

A bizonytalan halmazok elméletének alkalmazása röntgendiffraktométeres ásványtani fázisanalízis eredményeinek értékelésére

*Application of the fuzzy set theory for the quantitative phase analysis
of rocks by X-ray diffractometry*

BÁRDOSSY György¹ – ÁRKAI Péter² – FODOR János³
(4 ábra, 4 táblázat)

Tárgyszavak: röntgen-fázisanalízis, hibák, bizonytalan halmazok
Key words: X-ray phase analysis, errors, fuzzy sets

Abstract

The aim of this article is to show the advantages of the fuzzy method in the evaluation of X-ray diffraction phase analysis. The method elaborated in the Geochemical Research Laboratory of the Hungarian Academy of Sciences was applied (BÁRDOSSY et al. 1980). This method is particularly suitable for the study of fine grained sedimentary rocks and bauxites. The average analytical error of the method is ± 10 weight%. The limit of detection of the minerals varies from 0.5 to 5%.

The Late Permian Boda Siltstone Formation (BAF), occurring in southern Hungary, was chosen as test material. This formation has been studied very thoroughly by various methods in recent years. 29 selected rock samples from the BAF plus 2 from the overburden and one from the footwall, were analysed chemically by X-ray fluorescence and mineralogically by X-ray diffractometry. The analysis was carried out by a computerized Philips PW-1730 diffractometer, using monochromatised CuK α irradiation at 45 kV and 35mA.

It is assumed that the fuzzy set theory developed by ZADEH (1965) is familiar to readers. First fuzzy numbers have been constructed for each traditional "crisp" number indicating the quantity of the given mineral in the sample. The crisp and fuzzy data sets of all the 32 samples are presented in Table I. The main methodological results of the fuzzy evaluation are as follows:

– The analytical error is different for each sample and for each mineral. The range of the "support" (max.value - min.value) varied in the studied material from 2 to 28%.

– The areas of the fuzzy numbers are roughly proportional to the quantity of the mineral in the sample. Specific fuzzy areas (fuzzy area/fuzzy index) were calculated. Therefore, these express more clearly the analytical error (Table II).

– In the case of a very small mineral quantity – close to the limit of detection – even the presence of the mineral may be uncertain. This uncertainty can be expressed by the fuzzy numbers, as in this case the minimum value of the support is taken to be zero.

The main mineralogical and petrographical results of the study show the following:

– The minerals of the studied rock(formation) can be ranked according to their analytical error. For the studied BAF samples the following sequence was established (in decreasing order of the analytical error): potassium feldspar, quartz, illite-muscovite, albite, chlorite, dolomite, calcite, and hematite. It should be stressed that the sequence may be different for any mineral assemblage, depending on the structural properties of the minerals and the overlapping of the diagnostic diffraction peaks.

– Averages of the mineral composition, calculated separately from the crisp and the fuzzy numbers, showed an almost perfect coincidence (Tables III, IV).

¹ 1055 Budapest V. Kossuth tér 18.

² MTA Földtudományi Kutatóközpont Geokémiai Kutatólaboratórium. 1112 Budapest, Budaörsi út 45.

³ Állatorvostudományi Egyetem Biomatematikai és Számítástechnikai Tanszék. 1078 Budapest, István út 2.

– Standard deviations of the fuzzy numbers are 3 to 6 times higher than those of the crisp numbers. The reason for this difference is that the crisp numbers express the natural variability of the given mineral in the rock, while the fuzzy standard deviations comprise the analytical error of the X-ray phase analysis.

– The average analytical error of the entire mineral assemblage is also a characteristic value, as shown on Figure 3, e.g. the weathered BAF samples show a higher average analytical error than that of the fresh, unweathered rock samples.

The main benefit of the fuzzy evaluation is the quantitative determination of the analytical error for each mineral in each sample. Both methodological and mineralogical conclusions can be drawn from the additional information.

Összefoglalás

A dolgozat célja annak bemutatása, hogy a kvantitatív röntgendiffraktométeres fázisanalízis mérési eredményeinek kiértékelésekor milyen többlet-információkat nyújt a bizonytalan halmazok elméletének alkalmazása. A Bodai Aleurolit Formációból (BAF) származó 29 kőzetminta eredményein keresztül mutatják be a szerzők ezeket a lehetőségeket.

A hagyományos röntgendiffraktométeres fázisanalízis eddig elfogadott átlagos hibája ± 10 súly% volt. A fuzzy kiértékeléssel mintánként és ásványonként lehet a hiba nagyságát meghatározni. A kimutathatósági határ közelében levő ásványmennyiségek esetében az adott ásvány jelenlétének bizonytalanságát is érzékeltetni lehet a fuzzy számok segítségével. A feldolgozás eredményeként a BAF ásványait a meghatározás bizonytalansága szerinti sorrendbe lehetett foglalni. A hagyományos (crisp) és a fuzzy számok segítségével megkülönböztethetővé vált az adott ásvány természetes változékonysága az adott formációban, valamint a meghatározás analitikai hibájának a nagysága. A módszer bármely más kőzet kiértékelésekor is alkalmazható.

Bevezetés

A kvantitatív röntgendiffraktométeres fázisanalízis világszerte egyik alpmódszere a kőzetek, elsősorban a finomszemcsés üledékes kőzetek és ércek ásványos összetétele meghatározásának. A számos publikált módszer közül munkánkhoz azt alkalmaztuk, amelyet a 60-as és 70-es években dolgoztak ki az MTA Geokémiai Kutató Laboratóriumában (GKL) és az ALUTERV-FKI kutató intézetben (BÁRDOSY 1966, BÁRDOSY et al. 1980). A szakirodalomból ismert belső és külső standard módszereket nem alkalmaztuk, mert ezek nem tudják figyelembe venni az ásványok reális szerkezetét. Mint ismeretes, a röntgendiffraktométeres fázisanalízis gondosan homogenizált és 0,06 mm alá porított kőzetmintából indul ki. Az egyes ásványok reflexióinak intenzitásai nagyjából arányosak ugyan mennyiségeikkel, közvetlenül azonban nem értékelhetők. Ennek az az oka, hogy a reflexiók intenzitása más tényezőktől is függ, így a kőzet és az egyes ásványok tömegabszorpciók együttthatójától, az ásványok rendezettségétől, kémiai összetételük ingadozásaitól, valamint az amorf és quasi-amorf összetevők arányától. Ezen felül az ún. kitüntetett orientáció is jelentősen módosíthatja a reflexiók intenzitását és ezek arányát. Ezért a GKL-ben jelenleg is alkalmazott módszer a homogenizált kőzetpor vegyi összetételét is figyelembe veszi, oly módon hogy a kémiai komponenseket a mintában kimutatott ásványokra osztja szét azok mennyiségi aránya szerint.

E módszer egyik fő előnye az, hogy az ásványok reális és nem az elméleti (ideális) szerkezetével számol. Ennek ellenére a kvantitatív röntgendiffraktométeres fázisanalízis mai formájában is számos hibával terhelt. Több évtizedes

gyakorlati tapasztalataink alapján a módszer átlagos hibáját ± 10 súly%-ra becsüljük, az egyes ásványok kimutathatóságának határa pedig 0,5 és 5% között váltakozik. A főbb hibaforrások a következők:

– a műszerből fakadó hibák, pl. a röntgensugárzás intenzitásának ingadozása, a regisztráció bizonytalanságai, a háttér megnövekedése a kis szögterületben stb.,

– a mintaelőkészítésből fakadó hibák pl. a túl nagy szemnagyság, a tökéletlen homogenizáció, a kitüntetett orientáció fellépése stb.,

– a röntgenfluoreszcens vegyelemzés analitikai hibái,

– az ásványok reális szerkezetének és tényleges vegyi összetételének bizonytalan ismeretéből eredő hibák. Ezek adják a fázisanalízis teljes hibájának a nagyobb részét.

Rájöttünk arra, hogy a bizonytalan halmazok (fuzzy sets) elméletének alkalmazása lehetővé teszi az összesített hiba nagyságának és jellegének (pl. szimmetria, aszimmetria) jobb megismerését. A bizonytalanságok földtani szerepét és a fuzzy set elmélet alapvető fogalmait a közelmúltban ismertettük (BÁRDOSSY et al. 2000). A következőkben a módszer röntgenográfiai alkalmazhatóságát kívánjuk bemutatni.

Mintául a Pécestől nyugatra előforduló, késő-perm korú Bodai Aleurolit Formációt (BAF) választottuk ki, tekintettel arra, hogy az utóbbi években e formáción igen széleskörű vizsgálatok folytak (KOVÁCS et al. 2000). A formációból 29 kőzetmintát vizsgáltunk meg, amit a fedő kettő és a fekü egy mintájával egészítettünk ki. E minták vegyelemzését röntgenfluoreszcenciás módszerrel a Mecsekérc Kft. készítette el. A minták ásványos összetételéről vékonycsiszolatok, derivatográfus mérések és röntgenfelvételek alapján tájékozódunk. Azt találtuk hogy a minták a következő ásványokból épülnek fel: illit-muszkovit, klorit (ennek közelebbi meghatározására nem volt lehetőségünk), kaolinit, egyes felszíni mállott mintákban szmektit. Ezen kívül albit, pontosabban meg nem határozható, alárendelt mennyiségű káliföldpát, valamint dolomit, kalcit, hematit és rutil. Néhány mintában magnezit, sziderit, zeolit, valamint kevert szerkezetű agyagásvány is előfordult. Kőzettanilag a minták többsége albitfészkés agyagkő, melyet néhány albitolit és albitos dolomit egészített ki. Az kora-perm korú feküből egy homokkő mintát vizsgáltunk (Korpádi Homokkő Formáció). Egy további homokkő minta a közvetlen fedőből származik (Kővágószőlősi Formáció, Bakonyai Tagozat), egy pedig a magasabb fedőt képviseleti (Jakabhegyi Homokkő Formáció, alsó-triász).

Vizsgálati körülmények és értékelési metodika

A felvételek APD típusú számítógépes vezérlő és adatgyűjtő rendszerrel felszerelt Philips PW-1730 típusú röntgendiffraktométerrel készültek. A felvételekhez CuK_α sugárzást, grafit monokromátort használtunk 45 kV és 35 mA-el. A reflexiók intenzitásait proporcionális számlálóval mértük 1° -os divergencia és detektor résekkel. A felvételek $0,05^\circ$ -os lépésközökkel és 1 secundumos mérési sebességgel készültek.

Az ásványok kis szemcsemérete miatt az egyes ásványfázisok elkülönített vizsgálatára általában nem volt lehetőség. A röntgendiffraktométerrel kapott fázisösszetételt a vegyelemzésekkel vetettük össze és a teljes kőzetre vonatkozó elemzési eredményeket ásványfázisokra osztottuk szét. Ennek során az alábbi feltételeket alkalmaztuk:

- Tisztának tartott fázisok: kvarc (SiO_2), rutil (TiO_2) – az összes titán rutilban található, a plagioklász kémiaailag tiszta albit ($\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$) – az összes nátriumot az albit tartalmazza.

- Az illit-muszkovit az illit kristályossági indexek alapján az illit és az ideális muszkovit közötti, átmeneti összetételű (ARKAI et al. 1996).

- A kőzet teljes Fe_2O_3 tartalma hematit formájában van jelen.

- A kalcium tartalom karbonát ásványokhoz kötött, a CO_2 -t kalcit, dolomit, ritkábban sziderit és magnezit között osztottuk el.

- A bonyolult összetételű klorit okozta a legnagyobb bizonytalanságot az átszámításnál; szerencsés körülmény, hogy mennyisége a legtöbb esetben csekély volt.

A kapott eredményeket egész százalékokra kerekítettük. A kiértékelés következő lépéseként meghatároztuk e mennyiségek bizonytalanságát. Ennek során a fuzzy számok becslésekor az ásványok lehetséges ásványkémiai változékonyságát is figyelembe vettük, pl. Ca-beépülés lehetőségét a plagioklászba. A fuzzy számok háromszögek, ill. trapézok lehetnek. Sarokpontjaikat a következőképpen értelmeztük (1. ábra):

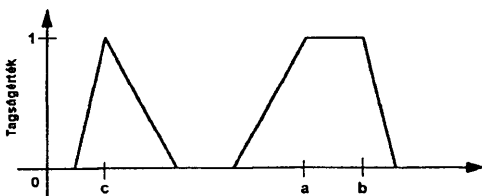
- A nulla tagságértékű legkisebb szám az adott ásvány legkisebb elfogadható értéke.

- A nulla tagságértékű legnagyobb szám értelemszerűen az ásvány legnagyobb elfogadható értéke.

- Az egységet elérő, tehát legnagyobb tagságértékű sarokpont, vagy intervallum az adott ásvány leginkább elfogadható mennyiségét fejezi ki.

A legkisebb és a legnagyobb sarokpont közötti intervallumot tartónak nevezzük és ennek hossza az adott ásvány meghatározásának lehetséges legnagyobb hibáját fejezi ki. Ugyanakkor az egységnyi tagságértéket elérő pontot vagy intervallumot magnak nevezzük és ez a meghatározás leginkább elfogadható hibájának nagyságát rögzíti. A kiértékelést még teljesebbé tettük a fuzzy szám területének kiszámításával. Kiszámítottuk továbbá az ún. defuzzifikált számot és a fuzzy indexet, melyek segítségével a meghatározások bizonytalanságát össze tudtuk hasonlítani és sorrendeket vehettünk fel (FODOR & ROUBENS 1994 ; TANAKA 1991).

Tapasztalataink szerint e fuzzy számok meghatározása a fuzzy módszer alkalmazásának döntő lépése, hiszen minden további számítás ebből indul ki. A fuzzy számokat ezért lehetőleg együtt határoztuk meg, röntgenográfiai, ásványtani és matematikai ismereteink egymást kiegészítő felhasználásával.



1. ábra. A fuzzy számok értelmezése

Fig. 1 Interpretation of the fuzzy numbers

A kiértékelés eredményeinek ismertetése

Az I. táblázaton a fázisanalízis hagyományos eredményei (ún. crisp számok) mellett a fuzzy számok jellemző adatait tüntettük fel az öt legnagyobb mennyiségben előforduló ásványra. Ott, ahol a „teljes tagság” két oszlopában azonos számok szerepelnek, pl. 7 meg 7, háromszög alakú a fuzzy szám. Ott viszont ahol e számok különböznek (mindig a baloldali a kisebb), trapéz alakú fuzzy számmal van dolgunk. A 2. ábrán látható, hogy milyen különbséget jelent a fázisanalízis eredményeinek bemutatása hagyományos módon és a fuzzy számok segítségével. A fuzzy számok és a belőlük számított további mutatók egyrészt módszertani, másrészt ásvány-kőzettani többlet ismereteket szolgáltatnak.

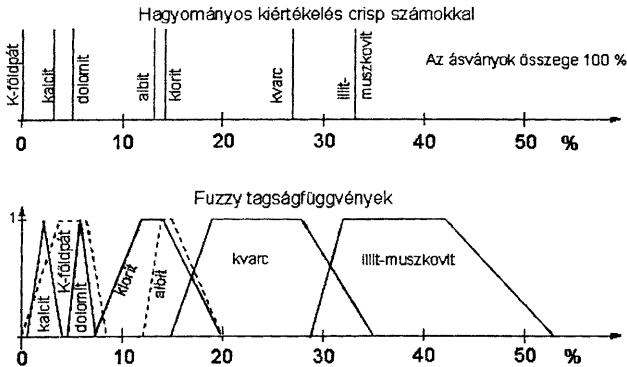
Módszertani eredmények. Kiderült, hogy az eddig használt $\pm 10\%$ -os hiba kőzetmintánként és ásványonként igen eltérő lehet. A tartó hossza maximálisan 28% -ot ért el, a mag hossza pedig 15% -ot. Számos esetben a mag egyetlen pontból (számból) állt, ami igen pontos eredményt fejezett ki. A számszerű összehasonlításhoz elsősorban a defuzzifikált számokat és a fuzzy indexeket használtuk. Azt tapasztaltuk, hogy a vizsgált minták esetében ez a két szám vagy azonos, vagy csak egy % egységgel tért el egymástól. A hagyományos crisp számokhoz az eltérés lényegesen nagyobb is lehet. Példaként a II. táblázatban a muszkovit- illít crisp értékeit és fuzzy mutatóit foglaltuk össze, mégpedig a defuzzifikált számok növekvő sorrendjében.

A vizsgált minták eredményeinek összehasonlító értékelése azt mutatta, hogy a fuzzy számok területe nagy vonalakban arányos a defuzzifikált számokkal és a fuzzy indexekkel. Ugyanez érvényes a tartó-intervallum hosszára is. Tehát általában minél nagyobb egy ásvány mennyisége az adott mintában, annál nagyobb a fázisanalízis hibája is! Ezt a körülményt már a hagyományos kiértékelésnél is érzékeltük, de számszerűsíteni nem tudtuk. Az összefüggés azonban eléggé laza, számos eltérést figyeltünk meg. Ezért a fuzzy számok területét fajlagos területté számoltuk át oly módon, hogy a fuzzy területet elosztottuk a defuzzifikált számmal, ill. a fuzzy indexszel. A fajlagos területeket a

I. táblázat. A röntgendiffraktométeres fázisanalízis hagyományos eredményei (crisp számok) és a megfelelő fuzzy számok értékei az öt, legnagyobb mennyiségben előforduló ásványnál

Table I Conventional results (crisp numbers) and fuzzy numbers of the X-ray powder diffractometric analysis for the five main minerals

Minta	Azonosító	muszkovit-illit				kvarc				albit					dolomit				hematit							
		crisp	min	teljes tags.	max	crisp	min	teljes tags.	max	crisp	min	teljes tags.	max	crisp	min	teljes tags.	max	crisp	min	teljes tags.	max					
1	4734, 359.4-359.6m (fédő) Jakabh.	50	34	42	50	62	32	25	32	36	45	1	1	2	2	3	8	6	8	11	13	6	4	5	6	7
2	Bat-4, 215.5m (fédő) Bakonyai HF.	35	13	21	36	44	35	28	34	42	50	10	9	10	12	18	8	7	8	18	25	5	2	3	5	7
3	K-75/2 (felszíni feltárás)	9	3	8	9	13	25	20	25	28	33	45	40	42	45	50	0	0	0	0	0	5	4	5	5	6
4	Bat-4, 1169.2m (baba, BAF)	33	29	32	42	53	27	20	24	28	33	13	12	14	15	20	5	3	5	5	7	5	4	5	5	6
5	Delta-3, 69.4-69.5m (alb, BAF)	14	10	14	15	20	3	2	3	4	8	59	54	56	60	67	6	4	6	6	8	6	5	6	9	10
6	XV, 2093.5m (fekt) Korpádi Hom.F.	34	27	33	35	45	46	30	38	46	53	8	5	6	8	10	0	0	0	0	0	6	4	5	8	10
7	EXT-3 1.40-1.55m (aba, BAF)	33	28	32	33	40	8	4	5	8	10	35	30	35	36	45	4	3	4	5	7	9	8	9	9	10
8	EXT-5 1.25-1.40m (aba, BAF)	36	33	35	36	40	7	5	6	7	10	29	27	29	29	33	5	4	5	6	7	8	7	8	9	10
9	EXT-6 1.35-1.45m (aba, BAF)	44	40	43	47	50	6	2	3	6	8	27	23	26	27	35	ny	0	0.5	0.5	1	9	8	9	10	11
10	SC-1 9.00-9.20m (aba, BAF)	44	40	42	47	50	9	6	6	9	10	24	20	23	26	30	3	2	3	4	5	9	8	8	10	11
11	SC-2 9.00-9.30m (aba, BAF)	30	25	27	32	35	10	3	4	12	14	35	30	34	35	40	3	2	3	4	6	8	7	8	8	9
12	SC-4 9.20-9.35m (aba, BAF)	37	25	31	37	40	6	4	6	6	6	31	27	31	36	40	5	4	5	6	7	8	7	8	9	10
13	OCT-1 9.3-9.4m (aba, BAF)	36	25	33	38	45	9	6	7	9	10	31	25	30	33	40	0	0	0	0	0	8	7	8	9	10
14	OCT-1 11.4-11.5m (aba, BAF)	37	30	33	38	45	9	5	7	7	10	32	28	32	36	42	ny	0	0.5	0.5	1	8	7	7	9	10
15	K-23/1 (aba, BAF, felsz.)	42	30	38	42	50	10	2	3	10	12	18	15	18	30	32	0	0	0	0	0	8	7	8	8	10
16	Bat-15 9.6m (aba, BAF, felsz.)	43	33	37	44	50	14	8	10	14	15	13	10	13	22	24	2	1	2	3	5	8	7	8	8	9
17	XIV, 2041.0m (aba, BAF)	39	30	34	39	45	14	3	4	16	18	16	15	16	18	20	14	10	12	22	23	8	7	8	8	11
18	Delta-3 22.45-22.70m (aba, BAF)	36	30	33	39	45	10	5	7	10	11	33	28	31	36	41	ny	0	0.5	0.5	1	8	8	8	10	11
19	Delta-3 48.35-48.50m (aba, BAF)	32	28	31	41	50	11	4	5	11	13	30	25	29	31	40	3	2	2	4	4	9	8	9	9	10
20	Delta-3 154.2m (aba, BAF)	37	28	37	39	45	16	6	8	16	20	46	23	26	29	35	8	5	6	6	7	6	5	6	8	8
21	Delta-3 197.9m (aba, BAF)	41	35	39	41	45	12	7	8	12	13	25	22	25	32	35	2	1	2	3	5	8	7	8	8	9
22	Delta-3 227.7m (aba, BAF)	31	15	18	32	40	9	3	3	9	10	32	30	33	49	55	4	3	4	6	9	7	6	7	7	8
23	Delta-4 17.8m (aba, BAF)	32	30	32	36	45	10	4	5	10	12	26	20	22	25	28	11	10	11	15	16	8	6	7	8	9
24	Delta-4 25.60m (aba, BAF)	33	25	30	33	40	6	3	4	6	8	32	30	32	37	42	3	2	3	4	5	9	8	9	9	10
25	Delta-4 70.70m (aba, BAF)	44	35	39	45	50	23	16	21	29	32	22	18	21	22	25	ny	0	1	1	2	7	7	7	8	9
26	Delta-5 20.85-21.10m (aba, BAF)	36	30	35	37	45	7	5	7	7	10	27	25	27	29	40	7	6	7	8	10	8	7	7	9	10
27	Delta-5 24.81-25.00m (aba, BAF)	33	30	33	34	40	6	5	6	7	8	30	25	30	30	35	6	5	6	8	9	8	7	7	9	9
28	Delta-5 59.59-34m (aba, BAF)	45	40	46	49	55	9	7	9	10	13	23	20	23	23	25	2	1	2	3	5	8	6	6	9	10
29	Delta-9 20.43-20.70m (aba, BAF)	40	35	38	42	50	9	4	5	8	10	23	20	23	25	30	7	6	7	9	10	8	8	8	9	10
30	Delta-9 79.58-79.78m (aba, BAF)	38	35	38	45	50	8	1	1	3	10	30	28	30	32	40	5	4	5	7	8	9	8	8	9	10
31	Delta-3 14.7m (dol, BAF)	8	7	8	9	12	2	2	2	4	5	33	30	32	33	38	45	42	45	45	48	4	3	4	5	6
32	SC-3 (dol, BAF)	7	5	6	7	10	8	4	5	8	10	40	38	40	40	45	37	35	37	40	42	2	2	2	4	5



2. ábra. Fázisanalízis eredményei hagyományos módon és a fuzzy számok segítségével kifejezve. Albitos agyagkő, BAT-4. jelű fúrás 1169,2 m.

Fig. 2 Results of XRD phase analyses expressed conventionally and by fuzzy numbers. Albitic claystone from borehole BAT-4, 1169.2 m

II. táblázatban külön oszlopokban mutatjuk be, értelmezésükről az ásvány-kőzettani részben szólunk.

Fontos módszertani többlet-információt jelent az, hogy fuzzy számokkal egy adott ásvány jelenlétének bizonytalanságát is ki lehet fejezni. Előfordulhat ugyanis, hogy a kérdéses ásvány diagnosztikus reflexiója olyan kicsiny, hogy alig emelkedik ki az alapvonalból. Nehezen, vagy egyáltalában nem dönthető el ilyenkor, hogy az adott ásvány reflexiója jelentkező, vagy csak az alapvonal szokásos ingadozásáról van szó. Az is gyakori, hogy bizonyos ásványok diagnosztikus reflexióját részben vagy egészben elfedik egy másik, nagyobb mennyiségben jelen levő ásvány reflexiói. Ilyenkor sem állapítható meg egyértelműen, hogy valóban jelen van-e a kérdéses ásvány. A hagyományos értékeléssel ez a bizonytalanság nem fejezhető ki, a fuzzy számokkal viszont igen. Ilyen esetben a fuzzy szám minimum sarokpontját nulla értéknél vesszük fel, a többi sarokpontot pedig az előzőekben elmondottak szerint jelöljük ki. (2. ábra). Ezzel azt fejezzük ki, hogy az adott ásvány jelenlétét a fuzzy szám által meghatározott mennyiségben lehetségesnek tartjuk, de azt sem zárjuk ki, hogy az ásvány a mintában még sincs jelen.

Míndezek az információk teljesebbé teszik a röntgendiffraktométeres fázisanalízis megbízhatóságát és számszerűsítik a módszerrel járó hibákat.

Ásvány-kőzettani eredmények. A röntgendiffraktométeres fázisanalízis szakemberei már régóta felismerték, hogy ásványonként eltérő a meghatározások bizonytalansága. A hagyományos módszerekkel ezt a felismerést nem lehetett számszerűsíteni. A fuzzy fajlagos területek összehasonlításával ez lehetővé vált,

II. táblázat. A minták sorrendje a illit-muskovit defuzzifikált értéke szerint.

Jelölések: ny=nyomokban található; n.o.=nem fordul elő

Table II Ranking of the samples according to their defuzzified values: illite-muskovite.

Legend: ny=in traces; n.o. not occurring in the samples

Minta sorszáma	Defuzz.	Index	crisp	Terület	T/Index	T/Defuzz	Tartó hossza	Mag hossza
32	7	7	7	3	0.43	0.43	5	1
3	8	8	9	5.5	0.67	0.67	10	1
31	9	9	8	3	0.33	0.33	5	1
5	15	15	14	5.5	0.37	0.37	10	1
22	26	26	31	19.5	0.74	0.74	25	14
2	29	29	35	23	0.81	0.81	31	15
11	30	30	30	7.5	0.25	0.25	10	5
24	32	32	33	9	0.28	0.28	15	3
12	33	33	37	10.5	0.32	0.32	15	6
7	33	33	33	6.5	0.20	0.19	12	1
27	34	34	33	5.5	0.16	0.16	10	1
13	35	35	36	12.5	0.35	0.36	20	5
6	35	35	34	10	0.29	0.28	18	2
23	36	36	32	9.5	0.27	0.26	15	4
8	36	36	36	4	0.11	0.11	7	1
14	37	37	37	10	0.27	0.27	15	5
18	37	37	36	10.5	0.29	0.28	15	6
26	37	37	36	8.5	0.23	0.23	15	2
20	37	37	34	9.5	0.26	0.26	17	2
17	37	37	39	10	0.27	0.27	15	5
19	38	38	32	16	0.43	0.42	22	10
4	39	39	33	17	0.44	0.43	24	10
15	40	40	42	12	0.30	0.30	20	4
21	40	40	41	6	0.15	0.15	10	2
16	41	41	43	12	0.29	0.29	17	7
29	41	41	40	9.5	0.23	0.23	15	4
30	42	42	38	11	0.26	0.26	15	7
25	45	45	44	15.5	0.35	0.35	20	11
10	45	45	44	7.5	0.17	0.17	10	5
9	45	45	44	7	0.16	0.16	10	4
1	47	47	50	18	0.38	0.38	28	8
28	48	48	45	9	0.19	0.19	15	3

hiszen ez a szám azt fejezi ki, hogy mennyi az egységnyi ásvány mennyiségre eső bizonytalanság. Egy-egy ilyen sorrend természetesen csak egy adott ásvány-paragenézisre, adott ásványgenetikai körülmények között érvényes. A jelen esetben ez a feltétel érvényesül, hiszen a BAF ásványgenetikai egységként fogható fel és azonos ásványokat tartalmaznak a rétegek, még ha ezek mennyisége eltérő is lehet. A BAF-ból származó 29 kőzetmintában a fuzzy fajlagos terület csökkenő sorrendjében a következő eredményt kaptuk:

A káliumföldpát meghatározás bizonytalanságát külön kell értékelni, hiszen az átfedések miatt az ásvány jelenléte is bizonytalan. A többi ásványra a III. táblázat adatai egy proporcionális hatást jeleznek, tehát minél nagyobb az ásvány mennyisége a mintában, annál nagyobb a meghatározás bizonytalansága is. (A fuzzy számok átlaga csak azokra a mintákra vonatkozik, amelyekben az adott ásványt ki lehetett mutatni.) E mellett az is egyértelmű, hogy a szilikát ásványok mennyiségének meghatározása a karbonátok és a hematit meghatározásánál bizonytalanabb. Ez az utóbbiak jellegzetes reflexióinak kisebb lefedettségével magyarázható.

III. táblázat. A fő kőzetalkotó ásványok fuzzy elemzésének eredményei
 Table III Results of the fuzzy analyses of the main rock-forming minerals

Ásvány	Tartó hossza	Tartó átlaga	Mag hossza	Mag átlaga	Fuzzy számok átlaga, %
	%	%	%	%	
Illit-muszk.	5 – 25	14	1 – 14	5	34
Albit	2 – 25	12	0 – 16	3	31
Kvarc	2 – 16	7	0 – 12	4	9
Klorit	3 – 14	6	0 – 6	2	7
Dolomit	1 – 13	4	0 – 10	2	8
Kalcit	2 – 10	4	0 – 6	2	6
Hematit	2 – 5	3	0 – 3	1	5

A hagyományos és a fuzzy értékelés összehasonlítása céljából kiszámítottuk 27 albitfészkes agyagkő minta átlagos összetételét és szórását mind a két módszerrel. Az utóbbi módszernél fuzzy indexeket használtunk. Az eredményeket a IV. táblázat mutatja be. A kapott átlagok vagy azonosak, vagy csak egyetlen százalékkal térnek el egymástól. Egyedül a káliumföldpát esetében van 2%-os eltérés az ásvány jelenlétének fentiekben ismertetett bizonytalansága miatt. Ez az eredmény megerősítette azt a feltevésünket, hogy a fuzzy és a hagyományos értékelés azonos mennyiségi eredményekhez vezet, de a fuzzy értékelés a bizonytalanságra vonatkozó többletinformációkat szolgáltat.

Ez a megállapítás az eredmények szórásában jutott kifejezésre. Míg a crisp számok szórása $\pm 1-8\%$ volt, addig a fuzzy számoké ennek 3–6 szorosa lett. Az illit–muszkovit sornál a legnagyobb ez a különbség, hiszen itt a crisp számok $\pm 5\%$ -os szórása $\pm 33\%$ -ra nőtt.

A crisp számok szórása egyértelműen a kőzetet alkotó ásványok természetes változékonyságát fejezi ki, hiszen a hagyományos értékelés a fázisanalízis bizonytalanságának kifejezésére nem alkalmas. Ezzel szemben a fuzzy indexek szórása a fázisanalízis hibájának következménye. A fuzzy-set elmélet alkalmazásával tehát először sikerült a minták természetes változékonyságát és a fázisanalízis hibájából eredő változékonyságot megkülönböztetni. Véleményünk

IV. táblázat. A klasszikus és fuzzy statisztikák összehasonlítása
 Table IV Comparison of the conventional and fuzzy statistics

Ásvány	Átlag (%)		Szórás (%)	
	crisp	fuzzy	crisp	fuzzy
1. muszkovit-illit	37	37	5	33
2. albit	28	29	8	25
3. kvarc	10	9	6	15
4. hematit	8	8	1	6
5. klorit	6	6	4	8
6. kalcit	5	6	2	8
7. dolomit	4	5	2	8
8. K-földpát	0	2	0	4

szerint igen fontos eredmény ez, amit az ásványgenetikai és üledékkőzettani kiértékeléseknél hasznosítani lehet.

Eddig csak a BAF ásványairól volt szó, de megpróbáltuk egész kőzetminták viselkedését is kiértékelni a fuzzy set elmélet segítségével. Ehhez a fedőből és a fekéből vett három mintát is felhasználtuk és összehasonlítottuk őket a BAF-ból származó kőzetminták eredményeivel. A fázisanalízis megerősítette azt a korábbi feltevést, hogy a fedő és fekéből származó kőzetminták a BAF kőzetmintáinál lényegesen kevesebb albitot tartalmaznak: 28% helyett 1–10%-ot. A másodlagosan keletkezett albit tehát a BAF egyik legjellegzetesebb ásványtani sajátossága.

Összehasonlítás céljából kiszámítottuk minden egyes kőzetminta átlagos fajlagos fuzzy területét (fuzzy terület/fuzzy index). Világos, hogy minél nagyobb ez a szám, annál nagyobb az adott minta fázisanalízisének átlagos hibája. A kapott eredményeket kőzetfajtánként átlagoltuk és a 3. ábrán mutatjuk be. Ezen a közvetlen fedő és fekéből vett minták is szerepelnek. A kis mintaszám miatt a kapott eredményt bár csak első közelítésnek tekintjük, mégis szembetűnő, hogy a BAF-ból származó minták fázisanalízisének átlagos hibája a közvetlen fedő és feké mintáinál kisebb. A BAF-ból vett mintákon belül a felszíni és felszínközeli, többé-kevésbé mállott minták átlagos hibája a legnagyobb. A felszíni mállás hatása tehát bizonytalanabbá tette a röntgendiffraktométeres fázisanalízist. Az üde kőzetminták között a különbség nem jelentős, legkisebb az albitos dolomit mintáké.

A kapott eredmények lehetőséget nyújtanak arra, hogy kellő számú vizsgálat esetén előre megmondhassuk, hogy egy adott újabb kőzetminta vizsgálata során mekkora bizonytalansággal kell számolnunk. A BAF kőzeteinek összesítő ásvány-kőzettani kiértékelését is elősegíthetik ezek az eredmények, hiszen számításba tudjuk venni ásványonként, ill. kőzetfajtánként a hibák nagyságát.

Összefoglalás

Munkánk során megbizonyosodtunk arról, hogy az eddigi hagyományos kiértékeléshez képest a fuzzy set elmélet használata mind módszertani, mind ásvány-kőzettani tekintetben többlet-információkat eredményezett. Azt találtuk, hogy a fuzzy számok meghatározásán túl érdemes ezek területét, fajlagos területét, a tartó és a mag hosszát, fuzzy indexeit és defuzzifikált értékeit is kiszámítani. A fuzzy számokkal végzett statisztikai számítások (átlagok, szórás) ásvány-kőzzettanilag értelmezhető eredményeket szolgáltatottak. Legfontosabbaknak a következő eredményeket tartjuk:

- A fázisanalízis hibái ásványonként és mintánként számszerűsíthetők.
- A BAF ásványai a fázisanalízis hibájának nagysága szerint sorrendbe szedhetők. Ilyen sorrendeket más kőzetekre is ki lehet dolgozni a fuzzy kiértékelés segítségével.
- A crisp és a fuzzy indexek kiszámításával meg lehet különböztetni az ásványok természetes változékonyságát és a fázisanalízis bizonytalanságát a BAF-ban és bármely más kőzetben.

3. ábra A vizsgált kőzetfajták átlagos fajlagos fuzzy területe (fuzzy terület/fuzzy index). Kőzetfajták: 1. bakonyai homokkő (felső átmeneti réteg); 2. BAF, albitfészkes agyagkő felszíni kibúvásban (mállott); 3. BAF, albitfészkes agyagkő; 4. BAF, albitolit; 5. BAF, homokos, albitfészkes agyagkő; 6. BAF, albitfészkes dolomit; 7. Korpádi Homokkő (alsó-perm fekv.)

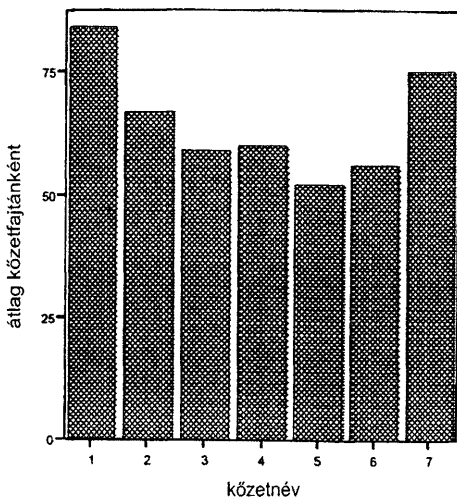


Fig. 3 Avarage relative fuzzyness of the evaluated rock types (fuzzy area/fuzzy index). Rock types: 1. Bakonya sandstone (upper transition); 2. BAF, claystone with albite nests; 4. BAF, albitolite; 5. BAF, sandy claystone with albite nests; 6. BAF, dolostone with albite nests; 7. Korpád Sandstone footwall (Lower Permian)

– Fuzzy számok segítségével olyan ásványokat is ki lehetett értékelni, amelyek jelenléte a mintában bár valószínűsíthető, de nem biztos.

Javasoljuk, hogy a fuzzy számokkal történő kiértékelés a kvantitatív röntgendiffraktométeres fázisanalízisben rendszeres alkalmazást nyerjen.

Irodalom – References

- ÁRKAI, P., MERRIMAN, R. J., ROBERTS, B., PEACOR, D. R. & TÓTH, M. 1996: Crystallinity crystallite size and lattice strain of illite-muscovite and chlorite: comparison of XRD and TEM data for diagenetic to epizonal pelites. – *Eur. Journal Mineral.* **8**, 1119–1137.
- BÁRDOSY, Gy. 1966: A bauxit ásványos összetételének röntgendiffrakciós vizsgálata. – *Kohászati Lapok* **99**, 355–363.
- BÁRDOSY, Gy., BOTTYÁN, L., GADÓ, P., GRIGER, Á. & SASVÁRI, J. 1980: Automated quantitative phase analysis of bauxites. – *American Mineralogist* **65**, 135–141.
- BÁRDOSY, Gy., FODOR, J., MOLNÁR, P. & TUNGLI, Gy. 2000: A bizonytalanság értékelése a földtudományokban. – *Földtani Közöny* **130**, 291–322.
- FODOR, J. & ROUBENS, M. 1994: *Fuzzy preference modelling and multicriteria decision support*. – Kluwer Academic Publishers, 272 p. Dordrecht
- KOVÁCS, L., HÁMOS, G. & CSICSÁK, J. 2000: Actual state of the site characterisation programme of the Boda Siltstone Formation. – *Földtani Közöny* **130**, 197–206.
- TANAKA, K. 1991: *An introduction to fuzzy logic for practical applications*. – Springer Verlag. New York. 138 p.
- ZADEH, L. 1965: Fuzzy sets. – *Information and Control* **8**, 338–353.

Kézirat beérkezett: 2000. 09. 25.