

**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](mailto:chud@igc.irk.ru)*

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

*100-летия Владивостоку, 159; e-mail: [sirenevka@mail.ru](mailto: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 (см<sup>3</sup>) 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*.

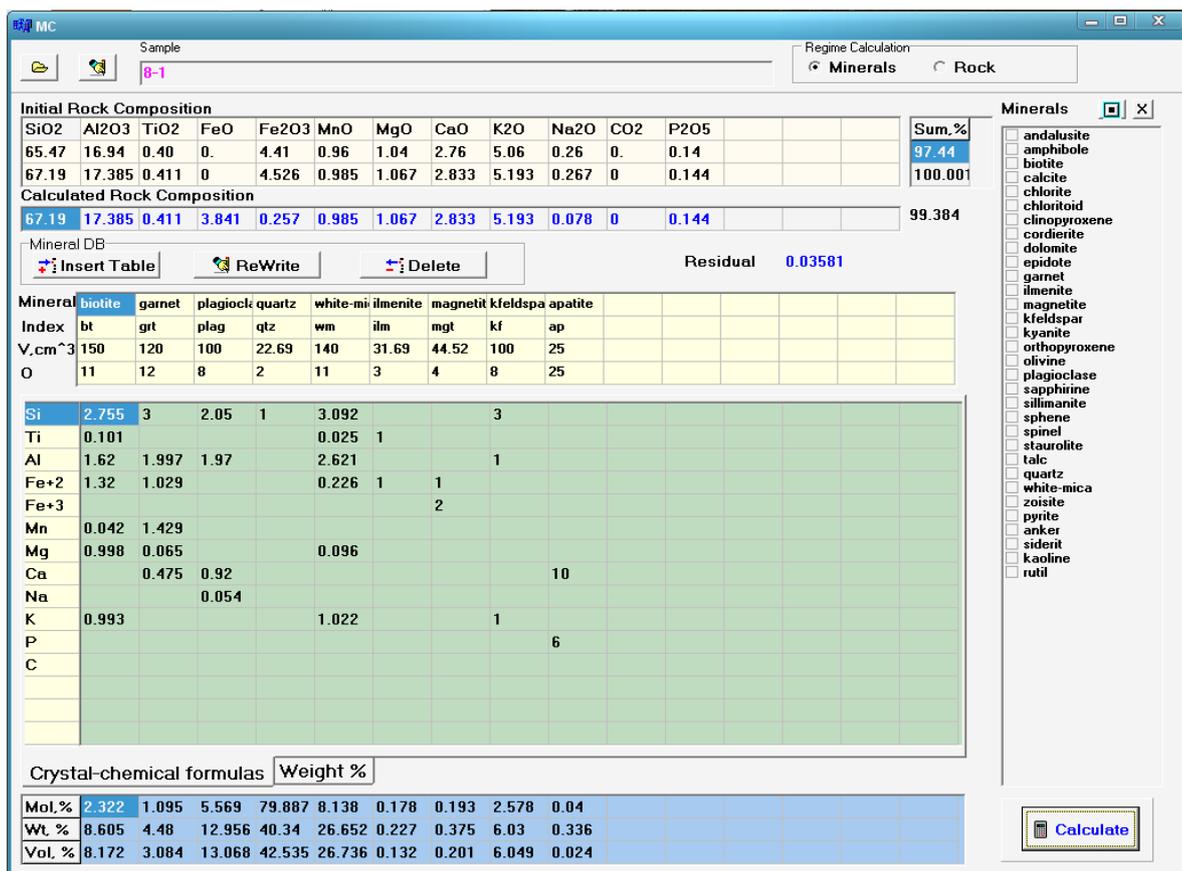


Рисунок 1. Рабочее окно программы MC

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 модалного 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 <sub>2</sub> | TiO <sub>2</sub> | Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | FeO   | Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | MnO  | MgO  | CaO  | K <sub>2</sub> O | Na <sub>2</sub> O | P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> | 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 <sup>+2</sup> | 1.766 | 0.989 | -     | -   | 0.741 | 1.89  | -     | 0.852 | 1.017 | 1.111 | -    |
| Fe <sup>+3</sup> | 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 <sub>2</sub> | TiO <sub>2</sub> | Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | FeO   | Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | MnO  | MgO  | CaO  | K <sub>2</sub> O | Na <sub>2</sub> O | P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> | 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).

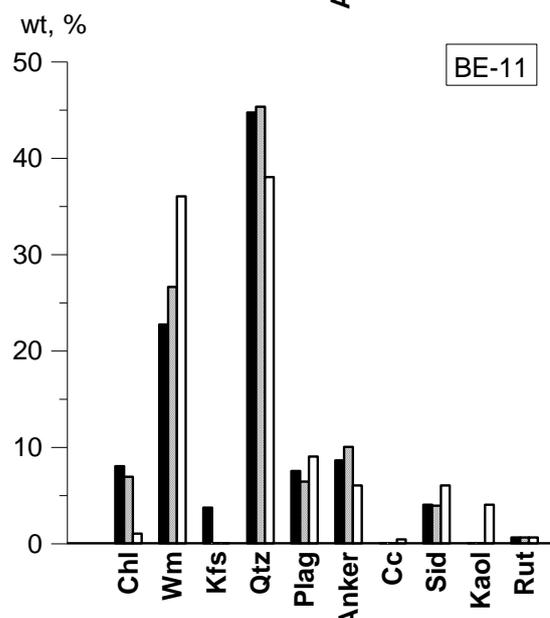
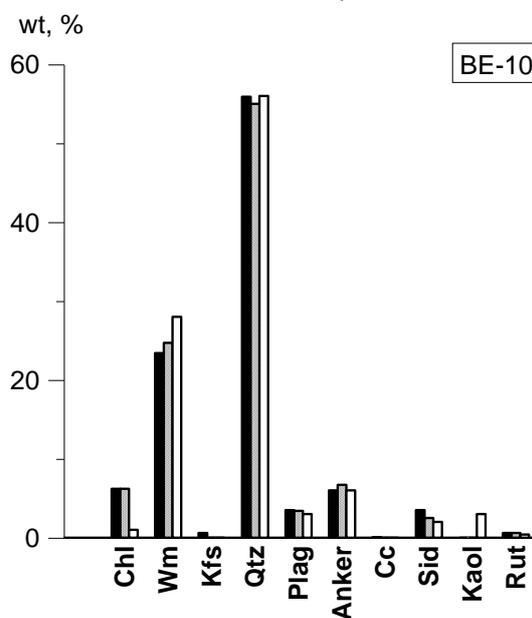
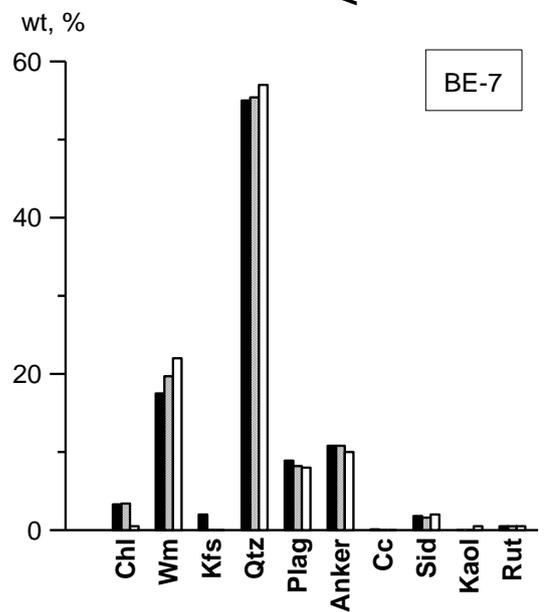
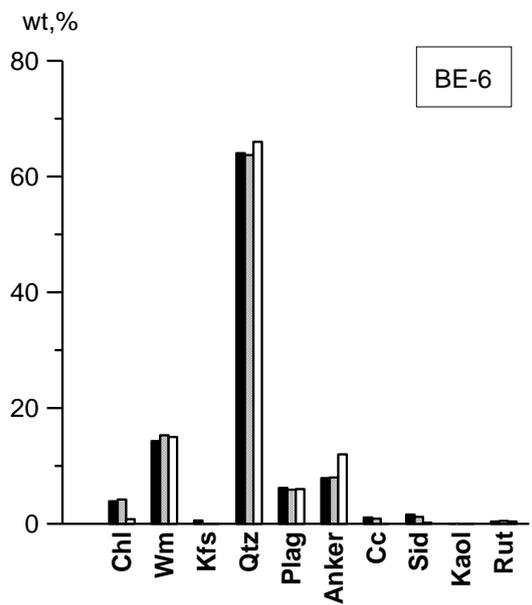
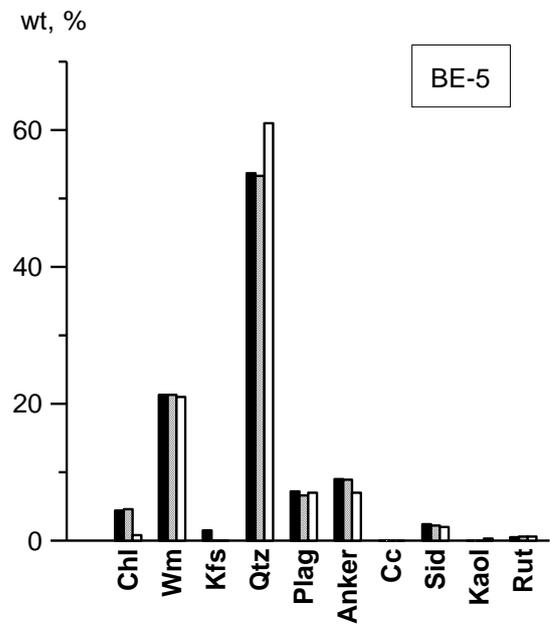
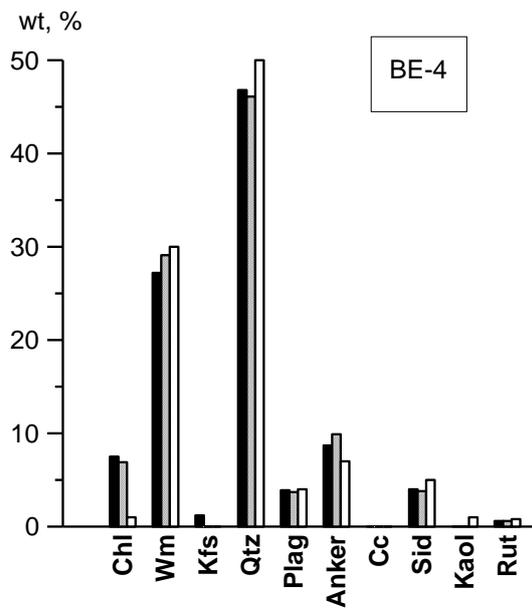


Рисунок 2. Сопоставление модальных количеств в породах, рассчитанных по программам MC (1) и MINSQ (2), на примере данных Восточного Балларата (3) (Bierlein, 2000).

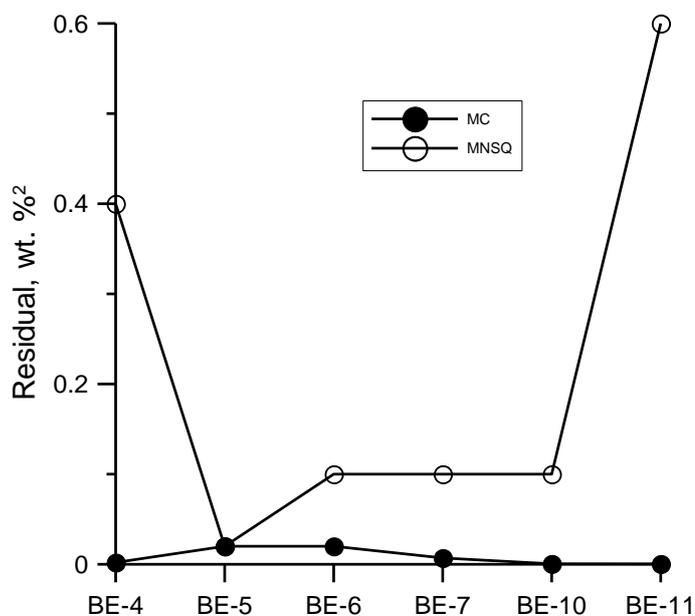


Рисунок 3. Величина Residual для данных Восточного Балларата (Bierlein, 2000) по программам MC и MINSQ.

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 | <b>0.0</b> | 15.3 | 0.0 | 0.06 | 23   | 9.3 | 0.3  | <b>0.53</b> |
| MINSQ  | 11.2 | 12.4 | 26.5 | <b>0.0</b> | 18.1 | 0.0 | 0.1  | 22.2 | 9.5 | 0.1  | <b>0.0</b>  |

### 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):

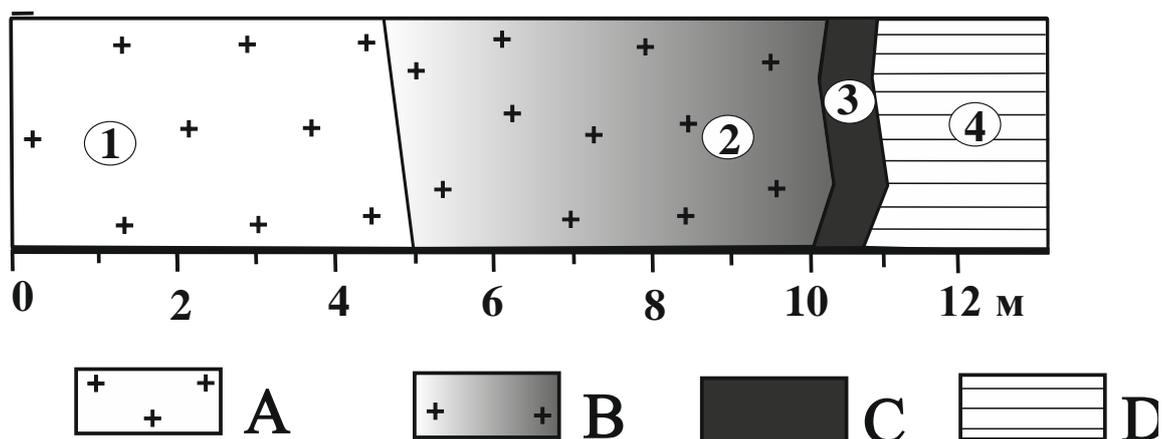


Рисунок 4. Минералогические зоны развития метасоматических пород по гранодиоритам на Березитовом месторождении: А - слабо измененные гранодиориты; В – сильноизмененные гранодиориты; С - темно-серые метасоматиты с минеральным парагенезисом -  $Qtz+Wm+Gr+Kfs+Bi+Plag_9$

Зона А. Слабоизмененный гранодиорит. Магматический парагенезис –  $Qtz + Plag_{25-35} + Kfs + Bi + Nb$ . 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 -  $Qtz + Plag_{25-35} + Kfs + Bi + Nb$ . 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+Plag<sub>90-95</sub>. 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                           | <b>A</b> | <b>B</b> | <b>C</b> | <b>D</b> |
| SiO <sub>2</sub>               | 62.68    | 66.23    | 65.47    | 69.42    |
| TiO <sub>2</sub>               | 0.47     | 0.36     | 0.40     | 0.36     |
| Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 17.07    | 16.51    | 16.94    | 17.87    |
| Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 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 <sub>2</sub> O              | 4.67     | 4.04     | 0.26     | 0.15     |
| K <sub>2</sub> O               | 2.41     | 3.63     | 5.06     | 5.93     |
| P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>  | 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 <sup>+2</sup> | 1.926 | -     | -     | -    | -     | 1.029 | 0.872 | -       | 1.394 | 1.32  | 0.226   |
| Fe <sup>+3</sup> | 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  | <b>A</b> | 19   | 7   | 49.9 | 1.7  | -   | 10.6 | 0   | 0.2 | 9.6 | 0.5  | 1.3  | -   | -   | 99.8 | 0.000 |
| 5    | <b>B</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  | <b>C</b> | 40.3 | 6.0 | 12.9 | 26.6 | 4.5 | 8.6  | -   | -   | -   | 0.3  | 0.4  | 0.2 | -   | 99.8 | 0.03  |
| 8-2  | <b>D</b> | 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                           | <b>A</b> | <b>B</b> | <b>C</b> | <b>D</b> |
| SiO <sub>2</sub>               | 63.67    | 67.20    | 67.19    | 71.58    |
| TiO <sub>2</sub>               | 0.48     | 0.36     | 0.41     | 0.37     |
| Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 17.34    | 16.75    | 17.38    | 18.32    |
| Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 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 <sub>2</sub> O              | 4.74     | 4.10     | 0.08     | 0.013    |
| K <sub>2</sub> O               | 2.45     | 3.68     | 5.19     | 6.11     |
| P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>  | 0.20     | 0.15     | 0.14     | -        |
| Σ                              | 99.68    | 99.69    | 99.38    | 99.37    |

Таблица 14. Содержания FeO и Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (вес.%) и коэффициент восстановления пород (K= FeO/(FeO+Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)) в зонах А-D, рассчитанный по данным таблицы 13.

| образец | зона     | FeO  | Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | K*100 |
|---------|----------|------|--------------------------------|-------|
| 1-Б     | <b>A</b> | 2.87 | 2.1                            | 58.1  |
| 5       | <b>B</b> | 2.77 | 1.37                           | 66.9  |
| 8-1     | <b>C</b> | 3.77 | 0.34                           | 93.7  |
| 8-2     | <b>D</b> | 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.