

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Николаева Георгия Сергеевича

ОКСИ-, БАРО-, ТЕРМОМЕТРИЯ ШПИНЕЛИДОВ:

Модель SPINMELT-2.0 и методики её применения

представленной на соискание ученой степени кандидата геолого-минералогических наук по специальности 1.6.4 – Минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых

Основная часть работы Г.С.Николаева посвящена разработке математической модели оценки ликвидусной температуры и состава магматических шпинелидов. Модель реализована в виде компьютерной программы SPINMELT-2.0, которая формально является развитием программы SPINMELT, фактически же вся термодинамическая основа модели была сделана заново. По точности расчета новая модель превосходит предложенные ранее аналоги. Проведено исследование модели, показаны тренды изменения моделируемых характеристик при изменении входных параметров, сделан вывод, что поведение модели соответствует принципу кислотно-основного взаимодействия Коржинского. При исследовании модели было установлено влияние серы в расплаве на ликвидусную температуру и состав кристаллизующегося шпинелида, однако оценка параметров такого влияния требует постановки специальных работ. Предложены и опробованы на реальных геологических объектах методы использования модели для восстановления петролого-геохимических параметров (в первую очередь температуры, давления и активности кислорода) шпинель-содержащих магматических систем. Предложенные методы с пошаговым подбором параметров кристаллизации представляются вполне логичными, хотя и требуют значительного объема вычислений, но программа SPINMELT-2.0 позволяет выполнить такие вычисления в реальное время.

Отдельное внимание в работе уделено разработке оливин-шпинелевого оксифугометра. Хотя в защищаемых положениях эта часть работы не нашла отражения, она является неотъемлемой частью выполненных исследований, так как значительная часть экспериментов (особенно высокобарических), на которых калибровались уравнения модели, выполнены в условиях неконтролируемой активности кислорода, которая существенно влияет на равновесия и требует обязательной оценки. Тестирование предложенного ранее уравнения Балльхауса-Берри-Грина показало завышение оценок активности кислорода для восстановительных высокобарических условий, что и обусловило разработку и калибровку нового уравнения.

Новизна работы не вызывает сомнения, поскольку модель построена на новой оригинальной термодинамической основе и калибрована с использованием последних доступных экспериментальных данных. *Актуальность работы* обусловлена тем, что хромит является основным промышленным источником хрома, кроме того, наряду с сульфидами, концентратом ЭПГ. Состав кристаллизующихся из расплава шпинелидов весьма чувствителен к основным петрологическим параметрам (температуре, давлению и активности кислорода), что позволяет оценивать параметры природных магматических процессов, а значительный объем накопленных в последнее время экспериментальных данных и развитие вычислительной техники дают возможность строить более сложные и более точные модели для этих оценок в широком диапазоне физико-химических параметров.

К работе есть несколько технических вопросов и замечаний:

1 – автор оперирует различными характеристиками точности, так при описании оливин-шпинелевого оксифугометра использовано среднее абсолютное отклонение, а при построении уравнений для коэффициентов распределения реакций модели указаны среднеквадратические отклонения, при тестировании модели опять указаны средние абсолютные отклонения, что затрудняет восприятие результатов исследований, но чистка выборки выполнена по попаданию в интервал 2σ . Более логичным и интерпретируемым (и традиционным в математической статистике) выглядит использование именно среднеквадратического отклонения. Кроме того следует учесть, что для нормального распределения среднее абсолютное отклонение охватывает около 42 % изменчивости оцениваемой величины и примерно на 25% меньше среднеквадратического, т.е. для получения 95 %-ного доверительного интервала, традиционно принятого в качестве погрешности оценок, величину среднего отклонения необходимо умножить

на $2\sqrt{\frac{\pi}{2}} \approx 2.5$, а заявленные в работе погрешности получаемых оценок сильно занижены. При проверке модели BBG указано, что «При давлении 10 кбар среднее отклонение составляет 0.64 ± 0.66 лог.ед., а для экспериментов при 15 кбар оно составляет 1.27 ± 0.74 лог.ед.», при этом не пояснено, как указаны границы доверительного интервала: 1σ , 2σ , среднее абсолютное отклонение или что-то другое.

2 – сомнительным выглядит отбрасывание экспериментов, выходящих за интервал в 2σ . Если предполагается наличие выбросов в обучающей выборке, необходимо использовать робастные методы получения оценок параметров регрессии, реализованные на сегодняшний день в большинстве программных пакетов и библиотек, используемых при обработке данных.

3 – осталось не понятным, почему в уравнениях 3, 4 и 5 модели используются концентрации компонентов, а в уравнении 2 в качестве активности Al^{3+} в шпинелиде используется экспонента концентрации Al^{3+} , хотя в правой части этого уравнения концентрация алюминия в расплаве стоит под логарифмом. Поскольку уравнение линейное по параметрам, при расчете это может привести к отрицательным содержаниям Al^{3+} в шпинелиде.

4 – в уравнениях модели (таблица 2) присутствуют регрессионные коэффициенты, неотличимые от нуля даже в пределах 1σ : (4) $D = 0.0003 \pm 0.018$, $F = 0.28 \pm 0.57$, (5) $C = -0.014 \pm 0.0262$, $E = -0.47 \pm 0.953$. Почему эти переменные не были исключены из регрессионной модели, если коэффициент распределения от них не зависит? Значимость коэффициентов, не отличимых от нуля в пределах 2σ в этих уравнениях так же весьма сомнительна.

5 – на странице 18 автореферата указано, что «изменение red-ox условий от QFM-3 до QFM+2 при 1 атм увеличивает температуру ликвидуса на 177°C . При этом вариации состава шпинелида изменяются незначительно». Во-первых, это утверждение противоречит рисунку 6 автореферата, где отчетливо показано изменение состава шпинелида при изменении активности кислорода, а в подписи к рисунку указано «крайне левые точки соответствуют буферу QFM-3, крайне правые – QFM+2». Во-вторых, тогда не понятно, как состав шпинелида может использоваться для оценки активности кислорода?

Все высказанные замечания несколько не умаляют значимость работы, но, возможно, смогут помочь автору при проведении дальнейших исследований. Следует отметить, что автор выполнил большой объем работы, владеет методами обработки данных, термодинамических расчетов и интерпретации этих расчетов. Автореферат написан хорошим научным языком, дает представление о цели, задачах и методах исследования, защищаемые положения достаточно обоснованы.

Представленная к защите диссертационная работа соответствует требованиям п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», предъявляемых к кандидатским диссертациям, а ее автор Георгий Сергеевич Николаев заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата геолого-минералогических наук по специальности 1.6.4 – Минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых.

Лавренчук Андрей Всеволодович, кандидат геолого-минералогических наук, старший научный сотрудник лаборатории петрологии и рудоносности магматических формаций ФГБУН Института геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН, доцент кафедры Минералогии и Геохимии Геолого-Геофизического факультета Новосибирского государственного университета.

Почтовый адрес: 630090, г. Новосибирск, просп. Ак. Коптюга, д. 3

Электронная почта: alavr@igm.nsc.ru

Я, Лавренчук Андрей Всеволодович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку.

ПОДПИСЬ УДОСТОВЕРЯЮ
ЗАВ. КАНЦЕЛЯРИЕЙ
ЖИПОВА Е.Е.
23.07.2024г.

