

**Программа MC – петрологический инструмент для вычисления реальных
количеств минералов в горной породе**

***К.В. Чудненко, **О.В. Авченко, **А.С. Вах**

**Институт геохимии СО РАН, 664033, Иркутск, Фаворского, 1А, chud@igc.irk.ru*

***Дальневосточный геологический институт ДВО РАН, 690022, Владивосток, просп.*

100-летия Владивостоку, 159; e-mail: sirenevka@mail.ru

Abstract: В статье приводится описание MC – компьютерной программы, предназначенной для расчета модальных количеств минералов в горных породах методом линейного программирования. Входной информацией является общий химический состав породы и состав минералов, выраженный в кристаллохимических формулах или в весовых процентах окислов. Программа MC отличается от известной программы MINSQ другим алгоритмом, повышенной точностью и опцией *Rock*, на которой возможно решение обратной задачи – вычисление теоретического состава горной породы на любом произвольно заданном модальном количестве минералов. Применение MC, как показано в статье, перспективно для решения разнообразных петрологических проблем в области метасоматоза, метаморфизма и магматизма.

Key words: MC, MINSQ, модальные количества, магматизм, метаморфизм, метасоматоз, линейное программирование.

Mineral abbreviations: Qtz – quartz, Plag – plagioclase, Kfs - K-feld spar, Bi – biotite, Hb – amphibole, Wm – muscovite, Gr – garnet, Sph - титанит, Ep – эпидот, Орх – ортопироксен, Апат - апатит, Mgt - магнетит, Ilm – ильменит, Gbs – гиббсит, Spi - шпинель, Chl - хлорит, Сс – кальцит, Rut – рутил, Anker – анкерит, Sid – сидерит, Kaol – каолинит, Py - пирит, Pirrot – пирротин.

Введение

В петрологии магматических и осадочных пород известен набор программ, на основе которых рассчитывается нормативный минералогический состав (Le Maitre, 1981; Cohen & Ward, 1991; Currie, 1991; Rosen et. al., 2004). 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 микронзонда 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 является MINSQ (Herrmann & Berry, 2002). Эта программа работает на основе метода наименьших квадратов и реализована на SOLVER в EXCEL. Описываемая в статье программа MC, работает на алгоритме линейного программирования, и также как и MINSQ, предназначена для расчета модальных количеств минералов на основе входной информации по химическому составу породы и минералов, но имеет более широкие возможности. Так, вводимые минералы в MC могут быть записаны как в виде окислов, так и в виде кристаллохимических формул, что дает возможность при определении трехвалентного железа в минералах разделить окисное и закисное железо в анализе породы. Другой особенностью MC является опция *Rock*, с помощью которой возможно рассчитать теоретический состав горной породы исходя из заданных модальных составов и минералов. В свою очередь, эта опция дает надежный контроль расчета модальных количеств и позволяет при необходимости обнаружить случаи неоднозначности расчета. Степень приближения модальных составов к данному составу породы, оцениваемая по величине *Residual*, у MC несколько выше, чем в MINSQ. Вместе с тем, расчет на MC требует более качественной работы минералога и химика-аналитика, так как даже незначительный недостаток каких-либо минералов в вводимом минералогическом наборе и неточности в определении химиком-аналитиком химического состава породы, могут приводить к более высокой величине *Residual*, чем при расчете на MINSQ. Применение MC, как показано в статье, перспективно для решения разнообразных петрологических проблем в области метасоматоза, метаморфизма и магматизма.

Описание программы МС

Программа МС (Modal composition) предназначена для расчета методом линейного программирования (Чудненко, 2010) 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 (O) 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*.

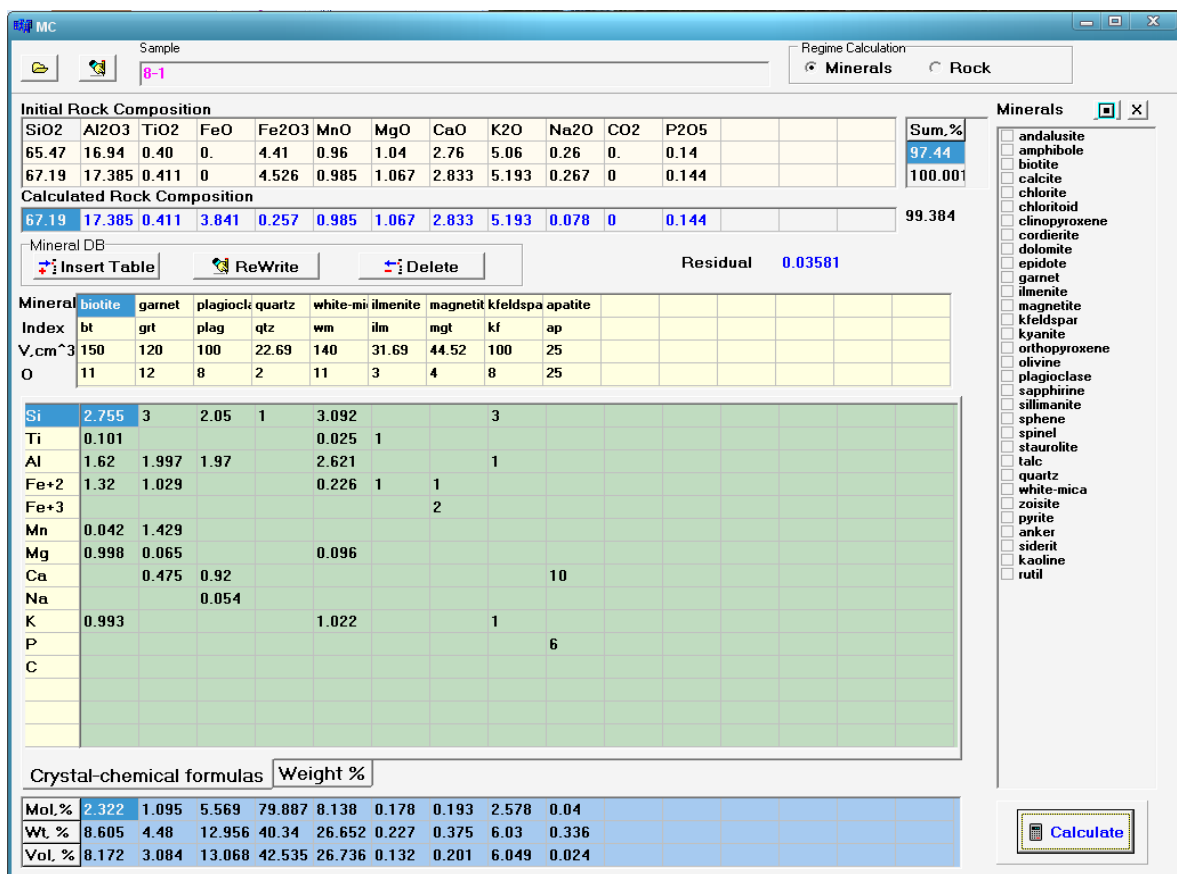


Рисунок 1. Рабочее окно программы MC

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, арсенопирит и т.д. должен проводиться только по кристаллохимическим формулам.

Закончив ввод исходных данных, нужно выполнить расчет, нажав кнопку *Calculate*. При этом переключатель режима работы программы *Regime Calculation* в верхней правой части рабочего окна должен находиться в положении *Minerals*. Результат 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 модалого 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.

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 исходно 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 МС 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, приведенных 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.

Пример расчета модального состава обр. 138

Эвлизит из охотского метаморфического гранулитового комплекса (Авченко, 1990) был проанализирован классическим мокрым анализом. Для расчета его модального состава на первом шаге в рабочее окно программы МС вводится состав породы без воды и потерь при прокаливании (строка 1, табл. 1). Этот состав автоматически нормируется на 100 вес. % в процессе расчета (строка 2, табл. 1). Порода состоит из магнетита, кварца, граната, ортопироксена, плагиоклаза, биотита и небольших количеств калишпата, зеленой шпинели, апатита, ильменита и амфибола. Кристаллохимические формулы всех минералов, рассчитанные из имеющихся анализов минералов, выполненных на микрозонде JXY 8100 в лаборатории ДВГИ ДВО РАН, даются в таблице 2. Шпинель содержит небольшие количества цинка, но содержание цинка в породе не определялось.

Таблица 1. Реальные (1, 2) и вычисленный на МС (3) химические составы породы (вес. %)

N	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
1	48.71	0.60	8.64	13.60	19.03	0.47	3.59	2.34	0.99	0.70	0.13	98.80
2	49.3	0.61	8.74	13.76	19.26	0.48	3.63	2.37	1	0.71	0.14	100
3	49.3	0.61	8.74	17.08	15.58	0.48	3.63	2.37	1	0.71	0.14	99.64

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

На втором шаге в рабочее окно МС вводятся кристаллохимические формулы минералов из таблицы 2. Поскольку содержание цинка в породе не определено, то цинк из состава шпинели необходимо исключить и произвести расчет, нажав клавишу *Calculate*. Модальный состав обр. 138, рассчитанный без учета цинка в шпинели, показан в таблице 3. Низкая величина *Residual*, равная всего 0.00002, вычисленная из разницы между заданным химическим составом породы (строка 2, табл. 1) и вычисленным (строка 3, табл. 1), свидетельствует о хорошем приближении полученного модального состава к составу породы. Можно рассчитать модальный состав обр. 138 и с учетом цинка в шпинели и найти теоретическое содержание цинка в породе 138. Для этого в строку ненормированного состава породы вводится произвольное небольшое количество цинка (допустим, 0.1 вес. %), а в состав шпинели добавляется цинк из таблицы 2. Расчет обнаруживает, что порода должна содержать 0.05 вес. % цинка, причем модальный состав породы при этом изменяется на тысячные доли процента.

Рассчитанный модальный состав породы в обр. 138 (табл. 3) уточняет примерную визуальную оценку минералов и показывает (табл. 1), что содержание трехвалентного железа в этой породе химиком-аналитиком завышено на 3.7 вес. %.

Таблица 3. Модальный состав породы обр. 138 (вес. %).

Hb	Opx	Plag	Qtz	Spi	Gr	Kfs	Ilm	Mgt	Bi	Apat	Σ	Residual
0.0	12.1	12.1	27.3	1.2	15.2	0.3	0.01	22.6	8.9	0.3	100	0.00002

Оценка точности работы МС

С помощью опции *Rock* и величины *Residual* легко оценить точность работы МС. Эта опция позволяет на первом шаге вычислить теоретический химический состав породы, исходя из произвольно заданного модального состава в весовых, мольных или объемных процентах и химического состава минералов, выраженного в кристаллохимических формулах или весовых %. На втором шаге применение опции *Minerals* на основе вычисленного состава породы и того же состава минералов даст нам модальный состав этой породы. Нам остается сравнить два модальных состава – заданный и вычисленный, чтобы оценить точность работы МС. В таблице 4 приводятся три примера, из которых видна очень хорошая сходимость вычисленного («calc») модального состава с заданным («real»). Входные теоретические составы пород, которые использовались для нахождения модальных количеств даются в таблице 5, а состав минералов приводится в таблице 2.

Таблица 4. Сопоставление заданных модальных составов («real») с вычисленными («calc») (вес. %). Соответствующие теоретические химические составы пород приводятся в таблице 5.

	Hb	Opx	Plag	Apat	Gr	Bi	Ilm	Mgt	Qtz	Kfs	Σ
«real 1»	5	10	10	0.2	10	15	0.3	2	45	2.5	100
«calc 1»	5.2	9.9	9.9	0.2	10.1	14.9	0.3	2	45	2.5	100
«real 2»	10	5	1	0.2	12	15	0.1	6	35	15.7	100
«calc 2»	10.2	4.5	0.8	0.2	12.2	15.4	0.0	6	35.2	15.5	100
«real 3»	15	10	35	0.2	0	15	0	2	15	7.8	100
«calc 3»	14.9	10.1	35	0.2	0.1	14.9	0	2	14.9	7.8	99.9

Таблица 5. Теоретические составы пород (вес.%), вычисленные по заданным модальным количествам («real»), помещенных в таблице 4. Составы минералов даются в таблице 2

N	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
«real 1»	68.79	0.95	8.39	10.10	1.88	0.35	4.33	2.36	2.1	0.66	0.09	100
«real 2»	62.67	0.90	9.28	11.04	4.82	0.35	4.08	2.10	4.31	0.30	0.09	99.94
«real 3»	56.72	0.90	15.45	8.57	2.41	0.07	4.93	5.46	3.12	2.29	0.09	100

Тестирование МС на природном материале

Джон Ферри (Ferry, 1984) приводит модальный состав для семи метapelитовых гнейсов биотитовой зоны метаморфизма Формации Вотервилль. В этой работе приводятся также составы минералов и химические составы пород, поэтому можно сравнить расчеты

модального состава по МС с данными Дж.Ферри (1984). Дж. Ферри не указывал магнетит в минералогическом составе пород. В двух породах, однако, согласно расчетам по МС, в очень небольших количествах должен быть и магнетит. Если не вводить магнетит в набор минералов, то величина *Residual* заметно увеличивается. Заметим, что магнетитовый минерал мог входить в состав твердого раствора ильменита. В остальном сходимость между данными Дж. Ферри и расчетами по МС почти идеальная (табл. 6).

Таблица 6. Сопоставление расчетов по МС с данными Дж. Ферри (1984) (мольные %)

№ обр.	Bi	Chl	Wm	Plag	Qtz	Ilm	Mgt	Cc	Pirrot	Py	Автор расчета	Resid
418-B	3	4.8	10.8	8.5	68.9	1.08	-	0	1.3	1.5	МС	0.002
418-B	3.9	5.1	10.2	8.7	70.2	1.03	-	0	0.3	0.5	Ferry, 1984	
423-A	2.9	3.7	7.2	14.5	67.5	0.9	-	2.8	0.3	-	МС	0.004
423-A	2.7	3.7	7.3	14.5	67.2	0.9	-	3	0.75	-	Ferry, 1984	
420-A	7.3	0.9	3.9	13.2	74.44	0.18	-	-	-	-	МС	0.08
420-A	7.22	0.83	3.92	13.3	73.94	0.62	-	-	-	-	Ferry, 1984	
429-A	3	5.6	11.7	7	71.30	1.2	0.02	-	-	-	МС	0.009
429-A	3.12	5.7	11.70	7.17	71.70	1.22	-	-	-	-	Ferry, 1984	
33-B	4.4	2.7	11.9	13.7	64.6	1.2	-	0.9	0.5	-	МС	0.1
33-B	4.893	2.76	11.77	13.9	65.40	1.16	-	0.9	0.3	-	Ferry, 1984	
418-A	1.8	3.5	12.1	2.9	77	0.99	0.7	0.7	-	-	МС	0.07
418-A	3.4	3.5	10.5	3.7	78	0.9	-	-	-	-	Ferry, 1984	

Особенности работы МС сравнительно с MINSQ

Сравнение расчетов модальных количеств минералов по программам МС и MINSQ выполнено на примере пород Восточного Балларата, метаморфизованных в зеленосланцевой фации (Bierlein, 2000). Составы минералов и пород для этих расчетов приводятся в работе (Herrmann & Berry, 2002). Получена хорошая сходимость результатов вычислений (рис.2), но величина *Residual* для МС несколько меньше, чем для MINSQ для всех образцов (рис. 3).

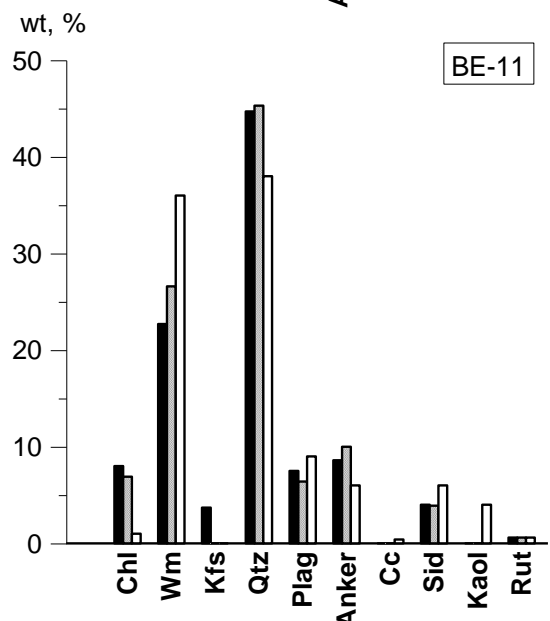
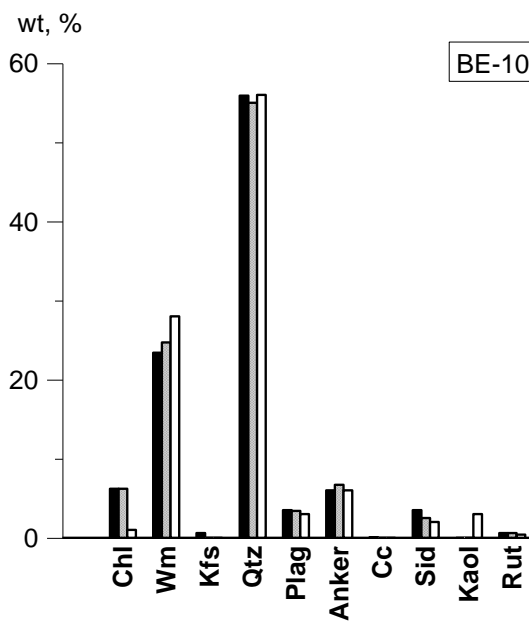
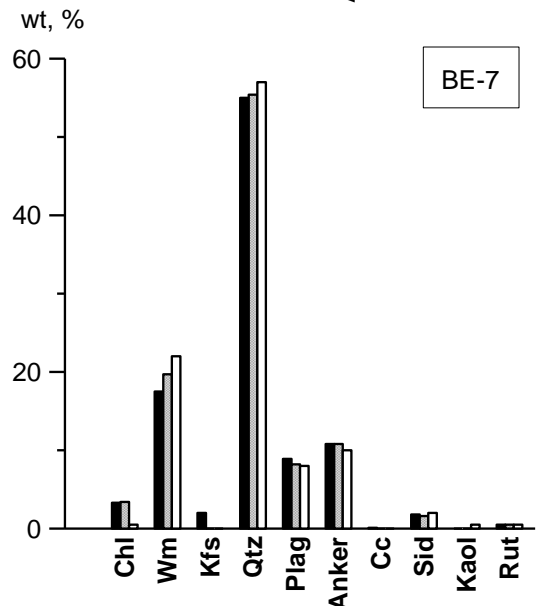
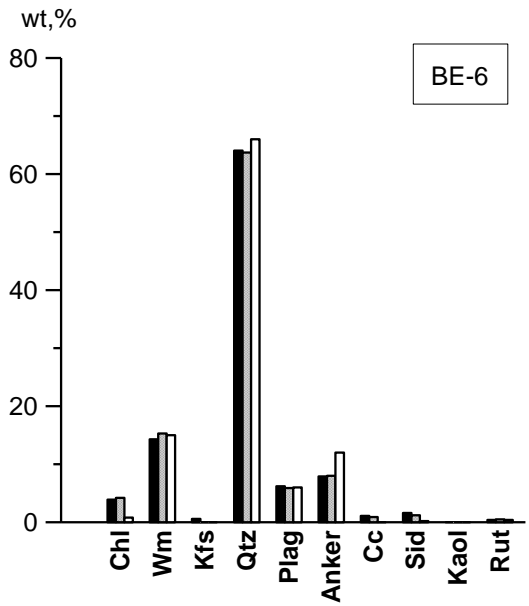
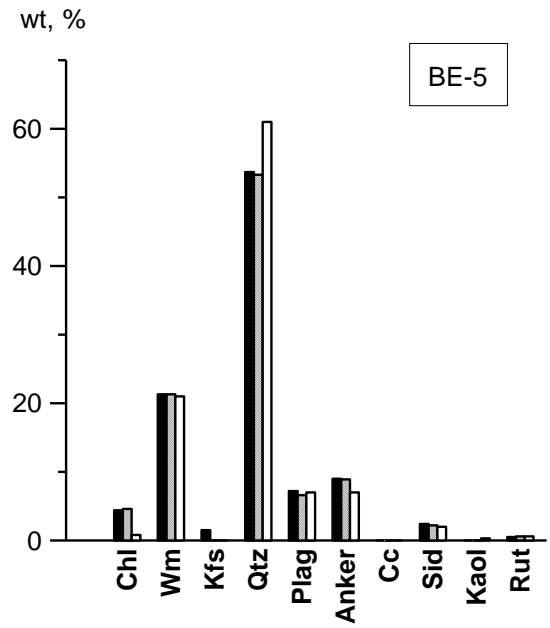
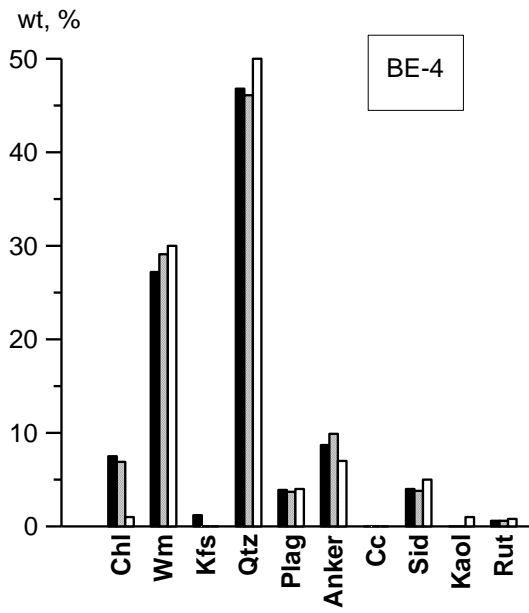


Рисунок 2. Сопоставление модальных количеств в породах, рассчитанных по программам MC (1) и MINSQ (2), на примере данных Восточного Балларата (3) (Bierlein, 2000).

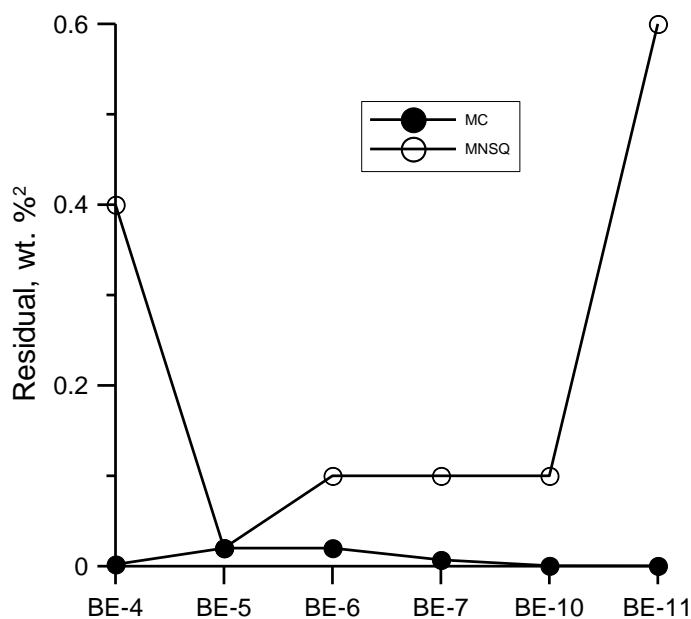


Рисунок 3. Величина Residual для данных Восточного Балларата (Bierlein, 2000) по программам MC и MNSQ.

При этом программа MC, относительно MINSQ, более резко контролирует недостаток некоторых минералов, которые имеются в породе, но не приняты во внимание или пропущены минералогом при расчете модального состава пород. Иначе говоря, программа MC предъявляет более жесткие требования к качеству работы минералога или химика-аналитика, чем MINSQ. Это важное отличие в работе в двух программ можно увидеть на основе теоретических составов пород, вычисленных MC с помощью опции *Rock*. Как видно из таблицы 7, результаты расчета модального состава теоретической породы по программам MC и MINSQ хорошо сопоставляются. Химический состав теоретической породы (табл. 8) получен при помощи опции *Rock* на основе произвольно заданных количеств минералов, показанных в таблице 7 в строке «teal». Химические составы этих минералов приведены в таблице 2. Далее предположим, что минералог пропустил шпинель (всего 1.2 вес.%) и рассчитал модальный состав этой породы без шпинели. Как видно из таблицы 9, 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 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.

Таблица 7. Сопоставление расчета модального состава пород (вес.%), выполненных по программам MC и MINSQ с точным модальным составом породы ("real").

Min	Opх	Plag	Qtz	Spi	Gr	Kfs	Ilm	Mgt	Bi	Apat	Residual
"real"	12.1	12.1	27.3	1.2	15.2	0.2	0.1	22.6	8.9	0.3	
MC	12.8	12.1	27.2	1.4	14.8	0.8	0.1	22.5	8.1	0.3	0.000
MINSQ	12.1	12.1	27.5	1.3	14.8	0.1	0.0	22.6	9.2	0.3	0.0

Таблица 8. Химический состав модельной породы (вес.%), вычисленный по модальному минералогическому составу, приведенному в таблице 7 ("real")

SiO2	TiO2	Al2O3	FeO	Fe2O3	MnO	MgO	CaO	K2O	Na2O	P2O5	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 9. Сопоставление расчета модального состава породы (вес.%), выполненных по программам MC и MINSQ при условии «потери» шпинели в наблюдаемом минералогическом составе.

Min	Opх	Plag	Qtz	Spi	Gr	Kfs	Ilm	Mgt	Bi	Apat	Residual
"real"	12.1	12.1	27.3	1.2	15.2	0.2	0.1	22.6	8.9	0.3	
MC	12.3	12.2	27.5	0.0	15.3	0.0	0.06	23	9.3	0.3	0.53
MINSQ	11.2	12.4	26.5	0.0	18.1	0.0	0.1	22.2	9.5	0.1	0.0

Опыт применения MC к анализу метасоматических пород

Эффективность применения MC к анализу минеральных парагенезисов метасоматических пород можно показать на примере рассмотрения метасоматитов Березитового месторождения (Верхнее Приамурье, Россия). Месторождение представлено сульфидсодержащими метасоматическими породами, которые локализованы в массиве порфиридных гранодиоритов позднепалеозойского возраста в виде двух совмещенных перевёрнутых конусов. Геологическое строение месторождения, возрастные датировки, минералогия руд приводятся в ряде публикаций (Вах и др., 2009; Вах и др., 2010; Вах и др., 2011). Метасоматические породы месторождения обнаруживают четко выраженное зональное строение. В направлении от гранитов к центру метасоматической залежи, выделяются следующие минералогические зоны (рис. 4):

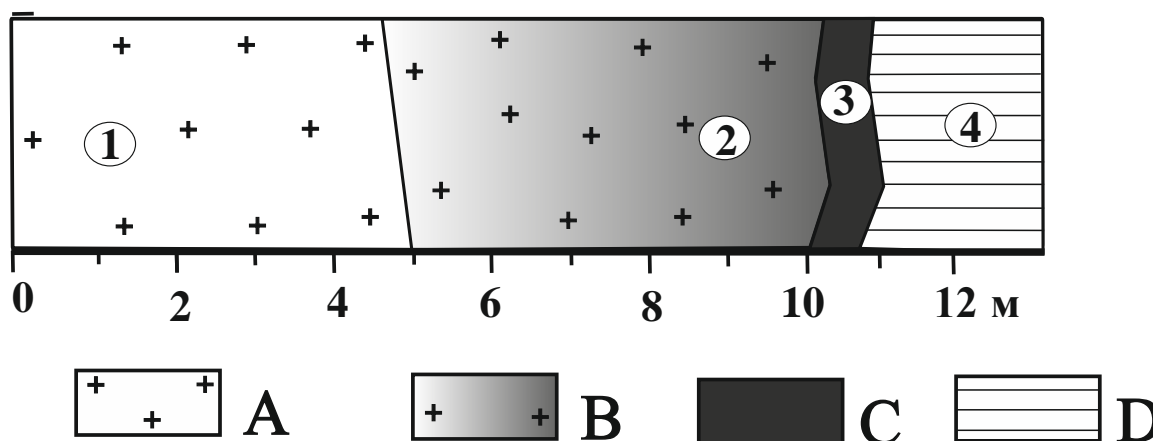


Рисунок 4. Минералогические зоны развития метасоматических пород по гранодиоритам на Березитовом месторождении: А - слабо измененные гранодиориты; В – сильноизмененные гранодиориты; С - темно-серые метасоматиты с минеральным парагенезисом - $Qtz+Wm+Gr+Kfs+Bi+Plag_9$

Зона А. Слабоизмененный гранодиорит. Магматический парагенезис – $Qtz + Plag_{25-35} + Kfs + Bi + Hb$. Изменение гранодиоритов выражено в развитии вторичного биотита по роговой обманке, появлении в небольших количествах новообразованного мусковита, кварца, хлорита и эпидота. Структура пород гранитная, порфировидная, 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+Plag₉₀₋₉₅. 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 A, B, C, D приводятся в таблицах 10, 11.

Таблица 10. Химический (% мас.) состав гранодиоритов и метасоматитов Березитового месторождения в зонах A, B, C, D (Примечание: Анализы пород выполнены Ноздрачевым Е.А. в ДВГИ ДВО РАН на рентгенофлуоресцентном спектрометре S4 Pioneer фирмы Bruker AXS.)

Номер пробы	1-Б	5	8-1	8-2
№ п/п	1	2	3	4
Зона	A	B	C	D
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
-------	-------	-------	-------	-------

Таблица 11. Составы минералов (вес. %) в зонах А, В, С, D, принятые для расчета модального состава гранодиоритов и метасоматитов (Примечание: формулы минералов Ilm, Mgt, Apat, Rut, Qtz, Gbs приняты теоретическими. Анализы минералов выполнены А.С. Вахом в ДВГИ ДВО)

Минерал	Hb	Ep	Sph	Plag	Plag	Gr	Gr	Kfs	Bi	Bi	Wm
Зона	A,B	A,B	A,B	A,B	C,D	A,B,C	D	A,B,C,D	A,B	C,D	A,B,C,D
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

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 *A-D*, в породах закономерно возрастают количества кварца и мусковита, тогда как количества плагиоклаза, эпидота и магнетита уменьшаются (табл. 12). Как видно из химических составов пород, рассчитанных МС по модальным количествам минералов, в последовательности *A-D* возрастает также степень восстановленности пород или отношения $FeO/FeO+Fe_2O_3$ (табл. 13, 14). Таким образом, с помощью применения МС выясняется, что в результате наложения процесса метасоматоза (кислотного выщелачивания) на гранодиоритовый субстрат происходит развитие кварц-мусковитовой 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.

Таблица 12. 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	A	19	7	49.9	1.7	-	10.6	0	0.2	9.6	0.5	1.3	-	-	99.8	0.000
5	B	25.4	9.5	42.9	10.6	-	8	-	0.1	1.3	0.3	1.8	0	-	99.9	0.000
8-1	C	40.3	6.0	12.9	26.6	4.5	8.6	-	-	-	0.3	0.4	0.2	-	99.8	0.03
8-2	D	47.5	-	1.2	49.7	0.4	-	0	0.1	-	0.0	0.03	-	1	99.9	0.03

Таблица 13. Химический (вес. %) состав гранодиоритов и метасоматитов Березитового месторождения в зонах А, В, С, D, рассчитанный МС по модальным количествам минералов.

Номер пробы	1-Б	5	8-1	8-2
№ п/п	1	2	3	4
Зона	A	B	C	D
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 14. Содержания FeO и Fe₂O₃ (вес.%) и коэффициент восстановления пород (K= FeO/(FeO+Fe₂O₃)) в зонах А-D, рассчитанный по данным таблицы 13.

образец	зона	FeO	Fe ₂ O ₃	K*100
1-Б	A	2.87	2.1	58.1
5	B	2.77	1.37	66.9
8-1	C	3.77	0.34	93.7
8-2	D	2.12	0.02	99

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://www.fegi.ru/>.

Поддержка Интеграционного гранта СО РАН № 12 и ДВО РАН № 12-II-CY-08-014.

Литература

Le Maitre, R.W. 1981. GENMIX – A generalized petrological mixing model program. *Computers & Geosciences*, **7**, 229-247.

Cohen, D.R. & Ward, C.R. 1991. SEDNORM – a program to calculate a normative mineralogy for sedimentary rocks based on chemical analyses. *Computers & Geosciences* **17**, 1235-1253.

Currie, K.L., 1991. GENORM: a generalized norm calculation. *Computers & Geosciences* **17**, 77–89.

Rosen Oleg, M., Abbyasov Ali A., Tipper John C. 2004. MINLITH – an experience-based algorithm for estimating the likely mineralogical composition of sedimentary rocks from bulk chemical analyses. *Computer & Geoscience*, **30**, 647-661.

Herrmann Walter & Berry Ron F. 2002. MINSQ – a least squares spreadsheet method for calculating mineral proportions from whole rock major element analyses. *Geochemistry: Exploration, Environment, Analysis*, **2**, 361–368.

Авченко О.В. Минеральные равновесия в метаморфических породах и проблемы геобаротермометрии. 1990. М.: Наука, 182 с.

Ferry, J.M. A biotite Isograd in South-Central Maine, U.S.A.: Mineral Reaction, Fluid Transfer, and Heat Transfer. *Petrology*. **2**, N 4, 871-894.

Bierlein, F.P., Arne, D.C., & McKnight, S., *et.al.* 2000. Wall-rock petrology and geochemistry in alteration halos associated with mesothermal gold mineralization, central Victoria, Australia. *Economic Geology*, **95**, 283-311.

Вах А.С., Авченко О.В., Карабцов А.А., Степанов В.А. Первая находка гротита в золоторудных месторождениях // Докл. РАН. 2009. Том 428. № 3. С. 353-357.

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.

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.

Чудненко К.В. Термодинамическое моделирование в геохимии: теория, алгоритмы, программное обеспечение, приложения. Новосибирск: Академическое издательство «Гео», 2010. 287 с.