

Математическое моделирование роста популяции кристаллов циркона.

Сорокин Михаил Александрович

Студент (специалист)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
Механико-математический факультет, Кафедра гидромеханики, Москва, Россия

E-mail: sorokin.mihail.a@gmail.com

При кристаллизации магматического расплава из него выделяются различные минералы, которые можно разделить на основные (плагиоклаз, оливин, пироксены), присутствующие в больших объемных долях, и акцессорные, объемная доля которых составляет доли процента. Они обычно концентрируют в себе элементы, содержащиеся в примесных количествах. К последним относится циркон, состоящий из оксидов кремния и циркония ($ZrSiO_4$), и различных других элементов в небольшом количестве.

В связи с активным использованием цирконов для геохронологии, а также изотопного и химического анализов, важно количественно связать условия возникновения и роста цирконов с изменением температуры магмы. Лабораторные эксперименты не позволяют оценить скорость роста и нуклеации цирконов в естественной магматической системе, поскольку эти процессы очень медленные и могут занимать тысячи и десятки тысяч лет. В связи с этим актуальным становится численное моделирование роста популяции цирконов в остывающем магматическом расплаве.

В работе представлена математическая модель зарождения и роста популяции кристаллов циркона в охлаждающейся магматической интрузии, позволившая рассчитать распределения кристаллов циркона по размерам из первых принципов. Модель основана на численном решении уравнения диффузии с учетом зарождения и роста отдельных кристаллов, зависимости равновесной концентрации циркония и коэффициента диффузии от температуры. Распределение кристаллов циркония по размерам рассчитано при различных скоростях охлаждения магматического очага и сравнивается с измерениями.

Нахождение численного решения данного уравнения, представляет из себя сложную, с вычислительной точки зрения, задачу в случае трёхмерной постановки. Если производить вычисления на среднестатистическом современном процессоре для персональных компьютеров, один расчёт будет занимать более месяца. Поэтому код для численного решения в двумерной и трёхмерной постановках был написан для ускоренного расчёта с применением графических ускорителей на языке CUDA.

В результате проведенных расчетов удалось получить распределение кристаллов по размерам в трёхмерной постановке, которое хорошо согласуется с измерениями на образцах продуктов вулканических извержений, а также получить первые оценки зависимости скорости нуклеации от переохлаждения для кристаллов циркона в остывающем магматическом очаге.