

A. Kotuljaková — G. Timčák: **Niektoré aplikácie gradientovej analýzy v geochemii** (Bratislava 26. 2. 1981)

Gradientová analýza je metóda, ktorá bola na geologické účely upravená na IIT Kharagpur. Umožňuje hodnotiť priestorovú topografiu skúmaného územia, a to tak, že X a Y-ové koordináty hodnoteného súboru bodov sú geografické a Z-ové chemické, mikrochemické či iné. Hodnoty sú usporiadané do matice vstupných dát, z ktorej sa po štandardizácii vypočíta rozptylovo-kovariačná matica. Tá sa potom rozkladá do radu ortogonálnych zložiek — „osí“, ktoré zodpovedajú charakteristickým číslam a vektorom matice. R-K matica sa ďalej diagonalizuje, čím sa získavajú charakteristické čísla určujúce dĺžku polosí elipsoidu charakterizujúce rozptyl pozorovaných hodnôt v smere charakteristických vektorov. Vektory určujú trend a sklon hlavných osí, ktoré sú vzájomne ortogonálne. Výstupom programu sú smerové kosínusy vektorov charakterizujúce gradient zmien zakrivenia analyzovanej plochy, t. j. charakter priestorových zmien chemizmu hornín v analyzovanej oblasti. Z výsledkov možno interpretovať aj tendenciu k obohateniu či ochudobňovaniu skúmaných zložiek a smer tendencií. Plný geologický, resp. geochemický význam charakteristických čísel je predmetom výskumu aj vo VL BF VŠT.

E. Plško: **Nové vyjadrovanie obsahu stopových a hlavných zložiek umožňujúce jednotné hodnotenie jeho rozloženia v geologických materiáloch** (Bratislava 26. 2. 1981)

Na základe termodynamической interpretácie dvojzložkových sústav a hodnotenia zmien ich potenciálu pri vyrovnávaní obsahu zložiek sa navrhuje ako náhodnými pôsobeniami ovplyvňovanú, a preto normálne — gaussovsky rozloženú veličinu brať parciálnu mólovú zmiešavaciu Gaussovu energiu. Táto veličina súvisí s obsahom sledovanej zložky (C_1 %) funkciou

$$x = \log (c_1/100 - c_1)$$

Prevedením hodnôt koncentrácie na hodnoty x sa dostane ich normálne rozloženie ako pre stopové prvky, stredný obsah a makrozložky, ako sa to experimentálne overilo

pri použití obsahu Ti v magnezite, Al_2O_3 v granitoidných horninách a $MgCO_3$ v magnezitovej hornine.

Pri nulovom obsahu limituje funkcia x k hodnote $\log c$, čo vysvetľuje možnosť aplikovať logaritmicke normálny model na opis rozloženia stopových prvkov.

Štatistické hodnotenie odchýlok parciálnej mólovej voľnej izobaricko-izotermickej energie sústavy tak poskytuje jednotný základ na spracovanie a hodnotenie rozptylu zložiek v rozličných typoch geologických materiálov bez ohľadu na ich obsah.

E. Plško — E. Martiny: **Matematicko-štatistické spracovanie súborov analytických výsledkov obsahujúcich podlimitné údaje** (Bratislava 26. 2. 1981)

Na geochemickú charakteristiku súboru istého typu vzoriek treba získať množstvo informácií, medzi ktoré patria aj stredné hodnoty a rozptyl obsahu sledovaných mikroprvkov. Obsah niektorých mikroprvkov sa však v geologických materiáloch nachádza pod hranicou stanoviteľnosti použitej analytickej metódy, takže priamy výpočet uvedených hodnôt získať nemožno. V minulosti sa tento problém väčšinou riešil dosadzovaním konvenčne zvolených hodnôt za hodnoty „mene než“, čo však vedie k informáciám nezodpovedajúcim skutočnému rozloženiu koncentrácií prvkov, ako aj k menej spoľahlivým informáciám týkajúcim sa hodnôt aritmetického a geometrického stredu.

Z uvedených dôvodov sme vypracovali postup, pomocou ktorého možno vypočítať aritmetický a geometrický priemer koncentrácií prvkov, ako aj početnosť ich rozloženia a v takých súboroch vzoriek, v ktorých sú analytické údaje pod medzou stanoviteľnosti. Pri výpočte týchto údajov sa vychádza z predpokladu logaritmicke normálneho rozloženia prvkov a priebehu priamkovej závislosti násobku štandardnej odchýlky od logaritmov koncentrácií sledovaného prvku.

Postup bol overený na výsledkoch spektrochemického stanovovania stopových prvkov v magnezitoch a podrobný opis postupu publikovaný v práci E. Plško — E. Martiny 1979: The description of distribution of microelements when a part of results lies below the limit of determination. Geol. zbor. Geologica carpath. (Bratislava), 30, pp. 379—383.