

ОТЗЫВ официального оппонента
на диссертацию на соискание ученой степени
кандидата геолого-минералогических наук
Бычкова Дмитрия Алексеевича
на тему: «Программа КриМинал и набор композитометров:
инструменты для моделирования равновесия
силикатный расплав – минералы»
по специальности 1.6.4 – «Минералогия, кристаллография.
Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых»

Диссертационная работа Д.А. Бычкова посвящена одной из фундаментальных петролого-геохимических проблем - эволюции мантийных ультрамафит-мафитовых магм при их подъеме к поверхности и кристаллизации. Она относится к тому быстро развивающемуся в настоящее время и весьма актуальному направлению исследований, целью которого является создание на базе экспериментальных и термодинамических данных математических моделей процессов дифференциации магм с проверкой результатов численного моделирования на материале изучения природных объектов.

Данная работа является продолжением развития замечательной отечественной научной школы, созданной более 40 лет назад группой исследователей, которую объединил и вдохновил проф. А.А. Ярошевский. В основе ее лежат подходы, методология и решения, сформулированные в фундаментальных пионерских работах М.Я. Френкеля (1988, 1995), которые в дальнейшем получили свое воплощение и дальнейшее развитие в серии программных комплексов КОМАГМАТ и других, разработанных А.А. Арискиным с коллегами (Ariskin et al., 1993, Арискин, Бармина, 2000, 2004; Арискин и др. 2013, 2018 и др.).

Диссертация состоит из введения, 5-ти глав, заключения. Список используемой литературы включает 169 названия, общий объем составляет 139 стр.

Основное внимание в работе (главы 2, 3) сфокусировано на совершенствовании термодинамического блока (ТД), являющегося фундаментом для создания новых программных комплексов, необходимых для решения пока еще нерешенных задач – численного моделирования процессов, связанных, прежде всего, с динамикой формирования дифференцированных ультрамафит-мафитовых интрузий (в частности, образования в них ритмической расслоенности), локализацией оруденения и других. В двух последующих главах (4 и 5) автором представлены результаты проверки «работоспособности» полученного усовершенствованного ТД-блока, организованного в виде программы КриМинал, путем сравнения расчетных и экспериментальных данных по кристаллизации базальт-андезитовых расплавов, а также моделируя кристаллизацию исходных материнских магм двух известных, хорошо изученных интрузий Киваккской и Скергаардской.

Среди основных достижений автора следует выделить следующие:

1. Предложен оригинальный подход в разработке уравнений ликвидусных термобарометров (или как предложено автором их называть композитометров). Во-первых, убедительно показана целесообразность применения экспоненциального вида уравнения термобарометров, что позволяет избежать систематических отклонений расчетных значений от экспериментальных, так как при обработке исходных данных минимизируются разности между расчетными и экспериментальными значениями самих содержаний компонентов, а не логарифмов содержаний. Во-вторых, при выводе уравнений использован оригинальный способ пересчета химических составов минералов в виде содержаний миналов. Следует особо отметить, как одно из достижений автора, использование такого подхода не только для главных, но и для примесных, второстепенных

для данного минерала элементов. Это заметно повысило точность расчетов содержаний этих элементов, как в минералах, так и расплавах.

2. Разработана процедура (протокол) тщательного отбора имеющихся экспериментальных данных, положенных в основу при выводе ликвидусных термобарометров, которая включает последовательную проверку масс-балансовыми расчётами аналитических данных, соответствие анализов заявленным минеральным видам и оценку степени равновесности экспериментов. Это привело к тому, что первоначальная выборка экспериментальных данных для ряда минералов сократилась многократно. В результате были сформированы представительные выборки экспериментальных данных, обеспечивающие статистически надежные результаты расчетов состава минеральных фаз, а также температуры их образования по предложенным уравнениям термобарометров-композициметров для каждой из рассматриваемых фаз. Следует отметить, что предложенные автором критерии равновесности могут быть использованы экспериментаторами и при проведении собственных экспериментальных исследований.

3. В результате проведенных исследований предложены новые уравнения термобарометров-композициметров для основных породообразующих минеральных фаз ультрамафит-мафитовых пород - оливина, плагиоклаза, авгита, ортопироксена и пижонита. При этом для оценки качества термобарометров использованы величины доверительных интервалов при заданном уровне надежности, что позволяет моделировать равновесия с участием этих минералов с относительно низкой погрешностью.

4. Разработан оригинальный алгоритм решения задачи поиска термодинамического равновесия в многокомпонентной многофазной системе силикатный расплав – минеральные фазы при понижении температуры, не накапливающий ошибку в процессе расчёта серии последовательных равновесий. Это дает возможность моделировать равновесие с любым

набором термобарометров-комполитометров. Предложенный алгоритм явился основой для программного комплекса КриМинал.

5. Проведена проверка расчетов траекторий изменения составов жидких и твердых фаз при кристаллизации шести исходных базальт-андезитовых расплавов, выполненных по программе КриМинал путем их сопоставления с экспериментальными данными повышенной надежности, полученными для этих же исходных расплавов. Показано хорошее соответствие расчетных и экспериментальных соотношений фаз, а также составов расплава и минералов. Сравнение с аналогичными расчетными данными по программе Melts (V1.0.2) показывает, что программа КриМинал моделирует равновесия «как минимум не хуже для известково-щелочных составов и заметно лучше для толеитовых». Следует особо отметить наглядное преимущество КриМинала в воспроизведении составов минералов в отношении содержаний малых, примесных компонентов в минералах, особенно пироксенах и оливинах.

6. Численное моделирование равновесной и фракционной кристаллизации исходных магм Киваккского и Скергаардского интрузивов выполненное по программе КриМинал в сравнении с расчетами по современным версиям программ КОМАГМАТ и Melts продемонстрировало работоспособность КриМинала. Были получены близкие результаты в определении порядка смены кристаллизующихся минеральных парагенезисов.

Перечисленные в пунктах 1- 4 достижения составляют основу трех кратко сформулированных автором защищаемых положений диссертации, которые являются, по мнению оппонента, вполне обоснованными.

Основные замечания по тексту диссертации, которые вызваны, главным образом, местами недостаточно полным и четким изложением материала, а также ограниченным объемом диссертации:

1. В обзорной первой главе и/или в водной части 3-ей главы следовало бы дать более полный обзор существующих программ и их краткие характеристики.

2. При выводе уравнений термобарометров автором используется пересчет химического состава минерала (содержаний в мас.% оксидов как главных, так и примесных элементов) на миналы. При этом в качестве миналов для примесных элементов в некоторых минералах (авгите, ортопироксене, пижоните) предлагаются, на первый взгляд, довольно экзотические составы таких миналов. Например, алал (AlAl) $AlAlO_3$, магги (MgTi) $MgTiO_3$. Желательно было бы обосновать с кристаллохимической точки зрения возможность соответствующих форм изоморфизма в минералах и существование таких соединений (молекул, кластеров) в расплавах.

3. Из текста не до конца понятна суть расчета по программе КриМинал температуры ликвидуса соответствующего минерала итерационным методом (стр. 38). В исходной экспериментальной выборке представлены данные, полученные при различных давлениях и летучестях кислорода. Учитываются ли при расчете ликвидусной температуры кроме состава эти параметры (P , fO_2)? Каким именно значениям P и fO_2 соответствует расчетная температура ликвидуса минерала? Следовало бы кратко пояснить.

4. В тексте диссертации: «В ряде случаев в результате статистической обработки линейные тренды на графиках корреляции расчётных и экспериментальных значений существенно отклоняются от линии равных значений, причём отсутствуют эксперименты, сильно отклоняющиеся от общего массива точек, при этом распределение остатков миналов носит нормальный характер. ... В этих случаях для улучшения согласования между расчётными и экспериментальными значениями вводится дополнительная поправка в виде уравнения (2.9)» (стр. 18). Насколько обоснована с точки зрения статистики, методов регрессионного анализа такая поправка «в виде уравнении тренда зависимости между экспериментальными и расчётными содержаниями минала (ур. 2.9)». Как рассчитываются коэффициенты a , b и c этого уравнения.

5. Верификация программы КриМинал на экспериментальных сериях проведена для субликвидусной области температур, где кристаллизуются

только оливин, плагиоклаз и пироксены. Оксидные минеральные фазы, содержащие Cr, Fe, Ti (шпинель, Ti-магнетит и др.), температуры кристаллизации которых сильно зависят от fO_2 , при этом отсутствуют. К сожалению, автором не указаны fO_2 условия, при которых получены выбранные для проверки экспериментальные данные и проведено численное моделирование.

Некоторые замечания редакционного плана:

1. Стр. 19. Не совсем удобна для читателя отсылка для разъяснения условных обозначений на графиках рис. 2.1 к рисунку 2.6, который располагается на стр. 36.

2. Стр. 29. Из подписи к рис. 2.4 не очень понятно сравнение результатов оптимизации показательного уравнения (2.8) с разными выборками. Какие именно выборки взяты.

3. Стр. 38, в тексте: «...Средние значения остатков содержания ... для FeO $-0,023 \pm 0,08$ масс.%, ...» - указанные значения $\pm 0,08$ не описка?

4. Стр. 79, в тексте: «...и летучести кислорода $-8,13...$ » Очевидно, имеется в виду логарифм летучести кислорода.

5. Стр. 129. В списке литературы ссылки 48 и 49 – повтор, это одна и та же работа.

Вместе с тем, указанные замечания не умаляют значимости диссертационного исследования. Надо отдать должное автору за хорошее оформление рукописи. Текст написан четко и ясно, очень хорошо иллюстрирован. Опубликованные статьи по теме диссертации в журналах, рекомендованных АК МГУ, а также автореферат полностью отражают ее содержание. Диссертация отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 1.6.4 – «Минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых» (по геолого-минералогическим наукам), а также критериям, определенным пп. 2.1-2.5

Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова, а также оформлена, согласно приложениям № 5, 6 Положения о диссертационном совете Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Таким образом, соискатель Бычков Дмитрий Алексеевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата геолого-минералогических наук по специальности 1.6.4 – «Минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых».


Официальный оппонент:

доктор геолого-минералогических наук,
главный научный сотрудник ГЕОХИ РАН

Луканин Олег Александрович

26.10.2023

Контактные данные:

тел.: 7(495)137-30-55, e-mail: 

Специальность, по которой

защищена диссертация:

04.00.02 – Геохимия

Адрес места работы:

119991, г. Москва, ул.Косыгина, д.

ГЕОХИ РАН, лаборатория геохимии мантии Земли

Тел.: 7(495)137-30-55; e-mail: director@geokhi.ru



О.А. Луканин