

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»

Эта работа - результат большого труда, многолетних усилий Дмитрия Алексеевича, направленных на оптимизацию процедур калибровки геотермобарометров минерал – расплав и совершенствование алгоритмов, использующих эти эмпирические калибровки при разработке ЭВМ-моделей кристаллизации магм. Особо отмечу последовательное использование статистических методов при верификации уравнений равновесия и тщательное тестирование программы КРИМИНАЛ на экспериментальных данных. Пожалуй, никто из предшественников не уделял этой стороне дела столько внимания. Подкупает стремление соискателя показать эффективность этой модели применительно к природным объектам. Это придает работе законченность, которую одновременно можно рассматривать как основу дальнейшего развития предложенных подходов, в том числе – расширения круга объектов для практических приложений.

Вместе с тем, в диссертации очевидны некоторые упущения в части петрологического сопровождения исследования, которые не позволили придать представлению результатов еще больше содержательности. Эти моменты рассмотрены ниже.

Диссертационная работа Д.А. Бычкова состоит из Введения, пяти глав, Заключения и Списка литературы. Общий объем работы – 139 стр., включая 76 рисунков, 14 таблиц и список литературы из 169 наименований.

Введение краткое, но включающее необходимые для диссертации разделы. Здесь трудно не согласиться с актуальностью решения проблем “ритмической расслоенности и магматогенного рудообразования”. Отмечу однако, что далее в диссертации эти проблемы не упоминаются. **Надо было конкретнее, подчеркнуть значение проведенных разработок для их решения.** Перечисленные элементы новизны отвечают содержанию исследования и текущему состоянию дел в области моделирования магматических процессов.

Глава 1. Проблемы моделирования дифференциации магм. Это пять страничек текста с тремя рисунками, где упоминается о нескольких популярных моделях кристаллизации магм и их некоторых приложениях. Фактически это демонстрация того, что автор знаком с этими моделями, но не видит необходимости провести их сравнения, обсудить плюсы и минусы, петрологическую направленность, пределы применимости и т.д. Думается, что наличие такого обзора могло бы украсить диссертацию. Более того, это позволило бы автору сконцентрироваться на роли современных моделей кристаллизации в теоретической петрологии и обосновать необходимость разработки новых подходов и алгоритмов.

Основное внимание в этой преамбуле автор уделил результатам моделирования строения интрузивов при помощи КОМАГМАТ, которые получены коллективом сотрудников МГУ им. М.В. Ломоносова и ГЕОХИ РАН. **Замечу, что эти результаты отражают малую часть реконструкций образования эффузивных и интрузивных пород при помощи современных ЭВМ-моделей.** В настоящее время достаточно материалов также для обсуждения (хотя бы краткого) работ по моделированию условий магматогенного рудообразования в расслоенных интрузивах.

Глава 2 представляет наиболее объемную часть диссертации и включает более 60 стр., посвященных выводу термобарометров - композитометров для силикатных фаз. Она разбита на 8 разделов: в трех первых обосновывается

выбор полуэмпирической формы уравнений равновесия минерал-расплав, описываются подходы к формированию выборок экспериментальных данных и разъясняются принципы калибровки геотермометров с оценками их достоверности.

Автор показывает, что замена сублинейной формы температурно-композиционной зависимости для логарифма содержаний миналов на экспоненциальную отвечает базовым принципам термодинамики и способствует проведению калибровок с повышением точности расчета абсолютных содержаний миналов, а не их логарифмов. Здесь очевидна новизна подхода. **Удивление вызывает** то, что для сравнений традиционных и предлагаемых калибровок служат данные по содержанию жадеитового минала в авгите (автор почему-то называет его "Налси"), т.е. наиболее неопределенного компонента при нормативных пересчетах составов пироксенов. Надо было показать также данные для F_0 в оливине, A_p в плагиоклазе и других миналов.

Второе замечание связано с отсутствием раздела по проблематике экспериментальных исследований. Такое обсуждение внесло бы больше ясности в принципы фильтрации экспериментальных данных, позволяя читателю составить мнение о возможности согласования и выбора данных, полученных разными методами в разных лабораториях. Оппоненту хорошо известны эти проблемы, которые порой не удается разрешить при помощи формальных статистических методов.

Пять заключительных разделов Главы 2 представляют результаты калибровок при помощи нового подхода для оливина, плагиоклаза, высоко-Са пироксена (авгита), ортопироксена и пижонита. Эта часть работы написана очень обстоятельно и прекрасно иллюстрирована. Впечатляет объем статистических материалов по результатам расчетов. Несомненным достижением являются уравнения, описывающие распределение малых компонентов во всех пяти породообразующих минералах.

Глава 3 посвящена разработке оригинального алгоритма решения задачи равновесия расплав - твёрдые фазы для многокомпонентной системы с минералами - твёрдыми растворами (программы КриМинал). Автор справедливо отмечает, что до последнего времени при моделировании магматических равновесий использовались алгоритмы минимизации свободной энергии Гиббса в условиях сохранения баланса масс, в явном (программы семейства MELTS) и неявном виде (КОМАГМАТ). Причем второй подход сводится к последовательно-итерационному решению уравнений закона действующих масс для выбранных минералов и прогнозного расплава. Д.А. Бычков предложил новый вариант подобных итераций, где в качестве целевой функции используется не минимум разницы псевдоликвидусных температур минералов при заданной степени кристаллизации (как сделано в программе КОМАГМАТ), а минимум различий расчетного и прогнозного состава минералов при заданной температуре. По существу видим две стороны одной задачи: **преимущества альтернативного алгоритма автор не поясняет**. Но несомненно, что это новый подход к моделированию кристаллизации, эффективность которого предполагает устойчивость вычислительной схемы и приложения к различным объектам. **К недостаткам этой части** можно отнести отсутствие термодинамически формализованного доказательства, что поиск минимума для предложенных целевых функций эквивалентен минимизации свободной энергии Гиббса.

Глава 4 демонстрирует точность расчетов по программе КриМинал при сравнении с результатами экспериментальных исследований. Прекрасно проведенное тестирование – с множеством графиков, которые убедительно подтверждают реалистичность модели КриМинал. Удачен выбор 6-ти экспериментальных работ для широкого диапазона магматических систем с возможностью контролировать оценки пропорций минералов. Оппоненту не известны работы, где верификация моделей кристаллизации проводилась бы столь системно и основательно.

Важной стороной этой работы явилось тестирование на тех же данных модели MELTS V1.0.2 (Ghiorso, Gualda, 2015) – одной из наиболее популярных зарубежных ЭВМ-программ. Эти сравнения показали подобие результатов расчетов по обеим моделям для известково-щелочных систем, а в некоторых случаях более точные предсказания для толеитов при помощи программы КриМинал. Полагаю, **в этой главе были бы нелишними сравнения с последними версиями модели КОМАГМАТ.**

В Главе 5 представлены результаты моделирования равновесной и фракционной кристаллизации исходных магм для двух интрузивов – Киваккского в Карелии и Скергаардского в Гренландии. Выбор удачен – первый вариант характеризует кристаллизацию несколько пересыщенных кремнеземом магм типичных для палеопротерозойских плутонов, второй – палеогеновый толеитовый магматизм Северной Атлантики. В качестве состава исходных магм для Кивакки использована оценка средневзвешенного состава интрузива, для Скергаарда – расчетный состав, подкрепленный результатами экспериментальных работ. При этом поставлена задача оценить диапазон давлений, при которых программа КриМинал воспроизводит порядок кристаллизации исходных магм. Вызывает интерес, что автор проводил расчеты не только по модели КриМинал, но также сопоставлял с вычислениями по программам MELTS и КОМАГМАТ (вер. 3.75).

Замечу, что Дмитрий Алексеевич **не особо потрудился над детальностью описания выбранных объектов – примерно по 20 строчек на геологию и строение для каждого.** Надо бы подробнее, включая, как минимум, эволюцию состава породообразующих минералов. Тем не менее, даже при столь усеченном представлении модельные порядки кристаллизации выглядят реалистично, в обоих случаях при давлениях несколько ниже 1 кбар. К результатам моделирования кристаллизации Киваккской магмы у оппонента замечаний нет. В случае Скергаарда дефицит информации обернулся некоторыми противоречиями.

Первое – трудно принять, что в Скергаарде Fe-Ti оксиды появляются после пижонита, поскольку магнетит-ильменитовые габбро зоны LZc залегают ниже Средней зоны, где Л. Уэйджер отмечал первые признаки кумулюсного пижонита. **Второе** – видимо автор не знаком с работами (Арискин и др., 2002; Ariskin et al., 2003), посвященными кристаллизации скергаардских магм и кумулатов, где много внимания уделено соотношениям между пижонитом, магнетитом и ильменитом. В приведенных на рис. 5.5 и 5.6 данных для модели КОМАГМАТ пижонит и ильменит отсутствуют – по той причине, что для расчетов использовалась версия 3.75 с обновленными “интрузивными” опциями, но устаревшими калибровками геотермометров. **Третье**, один из результатов предшественников – вывод, что поле пижонита в условиях закрытой по кислороду системы сильно сокращается по сравнению с кристаллизацией в условиях буферов QFM и вюстит-магнетит. Автор диссертации обошел обсуждение этих проблем и привел только один безальтернативный вариант с постулированным соотношением двух- и трехвалентного железа в исходной магме.

Эти замечания показывают, что Д.А. Бычкову еще предстоит накопить петрологический опыт последовательного использования представленной модели кристаллизации, но не снижают высокую оценку диссертационной работы в целом. Несомненно, что поставленные задачи в основном решены, а выводы обоснованы. Защищаемые положения отвечают полученным результатам, хотя формулировки нельзя признать удачными. Но главный результат – представление новой и перспективной модели КриМинал, развитие которой может вывести ее на уровень других ныне популярных петрологических инструментов, таких как MELTS, КОМАГМАТ и PETROLOG.

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.

Считаю, что 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».

17.10.2023
д. г.-м. наук доцент
Аришкин А.А.

