

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

© 2010 г. В. И. Васильев*, Н. С. Жатнуев*, С. Н. Рычагов**, Е. В. Васильева*, Г. Д. Санжиев*

*Геологический институт СО РАН
670047, г. Улан-Удэ, ул. Сахьяновой, 6а
E-mail: vasil@gin.bscnet.ru

**Институт вулканологии и сейсмологии ДВО РАН
683006, г. Петропавловск-Камчатский, бульв. Пийпа, 9

Поступила в редакцию 12.04.2010 г.

На основе программного комплекса “Селектор” и авторской методики моделирования разработана базовая компьютерная физико-химическая модель массопереноса и минералообразования в магматогенно-гидротермальных системах. Базовая модель представляет собой проточный физико-химический реактор с конечным числом резервуаров, каждый из которых имеет собственный химический состав, температуру и давление. Рассчитанный первично равновесный магматический флюид (водный раствор + газ) фильтруется через систему резервуарных субстанций до достижения термодинамического равновесия. Проточный реактор может быть усложнен подачей внешнего флюида в некоторые резервуары. Базовая модель была успешно применена для компьютерного моделирования физико-химических процессов в Северо-Парамуширской магматогенно-гидротермальной системе с 22 резервуарами. Поведение более чем 150 взаимосвязанных компонентов (включая конденсированные фазы, компоненты водных растворов и газы) были определены с высокой точностью.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, физико-химическое моделирование, магматогенно-гидротермальные системы, Северо-Парамуширская гидротермально-магматическая система.

Актуальность проблемы выяснения параметров магматогенно-гидротермальных систем вулканических областей, как современных зон интенсивного рудообразования, несомненна. Для получения корректных результатов необходимо представлять не только качественную картину строения и химической эволюции таких систем, но и иметь физико-химически и математически обоснованные количественные отношения P - T -условий и равновесных концентраций в минеральных парагенезисах этих областей. На сегодняшнем этапе геохимических исследований такую количественную базу можно получить только путем численного моделирования.

На основе программного комплекса “Селектор” [7] и авторской методики моделирования [3] разработана базовая компьютерная физико-химическая модель массопереноса и минералообразования в магматогенно-гидротермальных системах. Базовая модель представляет собой проточный физико-химический реактор с расчетным начальным равновесным магматическим флюидом, который в процессе линейного движения просачивается через конечное число физико-химических резервуаров, каждый из которых имеет собственный химический состав, температуру и давление (рис. 1). “Флюидом” в данной работе будем называть группу подвижных фаз “раствор + газ”. При отсутствии

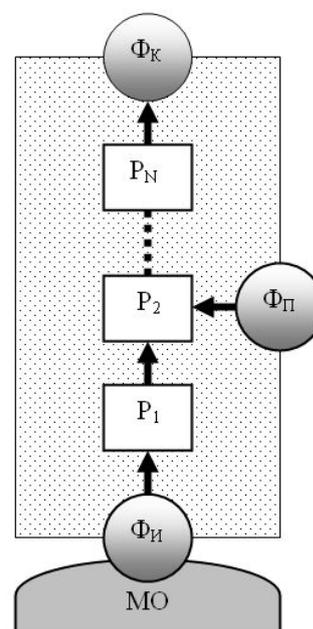


Рис. 1. Схема массопереноса модели (проточный реактор).

МО – магматический очаг; P_1, \dots, P_N – физико-химические резервуары; $\Phi_{И}$ – исходный флюид, равновесный с веществом очага в его P - T условиях; $\Phi_{К}$ – конечный флюид на выходе из последнего резервуара; $\Phi_{П}$ – приносимое в некоторый резервуар вещество.

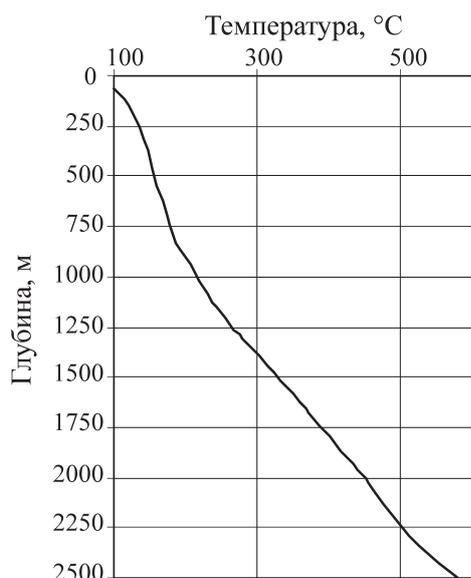


Рис. 2. Расчетная геотерма по скважине ГП-3. Интерполяция по данным [1].

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 равновесие резервуара с привнесенным веществом, а затем – с веществом флюида (рис. 1). Равновесные концентрации зависимых компонентов рассчитываются методом минимизации свободной энергии Гиббса.

Для модели необходимы следующие исходные данные: температура, давление и химический состав вещества в магматическом очаге, химические составы каждого резервуара и *PT*-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, подробно описанного в статье с участием одного из соавторов [1]. Из данного состава в качестве независимых компонентов модели выбраны: кремний, алюминий, железо, магний, кальций, натрий, калий, сера, углерод, водород и кислород. Добавлены рудные компоненты (золото, серебро, ртуть, медь, свинец,

Таблица 1. Расчетный равновесный состав 1 кг исходного магматического флюида

Компонент	Содержание, моль/кг флюида
Si	0.114816406220
Al	0.000000000018
Fe	0.000005850223
Ca	0.000000911932
Mg	0.000000000000
Na	0.034386311631
K	0.000030238862
S	0.016206240288
C	0.000000000000
H	110.570228587112
O	55.513184696991
Cl	0.053491105747
Au	0.000000025312
Ag	0.000000925300
Hg	0.000000248800
Cu	0.000378416818
Pb	0.000077073933
Zn	0.003052783097
Sn	0.000000000316

цинк, олово) и хлор. Для последних взяты их кларковые содержания [5]. 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 [2] при 900°C и 772 бар, что в данных условиях соответствует глубине 3000 м. Пересчитанный на мольные количества равновесный состав 1 кг исходного магматического флюида приведен в табл. 1. В резервуары с 20 по 22 (глубины 372–64 м) дополнительно вводился метеорный раствор, состав которого был усреднен из данных [6].

Температуры резервуаров интерполировались полиномиальной интервальной регрессией из данных [1, 4]. Расчетная геотерма по скважине показана на рис. 2.

Литостатическое давление в резервуарах рассчитывалось, исходя из принятой средней плотности пород 2.57 г/см³. В табл. 2 приведены глубины резервуаров, их *PT*-характеристики и 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 a_sprons98.DB) и 9 компонентов газовой фазы (база данных g_sprons98.DB).

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

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

Резервуар	H, м	T, °C	P, бар	Si	Al	Fe	Mg	Ca	Na	K	S	C	H	O
1	2500	580	643	8.48	3.25	0.73	1.84	0.75	0.80	0.46	0.93	0.00	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	0.00	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	0.00	5.70	30.16
6	1980	445	509	8.13	3.24	0.83	1.10	1.03	0.89	0.49	1.15	0.00	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	0.00	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	0.00	6.51	31.02
12	1346	290	346	9.61	3.91	0.74	0.93	0.00	0.47	0.77	0.40	0.00	4.84	31.24
13	1310	280	337	9.10	3.14	1.45	0.27	0.26	0.09	0.92	0.50	0.00	7.51	31.13
14	1307	278	336	9.80	3.12	0.85	0.85	0.06	1.15	0.65	0.49	0.00	4.60	30.98
15	1202	256	309	9.89	3.45	0.82	0.03	0.35	0.84	0.51	0.54	0.00	5.52	31.50
16	1090	230	280	9.83	3.31	0.79	0.48	0.31	0.74	0.44	0.53	0.00	6.03	31.67
17	800	183	206	9.42	3.16	0.82	0.84	1.00	1.03	0.12	0.13	0.00	7.66	31.32
18	701	175	180	9.32	3.11	0.94	0.93	1.00	0.90	0.10	0.13	0.00	7.71	31.25
19	550	160	141	8.63	3.44	0.99	0.88	0.99	0.96	0.13	0.39	0.00	7.61	31.16
20	372	148	96	6.86	1.88	0.63	1.81	2.24	0.57	0.23	0.45	0.00	19.81	33.08
21	150	121	39	11.77	2.00	0.51	0.26	0.14	0.26	0.27	0.44	0.00	8.30	33.36
22	64	100	16	9.90	3.62	0.61	0.52	0.97	1.17	0.54	0.28	0.00	1.25	29.87

газовой фазе, а начиная с 20-го резервуара (глубины от 372 до 64 м) – только в жидкой. На глубинах от 800 до 550 метров (резервуары 17–19) обе фазы сосуществуют.

Первичный флюид массой 1 кг попадает в первый резервуар (глубина 2500 м), его масса в следующем резервуаре (2340 м) уменьшается на порядок (рис. 3), порода насыщается газами, в основном кислородом и соединениями серы. Состав газовой фазы резервуаров со 2 по 20 показан на рис. 4.

Состав фазы раствора слишком сложен, чтобы приводить его здесь полностью. Расчет показал, что в резервуарах с 17 по 22 (глубины 800–64 м) существуют ненулевые концентрации 110 компонентов раствора. Покажем поведение наиболее характерных форм переноса веществ в растворе. Зависимые 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, натрия 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).

Третья группа характеризуется “скачковым” поведением. Концентрации соединений алюминия,

железа в свободной форме и магния имеют максимальные концентрации на средних для раствора глубинах – от 500 до 100 м. Ниже и выше этого интервала их концентрации незначительны. Такие соединения, как хлорид натрия и серебро в хлоридной форме, напротив, имеют концентрационный минимум на средних глубинах (700–300 м). Особ-

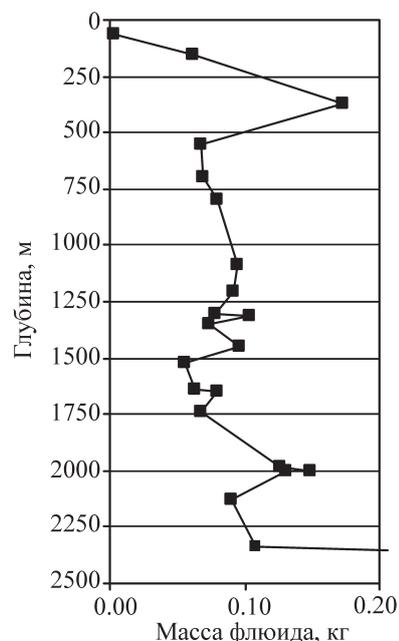


Рис. 3. Расчетное изменение массы флюида (раствор + газ) по глубине.

Здесь и далее на рис. 4–8 маркерами показано расположение модельных резервуаров.

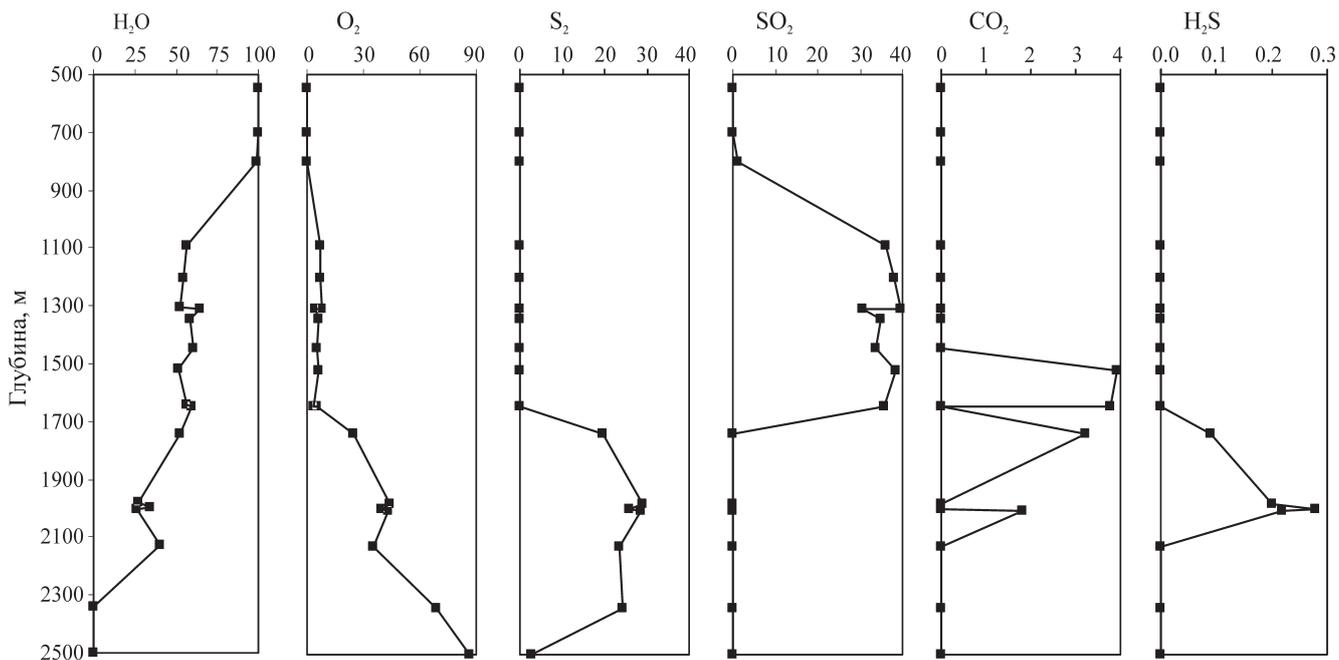


Рис. 4. Расчетное изменение содержания (мас. %) компонентов газовой фазы по глубине.

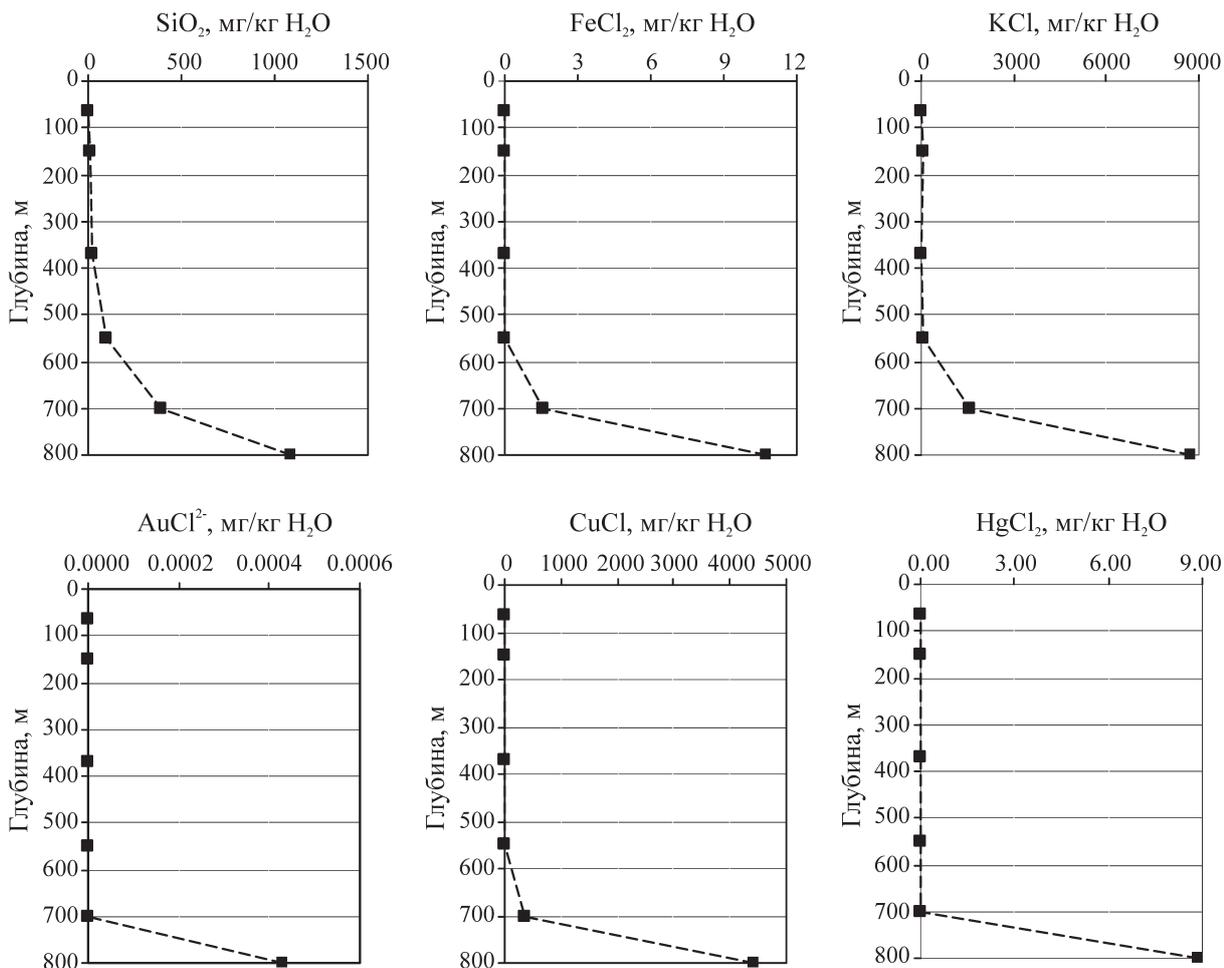


Рис. 5. Расчетное поведение некоторых зависимых компонентов раствора I группы.

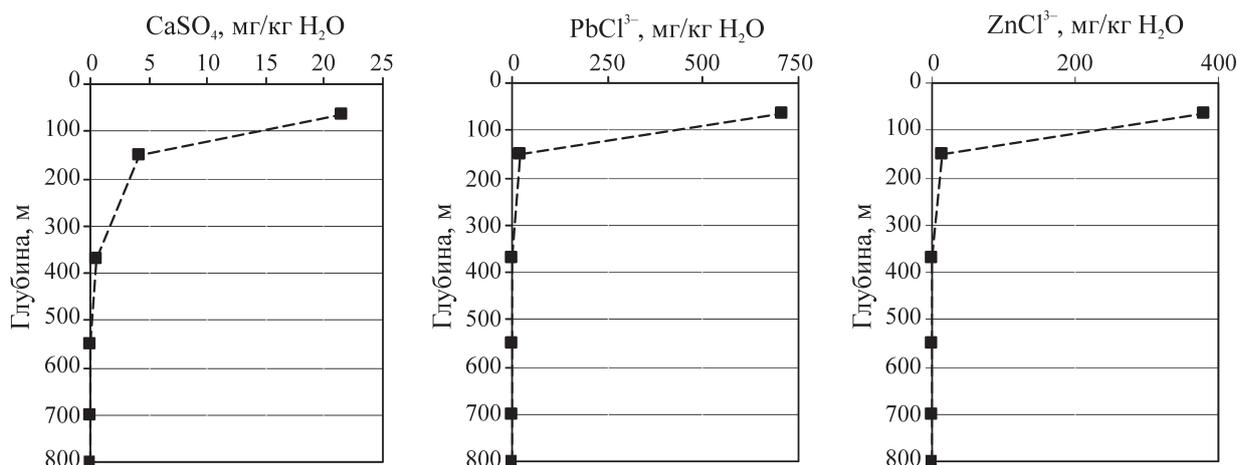


Рис. 6. Расчетное поведение некоторых зависимых компонентов раствора II группы.

няком в этой группе стоит оксид олова – диаграмма его концентрации имеет два максимума: в 18-м и 20-м резервуарах (рис. 7).

Ненулевые равновесные минеральные концентрации в различных резервуарах характерны для 35 конденсированных фаз. Для каждой фазы были по-

строены диаграммы концентраций на всем протяжении проточного реактора. На рис. 8 приведены диаграммы концентраций отдельных минеральных фаз: альбита, анортита, калиевого полевого шпата, энстатита, гематита и суммарной концентрации минералов кремнезема (α - и β -кварца, тридимита).

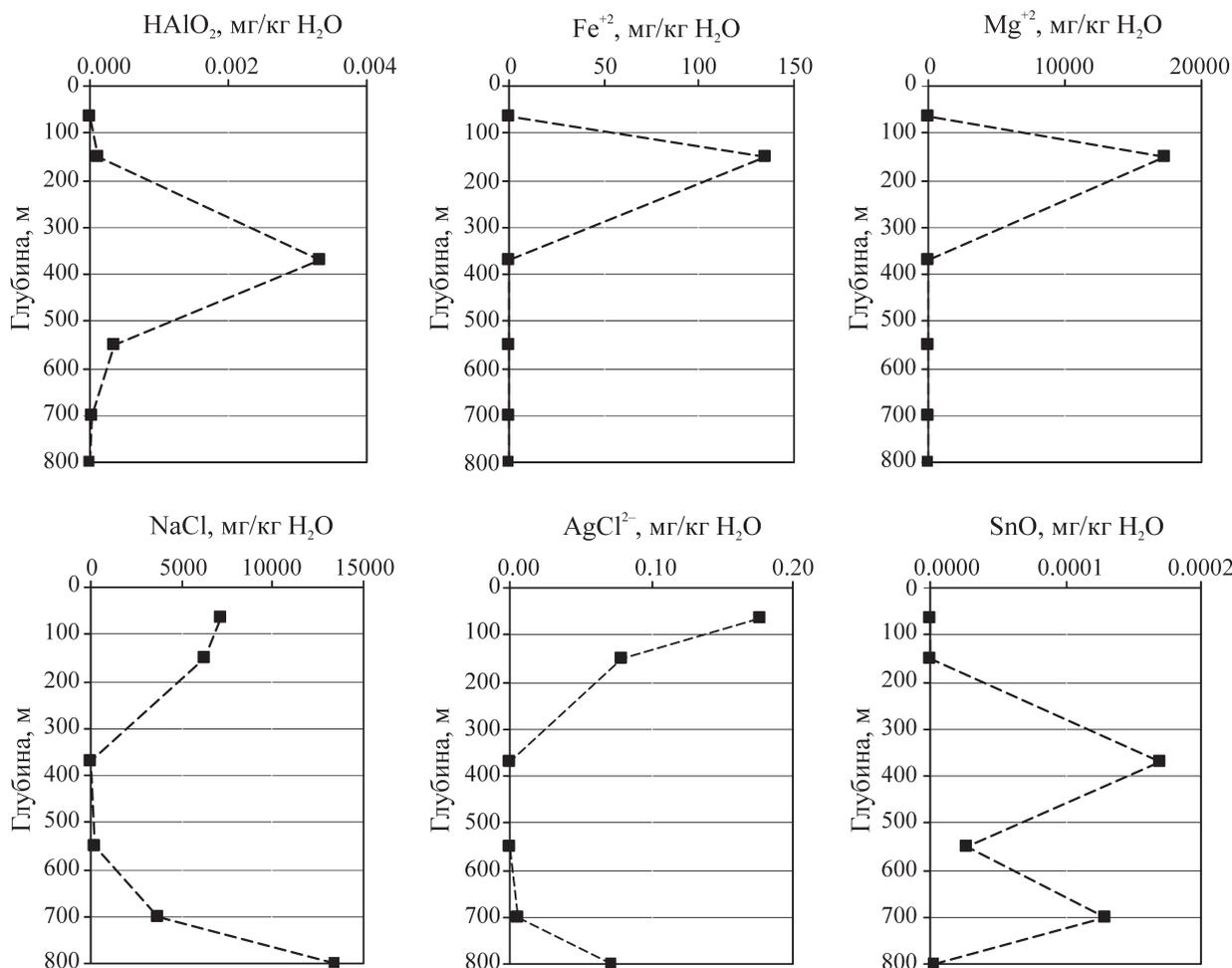


Рис. 7. Расчетное поведение некоторых зависимых компонентов раствора III группы.

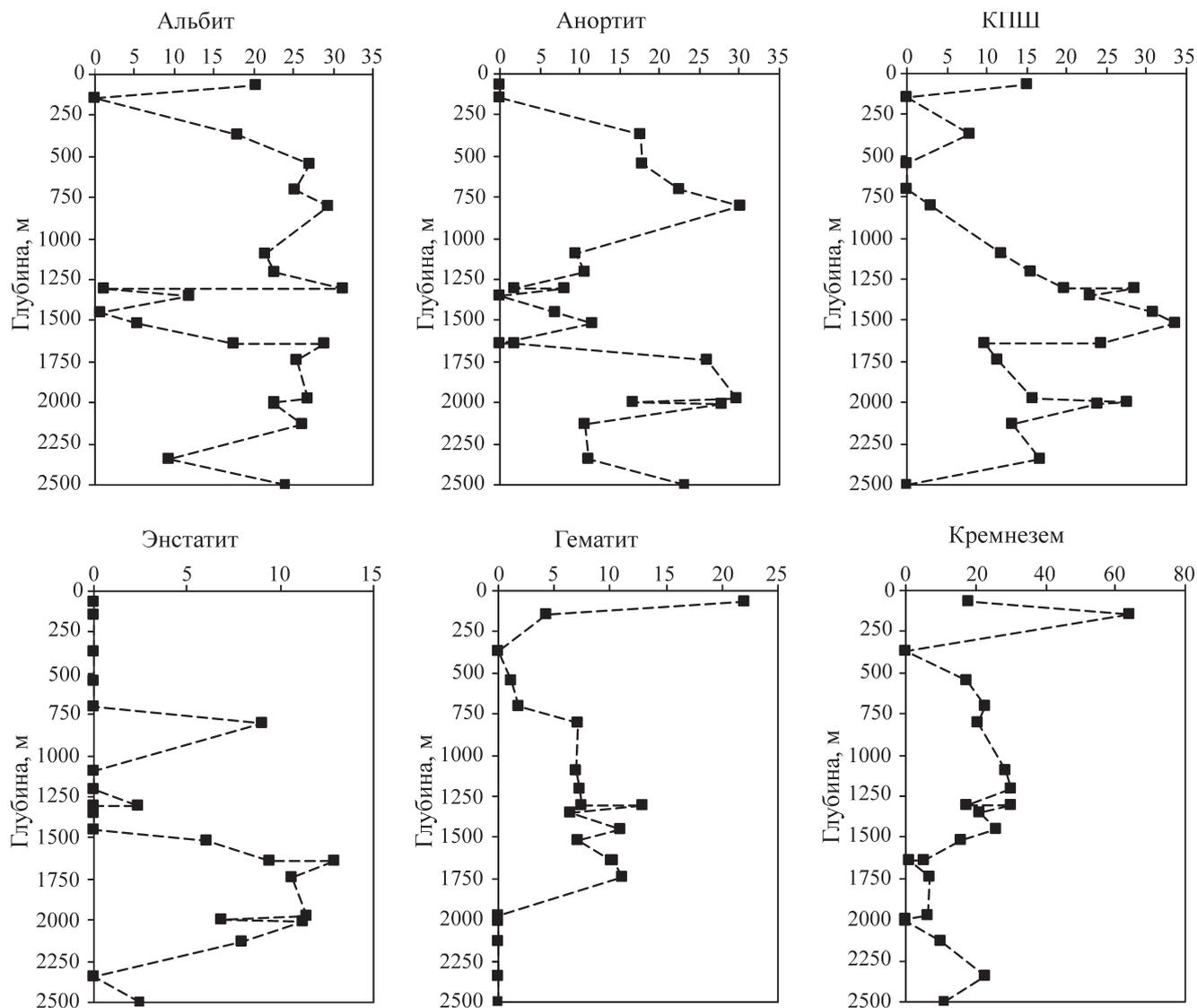


Рис. 8. Расчетная зависимость содержания (мас. %) некоторых конденсированных фаз от глубины.

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 мас. %), тенорита (интервал 1310–1090 м, до 0.015 мас. %), куприта (глубина 800 м, 0.011 мас. %) и халькозина (глубина 701 м, 0.012 мас. %). Единичное ненулевое содержание самородной меди зафиксировано на глубине 550 м. Цинк присутствует в виде цинкита (интервал 1646–550 м, до 0.029 мас. %) и сфалерита (интервал 372–64 м, до 0.042 мас. %). Олово на глубинах ниже 1300 м равномерно в самородном виде (до 0.009 мас. %), выше этой отметки – в виде касситерита (до 0.010 мас. %).

В целом, расчет показал пригодность данной концепции для моделирования массопереноса и минералообразования в магматогенно-гидротермальных системах. Полученные результаты непротиворечивы и доступны для интерпретации в терминах ме-

тодики комплексного компьютерного моделирования геологических объектов [3].

За счет разбиения мегасистемы пути подъема флюида на достаточное количество подсистем (резервуаров) на геометрическом этапе была достигнута значительная описательная корректность модели. Каждый резервуар соответствовал интервалу движения флюида на протяжении не более, чем 120 м, что в масштабах всей системы (2500 м) можно считать вполне удовлетворительным.

Использование программного комплекса “Селектор” [7], отвечающего лучшим современным стандартам программного обеспечения термодинамического моделирования, гарантировало высокое значение функциональной корректности на физико-химическом этапе моделирования. Подведена серьезная вещественная основа для дальнейших исследований в этой области: создана база данных, включающая равновесные минеральные ассоциации с раствором и

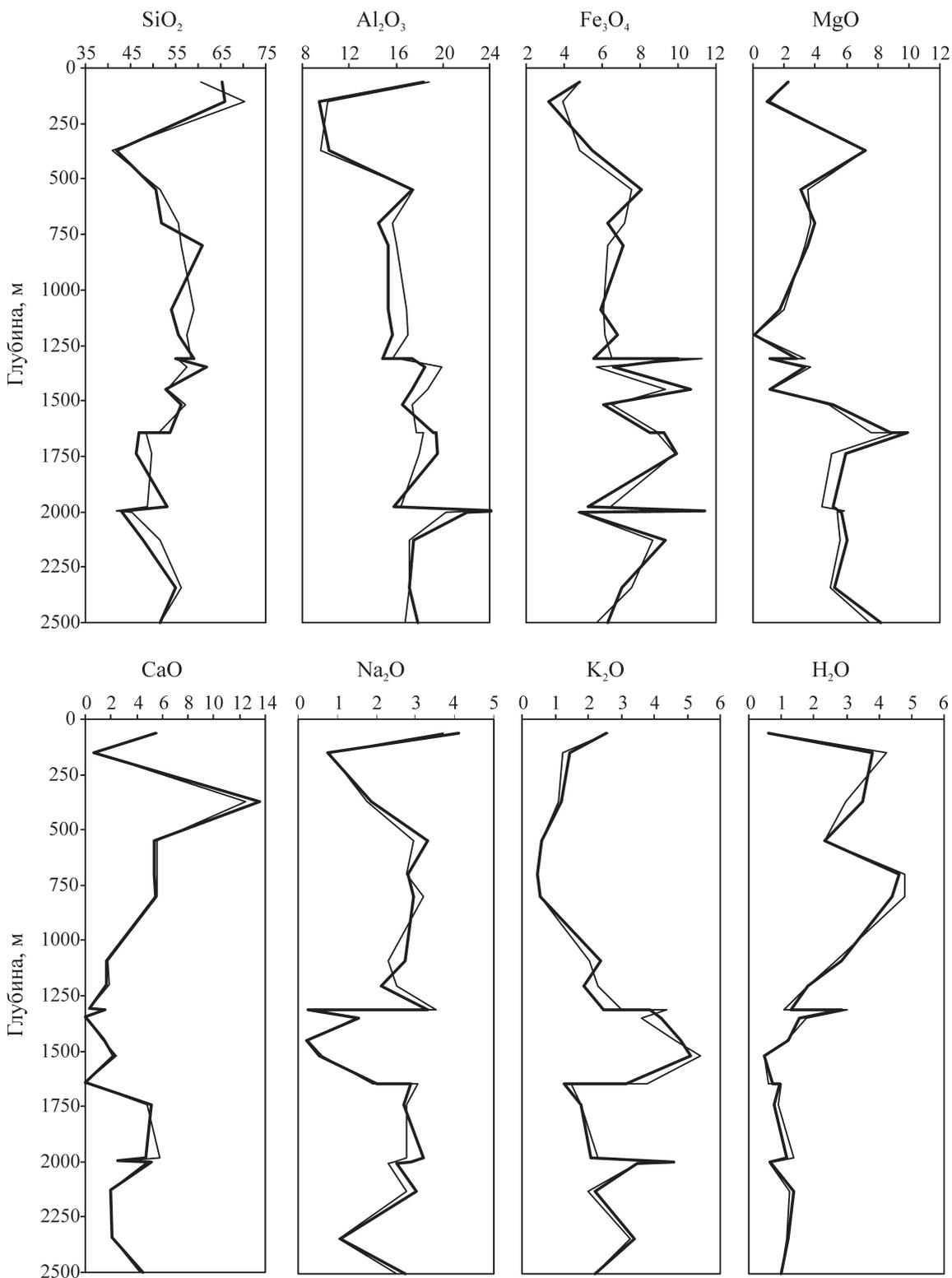


Рис. 9. Диаграммы пересчитанных на оксиды химических составов (мас. %) по глубине.

Природные составы – тонкая линия, расчетные – жирная линия.

газовой фазой для 154 зависимых компонентов, рассчитанные независимо от частных геологических предпочтений по строгим физико-химическим законам, исходя из наиболее общих исходных данных.

Концепция базовой модели, включающая принос внешних подвижных фаз в систему подъема магматического флюида, а также учет изменения количества переносимого вещества при взаимо-

действию резервуаров обеспечили корректную динамику модели.

Наконец, показателем общей корректности модели может служить сравнение исходных данных силикатного анализа проб в скважине ГП-3 [4] с расчетными данными по равновесному минеральному составу, также пересчитанному на оксиды. Результаты такого сравнения приведены на рис. 9 в виде диаграмм “глубина–содержание оксида”, где тонкой линией показаны исходные содержания, а жирной – расчетные. Максимальная невязка расчета химического состава не превышает 3.98 мас. % для кремнезема, 2.37 мас. % – для глинозема и 0.94 мас. % – для остальных оксидов.

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 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.
2. Богатиков О.А., Косарева Л.В., Шарков Е.В. Средние химические составы магматических горных пород. М.: Недра, 1987. 152 с.
3. Васильев В.И., Чудненко К.В., Жатнуев Н.С., Васильева Е.В. Комплексное компьютерное моделирование геологических объектов на примере разреза зоны субдукции // Геоинформатика. 2009. № 3. С. 15–30.
4. Рычагов С.Н., Белоусов В.И., Главатских С.Ф. и др. Северо-Парамуширская гидротермально-магматическая система: характеристика глубокого геологического разреза и модель современного минералогического разреза в ее недрах // Вулканология и сейсмология. 2002. № 4. С. 3–21.
5. Справочник по геохимии / Войткевич Г.В. и др. М.: Недра, 1990. 480 с.
6. Справочное руководство гидрогеолога. Т. 1. / Максимов В.М. и др. Ленинград: Недра, 1979. 512 с.
7. Чудненко К.В. Селектор-Windows: программное средство расчета химических равновесий минимизацией термодинамических потенциалов. Иркутск: ИГХ СО РАН, 2005. 97 с.

Рецензент В.В. Мурзин

Mass-transfer and mineral formation in magmatogene-hydrothermal systems by numerical physical-chemical modeling result

V. I. Vasiliev*, N. S. Zhatnuev*, S. N. Rychagov**, E. V. Vasilieva*, G. D. Sanzhiev*

**Geological Institute, Siberian Branch of RAS*

***Institute of Volcanology and Seismology, Far Eastern Branch of RAS*

On basis of known program complex “Selektor” and author’s modeling methods, the basic physical-chemical computer model of mass-transfer and mineral formation in magmatogene-hydrothermal systems has been elaborated. The model includes the flowing physical-chemical reactor with the finite set of reservoirs, with each of them having its own chemical composition, temperature and pressure. The calculated initial equilibrium magmatic fluid (aqueous solution + gas) filters through the set of reservoirs interacting with reservoirs’ substance until thermodynamic equilibrium is established. The flow reactor can be complicated by inflow of external fluid into some reservoirs. The basic model has been successfully applied for the computer simulation of physical-chemical processes in North-Paramushir magmatogene-hydrothermal system with 22 modeling reservoirs. The behavior of more than 150 dependent components (including condensed phases, aqueous solution components and gases) has been strictly defined.

Key words: computer simulation, physical-chemical modeling, magmatogene-hydrothermal systems, North-Paramushir hydrothermal-magmatic system.