

Моделирование времен формирования Fo-Ni неоднородностей на примере оливинов Авачинского вулкана

Гордейчик Б.Н.^{1,2}, Чурикова Т.Г.², Муравьев Я.Д.², Кронц А.³, Вёрнер Г.³

Modeling the formation times of Fo-Ni nonuniformities: an example of Avacha volcano olivine crystals

Gordeychik B.N., Churikova T.G., Muravyev Ya.D., Kronz A., Wörner G.

¹ *Институт экспериментальной минералогии РАН, г. Черноголовка;*

e-mail: gordei@mail.ru

² *Институт вулканологии и сейсмологии ДВО РАН, г. Петропавловск-Камчатский*

³ *Geowissenschaftliches Zentrum Göttingen, Abteilung Geochemie, Universität Göttingen, Göttingen, Germany*

Кратко изложен комплекс моделей для определения времен формирования Fo-Ni неоднородностей (диффузионной хронометрии) в оливине. Приводятся результаты моделирования на примере оливинов Авачинского вулкана.

Введение

Оливин является одним из первых кристаллизующихся минералов в эволюционирующем силикатном расплаве. При изменении состава расплава и/или термодинамических условий состав растущего кристалла изменяется, и по изменению состава кристалла от ядра к краю можно проследить его эволюцию от зарождения до извержения на поверхность. Реконструкция истории кристаллов оливина на основе диффузионной хронометрии требует подгонки решения диффузионных уравнений к измеренным концентрациям элементов [5]. Кратко изложим используемую для этого последовательность физической, математической и численной моделей.

Физическая модель

Рассматриваются две простые физические ситуации: диффузия на краю кристалла с начальной постоянной концентрацией некоторого компонента (Fo или Ni) и диффузия внутри кристалла, изначально состоящего из двух частей, каждая со своей начальной постоянной концентрацией компонента. Как край кристалла, так и граница контакта между частями кристалла предполагаются плоскими с перпендикулярным профилем из измеренных точек, поэтому ниже рассматривается одномерная геометрия. Пространственно однородные значения компонентов вокруг моделируемой зоны используются в качестве начальных условий, они же используются и как граничные условия. Концентрация компонента на краю кристалла интерпретируется как равновесное значение и также используется как граничное условие. Положение границы между частями кристалла обычно соответствует точке максимального градиента Fo и/или Ni. В случае несовпадения положений максимального градиента Fo и Ni предпочтение отдается Ni, так как деформация и искажение профиля Ni происходят медленнее из-за меньшего коэффициента диффузии. Анизотропные коэффициенты диффузии зависят как от термодинамических параметров – давления, температуры, фугитивности (P - T - fO_2), так и от состава оливина (Fo). По возможности использовались внешние термодинамические условия для моделируемой зоны: при моделировании диффузии внутри ядра кристалла использовались P - T - fO_2 условия для обрастания кристалла; при моделировании диффузии в обрастании кристалла использовались P - T - fO_2 условия для краевой части кристалла.

Математическая модель

Математические уравнения, описывающие диффузию Fo-Ni, имеют вид законов сохранения:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_c^{pr} \frac{\partial C}{\partial x} \right), \quad (1)$$

где x – координата вдоль профиля, t – время, C – компонент, для которого записано уравнение, то есть, либо Fo – количество магния, измеряемое в мол. %, либо NiO , измеряемое в мас. %, D_C^{pr} – коэффициент диффузии компонента вдоль профиля с учетом ориентации кристалла [1, 2, 4, 8]

$$D_C^{pr} = D_C^a \cos^2 \alpha + D_C^b \cos^2 \beta + D_C^c \cos^2 \gamma, \quad (2)$$

где D_C^a , D_C^b , и D_C^c – коэффициенты диффузии вдоль главных кристаллографических осей, а α , β , и γ – углы между направлением профиля и главными осями. Анизотропные свойства Fo и Ni аналогичны и выражаются соотношениями [2, 4]:

$$D_C^a = D_C^b = D_C^c / 6. \quad (3)$$

Если положение границы кристалла или положение границы контакта между однородными частями кристалла равно x_b , то начальные условия для обеих физических ситуаций формулируются единообразно:

$$C = \begin{cases} C_l, & x_l \leq x \leq x_b \\ C_r, & x_b \leq x \leq x_r \end{cases} \quad (4)$$

где x_l и x_r левая и правая границы рассматриваемой области, C_l и C_r – начальные значения компоненты слева и справа от границы контакта. Граничные условия слева и справа также имеют значения C_l и C_r , соответственно. При моделировании диффузии на краю кристалла, например, на левом краю, значения x_l и x_b совпадают, а C_l следует интерпретировать как равновесное значение компоненты на левом краю кристалла.

Коэффициент диффузии для Fo рассчитывался по [2, стр. 617]:

$$D_{Fo}^c = 10^{-9.21} \left(\frac{fO_2}{10^{-7}} \right)^{\frac{1}{6}} 10^{3(0.9 - \frac{Fo}{100})} \exp \left(- \frac{201000 + (P - 10^5) \cdot 7 \cdot 10^{-6}}{RT} \right), \quad (5)$$

а для Ni по [2, стр. 618]:

$$D_{Ni}^c = 3.84 \cdot 10^{-9} \left(\frac{fO_2}{10^{-6}} \right)^{\frac{1}{4.25}} 10^{1.5(0.9 - \frac{Fo}{100})} \exp \left(- \frac{220000 + (P - 10^5) \cdot 7 \cdot 10^{-6}}{RT} \right), \quad (6)$$

где fO_2 – фугитивность и P – давление в Паскалях, T – температура в Кельвинах, коэффициенты диффузии D_C^c и универсальная газовая постоянная R измеряются в системе единиц СИ.

Уравнения (5) и (6) показывают, что решение уравнения (1) для NiO никак не влияет на решение уравнения для Fo ; поэтому систему уравнений диффузии (1) можно решать последовательно относительно Fo и Ni : сначала решается уравнение для Fo , а затем при известной зависимости $Fo(x, t)$ решается уравнение для NiO . Отметим, что зависимость коэффициентов диффузии от $Fo(x, t)$ обеспечивает нелинейные свойства уравнениям (1). Это обстоятельство требует численного решения уравнений диффузии.

Численная модель

Разработан шаблон таблицы Excel для расчета временных масштабов диффузии Fo и Ni . Входными данными являются угловые данные об ориентации кристаллов, полученные методом EBSD, а также термодинамические параметры, полученные минеральными окситермомбарометрами. Координаты введенных точек измерения корректируются по алгоритму [3], так как в процессе измерения некоторые точки отклонялись от прямой из-за трещин, различного рода включений и других дефектов кристалла. Если две точки находятся очень близко друг к другу, тогда либо одна из них отбрасывается, либо две точки объединяются в одну с осреднением, чтобы шаг по времени не уменьшался существенным образом.

Явная консервативная конечно-разностная схема [7] является разностным аналогом уравнения диффузии

$$C_i^{n+1} = C_i^n + \tau \frac{\left(\Phi_{i-\frac{1}{2}}^c - \Phi_{i+\frac{1}{2}}^c \right)}{v_i}, \quad (7)$$

где C_i^n – значение компонента в ячейке i на временном слое n , τ – временной шаг между слоем n и $n + 1$, $v_i = (x_{i+1} - x_{i-1})/2$ – размер ячейки i , $\Phi_{i+\frac{1}{2}}^C$ – поток компонентов между ячейками i и $i + 1$, то есть разностный аналог закона Фика:

$$\Phi_{i+\frac{1}{2}}^C = -D_{i+\frac{1}{2}}^C \cdot \frac{C_{i+1}^n - C_i^n}{x_{i+1} - x_i}, \quad (8)$$

где $D_{i+\frac{1}{2}}^C = (D_i^C + D_{i+1}^C)/2$ – усредненный коэффициент диффузии по соседним ячейкам.

Коэффициент диффузии D_i^C для компоненты C вычисляется по (5) или (6).

Конечно-разностная схема устойчива при временном шаге $\tau < (v_i)^2/2D_i^C$ [7].

Расчет выполняется в два этапа. На первом этапе необходимо определить границы расчетной области, выбрать начальное положение границы x_b , и задать значения F_{O_l} и F_{O_r} . В результате расчета будет определено время, при котором численное решение F_0 наилучшим образом соответствует измеренным данным. Сумма квадратов разностей между численным решением и измеренными точками используется в качестве критерия наилучшего решения. На этом этапе значения x_b , F_{O_l} , и F_{O_r} могут быть скорректированы и наилучшим образом подобраны. На втором этапе выбираются значения NiO_l и NiO_r , и находится время, при котором численное решение для Ni наилучшим образом соответствует измеренным данным.

Результаты моделирования

Модели применялись к анализу структуры неоднородных оливинов из пород Авачинского вулкана (таблица).

Таблица. Использованные образцы.

Объект	Образец	Оливины, шт.	Время подъема, дни	Время пребывания, дни
Конус Попович	AVA-17-06	3	1-17	21-386
Конус Страж	AVA-17-08	4	5-45	12-190
Авачит	AVA-14-01	9	Время остывания: 200-11 000	

Оливины из пород двух Авачинских конусов оказались весьма схожи между собой по внутренней структуре: ядра окружены обрастаниями от расплавов, вынесших оливины на поверхность, приблизительно такая же структура наблюдалась в оливинах маара Шивелуча 7600 ВР [6]. В ядрах F_0 и Ni изменяются плавно, а в обрастаниях имеют крутые градиенты на внутренней границе обрастание-ядро и на внешней границе каждого кристалла (рисунок). Внутренние ядра имеют как прямую зональность, когда форстерит и никель уменьшаются по направлению к краю, так и обратную, когда форстерит и никель увеличиваются к краю кристалла. Такое поведение свидетельствует о контрастных составах расплавов в магматической камере, неравновесных с попавшими в них оливинами. Характерные времена пребывания оливинов в неравновесном составе варьируют от 21 до 386 дней для конуса Попович, и от 12 до 190 дней для конуса Страж. Времена подъема оливинов, то есть их выноса на поверхность несущим расплавом варьирует от 1 до 17 дней для конуса Попович, и от 5 до 45 дней для конуса Страж.

Концентрации элементов в оливинах авачитов плавно изменяются от ядра к краю (рисунок). Времена действия диффузии в оливинах авачитов оказались заметно больше, чем для конусов, 200-11 000 дней. Длительные времена действия диффузии в оливинах авачитов свидетельствуют об интрузивном происхождении пород и их медленном остывании.

Полевые работы и лабораторные измерения проводились в рамках НИР № FWME-2024-0009, модели разрабатывались в рамках НИР № FMUF-2022-0004.

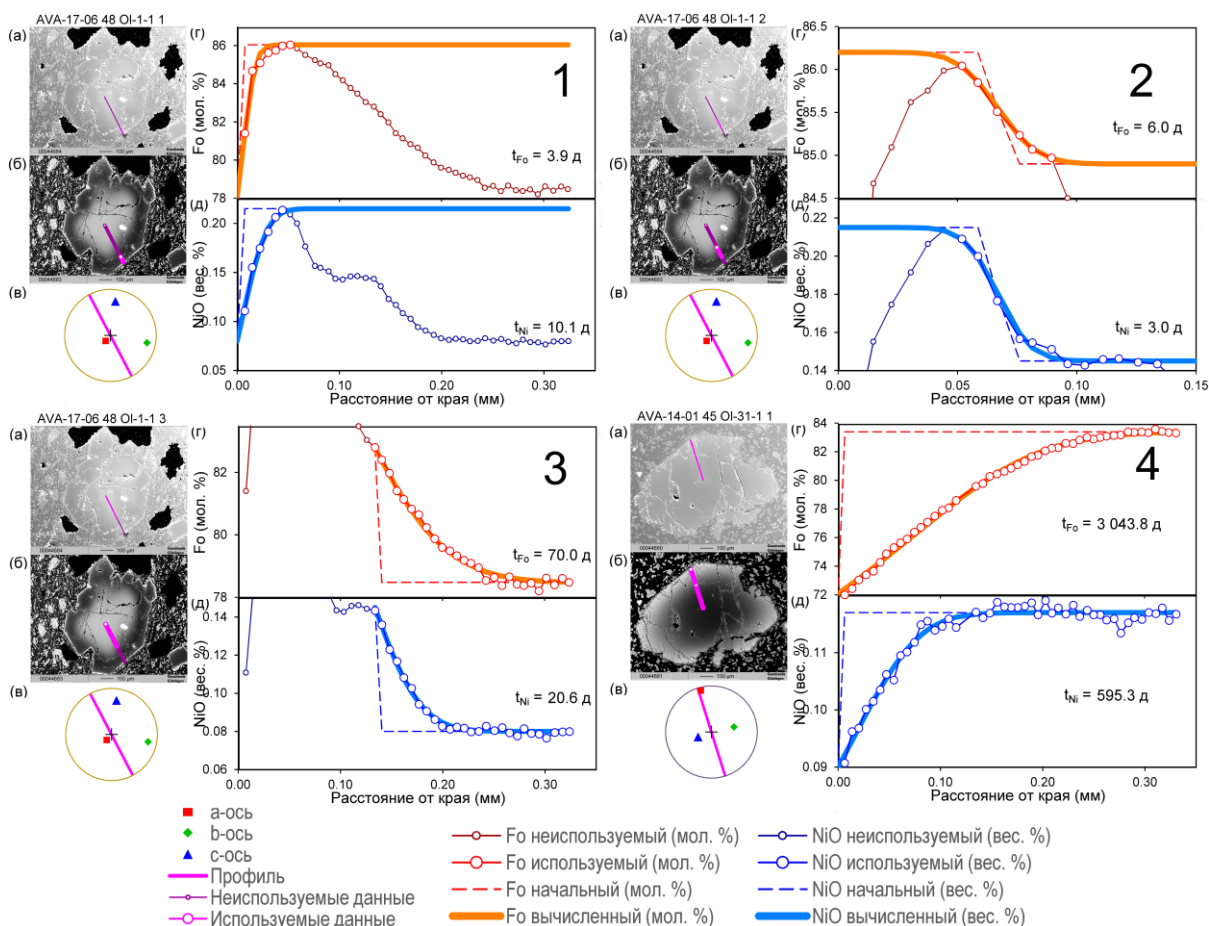


Рисунок. Характерный оливин Авачинских конусов: краевая зона – 1, обрастание – 2, ядро – 3. Характерный оливин авачита – 4. Изображение во вторичных электронах (а) показывает оливин и измеренный профиль. Изображение в обратно рассеянных электронах (б) показывает распределение атомного веса по оливину и положение использованных и неиспользованных в расчете точек. Стереографический график нижней полусферы (в) отображает проекции профиля и кристаллографических осей а, b и с. Графики Fo (г) и NiO (д) показывают измерения, используемые и неиспользуемые в расчетах, в также начальные данные и результаты моделирования.

Список литературы

1. *Carlslaw H.S., Jaeger J.C.* Conduction of Heat in Solids. Second edition. Oxford: Clarendon Press, 1959. 520 p.
2. *Chakraborty S.* Diffusion coefficients in olivine, wadsleyite and ringwoodite // *Reviews in Mineralogy and Geochemistry*. 2010. Vol. 72, Is. 1. P. 603-639. <https://doi.org/10.2138/rmg.2010.72.13>
3. *Chernov N.* Circular and Linear Regression: Fitting Circles and Lines by Least Squares // *Monographs on statistics and applied probability*. CRC Press, 2010. 286 p.
4. *Costa F., Chakraborty S.* Decadal time gaps between mafic intrusion and silicic eruption obtained from chemical zoning patterns in olivine // *Earth and Planetary Science Letters*. 2004. V. 227. Is. 3. P. 517-530. <https://doi.org/10.1016/j.epsl.2004.08.011>
5. *Costa F., Dohmen R., Chakraborty S.* Time scales of magmatic processes from modeling the zoning patterns of crystals // *Reviews in Mineralogy and Geochemistry*. 2008. V. 69. Is. 1. P. 545-594. <https://doi.org/10.2138/rmg.2008.69.14>
6. *Gordeychik B., Churikova T., Kronz A. et al.* Growth of, and diffusion in, olivine in ultra-fast ascending basalt magmas from Shiveluch volcano // *Scientific Reports*. 2018. V. 8. Is. 1. Art. 11775. <https://doi.org/10.1038/s41598-018-30133-1>
7. *Roache P.J.* Computational Fluid Dynamics. Albuquerque: Hermosa Publishers, 1976. 446 p.
8. *Shea T., Costa F., Krimer D., Hammer J.E.* Accuracy of timescales retrieved from diffusion modeling in olivine: A 3D perspective // *American Mineralogist*. 2015. V. 100. Is. 10. P. 2026-2042. <https://doi.org/10.2138/am-2015-5163>