

ОТЗЫВ

На автореферат диссертации

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

Диссертация Д.А.Бычкова посвящена созданию компьютерной программы для моделирования равновесий силикатный расплав – минералы. Проблема расчёта равновесий силикатный расплав – минералы является одной из центральных при исследовании магматических процессов. Она является неперенным этапом моделирования процессов равновесной и фракционной кристаллизации, формирования интрузивных комплексов. Эта проблема относится к типу "вечнозелёных" задач, полнота и точность решения которых будет увеличиваться по мере накопления экспериментальных данных и совершенствования алгоритмов вычислений. Существующие в настоящее время компьютерные программы в той или иной степени решают эту задачу, делая акцент на тех или иных аспектах. В этом плане создание программы КриМинал, использующей для расчёта суммы минеральных миналов является несомненно актуальной. Целью диссертационной работы явилось создание такой программы, которая бы не накапливала бы ошибок при расчётах последовательных равновесий и была свободна от необходимости перекалибровки композитомеров для систем различных составов.

Согласно автореферату, диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения. Объём диссертации – 125 страниц, включает 76 рисунков и 14 таблиц, список цитируемой литературы включает 169 наименований.

Первая глава представляет собой введение в проблему моделирования дифференциации магм. В этой главе кратко описана история решения проблем моделирования, рассмотрены имеющиеся программные комплексы, обсуждены их достоинства и недостатки. Сформулирована основная задача, стоящая перед данным исследованием. Диссертант справедливо считает, что первоочередной задачей является "разработка термодинамического блока, включающего алгоритм поиска гетерофазного равновесия в силикатной магме и набора соответствующих композитомеров".

Вторая глава посвящена выводу термобарометров-композитометров для силикатных фаз. Диссертант отмечает, что основой термодинамического блока любой модели, описывающей динамику формирования интрузивов, является создание набора термобарометров-композитометров для твёрдых фаз, находящихся в равновесии с расплавом. Для учёта состава системы автором было выбрано уравнение, выражающее логарифм константы равновесия через температуру, давление, фугитивность кислорода, мольные доли компонентов расплава, представляемого в виде однокатионных оксидов, ряда других параметров и подгоночных коэффициентов (Уравнение (1) в автореферате). Особенностью этого уравнения является то, что оно приводит к системе уравнений, в которой логарифмы мольных долей миналов, линейным образом зависят от подгоночных параметров. Это позволяет использовать хорошо разработанные алгоритмы линейного регрессионного анализа для их расчёта по экспериментальным данным. Однако диссертант справедливо отмечает, что при оптимизации этого уравнения преувеличенно

большой вес приобретают низкие содержания миналов, поскольку их логарифмы имеют наибольшие по абсолютной величине значения. С другой стороны практика измерений показывает, что низкие концентрации обычно измеряются с наибольшими аналитическими ошибками, что может приводить к искажению результата при использовании линейного метода наименьших квадратов (МНК). Авторы находят выход из этой ситуации за счёт использования показательной формы уравнения. В этом случае система уравнений записывается для мольных долей миналов, а не для их логарифмов, при этом исчезает завышенный статистический вес низких концентраций. "Расплатой" за это является потеря линейности и необходимость использования нелинейного МНК, что зачастую связано как с большими алгоритмическими трудностями, так и с большими затратами машинного времени. Впрочем, диссертант их успешно, преодолевает и убедительно показывает, что оптимизация показательной системы уравнений позволяет избежать трудностей, присущих линейной системе для логарифмов мольных долей миналов. Конечно, с математической и физической точки зрения показательная и линейная система эквивалентны. Но с точки зрения техники статистических вычислений одна из эквивалентных форм может оказаться более предпочтительной. Такая ситуация не является исключительной. Изложенный материал убедительно доказывает первое защищаемое положение: "Системы показательных уравнений (комполитометры), разработанные для оливина, плагиоклаза, авгита, ортопироксена, пижонита, вкуче с набором миналов для каждого минерала позволяют рассчитывать содержания не только главных, но и второстепенных компонентов в равновесии с расплавами от основных до кислых составов."

Вместе с тем необходимо подчеркнуть, что известным приёмом, который позволяет избежать ситуации с преувеличенным статистическим весом величин, характеризующихся большой аналитической ошибкой является оптимизация методом МНК не самих величин, а отношений этих значений к величине ошибки их измерений. Этот подход позволяет избежать трудностей, указанных диссертантом, при сохранении линейного характера уравнений. К сожалению, диссертант не рассматривает и не анализирует этот подход.

Вторым (а может быть и первоочередным) необходимым условием, обеспечивающим успех оптимизации, является правильный выбор набора экспериментальных данных, которые по сути представляют набор входных параметров для оптимизации. Диссертант уделяет этому вопросу большое внимание и проводит исследование высоком уровне. Рис. 2.2. и 2.3 в автореферате хорошо иллюстрируют точность описания экспериментальных данных и показывают, что остатки подчиняются закону нормального распределения с небольшими значениями стандартной ошибки. Оценки доверительных интервалов не оставляют сомнений в высокой точности описания входных данных программой КриМинал. Эти результаты обосновывают второе защищаемое положение: "Разработанная для формирования выборки экспериментальных данных новая методика дает возможность проверять масс-балансовыми расчётами аналитические данные и соответствие анализов заявленным минеральным видам, а также оценивать степень равновесности экспериментов. Эта методика уже применена на практике и показала свою эффективность".

В третьей главе рассмотрен алгоритм решения задачи равновесия расплав-твёрдые фазы для многокомпонентной системы с минералами, которые являются твёрдыми растворами. В реализуемом программой КриМинал подходе для нахождения равновесия расплав-минералы необходимо численно решить систему нелинейных алгебраических уравнений при условии сохранения валового состава при заданных температуре и давлении. При

использовании метода МНК это сводится к задаче отыскания условного минимума целевой функции. В качестве целевой функции в программе КриМинал принята обычная для МНК "сумма квадратов разностей мольных долей миналов между заданным составом минерала и составом минерала, равновесным с заданным расплавом". (уравнение (5) в автореферате). Следует сразу подчеркнуть, что использование такого сорта целевых функций, привычное для МНК и "защитное" в варианте линейных уравнений во многие стандартные пакеты обработки данных (например, Excel), несколько занижает вклад миналов с низкими значениями мольных долей в отличие от логарифмической формы, занижающей статистический вес миналов с высокими значениями мольных долей. Возможным рецептом, позволяющим избежать занижения вклада миналов, характеризующихся высокими или низкими мольными долями, является использование в целевой функции не разности соответствующих мольных долей для миналов, а их отношения к величине ошибки измерения.

Диссертант предложил оригинальный алгоритм решения системы нелинейных уравнений, на которых основывается модель. Этот итеративный алгоритм, как показано автором, позволяет успешно находить минимум целевой функции даже в тех случаях, когда поверхность целевой функции имеет "овражный" характер в окрестности точки минимума. (Наиболее неприятный для численного отыскания минимума случай). Особенностью предлагаемого алгоритма является то, что он позволяет избежать накопления ошибок в ходе последовательных расчётов состояний системы при приближении к минимуму. Тем самым рассчитанное равновесное состояние системы не зависит от предшествующих её состояний. Это, по сути, является необходимым условием, которому должен удовлетворять подобный алгоритм, поскольку равновесное состояние не зависит от способа его достижения. Этот алгоритм лёг в основу программы КриМинал.

В четвёртой и пятой главах программа КриМинал тестируется на экспериментальных сериях и природных объектах. Экспериментальные серии представляли собой кристаллизацию расплава единого исходного состава при понижении температуры. Были исследованы 6 серий как толеитовых, так и известково-щелочных базальтов. Результаты, показанные на рис. 4.1 – 4.5, свидетельствуют о хорошем согласии экспериментальных и расчётных данных. Следует подчеркнуть, что сведения о стартовых составах системы не использовались при процедуре оптимизации композитметров.

Совместная работа композитметров во взаимодействии с алгоритмом программы КриМинал была также протестирована на хорошо изученных природных объектах: Киваккский массив и Скергаардский массив. Диссертантом было проведено моделирование равновесной и фракционной кристаллизации существенно различающихся исходных магм Киваккского и Скергаардского интрузивов. Результаты в виде зависимостей температур плавления на ликвидусе от давления для случаев фракционной и равновесной кристаллизации представлены на рис. 5.3 и 5.4 в автореферате. Сравнение с программными комплексами КОМАГМАТ 3.75 и Melts 1.0.2. показывает конкурентоспособность программы КриМинал. Материал, изложенный в главах 3 – 5, служит достаточным доказательством третьего защищаемого положения: "Созданный для решения задачи поиска термодинамического равновесия алгоритм не накапливает погрешностей в составе фаз в процессе моделирования последовательности равновесных состояний. Работа алгоритма и комплекса композитметров в составе программы КриМинал прошла успешную верификацию воспроизведением фазового состава и химических составов фаз в экспериментальных сериях и моделированием порядка кристаллизации для интрузивов Кивакка (Карелия) и Скергаард (Гренландия)".

В заключение диссертант отмечает, что "...главными достижениями представленной диссертации являются: разработка оригинального алгоритма решения задачи равновесия; вывод системы композитометров для порообразующих минералов базитовых систем; верификация совместной работы алгоритма и комплекса композитометров на экспериментальном и природном материале". Это является очень точным и ёмким подведением итогов исследования.

Как и всякий текст такого объёма автореферат не лишён ряда опечаток и неудачных выражений. Например, диссертант дважды на стр. 9 и 11 даёт определение остатков: "Остатками в статистике принято называть отклонение измеренной величины от аппроксимации". Именно с указанным употреблением множественного и единственного числа. Однако число таких несуразностей не является зашкаливающим и не мешает восприятию материала. Представленный в автореферате материал достаточно полно отражён в публикациях диссертанта

Высказанные в данном отзыве замечания не снижают высокого уровня и ценности диссертационной работы Д.А. Бычкова, которая соответствует требованиям Положения о присуждении ученых степеней в МГУ имени М.В. Ломоносова, предъявляемым к работам на соискание степени кандидата геолого-минералогических наук. Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 1.6.4.- Минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых, а ее автор, *Бычков Дмитрий Алексеевич*, безусловно заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата геолого-минералогических наук.

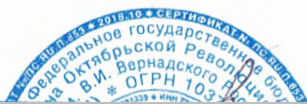
Поляков Вениамин Борисович,
доктор химических наук,
главный научный сотрудник, лаборатория изотопной геохимии и геохронологии,
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Ордена Ленина и Ордена
Октябрьской Революции Институт геохимии и аналитической химии им. В.И.
Вернадского Российской академии наук (ГЕОХИ РАН)
119991, Москва, ул. Косыгина, д.19.

Я, Поляков Вениамин Борисович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

«02» ноября 2023 г.

Подпись

Место Печати



В.И. Поляков