МАССОПЕРЕНОС И МИНЕРАЛООБРАЗОВАНИЕ В МАГМАТОГЕННО-ГИДРОТЕРМАЛЬНЫХ СИСТЕМАХ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ЧИСЛЕННОГО ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В.И. Васильев

Геологический институт СО РАН, Улан-Удэ, e-mail: vasil@gin.bscnet.ru

На базе программного комплекса «СЕЛЕКТОР» [Чудненко, 2005] и авторского программного обеспечения [Васильев и др., 2007] разработана базовая компьютерная физикохимическая модель линейного массопереноса и минералообразования в магматогенногидротермальных системах вулканических областей.

Модель имеет вид проточного физико-химического реактора с расчетным начальным равновесным магматическим флюидом, который в процессе линейного движения просачивается через конечное число резервуаров, каждый из которых имеет собственный химический состав, температуру и давление. «Флюидом» в данной работе будем называть группу подвижных фаз «раствор + газ». При отсутствии какой-либо одной подвижной фазы флюид считается существующим. Все резервуары характеризуются единым набором независимых компонентов, исходные содержания которых для каждого резервуара задаются при постановке задачи. Целью моделирования является расчет равновесных концентраций зависимых компонентов в каждом резервуаре, а также расчет состава флюида на выходе из последнего резервуара. Модель может усложняться притоком внешнего вещества в некоторые резервуары – в этом случае сначала рассчитывается равновесные концентрации зависимых веществом, а затем – с веществом флюида (рис. 1). Равновесные концентрации зависимых



компонентов рассчитываются методом минимизации свободной энергии Гиббса.

Рис. 1. Схема массопереноса модели (проточный реактор).

Обозначения: МО – магматический очаг; P_1 , P_2 , P_N – физикохимические резервуары; Φ_H – исходный флюид, равновесный с веществом очага в его P-T условиях; Φ_K – конечный флюид на выходе из последнего резервуара; Φ_Π – привносимое в некоторый резервуар вещество (данный параметр опционален, в случае привноса вещества сначала рассчитывается равновесие резервуара с привнесенным веществом, а затем – с веществом флюида).

Для модели необходимы следующие исходные данные: температура, давление и химический состав вещества в магматическом очаге, химические составы каждого резервуара и P-T условия трассы движения флюида, заданные порезервуарно или функцией.

В качестве примера рассмотрим конкретную модель подъема магматического флюида на материале, полученном при изучении Северо-Парамуширской гидротермально-магматической системы.

За вещественную основу модели был принят химический состав пород в разрезе скважины ГП-3 по данным исследования шлама и керна [Рычагов и др., 2002]. Из данного состава в качестве независимых компонентов модели выбраны следующие элементы: Si, Al, Fe, Mg, Ca, Na, K, S, C, H и O. Добавлены рудные компоненты (Au, Ag, Hg, Cu, Pb, Zn, Sn) и Cl. Для последних взяты их кларковые содержания по А.Е. Ферсману [Справочник..., 1990]. Анализы по скважине даны для 22-х точек по глубине (от 64 до 2500 м), следовательно, были приняты 22 резервуара с нумерацией снизу вверх (в направлении движения флюида). Масса каждого резервуара принята равной 1 кг.

Состав первичного магматического флюида был рассчитан из равновесия чистой воды со справочным средним составом андезита [Богатиков и др., 1987] при 900°С и 772 бар, что в данных условиях соответствует глубине 3000 м. Пересчитанный на мольные количества равновесный состав 1 кг исходного магматического флюида приведен в таблице 1. В

резервуары с 20 по 22 (глубины 372 – 64 м) дополнительно вводился метеорный раствор, состав которого был усреднен из данных [Справочное..., 1979].

Таблица 1. Пересчитанный на мольные количества расчетный равновесный состав 1 кг исходного магматического флюида.

Компонент	Содержание, моль/кг флюида
Si	0,114816406220
Al	0,0000000018
Fe	0,000005850223
Ca	0,000000911932
Mg	0,00000000000
Na	0,034386311631
K	0,000030238862
S	0,016206240288
С	0,00000000000
Н	110,570228587112
0	55,513184696991
Cl	0,053491105747
Au	0,00000025312
Ag	0,000000925300
Hg	0,000000248800
Cu	0,000378416818
Pb	0,000077073933
Zn	0,003052783097
Sn	0,00000000316

Температуры резервуаров интерполировались полиномиальной интервальной регрессией из данных [Белоусов и др., 2002]. Расчетная геотерма по скважине показана на рис. 2. Литостатическое давление в резервуарах рассчитывалось исходя из принятой средней плотности пород 2,57 г/см³. Петрофизические свойства пород в разрезе скважины ГП-3 были любезно предоставлены С.Н. Рычаговым. В таблице 2 приведены глубины резервуаров, их Р-Т характеристики, а также пересчитанные на мольные количества содержания основных независимых компонентов.

Зависимые компоненты были отобраны из баз данных ПК «СЕЛЕКТОР». Это 170 конденсированных фаз (базы данных b_Berman.DB, s_RobieHemingway.DB, s_sprons98.DB), 155 компонентов водного раствора (база

данных а sprons98.DB) и 9 компонентов газовой фазы (база данных g sprons98.DB).

Таблица 2. Характеристики модельных резервуаров и мольные количества их независимых компонентов. Для рудных компонентов (Au, Ag, Hg, Cu, Pb, Zn, Sn) и хлора приняты их кларковые содержания.

Резервуар	Н, м	T, ℃	Р, бар	Si	Al	Fe	Mg	Ca	Na	Κ	S	С	Н	0
1	2500	580	643	8,48	3,25	0,73	1,84	0,75	0,80	0,46	0,93	-	3,17	30,42
2	2340	525	601	8,99	3,24	0,95	1,18	0,35	0,32	0,67	0,82	0,10	4,50	31,04
3	2130	475	547	8,68	3,41	1,14	1,41	0,35	0,90	0,43	0,66	-	4,09	30,45
4	2004	450	515	7,56	3,99	0,61	1,36	0,86	0,75	0,74	1,19	0,05	3,79	30,45
5	1998	449	513	6,50	4,17	1,28	1,36	0,51	0,73	0,84	1,23	-	5,70	30,16
6	1980	445	509	8,13	3,24	0,83	1,10	1,03	0,89	0,49	1,15	-	3,78	30,42
7	1740	385	447	8,33	3,57	1,28	1,26	0,87	0,90	0,38	0,42	0,05	3,96	29,81
8	1646	366	423	8,23	3,68	1,18	2,30	0,06	1,01	0,32	0,44	-	5,22	30,50
9	1643	365	422	8,71	3,55	1,18	1,93	0,00	0,63	0,82	0,35	0,05	3,97	30,12
10	1520	332	391	9,48	3,39	0,84	1,20	0,42	0,19	1,14	0,34	0,05	3,19	30,18
11	1446	315	372	8,97	3,73	1,23	0,30	0,23	0,08	1,00	0,51	-	6,51	31,02
12	1346	290	346	9,61	3,91	0,74	0,93	0,00	0,47	0,77	0,40	-	4,84	31,24
13	1310	280	337	9,10	3,14	1,45	0,27	0,26	0,09	0,92	0,50	-	7,51	31,13
14	1307	278	336	9,80	3,12	0,85	0,85	0,06	1,15	0,65	0,49	-	4,60	30,98
15	1202	256	309	9,89	3,45	0,82	0,03	0,35	0,84	0,51	0,54	-	5,52	31,50
16	1090	230	280	9,83	3,31	0,79	0,48	0,31	0,74	0,44	0,53	-	6,03	31,67
17	800	183	206	9,42	3,16	0,82	0,84	1,00	1,03	0,12	0,13	-	7,66	31,32
18	701	175	180	9,32	3,11	0,94	0,93	1,00	0,90	0,10	0,13	-	7,71	31,25
19	550	160	141	8,63	3,44	0,99	0,88	0,99	0,96	0,13	0,39	-	7,61	31,16
20	372	148	96	6,86	1,88	0,63	1,81	2,24	0,57	0,23	0,45	-	19,81	33,08
21	150	121	39	11,77	2,00	0,51	0,26	0,14	0,26	0,27	0,44	-	8,30	33,36
22	64	100	16	9,90	3,62	0,61	0,52	0,97	1,17	0,54	0,28	-	1,25	29,87

Модель была рассчитана для подъема 1 кг флюида. Расчет показал, что в резервуарах с 1 по 16 (глубины от 2500 до 1090 м) флюид находится только в газовой фазе, а начиная с 20 резервуара (глубины от 372 до 64 м) – только в жидкой. На глубинах от 800 до 550 метров (резервуары 17 – 19) обе фазы сосуществуют. Характерно, что первичный флюид массой 1 кг попадает в первый резервуар (глубина 2500 м), и, как видно из диаграммы (рис 3), его масса в следующем же резервуаре (2340 м) уменьшается на порядок, порода насыщается газами, в основном кислородом и соединениями серы. Состав газовой фазы резервуаров с 1 по 19 показан на рис. 4.

Σ





Рис. 2. Расчетная геотерма по скважине ГП-3. Интерполяция по данным [Белоусов и др., 2002].

Рис. 3. Расчетное изменение массы флюида (раствор + газ) по глубине. Маркерами показано расположение модельных резервуаров.



Рис. 4. Расчетное изменение содержания компонентов газовой фазы по глубине. Содержания даны в процентах от общей массы газовой фазы. Маркерами показано расположение модельных резервуаров.

Состав фазы раствора слишком сложен, чтобы приводить его здесь полностью. Расчет показал, что в резервуарах с 17 по 22 (глубины от 800 до 64 м) существуют ненулевые концентрации 110 зависимых компонентов. Покажем поведение наиболее характерных форм переноса веществ в растворе. Компоненты породообразующих элементов по поведению можно условно разделить на три группы.

Концентрация в растворе компонентов первой группы относительно высока на глубинах 800 – 700 м, а к поверхности уменьшается практически до полного отсутствия. Это справедливо для соединений кремния, железа в хлоридной форме, натрий и калия (рис. 5). Из рудных сюда можно отнести соединения золота, меди и ртути.

Ко второй группе отнесем компоненты с прямо противоположным поведением – их концентрации в растворе существенно возрастают к поверхности. Это соединения кальция, а из рудных – серебра, свинца и цинка (рис. 6).



Рис. 5. Расчетное изменение концентрации растворенного а) - SiO₂; б) - Ca⁺²; в) - HAlO₂ по глубине. Такое поведение характерно для компонентов *a*) -I группы; *б*) - II группы; *в*) - III группы. Маркерами показано расположение модельных резервуаров.

Третья группа характеризуется максимальными концентрациями на средних для раствора глубинах – от 600 до 200 м. Ниже и выше этого интервала их концентрации незначительны. Это алюминий, железо в свободной форме и магний, а из рудных элементов – олово (рис. 7).

Ненулевые равновесные минеральные концентрации в различных резервуарах характерны для 35 конденсированных фаз. Максимальные содержания основных минералов приведены в таблице 3. Отдельно рассмотрим рудные компоненты. Золото, серебро и ртуть значительных конденсированных фаз не образуют. Медь присутствует в виде халькопирита (интервал 372 – 64 м, до 0,031 масс. %), тенорита (интервал 1310 – 1090 м, до 0,015 масс. %), куприта (глубина 800 м, 0,011 масс. %) и халькозина (глубина 701 м, 0,012 масс. %). Единичное ненулевое содержание самородной меди зафиксировано на глубине 550 м. Цинк присутствует в виде цинкита (интервал 1646 – 550 м, до 0,029 масс. %) и сфалерита (интервал 372 – 64 м, до 0,042 масс. %). Олово на глубинах ниже 1300 м равновесно в самородном виде (до 0,009 масс. %), выше этой отметки – в виде касситерита (до 0,010 масс. %).

Фаза	Максимум, масс.%	Резервуар	Глубина, м
Кварц	64,19	21	150
Кордиерит	35,48	8	1646
Тремолит	34,39	20	372
КПШ	33,72	10	1520
Альбит	31,30	14	1307
Анортит	30,24	17	800
Флогопит	21,30	1	2500
Парагонит	15,25	22	64
Энстатит	12,92	8	1646
Гематит	12,88	13	1310
Шпинель	12,02	5	1998
Магнетит	11,68	5	1998
Цоизит	10,65	22	64
Каолин	10,27	21	150
Ангидрит	7,33	20	372
Мусковит	6,73	21	150
Диопсид	2,64	6	1980
Лейцит	0,63	19	550
Сильвин	0,44	16	1090
Галит	0,35	13	1310

Таблица 3. Максимальные расчетные содержания основных минералов модели после прохождения флюида по резервуарам.

В целом, расчет показал пригодность данной концепции для моделирования массопереноса и минералообразования в магматогенно-гидротермальных системах. Результаты достаточно хорошо соответствуют литературным и природным данным.

Работа выполнена при финансовой поддержке Президиумов СО и ДВО РАН, проект № 117 (09-II-CO-08-006).

Список литературы

Белоусов В.И., Рычагов С.Н., Сугробов В.М. Северо-Парамуширская гидротермально-магматическая конвективная система: геологическое строение, концептуальная модель, геотермальные ресурсы // Вулканология и сейсмология, 2002. № 1. С. 34 – 50.

Богатиков О.А., Косарева Л.В., Шарков Е.В. Средние химические составы магматических горных пород. М.: Недра, 1987. 152 с.

Васильев В.И., Жатнуев Н.С. Реализация модели распределения вещества и тепла при коллизии на языке СИ++ с привлечением ПК «СЕЛЕКТОР» // Геохимия и рудообразование радиоактивных, благородных и редких металлов в эндогенных и экзогенных процессах. Материалы Всероссийской конференции с иностранным участием, посвященной 50-летию СО РАН и 80-летию чл.-корр. РАН Ф.П. Кренделева, 16–18 апреля 2007 г. Часть 2. Улан-Удэ: Изд-во БНЦ СО РАН, 2007. С. 119 – 121.

Рычагов С.Н., Белоусов В.И., Главатских С.Ф., Ладыгин В.М., Сандимирова Е.И. Северо-Парамуширская гидротермально-магматическая система: характеристика глубокого геологического разреза и модель современного минералорудообразования в ее недрах. // Вулканология и сейсмология, 2002. № 4. С. 3 – 21.

Справочник по геохимии / Войткевич Г.В., Кокин А.В., Мирошников А.Е., Прохоров В.Г. М.: Недра, 1990. 480 с.

Справочное руководство гидрогеолога. Т.1 / Максимов В.М., Бабушкин В.Д. и др. Ленинград: Недра, 1979. 512 с.

Чудненко К.В. Селектор-Windows: программное средство расчета химических равновесий минимизацией термодинамических потенциалов. Иркутск: ИГХ СО РАН. 2005. 97 с.