

Геол. ан. Балк. полуос. Ann. Geol. Penins. Balk.	63 (1999)	201–209	Београд, децембар 2000 Belgrade, Decembre 2000
---	-----------	---------	---

UDC (УДК) 55:550.4

Original scientific paper
Оригинални научни рад

FICTITIOUS ELEMENT OF SUM IN GEOLOGY

by

Veljko Omaljev*

The article is the continuation of a published paper (Omaljev, 1997) in which the idea on the fictitious element of sum has been explained more detailed, exemplified by use of statistical studies of geochemical distribution of chemical elements in geological bodies. This working method allows a better insight and comprehension of participation of components of the fictitious element of sum in detail, thus exhibiting their specificity.

Key words: geochemistry, unit values, fictitious element of sum.

Овај чланак је наставак објављеног рада (Omaljev, 1997), у коме се детаљније образлаже идеја о фiktивном елементу збира, са примером примене у статистичким изучавањима геохемијске расподеле хемијских елемената у геолонским телима. Ова метода рада омогућава бољи увид и схватање учешћа компоненти фiktивног елемента збира у детаљу, што је њена специфичност.

Кључне речи геохемија, јединичне величине, фiktивни елемент збира.

INTRODUCTION

Starting from the practice when in petrological and geochemical studies the unit masses (contents) of chemical elements are added, multiplied and divided, the author has been defined the fictitious element as a result of the mentioned mathematical operations.

There are numerous examples all over the world literature on use of the sum ($\text{Na}_2\text{O} + \text{K}_2\text{O}$ etc.) and quotient (Na/K , and others), then grades of chemical elements in petrology and geochemistry. This is, according to our terminology, use of the "fictitious element" of the sum and quotient in performing two-component and three-component diagrams. The fictitious element of the sum is not a subject of studies, but it is only used as a component of further investigations (for instance, Miyashiro, 1975; Le Maitre et al., 1989; Vukov, 1998; and many other authors).

* Olge Alkalaj 5, 11000 Belgrade.

In this paper is presented the theoretical basic for study of the role of the fictitious element of the sum in form of a complete version, which to the author became evident during two decades of work.

Elementary notions of a new approach in geochemical investigations the author has presented in form of laws, theorems, definitions and formulas (Omaljev, 1995), which are derived on basis of the principle "Dual Nature of Geological Random Variable", which in this paper has only been fragmentary presented. In the mentioned monography the author (Omaljev, 1995) has presented the entire knowledge on this principle, including the complete references.

The principle of "Dual Nature of Geological Random Variable" is based upon the theory of probability and mathematical statistics (Vranić, 1971; Vukadinović, 1973; and others), applied in geology (Devis, 1977 and others), which includes the usual statistical treatment, i.e. the density function $f(x)$, in addition of the new function $f_X(x)$, appearing as its specificity.

FICTITIOUS ELEMENT

Elementary notions of this method of statistical studies in geochemistry are unit values (Omaljev, 1980; 1987; 1995): unit mass of the sample (q) is the laboratory quantity of the sample's material in which the unit mass of the investigated chemical element (X) is to be determined, and as a result the unit concentration (x) or content of a chemical element in the sample has been obtained.

According to the **Theorem 1**: *The crystal of a mineral (corpuscle) or the sample in a statistical sample (geological body) represents the unit volume (v), characterized by two notions: 1) the unit mass of the sample material (q), and 2) the unit mass of a certain chemical element in the sample (X). These two measurement features are unified by the unit concentration ($x=X/q$) and represent the geological (geochemical) information, i.e. the intensive value of a geochemical field.*

In a statistical sample two geological populations are present as a consequence of the Theorem 1, as follows:

- 1) Geological population of the sample unit masses (q).
- 2) Geological population of unit masses of the examined chemical element (X) in samples.

The unit mass in the sample is a constant ($q=1$), since in a chemical analysis equal quantity (mass) of the sample material has been taken.

The unit mass of the examined chemical element (X) in samples is a variable value, named "geological random variable".

Unit concentration of the examined chemical element in samples

$$x = X/q = X/1 = X \quad (1)$$

in that way is numerically equal to the unit mass (content) of this element.

According to **Theorem 2**: *Both unit mass of the sample material (q), and unit mass of the examined chemical element (X) in the sample are functions of concentration (x);*

actually, these are functions of the distribution density $f(x)$, and $f_X(x)$, which are first derivative of the distribution functions $F(x)$ and $F_X(x)$ of geological random variable.

Two function of density distribution of the geological random variable are available as a consequence of presence of two geological populations in a statistical sample as an assemblage of samples:

$$f(x) = q/\Sigma q \quad (2)$$

$$f_X(x) = X/\Sigma X \quad (3)$$

As a consequence of the Theorem 2, concentration of the studied chemical element (x) is considered as an independent geological variable, according to which the unit masses are distributed after the measurement characteristics (q and X) as dependant geological variables.

Histogram is the clearest form of graphical illustration of statistical distribution of geological populations (Omaljev, 1980; 1987; 1995) after the measurement features (q and X).

In practice most commonly only distribution of geological population is presented, after the measurement indicator (q) on the histogram, according to formula (2).

According to this new method the distribution of two geological populations (q and X) is presented, thus being named "dual histogram", according to formulas (2) and (3).

On the dual histogram the function of the distribution density $f_X(x)$ of the population X is plotted in form of small columns inside the columns representing the density function $f(x)$ of the population q . This is only a graphical solution, but the function of density of the population distribution X occupies the same interval on axis of abscissa as a function of the population density q as well.

The most common is the case when in a statistical sample, as a representative of geological body, several chemical elements (X, Y, Z etc.) in form of their concentrations (x, y, z etc.) have been examined. In that case, statistical investigations are transformed into multi-componental ones, where a distinct chemical element (or a compound) appears as a component.

According to **Theorem 11**: *The sum ($C=X+Y$), product ($P=X * Y$) or quotient ($V=X/Y$) of unit masses of chemical elements in the sample is named "fictitious element", which formally (mathematically) doesn't differ from a chemical element, in the same time being defined all distribution parameters of the "fictitious element" population.*

FICTION ELEMENT OF SUM

On the basis of Theorem 11, the sum of unit masses of several chemical elements represents the unit mass of a fictitious element of sum

$$C = X + Y + Z + \dots \quad (4)$$

and in that way is defined the unit concentration of sum of the unit concentrations of these elements as well

$$c = x + y + z + \dots \quad (5)$$

The same rule is also applied to the mean value (mean content) of the fictitious element of sum.

The density functions of distribution of a fictitious element of sum are represented by formulas (2) and (3):

$$f(c) = q / \sum q$$

$$f_c(c) = C / \sum C$$

Graphical plotting of density function of distribution of a three-componental fictitious element of sum (C) is presented in Fig. 1a. Relations of three populations of real chemical elements (X , Y , and Z) are equal, and total intensity of each of these density functions $f_X(c)$, $f_Y(c)$ amounts 100%, according to formula (3).

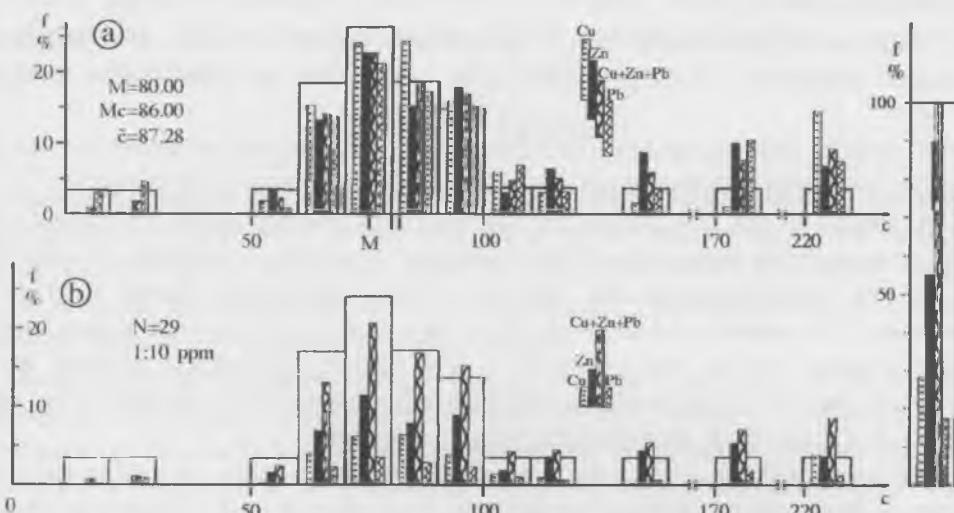


Fig. 1. Dual histogram of distribution of fictitious element of sum ($C = X + Y + Z$), then copper (X), zinc (Y) and lead (Z) after concentration of fictitious element of sum (c) in volcanites of the Radan (Lece) massif. a) Distribution of fictitious element of sum as well as copper, zinc and lead as independent functions of distribution densities. b) Distribution of fictitious elements of sum as well as copper, zinc, and lead as dependant functions of distribution densities.

Сл. 1. Двојни хистограми расподеле фиктивног елемента збира ($C = X + Y + Z$), бакра (X), цинка (Y) и олова (Z), по концентрацији фиктивног елемента збира (c) у вулканитима раданског (лецког) масива. а) Расподела фиктивног елемента збира бакра, цинка и олова као независних функција густина расподеле. б) Расподела фиктивног елемента збира бакра, цинка и олова као зависних функција густина расподеле.

However, there is a real need the distribution of real chemical elements to be found out as components of fictitious elements of sum, but in this sense it is necessary the mentioned formulas to be changed, deriving them from the formula (3):

$$f_X(c)_c = X / \sum C \quad (6)$$

$$f_Y(c)_c = Y / \sum C \quad (7)$$

$$f_Z(c)_c = Z / \sum C \quad (8)$$

Intensities of density functions of distribution of real chemical elements, according to formulas (6), (7), and (8) in each of classes of the dual histogram, in sum are equal to intensity of the density function $f_C(c)$ of fictitious element of their sum:

$$f_C(c) = f_X(c)_c + f_Y(c)_c + f_Z(c)_c \quad (9)$$

and this is actually the sum of unit masses of all real chemical elements constituting the fictitious element of sum. That applies to the total mass of fictitious element of sum in a statistical sample (100%) as well, which includes total masses of real chemical elements, which are presented in percentage of their participation in the mass of fictitious element of their sum. An error crept in the formerly published paper (Omaljev, 1993) in the formula 10, which is actually our formula (9), and which should be presented in the following form:

$$f_X(x) = f_{X_r}(x)_c + f_{X_n}(x)_c$$

being related to the easily soluble uranium (X_r) and poorly soluble uranium (X_n), whose sum gives total uranium (X), at that time represented as fictitious element of sum.

In Fig. 1. is presented statistical distribution of fictitious element of sum ($C=X+Y+Z$), which contains real elements: copper (X), zinc (Y), and lead (Z) in vulcanites of the Radan (Lece) massif.

Statistical distribution of real elements copper, zinc, and lead as independent functions of distribution densities in keeping with the formula (3), whose intensities also amount 100% of relative frequencies, is presented by the standard form of this dual histogram (Fig. 1a).

Distribution of real elements copper, zinc, and lead as dependant density functions, according to formulas (6), (7), and (8) is represented by the specific form of this dual histogram (Fig. 1b). The intensity sum of all of three real elements is equal to intensity of fictitious element of their sum in each of classes of the dual histogram. On the right end side of the axis of abscissa total participation of copper (27.71%), zinc (54.88%), and lead (17.42%) is presented in 100% of mass of the fictitious element of their sum.

The field of use of fictitious element of sum in geochemical investigations is very broad, and this form of statistical presentation of their distribution on dual histograms provides opportunity of a complete insight in participation of every real chemical element (or compound) in the fictitious element of their sum.

REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

- Devis Dž., 1977: Statistika i analiz geologičeskikh dannih.– "Mir", 1–572, Moskva (in Russian).
- Le Maitre R.W., et al, 1989: A Classification of Igneous Rocks and Glossary of Terms.– IUGS, Blackwell scient. public., 1–193, Oxford, London, Edinburgh, Melbourne.
- Miyashiro A., 1975: Classification, Characteristics, and origin of ophiolites.– The Journal of geology, vol. 83, No. 2, 249–281, Chicago.
- Omaljev V., 1980: Example of application of three-component dual histogram in study of uranium, thorium and potassium distribution in Zirovski Vrh Val gardena deposits.– Radovi Geoinstituta, 14, 43–66, Beograd (in Serbian, English summary).
- Omaljev V., 1987: Geochemical field.– Posebna izdanja Geoinstituta, 10, 1–174, Beograd (in Serbian, English summary).

- Omaljev V.. 1993: Easily soluble and poorly soluble uranium as compounds of total uranium in magmatic rocks of Surdulica massif.– Geol. an. Balk. poluos., 57/1, 287–299, Beograd (in Serbian and English).
- Omaljev V., 1995: Organization of matter and distribution of geological population.– Posebna izdanja Geoinstituta, 15, 1–280, Beograd. (in Serbian, English summary).
- Omaljev V.. 1997: Fictitious element.– Geol. an. Balk. poluos., 61/1, 55–62, Beograd (in Serbian and English).
- Vranić V., 1971: Vjerovatnost i statistika.– Tehnička knjiga, 1–378, Zagreb (in Croatian).
- Vukadinović S., 1973: Elementi teorije verovatnoće i matematičke statistike.– "Privredni pregled", 1–480, Beograd (in Serbian).
- Vukov M.. 1998: Magmatske stene.– Rud.-geol. fak., 1–487, Beograd (in Serbian).

РЕЗИМЕ

ФИКТИВНИ ЕЛЕМЕНТ ЗБИРА У ГЕОЛОГИЈИ

УВОД

Полазећи од праксе, где се у петролошким и геохемијским изучавањима сабирају, множе и деле јединичне масе (садржаји) хемијских елемената, аутор овог рада дефинисао је "фiktивни елемент" као резултат поменутих математичких операција.

Светска литература је пуна примера употребе збира ($\text{Na}_2\text{O}+\text{K}_2\text{O}$, и других) и количника (Na/K , и других) садржаја хемијских елемената у петрологији и геохемији. То је, по нашој терминологији, употреба "фiktивних елемената" збира и количника у изради двокомпонентних или трокомпонентних дијаграма. Фiktивни елемент збира се не изучава, већ се само користи као компонента за даља изучавања (нпр. Miyashiro, 1975; Le Maitre et al., 1989; Vukov, 1998; и многи други).

У овом раду даје се теоретска основа изучавања фiktивног елемента збира у форми комплетне верзије до које је аутор дошао у току две деценије рада.

Основне појмове новог приступа у геохемијским изучавањима аутор је изложио у форми закона, теорема, дефиниција и формула (Omaljev, 1995), које су изведене на бази принципа "Двојне природе геолошке случајне променљиве", што је у овом раду само фрагментарно изложено. У поменутој монографији аутор (Omaljev, 1995) је изложио целокупно сазнање о овом принципу, са комплетном литературом.

Принцип "Двојне природе геолошке случајне променљиве" базира на темељу теорије вероватноће и математичке статистике (Vranić, 1971; Vukadinović, 1973, и други), примењене у геологији (Devis, 1977, и други), која садржи уобичајени статистички поступак, тј. функцију густине $f(x)$, уз додатак нове функције $f_x(x)$, што је њена специфичност.

ФИКТИВНИ ЕЛЕМЕНТ

Основни појмови ове методе статистичких испитивања у геохемији су јединичне величине (Omaljev, 1980, 1987, 1995): јединична маса пробе (q) је лабораторијска количина материјала пробе у којој се одређује јединична маса испитиваног

хемијског елемента (X), а као резултат добија се јединична концентрација (x) или садржај хемијског елемента у проби.

По **Теореми 1:** Кристал минерала (коритускула) или проба у статистичком узорку (геолошком шелу) представља јединичну здремину (v) која има два обележја: 1) јединичну масу материјала пробе (q), и 2) јединичну масу одређеног хемијског елемената у проби (X). Јединична концентрација сједињује ова два обележја мерења ($x=X/q$) и представља геолошку (геохемијску) информацију; а то је интензивна величина геохемијског поља.

Као последица теореме 1, у статистичком узорку постоје две геолошке популације, и то:

1) Геолошка популација јединичних маса проба (q).

2) Геолошка популација јединичних маса испитиваног хемијског елемента (X) у пробама.

Јединична маса пробе је константа ($q = 1$), јер се у хемијској анализи увек узима једнака количина (маса) материјала пробе.

Јединична маса испитиваног хемијског елемента (X) у пробама је променљива величина, то је "геолошка случајна променљива".

Јединична концентрација испитиваног хемијског елемента у пробама

$$x = X/q = X/1 = X \quad (1)$$

постаје бројно једнака јединичној маси (садржају) тога елемента.

По **Теореми 2:** Јединичне масе материјала пробе (q) и јединичне масе испитиваног хемијског елемената (X) у проби су функције концентрације (x), и то су функције густине расподеле $f(x)$ и $f_X(x)$, које су први извод функција расподеле $F(x)$ и $F_X(x)$ геолошке случајне променљиве.

Као последица постојања две геолошке популације у статистичком узорку као скупу проба, постоје две функције густине расподеле геолошке случајне променљиве:

$$f(x) = q/\Sigma q \quad (2)$$

$$f_X(x) = X/\Sigma X \quad (3)$$

Као последица теореме 2, концентрација изучаваног хемијског елемента (x) је независна геолошка променљива, по којој се распоређују јединичне масе по обележјима мерења (q и X) као зависне геолошке променљиве.

Хистограм је најпрегледнија форма графичког приказа статистичке расподеле геолошких популација (Omaljev, 1980, 1987, 1995), по обележјима мерења (q и X).

У пракси се најчешће приказује само расподела геолошке популације по обележју мерења (q) на хистограму, по формулама (2).

По овој, новој методи приказује се расподела две геолошке популације (q и X) и зато је то "двојни хистограм", по формулама (2) и (3).

На двојном хистограму функција густине расподеле $f_X(x)$ популације X приказана је у форми стубића унутар стубова функције густине $f(x)$ популације q . То је само графичко решење, а функција густине расподеле популације X заузима исти интервал на апсцисној оси као и функција густине популације q .

Најчешћи је случај да се у статистичком узорку, као репрезенту геолошког тела, испитују садржаји више хемијских елемената (X , Y , Z , итд.) у виду њихових концентрација (x , y , z , итд.). Тада ова статистичка испитивања постају вишекомпонентна, где је компонента одређени хемијски елемент (или једињење).

По **Теореми 11:** Збир ($C = X + Y$), производ ($P = X * Y$) или количник ($V = X/Y$) јединичних маса хемијских елемената у прости именујемо термином "фиктивни елемент", који се формално (математички) не разликује од реалног хемијског елемената; а са тим су дефинисани сви параметри расподеле йодулације "фиктивног елемената".

ФИКТИВНИ ЕЛЕМЕНТ ЗБИРА

На основу теореме 11, збир јединичних маса више хемијских елемената представља јединичну масу фиктивног елемента збира:

$$C = X + Y + Z + \dots \quad (4)$$

а са тим је и јединична концентрација збир јединичних концентрација тих елемената:

$$c = x + y + z + \dots \quad (5)$$

Исто правило важи и за средњу вредност (средњи садржај) фиктивног елемента збира.

Функције густине расподеле фиктивног елемента збира су формуле (2) и (3):

$$f_C = q/\Sigma q$$

$$f_C(c) = C/\Sigma C$$

Графичка представа функција густина расподеле једног трокомпонентног фиктивног елемента збира (C) приказана је на сл. 1 (под а). Односи три популације реалних хемијских елемената (X , Y и Z) су равноправни и укупан интензитет сваке од ових функција густине $f_X(c)$, $f_Y(c)$ и $f_Z(c)$ износи 100%, сагласно формулама (3).

Међутим, постоји реална потреба за сазнањем расподеле реалних хемијских елемената као компоненти фиктивног елемента збира, а за то је потребно променити поменуте формуле, које изводимо из формуле (3):

$$f_X(c)_c = X / \Sigma C \quad (6)$$

$$f_Y(c)_c = Y / \Sigma C \quad (7)$$

$$f_Z(c)_c = Z / \Sigma C \quad (8)$$

Интензитети функција густине расподеле реалних хемијских елемената, по формулама (6), (7) и (8) у свакој класи двојног хистограма, у збиру су једнаки интензитету функције густине $f_C(c)$ фиктивног елемента њиховог збира

$$f_C(c) = f_X(c)_c + f_Y(c)_c + f_Z(c)_c \quad (9)$$

а то је управо збир јединичних маса свих реалних хемијских елемената који чине фиктивни елемент збира. То важи и за укупну масу фиктивног елемента збира у

статистичком узорку (100%), која садржи укупне масе реалних хемијских елемената; које се исказују у процентима њиховог учешћа у маси фиктивног елемента њиховог збира.

У раније објављеном раду (Omaljev, 1993) поткрадла се грешка у формули (10), која је уствари наша формула (9), а која треба да има ову форму:

$$f_X(x) = f_{X_r}(x)_c + f_{X_n}(x)_c$$

а која се односи на лако (X_r) и тешко (X_n) растворни уран, чији збир чини укупан уран (X), тада представљен као фиктивни елемент збира.

На сл. 1 приказана је статистичка расподела фиктивног елемента збира ($C=X+Y+Z$), који садржи реалне елементе: бакар (X), цинк (Y) и олово (Z) у вулканитима раданског (лецког) масива.

Стандардна форма овог двојног хистограма (сл. 1, под а) приказује статистичку расподелу реалних елемената бакра, цинка и олова као независних функција густина расподела, сагласно формули (3), чији интензитети такође износе 100% релативних фреквенција.

Специфична форма овог двојног хистограма (сл. 1, под б) приказује расподелу реалних елемената бакра, цинка и олова као зависних функција густина, по формулама (6), (7) и (8). Збир интензитета сва три реална елемента раван је интензитету фиктивног елемента њиховог збира у свакој класи двојног хистограма. На десној страни од апсцисне осе приказано је укупно учешће бакра (27,71%), цинка (54,88%) и олова (17,41%) у 100% масе фиктивног елемента њиховог збира.

Веома је широко поље примене фиктивног елемента збира у геохемијским изучавањима, а ова форма статистичког приказа њихове расподеле, на двојним хистограмима, омогућава потпун увид у учешће сваког реалног хемијског елемента (или једињења) у фиктивном елементу њиховог збира.