Дискуссионный клуб
Discussion Club

УДК 550.4:519.2:(553.3:553.6) http://doi.org/10.21440/2307-2091-2025-3-164-172

Математические модели петрогенных процессов и сопровождающие их энтропийные тренды

Стефан Григорьевич ПАНЯК*
Татьяна Сергеевна БОБИНА**

Уральский государственный горный университет, Екатеринбург, Россия

Аннотация

Актуальность. Со словами немецкого философа Иммануила Канта о том, что «в каждой науке столько истины, сколько в ней математики», геологическая наука соглашается несколько столетий, однако реальные шаги в данном направлении делает очень медленно. В настоящей статье изложен оригинальный взгляд на петрологические процессы с позиций точных наук: математики, физики, химии. В ней подытожены результаты математического моделирования процессов кристаллизации магматических и метаморфических пород, включая сопровождающий их рудогенез. Частично эти материалы были изложены ранее в ДАН СССР, однако в настоящей редакции акцент сделан на термодинамическом аспекте, впервые рассчитаны энтропийные тренды, сопровождающие эти процессы. Количество целенаправленно выполненных аналитических материалов позволило авторам выполнить качественный скачок – впервые получить генетическую информацию из получаемых эмпирических распределений химических компонентов в основных разновидностях пород.

Цель работы – показать возможности извлечения новой генетической информации при математическом моделировании геологических процессов, включая количественную оценку потенциальной рудоносности тех или иных пород.

Выводы. Впервые петрогенетические процессы получили математическую и термодинамическую интерпретацию. Давно обсуждаемые в петрологии расплывчатые понятия «активные», «пассивные», и «инертные» химические компоненты получили конкретную оценку, что упрощает использование правила фаз Гиббса. Доказано, что качественные аналитические материалы, выполненные с учетом требований статистики, позволяют оценить потенциальную рудоносность метаморфических и магматических пород.

***Ключевые слова*:** математическая модель метаморфических процессов, математическая модель магматических процессов, энтропия, расогенез.

Введение

Важность математического моделирования в геологии давно подчеркивал академик Н. С. Шатский [1], который писал, что «в поисках законов распределения, даже только распределения, а не минеральных скоплений в земной коре, сконцентрирована, как в фокусе, вся теоретическая геология, решающая задачу огромной практической важности». Известный российский историк В. О. Ключевский писал в связи с этим: «Факт, не приведенный в схему, есть смутное представление, из которого нельзя сделать научное употребление».

Новые возможности для внедрения математического моделирования породообразующих процессов появились в науке лишь в последней четверти XX в., когда было накоплено достаточное количество аналитического материала, позволившее сделать существенный качественный прорыв. К этому времени удалось собрать статистически представительное количество качественных химических анализов по основным петрографическим разновидностям магматических и метаморфических пород Среднего и Южного Урала. Эти анализы отвечали основным требованиям, предъявляемым к объективной научной обработке: они имели надежную петрографическую основу, все выборки отвечали требованиям гомогенности (однородности) пород, а количество превышало необходимые пределы для надежной статистической обработки. При соблюдении этих условий получаемые эмпирические кривые распределения (ЭКР) химических компонентов в по-

✉panjakst@gmail.com
https://orcid.org/0000-0001-8436-639X
**tanyashka1993@mail.ru
https://orcid.org/0000-0001-7790-9907

родах становятся регулярными, т. е. могут быть описаны математическими уравнениями. «Неправильные», нерегулярные кривые распределения, как правило, полимодальные. Обычно они априори характеризуют смешанную выборку, по которой нельзя получить генетической информации. Кроме того, в настоящей работе учтены многочисленные требования к аналитике и технологии лабораторных исследований, которые могут оказывать влияние на форму ЭКР [2–12]. Главной проблемой для предшественников при аналогичных исследованиях было отсутствие в их распоряжении статистически представительных гомогенных выборок. Однако даже при использовании такого несовершенного материала в 1960-е гг. были высказаны догадки о том, что частая повторяемость одних и тех же типов ЭКР несет определенный генетический смысл [13, 14]. Не приводя конкретной математической аргументации, автор высказал ряд правильных заключений.

Математическое обоснование законов распределения микросостояний (химических компонентов) в природных макросистемах (породах) впервые было получено одним из авторов в середине 1970–1980-х гг. [15–20]. Для теоретического обоснования генетической сущности кривых распределения понадобилось преобразовать уравнения Фика, описывающие диффузию химических компонентов в твердых и жидких средах:

$$dx = -\frac{1}{3} V\lambda \frac{d\rho}{dL} dSdt,$$

где λ – средняя длина пробега частицы (равна L); $d\rho/dL$ – градиент плотности (концентрации); S – элементарная площадка, сечение (равно L^2); t – время; V – скорость перемещения.

Заменяя концентрацию компонента на количество его частиц в единице объема, получим:

$$\rho = \frac{mN}{L^3},$$

где m – масса частицы; N –количество частиц в единице объема L^3.

Тогда, подставляя полученное выражение плотности частиц в уравнение Фика в направлении трех координат, получим:

$$dx = \frac{dL\left(mN/dL^3\right)}{dL \cdot dS \cdot dt}.$$

Полагая $\frac{dl}{dt} = V$ (где V – скорость перемещения частиц), после некоторых сокращений получим:

$$dx = \frac{mV \cdot dN}{dL}.$$

В полученном выражении целесообразно выделить mV:

$$mV = \frac{dx}{\left(dN/dL\right)},$$

где mV – импульс движения (импульс кристаллизации), который в соответствии с законами физики всегда является величиной постоянной (mV = const), а значит, независимой. Величина dN/dL – градиент плотности частиц. В последующем отношение $dN/dL = Fx$ названо детерминантом процесса, который задается для каждого конкретного (моделируемого) случая кристаллизации.

Далее принято $mV = E$, величина, которая в полном соответствии с центральной предельной теоремой (ЦПТ) как независимая величина всегда должна обладать нормальным распределением. Постоянство импульса – фундаментальное свойство пространства, один из нескольких законов физики, не теряющий своего смысла даже на квантовом уровне. В свою очередь, суммарный эффект n импульсов кристаллизации составит:

$$\sum\nolimits_1^n E_i = \sum \frac{\Delta x}{F_x}, \text{ или } E = \int \frac{dx}{F_x}.$$

Именно эта величина суммарного импульса кристаллизации E, как уже было сказано, должна в соответствии с ЦПТ всегда обладать нормальным распределением, а значит, может быть включена в уравнение нормальной кривой вместо переменной x:

$$y = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{\left(E-\mu\right)^2}{2\sigma^2}\right\},$$

где y – вероятность состояния функции переменной; σ – дисперсия; μ – среднее значение аргумента x_i, который функционально входит в E как суммарный импульс кристаллизации.

Принимая во внимание, что величина E может быть выражена через реально измеряемые содержания x_i, получаем новую возможность определять зависимость плотности вероятности распределения y от переменной x. Иными словами, подставляя в уравнение нормальной кривой вместо E результаты его интегрирования, получаем ряд новых кривых (ТКР), отражающих влияние заданных параметров детерминанта. Последующее сопоставление этих ТКР с полученными ранее ЭКР позволяет придавать последним определенный генетический смысл. Некоторые примеры таких распределений приведены в табл. 1, 2. А в основном эти модели были опубликованы в Докладах АН СССР и в последующем рекомендованы для использования в справочном пособии [3]. В настоящей публикации акцент сделан на термодинамическом аспекте, связи представленных моделей с сопровождающей их энтропией.

Подстановка в уравнение нормальной кривой конкретного подынтегрального выражения величины E приводит к ее закономерной деформации. Такие теоретические модели, полученные с использованием всех возможных комбинаций детерминантов, как оказалось, на-

Таблица 1. Примеры распределений химических компонентов в метаморфических породах
Table 1. Examples of distribution of chemical components in metamorphic rocks

Номер модели	Детерминант F_x	Характеристика модели	Типы кривых	Величина $E = \int \frac{dx}{F_x}$	Уравнения энтропии матрицы
1		Привнос компонента			
1-а	$1 - x$	*1-а – плотность пород постоянна*		$\ln\lvert 1-x\rvert$	$\Delta S = -k \ln\lvert 1-x\rvert$
1-б	$\frac{1}{x}$	*1-б – плотность пород возрастает*		$0{,}5 \cdot x^2$	$\Delta S = kx^2$
2	x	Вынос компонента, *плотность пород постоянна*		$\ln x$	$\Delta S = k \ln x$
3	$(x - C_1) + (x - C_2)$	Наложение двух процессов выноса, часть содержания неподвижна; *плотность пород постоянна*		$\ln\lvert 2x - C_1 - C_2\rvert$	$\Delta S = k \ln\lvert 2x - C_1 - C_2\rvert$

шли свое эмпирическое подтверждение. В свою очередь, теперь все разнообразие эмпирических кривых распределения микросостояний (в данном случае химических содержаний) получило свою генетическую интерпретацию. В наиболее распространенном случае, когда детерминант $F_x = x$, а $E = \ln x$, нормальному распределению должен подчиняться логарифм содержания. Однако само содержание x в этом случае должно аппроксимироваться асимметричным логнормальным распределением. Для случаев кристаллизации эвтектических систем, когда все импульсы равны ($X_1 = X_2 = X_{3\ldots}$), интегрирование приводит к формированию симметричной кривой нормального распределения.

Для наглядности в табл. 1 приведены некоторые модели распределений химических компонентов в метаморфических породах.

В целом для метаморфических пород фиксируется 8 математических моделей кристаллизации. В табл. 1 приведены три типоморфные модели с краткими комментариями.

Первая модель иллюстрирует процесс формирования новообразованной матрицы активными литофильными компонентами, способными привноситься в систему. Они же определяют основные породообразующие минералы породы, охотно формируют кристаллическую матрицу, а на завершающих этапах могут испытывать дефицит. Для этой модели детерминант может принимать два значения: $F_1 = 1 - x; F_2 = \frac{1}{x}$. В первом случае по мере насыщения системы величины x_i должны стремиться к нулю. Во втором случае детерминант не ограничивает x_i, она может возрастать до бесконечности.

Тогда $E_1 = \int \frac{dx}{(1-x)} = -\ln(1-x); E_2 = \int x dx = \frac{x^2}{2}$.

В первом случае нормальному распределению должно подвергаться отрицательное значение E, а во втором – положительное, хотя тип распределения (левосторонняя асимметрия, интерпретируемая автором как признак высокой термодинамической и кристаллизационной активности) у них сохранится один и тот же.

Вторая модель иллюстрирует поведение избыточных, литофобных компонентов, подверженных элизии, выносу за пределы кристаллизующейся матрицы. Тогда детерминант $F = x$, $E = \ln x$, а кривая распределения приобретает логнормальный вид. Обычно такими распределениями обладают пассивные компоненты, не способные формировать собственную кристаллическую матрицу.

Третья модель иллюстрирует очень редкие случаи бимодальных распределений, когда фиксируется наложение двух метаморфических процессов, сопоставимых по термодинамическим параметрам, но при условии частичного сохранения содержаний компонента матрицы предыдущего этапа, когда один или несколько минералов раннего петрогенеза сохраняют устойчивость. В случае полной подвижности (полной перекристаллизации породы) бимодальность, естественно, исчезает.

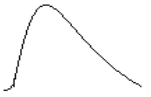
Вычисление

$$E_1 = \int \frac{dx}{(c-x)+\frac{1}{x}}$$

приводит к двум вариантам решения при $C < 2$ и $C > 2$. На первый взгляд, такой результат интегрирования кажется абсурдом. На самом деле он подчеркивает сочетание двух различных процессов вхождения компонента в породу: «петрогенного» с сохранением общего баланса вещества, когда привнос сопровождается адекватным выносом, и «рудогенного» с наложением привносимого компонента и сопровождаемого уплотнением породы. Для петрогенного процесса (при $C > 2$) получаем:

$$E_1 = 0{,}5 \ln\lvert C - x^2 + 1\rvert - \frac{c}{2\sqrt{c^2+4}} \ln\left\lvert \frac{2x - c - \sqrt{c^2+4}}{2x - c + \sqrt{c^2+4}} \right\rvert.$$

Таблица 2. Примеры распределений химических компонентов в магматических породах
Table 2. Examples of distribution of chemical components in igneous rocks

Номер модели	Детерминант F_x	Характеристика модели	Типы кривых	Величина $E = \int \frac{dx}{F_x}$	Уравнения энтропии матрицы
1	Const	Кристаллизация эвтектоидных систем		x	$\Delta S = kx$
2	$1 - x$	Кристаллизация литофильных компонентов с последующим дефицитом в расплаве		$\ln x$	$\Delta S = k \ln x$
3	x	Кристаллизация «избыточных» (литофобных) компонентов, подверженных элизии		$\ln x$	$\Delta S = k \ln x$
4	$(C_1 - x) + (C_2 - x)$	Раздельная кристаллизация литофильных компонентов в порфировых вкрапленниках и основной массе		$-\ln\lvert C_1 + C_2 - 2x\rvert$	$\Delta S = -k \ln\lvert C_1 + C_2 - 2x\rvert$
5	$x + (x - C_0)$	Кристаллизация компонентов, способных к инверсии химической активности при достижении концентрации C_0		$0,5 \ln\lvert 2x - C_0\rvert$	$\Delta S = 0,5\, k \ln\lvert 2x - C_0\rvert$

Подстановка результатов интегрирования в уравнение нормальной кривой трансформирует последнюю в бимодальную кривую, представляющую собой совмещение двух распределений типа 1 – λ. Эта модель, например, адекватно отражает эмпирическое распределение железомагнезиальных компонентов (FeO, MgO) в ставролитовых сланцах Кочкарского метаморфического комплекса с двумя генерациями отмеченного минерала. Как правило, это сочетание двух соизмеримых по интенсивности процессов, когда более поздний из них способен перекристаллизовать матрицу лишь частично. Более слабые наложенные процессы не способны превзойти энергетический барьер, необходимый для разрушения исходной матрицы. Существенно более интенсивные процессы перестраивают матрицу полностью и тогда эмпирические распределения должны быть априори унимодальными (одномодальными).

Далее кратко коснемся пяти математических моделей для иллюстрации петрогенеза магматических пород (табл. 2).

1. Первая модель иллюстрирует ситуацию, когда химический состав остывающего расплава оптимально соответствует потребностям формирующейся твердой массы, а импульс кристаллизации $x_1 = x_2 = x_3$ и т. д. В этом случае кривая распределения аппроксимируется нормальным законом. Такими распределениями обладают уникальные магматические образования – граниты, характеризующие особую исключительную степень петрогенетической «зрелости» планеты Земля.

2. Вторая модель с распределениями типа 1 – λ характеризует поведение компонентов с повышенной кристаллизационной активностью, формирующих основные породообразующие минералы, принимающих участие в котектических процессах, на конечных этапах кристаллизации они могут испытывать дефицит.

3. Третья модель с логнормальными распределениями иллюстрирует низкую кристаллизационную активность литофобных, избыточных компонентов, подвергаемых элизии. Как правило, они не востребованы формирующейся твердой фазой, накапливаются в остаточном расплаве или выносятся за пределы системы.

4. Четвертой моделью можно описывать образование эффузивных пород с порфировой структурой, когда фиксируются два этапа кристаллизации: на глубине (вкрапленники) и на поверхности (основная масса). Кривая распределения при этом, естественно, характеризуется бимодальностью. Для плагиоклазовых порфиритов, например, бимодальность отмечается для распределений CaO, Al_2O_3, NaO, а для пироксеновых она характерна для FeO, MgO, что естественно, так как именно они определяют химическую специфику упомянутых минералов-вкрапленников. При этом все отмеченные компоненты обладают распределениями 1 – λ, фиксирующими снижение энтропии в образованной ими твердой фазе. Для остывающего на дневной поверхности стекла переход доли компонента из расплава в твердую массу можно описать аналогично процессу эвтектоидной кристаллизации: $x_1 = x_2 = x_3 \ldots$. В этом случае $F_x = \text{const}$, значит, $E = x$. Кривая распределения в таком случае должна аппроксимироваться нормальным законом, при котором энтропия системы достигает максимума.

5. Последняя пятая модель описывает процесс формирования твердой матрицы рудных компонентов, способных к инверсии кристаллизационной активности по мере их накопления в остаточном расплаве. На начальных этапах эти редкие компоненты могут захватываться решетками главных породообразующих минералов, а по мере роста их концентрации в остаточном расплаве формируют рудную «пыль», акцессорные минералы.

Присутствие бимодальности на эмпирических кривых распределения редких элементов в магматических продуктах чаще всего свидетельствует об инверсии их кристаллизационной активности по ходу процесса. В соответствии с законом действия масс они в обычных условиях (при низких концентрациях) не обладают способностью формирования собственной твердой фазы. Если на этом процесс заканчивается, то эмпирические распределения обычно аппроксимируются логнормальной моделью, наиболее часто фиксируемой для этих элементов.

Таким образом, расшифровав генетический смысл эмпирических кривых распределения в макросистеме, мы получили объективную оценку вероятности ее состояния, которую Л. Больцман определил как энтропию:

$$S = \mathrm{k} \cdot \ln P + C,$$

где k – постоянная Больцмана; S – энтропия системы; P – вероятность состояния; C – постоянная интегрирования. Однако заменив ln P на E, мы получили более универсальную оценку вероятности состояния системы. И тогда можно записать:

$$S = \mathrm{k} \cdot E + C,$$

Легко убедиться в том, что формула энтропии Больцмана является частным случаем приведенного уравнения и может быть использована для случая, когда процесс протекает в соответствии со вторым началом термодинамики, что отвечает ln P в уравнении Больцмана. Во всех остальных случаях уравнение энтропии Больцмана использовать нельзя. Оно могло бы использоваться для адиабатических процессов, когда система не обменивается энергией с внешним обрамлением, что фактически исключено для описываемых магматических и метаморфических процессов.

В некоторых случаях при моделировании определенного природного процесса математические расчеты приводят, на первый взгляд, к парадоксальным выводам: уравнения, например, могут иметь два различных решения. При этом в одном случае результат обладает знаком «плюс», а в другом – «минус». Что это, математический казус? Оказалось, что в обоих случаях полученные результаты отражают возможность реализации природных процессов. Более того, эти «математические парадоксы» позволяют более детально распознавать механизм реализации этих процессов, различать их последовательность и генетическую сущность. Приведу несколько примеров для иллюстрации.

Моделируя, например, петрогенные процессы с переходом активного химического компонента в твердую фазу (макросистему), можно воспользоваться двумя выражениями детерминанта. В обоих случаях он должен отражать обратно пропорциональную связь между его накопленным ранее содержанием x_{i-1} и привносимой долей x_i. Иначе говоря, чем больше компонента накоплено в твердой фазе, тем меньше привносимые в данный момент величины x_i. «Парадоксальные», на первый взгляд, результаты получаем при расчете величины энтропии. Моделируя один и тот же процесс привноса компонента в твердую фазу формирующейся породы, получаем, значение энтропии со знаком «минус», а во втором – «плюс». Так как же на самом деле меняется энтропия системы? Оказалось, что природные процессы протекают в строгом соответствии с математической моделью. Приведем наглядный пример. Возьмем обычный малоупорядоченный химический компонент – ржавчину (лимонит). В процессе прогрессивного метаморфизма (в условиях повышающихся температур и давлений) лимонит становится неустойчивым, и железо может либо входить в кристаллическую решетку новообразованных породообразующих минералов, либо формировать рудную «пыль» в межзерновом пространстве, образуя гематит (Fe_2O_3) или магнетит (Fe_3O_4). В первом случае плотность породы не меняется, привнос железа сопровождается эквивалентным выносом других химических элементов. Общий баланс вещества при этом сохраняется. Только для такого процесса применим детерминант $F_x = 1 - x$. Единица в данном уравнении – общий баланс вещества, при процентных пересчетах он всегда составляет 100 %. При детерминанте $F_x = 1 - x$, $E = -\ln(1 - x)$, а $\Delta S = -\mathrm{k} \cdot \ln(1 - x)$. Здесь все увязано логической цепочкой, отрицательное значение энтропии свидетельствует об увеличении степени упорядоченности системы, что четко согласуется с эмпирическими данными. Во втором случае детерминант $F_x = \frac{1}{x}$ так же, как и $F = 1 - x$, отражает обратно пропорциональную зависимость X_i от X_{i-1}, однако содержание компонента X_i не ограничено. Теоретически оно может возрастать или уменьшаться сколь угодно. Здесь важно подчеркнуть, что в этом случае привнос не влияет на содержание других компонентов, но сопровождается увеличением плотности породы. А что происходит при этом с энтропией? Очевидно, что переход лимонита в магнетит сопровождается упорядочиванием системы, значит, энтропия формирующейся матрицы (минерала) должна снижаться. В соответствии с этим заключением при переходе лимонит ® магнетит кривая распределения трансформируется в фигуру с левосторонней асимметрией типа 1 – λ. Такой тип распределения, согласно полученным ранее результатам, характерен для термодинамически активных компонентов, способных снижать энтропию матрицы. Остается ответить на последний вопрос: почему же энтропия такого процесса $\Delta S = 0{,}5\ \mathrm{k} \cdot x^2$ положительная. Ответ прост: энтропия – величина аддитивная и зависит от массы вещества. Для случая описываемого перехода лимонит ⟶ магнетит каждый импульс x_i формирует более упорядоченную систему, но, накапливаясь, увеличивает плотность вещества, а значит, энтропию системы в целом.

Прямо пропорциональную зависимость x_i от x_{i-1} можно записать только одним детерминантом $F_x = x$. Чем больше x_{i-1}, тем больше порция x_i, и наоборот. Как уже отмечалось, это наиболее распространенный тип процессов в природе. Отмеченным детерминантом описывается рассеивание тепла и вещества в природе, что соответствует второму началу термодинамики. При $F_x = x$ величина энтропии $\Delta S = \mathrm{k} \cdot \ln x$, что совпадает с известным уравнением энтропии Больцмана. Оказалось, однако, что природные процессы (например, кристаллизация магматических пород, формирование продуктов метаморфизма) часто

протекают негэнтропийно, т. е. сопровождаются увеличением степени их структурной упорядоченности.

Следует отметить, однако, что петрогенетические процессы (магматизм и метаморфизм), протекающие с очевидным снижением энтропии, всегда несут в себе следы влияния второго начала термодинамики. Хотя обычно вновь образующаяся кристаллическая фаза обладает большей степенью упорядоченности, чем исходный расплав или минеральные ассоциации более низкотемпературных фаций метаморфизма. Детальное математическое моделирование свидетельствует, однако, о том, что в термодинамическом смысле процессы кристаллизации протекают весьма противоречиво, о негэнтропийных тенденциях можно говорить лишь в целом. Из восьми-десяти породообразующих компонентов обычно лишь небольшая их часть формирует более упорядоченные структуры. Именно эти компоненты определяют конкретный минеральный состав пород.

Полученные результаты придают вполне определенный смысл «правилу фаз Гиббса», использование которого до сих пор было затруднительным из-за неопределенности значения «*k*» – числа компонентов:

$$F = k + 2 - j,$$

где F – число минеральных фаз; k – число компонентов; j – число степеней свободы, которое обычно равно 2 (температура, давление).

Академик Д. С. Коржинский [21] делил породообразующие компоненты на «активные», «пассивные», «инертные», чтобы правилу фаз можно было придать конкретный смысл. Ибо без такого деления при k = 8–10 и j = 2, согласно правилу фаз, в породе должно присутствовать 6–8 минералов, в то время как фактически их обычно не бывает больше 4. Максимальное число фаз отвечает гранитной эвтектике, для которой, как известно, $\Delta x_1 = \Delta x_2 = \Delta x_3$ ... и т. д. Именно такие эмпирические распределения характерны для породообразующих компонентов Малышевского гранитного массива на Урале, что является лишним доказательством эвтектоидного механизма их кристаллизации.

Таким образом, полученные результаты свидетельствуют о том, что уравнение правила фаз удовлетворяет практике только в том случае, если в число компонентов k включать лишь те из них, которые обладают распределениями типа 1 – λ и в определенном смысле отождествляются с «активными» компонентами акад. Д. С. Коржинского.

В двуминеральных амфиболитах Кочкарского комплекса на Южном Урале, например, из 8 породообразующих компонентов лишь CaO и MgO обладают распределением 1 – λ. Тогда k = 2, а F = 2 + 2 – 2 = 2, что отвечает фактическому материалу. Роль «инертного» компонента обычно играет кремнезем SiO_2, занимающий, как правило, около половины объема матрицы.

Заключение

В завершение статьи приведем один пример конкретного расчета энтропии для подтверждения негэнтропийных трендов при петрогенетических процессах. Рассчитаем, как изменяется энтропия 1 кг гранитного вещества при изменении его температуры от 1000 °C до 800 °C:

$$S_2 - S_1 = mc \int_{T_1}^{T_2} \frac{dT}{T} mc \ln \frac{T_2}{T_1},$$

где m – масса; c – теплоемкость.

Тогда:

$$S_2 - S_1 = 1\,\text{кг} \cdot 0,88\,\text{кДж / кг} \cdot c \cdot \ln \frac{1073}{1273} = -0,17\,\text{кДж / град.}$$

Успешное решение проблем естествознания благодаря внедрению методов математического моделирования не ограничиваются приведенными примерами. Аналогичные результаты получены для множества других типов макросистем, сформированных детерминированными процессами: осадочных пород, трещиноватости, зернистости и др. Один из примеров – возможность конкретной оценки потенциальной рудоносности блоков земной коры на основе разделения ореолов рассеяния и концентрации полезных компонентов.

Вклад авторов

Паняк С. Г. – разработка дизайна исследования, анализ полученных данных, написание, редактирование и утверждение окончательного варианта текста статьи.

Бобина Т. С. – обзор публикаций по теме статьи, анализ полученных данных, написание текста статьи, подготовка и оформление графического материала.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Шатский Н. С. Избранные труды. В 4 т. Т. 4. История и методология геологической науки. М.: Недра, 1965. 398 с.
2. Бондаренко В. Н. Статистические решения некоторых задач в геологии. М.: Недра,1970. 247 с.
3. Ефремова С. В., Стафеев К. Г. Петрохимические методы исследования горных пород: справ. пособие. М.: Недра,1985. 511 с.
4. Канцель А. В. Функция распределения металла в рудах как генетическая характеристика процесса рудообразования // Известия АН СССР. Сер. геол. 1966. № 10. С. 18–30.
5. Крамбейн У., Грейбилл Ф. Статистические модели в геологии. М.: Мир, 1969. 397 с.
6. Мазина Е. А., Райхлин А. И. К вопросу о применении статистических методов при петрохимических и геохимических исследованиях // Магматические формации, метаморфизм и металлогения Урала: сборник науч. трудов. Свердловск, 1968. С. 53–59.
7. Матерон Ж. Основы прикладной геостатистики. М.: Мир, 1968. 408 с.
8. Миллер Р., Кан Дж. Статистический анализ в геологических науках. М.: Мир, 1965. 482 с.
9. Мягков В. Ф. О значении исследования кривых распределения содержаний для познания процессов рудообразования // ДАН СССР. 1967. Т. 178. № 4. С. 906–909.
10. Фаас А. В., Сарманов О. В. О распределении процентных величин // Вопросы математической геологии. Л.: Наука, 1968. С. 111–118.
11. Шарапов И. П. Применение математической статистики в геологии. М.: Недра, 1971. 245 с.

12. Шоу Д. М., Крафт Е. Ф. Гомогенность и случайные результаты в геохимии // Химия земной коры. М.: Наука, 1964. Т. II. С. 279–292.
13. Родионов Д. А. Функции распределения элементов и минералов в изверженных горных породах. М.: Наука, 1964. 102 с.
14. Родионов Д. А. Статистические решения в геологии. М.: Недра, 1981. 231 с.
15. Кейльман Г. А., Паняк С. Г. Математические модели метасоматических процессов и их геологическая интерпретация // ДАН СССР. 1976. Т. 227. № 1. С. 188–191.
16. Паняк С. Г. Математическое моделирование геохимии петрогенных процессов в связи с проблемой источника рудного вещества // ДАН СССР. 1981. Т. 261. № 5. С. 1190–1193.
17. Паняк С. Г. Распределение химических элементов в изверженных породах и их математические модели // ДАН СССР. 1980. Т. 253. № 5. С. 1200–1203.
18. Паняк С. Г. Закономерности распределения химических компонентов при петрогенных процессах и их математическое обоснование // ДАН СССР. 1987. Т. 296. № 4. С. 968–973.
19. Паняк С. Г. Логнормальные распределения параметров природных систем как отражение второго начала термодинамики // ДАН СССР. 1988. Т. 300. № 4. С. 957–960.
20. Поляков В. Л., Паняк С. Г. Функции распределения элементов как критерий генезиса гранитоидов // ДАН СССР. 1979. Т. 247. № 3. С. 703–706.
21. Коржинский Д. С. Понятие о геохимической подвижности элементов // Записки ВМО. 1942. Ч. 71. Вып. 3-4. С. 160–168.

Статья поступила в редакцию 30 июля 2025 года

UDC 550.4:519.2:(553.3:553.6) http://doi.org/10.21440/2307-2091-2025-3-164-172

Mathematical models of petrogenic processes and their accompanying entropy trends

Stefan Grigor'evich PANYAK*
Tat'yana Sergeevna BOBINA**

Ural State Mining University, Ekaterinburg, Russia

Abstract

Relevance. Geological science has been agreeing with the words of the German philosopher Immanuel Kant for several centuries: "There is as much truth in every science as there is mathematics in it", but real steps in this direction are made very slowly. This article presents an original view of petrological processes from the standpoint of the exact sciences: mathematics, physics, chemistry. It summarizes the results of mathematical modeling of the crystallization processes of igneous and metamorphic rocks, including the accompanying ore genesis. Some of these materials were previously presented in the DAN USSR, but in the current edition the emphasis is placed on the thermodynamic aspect, and the entropy trends accompanying these processes are calculated for the first time. The number of purposefully completed analytical materials allowed the authors to make a qualitative leap - for the first time to obtain genetic information from the obtained empirical distributions of chemical components in the main types of rocks.

The purpose of the work is to demonstrate the possibilities of extracting new genetic information in mathematical modeling of geological processes, including quantitative assessment of the potential ore content of certain rocks.

Conclusions. For the first time, petrogenetic processes received a mathematical and thermodynamic interpretation. The vague concepts of "active", "passive", and "inert" chemical components, long discussed in petrology, received a specific assessment, which simplifies the use of the Gibbs phase rule. It has been proven that high-quality analytical materials, performed taking into account the requirements of statistics, allow us to estimate the potential ore content of metamorphic and igneous rocks.

Keywords: mathematical model of metamorphic processes, mathematical model of igneous processes, entropy, race genesis.

REFERENCES

1. Shatsky N. S. 1965, Selected Works. In 4 Volumes. Vol. 4. History and Methodology of Geological Science. Moscow, 398 p. (*In Russ.*)
2. Bondarenko V. N. 1970, Statistical Solutions of Some Problems in Geology. Moscow, 247 p. (*In Russ.*)
3. Efremova S. V., Stafeev K. G. 1985, Petrochemical Methods of Rock Research: Reference Manual. Moscow, 511 p. (*In Russ.*)
4. Kantsel A. V. 1966, Metal Distribution Function in Ores as a Genetic Characteristic of the Ore Formation Process. *Izvestiya Akademii nauk SSSR. Seriya geologicheskaya* [News of the Academy of Sciences of USSR. Geological Series], no. 10, pp. 18–30. (*In Russ.*)
5. Krumbein W., Graybill F. 1969, Statistical Models in Geology. Moscow, 397 p. (*In Russ.*)
6. Mazina E. A., Raikhlin A. I. 1968, On the Issue of the Application of Statistical Methods in Petrochemical and Geochemical Studies. Magmatic Formations, Metamorphism and Metallogeny of the Urals: Collection of Scientific Papers. Sverdlovsk, pp. 53–59. (*In Russ.*)
7. Matheron J. 1968, Fundamentals of Applied Geostatistics. Moscow, 408 p. (*In Russ.*)
8. Miller R., Kahn J. 1967, Statistical Analysis in the Geological Sciences. Moscow, 482 p. (*In Russ.*)
9. Myagkov V. F. 1967, On the Importance of Studying the Distribution Curves of Contents for Understanding the Processes of Ore Formation. *Doklady Akademii nauk SSSR* [Reports of the USSR Academy of Sciences], vol. 178, no. 4, pp. 906–909. (*In Russ.*)
10. Faas A. V., Sarmanov O. V. 1968, On the Distribution of Percentage Values. Questions of Mathematical Geology. Leningrad, pp. 111–118. (*In Russ.*)
11. Sharapov I. P. 1971, Application of Mathematical Statistics in Geology. Moscow, 245 p. (*In Russ.*)
12. Shaw D. M., Kraft E. F. 1964, Homogeneity and Random Results in Geochemistry. Chemistry of the Earth's Crust. Moscow, vol. 2, pp. 279–292. (*In Russ.*)
13. Rodionov D. A. 1964, Distribution Functions of Elements and Minerals in Igneous Rocks. Moscow, 102 p. (*In Russ.*)
14. Rodionov D. A. 1981, Statistical Decisions in Geology. Moscow, 231 p. (*In Russ.*)
15. Keilman G. A., Panyak S. G. 1976, Mathematical Models of Metasomatic Processes and Their Geological Interpretation. *Doklady Akademii nauk SSSR* [Reports of the USSR Academy of Sciences], vol. 227, no. 1, pp. 188–191. (*In Russ.*)
16. Panyak S. G. 1981, Mathematical Modeling of the Geochemistry of Petrogenic Processes in Connection with the Problem of the Source of Ore Matter. *Doklady Akademii nauk SSSR* [Reports of the USSR Academy of Sciences], vol. 261, no. 5, pp. 1190–1193. (*In Russ.*)
17. Panyak S. G. 1980, Distribution of Chemical Elements in Igneous Rocks and Their Mathematical Models. *Doklady Akademii nauk SSSR* [Reports of the USSR Academy of Sciences], vol. 253, no. 5, pp. 1200–1203. (*In Russ.*)
18. Panyak S. G. 1987, Regularities of Distribution of Chemical Components in Petrogenic Processes and Their Mathematical Justification. *Doklady Akademii nauk SSSR* [Reports of the USSR Academy of Sciences], vol. 296, no. 4, pp. 968–973. (*In Russ.*)

✉panjakst@gmail.com
https://orcid.org/0000-0001-8436-639X
**tanyashka1993@mail.ru
https://orcid.org/0000-0001-7790-9907

19. Panyak S. G. 1988, Lognormal Distributions of Parameters of Natural Systems as a Reflection of the Second Law of Thermodynamics. *Doklady Akademii nauk SSSR* [Reports of the USSR Academy of Sciences], vol. 300, no. 4, pp. 957–960. (*In Russ.*)
20. Polyakov V. L., Panyak S. G. 1979, Distribution Functions of Elements as a Criterion for the Genesis of Granitoids. *Doklady Akademii nauk SSSR* [Reports of the USSR Academy of Sciences], vol. 247, no. 3, pp. 703–706. (*In Russ.*)
21. Korzhinsky D. S. 1942, The Concept of Geochemical Mobility of Elements. *Zapiski Vserossiyskogo mineralogicheskogo obshchestva* [Notes of the All-Russian Mineralogical Society], part 71, issue 3-4, pp. 160–168. (*In Russ.*)

The article was received on July 30, 2025