

УДК 552.4.072:681.3

© К.В. Чудненко, О.В. Авченко

*К.В. Чудненко, О.В. Авченко*

# ОЦЕНКА УСЛОВИЙ ФОРМИРОВАНИЯ МЕТАМОРФИЧЕСКИХ ПОРОД МЕТОДОМ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

## Введение

Любая метаморфическая порода в системном плане представляет собой сложную систему [5], анализ формирования которой сопряжен с множеством не до конца количественно идентифицированных параметров, включая состав метаморфоженного флюида, Т-Р условия, режим подвижности тех или иных компонентов, окислительный потенциал флюида, буферный окислительный потенциал минерального парагенезиса и т.д. Обычно с учетом имеющегося петрологического и геохимического материала имеются приблизительные оценки этих величин, полученные с той или иной степенью точности и надежности.

Несмотря на наличие в петрологической литературе разнообразных уравнений и компьютерных программ, предназначенных для определения Р-Т условий и величин парциальных давлений флюидных компонентов, при которых формировались минеральные ассоциации [10, 11, 13, 15, 16, 18, 20], проблема нахождения подобной информации для многих минеральных парагенезисов остается по-прежнему востребованной задачей. Это обусловлено отсутствием в реальных природных парагенезисах определенных минеральных фаз, без которых количественная оценка Р-Т условий и флюидного режима на основе классической термобарометрии [7] становится невозможной. Например, в кварцитогнеисе с парагенезисом Gr+Sill+Bi+Kfs+Qv (где Gr – гранат, Sill – силлиманит, Bi – биотит, Kfs – калишпат, Qv – кварц, Amph – амфибол, Pl – плагиоклаз, Py – пироксен, Vi – биотит, Pm – ильменит) нельзя оценить величину общего давления, величину парциального давления воды и величину фугитивности кислорода, поскольку необходимые для такого определения минеральные фазы – плагиоклаз, кордиерит, магнетит, ильменит в этом парагенезисе отсутствуют.

Обращалось внимание на частое отсутствие в гранулитовых минеральных ассоциациях магнетита [4], что затрудняет оценку величины фугитивности кислорода в этих парагенезисах на основе классических фугометров. Особую сложность представляет оценка Р-Т параметров и флюидного режима

основных кристаллосланцев, вследствие распространения в них, главным образом, маломинеральных, бескварцевых ассоциаций, как, например, – Amph+Pl, Amph+Pl+Py, Gr+Amph, Gr+Amph+Pl, Amph+Bi+Pl, Amph+Pl+Py+Bi. В подобных парагенезисах на основе классической термобарометрии более или менее надежно возможно определение только температуры. Кроме того, на основе классического подхода [7] нельзя строго доказать равновесность в термодинамическом смысле того или другого минерального парагенезиса.

Таким образом, востребованность подхода, позволяющего определять условия и ТР-параметры формирования метаморфических пород средствами компьютерного моделирования, не вызывает сомнения.

## Описание методики

Нами на протяжении двух десятилетий развивается подход имитационного компьютерного моделирования физико-химических условий минералообразования в метаморфических породах на основе метода моделирования минимизации термодинамических потенциалов [2, 8]. Дальнейшим развитием этого направления является предлагаемый в данной работе способ оценки условий образования минеральных ассоциаций, когда в рамках единой постановки совместно учтены поиск различных сценариев взаимодействия флюидов разного состава с исходным составом силикатной матрицы и расчет ТР-параметров решением обратной задачи термодинамического моделирования. Новизна подхода к определению условий формирования метаморфических пород заключается в том, что для расчета Р-Т условий и парциальных давлений флюидных компонентов учитывается вся возможная информация по данному минеральному парагенезису: химический состав породы, наблюдаемый количественный минералогический состав, параметры состава минералов – железистость (Fe/Fe+Mg) железомagneзиальных минералов, глиноземистость (Al/Al+Mg+Fe+Ti+Si) амфиболов, пироксенов, биотита, хлорита, кальциевость (Ca/Ca+Na) амфиболов и клинопироксена,

кальциевость ( $Ca/Ca+Mg+Fe+Mn$ ) и марганцовистость ( $Mn/Ca+Mg+Fe+Mn$ ) граната, титанистость ( $Ti/Ti+Fe+Mg+Si+Al$ ) биотита, окисленность ( $Fe^{+3}/Fe^{+3}+Ti+Fe^{+2}+Mg+Mn$ ) ильменита, натровость ( $Na/Na+K$ ) калишпата и мусковита, основность ( $Ca/Ca+Na$ ) или номер плагиоклаза. Это приводит к возможности оценки условий образования по P-T параметрам и флюидному режиму практически любой минеральной ассоциации и более строгому доказательству термодинамического равновесия в данном образце. Данная процедура может рассматриваться как задача идентификации условий формирования эталонного образца метаморфической породы. Основным критерием поиска оптимального решения является нахождение максимального приближения наблюдаемого и рассчитанного минерального парагенезиса по всему набору заданных идентифицирующих параметров.

Вычисление основано на трехуровневом алгоритме автоматического поиска параметрических условий формирования метаморфической породы (рис. 1):

- задание алгоритма идентификации состава внешнего флюида и интервала возможного изменения температуры и давления;
- вычисление значений температуры и давления при фиксированном составе флюида;

- определение качественного и количественного составов внешнего флюида и минерального парагенезиса с расчетными значениями TR-параметров.

На начальном уровне задается определенный состав внешнего флюида, который будет воздействовать на неизменную породу. В действительности реальный состав флюида практически всегда неизвестен, поэтому вначале заводится вектор, в котором учтены приблизительные соотношения основных компонентов:  $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $CO$  и др. В дальнейшем в зависимости от имеющейся петрологической информации возможно задавать последовательное изменение состава флюида, включая добавление или исключение отдельных компонентов, с тем чтобы исследовать все основные режимы взаимодействия флюид/порода, позволяющего изучить вклад различных внешних факторов на формирование метаморфической породы (разные степени  $f_{O_2}$ , парциальные давления  $H_2O$ ,  $CO_2$ , и др. газов и т.д.).

На втором уровне проводится расчет TR-параметров для исследуемого образца породы с набором летучих компонентов, задаваемых каждым сгенерированным модельным составом флюида. В математическом описании задача может быть отнесена к специальному классу задач в теории распознавания образов – методу сравнения с прототипом [6, 9],

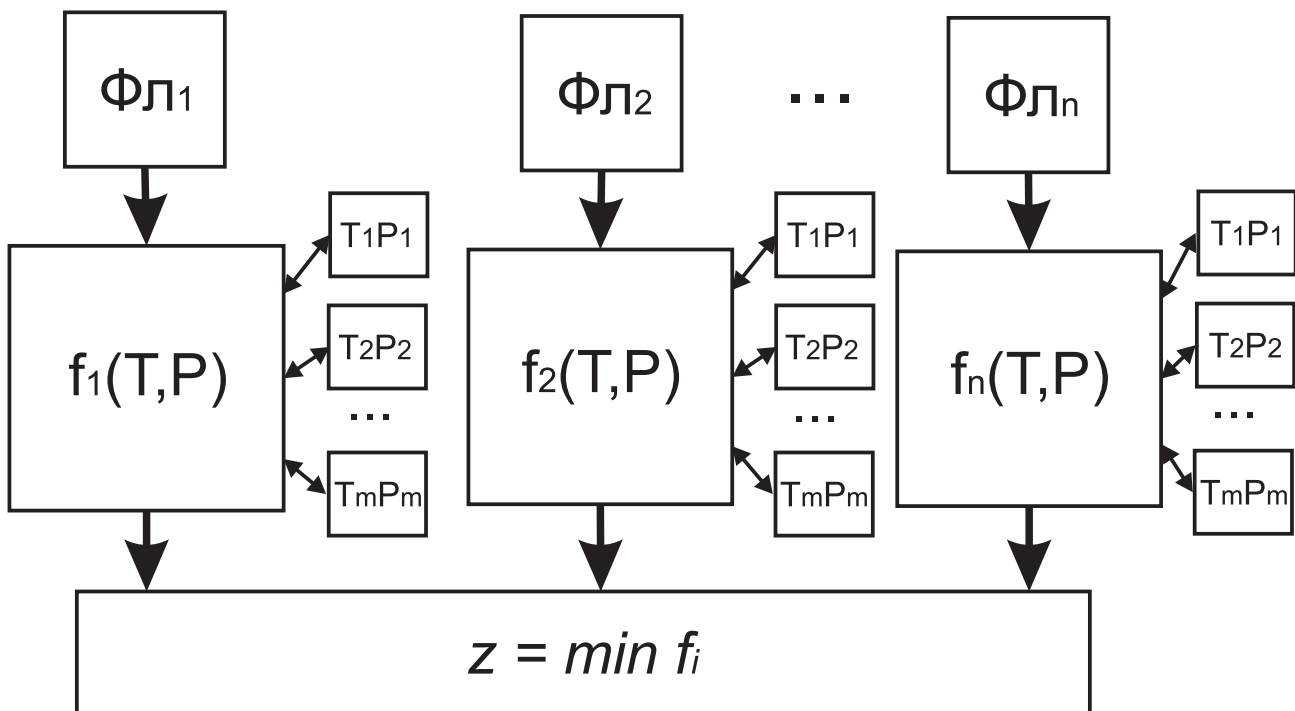


Рис. 1. Схема алгоритма расчета параметрических условий формирования метаморфической породы.  $Фл_i$  – метаморфогенный флюид;  $f_i(T, P)$  – блок расчета T-P-параметров при взаимодействии флюида  $Фл_i$  с породой;  $i = 1, n$ ;  $n$  – количество сценариев с участием флюидов различного состава;  $m$  – количество расчетных T-P точек;  $z$  – определение оптимального состава внешнего флюида и T-P условий формирования метаморфической породы

где в качестве эталона выбирается реальный образец породы, представленный вектором основных параметров и химического состава. Получаемые в результате решений экспериментальные (модельные) образцы породы для различных ТР и составов флюида представляют набор распознаваемых классов. Мера близости между объектами классификации и заданным эталоном устанавливается в зависимости от выбранного метрического расстояния между ними, которое во многом определяет результаты классификации.

Идентификация термобарических условий производится решением задачи нахождения минимума функции  $f$ , определяющей близость смоделированного состава породы к эталону при различных  $T$  и  $P$  из заданного интервала  $D_{ТР}$  для фиксированного состава флюида:

$$f = \min \left( \sqrt{\sum_i w_i (A_i - B_i)^2 + \sum_j (A_j - B_j)^2} \right), i \in P, j \in C,$$

где  $A$  – эталон (реальная порода),  $B$  – модельный расчет,  $P$  – множество параметров состава минералов,  $C$  – множество данных количественного химического состава породы. Весовые коэффициенты  $w_j$  позволяют приписать определенную вес параметру пропорционально степени важности признака в задаче классификации. Если такая дополнительная информация отсутствует, все  $w_j$  принимаются равными единице.

Принято целесообразным использовать комбинированную меру расстояния: взвешенное евклидово расстояние (для параметров состава минералов) и квадрат евклидова расстояние (для состава породы). Обычно вторая мера расстояния используется в тех случаях, когда требуется придать больше значение более отдаленным друг от друга объектам. Но в данном случае, поскольку определение параметров производится в относительных единицах в интервале (0, 1), то вторая мера, наоборот, представляет меньший вклад в общий функционал. Таким образом, состав минералов (параметры) вносит более весомый вклад в нахождение решения, чем значение количества минералов в породе. Такое соотношение принято в связи с тем, что определение состава минералов наиболее надежная и выверенная информация, доступная практически любому петрологу. В случае же с химическим составом породы, определенный люфт заложен на точность силикатного анализа, определение степени окисленности, не всегда полной и объективной оценке роли летучих компонентов в формировании породы и других факторов, увеличивающих степень погрешности исходных данных.

Задача определения равновесного состава породы при фиксированных  $T$ ,  $P$  и составе флюида

решается путем минимизации энергии Гиббса системы для модельного расчета образца породы ( $B$ ). Приведенный потенциал энергии Гиббса минеральной системы имеет вид [2]:

$$G(x) = \sum_{j \in S} \left( \frac{g_j}{RT} + \ln a_j^{id} + \ln \gamma_j \right) x_j,$$

где  $g_j$  – стандартный изобарно-изотермический потенциал  $j$ -го компонента;  $a_j^{id}$  – активность минала  $j$  в минерале при идеальном смешении, позволяющая учитывать вклады в идеальную активность конфигурационных факторов;  $\gamma_j$  – коэффициент активности;  $x_j$  – мольное количество  $j$ -го минала;  $S$  – множество индексов  $j$ , обозначающее компоненты минеральной системы. В случае однопозиционных твердых растворов активность равна молярной доле минала в минеральной фазе  $a_j^{id} = x_j / X_\alpha$ , где  $X_\alpha$  – мольное количество фазы  $\alpha$  твердого раствора.

Определение оптимального состава внешнего флюида с расчетными значениями температуры и давления формирования метаморфической породы (третий уровень) связано с решением задачи одномерной минимизации полученных значений функций  $f$  по всем из исследованных составов флюида:

$$z = \min_F f,$$

где  $F$  – множество составов внешнего флюида.

На практике нельзя исключить случая, когда в силу тех или иных причин (неточного задания схемы возможной эволюции состава флюида, нечеткого определения условий поиска области ТР, недостаточной полноты модели и т.д.) возможно получение достаточно грубого приближения решения к реальному образцу, что характеризуется большим значением критериальной функции и может служить сигналом, что требуется дальнейшее исследование системы с модифицированным набором исходных данных.

### Численный пример

В качестве примера рассмотрим задачу определения условий образования минеральных парагенезисов в трех образцах горных пород из охотского гранулитового комплекса [1]. Данные породы представлены гнейсами и кварцитогнейсами с парагенезисами  $Gr+Bi+Pl+Sill+Kfs+Qv+Ilm$  (обр. 251-А),  $Gr+Bi+Pl+Kfs+Qv$  (обр. А-433-1) и  $Gr+Bi+Sill+Kfs+Qv$  (обр. 441-г). Химические анализы данных пород приводятся в табл. 1, а химические анализы минералов – в табл. 2.

Таблицы 3 и 4 представляют собой результаты вычисления по предложенному алгоритму. При расчете использовались базы термодинамических данных и модели минеральных твердых растворов, рассмотренных в работах [2, 3], причем блок моделей твердых растворов был существенно расширен,

Таблица 1  
Химические составы пород

Полевой номер	251-А	441-г	А-433-1
SiO <sub>2</sub>	56,50	81,82	70,27
TiO <sub>2</sub>	1,16	0,38	0,68
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	19,88	9,30	12,76
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	2,69	1,31	1,21
FeO	5,60	3,07	4,56
MnO	0,30	0,09	0,04
MgO	3,42	1,34	1,82
CaO	1,10	0,04	2,38
Na <sub>2</sub> O	2,61	0,04	2,70
K <sub>2</sub> O	5,95	1,02	1,82
P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	0,08	0,05	0,15
п.п.п.	0,50	0,95	1,11
Σ	99,79	99,41	99,50

Примечание: Анализы выполнены в лабораториях Аналитического центра ДВГИ ДВО РАН сотрудницей Алексеевой Л.И.

согласно последним работам в области термодинамики биотита [19] и клино- и ортоамфиболов [14].

В табл. 3 приводится сопоставление реальных (природных) минеральных ассоциаций по количеству и набору минералов с модельными парагенезисами. Количественный состав реальных парагенезисов, показанный в табл. 3, находился расчетным методом по разработанной нами сервисной программе МС, основанной на минимизации невязок в уравнениях баланса масс состава породы и кристаллохимических формул минералов. Какая либо входная термодинамическая информация в этой программе отсутствует. Подобный метод пересчетов минерального состава, используемых в петрологических исследованиях, применялся в программе MINSQ [17], и он был модифицирован с учетом специфики решаемых задач.

В табл. 4 даются рассчитанные оценки условий образования данных минеральных парагенезисов (данные по Р-Т и флюидному режиму) и приводится сопоставление состава реальных минералов по железистости, кальциевости, марганцовистости граната, железистости, титанистости биотита и номеру плагиоклаза (эти параметры также представлены в табл. 2) с модельными минеральными ассоциациями. Фундаментальный факт соответствия количественного набора минералов в парагенезисах и параметров состава минералов между реальными и модельными ассоциациями (табл. 3, 4) свидетель-

ствует как о хорошем приближении к химическому равновесию реальных парагенезисов, так и о согласованности всех термодинамических данных, принятых при решении данной задачи. Высокая степень сходимости реальных и модельных парагенезисов повышает степень доверия и к вычисленным условиям их образования. Оценки Р-Т во всех трех образцах гранулитов оказались близкими (табл. 4) при их высокой восстановленности (на уровне графитового буфера). Характерно невысокое отношение флюид/порода во всех моделях – в пределах 0,05-0,1 (вес. %). Высокая восстановленность минеральных ассоциаций подчеркивается отсутствием магнетита в реальных парагенезисах и низким содержанием (до 0,07 ф.е.) трехвалентного железа в ильмените (табл. 2). Отметим, что величину давления и параметры флюидного режима в обр. А-433-1, 441-г, а также уровень фугитивности кислорода и отношение флюид/порода во всех образцах на основе классической термобарометрии найти невозможно. Гранат-биотитовая термометрия по Л.Л. Перчуку [7] дает для данных минеральных парагенезисов температуры в 650-690°C. Одновременное определение Р-Т оценок в обр. 251-А по программе РЕТ [12] приводит к оценкам 6,3-7,1 кбар и 670°C (геобарометры Gr+Bi+Pl+Qv и Gr+Pl+Sill+Qv, Gr-Bi термометр). Некоторые отличия в определении условий образования минеральных ассоциаций классическим и предлагаемым методами объясняются как различием самих подходов, так и использованием в расчетах входных термодинамических данных из разных источников.

### Заключение

Предлагаемый подход к проблеме оценки условий формирования метаморфических пород опирается на решение обратной задачи термодинамического моделирования на основе модельного расчета реальных минеральных ассоциаций в зависимости от входных данных по химическому составу породы и внешнего метаморфогенного флюида, параметров минералов, возможных интервалов Р-Т условий минералообразования. В вычислительном плане реализация расчетной процедуры алгоритма подразумевает решение большого количества прямых задач, что, в свою очередь, связано с определенными временными затратами. Однако мощность современных вычислительных систем делает данное ограничение не существенным.

Верификацией решения задачи является сопоставление набора и состава минералов в модельном парагенезисе с реально наблюдаемой минеральной ассоциацией и сравнение получающихся в процессе моделирования данных по Р-Т условиям и флюидному

Таблица 2

Химические анализы минералов и их кристаллохимические формулы в обр. 251-А, 441-г, А-433-1

№	251-А										441-г						А-433-1					
	Gr-c	Gr-r	Gr-c	Bi	Bi-k	Plag	Ilm	Kfs	Gr-c	Gr-c	Bi	Kfs	Gr	Bi	Gr	Bi	Bi-k	Plag				
№ п/п	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18				
SiO <sub>2</sub>	38,31	37,84	37,87	35,78	35,49	60,24	0	61,63	36,75	37,36	34,15	35,05	63,41	36,98	36,50	34,34	34,87	58,70				
TiO <sub>2</sub>	0	0	0	4,82	4,2	0	48,9	0	0	0	2,87	2,26	0	0	0	4,21	3,02	0				
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	21,25	20,6	21,04	15,89	16,52	23,65	0	18	20,87	21,02	17,46	17,95	18,02	21,30	20,73	17,15	17,76	23,86				
FeO	26,92	27,95	26,86	12,21	11,73	0	45,81	0	33,51	33,29	18,6	18,06	0	33,22	33,80	17,35	16,40	0				
MnO	1,43	1,49	1,29	0	0	0	1,32	0	1,76	1,4	0	0	0	0,50	0,74	0	0	0				
MgO	8,07	7,06	8,68	13,72	15,58	0	0	0	5,06	5,98	9,79	10,62	0	4,96	4,74	10,50	11,49	0				
CaO	1,05	0,71	0,78	0	0	5,05	0	0	0,55	0,6	0	0	0	1,63	1,37	0	0	6,22				
Na <sub>2</sub> O	0	0	0	0	0	8,49	0	1,99	0	0	0	0	1,61	0	0	0	0	7,62				
K <sub>2</sub> O	0	0	0	9,49	8,61	0,19	0	13,43	0	0	10,27	10,01	15,42	0	0	9,93	9,91	0,37				
Сумма	97,03	95,65	96,52	91,91	92,13	97,62	96,03	95,05	98,5	99,65	93,14	93,95	98,46	98,59	97,88	93,48	93,45	96,77				
Si	3,043	3,068	3,024	2,74	2,692	2,737	0	2,978	2,97	2,967	2,68	2,705	2,983	2,975	2,969	2,663	2,685	2,701				
Ti	0	0	0	0,278	0,24	0	0,965	0	0	0	0,169	0,131	0	0	0	0,246	0,175	0				
Al	1,989	1,968	1,98	1,434	1,477	1,267	0	1,025	1,988	1,968	1,615	1,632	0,999	2,020	1,987	1,568	1,612	1,294				
Fe <sup>2+</sup>	1,788	1,895	1,794	0,782	0,744	0	0,936	0	2,192	2,114	1,221	1,165	0	2,206	2,224	1,125	1,056	0				
Fe <sup>3+</sup>	0	0	0	0	0	0	0,07	0	0,073	0,097	0	0	0	0,029	0,075	0	0	0				
Mn	0,096	0,102	0,087	0	0	0	0,029	0	0,12	0,094	0	0	0	0,034	0,051	0	0	0				
Mg	0,956	0,853	1,033	1,567	1,762	0	0	0	0,61	0,708	1,145	1,222	0	0,595	0,575	1,214	1,319	0				
Ca	0,089	0,062	0,067	0	0	0,246	0	0	0,048	0,051	0	0	0	0,141	0,119	0	0	0,307				
Na	0	0	0	0	0	0,748	0	0,186	0	0	0	0	0,147	0	0	0	0	0,680				
K	0	0	0	0,927	0,833	0,011	0	0,828	0	0	1,028	0,985	0,925	0	0	0,983	0,974	0,022				
X <sup>Gr</sup> <sub>Fe</sub>	0,65	0,69	0,63						0,78	0,75				0,79	0,79							
X <sup>Gr</sup> <sub>Ca</sub>	0,030	0,021	0,022						0,016	0,017				0,047	0,040							
X <sup>Pl</sup> <sub>Al</sub>						0,25																
X <sup>Bi</sup> <sub>Fe</sub>				0,33	0,30						0,52	0,49				0,48	0,44					

Примечание. Анализы выполнены в Аналитическом центре ДВГИ ДВО РАН на микрозонде JEOL 8100 Вахом А.С., Бадрединовым З.Г., с – центр кристалла, г – край кристалла, Bi-k – биотит на контакте с гранатом.

Таблица 3

Сопоставление (вес. %) количеств минералов в природных образцах (П) и моделях (М) и отношение (W/R) флюид/порода (вес. %) в моделях

Образец	Природный (П) – Модель (М)	Минералы							
		Gr	Bi	Pl	Kfs	Sill	Qv	Ilm	W/R
251-A	П	20	12,3	17,5	33,7	5,06	10,4	1,0	
	М	20,7	11	15	39,7	3,7	8	1,5	0,05
441-Г	П	5,2	9,8	–	0,02	10,41	74,53	0	
	М	7,3	9	–	1	9,4	73	0,2	0,09
433-1	П	8,1	13,02	34,8	2,1	–	41,9	–	
	М	9,1	11,6	32,5	5,1	–	40	0,6	0,05

Таблица 4

Сопоставление минеральных парагенезисов, параметров состава минералов в природных образцах (П) и моделях (М), оценки P (бар), T °C,  $f_{O_2}$ ,  $P_{CO_2}$ ,  $P_{H_2O}$

№ обр.	251-A		441-Г		A-433-1	
	П	М	П	М	П	М
$X_{Fe}^{Grt}$	0,63-0,65	0,64	0,78	0,774	0,79	0,784
$X_{Ca}^{Grt}$	0,026	0,03	0,01	0,015	0,04	0,068
$X_{Fe}^{Bt}$	0,34	0,34	0,49	0,501	0,48	0,49
$X_{An}^{Pl}$	0,25	0,26	–	–	0,31	0,32
Ti в Bt, ф.е.	0,24	0,20	0,17	0,16	0,24	0,17
Mn в Grt, ф.е.	0,08-0,1	0,10	0,12	0,08	0,05	0,03
Al <sup>3+</sup> в Bt, ф.е.	1,46	1,71	1,61	1,73	1,57	1,41
$Q_{Bt}$		0,49		0,37		0,41
Qv	+	+	+	+	+	+
Kfs	+	+	+	+	+	+
Sill	+	+	+	+	–	+
Ilm	+	+	–	Сл.	–	+
T °C		695		748		717
P, бар		5890		5600		6050
$f_{O_2}$		–17		–16,4		–16,8
$P_{CO_2}$		4700		1800		4380
$P_{H_2O}$		1100		3560		1580

Примечание: + означает присутствие минерала; Сл. – след; прочерк – отсутствие минерала;  $Q_{Bt} = z_{Mg}^{M2} - z_{Mg}^{M1}$  – параметр упорядочения биотитов по [19];  $X_{Fe}^{Grt}$ ,  $X_{Fe}^{Bt}$  – железистость (Fe/Fe+Mg) граната и биотита;  $X_{Ca}^{Grt}$  – кальциевость (Ca/Ca+Fe+Mg) граната;  $X_{An}^{Pl}$  – основность (Ca/Ca+Na) плагиоклаза.

режиму с показаниями известных геотермобарометров и фугометров.

Работа поддержана Интеграционным проектом СО и ДВО РАН № 12 (12-I-CY-08-014).

**Ключевые слова:** термодинамическое моделирование, распознавание образцов, метаморфические породы, парагенезис, минералообразование.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Авченко О.В. Минеральные равновесия в метаморфических породах и проблемы геобаротермометрии. – М. : Наука, 1990. – 182 с.
2. Авченко О.В., Чудненко К.В., Александров И.А. Основы физико-химического моделирования минеральных систем. – М. : Наука, 2009. – 229 с.
3. Авченко О.В., Чудненко К.В., Александров И.А., Худоложкин В.О. Адаптация программного комплекса «СЕЛЕКТОР-С» к решению проблем петрогенезиса метаморфических пород // Геохимия. – 2011. – Т. 49 – № 2. – С. 149-164.
4. Авченко О.В., Чудненко К.В., Худоложкин В.О., Александров И.А. Окислительный потенциал и состав метаморфоженного флюида как решение обратной задачи выпуклого программирования // Геохимия. – 2007. – № 5. – С. 547-558.
5. Бусленко Н.П. Моделирование сложных систем. – М. : Наука, 1978. – 400 с.
6. Дуда Р., Харт П. Распознавание образов и анализ сцен. – М. : Мир, 1978. – 510 с.
7. Перчук Л.Л. Магматизм, метаморфизм и геодинамика. – М. : «Наука», 1993. – 190 с.
8. Чудненко К.В. Термодинамическое моделирование в геохимии: теория, алгоритмы, программное обеспечение, приложения. – Новосибирск : Изд-во «Гео», 2010. – 287 с.
9. Ту Дж., Гонсалес Р. Принципы распознавания образов. – М. : Мир, 1978. – 410 с.
10. Connolly J.A.D., Petrini K. An automated strategy for calculation of phase diagram sections and retrieval of rock properties as a function of physical conditions // Journal of Metamorphic Geology. – 2002. – V. 20. – P. 697-708.
11. Connolly J.A.D. Computation of phase equilibria by linear programming: a tool for geodynamic modeling and its application to subduction zone decarbonation // EPSL. – 2005. – V. 236. – P. 524-541.
12. Dachs E. PET: Petrological elementary tools for mathematics // Computers & Geosciences. – 1998. – V. 24. – № 3. – P. 219-235.
13. De Capitani C., Petrakakis K. The computation of equilibrium assemblage diagrams with Theriak/Domino software // American Mineralogist. – 2010. – V. 95. – P. 1006-1016.
14. Diener J.F.A., Powell R., White R.W., Holland T.J.B. A new thermodynamic model for clino- and orthoamphiboles in the system  $\text{Na}_2\text{O}-\text{CaO}-\text{FeO}-\text{MgO}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2-\text{H}_2\text{O}-\text{O}$  // Journal of Metamorphic Geology. – 2007. – V. 25. – P. 631-656.
15. Eriksson G., Hack K. ChemSage – A computer program for the calculation of complex chemical equilibria // Metallurg. Trans. – 1990. – V. 21B. – P. 1013-1023.
16. Greenberg J.P., Weare J.H., Harvie C.E. An equilibrium computation algorithm for complex highly nonideal systems. Application to silicate phase equilibria // High Temperature Science. – 1985. – V. 20. – P. 141-162.
17. Herrmann W., Berry R.F. MINSQ – a least squares spreadsheet method for calculation mineral proportion from whole rock major element analyses // Geochemistry: Exploration, Environment, Analysis. – 2002. – V. 2. – P. 361-368.
18. Powell R., Holland T. Course Notes for «THERMOCALC Workshop 2001: Calculating metamorphic Phase Equilibria» (on CD-ROM), 2001 (<http://www.metamorph.geo.uni-mainz.de/thermocalc/>).
19. Tajcmanova L., Connolly J.A.D., Cesare B. A thermodynamic model for titanium and ferric iron solution in biotite // Journal of Metamorphic Geology. – 2009. – V. 27. – P. 153-165.
20. Takeno N. FLASK-SG: A program to compute chemical equilibria in metamorphic petrology // Computers & Geosciences. – 2001. – V. 27. – P. 1179-1188.