МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕТРОГРАФИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Памяти д. г.-м. н. Ю. А. Ткачева

Ю. Л. Войтеховский^{1, 2}, А. А. Захарова¹¹Санкт-Петербургский горный университет, Санкт-Петербург²Геологический институт ФИЦ КНЦ РАН, Апатиты

Voytekhovskiy_YuL@pers.spmi.ru

В статье изложена методика 2D-моделирования структур биминеральных горных пород в терминах вероятностей бинарных межзерновых контактов. Показано, что типовые петрографические структуры (вкрапленная, цепочечная, пойкилитовая, порфирировая) и текстуры (массивная, полосчатая, шлировая) закономерно заполняют барицентрическую диаграмму (p_{ii} , p_{ij} , p_{ji}) вероятностей контактов. Указанные структуры и текстуры соотносены с равновесием Харди — Вайнберга. Обсуждены проблемы моделирования полиминеральных петрографических структур и текстур. Предложен новый тип структурных диаграмм. Статья посвящена памяти д. г.-м. н. Ю. А. Ткачева — известного российского специалиста в области моделирования структур осадочных горных пород.

Ключевые слова: кристаллическая горная порода, петрографические структуры: вкрапленная, цепочечная, пойкилитовая, порфирировая; петрографические текстуры: массивная, полосчатая, шлировая.

MODELING PETROGRAPHIC STRUCTURES

Dedicated to the memory of Dr. Sci. Yu. A. Tkachev

Yu. L. Voytekhovskiy^{1, 2}, A. A. Zakharova¹¹Saint-Petersburg Mining University, Saint Petersburg²Geological Institute FRC KSC RAS, Apatity

The article describes a technique for 2D modeling of structures and textures of bimineral rocks in terms of the probabilities of binary intergranular contacts. It is shown that typical petrographic structures (disseminated, chained, poikilitic, porphyritic) and textures (massive, banded, schlieren) regularly fill the barycentric diagram (p_{ii} , p_{ij} , p_{ji}) of contact probabilities. These structures and textures are correlated with the Hardy-Weinberg equilibrium. The problems of modeling polymineral petrographic structures and textures are discussed. A new type of structural diagrams is suggested. The article is dedicated to the memory of Dr. Sci. Yu. A. Tkachev — a well-known Russian specialist in the field of modeling the structures of sedimentary rocks.

Keywords: crystalline rock, petrographic structures: disseminated, chained, poikilitic, porphyritic; petrographic textures: massive, banded, schlieren.

Введение

Структура и текстура — атрибуты любой горной породы, содержащие разнородную информацию о ее генезисе. Петрографические словари определяют их как совокупные характеристики форм (панидио-, гипидио- и ксеноморфно-зернистые структуры), абсолютных и относительных размеров (тонко-, мелко-, средне- и крупно-, равномерно- и неравномерно-зернистые, порфирировидные и порфирировые структуры) слагающих горную породу минеральных зерен, а также пространственных отношений их самих (пойкилитовая структура) и агрегатов (массивная, шлировая, полосчатая текстуры) [5]. Отдавая должное поколениям петрографов, описавших сотни структур и текстур, заметим, что они не укладываются в математическую систему не столько из-за разнообразия, сколько из-за намерения вместить в одну характеристику несколько разнородных измеримых параметров и даже генетические (!) представления. Типичный пример — лепидогранобластовая структура, указывающая на чешуйки слюды, изометричные зерна кварца и бластез горной породы. Мы

видим в этом недостаток сегодняшней петрографической номенклатуры. (Можно ли представить номенклатуру точечных или пространственных групп симметрии, в которую входили бы утверждения о генезисе измеряемых кристаллов?) Тем не менее подчеркнем, что дальнейшие подходы предлагаются в дополнение, а не вместо существующих.

Принципы моделирования

Всякая модель представляет объект лишь в тех аспектах, которые полагаются всеобщими и принципиальными. Все более полное описание достигается поэтапным добавлением в модель более частных аспектов. В этом исследовании мы руководствовались следующими принципами.

Номенклатура петрографических структур и текстур сложилась при их наблюдении в 2D-поверхностях: обнажениях, штуфах, шлифах под микроскопом. Моделирование в 3D привело бы к сложной проблеме

Для цитирования: Войтеховский Ю. Л., Захарова А. А. Моделирование петрографических структур // Вестник геонаук. 2020. № 10(310). С. 38—42. DOI: 10.19110/geov.2020.10.5.

For citation: Voytekhovskiy Yu. L., Zakharova A. A. Modeling petrographic structures. Vestnik of Geosciences, 2020, 10(310), pp. 38—42. DOI: 10.19110/geov.2020.10.5.

ме стереологической реконструкции, то есть распознаванию в сечениях. Поэтому моделирование выполнялось сразу в 2D.

Горная порода — системный объект с определенными элементами (минеральными зёрнами различных видов) и пространственными отношениями (контактирования/неконтактирования). Сложность системы более зависит от специфики отношений, чем от разнообразия элементов (хотя ясно, что отношений без элементов не бывает). В этом исследовании мы избегаем описания элементов (форм и размеров минеральных зёрен) и делаем акцент на описании их отношений контактирования.

Диагностика минеральных видов и характеристика форм и размеров минеральных индивидов — минералогический, а не петрографический уровень исследования. Последний состоит в узнавании горной породы по ее модальному составу (из которого следует химический состав, а если не следует, то потому, что составы минералов варьируют в широких пределах) и типу организации (структуре и текстуре), что в обоих аспектах подразумевает статистический подход.

Статистический подход содержится и в традиционном описании горной породы, ведь мы всегда отбираем «представительный» штуч, в котором достигается ее узнаваемый облик. В этом исследовании для характеристики пространственных отношений минеральных зёрен мы используем вероятности бинарных контактов. Моделирование выполнено для биминеральной горной породы. В этом простейшем случае вероятности контактов и расчетные тренды можно изобразить в барицентрической диаграмме $\{p_{ii}, p_{ij}, p_{jj}\}$. Возможности моделирования полиминеральных структур обсуждены отдельно.

Принципиально важная черта организации горных пород (а также металлов и сплавов) состоит в том, что 4 зёрна контактируют в точке, 3 — по линейному ребру, 2 — по некоторой поверхности [1; 6, с. 34–35]. В случайное сечение первые не попадают, вторые выглядят как тройные контакты в точке, последние — как бинарные контакты вдоль линии (рис. 1). Но для любого планарного графа выполняется соотношение Эйлера: $n - e + v = 1$, где n — число клеток, e — ребер, v — вершин. В нашем случае (представляя граф без края — так мыслится и кристаллическая решетка) $3v = 2e$. Тогда $e = 3n - 3 \approx 3n$ при $n \rightarrow \infty$. Средняя координация клеток: $2e / n = 6 - 6/n \rightarrow 6$ при $n \rightarrow \infty$.

Поэтому статистическое моделирование петрографических структур возможно на гексагональной сетке (рис. 1). На первый взгляд, это противоречит сказан-

ному выше об игнорировании форм минеральных зёрен. Но для дальнейшего важны не гексагоны (их можно заменить точками в центрах), а усредненные характеристики сетки: общее число бинарных контактов $3n$ и средняя координация клетки 6. Историческая аналогия — переход О. Браве от форм «полиэдрических молекул» Р.-Ж. Гаюи к размещению в пространстве их центров, что привело к открытию 14 типов решеток. Удивительно, что правильное кристаллографическое разбиение плоскости на гексагоны проявилось «в среднем» в неправильном рисунке межзерновых границ в сечении горной породы.

Вкрапленные структуры, массивные текстуры

Пусть n — общее число минеральных зёрен, тогда $3n$ — общее число бинарных контактов в структуре. Пусть kn — число черных зёрен, рассеянных в белой матрице, здесь и далее $0 < k < 1$ (оценка точной верхней границы для k всякий раз составляет задачу). Тогда числа различных бинарных контактов равны: $N_{qq} = 0$, $N_{qb} = 6kn$, $N_{bb} = 3n - 6kn$. Делением на $3n$ найдем соответствующие вероятности: $p_{qq} = 0$, $p_{qb} = 2k$, $p_{bb} = 1 - 2k$. Предположительно, максимальная концентрация черных зёрен достигается для $k = 1/4$ (рис. 2). Серия вкрапленных структур для $0 < k < 1/4$ образует ограниченный непрерывный тренд на ребре (p_{bb}, p_{qb}) барицентрической диаграммы (рис. 3). Равномерное рассеяние черных зёрен среди белых создает массивную текстуру.

Пойкилитовые структуры

Пусть n — общее число ойкокристаллов, m — хадакристаллов (рис. 2). Общее число контактов: $N_{qq} = 0$, $N_{qb} = m$, $N_{bb} = 3n$. Соответствующие вероятности: $p_{qq} = 0$, $p_{qb} = m/(3n+m) = 1/(1+3n/m)$, $p_{bb} = 3n/(3n+m) = 1/(1+m/3n)$. Если хадакристаллов относительно мало, т. е. $m/3n \rightarrow 0$, то $p_{qb} \rightarrow 0$, $p_{bb} \rightarrow 1$. Если хадакристаллов относительно много, т. е. $3n/m \rightarrow 0$, то $p_{qb} \rightarrow 1$, $p_{bb} \rightarrow 0$. Тренд пойкилитовых структур занимает все ребро (p_{bb}, p_{qb}) барицентрической диаграммы (рис. 3).

Цепочечные структуры, полосчатые текстуры

Пусть n — общее число минеральных зёрен, тогда $3n$ — общее число бинарных контактов в структуре. Пусть kn — число черных зёрен в цепочках. Тогда $N_{qq} = kn$, $N_{qb} = 4kn$, $N_{bb} = 3n - 5kn$. Соответствующие

Рис. 1. Межзерновые границы в петрографическом шлифе и гексагональная сетка

Fig. 1. Intergranular boundaries in a petrographic section and a hexagonal net

Рис. 2. Модели структур и текстур: 1 — вкрапленная, 2 — пойкилитовая, 3 — цепочечная, 4 — с ветвящимися кластерами, 5 — шлировая, 6 — порфировая

Fig. 2. The models of the structures and textures: 1 — disseminated, 2 — poikilitic, 3 — chained, 4 — with branching clusters, 5 — schlieren, 6 — porphyritic

вероятности: $p_{чч} = k/3$, $p_{чб} = 4k/3$, $p_{бб} = 1 - 5k/3$. Предположительно, максимальная концентрация черных зерен достигается для $k = 1/2$ (рис. 2). Серия цепочечных структур для диапазона $0 < k < 1/2$ образует непрерывный тренд (рис. 3). Превращением цепочек в черные полосы и варьированием (через k) ширины белых полос между ними моделируются полосчатые текстуры. Их тренды покрывают угол барицентрической диаграммы ниже тренда цепочечной структуры.

Структуры с ветвящимися кластерами

В работе [2, с. 10–13] описаны структуры с ветвящимися кластерами зерен кварца в полевошпатовой матрице. Выполним моделирование для кластеров из 7 зерен (рис. 2). Пусть n — общее число минеральных зерен в структуре, тогда $3n$ — общее число бинарных контактов. Пусть kn — общее число кварцевых зерен в кластерах. Тогда число кластеров равно $kn/7$. Число контактов: $N_{чч} = kn$, $N_{чб} = 4kn$, $N_{бб} = 3n - 5kn$. Соответствующие вероятности: $p_{чч} = k/3$, $p_{чб} = 4k/3$, $p_{бб} = 1 - 5k/3$. Результат совпал с предыдущим, так как цепочки и ветвящиеся кластеры отличаются лишь одним зерном — центром ветвления, что не сказалось на статистике контактов.

Шлировые текстуры

Пусть n — общее число минеральных зерен, тогда $3n$ — общее число бинарных контактов в структуре. Пусть kn — число зерен, собранных в шлиры по 7

Рис. 3. Барицентрическая диаграмма вероятностей (p_{ii} , p_{jj} , p_{ij}). Структуры и текстуры: 1 — вкрапленная, 2 — цепочечная, 3 — порфировые (d — диаметр фенокриста), 4 — шлировые (количества зерен в шлирах указаны числами), 5 — с ветвящимися кластерами, 6 — пойкилитовые; 7 — линия равновесия Харди — Вайнберга

Fig. 3. Barycentric diagram of (p_{ii} , p_{jj} , p_{ij}) probabilities. Structures and textures: 1 — disseminated, 2 — chained, 3 — porphyritic (d — diameter of phenocryst), 4 — schlieren (quantities of grains in the schlieren are indicated by the numbers), 5 — with branching clusters, 6 — poikilitic; 7 — the Hardy–Weinberg equilibrium line

(рис. 2). Тогда число шлиров в структуре $kn/7$, число контактов: $N_{чч} = 12kn/7$, $N_{чб} = 18kn/7$, $N_{бб} = 3n - 30kn/7$, соответствующие вероятности: $p_{чч} = 4k/7$, $p_{чб} = 6k/7$, $p_{бб} = 1 - 10k/7$. Тренды шлировых текстур для разных размеров шлиров и значений k покрывают барицентрическую диаграмму ниже тренда цепочечной структуры (рис. 3).

Порфиroidные и порфиrowые структуры

Эти структуры удобно моделировать как предыдущие, у которых в шлирах стерты межзерновые границы. Характеристика модельных шлиров дана в таблице. Здесь d — диаметр шлира (диаметр белого зерна принят за 1), $n(d)$ — число зерен в шлире (аппроксимируется величиной $\pi d^2/4$), $v(d) = N_{чч}$ — число границ в шлире, $p(d) = N_{чб} = 6d$ — число внешних границ шлира, $\Sigma = N_{чч} + N_{чб}/2 = 3n(d)$.

Характеристика модельных шлиров Characteristics of model shlirens

d	3	5	7	9	11
n(d)	7	19	37	61	91
v(d)	12	42	90	156	240
p(d)	18	30	42	54	66
Σ	21	57	111	183	273

Пусть n — общее число минеральных зерен, тогда $3n$ — общее число бинарных контактов в структуре. Пусть kn — число зерен в шлирах, тогда $3kn$ — числа контактов в $kn/n(d)$ -шлирах. Стирая внутренние границы, превратим шлиры в порфиrowые вкрапленники. Число оставшихся контактов: $N_{чч} = 0$, $N_{бб} = 3n - 3kn - knp(d) / 2n(d) = 3n(1-k) - 12kn / \pi d$, $N_{чб} = 2knp(d) / 3n(d) = 16kn / \pi d$. Деля на их сумму, получим вероятности: $p_{чч} = 0$, $p_{чб} = 16k / [3\pi d(1-k) + 4k]$, $p_{бб} = 1 - p_{чб}$.

Тренды порфиrowидных и порфиrowых структур в совокупности покрывают ребро ($p_{бб}$, $p_{чб}$) барицентрической диаграммы (рис. 3). Каждый начинается вблизи вершины $p_{бб}$ и простирается к вершине $p_{чб}$ тем далее, чем меньше диаметр кластера. При фиксированном d предельное значение k вычисляется из условия $p_{чб} > 0$ (рис. 4).

Обсуждение и выводы

Выше предложена барицентрическая диаграмма нового типа, показывающая вероятности бинарных межзерновых контактов (в простейшем случае биминеральной горной породы), существующих во всех кристаллических горных породах и тем самым выражающих фундаментальные пространственные отношения между слагающими их минеральными индивидами. При заданном виде кластера моделируются любые петрографические структуры и текстуры. При этом их канонические типы закономерно заполняют поле диаграммы трендами, определяемыми видом кластера и его концентрацией в структуре. (Левая часть диаграммы на рис. 3 симметрично заполняется структурами «белые кластеры в черной матрице».) Фигуративные

Рис. 4. Соотношение d и k для порфиrowых структур
Fig. 4. Relationship between d and k for porphyritic structures

точки реальных петрографических структур и текстур должны занимать промежуточные положения между модельными трендами.

Около вершины $p_{чб}$ внутри диаграммы есть поле, в которое модельные тренды не проникают. Это означает, что невозможна петрографическая структура без мономинеральных контактов (типа шахматной доски), образуемых хотя бы одним минералом (таковы модельные вкрапленные и пойкилитовые структуры). В реальных петрографических структурах обычны мономинеральные контакты обоих видов. Для расчетных трендов могут быть оценены предельные точки, вместе ограничивающие запрещенное поле.

Тренды различных структур (например, цепочечной и с ветвящимися кластерами) и поля текстур (полосчатых и шлировых) в поле диаграммы перекрываются. Совпадение статистик бинарных контактов и, как следствие, термодинамических характеристик [3] сети межзерновых границ обращает внимание на фундаментальный вопрос: почему горная порода следует той или иной стратегии кристаллизации, приводящей к той или иной структуре?

Интересен вопрос о соотношении различных структур и текстур с рассмотренным ранее [4] равновесием Харди — Вайнберга, выражающим гомогенное перемешивание минеральных индивидов в горной породе (массивная текстура). На диаграмме видно, что тренды вкрапленных, пойкилитовых и цепочечных структур, начинаясь вблизи вершины $p_{бб}$ диаграммы, на значительном протяжении следуют вблизи линии равновесия. Явно отклоняются от нее ярко выраженные порфиrowые, пойкилитовые и цепочечные структуры, а также полосчатые и шлировые текстуры.

Возможно ли расширение метода на полиминеральные структуры? Принципиальных препятствий к этому нет. Проблема состоит в визуализации барицентрических диаграмм и поверхностей равновесия Харди — Вайнберга. Даже для трехминеральной горной породы это 2-мерная поверхность в 6-вершинном (5-мерном) симплексе. В этом случае более наглядно последовательное рассмотрение полиминеральной структуры в виде «минерал — матрица» для каждого из слагающих горную породу минералов и сравнение результатов на барицентрической диаграмме.

Расчет вероятностей бинарных межзерновых контактов — рутинная процедура даже для биминеральной горной породы. Мы изучаем возможность применения для этих целей линейного метода Розиваля в компьютерном варианте и с применением отечественного анализатора структуры МИУ-5.

Литература

1. Бельский В. З. Геометрико-вероятностные модели кристаллизации. Феноменологический подход. М.: Наука, 1980. 88 с.
2. Бескин С. М., Ларин В. Н., Марин Ю. Б. Редкометалльные гранитовые формации. Л.: Недра, 1979. 280 с.
3. Бродская Р. Л. Термодинамические (кинетические) критерии формирования и эволюции структуры минеральных агрегатов // Зап. ВМО. 1988. № 5. С. 623–633.
4. Войтеховский Ю. Л. Типизация неправильных пространственных разбиений // Вестник ИГ Коми НЦ УрО РАН. 2018. № 8. С. 46–50. doi: 10.19110/2221-1381-2018-8-46-50.
5. Левинсон-Лессинг Ф. Ю., Струве Э. А. Петрографический словарь. М.: Госгеолиздат, 1963. 448 с.
6. Салтыков С. А. Стереометрическая металлография. М.: Гос. науч.-тех. изд. лит. по черной и цветной металлургии, 1958. 447 с.

References

1. Belenkiy V. Z. *Geometriko-veroyatnostnye modeli kristallizatsii. Fenomenologichesky podhod* (Geometric-probabilistic models of crystallization. Phenomenological approach). Moscow: Nauka, 1980, 88 pp.
2. Beskin S. M., Larin V. N., Marin Yu. B. *Redkometalnye granitovye formatsii* (Rare-metal granitic formations). Leningrad: Nedra, 1979, 280 pp.
3. Brodskaya R. L. *Termodinamicheskiye (kineticheskiye) kriterii formirovaniya i evolutsii struktury mineralnykh agregatov* (Thermodynamic (kinematic) criteria of formation and evolution of mineral aggregates structures). Proc. Rus. Mineral. Soc, 1988, No. 5, pp. 623-633.
4. Voytekhovskiy Yu. L. *Tipizatsiya nepravilnykh prostranstvennykh razbieniy* (Typization of irregular spatial tilings). Vestnik IG Komi SC UB RAS, 2018, No. 8, pp. 46–50. doi: 10.19110/2221-1381-2018-8-46-50.
5. Levinson-Lessing F. Yu., Struve E. A. *Petrograficheskiy slovar* (Petrographic dictionary). Moscow: Gosgeolizdat, 1963, 448 pp.
6. Saltykov S. A. *Stereometricheskaya metallografiya* (Stereometric metallography). Moscow: State Publ. House on Ferrous and Non-Ferrous Metallurgy, 1958, 447 pp.

Поступила в редакцию / Received 19.10.2020