

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. Ломоносова

На правах рукописи

ГОРОХОВА Наталья Владимировна

ДИНАМИКА РОСТА КРИСТАЛЛА В ОЧАГАХ И КАНАЛАХ ВУЛКАНА

Специальность 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

АВТОРЕФЕРАТ

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2014

Работа выполнена в ФГБОУВПО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» на кафедре гидромеханики механико-математического факультета и в лаборатории общей гидромеханики Института механики.

Научный руководитель: Мельник О.Э., доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН, заведующий лабораторией общей гидромеханики НИИ механики МГУ имени М.В. Ломоносова

Консультант: Плечов П.Ю., доктор геолого-минералогических наук, профессор кафедры петрологии геологического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова

Официальные оппоненты: Гупало Ю.П., доктор физико-математических наук, профессор МФТИ

Аранович Л.Я., доктор геолого-минералогических наук, заведующий лабораторией Института геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии РАН

Ведущая организация: Математический институт им. В.А.Стеклова РАН (Москва)

Защита состоится 23 мая 2014 г. в 15 часов на заседании диссертационного совета Д.501.001.89 при Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова по адресу: 119991, г. Москва, Ленинские горы, Главное здание МГУ, аудитория 16-24.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке механико-математического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Автореферат разослан «__» марта 2014 г.

Учёный секретарь
диссертационного совета Д.501.001.89
доктор физико-математических наук



В.В. Измоленов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Диссертация посвящена математическому моделированию роста одиночного кристалла плагиоклаза из магматического расплава. Плагиоклаз – один из основных породообразующих минералов и может быть представлен в виде смеси двух компонент: анортита и альбита. Задача рассмотрена в равновесной и неравновесной постановках, с различными условиями на границе кристалл-расплав. Выявлены причины немонотонного изменения химического состава кристалла (осцилляторной зональности) и реконструированы условия подъема магмы для вулкана Безымянный.

Актуальность темы. Математическое моделирование процессов внедрения магмы в земную кору, её подъема к поверхности в процессе извержения является важным источником информации о явлении, непосредственное наблюдение которого невозможно. За счет медленной диффузии внутри кристалла плагиоклаза его состав отражает условия кристаллизации магмы. В работе исследуется рост кристаллов в магме как многокомпонентном расплаве в различных внешних условиях. Строятся модели как равновесной (характерное время протекания процесса значительно превышает характерное время диффузии компонент расплава), так и неравновесной кристаллизации. В настоящее время для интерпретации измерений обычно используются равновесные модели, хотя большой массив экспериментальных данных свидетельствует о неравновесности многих природных процессов.

Рост кристаллов в магматическом расплаве происходит под действием многокомпонентной диффузии, изучение которой началось в 40-х годах прошлого века с работ Онзагера, в которых диффузионные потоки массы были выражены в общем виде с помощью диффузионной матрицы (Onsager, 1945). В дальнейшем, в работах многих авторов предлагались способы экспериментального и теоретического определения диффузионной матрицы. Для магматического расплава, содержащего большое число компонент, в настоящее время эта задача не решена, поэтому на практике используются более простые выражения для определения диффузионных потоков (Oishi, 1965; Lasaga, 1979).

При моделировании роста кристаллов в магматических расплавах ранее использовалась только модель двухкомпонентной диффузии с учетом эмпирически полученных формул для определения температуры равновесия кристалл-расплав и скорости роста кристалла. Состав кристалла определяется коэффициентами распределения, которые могут зависеть от температуры.

При исследовании кристаллизации плагиоклаза особое внимание уделяется объяснению возникающей в кристаллах периодической (или осцилляторной) зональности по составу. Одной из причин её возникновения может являться колебания температуры системы. В ряде работ (Allegre et al, 1981; Lasaga, 1982; Tsune, Toramaru, 2007) показано, что колебания состава кристалла могут быть вызваны конкуренцией процессов роста и диффузии

компонент при монотонном изменении температуры расплава во времени. При этом основной причиной считалась неоднозначность определения скорости роста кристалла в зависимости от состава расплава (Allegre et al, 1981; Lasaga, 1982). Такой закон роста не нашел экспериментального подтверждения. Более того, для двухкомпонентной системы в (Lasaga, 1982) получено, что если скорость роста кристалла – однозначная функция состава расплава, то концентрации компонент в кристалле изменяются монотонно. В (Tsune, Togamari, 2007) для вычисления скорости роста предлагается формула, учитывающая влияние шероховатости растущей грани кристалла на скорость его роста. Получены периодические режимы про скачкообразном переходе от режима быстрого роста, соответствующего шероховатой стенке, к медленному, соответствующему гладкой стенке. В России кристаллизация магматических расплавов изучалась в работах Френкеля М.Я., Ярошевского А.А., Арискина А.А., Барминой Г.С., Коптева-Дворникова Е.В., Арановича Л.Я., Плечова П.Ю.

Актуальность работы состоит в необходимости интерпретации данных петрологических измерений и экспериментов для восстановления условий внедрения и подъема магмы при вулканических извержениях. Существующие модели роста кристаллов из магматического расплава не учитывали ряд важных параметров: перекрестную диффузию компонент многокомпонентного расплава, реальную зависимость состава кристалла и температуры равновесия кристалл-расплав от состава расплава, зависимость скорости роста от переохлаждения.

Цель и задачи исследования. Целью работы является исследование процесса роста кристалла плагиоклаза на основе решения уравнений многокомпонентной диффузии в магматическом расплаве в процессе его кристаллизации. Были поставлены следующие задачи:

- Построение в общем виде математической модели диффузионного роста кристалла в многокомпонентном расплаве для произвольных зависимостей состава кристалла и температуры равновесия от условий кристаллизации и состава расплава. Построение математической модели равновесного роста кристалла из многокомпонентного расплава.
- Исследование кристаллизации плагиоклаза в различных условиях (при падении температуры или давления) с использованием модельных и реальных зависимостей, определяющих состав кристалла и температуру равновесия (ликвидуса).
- Объяснение на основе построенной модели роста возникающей в кристаллах плагиоклаза зональности.

Научная новизна. В работе получены следующие новые результаты, выносимые на защиту:

- Построена модель диффузионного роста кристалла в многокомпонентном расплаве для произвольной зависимости состава кристалла от состава

расплава.

- Для модельных зависимостей состава кристалла плагиоклаза и температуры равновесия кристалл-расплав от состава расплава получено аналитическое решение равновесной задачи.
- В неравновесном случае исследовано влияние граничных условий на процесс кристаллизации. Показано, что граничные условия в форме Стефана могут быть использованы при моделировании процессов, близких к равновесным. Кристалл при этом растет монотонно по времени, а его состав – монотонная функция расстояния от центра кристалла к периферии.
- Если скорость роста однозначно определяется переохлаждением расплава на границе с кристаллом, то кристалл может расти как монотонно, так и со сменой режимов роста и растворения. В последнем случае состав кристалла сложнзонален. Ранее при однозначной зависимости скорости роста от переохлаждения такая зональность кристаллов не обнаружена, поскольку предыдущие модели не учитывали многокомпонентный характер диффузии в магматическом расплаве
- Процесс кристаллизации плагиоклаза, вызванный остыванием расплава, исследован для реальных зависимостей состава кристалла и температуры равновесия от состава расплава. В результате численного моделирования получена зависимость средней ширины полос от скорости остывания и критерий возникновения зональности. Эти зависимости важны для интерпретации петрологических данных при изучении изверженных пород.
- Исследован процесс роста кайм на кристаллах плагиоклаза при подъеме магмы по каналу вулкана с использованием петрологических данных вулкана Безымянный. Показана необходимость использования неравновесной модели роста кристалла. Реконструированы условия подъема магмы.

Достоверность результатов. В работе найдено аналитическое решение для модели равновесной кристаллизации в пределе, когда коэффициенты диффузии компонент стремятся к бесконечности. Результаты расчетов по неравновесной модели получены с помощью численного решения системы уравнений известным методом матричной прогонки с итерациями. Они в предельном случае дают корректное решение, полученное в рамках равновесной модели. Достоверность расчетов подтверждается сопоставлением на качественном уровне с экспериментальными и расчетными данными других авторов, а также с известными решениями уравнений диффузии.

Научная и практическая значимость. Научная значимость работы состоит в том, что построены оригинальные модели равновесного и неравновесного (диффузионного) роста кристалла из произвольного расплава с учетом перекрестных членов. Впервые проанализировано влияние граничного условия в неравновесной модели на процесс роста кристалла из

многокомпонентного магматического расплава на примере кристаллизации плагиоклаза. Результаты численного моделирования показали, что обычно используемое предположение о существовании на границе локального равновесия и по составу, и по температуре (условие Стефана) не дает объяснения явлениям, наблюдаемым при экспериментах и в реальных кристаллах. Тем не менее, это условие может применяться при моделировании процессов, близких к равновесным.

Практическая значимость работы состоит в том, что с помощью предложенных в ней моделей при использовании реальных зависимостей состава кристалла от состава расплава (и других параметров) можно реконструировать условия роста кристаллов в магматическом расплаве, тем самым получая уникальную информацию об условиях внедрения и подъема магмы.

Личный вклад автора. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором. Постановки задач, обсуждение и подготовка к публикации некоторых из представленных в диссертации результатов проводилась совместно с соавтором – научным руководителем. Аналитическое решение задачи о равновесном росте кристалла в модельном случае, а также разработка алгоритмов решения нелинейных дифференциальных уравнений и численное моделирование проводились автором единолично. Петрологические данные и модели для определения состава кристалла и равновесной температуры, используемые в работе, получены в сотрудничестве с соавторами – сотрудниками Геологического факультета МГУ.

Соответствие диссертации паспорту научной специальности. В соответствии с областью исследований специальности 01.02.05 – «Механика жидкости, газа и плазмы» диссертация включает в себя теоретическое и с помощью численного эксперимента изучение процесса роста кристалла из магматического расплава. Полученные результаты соответствуют пункту 15 (тепломассоперенос в газах и жидкостях) паспорта специальности.

Апробация работы. Результаты, полученные в работе, были доложены на следующих научных конференциях: Конференция-конкурс молодых ученых НИИ механики МГУ (2009, 2010, 2011, 2013), Ломоносовские чтения (Москва, 2010), 16 школа-семинар «Современные проблемы аэрогидродинамики» (Сочи, 2010), Всероссийская научная школа молодых ученых «Механика неоднородных жидкостей в полях внешних сил» (Москва, 2010), X Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики «Актуальные проблемы механики» (Нижний Новгород, 2011), XIX Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов» (Москва, 2012), Генеральная Ассамблея Европейского общества геологических наук (Вена, Австрия, 2012).

Результаты работы были также доложены и обсуждены на

специализированном научном семинаре по механике сплошных сред под руководством академика РАН А.Г. Куликовского, проф. В.П. Карликова, члена-корреспондента РАН О.Э. Мельника (НИИ механики МГУ, Москва, 2012, 2013).

Публикации по теме диссертации. Основные результаты работы изложены в 11 научных публикациях, из которых 2 [1,10] – статьи в журналах, входящих в Перечень ВАК на момент публикации, и 5 – тезисы докладов. В работах [1,8,10], опубликованных в соавторстве с научным руководителем и сотрудниками геологического ф-та МГУ [10], автор участвовал в постановке задачи, обработке петрологических данных, данных экспериментов и результатов расчетов.

Структура и объем работы. Диссертация содержит введение, четыре главы, заключение и список литературы. В работе имеется 41 рисунков и 67 библиографических ссылок. Общий объем диссертации составляет 105 страниц.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во Введении приводится обзор литературы, обсуждается актуальность темы диссертации, основные цели и направления исследований, указана научная и практическая значимость работы.

Глава 1 посвящена постановке задачи о росте кристалла в магматическом расплаве и построению математических моделей кристаллизации в общем виде. В **разделе 1.1** поставлена задача о росте кристалла в многокомпонентном магматическом расплаве. Процесс кристаллизации рассматривается в одномерной системе кристалл-расплав. Плоская граница между фазами перемещается со скоростью роста (растворения) V (рис.1). Такое представление возможно для кристаллов, имеющих плоские грани как, например, кристалл плагиоклаза.

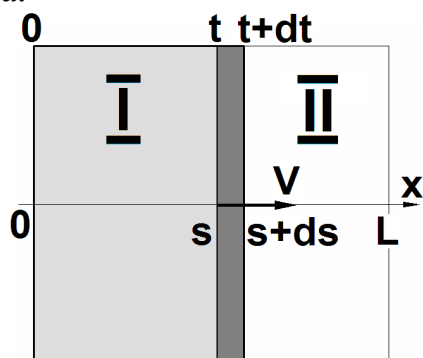


Рис.1: геометрия системы
I – кристалл
II – расплав

Расплав состоит из K_m компонент, кристалл – из $K_s \leq K_m$ компонент (компоненты с номерами от $(K_s + 1)$ до K_m входят только в расплав). В начальный момент задано распределение концентраций в расплаве:

$$C_i(x, t = 0) = C_i^0 = const, \quad i = 1, \dots, K_m \quad (1)$$

Приняты следующие предположения:

- Диффузия компонент в кристалле отсутствует, поскольку характерные времена диффузии в кристалле на несколько порядков превышают времена диффузии в расплаве для многих кристаллов и, в частности, для плагиоклаза.
- Выравнивание температуры внутри ячейки происходит мгновенно, т.к. коэффициент температуропроводности $k \sim 3 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$ на несколько порядков больше характерных значений коэффициентов диффузии $D_0 \sim 10^{-13} \text{ м}^2/\text{с}$. Поэтому температура является внешним параметром задачи.
- Не учитываются напряжения и изменение плотности, возникающие в процессе роста кристалла. Плотности всех компонент одинаковы.
- На границе кристалл-расплав предполагается локальное равновесие по составу.
- Отсутствует макроскопическое движение в расплаве, из которого растет кристалл.

В разделе 1.2 выписана адаптированная для решения поставленной задачи математическая модель равновесной кристаллизации. Равновесная постановка может быть использована, когда характерное время диффузии много меньше характерного времени роста. Тогда рост кристалла описывается следующей системой уравнений:

$$\begin{aligned}
 C_{iS} &= C_{Si}(p, C_1, \dots, C_{K_m}), \quad i = 1, \dots, K_S \\
 T_{eq} &= T_e(p, C_1, \dots, C_{K_m}), \\
 f_i(s) &= C_{iS}|_s, \quad M_{iS}(s) = \int_0^s f_i(x) dx, \quad i = 1, \dots, K_S \\
 M_{iS}(s) + C_i(L - s) &= C_i^0 L, \quad i = 1, \dots, K_S \\
 C_i(L - s) &= C_i^0 L, \quad i = K_S + 1, \dots, K_m \\
 \sum_{i=1}^{K_S} C_{iS} &= 1 \Rightarrow \sum_{i=1}^{K_S} M_{iS} = s, \quad \sum_{i=1}^{K_m} C_i = 1
 \end{aligned} \tag{2}$$

В первых двух уравнениях задается зависимость состава кристалла (концентраций C_{iS}) и температуры равновесия кристалл-расплав T_{eq} от состава расплава и давления. Профиль концентрации i -й компоненты в кристалле $f_i(x)$ и ее удельная масса $M_{iS}(s)$ определяются в 3-ем уравнении. 4-е и 5-е уравнения системы выражают законы сохранения массы каждой компоненты, а 6-е уравнение – стехиометрические соотношения в кристалле и расплаве. В общем виде эти уравнения были сформулированы М.Я.Френкелем (Френкель и др., Динамика внутрикамерной дифференциации базитовых магм, 1988), они широко используются в петрологических программах моделирования.

В процессе роста кристалла за счет выделения скрытой теплоты

кристаллизации температура изолированной системы кристалл-расплав растёт:

$$T_{melt} = T_0 + \frac{L_h}{c_v} \cdot \frac{s}{L} \quad (3)$$

где L_h – скрытая теплота кристаллизации, c_v – удельная теплоемкость. Система (2) может быть решена в явном виде. Обратная задача по определению давления и температуры по известному профилю некоторой компоненты в кристалле решается численно.

В разделе 1.3 построена математическая модель диффузионного роста кристалла (неравновесная постановка). Одномерная многокомпонентная диффузия в расплаве описывается следующими уравнениями:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_i}{\partial t} &= -\frac{\partial J_i}{\partial x}, \quad i = 1, \dots, K_m \\ \sum_{i=1}^{K_m} C_i &= 1, \\ s < x < L, \quad t > 0 \end{aligned} \quad (4)$$

где J_i – поток массы i -й компоненты. В работе использованы соотношения для определения потоков массы, учитывающие перекрестную диффузию компонент (Oishi, 1965):

$$J_i = -D_i \frac{\partial C_i}{\partial x} - C_i \sum_{j=1}^{K_m} (D_i - D_j) \frac{\partial C_j}{\partial x}, \quad i = 1, \dots, K_m \quad (5)$$

На границе раздела фаз $x = s$ выполнены условия сохранения массы на разрыве $V[C_i] - [J_i] = 0$, на внешней границе ячейки $x = L$ потоки массы компонент равны нулю:

$$\begin{aligned} x = s: \quad V \cdot (C_i|_{x=s} - C_{iS}) - J_i|_{x=s} &= 0 \\ x = L: \quad \frac{\partial C_i}{\partial x} \Big|_{x=L} &= 0, \quad i = 1, \dots, K_m \\ \sum_{i=1}^{K_s} C_{iS} &= 1 \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь C_{iS} – концентрация в кристалле i -ой компоненты ($C_{iS} = 0$ при $i = K_s + 1, \dots, K_m$), V – скорость роста кристалла.

Далее в разделе 1.4 проводится обезразмеривание системы (4)-(5) и переход в подвижную систему координат, связанную с границей кристалл-расплав (раздел 1.5). В разделах 1.6 и 1.7 строится разностно-краевая задача для численного решения полученной системы, а разделы 1.8 и 1.9 посвящены её программной реализации.

В Главе 2 построенные в главе 1 модели применены для качественного

исследования кристаллизации плагиоклаза в условиях линейного по времени падения температуры расплава. Плагиоклаз можно представить как смесь молекул двух типов: анортита ($An - CaAl_2Si_2O_8$) и альбита ($Ab - NaAlSi_3O_8$). Поэтому предполагается, что $K_s = 2$, $K_m = 3$ (анортит – компонента 1, альбит – 2 и 3 – остаточный расплав). В разделе 2.1 система уравнений многокомпонентной диффузии записывается для плагиоклаза. В этой главе давление считается постоянным, а температура расплава линейно убывает с течением времени: $T_{melt} = T_0 - V_T t$ ($T_0 [K]$ – начальная температура, $V_T [K/ч]$ – скорость остывания расплава). Коэффициенты диффузии компонент предполагаются постоянными, их отношение $C_D = D_2/D_1$ будет варьироваться для определения их влияния на процесс кристаллизации. Коэффициент диффузии остаточного расплава мал по сравнению с коэффициентами диффузии анортита и альбита: $D_3 = 10^{-17} \text{ м}^2/\text{с}$ (раздел 2.2).

Предполагаются модельные соотношения для определения состава кристалла C_{1S} и температуры равновесия T_{eq} по относительному содержанию анортита в расплаве на границе с кристаллом – $X_{an} = C_1/(C_1 + C_2)$:

$$C_{1S} = 1 - (1 - X_{an})^2, \quad T_{eq} = T_{eq0} + k_T \cdot (X_{an} - X_{an0}) \quad (7)$$

Здесь T_{eq0} – температура равновесия, а X_{an0} – доля анортита в начальный момент времени; k_T – угловой коэффициент.

Для полной постановки задачи необходимо определить скорость роста кристалла, входящую в (6). Классическим считается условие Стефана – отсутствие локального переохлаждения на границе растущего кристалла. В этом случае лимитирующим фактором является диффузия компонент, как более медленный процесс. Тогда граничные условия будут иметь вид:

$$\begin{cases} V \cdot (C_1|_{x=s} - C_{1S}) - J_1|_{x=s} = 0, \\ T - T_{eq}|_{x=s} = 0, \end{cases} \quad (8)$$

а скорость роста кристалла определяется из закона сохранения массы для второй компоненты:

$$V = \frac{J_2|_{x=s}}{C_2|_{x=s} - C_{2S}}. \quad (9)$$

Если же осуществляется реакционный рост кристалла (лимитирующий фактор – скорость встраивания частиц в растущий кристалл), то состав приграничного слоя может отличаться от равновесного с кристаллом, а переохлаждение отлично от нуля. Тогда в качестве граничных условий на подвижной границе берутся условия сохранения массы компонент, а скорость роста кристалла определяется из дополнительного соотношения (Hort, 1998; Melnik, Sparks, 2005):

$$V = V_0 \frac{\Delta T \cdot (T + \Delta T_u - \Delta T)}{\Delta T_u \cdot T} \cdot \exp\left(\frac{(\Delta T_u - \Delta T)(T - \Delta T)}{\Delta T_u \cdot T}\right) \quad (10)$$

где $\Delta T = T - T_{eq}$ – переохлаждение расплава, а $\Delta T_u = const$ – переохлаждение, при котором скорость роста достигает максимума V_0 ($\Delta T_u = -62K$ для плагиоклаза). При этом на величину скорости роста существенно влияет только переохлаждение расплава (рис.2).

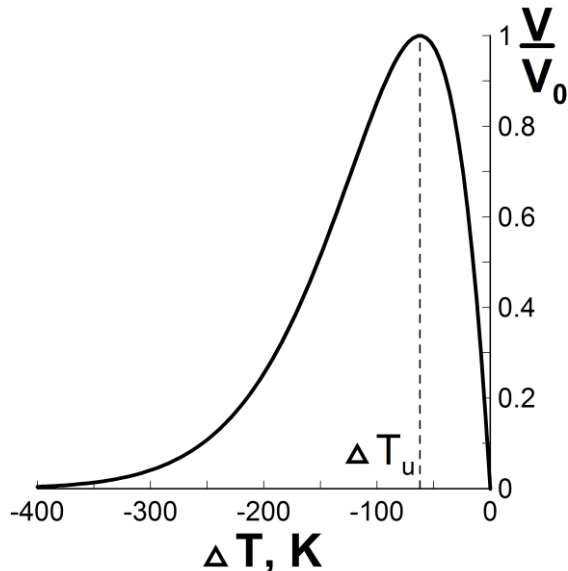


Рис.2: зависимость скорости роста от переохлаждения

Если учитывается растворение кристалла, когда температура расплава больше равновесной температуры, скорость роста полагается отрицательной при положительном переохлаждении. Т.е. при $0 < \Delta T < |\Delta T_u|$ скорость растворения по модулю равна скорости роста при таком же по модулю переохлаждении расплава. При $\Delta T > |\Delta T_u|$ скорость растворения максимальна и равна по модулю V_0 . Когда кристалл растворяется, состав расплава на границе с кристаллом определяется содержанием компонент в растворившемся слое кристалла.

В разделе 2.3 проводится анализ размерностей в задаче о диффузионном росте кристалла плагиоклаза.

В разделе 2.4 в равновесной постановке получено аналитическое решение системы (2) для параметров, определяемых соотношениями (7).

В разделах 2.5 и 2.6 представлены результаты расчетов по неравновесной модели как в случае диффузионно-контролируемого (раздел 2.5), так и в случае реакционно-контролируемого (раздел 2.6) роста кристалла.

Когда используются граничные условия в форме Стефана при фиксированных коэффициентах диффузии и начальном составе кристалла, характер протекания процесса определяется единственным безразмерным

параметром $V_T' = \frac{V_T t_0}{k_T} = \frac{V_T L^2}{k_T D_1}$. При $V_T' > 0$ кристалл монотонно растет с

убыванием концентраций анортита и альбита в расплаве на границе с кристаллом. Когда $V_T' < 0$, кристалл растворяется. При увеличении V_T'

концентрации анортита и альбита убывают быстрее, в какой-то момент эти компоненты полностью вычерпываются из расплава. При уменьшении V_T' зависимость концентрации анортита в расплаве на границе от времени становится более полой, а кристалл растет медленнее (рис. 3).

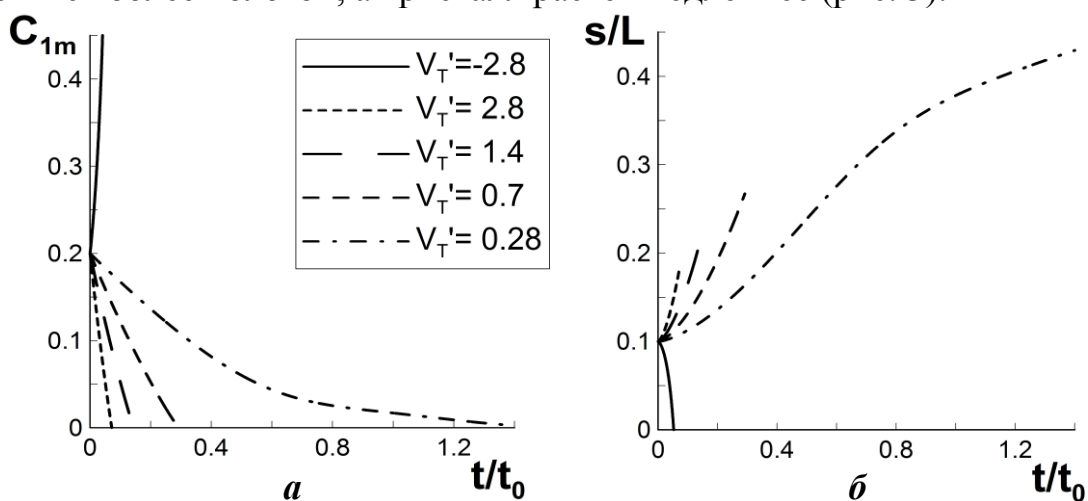


Рис.3: зависимость концентрации анортита в расплаве (а) и размера кристалла (б) от времени

При любых значениях безразмерных параметров C_D и C_{D3} кристалл растет монотонно (рис. 4). Расчеты приближаются к аналитическому решению равновесной задачи с увеличением отношения C_D (при фиксированном V_T') и уменьшении безразмерной скорости остывания V_T' при фиксированном C_D . Расчеты показывают возможность использования граничных условий в форме Стефана в процессах близких к равновесным.

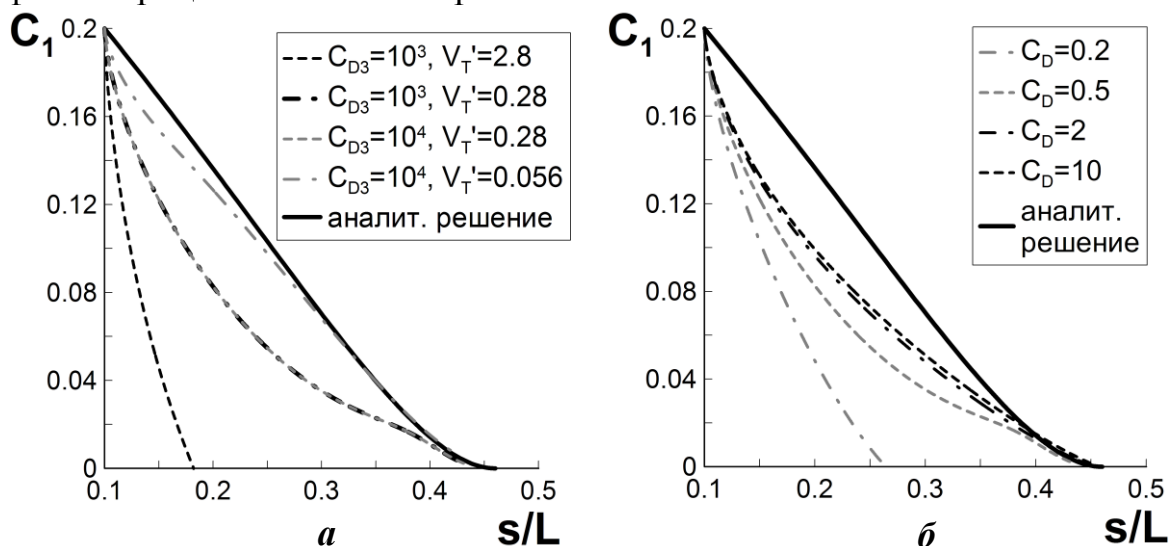


Рис.4: сравнение с равновесным решением
а) при $C_D = 0.5$; б) при $C_{D3} = 10^4, V_T' = 0.28$

В отличие от условий Стефана в случае реакционно-контролируемого роста кристалла могут осуществляться различные сценарии. При одних значениях определяющих параметров кристалл растет монотонно с образованием

монотонно-убывающего профиля анортита. При других – возможно чередование режимов роста и растворения (отсутствия роста) с образованием кристалла с периодической (осцилляторной) зональностью. Такой режим возможен только при $C_D < 1$.

Характер протекания процесса кристаллизации в случае периодического роста представлен на рис. 5 для случая без учета растворения. Рост кристалла начинается при температуре расплава ниже температуры равновесия. В процессе роста концентрации анортита и альбита в расплаве в пограничном слое убывают, причем концентрация анортита уменьшается быстрее, поскольку для данных условий в кристалл уходит преимущественно анортит. Изменение относительного содержания анортита на границе приводит к немонотонному изменению температуры равновесия и, соответственно, переохлаждения. В результате в некоторый момент температура равновесия становится ниже температуры расплава и рост кристалла прекращается. Пока кристалл не растет, анортит и альбит перераспределяются в расплаве в результате диффузии. При $C_D < 1$ анортит диффундирует быстрее, поэтому, в то время как его концентрация в погранслое достигает практически постоянного значения, концентрация альбита продолжает расти.

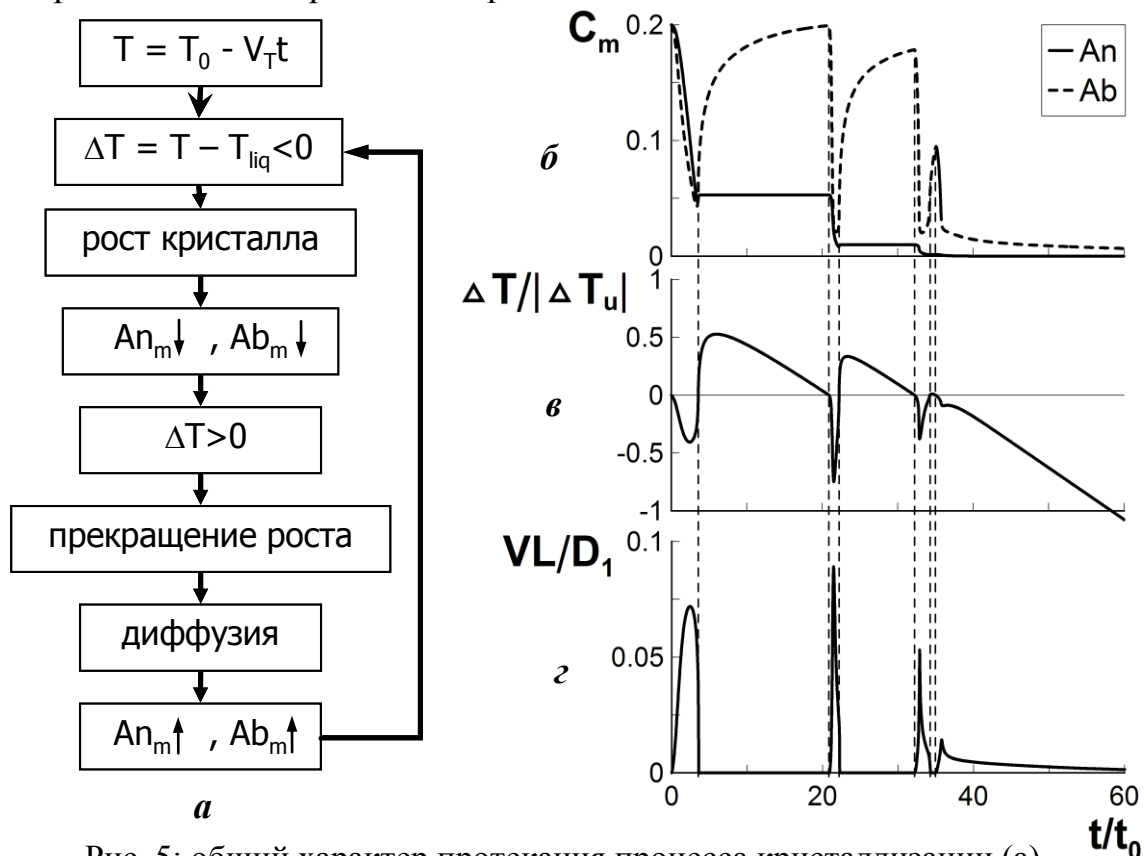


Рис. 5: общий характер протекания процесса кристаллизации (а), зависимость концентраций анортита C_{1m} и альбита C_{2m} на границе кристалла (б), безразмерного переохлаждения $\Delta T / |\Delta T_U|$ (в) и безразмерной скорости роста кристалла VL / D_1 (г) от времени.

При остывании расплава наступает момент, когда температура равновесия становится больше температуры расплава и рост кристалла возобновляется при другом составе расплава в приграничном слое. Большая продолжительность режима отсутствия роста (с положительным переохлаждением) показывает необходимость учета растворения при моделировании кристаллизации. При учете растворения кристалла перераспределение компонент происходит значительно быстрее за счет их поступления в погранслои из растворившегося кристалла. Времена протекания режимов роста и растворения практически одинаковы в отличие от случая без учета растворения.

Проведено сравнение результатов расчетов реакционно-контролируемого процесса (растворение кристалла учитывается) с аналитическим решением равновесной задачи (рис. 6). Расчеты приближаются к равновесному решению при увеличении параметров C_{D3} , C_D и уменьшении V_T' . При $C_{D3} = 10^5$ решение близко к равновесному, приближаясь к нему с убыванием V_T' и C_D . В случае сильно неравновесного решения (например $C_{D3} = 10^4$) возможен рост сложнзонального кристалла. Кристалл растет немонотонно, когда безразмерная скорость остывания V_T' меньше некоторого значения. При дальнейшем убывании V_T' количество полос в кристалле увеличивается, а профиль анортита, в среднем, приближается к равновесному решению. При отрицательных V_T' кристалл также монотонно растет, в отличие от результатов, полученных для задачи Стефана. Влияние параметра $\Delta T_u'$, отвечающего за величину углового коэффициента k_T , менее существенно: при его росте незначительно увеличивается число полос в кристалле с сохранением профиля анортита в среднем.

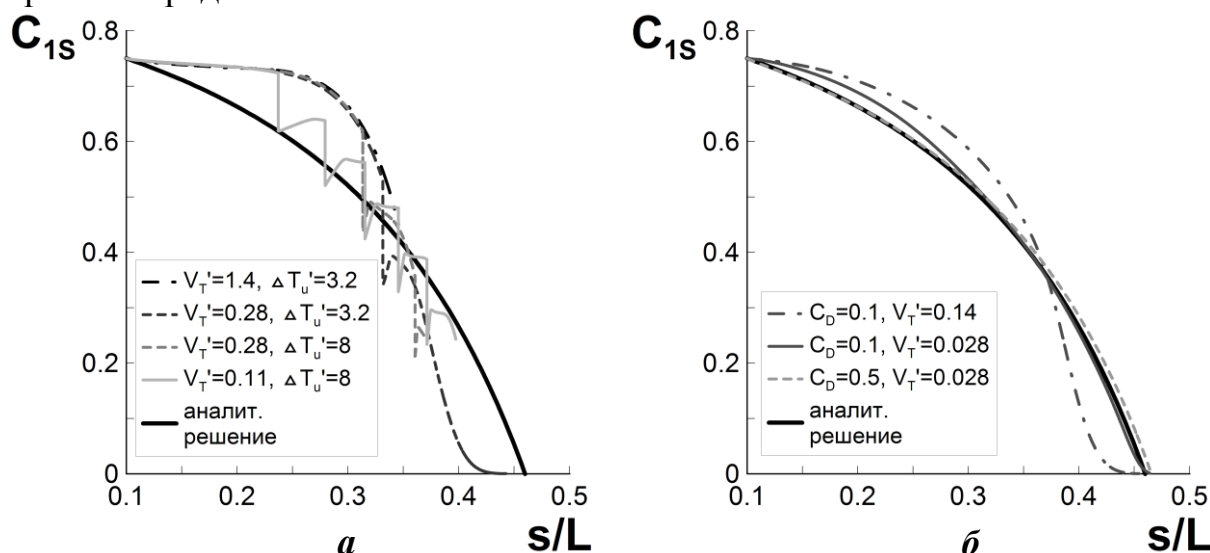


Рис. 6: сравнение с аналитическим решением.

а) при $C_{D3} = 10^4$, $C_D = 0.1$; б) при $C_{D3} = 10^5$, $\Delta T_u' \approx 3.2$.

При фиксированных значениях параметров C_{D3} и C_D в плоскости $(\Delta T_u', V_T')$ можно выделить область, соответствующую зональным кристаллам

(рис.7). Существует максимальное значение параметра V_T' (при фиксированных коэффициентах диффузии), выше которого кристалл всегда растет монотонно. При увеличении C_{D3} , т.е. при приближении к равновесному процессу, максимальное значение V_T' уменьшается. Параметр C_D существенно не влияет на величину максимального V_T' . При малых значениях C_D при маленьких V_T' возможно полное растворение кристалла после первого периода роста. Такая ситуация не описывается предложенной моделью.

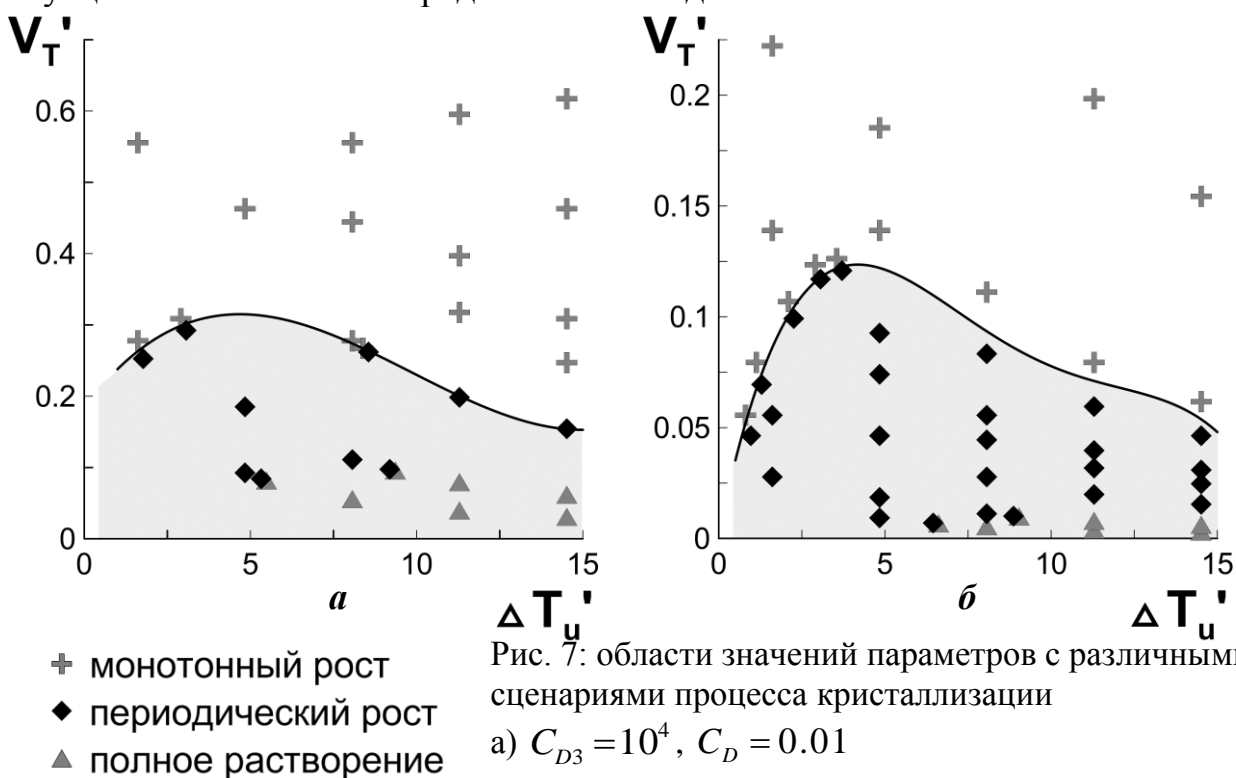


Рис. 7: области значений параметров с различными сценариями процесса кристаллизации
 а) $C_{D3} = 10^4$, $C_D = 0.01$
 б) $C_{D3} = 10^5$, $C_D = 0.01$

В Главе 3 модели роста кристалла применены для исследования кристаллизации плагиоклаза в остывающем расплаве для реальных зависимостей состава кристалла и скорости его роста (рис. 8) от состава расплава (раздел 3.1).

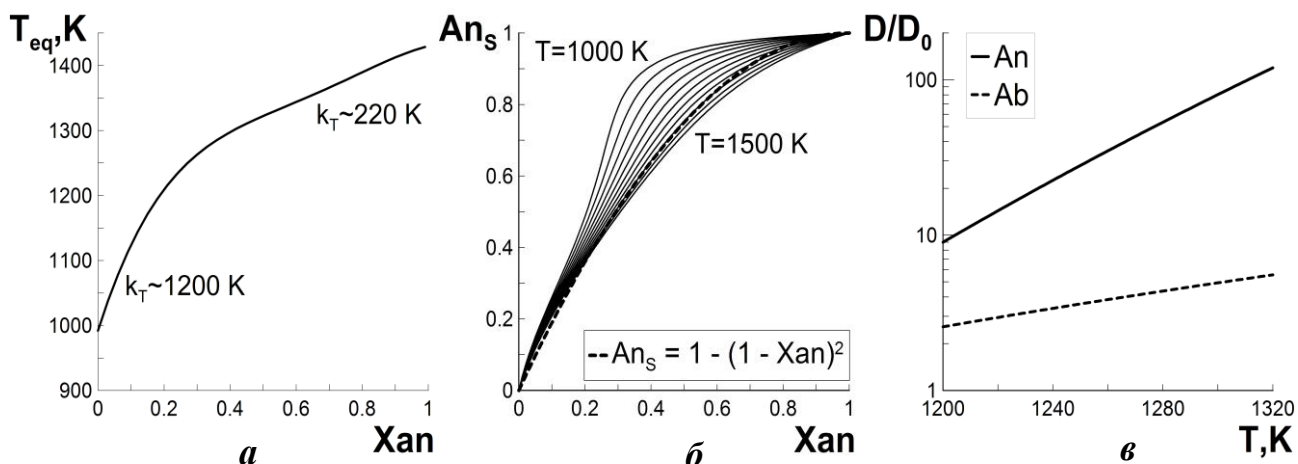


Рис.8: зависимость температуры равновесия (а) и состава кристалла (б) от состава расплава на границе кристалла, коэффициентов диффузии от температуры (в).

Результаты расчетов обсуждаются в **разделе 3.2** для случая без учета растворения и в **разделе 3.3** для случая с учетом растворения. Получено, что в широком диапазоне параметров в обоих случаях происходит смена режимов роста и растворения и образуются периодически-зональные кристаллы. В результате периодического роста в кристаллах образуются полосы, которые имеют примерно равную ширину. Зависимость средней ширины полос от скорости остывания (рис. 9 для случая с учетом растворения) хорошо аппроксимируется полиномом 4-й степени (сплошная линия). Здесь ΔT_m – характерный диапазон изменения температур (разница между начальной и конечной температурами расплава).

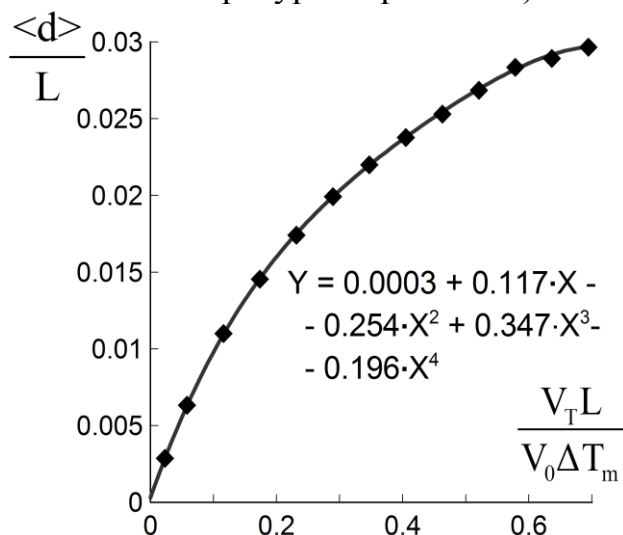
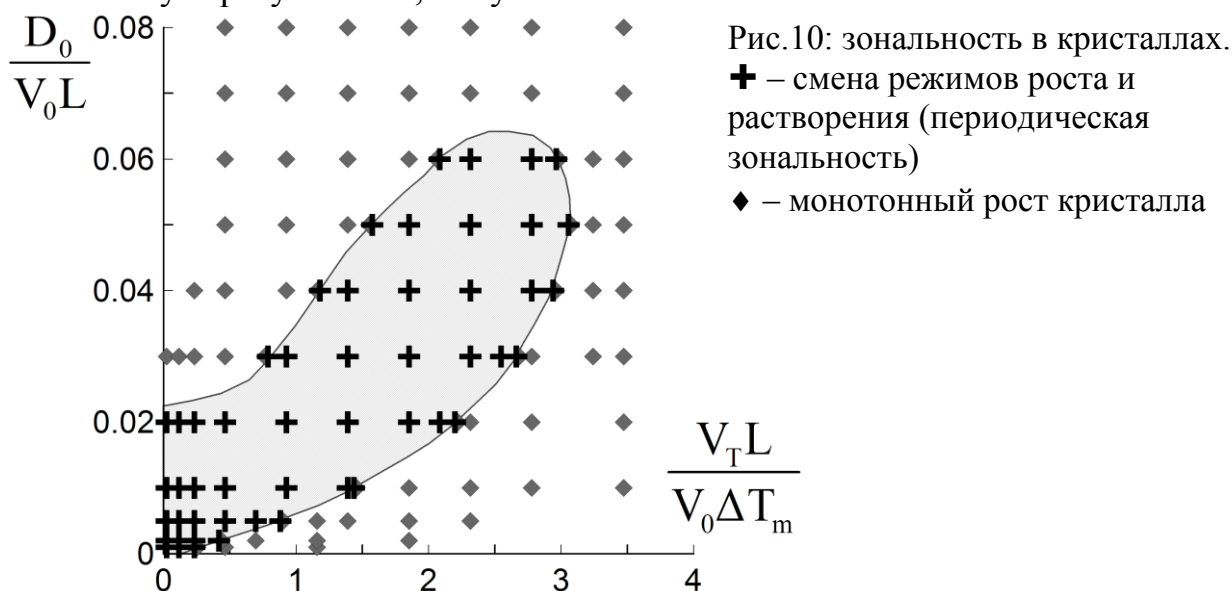


Рис.9: зависимость средней толщины полос от скорости остывания расплава для $D_0 = 10^{-14} \text{ м}^2 / \text{с}$ ($D_0 / V_0 L = 0.01$).

В результате расчетов с разными значениями безразмерных параметров, определяющими процесс кристаллизации, получена (рис. 10) область значений параметров, в которой кристалл растет со сменой режимов роста и растворения (образуются зональные кристаллы). При быстрой диффузии (характерное значение D_0 велико) процесс кристаллизации приближается к равновесному и кристалл растет монотонно. Существуют максимальные характерное значение коэффициентов диффузии (около $6.5 \cdot 10^{-14} \text{ м}^2 / \text{с}$) и безразмерная скорость

остывания, выше которых не могут образовываться зональные кристаллы. Максимальному значению безразмерного параметра, равному примерно 3.1, соответствует скорость остывания 130 К/ч (при выбранных значениях параметров задачи). При переходе границы области происходит качественное изменение характера протекания процесса, особенно существенно проявляющееся при малых D_0 : кристалл начинает расти монотонно. Этот результат, а также существование максимальной скорости остывания, соответствует результатам, полученным в главе 2.



В процессе роста состав кристалла существенно зависит от условий, в которых происходит кристаллизация. В фенокристаллах плагиоклаза выделяют 2 зоны: ядро (основная часть кристалла, вырастающая в очаге вулкана) и кайма, которая нарастает в процессе подъема по каналу вулкана. В **Главе 4** моделируется рост кристалла плагиоклаза при подъеме магмы по каналу вулкана и по изменению концентрации анортита в каймах кристаллов плагиоклаза реконструируются условия подъема магмы при извержениях вулкана Безымянный (Камчатка).

Для исследования были выбраны извержения вулкана Безымянный 2000, 2006, 2007 годов как наиболее типичные для последнего цикла активности вулкана (Shcherbakov et al, 2011). Предполагается, что в процессе подъема давление падает линейно от 100 МПа до атмосферного (0.1 МПа), скорость падения давления может меняться в процессе подъема. Размер ячейки, в которой происходит рост плагиоклаза, определяется средним расстоянием между фенокристаллами и в расчетах берется равным 0.35 мм (**раздел 4.1**). Температура равновесия плагиоклаза описывается функцией состава расплава, давления и содержания воды. Состав плагиоклаза в равновесии с расплавом определяется теми же параметрами и равновесной температурой. Эти зависимости являются интерполяцией расчетных данных, полученных с помощью пакета PETROLOG-3 (Danyushevsky, Plechov, 2011) и представлены на рис. 11. Коэффициенты диффузии анортита и альбита предполагаются постоянными, поскольку изменение температуры в процессе подъема невелико.

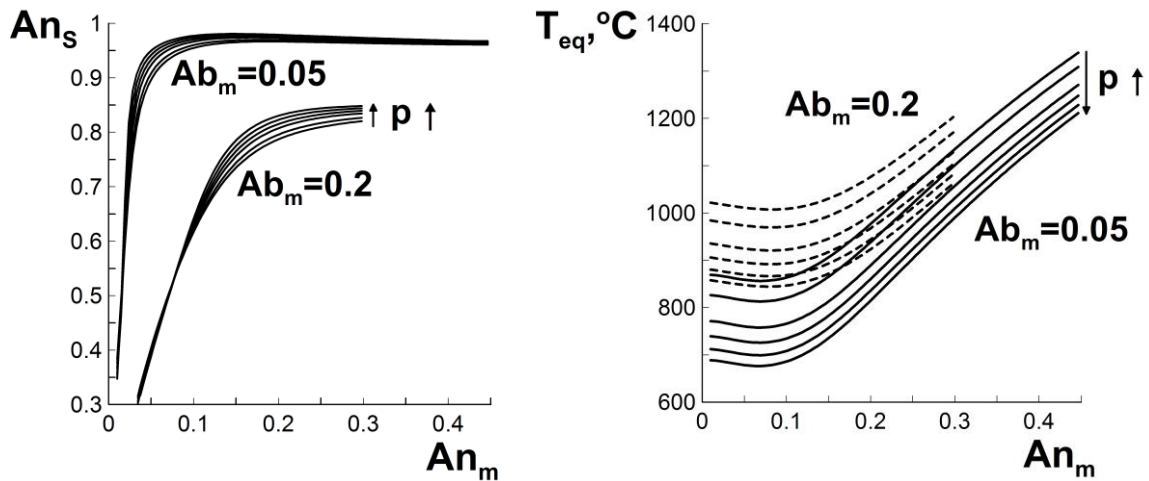


Рис.11: графики зависимости состава кристалла и температуры равновесия от анортита в расплаве.

Ставится задача определения условий подъема магмы по каналу вулкана по измеренным профилям анортита в каймах кристаллов. В разделе 4.2 показано, что равновесная модель не дает физически адекватные результаты: вычисленное по системе (2) давление достигает минимума в средней части профиля, а потом начинает расти, а температура магмы резко увеличивается по мере ее подъема. Такое увеличение нельзя объяснить выделением скрытой теплоты кристаллизации или влиянием вязкой диссипации.

В разделе 4.3 в рамках неравновесной модели диффузионного роста кристалла проводится исследование влияния условий подъема магмы, коэффициента диффузии анортита и отношения $C_D = D_{Ab}/D_{An}$ на процесс кристаллизации. В результате найдены условия подъема магмы, при которых результаты расчетов совпадают с измеренными профилями анортита (рис. 12). Наилучшее соответствие на первом этапе роста ($s \leq 0.02$ мм) получено при $D_1 = 10^{-13} \text{ м}^2/\text{с}$ и $C_D = D_{Ab}/D_{An} = 0.3$ для времени подъёма 15-20 дней, что соответствует оценкам времени подъёма магмы для извержений такого типа. На втором этапе роста для извержения 2007-го года скорость падения давления должна стать меньше, по крайней мере, в 2 раза (не меньше 30 дней). При этом кристаллизация близка к равновесной. Для образца 2006-го года быстрое убывание концентрации анортита на второй стадии может быть вызвано быстрым (менее, чем за 1 день) подъемом магмы (и, соответственно, быстрым падением давления) или получено в результате комбинации относительно медленного подъёма магмы и быстрого охлаждения. Первый сценарий кажется более реалистичным. Профиль анортита образца 2000-го года не может быть получен при использовании предложенной модели. В этом случае могли играть роль другие процессы, помимо охлаждения и падения давления, например, кристаллизация других минералов.

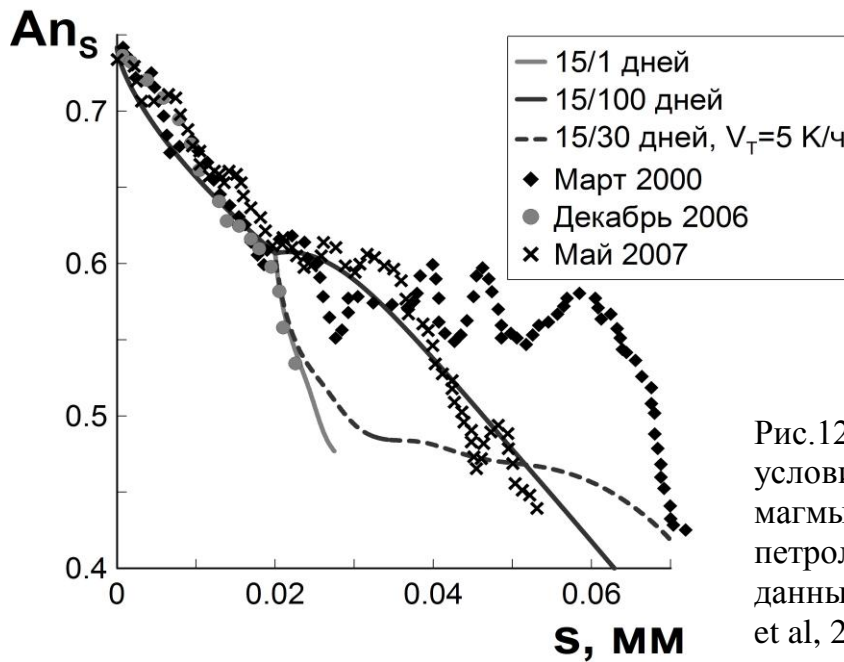


Рис.12: реконструкция условий подъема магмы в сравнении с петрологическими данными (Shcherbakov et al, 2011)

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

- Построена модель неравновесной кристаллизации произвольного многокомпонентного расплава, вызванной изменением внешних условий. Предложен метод решения разностно-краевой задачи для параболической системы уравнений, связанный с переходом в подвижную систему координат, движущуюся вместе с гранью растущего кристалла.
- Модели равновесной и неравновесной кристаллизации применены для качественного и количественного исследования кристаллизации плагиоклаза при использовании модельных функций, определяющих состав кристалла и температуру равновесия в зависимости от относительного содержания анортита в расплаве, и постоянных коэффициентов диффузии. Найдено аналитическое решение равновесной задачи.
- Проанализировано влияние граничных условий на границе кристалл-расплав на динамику кристаллизации. Показано, что при использовании граничных условий в форме Стефана (условие локального равновесия по температуре) процесс кристаллизации зависит только от двух безразмерных параметров. Состав кристалла меняется монотонно при монотонном падении температуры. Показано, что граничные условия в форме Стефана могут использоваться при моделировании процессов, близких к равновесным. Применение этого условия не позволяет объяснить зональность химического состава плагиоклазов, наблюдаемую как в природных, так и экспериментально выращенных кристаллах.
- В случае реакционно-контролируемого роста кристалла скорость роста определяется локальным переохлаждением расплава на его границе. В зависимости от значений определяющих параметров задачи кристалл может

расти как монотонно, так и со сменой режимов роста и растворения. При этом образуются зональные по составу кристаллы. Для заданных значений коэффициентов диффузии существует минимальное значение безразмерного параметра (определяемого отношением скорости остывания и углового коэффициента температуры ликвидуса), ниже которого кристалл растет монотонно.

- Процесс кристаллизации плагиоклаза, вызванный остыванием расплава (при постоянном давлении) исследован для реальных зависимостей состава кристалла и температуры ликвидуса от состава расплава. Как и для модельных зависимостей, реакционно-контролируемый рост при линейном падении температуры приводит к образованию зональных кристаллов. Получена зависимость средней ширины полос от скорости остывания. Получена область значений параметров, при которых возникает зональность. Существуют максимальная скорость остывания и максимальная скорость диффузии (характерное значение коэффициентов диффузии), выше которых кристаллы растут монотонно.
- Исследован процесс роста кайм на кристаллах плагиоклаза при подъеме магмы по каналу вулкана – в условиях линейного падения давления. Использовались реальные зависимости состава кристалла и температуры равновесия от состава расплава и давления, основанные на петрологических данных магмы вулкана Безымянный. Проводилось сравнение результатов расчетов при различных значениях параметров задачи с профилями плагиоклазов, образованных при извержениях этого вулкана в 2000, 2006 и 2007 годах. Показана необходимость использования неравновесной модели роста кристалла. Реконструированы условия подъема магмы в процессе этих извержений. Это позволило независимо оценить параметры магматической системы вулкана Безымянный.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

- 1 **Горохова Н.В., Мельник О.Э. Моделирование динамики диффузионного роста кристалла из остывающего магматического расплава // Изв. РАН. МЖГ. 2010. № 5.**
- 2 Горохова Н.В. Моделирование диффузионного роста кристалла плагиоклаза // Труды конференции-конкурса молодых ученых НИИ механики МГУ 14-16 октября 2009 г. 2010. С. 120-132.
- 3 Горохова Н.В. Модель диффузионного роста кристалла: механизм образования зональности в кристалле плагиоклаза // М.: Изд-во Московского Университета, тезисы докладов 16 школы-семинара «Современные проблемы аэрогидродинамики». 2010, 06-16 сентября 2010 г., Сочи. С. 38-39.
- 4 Горохова Н.В. Модель диффузионного роста кристалла плагиоклаза // Сборник тезисов докладов Всероссийской научной школы молодых ученых «Механика неоднородных жидкостей в полях внешних сил». 2010, 30 ноября

- 2 декабря 2010 г., Москва. С. 41-43.
- 5 Горохова Н.В. Модель Диффузионного роста кристалла // Труды конференции-конкурса молодых ученых НИИ механики МГУ 13-15 октября 2010. 2011. С.117-123.
 - 6 Горохова Н.В. Модель диффузионного роста кристалла плагиоклаза // Изд-во Нижегородского государственного университета, тезисы докладов X Всероссийского съезда по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики «Актуальные проблемы механики». 2011, 24-30 августа, Нижний Новгород.
 - 7 Горохова Н.В. Модель роста кристалла плагиоклаза при подъеме магмы по каналу вулкана. XIX Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов», Москва, 9-13 апреля 2012, http://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2012/1796/28416_810a.pdf.
 - 8 N. Gorokhova and O. Melnik. Numerical simulation of plagioclase rim growth during magma ascent at Bezymianny volcano, Kamchatka. European Geosciences Union. General Assembly 2012. Austria, Vienna, 22-27 April 2012, <http://meetingorganizer.copernicus.org/EGU2012/EGU2012-14435.pdf>.
 - 9 Горохова Н.В. Модель роста кристалла плагиоклаза при его подъеме по каналу вулкана // Труды конференции-конкурса молодых ученых НИИ механики МГУ 12-14 октября 2011. 2013. С. 101-108.
 - 10 **N.V. Gorokhova, O.E. Melnik, P.Yu. Plechov, V.D. Shcherbakov. Numerical simulation of plagioclase rim growth during magma ascent at Bezymianny Volcano, Kamchatka // Journal of Volcanology and Geothermal Research. 2013. V. 263. P. 172–181.**
 - 11 Горохова Н.В. Исследование влияния параметров модели диффузионного роста кристалла на процесс кристаллизации плагиоклаза // Труды конференции-конкурса молодых ученых НИИ механики МГУ 8-9 октября 2013 (в печати).