

УДК 552.124:681.3.06

© Коллектив авторов

K.B. Чудненко, O.B. Авченко, A.C. Вах, A.K. Чудненко

Mineral	biotite	garnet	plagiocl	quartz	white-mi	ilmenite	magnetit	kfeldspa	apatite
Index	bt	gr	pl	qtz	wh	ilm	mag	kfs	apat
V, cm ³	150	10	10	10	10	10	10	10	10
O	11	12	8	2	11	3	4	8	25
Si	2.75	1.5	2.05	1	3.092	1	3		
Ti	0.10				0.005	1			
Al	1.62	1.32	1.029		2.226	1	1		
Fe+2									
Fe+3									
Mn	0.042	1.323							
Mg	0.998	0.065			0.096				
Ca		0.475	0.92						10
Na		0.05							

ПЕТРОЛОГИЧЕСКИЙ ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ РЕАЛЬНОГО МИНЕРАЛЬНОГО СОСТАВА ГОРНОЙ ПОРОДЫ (ПРОГРАММА MC)

Введение

В петрологии магматических и осадочных пород известен набор компьютерных программ, на основе которых рассчитывается нормативный минералогический состав [8, 9, 12, 13]. Этот нормативный состав, однако, мало связан с реальной минералогией горных пород, что вызывает особые сложности в интерпретации полученных данных. Вероятно поэтому пересчет на нормативный состав для расшифровки петрогенетических особенностей метаморфических и метасоматических пород почти не применялся.

В настоящее время аналитические возможности, благодаря внедрению в практику петрологических исследований микрозонда и рентгенофлуоресцентного анализа, резко расширились, так что не существует трудностей в получении качественных анализов горных пород и минералов. Поэтому появилась потребность в программах, способных на основе данных по химическому составу пород и слагающих их минералов рассчитать реальный количественный минералогический состав. Одной из таких программ, получивших признание в первую очередь у зарубежных исследователей, является MINSQ [11], реализующая алгоритм метода наименьших квадратов и созданная на SOLVER в EXCEL. Описываемая в статье программа MC работает на алгоритме линейного программирования и также, как и MINSQ, предназначена для расчета модалных количеств минералов на основе входной информации по химическому составу породы и минералов, но имеет ряд дополнительных возможностей. Так, вводимые минералы в MC могут быть записаны как в виде окислов, так и в виде кристаллохимических формул, что позволяет при определении трехвалентного железа в минералах разделить окисное и закисное железо в анализе породы. Другой особенностью MC является реализация возможности решения обратной задачи с помощью опции Rock, когда необходимо рассчитать теоретический состав горной породы, исходя из заданных модалных

составов и минералов. Эта опция дает надежный контроль расчета модалных количеств и позволяет при необходимости обнаружить случаи неоднозначности расчета. Степень приближения модалных составов к данному составу породы оценивается по величине Residual. Нужно особо отметить, что расчет на MC требует качественной работы минералога и химика-аналитика, так как в некоторых случаях даже незначительный недостаток каких-либо минералов во вводимом минералогическом наборе и неточности в определении химиком-аналитиком химического состава породы могут приводить к высокой величине Residual, что служит критерием необходимости уточнения исходной информации. Применение MC, как показано в статье, перспективно для решения разнообразных петрологических проблем в области метасоматоза, метаморфизма и магматизма.

Обозначения минералов: Qtz – кварц, Plag – плагиоклаз, Kfs – калиевый полевой шпат, Bi – биотит, Hb – амфибол, Wm – мусковит, Gr – гранат, Sph – титанит, Ep – эпидот, Orp – ортопироксен, Apat – апатит, Mgt – магнетит, Ilm – ильменит, Gbs – гиббсит, Spi – шпинель, Chl – хлорит, Cc – кальцит, Rut – рутил, Anker – анкерит, Sid – сидерит, Kaol – каолинит, Py – пирит, Pirt – пирротин, Or – ортоклаз, Ab – альбит, Ne – нефелин, An – анортит, Di – диопсид, Hy – гиперстен, Ol – оливин.

Описание программы MC

Программа MC (Modal Composition) предназначена для расчета методом линейного программирования [7] количеств минералов в минеральном парагенезисе, выраженных в весовых, объемных или мольных процентах, по общему химическому составу породы и составу минералов, выраженному в кристаллохимических формулах или в весовых процентах окислов.

Целевая функция задачи линейного программирования состоит в минимизации отклонения исходного и расчетного состава породы:

$$\min \sum_{j=1}^n (x_j - y_j)^2 \quad (1)$$

на множестве ограничений

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j = b_i, \quad (2)$$

$$x_j \geq 0, j = 1, \dots, n, \quad (3)$$

где x_j – содержание минерала j в расчетном составе породы; y_j – содержание минерала j в исходном составе породы; n – количество минералов в составе породы; a_{ij} – коэффициенты, показывающие число стехиометрических единиц i в минерале j ; b_i – мольное количество стехиометрической единицы i во всех минералах.

Последовательность вычислительных шагов алгоритма включает:

1. Нахождение опорного решения $X = (x_1, \dots, x_n)$.
2. Поиск следующего опорного решения с оценкой целевой функции задачи (1).
3. В случае когда значение целевой функции последующего решения перестает уменьшаться, перебор опорных решений прекращается и текущее опорное решение принимается в качестве оптимального.

Рабочее окно программы представлено на рис. 1.

Номер образца и любые краткие комментарии по желанию пользователя заносятся в верхнюю информационную строку-заголовок *Sample*. Исходный химический состав породы вводится в строку таблицы *Initial Rock Composition* (вес. %), находящуюся в верхней части окна, без воды и потерь при прокаливании. В процессе расчета этот состав будет нормирован на 100% и показан во второй строке таблицы *Initial Rock Composition*. При необходимости состав компонентов по желанию пользователя может быть расширен путем заполнения пустых клеток таблицы. На следующем этапе необходимо задать набор определенных в породе минералов. Для облегчения формирования списка программа МС сопряжена с базой данных минералов *Minerals.db*, в которой хранятся: название минералов, их краткие наименования, мольные объемы (см³) и количество атомов кислорода (О) в стехиометрической формуле минерала. Выбор необходимого набора минералов производится отметкой необходимых минералов в списке *Minerals*, расположенном в правой части рабочего окна, и нажатием кнопки *Insert Table*. При необходимости список *Minerals* можно сделать невидимым, нажав кнопку «х». Недостающие в базе минералы можно ввести в таблицу вручную. Введенные вручную минералы можно сохранить в базе данных, нажав кнопку *ReWrite*. Если один или несколько минералов нужно удалить из базы данных, то необходимо их выделить в списке *Minerals* и нажать кнопку *Delete*. Программа МС может работать и без базы данных *Minerals.db*, в этом случае минералы вводятся в таблицу вручную и при необходимости

могут быть сохранены в созданную базу данных нажатием кнопки *ReWrite*.

Количество минералов может быть введено двумя способами: либо через коэффициенты кристаллохимических формул минералов (в этом случае открыта вкладка *Crystal-chemical formulas* в нижней части рабочего окна), либо как весовые проценты окислов компонентов (открыта вкладка *Weight %*). Набор как химических элементов в кристаллохимических формулах, так и окислов при вводе весовых количеств минералов может быть дополнительно расширен пользователем, исходя из решаемой задачи. Имеется только ограничение на ввод бескислородных соединений: расчет таких минералов, как пирит, пирротин, арсенипирит и т.д. должен проводиться только по кристаллохимическим формулам.

Продемонстрируем ввод исходных данных и проведение расчета на тестовом примере из работы Джона Ферри [10], в которой приведены составы минералов, химические составы пород и модальный состав метapelитовых гнейсов формации Вотервилль. Вводим исходные данные образца 418-А и для выполнения расчета нажимаем кнопку *Calculate* (рис. 1). При этом переключатель режима работы программы *Regime Calculation* в верхней правой части рабочего окна должен находиться в положении *Minerals*. Результат расчета количественного содержания минералов в породе (вес. %, объемн. %, моль. %) будет выведен в нижней части рабочего окна.

Точность полученного решения можно оценить по расчетному составу породы (вес. %), который выводится в таблицу *Calculated Rock Composition* в верхней части рабочего окна синим цветом. Также вычисляется расхождение исходного и расчетного составов породы, равное значению целевой функции задачи (1) – $Residual = \sum_j^n (x_j - y_j)^2$. В связи с тем,

что определение Fe⁺² и Fe⁺³ в породе не всегда строго разделено, для железа сделано исключение: рассчитывается отклонение не отдельных форм железа (окисного и закисного), а общее отклонение содержаний железа в аналитическом определении и проведенном расчете. Небольшая величина *Residual* (*Residual* < 0,2) свидетельствует о хорошем приближении рассчитанного модального состава к данному химическому составу породы. При значительном отклонении (*Residual* > 1) числовое значение выводится красным цветом, что является сигналом о недостаточной точности исходных аналитических данных или неверном/неполном списке заданных минералов.

Дж. Ферри не указывал магнетит в минералогическом составе пород. Заметим, что магнетитовый минерал в метаморфических породах часто входит в

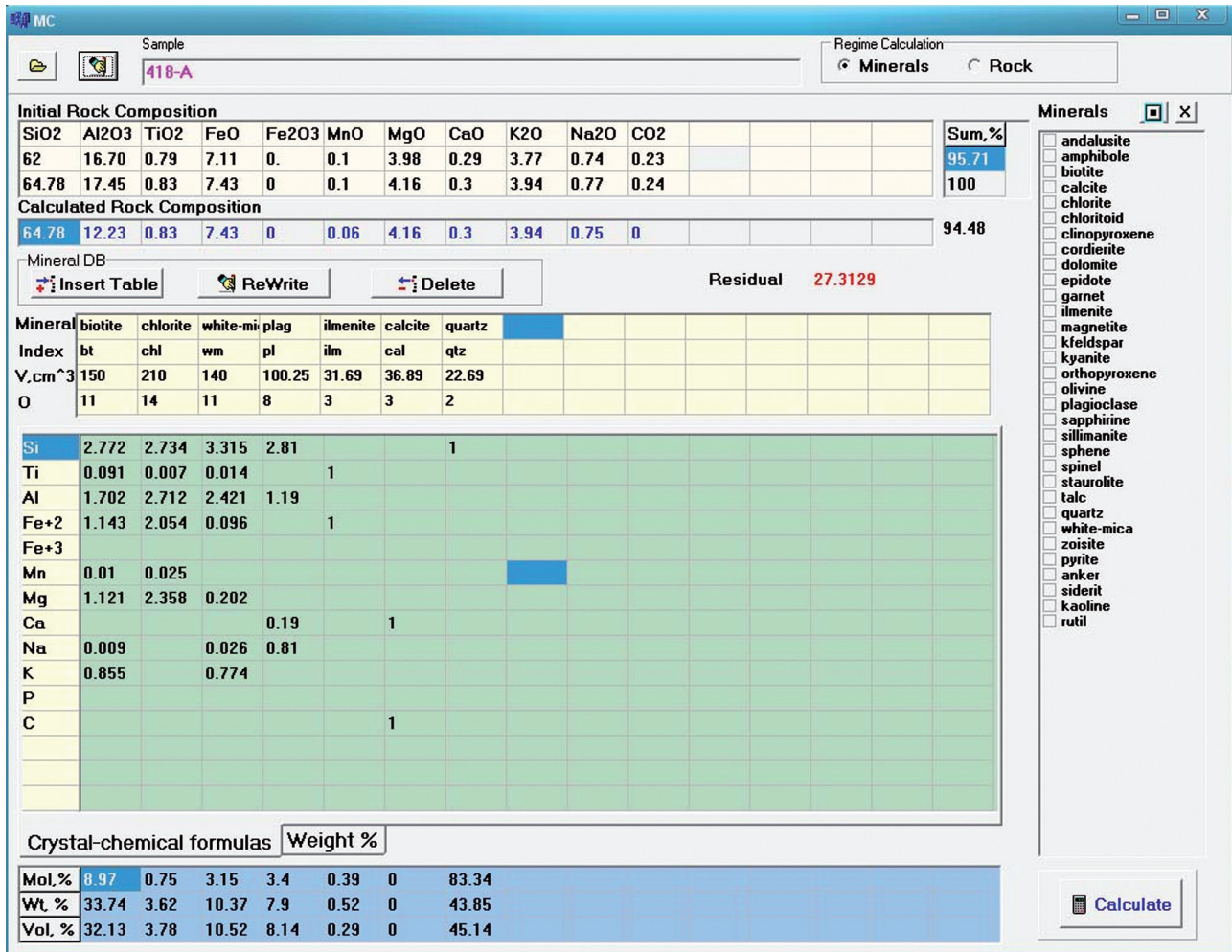


Рис. 1. Рабочее окно программы MC для образца 418-A

состав твердого раствора ильменита. Добавление магнетита в перечень возможных минералов позволяет значительно усилить точность расчета (рис. 2) и вплотную приблизить полученные результаты к данным Дж. Ферри по количественному составу минералов (табл. 1).

Файл с исходными данными может быть сохранен в выбранной папке пользователя нажатием кнопки с изображением пишущей руки в левом верхнем углу рабочего окна. При последующем расчете данные могут быть загружены из этого файла нажатием кнопки с символом открытой папки.

Результаты расчетов дополнительно выводятся в файл, имя которого по умолчанию совпадает с именем исходного файла, но имеющего расширение «.out». Это обычный текстовый файл, в котором представлена следующая информация:

1. Состав расчетной системы в химических элементах (моли) и невязки баланса масс, полученные в результате расчета.

2. Количество рассчитанных минералов (моль, вес. %, грамм, объемн. %).
3. Исходный и расчетный состав породы (вес. %).
4. Величина *Residual*.

Отличительной чертой программы MC от других подобных программ, ориентированных на расчет модальных количеств, является опция *Rock*, задаваемая переключателем режима работы программы *Regime Calculation* в верхней правой части рабочего окна. Если нажать кнопку *Rock*, то можно провести обратный расчет состава породы, т.е. вычислить теоретический состав горной породы на любом произвольно заданном модальном количестве минералов, выраженном в весовых, объемных или мольных процентах. Произвольные модальные количества, приведенные к 100%, вводятся внизу рабочего окна в соответствующих единицах. Состав минералов для этой опции, также как и в опции *Minerals*, задается в коэффициентах кристаллохимических формул или в весовых % окислов.

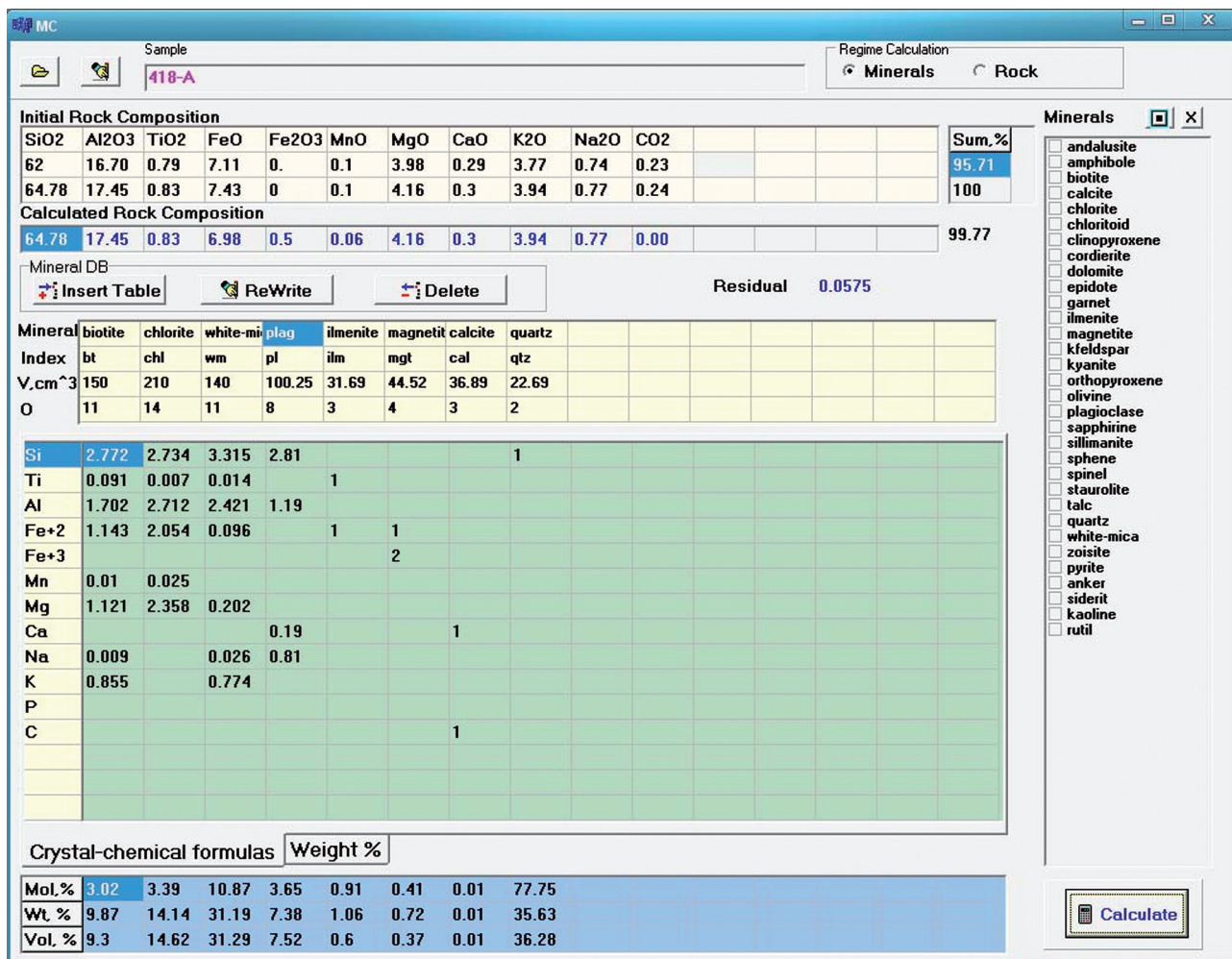


Рис. 2. Рабочее окно программы MC для уточненного состава образца 418-A

Таблица 1

Минеральный состав образца 418-A (мольные %)

№ обр.	Bi	Chl	Wm	Plag	Qtz	Ilm	Mgt	Cc	Ист.
418-A	3,0	3,4	10,8	3,7	77,8	0,9	0,4	0,01	MC
418-A	3,4	3,5	10,5	3,7	78	0,9	–	–	[10]

Особенности работы MC

Программа MC дает возможность контролировать недостаток некоторых минералов, которые имеются в породе, но не приняты во внимание или пропущены минералогом при расчете модального состава пород. Покажем это свойство на примере расчета теоретического состава породы, вычисленного MC с помощью опции *Rock*. Нами использован подробно изученный образец эвлизитов из охотского метаморфического гранулитового комплекса [1]. Кристаллохимические формулы всех минералов, рассчитанные из имеющихся анализов минералов, выполненных на микрозонде JXY 8100 в лаборатории

ДВГИ ДВО РАН, приведены в табл. 2. Химический состав теоретической породы (табл. 3) получен при помощи опции *Rock* на основе произвольно заданных количеств минералов, показанных в табл. 4 в строке «real». Проведя расчеты модального состава теоретической породы по программам MC и MINSQ, получаем их хорошее соответствие (табл. 4). Далее предположим, что минералог пропустил шпинель (всего 1,2 вес.%) и рассчитал модальный состав этой породы без шпинели. Как видно из табл. 4, MC в этом случае показывает высокую величину *Residual*, равную 0,53, что и свидетельствует о недостатке какого-то минерала в минеральном наборе для расчета модального состава породы. В отличие от MC, программа

Таблица 2

Кристаллохимические формулы минералов для расчета модального состава

Минерал	Hb	Opx	Plag	Qtz	Spi	Gr	Kfs	Ilm	Mgt	Bi	Apat
Si	6,3	1,96	2,52	1	–	3	3	–	–	2,72	–
Ti	0,12	–	–	–	0,07	–	–	0,991	0,017	0,264	–
Al	2,14	0,07	1,46	–	2	1,90	1	–	–	1,36	–
Fe ⁺²	1,766	0,989	–	–	0,741	1,89	–	0,852	1,017	1,111	–
Fe ⁺³	0,613	0,014	0,017	–	–	0,091	–	0,019	1,955	–	–
Mn	–	0,022	–	–	–	0,176	–	0,139	–	–	–
Mg	2,074	0,921	–	–	0,191	0,42	–	–	–	1,386	–
Ca	1,83	0,026	0,489	–	–	0,503	–	–	–	–	10
Na	0,34	–	0,510	–	–	–	0,077	–	–	–	–
K	0,32	–	–	–	–	–	0,949	–	–	0,996	–
P	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	6
Zn	–	–	–	–	0,11	–	–	–	–	–	–
O	23	6	8	2	4	12	8	3	4	11	25

Таблица 3

Химический состав модельной породы (вес.%), вычисленный по модальному минералогическому составу, приведенному в таблице 4 («real»)

SiO ₂	TiO ₂	Al ₂ O ₃	FeO	Fe ₂ O ₃	MnO	MgO	CaO	K ₂ O	Na ₂ O	P ₂ O ₅	Σ
49,37	0,65	8,78	17,2	15,64	0,48	3,65	2,37	0,99	0,71	0,13	99,97

Таблица 4

Сопоставление расчета модального состава породы (вес.%), выполненных по программам MC и MINSQ при условии «потери» в составе шпинели

Источник данных	Минерал											Residual
	Opx	Plag	Qtz	Spi	Gr	Kfs	Ilm	Mgt	Bi	Apat		
real	12,1	12,1	27,3	1,2	15,2	0,2	0,1	22,6	8,9	0,3	–	
1	MC	12,8	12,1	27,2	1,4	14,8	0,8	0,1	22,5	8,1	0,3	0,0
	MINSQ	12,1	12,1	27,5	1,3	14,8	0,1	0,0	22,6	9,2	0,3	0,0
2	MC	12,3	12,2	27,5	–	15,3	0,0	0,06	23	9,3	0,3	0,53
	MINSQ	11,2	12,4	26,5	–	18,1	0,0	0,1	22,2	9,5	0,1	0,0

1 – точный модальный состав породы; 2 – расчет при условии «потери» в составе шпинели.

MINSQ как бы не замечает нехватки шпинели и дает величину *Residual* близкую к нулю. Таким образом, программа MC может служить своеобразным контролером работы минералога и химика-аналитика.

Оценка точности расчета MC

Для оценки точности работы MC воспользуемся методами статистического анализа [5]. За основу возьмем представительную сводку Г.С. Йодера и К.Э. Тилли [6], в которой приведен нормативный состав всех главных разновидностей базальтов.

Существует несколько общепринятых систем пере-счета пород на стандартные (нормативные) минералы. Авторы [6] использовали одну из наиболее популярных систем – CIPW, в которой содержания нормативных минералов задается в массовых долях. Поскольку перечень минералов в нормативном составе постоянен, то такой прием удобен для сравнения пород, проанализированных различным образом.

Сопоставление данных Йодера и Тилли и результатов расчета по программе MC представлены в табл. 5. Следует отметить, что данные [6] в свою оче-

редь имеют определенный запас точности: остаток не реализованных в минералах компонентов изменяется в пробах в пределах 0,1-0,9 вес. % и суммарный состав определенных минералов определяется как $100 \pm 0,5\%$.

Для каждой пробы рассчитан парный критерий Стьюдента:

$$T_{набл.} = \frac{\sum \delta_i}{\sqrt{(N \sum \delta_i^2 - (\sum \delta_i)^2) / (N-1)}}$$

где δ_i – разности между определенными и расчетными по МС количествами минералов, N – объем выборки (9 или 10).

При числе степеней свободы $\nu = N - 1 = 8$ (9) на 95% уровне достоверности табличное значение критической точки распределения Стьюдента $t_{кр}$ дает величину – 2,31 (2,26). Поскольку $T_{набл.} < t_{кр}$, то можно сделать вывод, что нет оснований отвергать нулевую гипотезу, и результаты расхождений исходных и расчетных величин различаются незначительно.

Другим показательным примером может служить обработка данных Дж. Ферри по природным образцам метапелитовых гнейсов биотитовой зоны метаморфизма формации Вотервилль [10] с приведенным составом минералов и химическим составом пород. Расчет по МС приведен в табл. 6, где показано, что на 95% уровне достоверности полученные результаты удовлетворяют критерию Стьюдента.

Оценим точность расчета. В качестве критерия выберем сумму абсолютных значений отклонений содержаний определенных и рассчитанных по МС

минералов, представленных в табл. 5 и 6 ($N = 30$). Доверительный интервал для генерального среднего определяется как

$$(\bar{x} - t_{кр} \frac{\sigma}{\sqrt{N}}; \bar{x} + t_{кр} \frac{\sigma}{\sqrt{N}}),$$

где $t_{кр}$ – доверительный уровень, σ – квадратичное отклонение.

Определим значения $t_{кр}$ по таблицам функции Лапласа. Оценка отклонений расчетов по 30 образцам составляет $4,1 \pm 0,92$ (вес. %) с доверительной вероятностью 95%. Учитывая точность определения химического состава породы и минералов, такая оценка может быть признана удовлетворительной.

Опыт применения МС к анализу метасоматических пород

Эффективность применения МС к анализу минеральных парагенезисов метасоматических пород покажем на примере рассмотрения метасоматитов Березитового месторождения (Верхнее Приамурье, Россия). Месторождение представлено сульфидсодержащими метасоматическими породами, которые локализованы в массиве порфириовидных гранодиоритов позднепалеозойского возраста в виде двух совмещенных перевёрнутых конусов. Геологическое строение месторождения, возрастные датировки, минералогия руд приводятся в ряде публикаций [2-4]. Метасоматические породы месторождения обнаруживают четко выраженное зональное строение. В направлении от гранитов к центру метасоматической залежи, выделяются следующие минералогические зоны (рис. 3):

Зона А. Слабоизмененный гранодиорит. Магматический парагенезис – $Qtz + Plag_{25-35} + Kfs + Bi + Nb$. Изменение гранодиоритов выражено в развитии

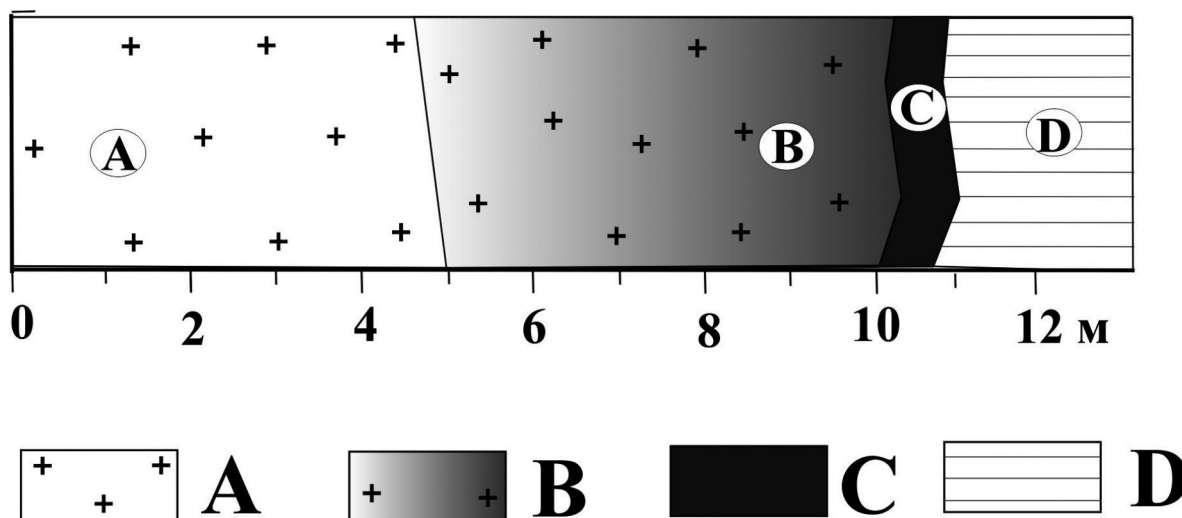


Рис. 3. Минералогические зоны развития метасоматических пород по гранодиоритам на Березитовом месторождении: А – слабо измененные гранодиориты; В – сильноизмененные гранодиориты; С – темно-серые метасоматиты с минеральным парагенезисом – $Qtz+Wm+Gr+Kfs+Bi+Plag_{90-95}$; D – светло-серые метасоматиты с минеральным парагенезисом – $Qtz+Wm+Gr+Kfs+Bi$. Цифры в кружках – места отбора образцов в зонах, их номера отвечают порядковым номерам в табл. 7

Таблица 5

Сопоставление расчетов по МС с данными Г.С. Йодера и К.Э. Тилли (вес. %) [6]

№ пробы	Qtz	Or	Ab	Ne	An	Di	Hу	Ol	Mgt	Ilm	Apat	Cc	$T_{набл}$
1	2,16 2,33	3,34 3,60	31,96 32,32	– –	21,68 21,87	11,14 10,73	19,22 19,46	– –	4,41 4,93	3,19 3,23	1,68 1,53	– –	0,466
2	8,82 8,93	2,78 2,90	19,39 19,80	– –	25,02 25,10	19,02 17,74	16,87 17,53	– –	4,41 4,45	3,50 3,51	0,00 0,05	– –	0,044
3	7,56 7,74	2,78 2,90	25,15 25,47	– –	23,35 23,38	12,79 12,59	19,30 19,06	– –	4,64 4,81	3,34 3,42	0,75 0,64	– –	0,215
4	9,66 9,80	2,22 2,42	17,29 17,60	– –	21,68 21,49	20,51 20,12	15,16 15,18	– –	3,25 3,41	9,27 9,33	0,67 0,64	– –	0,153
5	1,92 2,09	2,22 2,30	19,91 19,97	– –	25,85 25,82	19,19 18,07	24,47 24,97	– –	3,02 3,05	3,34 3,34	0,34 0,39	– –	–0,070
6	4,26 4,35	2,78 2,96	16,24 16,42	– –	26,41 26,46	20,65 19,69	21,84 22,64	– –	1,86 2,08	4,71 4,77	0,67 0,64	– –	0,151
7	0,30 0,88	2,22 2,60	20,96 20,23	– –	26,13 26,34	22,04 20,52	22,44 23,06	– –	1,86 2,04	3,95 3,99	0,34 0,34	– –	–0,041
7a	1,80 1,79	3,89 4,08	20,96 21,32	– –	24,74 24,52	21,61 20,44	17,82 18,23	– –	2,55 2,77	6,08 6,17	0,67 0,68	– –	–0,030
8	5,40 5,69	3,34 3,43	5,76 6,01	– –	36,97 37,20	15,98 14,53	28,00 29,16	– –	0,46 0,53	2,89 2,96	0,34 0,50	– –	0,151
9	1,47 1,73	3,34 3,37	18,92 18,95	– –	25,58 25,62	23,41 22,38	18,12 18,50	– –	3,31 3,47	5,24 5,24	0,64 0,62	0,14 0,14	–0,044
10	0,87 1,05	3,34 3,37	20,44 20,48	– –	25,58 25,71	24,46 23,23	16,52 17,19	– –	5,78 2,64	2,55 5,74	0,67 0,59	– –	–0,015
11	0,33 0,74	3,34 3,31	20,44 20,23	– –	24,74 25,00	25,41 23,93	17,41 18,17	– –	5,62 2,38	2,21 5,62	0,67 0,62	– –	–0,011
12	0,69 0,63	3,06 3,07	18,34 18,78	– –	23,77 23,78	23,27 22,76	20,26 20,28	– –	5,39 4,69	4,53 5,41	0,67 0,59	– –	0,003
13	– –	3,06 3,08	18,86 18,98	– –	24,19 24,33	24,13 23,05	17,97 16,53	3,81 7,79	5,32 0,35	2,09 5,29	0,67 0,59	– –	–0,008
14	– –	2,78 3,06	17,82 18,48	– –	25,30 25,64	22,93 22,92	15,35 15,38	9,14 10,09	2,09 0,00	4,41 4,42	0,34 0,00	– –	–0,023
15	– –	0,56 0,54	18,34 19,39	– –	39,48 40,41	14,74 14,36	9,63 13,85	14,66 9,87	0,46 0,00	1,52 1,59	– –	– –	0,086
16	0,00 0,12	0,56 0,84	23,58 24,08	– –	36,97 37,47	15,23 15,22	– –	20,55 20,55	1,39 0,00	1,67 1,72	0,17 0,00	– –	–0,025
17	– –	0,56 0,73	21,48 22,35	– –	38,64 40,06	13,79 14,04	1,68 5,99	19,93 15,43	2,09 0,00	1,37 1,39	0,17 0,00	– –	0,073
18	– –	3,34 3,28	23,84 21,12	1,56 3,34	13,90 14,22	25,31 25,12	– –	19,97 26,32	4,64 0,00	4,86 5,02	1,68 1,56	– –	0,11
19	– –	5,56 5,69	20,96 18,18	2,27 3,98	25,30 25,19	18,51 17,74	– –	18,21 23,38	4,41 0,87	4,26 4,30	0,67 0,66	– –	–0,034
20	– –	5,28 4,98	20,04 17,03	2,20 3,88	23,63 23,87	20,89 20,00	– –	18,48 25,03	4,53 0,22	4,41 4,34	0,67 0,64	– –	–0,02
21	0,84 2,14	7,78 7,75	27,77 28,45	– –	19,46 19,81	15,49 15,50	12,88 10,42	– –	6,03 7,91	6,23 6,27	2,02 1,75	– –	0,145
22	– –	5,00 4,67	25,68 26,25	0,28 0,00	29,19 29,53	19,04 18,78	0,00 1,59	9,68 7,23	3,71 5,14	5,93 5,91	1,34 0,90	– –	0,014
23	0,00 0,56	7,50 7,51	29,34 29,55	– –	24,32 24,50	17,97 17,77	6,43 6,72	1,83 0,00	6,03 7,38	5,78 5,85	0,34 0,15	– –	0,059

Таблица 6

Сопоставление расчетов по МС с данными Дж. Ферри (1984) (вес. %)

№ пробы	Bi	Wm	Chl	Plag	Qtz	Ilm	Cc	Py	Pyrt	Mgt	$T_{наб.}$
33B	13,15 12,12	27,85 28,83	9,45 9,30	23,27 23,18	24,44 24,59	1,1 1,14	0,56 0,56		0,19 0,28		-0,002
418A	11,22 9,87	29,95 31,19	14,7 14,14	7,44 7,38	35,69 35,63	1 1,06	0 0,01			0 0,72	0,0
418B	11,04 8,83	25,71 27,7	18,27 17,44	15,47 15,18	27,93 27,77	1,04 1,1		0,27 0,76	0,25 1,22		0,002
420A	23,8 24,13	11,32 11,2	3,49 3,72	27,13 26,98	33,56 33,8	0,71 0,17					-0,006
423A	8,2 8,51	19,38 19,24	14,05 14,21	26,78 26,75	28,1 28,11	0,94 0,96	2,09 1,99		0,46 0,22		-0,005
429A	8,81 8,38	28,99 29,38	20,45 20,47	12,42 12,21	28,13 28,26	1,21 1,25				0 0,05	-0,006

Моделирование геобъектов и геопроцессов

вторичного биотита по роговой обманке, появлению в небольших количествах новообразованного мусковита, кварца, хлорита и эпидота. Структура пород гранитная, порфириовидная, среднезернистая. Отдельные кристаллы олигоклаза могут достигать размера 1 см. Калишпат представлен решетчатым микроклином. Акцессорные минералы представлены преимущественно апатитом, цирконом, магнетитом, ортитом и сфеном.

Зона В. Сильноизмененный гранодиорит. Ведущий магматический парагенезис остается таким же как в зоне А – $Qtz + Plag_{25-35} + Kfs + Bi + Hb$. Но изменение пород здесь выражено сильнее, и обусловлено появлением мелких и мельчайших табличек основного плагиоклаза (вплоть до анортита), обильного мусковита и окварцевания, развитию эпидота, хлорита и сульфидов, преимущественно пирита. Акцессорные минералы представлены ильменитом, магнетитом и апатитом. Участками в составе этих гранодиоритов присутствует турмалин и андрадит-гроссуляровый гранат. При этом в породах сохранена первичная гранитная, гипидиоморфнозернистая структура. Мощность зоны сильно измененных гранодиоритов составляет первые метры.

Зона С. «Темно-серые» тонкозернистые метасоматиты – представлены плотными темно-серыми породами, в которых широко развиты идиоморфные кристаллы розового граната. Парагенезис пород – $Qtz + Wm + Gr + Kfs + Bi + Plag_{90-95}$. Своеобразие этого типа пород подчеркивается значительными количествами новообразованного плагиоклаза, по составу близкому к анортиту. В составе метасоматитов в небольших количествах отмечаются турмалин, пирит, пирротин, магнетит, ильменит, сфалерит, галенит. Метасоматиты слагают зону мощностью от

первых десятков сантиметров до 10 метров, окаймляя трубообразную метасоматическую залежь на ее контакте с гранитами.

Зона D. Рудоносные «светло-серые» метасоматиты слагают основную часть метасоматической залежи. Они представлены тонкозернистыми светло-серыми породами, в которых видны мелкие единичные розовато-бурые агрегаты граната. В отдельных участках пород совместно с гранатом находятся агрегаты цинковой шпинели – ганита. Парагенезис пород – $Qtz + Wm + Gr + Kfs + Bi$. В этих породах анортит отсутствует, а биотит присутствует в весьма малых количествах. Повсеместно в составе метасоматитов в переменных количествах наблюдаются также мелкие единичные агрегаты темно-коричневого турмалина.

Химические анализы пород и минералов из зон А-D приводятся в таблицах 7, 8.

Поскольку анализы пород выполнялись методом XRF, то общее содержание железа в них приводится в виде трехвалентного железа. Так как породы (кроме гранодиоритов) – тонкозернистые, с размером минеральных зерен 0,02-0,05 мм, оценить визуально количества минералов в метасоматических зонах не представляется возможным. Однако, на основе МС вполне возможно оценить количественный минералогический состав этих пород и, кроме того, найти в них соотношение окисного и закисного железа. Как видно из расчетов на МС, в направлении от гранодиоритов к центру метасоматической залежи или в последовательности А-D, в породах закономерно возрастают количества кварца и мусковита, тогда как количества плагиоклаза, эпидота и магнетита уменьшаются (табл. 9). Как видно из химических составов пород, рассчитанных МС по модальным количествам минералов, в последовательности А-D

Таблица 7

**Химический (% мас.) состав гранодиоритов и метасоматитов Березитового месторождения
в зонах А-Д**

Номер пробы	1-Б	5	8-1	8-2
Зона	А	В	С	Д
SiO ₂	62,68	66,23	65,47	69,42
TiO ₂	0,47	0,36	0,40	0,36
Al ₂ O ₃	17,07	16,51	16,94	17,87
Fe ₂ O ₃	5,18	4,39	4,41	2,31
FeO	н.о.	н.о.	н.о.	н.о.
MnO	0,09	0,06	0,96	0,10
MgO	1,19	0,98	1,04	0,48
CaO	4,49	2,21	2,76	0,22
Na ₂ O	4,67	4,04	0,26	0,15
K ₂ O	2,41	3,63	5,06	5,93
P ₂ O ₅	0,20	0,15	0,14	0,14
п.п.п.	0,69	0,49	1,59	2,27
Сумма	99,15	99,06	99,03	99,26

Примечание: анализы пород выполнены Ноздрачевым Е.А. в ДВГИ ДВО РАН на рентгенофлуоресцентном спектрометре S4 Pioneer фирмы Bruker AXS.

Таблица 8

**Составы минералов (вес. %) в зонах А-Д, принятые для расчета модального состава
гранодиоритов и метасоматитов**

Минерал	Hb	Ep	Sph	Plag	Plag	Gr	Gr	Kfs	Bi	Bi	Wm
Зона	А,В	А,В	А,В	А,В	С,Д	А-С	Д	А-Д	А,В	С,Д	А-Д
Si	6,345	2,99	0,99	2,81	2,05	3	3,018	2,976	2,795	2,755	3,092
Ti	0,035	–	0,906	–	0,07	–	–	–	0,122	0,101	0,025
Al	1,9	2,303	0,11	1,19	1,97	2	1,955	1,019	1,346	1,62	2,621
Fe ⁺²	1,926	–	–	–	–	1,029	0,872	–	1,394	1,32	0,226
Fe ⁺³	1,105	0,719	0,025	–	–	–	0,008	–	–	–	–
Mn	0,161	–	–	–	–	1,429	1,821	–	0,048	0,042	–
Mg	1,425	–	–	–	–	0,065	0,066	–	1,236	0,998	0,096
Ca	1,943	1,988	1,005	0,19	0,92	0,475	0,259	–	–	–	–
Na	0,327	–	–	0,81	0,054	–	–	0,046	–	–	–
K	0,225	–	–	–	–	–	–	0,994	0,938	0,993	1,022
O	23	12,5	5	8	8	12	12	8	11	11	11

Примечание: формулы минералов Ilm, Mgt, Apat, Rut, Qtz, Gbs приняты теоретическими. Анализы минералов выполнены А.С. Вахом в ДВГИ ДВО РАН на микронзонде JEOL 8100.

возрастает также степень восстановленности пород или отношения FeO/FeO+Fe₂O₃ (табл. 10, 11). Таким образом, с помощью применения МС выясняется,

что в результате наложения процесса метасоматоза (кислотного выщелачивания) на гранодиоритовый субстрат происходит развитие кварц-мусковитовой

Таблица 9

Модальный состав гранодиоритов и метасоматитов Березитового месторождения

Обр.	Зона	Qtz	Kfs	Plag	Wm	Gr	Bi	Sph	Rut	Ep	Apat	Mgt	Ilm	Gbs	Σ	Res
1-Б	А	19	7	49,9	1,7	–	10,6	0	0,2	9,6	0,5	1,3	–	–	99,8	0,000
5	В	25,4	9,5	42,9	10,6	–	8	–	0,1	1,3	0,3	1,8	0	–	99,9	0,000
8-1	С	40,3	6,0	12,9	26,6	4,5	8,6	–	–	–	0,3	0,4	0,2	–	99,8	0,03
8-2	Д	47,5	–	1,2	49,7	0,4	–	0	0,1	–	0,0	0,03	–	1	99,9	0,03

Таблица 10

Химический (вес. %) состав гранодиоритов и метасоматитов Березитового месторождения в зонах А-Д, рассчитанный МС по модальным количествам минералов

Номер пробы	1-Б	5	8-1	8-2
Зона	А	В	С	Д
SiO ₂	63,67	67,20	67,19	71,58
TiO ₂	0,48	0,36	0,41	0,37
Al ₂ O ₃	17,34	16,75	17,38	18,32
Fe ₂ O ₃	2,07	1,37	0,26	0,02
FeO	2,87	2,77	3,84	2,12
MnO	0,09	0,06	0,98	0,10
MgO	1,21	0,99	1,07	0,5
CaO	4,56	2,24	2,83	0,23
Na ₂ O	4,74	4,10	0,08	0,013
K ₂ O	2,45	3,68	5,19	6,11
P ₂ O ₅	0,20	0,15	0,14	–
Σ	99,68	99,69	99,38	99,37

Таблица 11

Содержания FeO и Fe₂O₃ (вес.%) и коэффициент восстановления пород (K = FeO/FeO+Fe₂O₃) в зонах А-Д

образец	Зона	FeO	Fe ₂ O ₃	K×100
1-Б	А	2,87	2,1	58,1
5	В	2,77	1,37	66,9
8-1	С	3,77	0,34	93,7
8-2	Д	2,12	0,02	99

минеральной ассоциации, причем этот процесс проходил при участии восстановленных флюидов. Очевидно, что применение МС дает важную дополнительную петрогенетическую информацию для метасоматических пород Березитового месторождения, и эту информацию нельзя получить из простого рассмотрения химических анализов пород и минералов.

Заключение

Программа МС, работающая на алгоритме линейного программирования, является новым эффективным петрологическим инструментом для расчета минералогического модального состава. Входной информацией является химический состав породы и состав слагающих породу минералов, выраженный в коэффициентах кристаллохимических формул или в весовых процентах. Если в минералах найдено расчетным или экспериментальным путем содержание трехвалентного железа, то МС может разделить общее железо породы на окисное и закисное. Особенностью МС является опция Rock, способная вычислить теоретический состав породы на основе произвольно заданного модального количества минералов, выраженного в весовых, объемных или мольных процентах. На примере применения МС к анализу минеральных парагенезисов метасоматических пород Березитового месторождения наглядно показано развитие кварц-мусковитовой минеральной ассоциации по гранодиоритовому протолиту и установлено, что с увеличением степени метасоматических изменений восстановленность пород возрастает. Программа МС, инструкция и примеры расчетов, обсуждаемых в статье, помещены в открытом доступе на информационном сервере ДВГИ ДВО РАН по адресу: <http://fegi.ru/institute/innov/461-2013-03-11-03-22-32>.

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

Ключевые слова: МС, модальные количества, химический состав, минералы, линейное программирование.

ЛИТЕРАТУРА

1. Авченко О.В. Минеральные равновесия в метаморфических породах и проблемы геобаротермометрии. – М. : Наука, 1990. – 182 с.
2. Вах А.С., Авченко О.В., Карабцов А.А., Степанов В.А. Первая находка гротита в золоторудных месторождениях // Докл. РАН. – 2009. – Т. 428, № 3. – С. 353-357.
3. Вах А.С., Авченко О.В., Карабцов А.А. Червандонит-(Се) в рудах Березитового месторождения – вторая находка в мире // Тихоокеанская геология. – 2010. – Т. 29, № 3. – С. 14-23.
4. Вах А.С., Авченко О.В., Сергеев С.А., Пресняков С.А. Первые U-Pb данные (SHRIMP-II) о возрасте цирконов из гранитоидов и рудоносных пород Березитового золото-полиметаллического месторождения // Докл. РАН. – 2011. – Т. 438, № 5. – С. 659-664.
5. Гмурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика. М. : Высшая школа, 1977. – 479 с.
6. Йодер Г.С., Тилли К.Э. Происхождение базальтовых магм. – М. : Мир, 1965. – 248 с.
7. Чудненко К.В. Термодинамическое моделирование в геохимии: теория, алгоритмы, программное обеспечение, приложения. – Новосибирск : Изд-во «Гео», 2010. – 287 с.
8. Cohen D.R., Ward C.R. SEDNORM – a program to calculate a normative mineralogy for sedimentary rocks based on chemical analyses // Computers & Geosciences. – 1991 – V. 17. – P. 1235-1253.
9. Currie K.L. GENORM: a generalized norm calculation // Ibid. – P. 77-89.
10. Ferry J.M. A biotite Isograd in South-Central Maine, U.S.A.: Mineral Reaction, Fluid Transfer, and Heat Transfer // Petrology. – 1984. – V. 2, № 4. – P. 871-894.
11. Herrmann W., Berry R.F. MINSQ – a least squares spreadsheet method for calculating mineral proportions from whole rock major element analyses // Geochemistry: Exploration, Environment, Analysis. – 2002. – V. 2. – P. 361-368.
12. Le Maitre R.W. GENMIX – A generalized petrological mixing model program // Computers & Geosciences. – 1981. – V. 7. – P. 229-247.
13. Rosen O.M., Abbyasov A.A., Tipper J.C. MINLITH – an experience-based algorithm for estimating the likely mineralogical composition of sedimentary rocks from bulk chemical analyses // Ibid. – 2004. – V. 30. – P. 647-661.