

**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»**

В науках о Земле известны как минимум пять программных комплексов (MELTS, КОМАГМАТ, THERMOCALC, Perple\_X и Petrolog-3), которые в той или иной степени решают проблему фазовых равновесий в магматических процессах, в ходе фракционной или равновесной кристаллизации и, в меньшей степени, в ходе частичного плавления мантийного субстрата. Казалось бы, для чего необходима разработка еще одного программного комплекса, КриМинал, который разрабатывает группа, в составе которой и наш подзащитный, Бычков? Ответ очевиден: в науке нет и не может быть устоявшихся истин, теорий или программ, все должно подвергаться проверке и перепроверке. Таким образом, актуальность данной работы не вызывает сомнений.

Представленная диссертация включает 5 глав, и ее содержание суммировано в виде трех защищаемых положений.

**Глава 1** преимущественно обзорная и обсуждает проблемы моделирования дифференциации магм.

**Глава 2** – основная, описывает вывод термобарометров– композитометров для породообразующих минералов. Именно к этой главе у меня наибольшее количество замечаний:

1) Для каждого минерала авторы предлагают определенный набор миналов. В частности, для оливина это: Форстерит, Фаялит, Тефроит

$\text{MnSi}_{0.5}\text{O}_2$ , Ларнит  $\text{CaSi}_{0.5}\text{O}_2$  и Хромоливин  $\text{CrSi}_{0.5}\text{O}_2$ . Учет малых компонентов часто несет определенные риски. В недавней работе Gavrilenko et al. (2022) показали, что вторичная флюоресценция от окружающего стекла существенно завышает содержание Ca даже в центре больших (до 100  $\mu\text{m}$ ) кристаллов оливина. То есть приводимое в экспериментальных работах содержание Ca-минала ларнита может быть завышенным, если только авторы той или иной публикации не уделили этой проблеме специальное внимание. С хромоливином, где хром по определению двухвалентный – другая проблема. Дело в том, что в силикатных расплавах при  $f\text{O}_2$  на уровне QFM преобладает  $\text{Cr}^{3+}$ , который, как показали Hanson and John (1998), так же как и  $\text{Cr}^{2+}$  может входить в оливин. Положение  $\text{Cr}^{3+}$  в структуре оливина не до конца понятно, но очевидно, что определение всего хрома в минал хромоливин некорректно.

2) Недостаточно внятно описан этап удаления из выборки экспериментов, содержащих значительные аналитические погрешности, основанный на балансе масс. Допустим, эксперименты выполнены при 1 атм общего давления в восстановительных условиях на платиновых петлях. При этом возможны потери щелочей из расплава в атмосферу печи, а также уход железа из расплава в платину петли, если эти петли не были предварительно насыщены железом. При этих условиях при балансе масс кроме реальных кристаллических фаз и расплава следует включить «компоненты»  $\text{Na}_2\text{O}$ ,  $\text{K}_2\text{O}$  и  $\text{FeO}$ . Игнорирование этих «компонентов» может приводить к выводу о больших аналитических ошибках (каковых на самом деле не было!) и отбраковке корректных экспериментов. Если экспериментатор использовал Re петли, в которые уход железа из расплава минимален, либо Pt петли, насыщенные предварительно железом, «компонент»  $\text{FeO}$  не нужен. Если экспериментатор работал в запаянных ампулах – отпадают из рассмотрения «компоненты»  $\text{Na}_2\text{O}$  и  $\text{K}_2\text{O}$ . В целом, я скептически отношусь к возможности отбраковать плохие эксперименты чисто статистическими методами, не вникая внимательно в текст экспериментальных работ.

3) Метод отбраковки данных с постоянным отбрасыванием экспериментов, где ошибки выходят за  $3\sigma$  интуитивно понятен, но в чем-то порочен. Я уверен, автор сталкивался с ситуацией, когда играя со многими моделями можно увидеть, как те или иные данные то выходят за  $3\sigma$ , то возвращаются на приемлемый уровень ошибок. Возможно, «порог отбрасывания» стоило поднять до  $4\sigma$ , чтобы исключить явные выбросы, оставив, в то же время, опыты, которые просто плохо описываются текущей моделью. Очевидно, что любая наша модель не является идеальной, она лишь отражает наше понимание законов природы на данный момент времени.

4) При расчете композитометров автор предпочитает использовать показательное уравнение вида (2.8) и напрямую оптимизировать разницу между экспериментальными и расчётными значениями. Автор обосновывает это решение. Однако, вид уравнения (2.8) исключает использование аппарата многомерной линейной регрессии, и приходится использовать надстройку «Поиск решения» в MS Excel, выбрав в качестве метода решения опцию «Поиск решения нелинейных задач методом ОПГ». К сожалению, в этом случае не ясна ошибка, с которой вычисляются эмпирические коэффициенты в уравнениях типа (2.8), что мне представляется большим недостатком метода. Возможно, на предварительном этапе стоило бы использовать линейную регрессию для уравнений в логарифмической форме с тем, чтобы оценить ошибки на эмпирические коэффициенты. В случае приемлемых ошибок можно было бы переходить к методу, предложенному автором. Если бы автор публиковал ошибки на коэффициенты, полученные на этом предварительном этапе, тогда читатель/пользователь гораздо лучше представлял бы себе, какие именно параметры предложенного эмпирического уравнения наиболее значимы, а какие – нет.

**Глава 3** посвящена разработке алгоритма решения задачи равновесия расплав — твёрдые фазы для многокомпонентной системы с минералами - твёрдыми растворами. Иными словами, в ней изложена процедура, каким

образом программа КриМинал рассчитывает состав и температуру кристаллических фаз, равновесных с силикатным расплавом.

**Глава 4** приводит примеры верификация программы КриМинал и набора композитометров на экспериментальных сериях. К этой главе у меня также несколько замечаний:

1) Автором были отобраны 6 экспериментальных серий (ссылки даны в таблице 4.1). Удивительно, но Бычков не приводит даже краткого описания этих серий: интервала температуры, давления, летучести кислорода, на каком типе установок выполнены опыты, какого типа контейнер использован для опытов (капсула, петля, чистая платина, или предварительно насыщена железом). Все это крайне важно, поскольку невязки эксперимент/расчет могут быть частично связаны с экспериментальными проблемами, а не с качеством программного обеспечения. Более того, в табл. 4.1. номера использованных опытов даны в соответствии с базой ИНФОРЕКС, так что читатель/рецензент, открывший оригинальную статью, не в состоянии понять, какие именно опыты были использованы Бычковым. Можно любить ИНФОРЕКС, можно даже им восхищаться, но номера экспериментов (а также номера страниц, таблиц и рисунков) всегда следует цитировать в соответствии с первоисточником!

2) Бычков показал, что КриМинал считает не хуже Melts. Это хороший вывод. И сравнение расчетных данных с экспериментом для 6 выбранных серий тоже впечатляет, хотя немного настораживает метод подачи материала, когда из двух серий (из текста даже не ясно из каких именно серий) «пришлось отбросить часть температурных сечений, нарушающих критерии равновесности». Более убедительным был бы подход с подробным сравнением эксперимента и расчета. Например, Thy et al (1991), чьи опыты использовал Бычков, работали при 1 атм общего давления на платиновых петлях ненасыщенных железом. Они отмечали некоторую потерю щелочей и железа в ходе экспериментов. Было бы неплохо показать, влияют или нет подобные экспериментальные проблемы на разницу между расчетом и

экспериментом и каким образом. Или, скажем Whitaker et al. (2007), чьи опыты также использовал Бычков, сделали эксперименты в широком интервале давлений, от 1 атм до 9.3 кбар. Было бы неплохо показать, в каком случае КриМинал считает лучше, а в каком – хуже и почему.

**Глава 5** посвящена моделированию кристаллизации материнских магм дифференцированных интрузивов. Автор провел моделирование равновесной и фракционной кристаллизации двух существенно различающихся исходных магм (Киваккского и Скергаардского интрузивов) с помощью трёх программ MELTS, КОМАГМАТ и КриМинал. Было показано, что КриМинал воспроизводит природные порядки появления минералов на ликвидусе, по крайней мере, не хуже, чем программы, определяющие современный мировой уровень моделирования магматических процессов.

Некоторые мелкие замечания касаются оформления текста:

- 1) Условные обозначения и экспериментальные точки на рисунках очень мелкие. Так было принято лет 50 назад. Достаточно посмотреть литературу последних 20 лет, чтобы понять, что современный тренд – крупные ясные значки.
- 2) Ссылки в тексте на целую монографию (например, Иванова, 2017), когда речь идет о чем-то очень конкретном, бесполезны и только раздражают читателя.
- 3) В списке литературы есть огрехи. В частности, в публикации [62] вместо С. 98 должно быть Paper 98. Статья (Николаев и др., 2018) цитируется два раза, в русской и в английской версии (№№ 32 и 133, соответственно).

Вместе с тем, указанные замечания не умаляют теоретической и практической значимости диссертационного исследования. В частности, программа КриМинал доступна для свободного скачивания в интернете. Статьи по теме диссертации опубликованы в высокорейтинговых российских журналах, а многие положения работы докладывались на всероссийских

конференциях. Все научные положения и выводы обоснованы. 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. Диссертация оформлена согласно приложениям № 5, 6 Положения о диссертационном совете Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова. Содержание автореферата в целом соответствует содержанию диссертации.

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,  
ведущий научный сотрудник лаб. Геохимии  
Федерального государственного бюджетного учреждения науки  
Института геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии  
и геохимии Российской академии наук (ИГЕМ РАН)

Борисов Алекс

17 октября 2023 г.

Контактные да  
тел.: 7(499) 230

Специальность, по которой официальным оппонентом  
защищена диссертация:

25.00.09 – Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых.

Адрес места работы:

119017, г. Москва, Старомонетный пер., д. 35,

ИГЕМ РАН, лаб. Геохи

тел.: 7(499) 2308221, e-