

На правах рукописи

Захарова Алена Александровна



**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
МИНЕРАЛЬНЫХ АГРЕГАТОВ:
ТЕОРИЯ И ГЕОЛОГИЧЕСКОЕ ПРИЛОЖЕНИЕ**

Специальность 25.00.05 – Минералогия, кристаллография

**Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата геолого-минералогических наук**

Санкт-Петербург – 2022

Диссертация выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Санкт-Петербургский горный университет».

Научный руководитель:

доктор геолого-минералогических наук, профессор

Войтеховский Юрий Леонидович

Официальные оппоненты:

Котова Ольга Борисовна

доктор геолого-минералогических наук, старший научный сотрудник, федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр «Коми научный центр Уральского отделения Российской академии наук»; лаборатория технологии минерального сырья, заведующий лабораторией;

Талис Александр Леонидович

доктор физико-математических наук, федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук; лаборатория физической химии полимеров, ведущий научный сотрудник.

Ведущая организация – Институт геологии – обособленное подразделение Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра «Карельский научный центр Российской академии наук», г. Петрозаводск.

Защита диссертации состоится **30 сентября 2022 г. в 15:30** на заседании диссертационного совета ГУ 212.224.04 Горного университета по адресу: 199106, г. Санкт-Петербург, 21-я В.О. линия, д.2, ауд. № 1171а.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Горного университета и на сайте www.spmi.ru.

Автореферат разослан 30 июля 2022 г.

УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ
диссертационного совета



ГУЛЬБИН
Юрий Леонидович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность.

Структура и текстура – важнейшие характеристики горных пород и руд наравне с их минеральным и химическим составом. Несмотря на развитие современных технологий, основным подходом к их определению остается качественное описание структурно-текстурных особенностей минеральных агрегатов. Такой подход порождает огромное число разновидностей структур и текстур, границы между которыми строго не обозначены, а сами термины не имеют единого определения и однозначной трактовки.

Структурно-текстурный анализ минеральных агрегатов имеет большое значение для решения задач технологической минералогии, включая прогноз извлечения рудных минералов. Обычно он строится на основе дорогостоящих технологических испытаний. Внедрение методик, позволяющих прогнозировать извлечение полезных компонентов и разделять руды на технологические типы уже на ранних этапах геологоразведочных работ путем анализа их структуры и текстуры позволит значительно снизить затраты на технологические испытания.

Работа носит методический характер и посвящена актуальной проблеме разработки теоретических основ количественной классификации структур минеральных агрегатов, предназначенной для решения широкого круга геолого-генетических и минералого-технологических задач. Понятие структуры в работе определено строго математически, категория текстуры употребляется в общепринятом (описательном) смысле. Список важнейших структурных терминов, использованных в диссертации, приведен в таблице 1.

Степень разработанности темы исследования.

Существует несколько основных подходов к определению структур и текстур минеральных агрегатов. Классический описательный подход (Розенбуш, 1934; Заварицкий, 1955; и др.) основан на наблюдениях горных пород под микроскопом и приводит к большому числу структурных разновидностей, между которыми отсутствуют четкие границы (Половинкина, 1966). Структурные термины при этом не имеют однозначной трактовки (Левинсон-Лессинг, 1963; Жабин, 1979). Структур-

но-текстурные особенности руд, важные для оценки степени раскрытия минеральных сростков при обогащении (Изоитко, 1997), также определяются в основном описательно (Бетехтин, 1958; Шахов, 1961; Исаенко, 1964).

Термодинамический подход базируется на представлении о межзерновых контактах как зонах разрыва химических связей и зонах краевых дислокаций кристаллических решеток. Строение минеральных агрегатов в этом случае рассматривается с точки зрения приближения к термодинамическому равновесию контактирующих зерен. Это приближение оценивается разными способами: с помощью гранулометрических исследований (Трейвус, 1998), путем измерения дигедральных углов (Vernon, 1968, Жабин, 1979) и расчета атомарной плотности граней (Бродская, 1988, 2018). Термодинамический подход строго обоснован и позволяет количественно характеризовать процессы кристаллизации горных пород, но не ведет к созданию их строгой структурной классификации.

Количественный подход включает разные методы: модальный анализ по Делессу (Delesse, 1848), Розивалю (Rosiwal, 1898) и Глаголеву (Глаголев, 1941), частоты контактирования минеральных зерен в агрегате (Rogers, Bogy, 1958; Lafeber, 1963), теорию марковских цепей (Вистелиус, 1972), теорию графов (Миронов, 1975; Макагонов, 1979; Маликов, 1985).

Особую роль в развитии количественных методов анализа структур сыграли минералогические интеграционные устройства (МИУ), с помощью которых образец сканируется вдоль серии параллельных линий, а также анализаторы видеоизображений (ВидеоТест, ImageJ и др.).

Несмотря на разнообразие подходов к анализу структур минеральных агрегатов, проблема их количественной классификации и однозначного определения самого понятия «структуры» на сегодняшний день не решена.

Цель работы – создание математической модели минерального агрегата (в том числе горной породы, руды), определение его структуры на основе вероятностей межзерновых контактов и разработка количественной классификации структур, предназначенной для использования в геологической практике.

Задачи исследования:

1. Моделирование структур биминеральных агрегатов на основе статистик бинарных и тернарных межзерновых контактов.
2. Моделирование структур триминеральных агрегатов на основе статистик бинарных межзерновых контактов.
3. Использование построенной модели для выявления связи между структурой руд и степенью извлечения полезного минерала.

Научная новизна:

1. Для минеральных агрегатов (в том числе горных пород и руд) разработана математическая модель, основанная на статистиках вероятностей бинарных и тернарных межзерновых контактов.
2. Для биминеральных агрегатов выявлены модельные тренды, отражающие закономерности расположения типовых структур и текстур на барицентрических диаграммах вероятностей бинарных и тернарных контактов, и предложена классификационная диаграмма – барицентрический тетраэдр вероятностей тернарных контактов с 8 полями, каждому из которых отвечает структурная индикатриса 3-го порядка.
3. Для триминеральных агрегатов предложена классификационная диаграмма – барицентрический 6-вершинный симплекс вероятностей бинарных контактов, в тетраэдрических гранях которого построены поля структурных типов.
4. Для апатитовых руд Хибин и железистых кварцитов Костомукши установлена связь между структурными типами руд и степенью извлечения полезного минерала.

Теоретическая и практическая значимость работы:

1. Построенные модельные тренды и классификационные диаграммы для бинарных и тернарных контактов позволяют количественно характеризовать структуры и находить тонкие различия между минеральными агрегатами сходного химического и минерального состава.
2. Установленные зависимости между структурными типами руд и степенью извлечения полезного минерала могут быть использованы при минералого-технологическом карти-

ровании. Практическая значимость исследования подтверждена актом внедрения, полученным от ООО «ЦНТ Инструментс».

Методология и методы исследования.

Теоретической основой диссертационной работы послужила методология определения структур минеральных агрегатов, разработанная Ю. Л. Войтеховским, которая заключается в типизации структур на основе статистик межзерновых контактов в *n*-минеральном агрегате.

Каменный материал для исследования представлен амфиболитами Керетского архипелага, апатитовыми рудами Хибинского массива и железными рудами Костомукшского рудного поля, всего 35 образцов. Шлифы изучены с помощью поляризационных микроскопов Leica DM750 и Leica DM2700P, а также анализатора структур МИУ-5М. Панорамные снимки шлифов обработаны в графическом редакторе CorelDRAW X8, для подсчетов контактов применена программа ArcGIS. В работе также использованы авторские программы, написанные на языке Python.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Моделирование минеральных агрегатов как автоморфизмов минеральных видов позволяет построить классификацию структур на основе статистик бинарных и тернарных межзерновых контактов и предложить для них барицентрические диаграммы нового типа, выявляющие закономерности в расположении классических структур и текстур.

2. Статистическое равновесие Харди-Вайнберга отвечает гомогенному перемешиванию минеральных зерен при любом модальном составе агрегата, а его соответствие статистически равновесному агрегату проверяется критериями согласия.

3. Установленные на основе построенной модели структурные типы апатитовых (Хибины) и железных (Костомукша) руд коррелируют со степенью извлечения полезного минерала.

Степень достоверности результатов исследования обеспечена детальным анализом теоретических основ построенной модели, корректной статистической обработкой результатов измерений, соответствием результатов моделирования геологическим и технологическим данным.

Апробация результатов. Основные положения и результаты работы докладывались на Всероссийской молодежной геологической конференции памяти В.А. Глебовицкого (СПбГУ, 2020), IX Международной научной конференции молодых ученых «Молодые – Наукам о Земле» (РГГУ им. С. Орджоникидзе, 2020), XIX Международном семинаре «Геология, геоэкология, эволюционная география» (РГПУ им. А.И. Герцена, 2020), Геологическом международном студенческом саммите (СПбГУ, 2021, 2022), XXIX Всероссийской молодежной конференции «Строение литосферы и геодинамика» (Институт земной коры СО РАН, 2021), XVII Международном форуме-конкурсе студентов и молодых исследователей “Topical issues of rational use of natural resources” (Санкт-Петербургский горный университет, 2021), международной конференции 72nd VNT – Freiberg university forum “Technologies for climate protection”, 15th Freiberg – St. Petersburg Colloquium of Young Scientists (Фрайбергская горная академия, 2021), I Международной междисциплинарной научно-практической конференции «Человек в Арктике» (Санкт-Петербургский горный университет, 2021), XIX Всероссийской (с международным участием) Ферсмановской научной сессии (ГИ КНЦ РАН, 2022), XIV Российском семинаре «Технологическая минералогия в оценке качества минерального сырья природного и техногенного происхождения» (ФБГУ «ВИМС», 2022).

Личный вклад автора заключается в формулировке задач диссертационного исследования, анализе зарубежной и отечественной научной литературы по проблеме; выполнении теоретических исследований (в том числе разработке программ); обработке и интерпретации геологических данных.

Публикации по работе. Результаты диссертационной работы в достаточной степени освещены в 13 печатных работах, в том числе в 3 статьях – в изданиях из перечня рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук (далее – Перечень ВАК), в 2 статьях – в изданиях, входящих в международную базу данных и систему цитиро-

вания Scopus. Получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Структура работы. Диссертация состоит из оглавления, введения, 4 глав с выводами по каждой из них, заключения и библиографического списка. Содержит 163 страницы машинописного текста, 61 рисунок, 22 таблицы, 12 формул, список литературы из 130 наименований и 5 приложений.

Благодарности. Автор выражает благодарность научному руководителю д.г.-м.н., проф. Ю.Л. Войтеховскому, к.г.-м.н., доц. Д.А. Петрову, к.г.-м.н., доц. В.В. Смоленскому (кафедра минералогии, кристаллографии и петрографии Горного университета) за всестороннюю помощь и поддержку при написании работы; д.г.-м.н. С.Г. Скублову (ИГГД РАН), к.г.-м.н. А.А. Компанченко, к.г.-м.н. Ю.Н.Нерадовскому, к.т.н. Д.Н. Шибасовой (КНЦ РАН) за предоставленный фактический материал; д.г.-м.н. Р.Л. Бродской, н.с. Ю.В. Кобзевой, ведущим инженерам И.В. Бильской и В.Д. Ляхницкой (ВСЕГЕИ) за помощь в организации работы на МИУ-5М.

Исследование поддержано грантом Комитета по науке и высшей школе Правительства Санкт-Петербурга (распоряжение № 255 от 03.12.2020 г.)

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность работы, сформулированы цель, задачи исследования и научная новизна, раскрыто практическое значение диссертации и сформулированы основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе рассмотрены различные подходы к определению структур и текстур минеральных агрегатов. Классический описательный подход характеризуется отсутствием их единой терминологии и строгой классификации. Вторая часть главы посвящена термодинамическому подходу. В нем межзерновые границы рассматриваются как зоны краевых дислокаций кристаллических решеток, а структура минерального агрегата описывается на основе понятия термодинамического равновесия. В третьей части главы обсуждаются количественные методы анализа структур и теоретические основы методики их типизации, основанной на статистике вероятностей межзерновых контактов.

Во второй главе выполнено теоретическое моделирование структур минеральных агрегатов. Выявлены модельные тренды для биминеральных агрегатов. Предложены классификационные диаграммы – барицентрический тетраэдр для тернарных контактов в биминеральных агрегатах и барицентрический 6-вершинный симплекс для бинарных контактов в триминеральных агрегатах.

В третьей главе продемонстрирована возможность практического использования разработанной методики типизации структур. На примере амфиболитов Керетского архипелага показана возможность применения модельных трендов для количественной характеристики структур. На примере апатитовых и железных руд обоснована связь структурных типов и степени извлечения полезного минерала при обогащении.

В четвертой главе рассмотрены автоматические методы минералогического анализа, включая использование анализатора структур МИУ-5М для полуавтоматического подсчета межзерновых контактов.

В заключении приводятся основные выводы по работе.

Краткое описание методики

Методика определения структур минеральных агрегатов по статистикам вероятностей (p) межзерновых контактов в n -минеральном агрегате («метод структурной индикатрисы») изложена в статьях (Войтеховский, 1998, 2014, 2016).

Важная черта организации минеральных агрегатов – контактирование 4-х зерен в точке, 3-х – по ребру, 2-х – по поверхности (Салтыков, 1958). Куотернарные контакты (p_{ijkl}) никогда не попадают в плоский срез, поэтому для анализа структуры используются только тернарные (p_{ijk}) и бинарные (p_{ij}) контакты. Для тернарных контактов математический аппарат разработан только для биминеральных агрегатов, поэтому для анализа структуры в основном используются бинарные контакты (1)

$$p_{ijkl} \rightarrow p_{ijk} \rightarrow p_{ij}, \quad (1)$$

где i, j, k, l – контактирующие минералы.

Согласно разработанной методике минеральный агрегат (в том числе горная порода или руда) представляет собой ав-

гоморфизм – многозначное отображение в себя минеральных видов $m_i, m_j \dots m_n$, реализуемых в минеральных индивидах, управляемое оператором p_{ij} (2)

$$\{m_i\}_1^n \xrightarrow{p_{ij}} \{m_i\}_1^n, \quad (2)$$

где m_i – минеральные виды, n – число минералов в агрегате, p_{ij} – вероятности (частоты) бинарных межзерновых контактов. Сумма вероятностей всех контактов равна единице:

$$\sum_{i,j=1}^n p_{ij} = 1. \quad (3)$$

В левую часть уравнения (3) логично добавить межзерновые контакты в виде произведения переменных m_i, m_j . Тогда сумма в левой части уравнения выражается в виде произведения матриц (4):

$$\sum_{i,j=1}^n p_{ij} m_i m_j = [m_1 m_2 \dots m_n] \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & \dots & p_{1n} \\ p_{21} & p_{22} & \dots & p_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ p_{n1} & p_{n2} & \dots & p_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ \dots \\ m_n \end{bmatrix} = E \quad (4)$$

где E – единичная матрица.

В матрице вероятностей уравнения (4) заложена квадратичная форма, которой соответствует квадратичная поверхность в n -мерном пространстве (структурная индикатриса), которая определяется приведением симметрической матрицы $[p_{ij}]$ к диагональному виду (5).

$$Q_{ii} = \begin{bmatrix} q_{11} & & & \\ & q_{22} & & \\ & & \dots & \\ & & & q_{nn} \end{bmatrix} \quad (5)$$

где q_{nn} – диагональные элементы.

Принцип номенклатуры: структура S_n^m соответствует диагональной матрице Q_{ii} , в которой на n позициях стоят m положительных элементов. На рисунке 1 приведена барицентрическая диаграмма, на которой показаны два основных

структурных типа S_2^1 (преобладает рассеяние зерен, 1 плюс на диагонали) и S_2^2 (преобладает агрегация зерен, 2 плюса на диагонали). Между ними существуют непрерывные переходы. Для наглядности главные типы структур для каждого поля диаграммы показаны на рисунке 2. В целом для n -минерального агрегата возможны n типов структур, при этом существуют подтипы, которые определяются положением плюсов на диагонали. Общее количество подтипов равно $2^n - 1$.

Фундаментальную роль в рамках описанного подхода играет равновесие Харди-Вайнберга, представляющее собой статистическое равновесие моно- и полиминеральных контактов (6) Для бинарных контактов в биминеральных агрегатах линия равновесия разделяет поля структурных типов (рисунок 1).

$$p_{11}p_{22} = (p_{12})^2 \quad (6)$$

где 1 и 2 – минералы.

Основные результаты отражены в следующих защищаемых положениях:

1. Моделирование минеральных агрегатов как автоморфизмов минеральных видов позволяет построить классификацию структур на основе статистик бинарных и тернарных межзерновых контактов и предложить для них барицентрические диаграммы нового типа, выявляющие закономерности в расположении классических структур и текстур.

Методология типизации структур, основанной на статистиках вероятностей межзерновых контактов, позволяет создать строгую классификацию структур минеральных агрегатов. Для бинарных контактов в биминеральных агрегатах возможны 2 основных структурных типа, но при использовании тернарных контактов классификация расширяется. В работе впервые получены структурные индикатрисы для тернарных контактов (аналитическим путем и построением по точкам в компьютерной программе). Построенная для них барицентрическая диаграмма представляет собой тетраэдр (4 типа тернарных контактов, рисунок 3). Структурные индикатрисы в этом случае представляют собой плоские кривые 3-го порядка (всего 8

типов, рисунки 3 и 4). Модели структур для разных областей тетраэдра показаны на рисунке 5.

Для бинарных контактов в триминеральных агрегатах барицентрическая диаграмма представляет собой 6-вершинный (6 типов бинарных контактов) 5-мерный симплекс. Равновесие Харди-Вайнберга в этом случае представляет собой поверхность. Для ее визуализации использован метод проекций, с помощью которого построены следы поверхности равновесия в трехмерных гранях симплекса – тетраэдрах (рисунок 6). Для каждого тетраэдра установлено расположение полей структурных типов, не совпадающее с положением следов поверхности равновесия (рисунок 6).

Моделирование классических структур и текстур выполнено для бинарных и тернарных контактов с целью выявления закономерностей в расположении трендов на барицентрических диаграммах. В качестве основы для моделирования взята правильная гексагональная сетка (средняя координация зерна 6 следует из теоремы Эйлера для плоских графов). Модельные тренды строились с учетом вида кластера (способа агрегации зерен) и модального состава агрегата (рисунок 7). Для бинарных контактов (рисунок 8) модельные тренды закономерно заполняют правый угол диаграммы за исключением поля вблизи вершины $r_{чб}$. Левая часть диаграммы заполняется симметрично при замене черных зерен на белые.

На рисунке 8 видно соотношение различных структур и текстур с равновесием Харди-Вайнберга. Ближе всего к линии равновесия расположены тренды пойкилитовых, цепочечных структур и шлировых текстур с небольшим числом зерен в кластере. Сразу от вершины резко отклоняются шлировые текстуры с большими кластерами, при движении к вершине $r_{чб}$ неравновесными становятся пойкилитовые и порфиновые структуры. Наложение трендов цепочечных структур, структур с ветвящимися кластерами и текстур с небольшими шлирами доказывает необходимость категории текстуры (рисунок 8).

Закономерное расположение трендов наблюдается и для тернарных контактов (правая часть тетраэдра заполняется аналогично треугольнику, рисунок 9). В барицентрическом тетраэдре построены аналогичные модельные тренды (вместо

ребер в расчетах участвуют вершины зерен). Равновесие Харди-Вайнберга здесь представляет собой линию, которая расположена в теле тетраэдра. На основе выражения бинарных контактов через тернарные построена классифицирующая поверхность (К-поверхность), которая делит тетраэдр на две области, аналогичные таковым в треугольнике (линия равновесия лежит на К-поверхности). В точках выше К-поверхности преобладают полиминеральные контакты, ниже - мономинеральные (рисунок 9). Таким образом, равновесие Харди-Вайнберга имеет смысл разделительной границы между структурами только для бинарных контактов в биминеральных агрегатах, в остальных случаях выражает статистическое равновесие контактов.

Фигуративные точки реальных горных пород и руд будут занимать промежуточное положение между трендами из-за невыдержанности кластеров, как показано на примере амфиболитов Керетского архипелага (рисунок 10). Амфиболиты в основном состоят из амфибола (до 90 об. %) с подчиненным количеством кварца и плагиоклаза, имеют похожие гранонематобластовые структуры (рисунок 11). В результате исследования выявлены два структурных типа, при этом в расположении точек относительно модельных трендов отразились наличие амфиболовых шлиров и цепочечное расположение зерен амфибола и биотита (рисунок 10).

Предложенные диаграммы можно использовать для количественной характеристики структур минеральных агрегатов, близких по химическому и модальному составу, и выявления тонких различий между ними.

2. Статистическое равновесие Харди-Вайнберга отвечает гомогенному перемешиванию минеральных зерен при любом модальном составе агрегата, а его соответствие статистически равновесному агрегату проверяется критериями согласия.

Равновесие Харди-Вайнберга соответствует равной вероятности моно- и полиминеральных контактов и по сути выражает массивную текстуру в ее статистическом смысле. Таким образом, с точки зрения математики массивная текстура является структурой, в которой гомогенно перемешаны все мине-

ральные зерна. Такого «идеального» перемешивания в природе нет, поэтому можно лишь оценить, насколько фигуративная точка на диаграмме приближается к линии равновесия. Фигуративные точки амфиболитов Керетского архипелага расположены близко к линии равновесия, поэтому для них выполнена оценка соответствия наблюдаемых структур «идеальным» на основе критерия Пирсона (7)

$$\chi_n^2 = \sum_{i=1}^n \frac{(O_i - E_i)^2}{E_i}, \quad (7)$$

где O_i – измеренные вероятности тернарных контактов, E_i – теоретические вероятности, соответствующие равновесию Харди-Вайнберга. Результаты показаны в таблице 2.

Для всех образцов расчетное значения критерия Пирсона превышает пороговое (11,34 для $\alpha = 0,01$), следовательно, гипотеза о соответствии структуры «идеальной» отвергается. Наиболее близкое к пороговому значению критерия у образца 711, что согласуется с положением точки на диаграмме (рисунок 10). Несмотря на массивный облик, структура амфиболитов характеризуется наличием шлиров и слабо выраженной полосчатостью, что приводит к ее отличию от «идеально массивной».

3. Установленные на основе построенной модели структурные типы апатитовых (Хибины) и железных (Костомукша) руд коррелируют со степенью извлечения полезного минерала.

Апатитовые руды (Хибинский массив) сложены в основном апатитом (до 100 об. %) и эгирин-авгитом, имеют гипидиоморфнозернистые структуры и массивные текстуры. Примеры шлифов показаны на рисунке 12. Структуры руд вначале типизировались по двум условным минералам – апатиту и матрице (под матрицей здесь и далее понимается сумма межзерновых контактов остальных минералов в агрегате). Выявлены закономерности в расположении фигуративных точек (рисунок 13). Сплошные апатитовые руды близки к вершине $p(\text{Ap}-\text{Ap})$. Для них извлечение апатита наилучшее из-за отсутствия его сростков с другими минералами. При движении к центру диаграммы наблюдается обеднение руды и усложне-

ние взаимоотношений минералов (в образце 7 появляются сложные сростки апатита с эгирином, в образцах 8 и 9 повышена доля мономинеральных агрегатов нефелина, рисунок 12).

В рамках предлагаемой классификации большая часть образцов относится к структурному типу S_2^1 и только два находятся в поле типа S_2^2 . Попадание большинства образцов в поле S_2^1 объясняется рассеянием среди зерен апатита зерен других минералов. Поэтому при фиксированной вероятности $p(\text{Ap-Ap})$ (красные линии на диаграмме, рисунок 13) фигуративная точка смещается от линии равновесия в сторону вероятности $p(\text{Ap-M})$ (то есть в сторону поля S_2^1). Для образцов 8 и 9 повышена доля вероятности $p(\text{M-M})$ из-за наличия мономинеральных агрегатов нефелина, что определяет переход в сторону поля S_2^2 .

В результате типизации структур по трем условным минералам (апатит, эгирин с амфиболом и все остальные) выявлены 3 типа руд (таблица 3):

а) с переходными структурами (сплошные апатитовые руды, образцы 1 и 4);

б) со структурой S_3^1 , характерной для образцов со сложными сростками эгирина с апатитом (образец 7) и гипергенными изменениями (шпреухштейнизация в образцах 3 и 5), ухудшающими извлечение апатита при флотации (Абрамов, 2004; Брыляков, 2004);

в) со структурой S_3^2 , для которых извлечение апатита не осложнено.

Похожая ситуация наблюдается для железистых кварцитов (Костомукшское рудное поле). Руды представляют собой образцы с двух месторождений (рисунок 14). Это – упорные Костомукшские руды (тонкополосчатые образцы с мелкозернистым магнетитом в сростках, далее ТКШ-руды) и легкообогатимые руды Корпангского месторождения со свободными зернами магнетита среднего размера (ЛКШ-руды). Руды сложены в основном кварцем и магнетитом. Структуры руд лепидо- и немагогранобластовые, текстуры в основном полосчатые или массивные.

Типизация структур вначале проводилась по двум условным минералам: магнетиту и матрице. Показано, что труд-

нообогащаемые ТКШ-руды распределены в поле диаграмме равномерно (рисунок 15, а) и тяготеют к вершине р (М-М), что связано с большим числом биминеральных контактов амфиболов и биотита. Большая доля силикатов усложняет раскрытие сростков с магнетитом при флотации. Расположение фигуративных точек говорит об изменчивости соотношения межзерновых контактов (то есть характеристик руды) в пределах типа, что также усложняет извлечение магнетита.

Основная часть легкообогащаемых ЛКШ-руд (рисунок 15, б) расположена компактно на середине ребра диаграммы, что указывает на примерно одинаковые характеристики руд. В этом случае увеличивается число контактов Р-М (больше свободных зерен магнетита), что упрощает раскрытие сростков и его извлечение. В результате типизации структур железных руд по трем условным минералам (магнетит, кварц и матрица) выявлены два структурных типа (таблица 4):

а) структура S_3^1 характерна для руд с мелкозернистым магнетитом в сростках либо с большим количеством амфиболов и биотита. Мелкозернистый магнетит требует дополнительного измельчения, а наличие силикатов усложняет флотацию с точки зрения раскрытия сростков с магнетитом (Абрамов, 2004; Северов, 2011);

б) структура S_3^2 характерна для руд с крупными и свободными зернами магнетита в сростках преимущественно с кварцем, что положительно влияет на извлечение магнетита.

Оба структурных типа встречаются в ЛКШ- и ТКШ-рудах (таблица 4), что связано с наличием в обоих типах руд двух разновидностей железистых кварцитов (Shibaeva et al., 2021).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Диссертация представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, в рамках которой предложена математическая модель минерального агрегата на основе вероятностей бинарных и тернарных межзерновых контактов. Смещение акцента с морфометрических характеристик минеральных зерен на фундаментальное отношение контактирования позволило строго определить категорию структуры и показать возможности создания новой классификации структур.

В результате исследования разработана математическая модель структур минеральных агрегатов на основе статистик вероятностей бинарных и тернарных контактов. Предложены новые классификационные диаграммы, которые можно использовать для количественной характеристики структур минеральных агрегатов.

Предложенная модель впервые применена для типизации структур руд. Установлена зависимость между структурными типами руд и степенью извлечения полезного компонента, что можно использовать для решения минералого-технологических задач, связанных с разделением руд на технологические типы.

Результаты исследования можно использовать для решения различных минералого-технологических задач, включая выделение технологических типов руд и установление связи между структурными типами и физико-механическими свойствами руд. Авторские программы позволяют наглядно представлять положение фигуративных точек образцов для тернарных контактов, а также визуализировать структурные индикатрисы по заданным значениям вероятностей. Бариецентрические диаграммы с модельными трендами можно использовать для строгой количественной характеристики структур минеральных агрегатов.

В качестве будущих исследований предлагается расширение модели на полиминеральные агрегаты, изучение технологий автоматического анализа минеральных агрегатов для получения статистики вероятностей межзерновых контактов, разработка программного обеспечения, в том числе с использованием нейросетевых технологий, углубленные исследования по типизации структур руд для выявления закономерностей между структурными типами руд, их физико-механическими свойствами и извлечением полезного компонента.

СПИСОК ОСНОВНЫХ РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Публикации в изданиях из Перечня ВАК:

1. Войтеховский, Ю.Л. Моделирование петрографических структур / Ю.Л. Войтеховский, **А.А. Захарова** // Вестник геонаук. – 2020. – №10. – С. 38-42. – DOI: 10.19110/geov.2020.10.5.

2. Войтеховский, Ю.Л. Моделирование петрографических структур. Статья 2 / Ю.Л. Войтеховский, **А.А. Захарова**, М.Д. Климоchenков // Вестник геонаук. – 2020. – № 12. – С. 32-35. – DOI: 10.19110/geov.2020.12.3.

3. Войтеховский, Ю.Л. Петрографические структуры: ийолиты и уртиты Хибин / Ю.Л. Войтеховский, **А. А. Захарова** // Вестник МГТУ. – 2021. – Т. 24, № 2. – С. 160-167. – DOI: 10.21443/1560-9278-2021-24-2-160-167.

Публикации в изданиях, входящих в международную базу данных и систему цитирования Scopus:

4. Voytekhovsky, Yu.L. Petrographic structures and Hardy-Weinberg equilibrium / Yu.L. Voytekhovsky, **A.A. Zakharova** // Journal of Mining Institute. – 2020. – V. 242. – PP. 133-138. – DOI: 10.31897/PMI.2020.2.133.

5. **Zakharova, A.A.** Methodology for predicting the washability of apatite ores (Kirovsky mine, Kola Peninsula) / **A.A. Zakharova**, Yu.L. Voytekhovsky // Obogashchenie Rud. – 2022. – No 1. – PP. 27-30. – DOI: 10.17580/or.2022.01.05.

Публикации в прочих изданиях:

6. **Захарова, А.А.** Математическое моделирование петрографических структур на примере ийолит-уртитов Хибинского массива / **А.А. Захарова**, Ю. Л. Войтеховский // Сборник тезисов докладов всероссийской молодежной геологической конференции памяти В.А. Глебовицкого. – 2020. – С. 39-41.

7. **Захарова, А.А.** Горная порода: к определению петрографической структуры / **А.А. Захарова, Ю.Л. Войтеховский** // Материалы IX Международной научной конференции молодых ученых «Молодые – Научкам о Земле». – 2020. – Т. 2. – С. 181-183.

8. **Захарова, А.А.** Математическое моделирование петрографических структур с применением современных информационных технологий / **А.А. Захарова, Ю.Л. Войтеховский** // Геология, геоэкология, эволюционная география: Коллективная монография / ред. Е.М. Нестерова, В.А. Снытко. – 2020. – Том XIX. – С. 48-51.

9. Войтеховский, Ю.Л. Статистическое описание структур и текстур амфиболитов островов Керетского архипелага (Белое море) / Ю.Л. Войтеховский, **А.А. Захарова** // Труды Карельского научного центра РАН. – 2021. – № 2. – С. 44-50. – DOI: 10.17076/geo1355.

10. Войтеховский, Ю.Л. Аналитическая геометрия кристаллической горной породы / Ю.Л. Войтеховский, **А.А. Захарова** // Труды Ферсмановской научной сессии ГИ КНЦ РАН. – 2021. – № 18. – С. 96-101. – DOI: 10.31241/FNS.2021.18.017.

11. **Захарова, А.А.** Моделирование структур и текстур горных пород на основе статистик тернарных межзерновых контактов / **А.А. Захарова, Ю.Л. Войтеховский** // Сборник тезисов докладов Геологического Международного Студенческого Саммита. – 2021. – С. 26-29.

12. **Захарова, А.А.** Моделирование структур горных пород на основе статистических методов: амфиболиты Керетского архипелага / **А.А. Захарова, Ю.Л. Войтеховский** // Строение литосферы и геодинамика: материалы XXIX Всероссийской молодежной конференции. – 2021. – С. 109-111.

13. **Захарова, А.А.** Методика определения петрографических структур с использованием прибора

МИУ-5М / **А.А. Захарова**, Ю.Л. Войтеховский, А.А. Компанченко, Ю. Н. Нерадовский // Вестник МГТУ. – 2022. – Т. 25, № 1. – С. 5-11. – DOI: 10.21443/1560-9278-2022-5-11.

Свидетельство:

14. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2021612125 Российская Федерация. Визуализация границы Харди-Вайнберга для триминеральных агрегатов в трехмерных сечениях методом проекций: №2021611327 заявл. 09.02.2021; опубл. 11.02.2021 / **А.А. Захарова**, Ю.Л. Войтеховский; заявитель федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский горный университет.

Таблица 1 - Список терминов

Автоморфизм	отображение множества (минерального агрегата) элементов (зерен) в себя
Барцентрическая диаграмма	диаграмма, положение точки в которой определяется как центр тяжести компонентов (вероятностей межзерновых контактов), заданных в вершинах диаграммы
Контакты бинарные	контакты между двумя зернами, в шлифе представляют собой ребро
Контакты тернарные	контакты между тремя зернами, в шлифе представляют собой точку
Контакты куотернарные	контакты между четырьмя зернами, в шлифе не попадают
Равновесие Харди-Вайнберга	статистическое равновесие моно- и подиминеральных контактов в минеральном агрегате, отвечающее идеальному перемешиванию минеральных зерен при любом модальном составе агрегата
Симплекс	простейший многогранник в n-мерном пространстве (на плоскости - треугольник, в 3D - тетраэдр)
Структурная индикатриса	геометрический образ структурного типа, задаваемого уравнением (4)

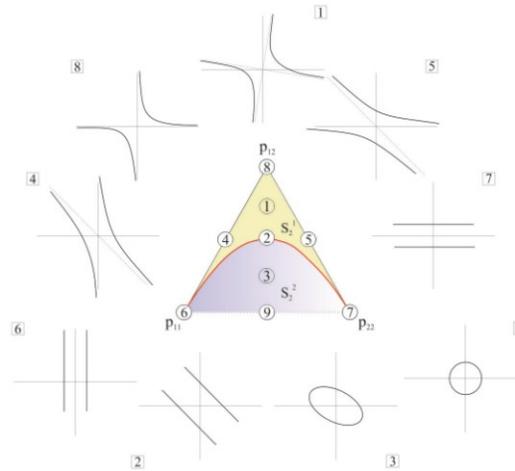


Рисунок 1 - Барцентрический треугольник вероятностей бинарных контактов $\{p_{11}, p_{12}, p_{22}\}$ для биминерального агрегата. Показаны структурные индикатрисы, цветными полями обозначены два основных структурных типа - S_1^2 и S_2^2 . Красным показана линия равновесия Харди-Вайнберга.

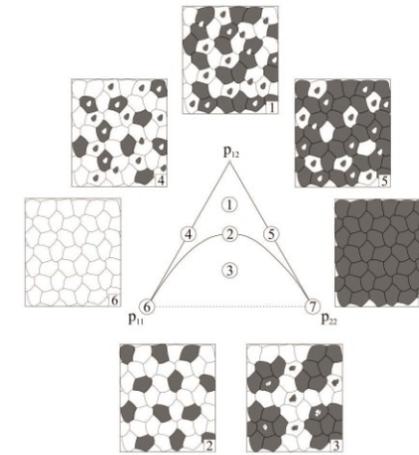


Рисунок 2 - Модели структур биминеральных агрегатов для разных областей барцентрического треугольника. Состояния $p_{12} = 1$ и $p_{11} + p_{22} = 1$ (пунктирное ребро без вершин) в минеральных агрегатах невозможны. Обозначения соответствуют рисунку 1.

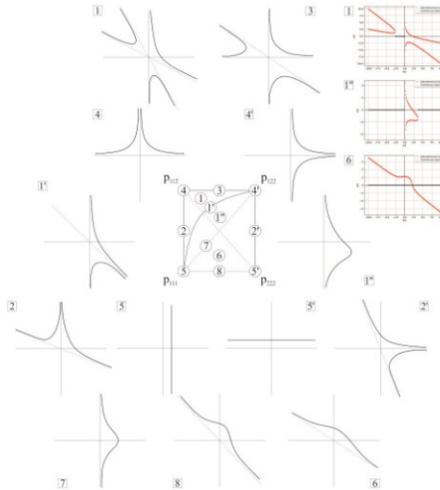


Рисунок 3 - Барцентрический тетраэдр вероятностей тернарных контактов $\{p_{11}, p_{12}, p_{22}, p_{112}\}$ для биминерального агрегата. Показаны структурные индикатрисы для вершин, ребер и граней тетраэдра, полученные аналитически. Графики красного цвета - результаты построений в программе.

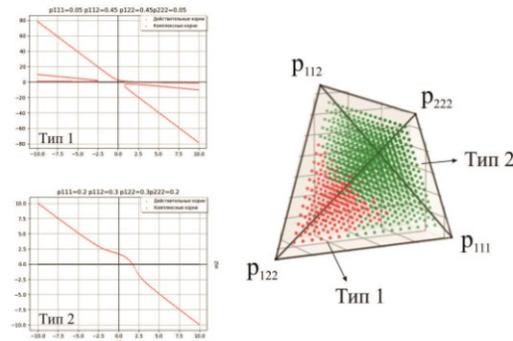


Рисунок 4 - Примеры структурных индикатрис для точек внутри барцентрического тетраэдра. Справа показана граница между двумя типами.

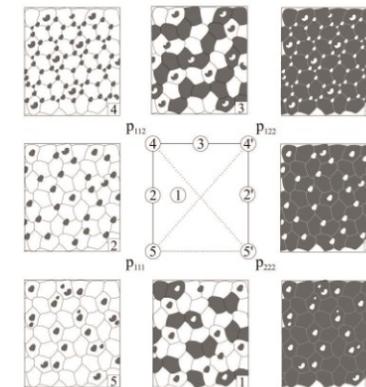


Рисунок 5 - Модели структур биминеральных агрегатов для разных областей барцентрического тетраэдра. Состояния $p_{112} = 0$ (без ребра $p_{122} + p_{222} = 1$) и $p_{122} = 0$ (без ребра $p_{112} + p_{111} = 1$) в минеральных агрегатах невозможны. Обозначения соответствуют рисунку 3.

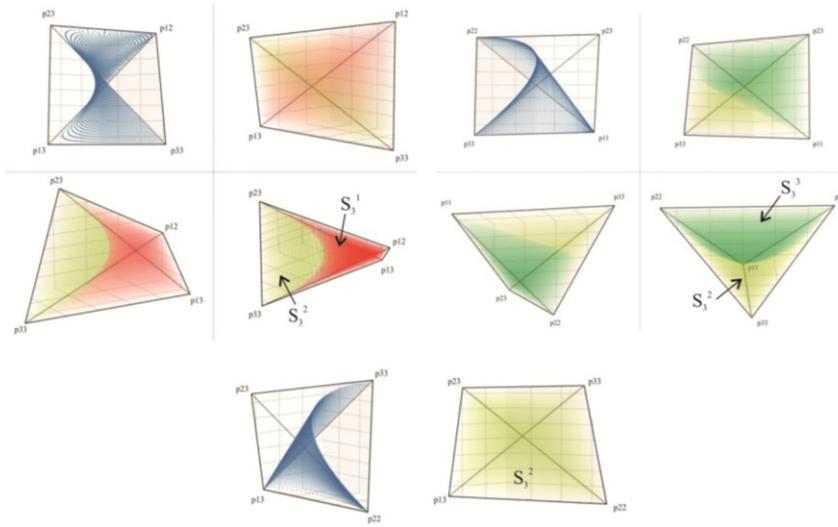


Рисунок 6 - Примеры следов поверхности равновесия Харди-Вайнберга и соответствующих полей структурных типов для бинарных контактов в триминеральных агрегатах.

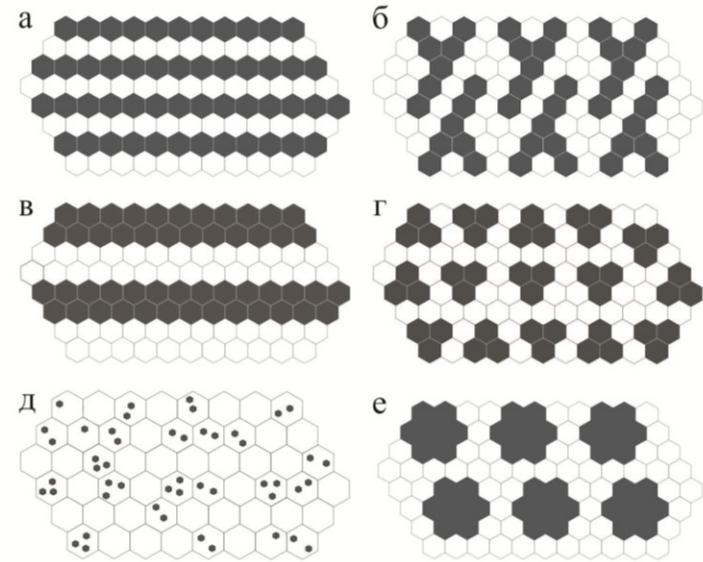


Рисунок 7 - Модели структур и текстур: а - цепочечная структура, б - структура с ветвящимися кластерами, в - полосчатая текстура, г - шлировая текстура (три зерна в шлере), д - пойкилитовая структура, е - порфировидная структура

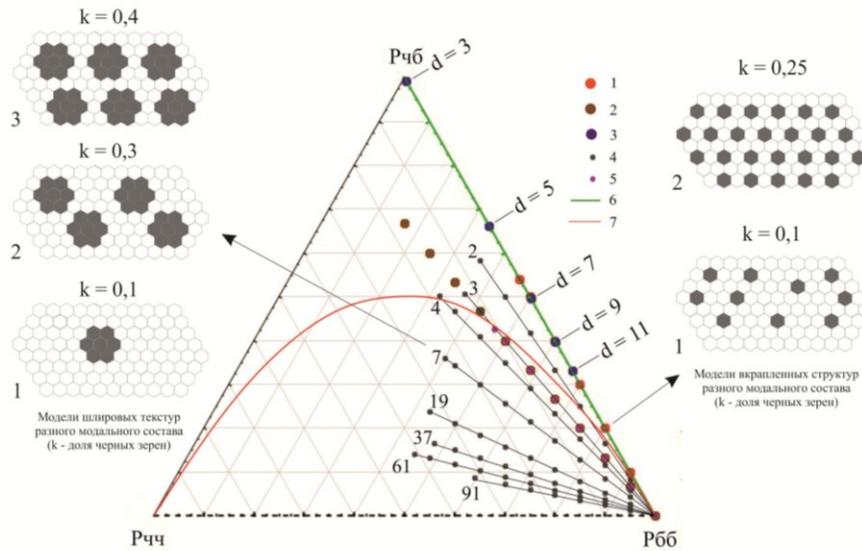


Рисунок 8 - Баричесентрический треугольник вероятностей бинарных контактов $\{p_{11}, p_{12}, p_{22}\}$, с модельными трендами (ч - черные зерна, б - белые). Условные обозначения структур и текстур: 1 – вкрапленная, 2 – цепочечная, 3 – порфировидные (d – относительный диаметр вкрапленника), 4 – шлировые (количество зерен в шлере указано числами), 5 – с ветвящимися кластерами, 6 – пойкилитовые; 7 – линия равновесия Харди-Вайнберга.

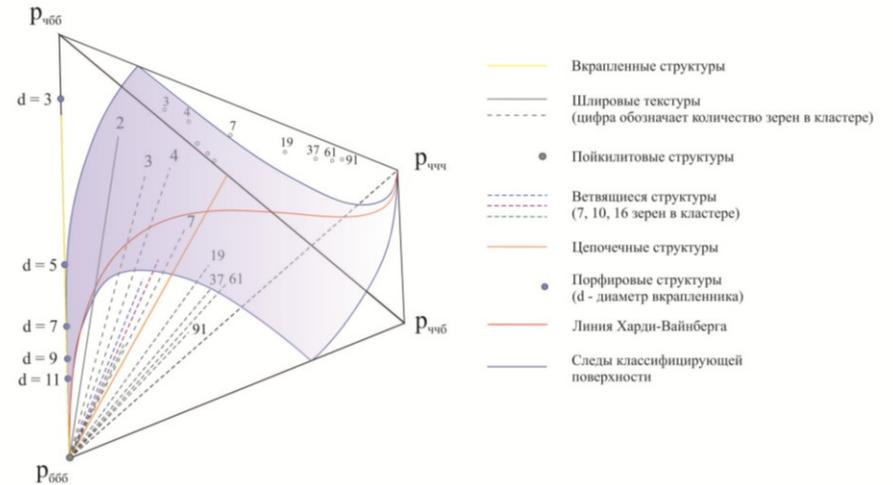


Рисунок 9 - Баричесентрический тетраэдр вероятностей тернарных контактов $\{p_{111}, p_{112}, p_{122}, p_{222}\}$ с модельными трендами (ч - черные зерна, б - белые). Сплошные линии обозначают расположение трендов на ребре или грани тетраэдра, штриховые – в теле тетраэдра. На грани $(p_{ббб}, p_{ччч}, p_{чбб})$ показаны точки пересечения с модельными трендами.

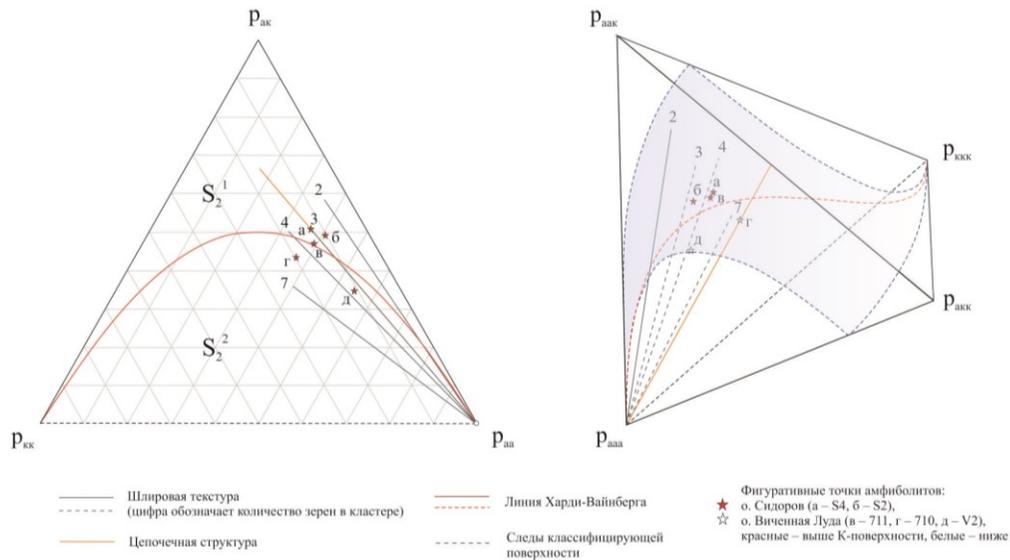


Рисунок 10 - Барицентрические диаграммы для бинарных (слева) и тернарных (справа) контактов с фигуративными точками амфиболитов. Обозначения: а - амфибол, к - кварц (объединен с плагиоклазом), аксессуар в расчетах не учтены. Модельные тренды построены согласно рисункам 6 и 8.

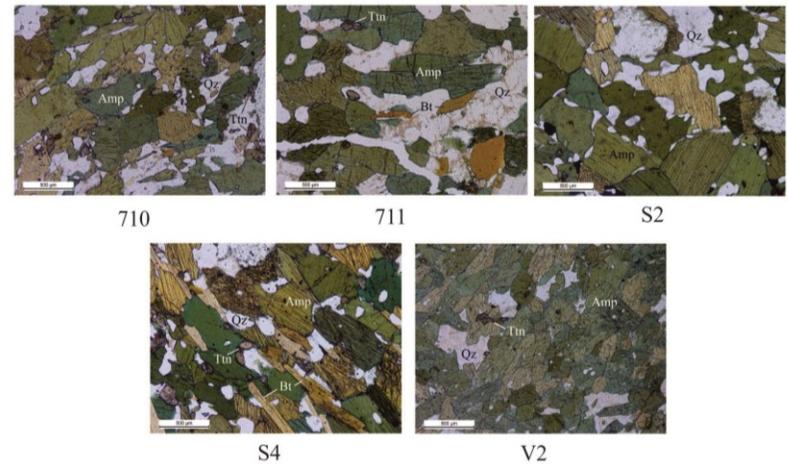


Рисунок 11 - Фотографии шлифов амфиболитов (номер образца указан снизу). Amp - амфибол, Qz - кварц, Bt - биотит, Ttn - титанит. Николи II.

Таблица 2 - Расчетное значение критерия Пирсона для амфиболитов

710	711	S2	S4	V2
130,69	29,73	283,88	245,98	42,01

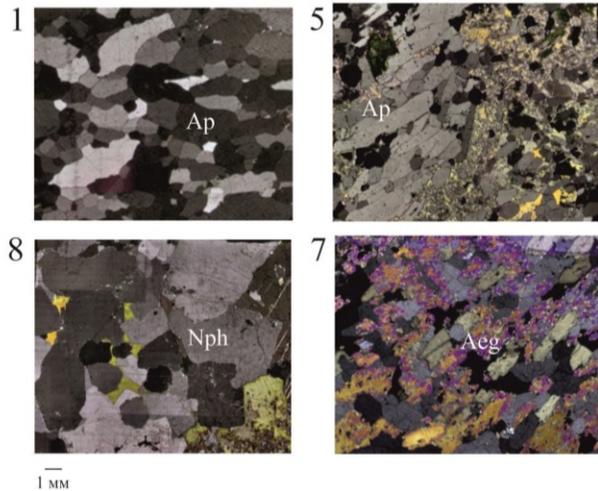


Рисунок 12 - Фрагменты шлифов апатитовых руд (номер образца указан слева). Ap - апатит, Nph - нефелин, Aeg - эгирин-авгит. Николи X.

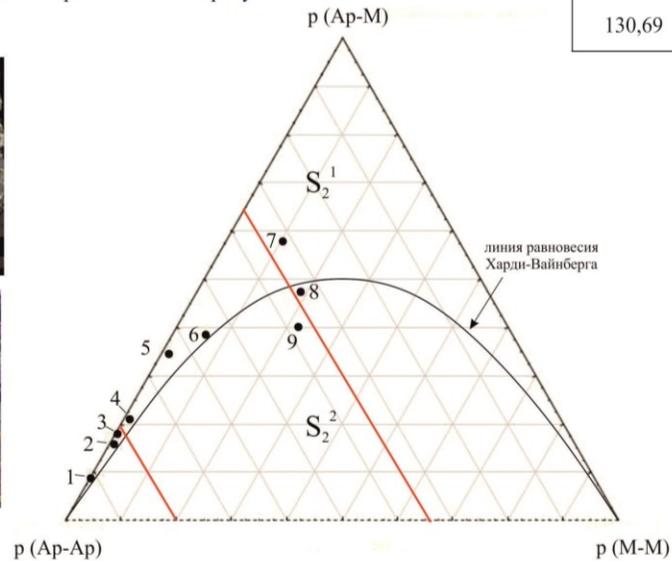


Рисунок 13 - Барицентрический треугольник вероятностей бинарных контактов $\{p_{11}, p_{12}, p_{22}\}$ для апатитовых руд. Ap - апатит, М - матрица.

Таблица 3 - Результаты расчетов по трем минералам для апатитовых руд

№ шлифа	Структурный тип
1	переход от S_3^1 к S_3^2
2	S_3^2
3	S_3^1
4	переход от S_3^1 к S_3^2
5	S_3^1
6	S_3^2
7	S_3^1
8	S_3^2
9	S_3^2

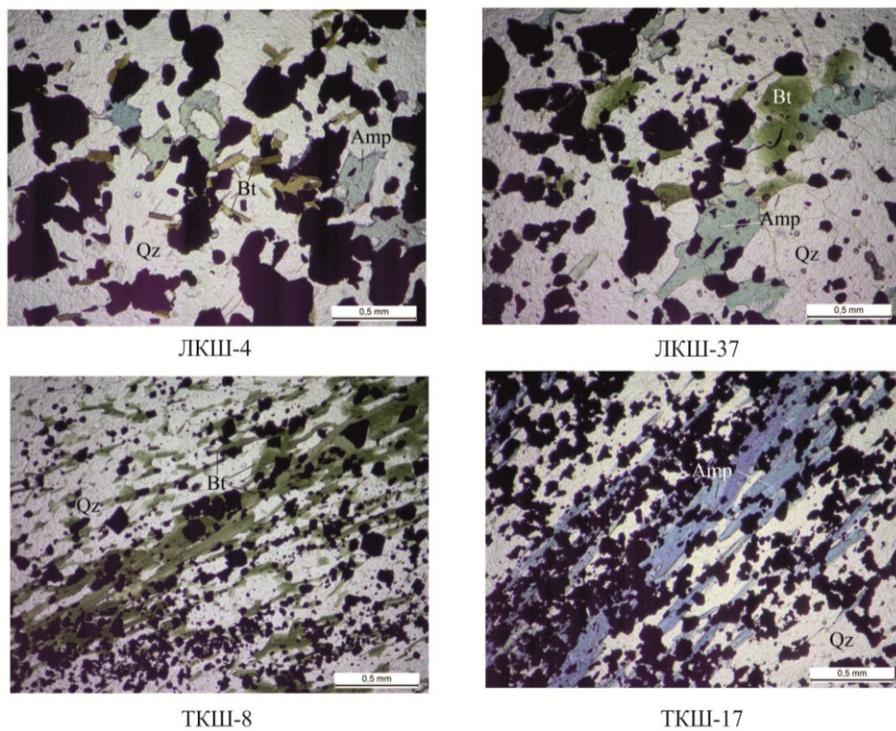
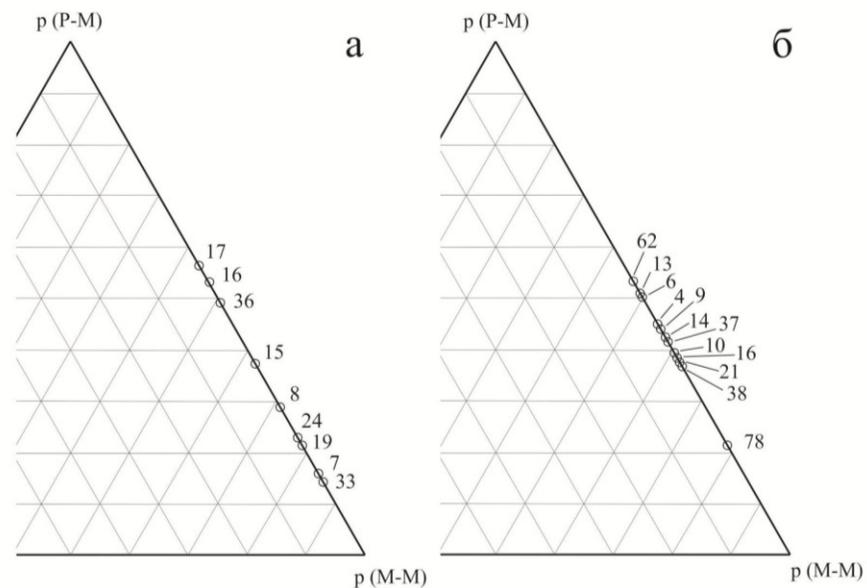


Рисунок 14 - Фотографии шлифов легкообогатимых (ЛКШ) и труднообогатимых (ТКШ) железных руд (номер образца указан снизу). Amp - амфибол, Bt - биотит, Qz - кварц. Николи II.



а - ТКШ-руды, б - ЛКШ-руды

Рисунок 15 - Фрагменты барицентрических треугольников вероятностей бинарных контактов $\{p_{11}, p_{12}, p_{22}\}$ для железных руд. P - рудный минерал (магнетит), M - матрица. Контакты P-P не учтены.

Таблица 4 - Фрагмент таблицы с результатами расчетов по трем минералам для железных руд.

ЛКШ-руды		ТКШ-руды	
№ шлифа	Структурный тип	№ шлифа	Структурный тип
4	S_3^2	7	S_3^1
6	S_3^1	8	S_3^1
9	S_3^2	15	S_3^2