

А. Г. КРАЕВА, Н. Л. ДОБРЕЦОВ, С. С. ЛАЗАРЕВА

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРИИ ГРАФОВ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ ПАРАГЕНЕТИЧЕСКИХ ДИАГРАММ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ

(Представлено академиком В. С. Соболевым 28 XI 1972)

Используемый в петрологической литературе метод Ф. Скрейнемакера — Д. С. Коржинского (¹, ²) построения диаграмм состояния основан на геометрических построениях и часто принуждает ограничиваться упрощенными моделями, когда число инертных компонентов не более 3—4, а число внешних параметров сведено к двум. Цель этой работы — показать один из путей получения всех элементов диаграммы, одинаковый при любых количествах минералов, компонентов и внешних параметров. В (³) была показана возможность использования аппарата теории графов, с помощью которой можно построить диаграмму состояния системы и вообще решать все вопросы геометрии полиэдра составов, не прибегая к геометрическим построениям. При этом теряется наглядность рассуждений, но возникает возможность избежать многомерных конструкций, использовать алгоритмы теории графов, а решение принимает вид, доступный для составления программ, в которых необходимость тем больше, чем больше минералов и компонентов.

Таблица 1

Минерал	$\frac{1}{2} \text{Al}_2\text{O}_3$	FeO	MgO	CaO	Символ минерала	Индекс минерала
Тальк	0,0	0,0	1,0	0,0	Та	A ¹
Хлорит	2,7	1,8	2,5	0,0	Хл	A ²
Стильпомелан	2,0	3,0	2,0	0,0	Ст	A ³
Эпидот	2,0	0,0	0,0	2,0	Эп	A ⁴
Актинолит	0,2	1,0	3,8	2,0	Акт	A ⁵
Нумшеллит	1,3	0,3	0,7	2,0	Пу	A ⁶
Магнетит	0,0	1,0	0,0	0,0	Мг	A ⁷

В настоящей статье кратко излагаются некоторые операции над графами, необходимые для получения элементов парагенетических диаграмм, на примере из петрологии низкотемпературных метаморфических сланцев. За исходные данные взята табл. 1. Рассмотрим только наиболее распространенные ассоциации в породах, постоянно содержащих кварц, альбит, мусковит и гематит, т. е. систему из 4 виртуальных компонентов и 7 минералов. По правилам из (³) составим граф системы G_{ϕ}^{k-1} , где k — число компонентов, а ϕ — число минералов. Для этого графа следует выписать матрицу смежности, учитывая знаки всех определителей k -порядка, полученных из матрицы составов минералов и не равных нулю.

Вся терминология, касающаяся графа, заимствована из (⁴). Особенность использования графа заключается в том, что все элементы искомой диаграммы читаются в нем по k -минеральным дивариантным ассоциациям, которые проставлены в вершинах графа. Например, 1-я вершина 1 2 3 4 представляет ассоциацию из минералов A¹, A², A³, A⁴ (см. табл. 1), 2-я вершина с индексами 1, 2, 3, 5 представляет ассоциацию A¹, A², A³, A⁵ и т. д. Вершины с индексами, например, 1 2 3 7 быть не может, потому что определитель из строк с этими номерами табл. 1 равен нулю. Всего для табл. 1 получается 34 вершины в графе, т. е. 34 четырехминеральных

ассоциаций. Всякая другая ассоциация с большим числом степеней свободы определяется как общая для нескольких 4-минеральных ассоциаций. Именно, доказана справедливость утверждения: две вершины графа удалены друг от друга на расстояние l тогда и только тогда, когда среди их минералов есть точно $k - l + 1$ общих ⁽⁵⁾.

Вопрос о взаимнойисключаемости ассоциаций решается делением ребер графа на сильные и слабые согласно ^(3, 5, 6). Две k -минеральные ассоциации исключают друг друга, если в подграфе, определяемом вершинами маршрутов, по которым измеряется расстояние между рассматриваемыми ассоциациями, нельзя найти слабый маршрут, каждое слабое ребро которого стягивает сильную вилку из этого же подграфа. Если вершины смежны, то это условие сводится к тому, что их соединяет сильное ребро.

Из-за недостатка места мы приводим лишь часть матрицы смежности графа (табл. 2), составленную для пучка шести минералов без энидота. Слабым ребрам соответствует -1 , сильным ребрам $+1$.

Чтобы найти все реакции, в построенном графе найдем все максимальные полные подграфы, не различая ребер, т. е. учитывая только факт смежности вершин. Для этого можно воспользоваться алгоритмом из ⁽¹⁾ или последовательным удалением вершин. Среди полученных подграфов есть два типа. Первый тип назовем сильным произведением двух полных слабых подграфов, если все вершины каждого подграфа сильно смежны с каждой вершиной другого. Второй тип назовем слабым произведением двух полных сильных подграфов, если все вершины одного слабо смежны с каждой вершиной другого. Каждое сильное произведение представляет моновариантную реакцию. Каждый из его слабых подграфов дает множество k -минеральных ассоциаций, которые могут находиться в одном поле. Например, 1-е сильное произведение в табл. 3 имеет слабые подграфы 3—7 и 2—4—11 (см. табл. 2). Это значит, что ассоциации 3 и 7 находятся в одном поле, а 2, 4 и 11 — в другом (см. диаграмму). Эта реакция является границей между двумя полями.

Таблица 2

1234	1235	1236	1256	1257	1267	1356	1357	1367	1567	2356	2357	2367	3567	2567	
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	
0	+1 0	+1 +1 0	0 -1 +1 0	0 +1 0 -1 0	0 0 +1 +1 0	0 +1 -1 0 0	0 -1 0 0 -1 0	0 0 -1 0 +1 +1 0	0 0 0 +1 -1 +1 0	0 -1 +1 -1 0 0 0	0 -1 0 0 +1 0 0	0 0 -1 0 0 -1 +1 0	0 0 0 0 0 -1 +1 -1 0	0 0 0 -1 0 +1 +1 +1 +1	1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15

Для нахождения полей составим табл. 3 (приведена ее часть, соответствующая выбранному пучку). На пересечении i -й строки и j -го столбца ставим -1 , если эти подграфы имеют общее слабое ребро, $+1$, если сильное ребро, и 0 , если они не имеют ни одного общего ребра. Например, на пересечении 1 сильного и 2 слабого в табл. 3 стоит -1 , так как ребро 2—4 слабое (см. табл. 2). На основании этой таблицы составим табл. 4 для сильных произведений. В ней на пересечении i -й строки и j -го столбца ставим $+1$, если эти сильные произведения в табл. 3 имеют по -1 в одном и том же хотя бы одном столбце, -1 , если они имеют по одной общей вершине и для них не существует ни одного столбца, имеющего в пересечении с ними по -1 . И, наконец, во всех остальных случаях ста-

вим нули. Табл. 4 можно рассматривать как матрицу смежности нового графа, применив опять алгоритм из (4) для того, чтобы найти все максимальные полные подграфы, каждая пара вершин которых слабо смежна. Для табл. 4 получим подграфы 3-6, 3-4, 1-5, 1-4, 2-6, 2-5. Получили все поля дивариантных равновесий пучка. Точно так же по полной таблице для сильных произведений были сразу получены все поля. Разложить их по пучкам можно, если помнить, что каждая реакция входит в два поля одного пучка, и использовать поэтому нахождение простых циклов по матрице инцидентий реакций и полей из (4).

При вычерчивании диаграммы по обе стороны от каждой линии пишем вершины слабых подграфов соответствующего сильного произведения так, чтобы они имели по одной вершине, общей с другой линией. Например, в поле 1-4 (см. рис. 1) для линии 1 пишем 3, 7, а для линии 4-7, 8, 14, потому что эти подграфы имеют одну общую вершину 7. Фация каждого поля объединяет k -минеральные ассоциации моновариантных линий, входящих в его границы. Например, поле 1-4 на рис. 1, является областью устойчивости ассоциаций с номерами (по табл. 2) 3, 7, 8, 13, 14 и $Xл + Эп - Пу - Мг$, которая появляется, если описанные операции повторить для матрицы смежности всего графа G_7^3 .

Для того чтобы написать реакции в обычном виде, нужно из табл. 2 взять индексы, общие для всех вершин слабого подграфа, и отбросить среди них индексы, общие вообще для всех вершин графа этой реакции. Например, 1-я реакция может быть написана так: группа ассоциаций 2, 4, 11 имеет общие минералы $Xл$ и $Акт$, другая группа 3 и 7 - $Та$, $Ст$, $Пу$ (см. табл. 2 и 1).

На полученной диаграмме показаны только стабильные пучки. При ориентации этой диаграммы относительно осей T и P линия разложения стильномелана принята горизонтальной (не зависящей от P), а остальные линии с участием высоководных минералов ($Xл$, $Пу$, $Ст$) сделаны по возможности слабо наклонными, так как соответствующие реакции должны больше зависеть от температуры, а не от давления. Вследствие упрощения системы некоторые реакции с участием талька не соответствуют природным наблюдениям. Тем не менее, полученная диаграмма представ-

Таблица 3

Сильные произведения		Слабые произведения																																			
		1, 2, 3		2, 4, 5		3, 4, 6		3, 4, 6, 11, 13		3, 7, 9, 7, 8, 5, 6		2, 11, 12		4, 7, 10		5, 8, 10		6, 9, 10		4, 11, 15, 5, 12, 15		13, 15		8, 9		7, 11, 14		8, 12, 14, 9, 13, 14		17		18		19		20	
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20																
1	1, 2, 3, 4, 7, 11	+1	-1	+1	+1	-1	+1	0	-1	+1	0	-1	0	0	0	0	+1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	2, 5, 8, 12	0	+1	0	0	0	-1	0	-1	0	+1	0	0	0	0	0	0	+1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
3	3, 6, 8, 13	0	0	+1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
4	7, 8, 9, 10, 14	0	0	0	0	+1	-1	0	0	+1	+1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
5	11, 12, 13, 14, 15	0	0	0	-1	0	0	0	+1	0	0	+1	0	0	0	0	0	-1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
6	4, 5, 6, 10, 15	0	-1	+1	0	0	0	0	0	+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	

