

Моделирование магматической кристаллизации в гетерогенных и градиентных средах

Фомин Илья Сергеевич

Студент 1-ого курса геологического факультета

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: fomin@web.ru

Одним из ведущих направлений современных естественных наук является моделирование природных процессов. Методы математического моделирования помогают изучению механизмов физико-химических процессов, позволяют перевести теоретические модели на количественную основу, проводить сравнение с природными объектами.

Смешение магм контрастного состава и температуры (например, базальтовых и риолитовых расплавов) является широко распространенным в природе процессом. Математическое моделирование этого процесса является сложной задачей, поскольку при смешении важен учет теплообмена, конвекции магмы и кристаллизации минералов в градиентном поле температур.

Одной из существенных составных частей моделирования смешения магм является расчет кристаллизующихся (или плавящихся) минералов и учет теплот кристаллизации в общем теплообмене. Нами был написан расчетный модуль, который в качестве входного параметра использует профиль, состоящий из точек с произвольно меняющимся составом расплава и температурой, которая должна быть в конкретной точке. Результатом расчёта является профиль, содержащий новые составы расплавов, составы минеральных фаз и теплоты кристаллизации.

Набор ликвидусных фаз оценивается по принципу Ван-Кирка: при данном расплаве любой минерал может быть равновесен с ним, однако кристаллизаться начнёт тот, у которого псевдоликвидусная температура наибольшая [1].

Для расчетов был использован следующий алгоритм: с помощью итерационного счёта находятся температуры кристаллизации минералов, определяется тот, который будет кристаллизаться, затем находится его состав, после чего производится его равновесная кристаллизация с некоторым небольшим шагом. Затем эта процедура повторяется до тех пор, пока наибольшая псевдоликвидусная температура не станет меньше, чем заданная, после чего обсчёт точки прекращается.

Температуры равновесия минерал-расплав оцениваются для 4 минералов: оливин по модели Ford, 1983, плагиоклаз по модели Арискин, 1993, ортопироксен по модели Арискин, 1993 и клинопироксен по модели Арискин, 1986. При необходимости могут быть добавлены модели других минералов. Масс-баланс основан на фракционном механизме кристаллизации, т.е. твердые продукты удаляются без взаимодействия с расплавом [2].

Таким образом, результатом проведённой работы является программный модуль, рассчитывающий составы расплава и минеральных фаз для профилей состава и температуры. Его использование позволит моделировать процессы смешения расплавов для жидкостей, заключённых в объёмах произвольной формы и размера, с необходимой точностью. Модуль реализован на языке FORTRAN-90, что позволяет проводить все расчёты с высокой скоростью.

Литература:

1. Арискин А.А., Бармина Г.С., Моделирование фазовых равновесий при кристаллизации базальтовых магм.-М.:Наука,МАИК "Наука/Интерпериодика",2000.-363с
2. Плечов П.Ю., Данюшевский Л.В. "PETROLOG III. Моделирование равновесной и фракционной кристаллизации"//Материалы ЭСМПГ-2006, Электронный научно-информационный журнал «Вестник Отделения наук о Земле РАН» №1 (24),2006, Опубликовано 1 июля 2006 г. URL: http://www.scgis.ru/russian/cp1251/h_dgggms/1-2006/informbul-1_2006/term-24.pdf

Автор выражает признательность к.г.-м.н. Плечову П.Ю. за помощь в подготовке тезисов.