광물과 암석
Korean J. Mineral. Petrol. Vol. 38, No. 2, p. 111~131, 2025
https://doi.org/10.22807/KJMP.2025.38.2.111

입문자를 위한 alphaMELTS 1.9 사용 매뉴얼

박규찬* · 임성환 · 박정우
서울대학교 지구환경과학부

User manual of alphaMELTS 1.9: A Guide for Beginners

Gyuchan Park*, Sunghwan Im and Jung-Woo Park
School of Earth and Environmental Sciences, Seoul National University, Room 301, building 25-1, 1, Gwanak-ro, Gwanak-gu, Seoul 08826, Korea

요 약: alphaMELTS 1.9는 다양한 환경에서의 화성과정을 구현하는 모델링 프로그램으로 기존에 보고된 열역학 모델링 프로그램인 MELTS, pMELTS 및 pHMELTS를 기반으로 한다. 문자 기반 인터페이스를 제공하며 윈도우(Windows)와 맥(Mac) 운영체제에서 모두 실행 가능하여, 기존 열역학 모델링 프로그램에 비해 뛰어난 접근성과 사용 편의성을 갖춘 것이 특징이다. 본 논문에서는 alphaMELTS 1.9의 설치 방법과 기본 사용법을 정리하고, 실행 과정에서 발생할 수 있는 일반적인 오류와 그 해결 방안을 제시한다. 또한, alphaMELTS 1.9를 활용하여 평형 및 분별 결정 작용, 동화-분별 결정 작용, 평형, 연속 및 분별 용융, 융제 용융 등의 화성과정을 구현하고 이를 실제 분석 자료와 비교한 예제를 제시한다. 이를 통해 연구자들이 alphaMELTS 1.9를 활용하여 화성 작용의 기작과 맨틀 및 지각의 진화과정을 보다 효과적으로 이해하고 분석할 수 있도록 하는데 목적이 있다.

핵심어: 열역학 모델, alphaMELTS, 분별 결정 작용, 맨틀 용융

Abstract: alphaMELTS 1.9 is a modelling program designed to simulate magmatic processes under various geological settings, based on the thermodynamic models, MELTS, pMELTS, and pHMELTS. The text-based interface and compatibility of alphaMELTS 1.9 with both Windows and Mac systems offer greater accessibility and usability, compared to conventional thermodynamic models. This paper outlines the installation procedure and basic usage of alphaMELTS 1.9, and provides guidance on troubleshooting common execution errors. Additionally, it presents examples that implement representative magmatic processes—including equilibrium and fractional crystallization, assimilation-fractional crystallization, equilibrium, continuous and fractional melting, and flux melting—using alphaMELTS 1.9. Furthermore, the modelling results are compared with natural sample data. This study aims to assist researchers in utilizing alphaMELTS 1.9 for understanding the magmatic processes and evolution of mantle and crust.

Keywords: Thermodynamic model, alphaMELTS, Fractional crystallization, Mantle melting

서 론

MELTS 시리즈는 마그마 내 광물-용융물 상평형을 계산하는 데 최적화된 열역학 모델링 프로그램으로, 다양한 온도, 압력, 조성 조건에서 일어나는 화성 작용을 재현할 수 있다(e.g. MELTS, Rhyolite-MELTS, pMELTS, pHMELTS). 그 중 MELTS는 가장 기본이 되는 프로그램으로 500-2000 ℃의 온도 범위와 0-3 GPa의 압력 범위에서 일어나는 화성 작용을 재현하는데 적합하다 (Ghiorso and Sack, 1995; Asimow and Ghiorso, 1998). Rhyolite-MELTS는 MELTS의 열역학 모델에서 석영과 K-장석의 형성 엔탈피를 수정하고, H_2O-CO_2 혼합 유체의 포화 모델이 추가된 프로그램으로(Gualda *et al*., 2012; Ghiorso and Gualda, 2015), 물 함량이 높은 규장질 마그마계(magma system)를 모델링하는데 적합하

*Corresponding author
Tel: +82-2-880-8125
E-mail: qkrrbcks7@snu.ac.kr

다. 반면, pMELTS는 고온(1000-2500 ℃), 고압(1-4 GPa) 조건에서 맨틀 암석 및 용융물의 성분을 재현할 수 있도록 MELTS의 열역학 모델을 수정한 프로그램으로, 특히 맨틀 용융 과정을 모델링하는데 특화되어 있다 (Ghiorso *et al*., 2002). 마지막으로 pHMELTS는 물이 존재하는 환경에서 맨틀 용융 과정을 재현하는데 적합한 프로그램이다. 기존 MELTS 시리즈가 H_2O를 함수광물과 용융물, 유체에만 분배할 수 있는 반면, pHMELTS는 무수 광물 내로의 H_2O 분배를 고려하는 모델을 MELTS 또는 pMELTS과 결합함으로써 보다 정교한 물-함수계 용융 과정을 모사할 수 있다(Asimow *et al*., 2004). 다양한 조건에서의 화성 작용에 적용할 수 있는 범용성 덕분에 MELTS 시리즈는 자연 화성암 시료에서 관찰되는 성분 다양성을 설명하기 위한 도구로 널리 활용되어 왔다. 이를 통해 다양한 화성 작용의 기여을 평가하거나, 해당 화성 작용이 일어난 물리화학적 환경을 추정하는데 사용되어 왔다(e.g., Laubier *et al*., 2007; Gennaro *et al*., 2019).

alphaMELTS는 기존 MELTS 시리즈의 열역학 모델을 모두 포함하며, 사용성과 접근성을 개선한 열역학 모델링 프로그램이다. 기존 MELTS 시리즈가 터미널 명령어 입력 방식으로 작동하는 것과 달리, alphaMELTS는 문자 기반의 인터페이스를 통해 사용자 친화적인 환경을 제공한다. 또한, 기존 MELTS 시리즈는 유닉스(UNIX) 계열의 리눅스(Linux)와 맥(Mac) 운영체제에서만 사용 가능하지만 alphaMELTS는 윈도우(Windows) 운영체제에서도 실행 가능해 더욱 많은 연구자들이 쉽게 접근할 수 있도록 설계되었다.

본 논문은 alphaMELTS의 기초적인 사용법을 소개하고, 대표적인 화성과정에 대한 예제를 제공함으로써 국내 연구자들이 지화학 자료 해석에 이 프로그램을 효과적으로 활용할 수 있도록 하는데 목적이 있다. 또한, 이 논문을 매뉴얼로 사용할 수 있도록, 각 장 간의 연결성을 유지하되, 연구자가 관심있는 특정 장부터 선택적으로 읽어도 이해할 수 있도록 구성하였다. alphaMELTS의 더 자세한 활용법과 고급 설정은 alphaMELTS 공식 홈페이지(http://magmasource.caltech.edu/alphaMELTS/)에서 제공하고 있는 공식 매뉴얼과 워크샵 자료에서 찾아볼 수 있다.

현재 alphaMELTS는 1.9와 2.3 두 가지 버전이 제공된다. alphaMELTS 2.3은 Rhyolite-MELTS(Gualda *et al*., 2012; Ghiorso and Gualda, 2015)를 포함하고 있어 함수 규장질 마그마계를 고려한 모델링에 강점을 갖지만, 아직 pHMELTS(Asimow *et al*., 2004)를 내장하지 않아 맨틀의 수화 용융 계산에는 한계가 있다. 이에 비해 alphaMELTS 1.9는 MELTS와 pMELTS, pHMELTS의 열역학 모델을 모두 포함하고 있어 더 폭넓은 응용이 가능하다. 따라서 본 논문에서는 alphaMELTS 1.9 (이하, 'alphaMELTS')를 다루고자 한다.

설치 및 실행 방법

설치

이하의 글에서는 실행 가능한 프로그램명이나 스크립트를 `Courier` 글꼴로 표기하였다. 운영체제 및 alphaMELTS 공식 홈페이지에서 제공하거나, 본문에서 임의로 지정한 명칭이 있는 폴더 및 파일명, 수치 등의 변수들은 **굵은 글씨로** 나타내었다. 반면, 특정 파일이나 폴더를 지칭하지 않고 일반적인 유형이나 범주를 설명할 경우에는 *기울임꼴*로 표기하였다. *기울임꼴*로 표기된 항목은 실제 프로그램 구동 시, 실제 사용할 파일명이나 폴더명으로 치환되어야 한다.

파일 내려받기

alphaMELTS 공식 홈페이지에서 회원가입 후 사용중인 운영체제와 호환되는 버전의 alphaMELTS를 내려받는다. 운영체제에 따라 설치하는 방법이 상이하기 때문에 아래에서는 대부분의 연구자가 사용하는 맥과 윈도우 운영체제에서 설치하는 방법을 서술하였다. 윈도우의 경우, 홈페이지에서 제공하는 링크를 이용하여 `strawberry perl` 프로그램을 먼저 설치해야 한다. 링크에서 'portable version' 압축 파일을 내려 받아 압축을 풀고, C나 D 드라이브 바로 아래로 이동하여 폴더 이름을 **Strawberry**로 변경한다(예: **C:\Strawberry**). 맥은 `perl` 프로그램을 내려받지 않는다. 다음으로 두 운영체제 모두 alphaMELTS 압축 파일의 압축을 풀고, 폴더 내부의 **windows_ alphamelts_1-9** 또는 **macosx_ alphamelts_1-9** 폴더(이하, *download_folder*)를 C나 D 드라이브 바로 아래로 이동한다(예: **C:\windows_ alphamelts_1-9**). 이때, 프로그램 구동 시에 발생할 수 있는 문제를 방지하기 위해 다운로드 및 설치하는 파일 경로는 공백 없이 영문과 숫자, 밑줄 문자(_)로만 구성하는 것을 추천하며, 클라우드 저장소는 이용하지 않는 것을 권한다.

프로그램 설치

파일은 모두 받았으니 이제 설치를 진행한다. 윈도우의

경우, *download_folder* 폴더 내의 `install.command`를 우클릭하여 연결 프로그램을 선택, 다른 앱-이 PC에서 다른 앱 찾기를 선택하여 `perl` 프로그램을 선택한다. 위치는 C나 D 드라이브의 **Strawberry\Perl\bin**이다. 맥의 경우, `install.command`를 더블 클릭한다. 명령 프롬프트나 터미널이 열리며, 순서대로 세 개의 폴더의 위치와 기본 *settings_file*을 물어볼 것이다. 첫번째 폴더는 프로그램 자료들을 저장하는 *installation_folder*로 위치는 기본적으로 *download_folder*로 설정되어 있을 것이며, 이는 기본 설정값을 사용하는 것을 추천한다. 두번째 폴더는 프로그램을 구동할 때 필요한 스크립트를 저장하는 *links_folder*로 맥에서는 사용자의 홈 폴더 내 bin 폴더, 윈도우에서는 문서 폴더 내 bin 폴더가 기본값으로 설정되어 있다. bin 폴더가 기존에 존재하지 않는다면 alphaMELTS 설치와 함께 자동으로 생성된다. alphaMELTS를 구동할 때 *links_folder*에 저장된 스크립트를 실행하여 구동하기 때문에 기본으로 설정된 폴더 위치를 사용해도 되지만, 사용의 편의를 위해 다른 폴더의 위치를 설정하는 것도 추천한다. 다른 폴더의 위치로 설정하기 위해 해당 폴더를 드래그 앤 드롭하여 그 경로를 입력할 수 있다(예: **C:\alphaMELTS_running**). 이 경우에도 파일 경로는 영문과 숫자, 특수 문자로만 구성하는 것을 추천하며, 클라우드 저장소는 이용하지 않는 것을 권한다. 마지막 폴더는 예시 자료들을 포함하는 *examples_folder*로 기본으로 제공되는 위치를 사용하는 것을 추천한다. 이들 예시 자료는 아래 예제에서 활용될 예정이다. 마지막으로는 환경 변수와 모델 조건을 포함하는 *settings_file*을 요구하는데 기본 설정값인 **alphamelts_default_env.txt**으로 둔다. 모두 설정 후 'y'를 입력하여 설치를 수행 및 완료한다.

입력 파일

alphaMELTS를 실행하는 방법을 기술하기 전에 구동 시 사용되는 자료들을 먼저 설명하고자 한다. 이들 파일을 프로그램에 입력 및 이용하는 방법은 '실행 방법' 장에 기술되어 있다.

melts_file

모델링에 필요한 초기 성분과 물리, 화학적 조건을 포함하는 파일로 **.melts** 확장자를 갖는다(예: *example_folder* 내 **Morb.melts)**. 해당 파일의 편집은 워드패드나 메모장으로 가능하다. 파일 내용 중 'Title:'과 주원소(산화물 형태로 표기) 성분인 'Initial Compositions: *element value*'만이 필수적으로 포함되어야 하는 정보이며, 첫 행은 'Title:'로 시작해야 한다. 주원소 성분(필요시 H_2O 포함)의 단위는 그램(g)이며, 0으로 설정하면 값을 입력하지 않아도 해당 산화물이 화면 출력이나 출력 파일에 기재된다.

미량원소 성분은 'Initial Trace: *element value*'로 입력하며, ppm 단위 또는 정규화된(normalized) 값으로 입력할 수 있다. 'Initial Temperature: *value*'와 'Initial Pressure: *value*', 'Initial Entropy: *value*'로 입력할 수 있는 초기 온도와 압력, 엔트로피의 단위는 각각 ℃와 bar, J/K이다. 'Log fO_2 Path: *value*'에 설정할 수 있는 값은 FMQ, IW, NNO, HM, ABS, NONE 등으로 각각의 산소 퓨가시티(oxygen fugacity, fO_2) 버퍼(buffer)를 지시한다(Frost, 1991). 'Log fO_2 Delta: *value*'는 'Log fO_2 Path: *value*'에서 선택한 산소 퓨가시티 버퍼로부터의 차이값을 입력하거나 산소 퓨가시티 버퍼를 ABS로 입력한 경우 절대값을 입력하여 모델링하는 시스템의 초기 산소 퓨가시티로 설정한다. 모델링이 고상선 미만 조건(subsolidus)에서 시작하는 경우(이를 설정하는 것은 'alphaMELTS menu prompt' 장에서 서술), Fe 일부를 Fe_2O_3로 설정해야 한다. 다만, alphaMELTS 프로그램이 산소 퓨가시티 버퍼를 근거로 FeO와 Fe_2O_3의 비율을 자동을 조절하기 때문에 *melts_file*에서 그 비율을 정확하게 입력할 필요는 없다.

pMELTS는 MELTS와 달리 MnO와 CoO, NiO이 캘리브레이션되지 않았기 때문에 pMELTS를 이용하는 경우, 이들 원소는 'Initial Composition: *element value*'이 아닌 'Initial Trace: *element value*'를 이용하여 열역학 계산에 활용되지 않는 미량원소의 형태로 입력해야 한다. 그리고 모델링이 고상선 미만 조건에서 시작하는 경우, 안정상에 장석과 첨정석이 없으면 각각 K_2O와 Cr_2O_3의 계산에 오류가 발생할 수 있다. K_2O는 하석(nepheline)이나 백류석(leucite)와 같은 준장석 광물로 분배될 수도 있지만, 이들은 규산염 불포화 조건에서 안정화되는 광물로 일반적으로 사방휘석이 존재하는 맨틀 용융 모델링 시 안정한 광물로 고려되지 않는다(Yoder and Tilley, 1962). 따라서 맨틀 용융 모델링 시 안정화되는 광물상을 고려하여 특정 원소를 'Initial Trace: *element value*'로 입력하는 것을 권장한다.

enrichment_file

*enrichment_file*은 기원물질(source) 혼합과 동화

(assimilation)-분별 결정 작용, 융제 용융(flux melting) 모델링 시에 이용되는 파일로 초기 성분에 더해지는 추가 물질의 성분을 포함한다. 확장자는 **.melts**이며, 예시로는 본 논문의 '융제 용융' 장에 제시된 **hydrousfluid.melts**가 있다. 파일의 내용은 *melts_file*와 동일하게 'Title:'로 시작해야 하고, 'Initial Composition:'과 'Initial Trace:'를 포함할 수 있다. 다만, 'Initial Composition:'은 필수 요소가 아니며, 'Initial Trace:'의 순서는 *melts_file*와 동일해야 한다. 모델링 각 단계별로 추가되는 물질의 질량은 'Initial Mass: *value*'로 입력할 수 있으며, 단위는 그램이다.

settings_file

환경 변수가 포함되어 있는 입력 파일로 확장자는 **.txt**이다. 입력할 수 있는 모든 환경 변수는 프로그램 설치 시에 기본 설정값으로 이용한 파일인 **alphamelts_default_env.txt**에 포함되어 있으며, *installation_folder*에서 찾을 수 있다. *settings_file* 내 대부분의 환경 변수들은 'ALPHAMELTS_ENVIRONMENT_VARIABLE(환경 변수 제시) *value*(변수 설정값)' 형태로 설정된다. 모델링 과정에서 사용하지 않을 환경 변수는 맨 앞에 !를 입력하거나 *value*를 'false'로 설정하여 비활성화할 수 있다. 환경 변수 'ALPHAMELTS_VERSION'에는 MELTS나 pMELTS를 설정하여 모델링에 사용할 열역학 모델을 선택할 수 있다. pHMELTS는 앞선 두 모델과 결합하여 사용되는 모델로 환경 변수 'ALPHAMELTS_DO_TRACE_H2O'를 활성화하여 활용할 수 있다. 모델링에서 가정할 열역학적 과정은 'ALPHAMELTS_MODE'로 설정할 수 있다. 맨틀 용융을 모델링하기 위해서는 외부로부터의 열이 공급되는 조건을 가정하여 'ALPHAMELTS_DELTAT'을 양수로 설정하거나 맨틀이 지표로 상승하는 조건을 가정하여 'ALPHAMELTS_DELTAP'를 음수로 설정할 수 있다. 반면, 마그마 결정화를 위해서는 마그마가 식는 것을 가정하여 'ALPHAMELTS_DELTAT'를 음수로 설정할 수 있다. '예시' 장에서는 일부 환경 변수의 활용 예시를 서술하며, 모든 환경 변수에 대한 제시한 설명은 공식 매뉴얼(Antoshechkina and Asimow, 2016)에 기술되어 있다.

감압 맨틀 용융과 등압 마그마 결정화를 모델링하는 경우에는 사용의 편의를 위해 직접 *settings_file*을 만드는 것보다 각 모델에 필요한 변수만 포함되어 있는 **isentropic_melt_env.txt**와 **frac_xtal_env.txt**를 활용하기를 추천한다. 두 파일 모두 *installation_folder*에 포함되어 있으며, 각 파일의 활용법은 '예시' 장에 기술되어 있다.

실행 방법

links_folder 내 `run_alphamelts.command.bat` 파일을 더블 클릭하여 alphaMELTS를 구동할 수 있다. 모델링으로 진입하기 위한 alphaMELTS menu prompt에 도달하기 위해서는 명령어 옵션을 이용하여 모델링 시 사용할 환경 변수와 구동 후 자료를 저장할 폴더 위치를 설정해야 한다. 본 장은 명령어 옵션들 중 alphaMELTS 구동에 필수적인 옵션들을 설명하고, 이들을 활용하여 alphaMELTS menu prompt에 도달하는 방법을 기술한다. alphaMELTS menu prompt를 활용하여 모델링을 수행하는 구체적인 방법은 '예시' 장에서 다룬다.

명령어 옵션

-h: 사용할 수 있는 모든 명령어의 목록과 각 명령어의 간략한 설명을 불러오는 명령어 옵션이다. 다른 명령어 옵션은 함께 사용할 수 있고, 사용 순서도 무관하지만 본 명령어 옵션은 독립적으로 사용하여야 한다.

-f *settings_file*: *settings_file*를 불러와서 환경 변수를 설정하는 명령어 옵션이다. 불러올 *settings_file*을 드래그 앤 드롭하여 위치 및 파일명을 입력할 수 있다. 해당 명령어 옵션을 입력하지 않으면 alphaMELTS는 기본 설정값인 **alphamelts_default_env.txt**을 *settings_file*로 이용한다. 이때, **alphamelts_default_env.txt**이 *links_folder*에 있어야 한다.

-p *output_path*: 모델링 결과를 저장할 폴더 위치(*output_path*)를 설정하는 명령어 옵션이다. 만약 입력한 폴더가 존재하지 않으면 해당 폴더를 생성한다. 모델링 결과 중 **_tbl.txt**로 끝나는 파일만 *output_path*로 옮겨진다.

alphaMELTS 실행 방법

*links_folder*에서 `run_alphamelts.command.bat` 파일을 더블 클릭으로 연다. 아래 예시와 같이 명령어 옵션을 입력하여 *settings_file*을 불러오고, 출력 파일을 저장할 폴더 위치(*output_path*)를 지정한다. 이때, 각 명령어 옵션은 띄어서 한 줄에 입력해야 한다. 대괄호 안의 글자는 키보드에서 입력할 자판의 이름을 지시한다. 명령어 옵션 입력을 성공하면 alphaMELTS가 실행

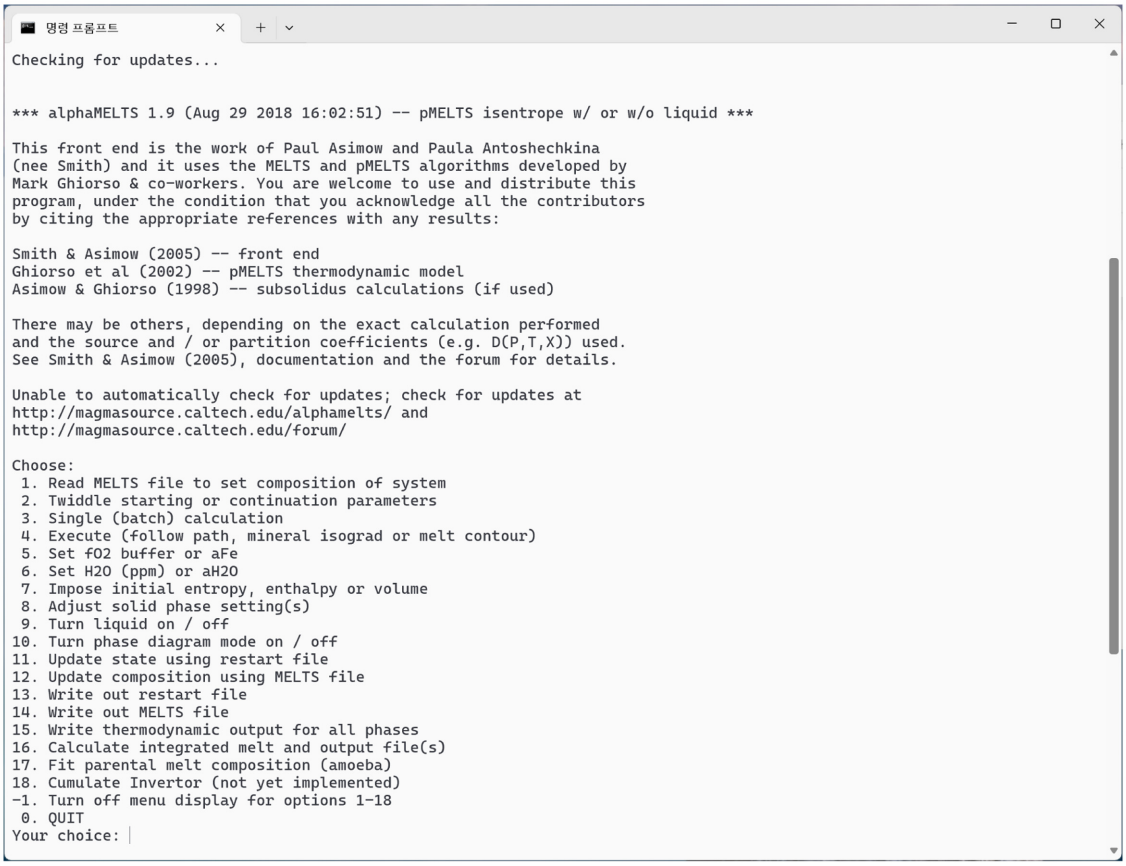


Fig. 1. The screenshot of alphaMELTS 1.9 menu prompt.

되며, alphaMELTS menu prompt가 나타난다(Fig. 1). alphaMELTS가 반복적으로 오류를 출력하는 경우 alphaMELTS 혹은 컴퓨터를 종료 및 다시 시작한 후 재시도하는 것을 권장한다.

-f *settings_file* -p *output_path* [Enter]

alphaMELTS menu prompt

본 장은 각 옵션들의 역할을 간단하게 기술하며, 각 옵션들의 활용 방법은 '예시' 장에 상세히 기술되어 있다.

1. Read MELTS file to set composition of system: *melts_file*을 읽어 들여 모델링에 사용할 초기 성분과 온도, 압력 등의 조건을 입력하는 옵션이다.

2. Twiddle starting or continuation parameters: *melts_file*이나 *settings_file*에서 입력한 초기 온도와 압력을 변경하거나 설정하는 옵션이다. 이미 옵션 4를 이용하여 모델링을 수행한 경우에는, 온도와 압력 변화량도 변경할 수 있다.

3. Single (batch) calculation: 주어진 온도, 압력, 성분 조건에서 안정상의 화학 성분과 질량 및 열역학 인자(엔트로피, 엔탈피, 부피 등)를 계산하는 옵션이다. 액상선 초과 조건(superliquidus)과 고상선 미만 조건 중 모델링 조건을 선택할 수 있다.

옵션 10을 이용하여 상평형도 모드를 활성화한 채로 옵션 3을 선택하면 특정 상이 안정한 온도 또는 압력 조건을 계산할 수 있다. 두 가지의 상평형도 모드 중 'Bracket reaction'이 활성화된 채로 옵션 3을 선택하고 특정 고체 상을 입력하면 해당 상이 존재할 수 있는 온도 및 압력 조건을 계산할 수 있다. 또다른 상평형도 모드인 'Follow affinity=0 contour'을 활성화한 채로 옵션 3을 선택하고 특정 고체 상을 입력하면 다른 고체 상은 존재하지 않고 해당 상만이 존재하는 온도 및 압력 조건을 계산할 수 있다. 이때, alphaMELTS 모델링 중 단사휘석이나 장석은 서로 다른 성분을 갖는 둘 이

상의 광물상이 공존할 수 있는데, 각각의 상이 계에서 사라지는 시점의 온도 및 압력 조건도 개별적으로 계산할 수 있다. 상평형도 모드가 활성화된 상태에서 특정 고체 상이 아닌 액체를 입력하면, 액체의 존재비나 H_2O 활동도(H_2O activity, aH_2O)가 특정 수치에 도달하는 온도, 압력 조건(상평형도 모드 중 'Bracket reaction'을 활성화한 경우)이나 최소한의 고체 상이 존재하는 온도, 압력 조건('Follow affinity=0 contour'을 활성화한 경우)을 계산할 수 있다.

4. Execute (follow path, mineral isograd or melt contour): *melts_file*로 입력된 초기 성분 및 조건을 이용하여 *settings_file*에서 설정된 환경 변수를 적용하여 모델링을 수행한다. 액상선 초과 조건과 고상선 미만 조건 중 모델링의 초기 조건을 선택할 수 있다.

옵션 10을 이용하여 상평형도 모드를 활성화한 채로 옵션 4를 선택하면 특정 상이 안정한 최저 또는 최고 온도, 압력 조건을 따라 모델링을 수행할 수 있다. 이때, 두 가지 상평형도 모드 중 'Follow affinity=0 contour'을 활성화한 경우, 다른 고체 상은 존재하지 않는 준안정 조건에서 모델링을 수행할 수도 있다. 특정 고체 상이 아닌 액체를 입력하고 존재비나 H_2O 활동도 수치를 입력하면 해당 조건을 만족하는 온도, 압력 조건을 따라 모델링을 수행하거나('Bracket reaction'을 활성화한 경우) 최소한의 고체 상이 존재하는 온도, 압력 조건을 따라 모델링을 수행할 수 있다('Follow affinity=0 contour'을 활성화한 경우).

5. Set fO_2 buffer: 산소 퓨가시티를 설정하는 옵션이다. *settings_file*에서 환경 변수 'ALPHAMELTS_IMPOSE_fO_2'가 활성화되어 있으면, 전체 모델링 과정에서 설정된 산소 퓨가시티값으로 고정된다. 반면 해당 환경 변수가 비활성화되어 있으면, 설정된 산소 퓨가시티 버퍼는 등엔트로피, 등엔탈피, 등적(isochoric) 과정을 구현할 때 초기값으로만 이용되고, 모델링이 수행됨에 따라 자동으로 변경된다.

6. Set H_2O (ppm) or aH_2O: pHMELTS 모델을 이용하기 위해 *settings_file*에서 환경 변수 'ALPHAMELTS_DO_TRACE_H_2O'가 활성화되어 있다면, 해당 옵션을 이용하여 초기 물 함량을 설정할 수 있다. 그렇지 않다면, 0 초과 1 이하의 aH_2O을 입력하여 aH_2O 버퍼를 설정할 수 있다. 다만, 산소 퓨가시티와 동일하게 등엔트로피, 등엔탈피, 등적 과정을 구현할 때는 초기값으로만 이용되며, 해당 값으로 고정되지 않는다.

7. Impose initial entropy, enthalpy or volume: *settings_file*에서 입력한 모델링 과정(예를 들면, 등엔트로피, 등엔탈피, 등적 과정)에 해당하는 열역학 인자를 설정하는 옵션이다. 해당 옵션이 설정되지 않으면, alphaMELTS 프로그램이 자동으로 초기 온도, 압력 조건을 근거로 해당 인자들을 계산하여 모델링에 이용한다.

8. Adjust solid phase setting(s): 모델링 중 특정 고체상의 안정화를 제한하거나 설정하는 옵션이다. *melts_file*에 입력된 설정을 덮어쓴다.

9. Turn liquid on / off: 모델링 중 액체상의 안정화를 제한하거나 설정하는 옵션이다.

10. Turn phase diagram mode on / off: 상평형도 모드를 활성화하는 옵션으로 두 가지의 모드('Bracket reaction' 또는 'Follow affinity=0 contour') 중 하나를 선택할 수 있다. 상평형도 모드를 활성화하여 옵션 3과 4를 선택하면 특정 상의 안정화 여부를 강제하여 모델링을 수행할 수 있다. 이에 대한 자세한 모델링 방법은 옵션 3과 4에 기술되어 있다.

11. Update state using restart file: *restart_file*을 읽어들이는 옵션이다. *restart_file*은 옵션 13으로 출력할 수 있는 이진(binary) 파일로 출력 당시의 모든 정보를 포함하고 있다. 그래서 옵션 11을 이용해서 alphaMELTS 프로그램에 입력하면 출력 당시의 조건으로 모델링을 재시작할 수 있다. 옵션 11의 학술적 활용법은 공식 매뉴얼(Antoshechkina and Asimow, 2016)에서 찾아볼 수 있다.

12. Update composition using MELTS file: *enrichment_file*을 추가로 읽어 들여 기원물질 혼합을 수행하는 옵션이다. *enrichment_file* 내 성분의 질량을 입력하여 혼합비를 설정할 수 있으며, 주원소와 미량원소 성분 모두 혼합하거나 미량원소 성분만 혼합할 수 있다.

13. Write out restart file: 옵션 11에서 이용되는 *restart_file*을 출력하는 옵션이다.

14. Write out MELTS file: 모델링 수행 후, 형성된 용융물이나 잔여물의 성분을 *melts_file*로 출력하는 옵션이다.

15. Write thermodynamic output for all phases: 개별 상의 열역학 정보를 출력하는 옵션이다. 출력 파일의 이름이 **_tbl.txt**로 끝나도록 설정하면 모델링 종료 후 *output_path*로 옮겨진다.

16. Calculate integrated melt and output file(s): 부분용융 모델링이 완료된 후에 이용하는 옵션이며, 각 단계에서 형성된 액체를 혼합한 용융물 성분을 출력한다. 1-D(기둥형)와 2-D(삼각형) 두 가지 용융 영역을

가정한 성분이 함께 출력된다. 출력 파일의 이름을 **_tbl.txt**로 끝나도록 설정하면 모델링 종료 후 *output_path*로 옮겨진다.

17. Fit parental melt composition (amoeba): 모용융물 성분을 계산하는 방법 중 하나인 Amoeba 과정을 수행하는 옵션이다.

18. Cumulate Invertor (not yet implemented): 현재 버전 기준 구현되지 않은 옵션이다.

-1. Turn off (or on) menu display for options 1-18: alphaMELTS menu prompt의 화면 출력을 끄고 켜는 옵션이다.

0. Quit: 프로그램을 종료하는 옵션이다. 해당 옵션을 이용하여 종료 시, 모델링 구동과 함께 *links_folder* 내로 출력된 출력 파일들 중 **_tbl.txt**로 끝나는 파일을 *output_path*로 이동한다.

예 시

본 장에서는 앞서 소개한 alphaMELTS의 기능을 간단한 예제를 통해 직접 구현하고, 그 결과를 분석한다. 각 예시는 alphaMELTS 홈페이지(https://magmasource.caltech.edu/alphamelts/)에 수록된 예제 및 워크샵 자료 등을 참고하여 작성되었다. 제시된 예제 외에도 사용자는 다양한 환경 변수를 조절함으로써, 필요에 따라 원하는 화성과정을 유연하게 구현할 수 있다. 따라서 본 장의 목적은 alphaMELTS의 모든 기능을 포괄적으로 설명하기보다는, 자연계 화성암의 조성을 이해하는데 자주 활용되는 주요 화성 작용들을 alphaMELTS로 구현하는 방법을 소개하고 실습하는데 있다. 이 장에서 다루지 않은 환경 변수의 세부 사용법은 설치 파일 패키지에 포함된 영문 매뉴얼(Antoshechkina and Asimow, 2016)을 참조할 수 있으며, 다양한 화성과정 모델링 사례나 프로그램 구동과 관련한 문제 해결법은 MELTS 소프트웨어 사용자 포럼(https://magmasource.caltech.edu/forum/)의 자료를 참고할 것을 권장한다.

alphaMELTS가 반복적으로 오류를 출력하는 경우 다음과 같은 시도를 해 보는 것을 권장한다: 1) 입력 파일명, 출력 파일명 및 파일 경로 상의 모든 폴더명을 영문으로 변경, 2) 파일명 및 폴더명에서 밑줄 문자(_) 등을 제외한 특수 문자 제거, 3) 입력 파일 내 오타 및 누락된 명령어 점검, 4) 호출할 입력 파일을 모두 *links_folder*로 옮겨서 동일한 작업을 수행, 5) alphaMELTS 및 컴퓨터 종료 및 다시 시작.

결정화

환경 변수 및 초기 성분, 조건(settings_file, melts_file)

installation_folder 내 **frac_xtal_env.txt**은 분별 결정 작용을 구현하는데 필요한 환경 변수를 포함한다. 본 논문에서는 해당 *settings_file*을 수정하여 다른 결정화 모델링에도 활용하였다. 활성화된 환경 변수를 살펴보면, 해당 파일은 열역학 모델 중 MELTS를 이용하여 (ALPHAMELTS_VERSION MELTS) 등압 조건 (ALPHAMELTS_MODE isobaric; ALPHAMELTS_DELTAP 0)에서 온도를 1 ℃씩 떨어뜨리며 계산을 수행하도록 alphaMELTS에게 명령한다(ALPHAMELTS_DELTAT -1). 또한, 반복 계산 중 만들어지는 고체상은 계에서 제외하도록 명령하여(ALPHAMELTS_FRACTIONATE_SOLIDS true), 분별 결정 작용을 모델링한다. 계산을 수행할 압력, 온도 범위는 각각 1-30000 bar, 500-2400 ℃으로 제한한다(ALPHAMELTS_MAXP 30000; ALPHAMELTS_MINP 1; ALPHAMELTS_MAXT 2400; ALPHAMELTS_MINT 500).

installation_folder 내 **Morb.melts** 파일은 결정화 모델링에 필요한 초기 온도, 압력, 조성 조건을 포함한다. 이 파일을 수정하여 이후의 결정화 모델링을 진행하는데 *melts_file*로 활용하였다. **Morb.melts** 파일을 열고, 'Final' 및 'Increment', 'Mode', 'dp/dt'로 시작하는 줄을

Title: Mean mafic EPR (PetDB)
Initial Composition: SiO_2 48.49
Initial Composition: TiO_2 0.95
Initial Composition: Al_2O_3 16.67
Initial Composition: Fe_2O_3 1.90
Initial Composition: Cr_2O_3 0.06
Initial Composition: FeO 7.49
Initial Composition: MgO 11.14
Initial Composition: CaO 11.68
Initial Composition: Na_2O 2.29
Initial Composition: K_2O 0.06
Initial Composition: P_2O_5 0.08
Initial Composition: H_2O 0.3
Initial Trace: Cr 1
Initial Trace: Sr 1
Initial Trace: Ba 1
Initial Trace: Zr 1
Initial Trace: La 1
Initial Temperature: 1200.00
Initial Pressure: 500.00
Log fO_2 Path: FMQ
Log fO_2 Delta: 0

삭제한다. 이들을 조절하는 환경 변수를 **frac_xtal_env.txt**에서 설정했기 때문이다. 성분과 압력, 온도를 아래와 같이 변경하였다. 주원소 성분값은 암석 지화학 데이터베이스인 PetDB(www.earthchem.org/petdb)에 2024년 12월 19일까지 등록된 태평양 중앙해령 현무암 중, MgO 함량이 9.5 wt%을 초과하는 시료들의 평균 조성을 기반으로 하였다. 편의를 위해 선택된 미량원소의 함량은 모두 1로 설정하였다. 작성한 *melts_file*은 다음과 같다. 파일명을 **mean_morb_9.5.melts**라 하겠다.

본 장의 예제에서는 **frac_xtal_env.txt** 파일을 *settings_file*로, **mean_morb_9.5.melts**을 *melts_file*로 이용하여 다양한 결정화 모델링을 수행하였다. 이때, 모델링의 목적에 따라 환경 변수를 변경 및 추가하며 계산을 진행하였으며, 수정 사항은 각 예제에서 기술한다.

액상선 구하기 및 분별 결정 작용

본 장의 목적은 alphaMELTS의 기본적인 사용법을 익히고, 분별 결정 작용을 재현하는 것이다. 이를 위해 액상선을 계산하는 방법도 함께 서술하였으며, 초기 물 함량을 달리하여 모델링을 수행하고 그 결과를 태평양 중앙해령의 화산암 조성과 비교하였다.

***settings_file* 수정: frac_xtal_env.txt** 파일에서 다음 환경 변수의 값을 900으로 변경하여, 모델링의 최소 온도 범위를 900 ℃로 변경한다.

```
ALPHAMELTS_MINT 900
```

모델링 수행: frac_xtal_env.txt을 *settings_file*로 설정하여 alphaMELTS를 호출한 후, 옵션 1을 선택하여 **mean_morb_9.5.melts**의 파일 경로를 입력한다.

```
1 [Enter]
mean_morb_9.5.melts [Enter] // melts_file 경로
```

alphaMELTS menu prompt의 옵션 3을 통해 현재 입력된 온도, 압력 및 성분 조건에서 평형을 이루는 상조합을 계산한다. 결정화 작용을 구현하기 때문에 계산 조건으로 액상선 초과 조건(1)을 선택한다.

```
3 [Enter]
1 [Enter]
```

계산 결과는 현재 온도, 압력 조건(온도 = 1200 ℃; 압력 = 500 bar)에서는 약 85.5 g의 용융물과 함께 약 7.8 g의 감람석, 7.7 g의 사장석, 0.1 g의 첨정석으로 구성된 상 조합이 열역학적으로 가장 안정함을 보여준다. H_2O 활동도는 0.054로 계산되며, 이는 용융물 내 물 함량(0.35 wt%)을 반영한다.

본 예제는 *melts_file*을 통해 입력한 전체 조성(bulk composition)과 동일한 조성의 용융물 100 %로 이루어진 계를 결정화하는 것이 목적이므로, 모델링 초기 온도를 액상선 온도 이상으로 높여주어야 한다. 옵션 2, 3을 반복 사용하며 사용자가 직접 액상선 온도를 찾아낼 수도 있지만, alphaMELTS의 상평형도 모드를 활용할 수도 있다. 아래는 옵션 10을 통해 상평형도 모드를 활성화하고, 계 내에서 액체상의 비율이 약 100 %가 될 때까지 온도를 조절하는 명령이다. 계산 중에 출력되는 온도의 단위는 K으로 *melts_file*과 *settings_file*에서 입력하는 온도의 단위(℃)와 다르므로 주의가 필요하다.

```
10 [Enter]
2 [Enter]
3 [Enter]
liquid [Enter]
```

옵션 2를 선택하여, 명령 프롬프트 또는 터미널 창의 'Starting Temp'에 적힌 액상선 온도값을 확인한다. 본 예제에서 계산된 액상선은 1258.47 ℃이다.

```
2 [Enter]
                … 액상선 확인 …
0 [Enter]
0 [Enter]
```

지금까지의 작업을 통해 분별 결정 작용을 모델링하기 위해 필요한 초기 조건을 모두 지정했다. 이제 옵션 10을 입력하여 상평형도 모드를 종료하고(0) 계산을 실행한다. 옵션 4를 선택하여 계산을 시작하면 **frac_xtal_env.txt**에서 설정한 대로 계의 온도를 1도씩 내리며 분별 결정 작용 모델링이 진행된다.

```
10 [Enter]
0 [Enter]
4 [Enter]
```

계산이 끝나면 다시 alphaMELTS menu prompt가

나타난다. 옵션 0을 사용하여 프로그램을 종료하고 *output_path*로 출력 파일을 옮길 수 있다.

```
0 [Enter]
```

이제, 평균 중앙해령현무암 성분에서 다른 모든 조건을 일정하게 유지한 채로 물 함량(Initial Composition: H_2O *value*)만 0, 0.6, 0.9 wt%로 변경하여 모델링을 수행해보자. 이때, 동일한 *output_path*를 이용하면 모델링을 수행할 때마다 자료가 덮어씌워지기 때문에 각각 모델링을 수행할 때 서로 다른 *output_path*를 설정해 주어야 한다. 만약 열역학 계산이 끝나지 않고 계속 같은 단계에서 반복되거나 모델링이 멈춘다면, ctrl +C(윈도우와 맥 동일)를 눌러 계산을 종료하고 *links_folder*에서 수동으로 출력 파일을 가져온다.

모델링 결과: 각각 모델링에서 설정한 *output_path*의 **Liquid_comp_tbl.txt**로부터 결과값을 가져와 FeO_T-MgO와 Al_2O_3-MgO 도표를 그리고 태평양 중앙해령의 실측 화산암 조성과 비교해보자(Fig. 2). 물 함량만을 1 wt% 이하의 범위 내에서 변화시켰을 뿐임에도, 이로 인해 유도되는 마그마 분화 과정의 변화로 태평양 전역에 분포하는 중앙해령 화산암 조성의 대부분을 설명할 수 있다. 실제로 중앙해령 화산암의 성분 다양성은 마그마 내 물 함량의 차이만으로 해석되지 않지만, 이는 여러 요인에 의해 조절되는 마그마 진화 과정에서 각 요인이 가지는 효과를 추측할 수 있는 alphaMELTS의 강점을 잘 보여준다.

미량원소 계산

MELTS 열역학 모델의 캘리브레이션에 포함되지 않은 미량원소 또한 마그마 결정화 및 부분용융 모델링에 포함시킬 수 있다. 미량원소 함량은 주원소와 달리 열역학 모델에 근거하여 계산되는 것이 아닌 열역학 모델을 통해 도출된 각 액체 및 고체상의 조성 및 존재비를 용융물-광물 간 분배계수와 결합하여 계산된다. 각 미량원소의 분배 계산에는 alphaMELTS에 저장된 분배계수와 전자가 수의 기본값이 사용되며, 이는 alphaMELTS 패키지에 동봉된 **default_trace_data.txt**에서 확인할 수 있다. 상술한 '액상선 구하기 및 분별 결정 작용' 장의 모델링을 동일하게 적용하여, 미량원소 함량 변화를 계산해보자.

***settings_file* 수정: frac_xtal_env.txt** 파일에서 다음 환경 변수 앞의 !를 삭제하여 미량원소 모델링을 활성화한다. 그리고 모델링의 최소 온도 범위를 900 ℃로 변경한다.

```
ALPHAMELTS_MINT 900
ALPHAMELTS_DO_TRACE true
```

모델링 수행: 앞선 예시에서 진행했던 *melts_file* 입력, 액상선 찾기, 상평형도 모드 해제 및 계산 실행 과정을 반복한다. 수행해야 할 명령을 정리하면 다음과 같다.

```
1 [Enter]
mean_morb_9.5.melts [Enter] // melts_file 경로
10 [Enter]
2 [Enter]
3 [Enter]
liquid [Enter]
10 [Enter]
0 [Enter]
4 [Enter]
1 [Enter]
```

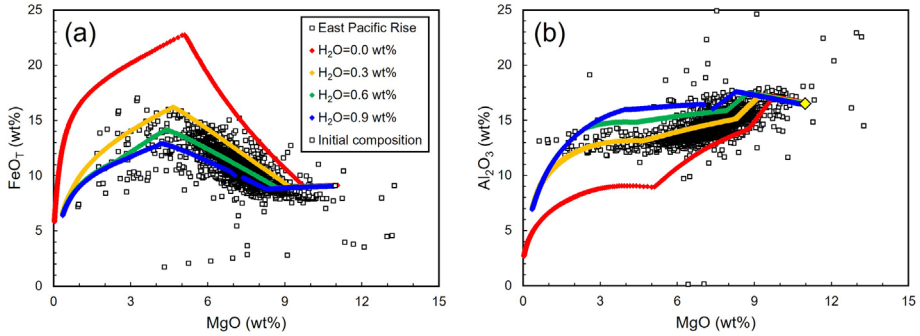


Fig. 2. Binary diagrams of (a) FeO_T-MgO and (b) Al_2O_3-MgO exhibiting results of fractional crystallization modelling. For the comparison, compositions of volcanic rocks from the East Pacific Rise (EPR) are plotted together. The EPR data were compiled from the PetDB database (www.earthchem.org/petdb) on 19th December 2024.

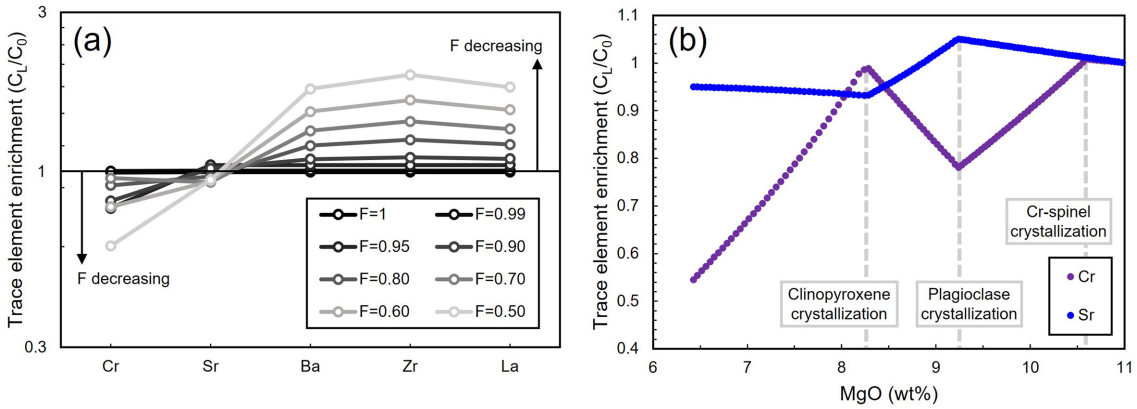


Fig. 3. (a) The spider diagram depicting the variation of trace elements along with the mass fraction of liquid (F). (b) The diagram of Cr and Sr contents against MgO contents in liquid.

모델링 결과: Trace_main_tbl.txt의 'Liquid Trace:'에서 액체상의 질량 분율(F)이 각각 1, 0.99, 0.95, 0.9, 0.8, 0.7, 0.6, 0.5에 근접한 결과값을 가져와 거미 도표(spider diagram)를 그려보자(Fig. 3a). 분별 결정 작용이 진행됨에 따라 용융물 내의 호정성 원소 함량이 감소하고 비호정성 원소 함량은 증가하는 현상이 확인된다. **Trace_main_tbl.txt**와 **Liquid_comp_tbl.txt**에서 각각 분화과정에 따른 미량원소 데이터와 MgO 성분값을 가져와 MgO-Cr 및 MgO-Sr 도표를 그려보자(Fig. 3b). 이를 통해 분화 단계에서 특정 광물이 정출되는 지점을 확인할 수 있다. 각 분화 단계에서 정출한 광물의 종류와 물리화학적 특성은 **Phase_main_tbl.txt** 등에서도 확인할 수 있다.

평형 결정 작용

이번 예제에서는 평형 결정 작용에서의 주원소와 미량원소 함량 변화를 모델링하고 분별 결정 작용 모델링과 결과를 비교해보자.

***settings_file* 수정:** 먼저, 모델링의 최소 온도 범위를 900 ℃로 변경한다. 평형 결정화를 구현하기 위해서는 매 단계에서 결정화되는 고체상을 계에서 제외하지 않은 채 다음 계산을 이어 나가야 하므로, **frac_xtal_env.txt** 내 환경 변수 'ALPHAMELTS_FRACTIONATE_SOLIDS true'를 비활성화한다. 그리고 미량원소 성분을 모델링하기 위해 환경 변수 'ALPHAMELTS_DO_TRACE'를 활성화한다.

```
ALPHAMELTS_MINT 900
!ALPHAMELTS_FRACTIONATE_SOLIDS true
ALPHAMELTS_DO_TRACE true
```

모델링 수행: 앞선 예시에서 진행했던 *melts_file* 입력, 액상선 찾기, 상평형도 모드 해제 및 계산 실행 과정을 수행한다. 수행해야 할 명령을 정리하면 다음과 같다.

```
1 [Enter]
mean_morb_9.5.melts [Enter] // melts_file 경로
10 [Enter]
2 [Enter]
3 [Enter]
liquid [Enter]
10 [Enter]
0 [Enter]
4 [Enter]
1 [Enter]
```

모델링 결과: 분별 결정 작용 예제와 본 예제의 **Bulk_comp_tbl.txt**에서 온도 및 MgO 성분값을 이용해 온도-MgO 도표를 그려보자(Fig. 4a). 모델링이 진행됨에 따라, 즉 온도가 감소함에 따라, 분별 결정 작용 모델에서는 전체 MgO 성분이 연속적으로 감소하지만 평형 결정 작용 모델에서는 산소 퓨가시티 버퍼의 영향을 제외하고는 전체 성분이 일정하게 유지된다. 또한, 각 예제의 **Trace_main_tbl.txt**의 자료를 활용하

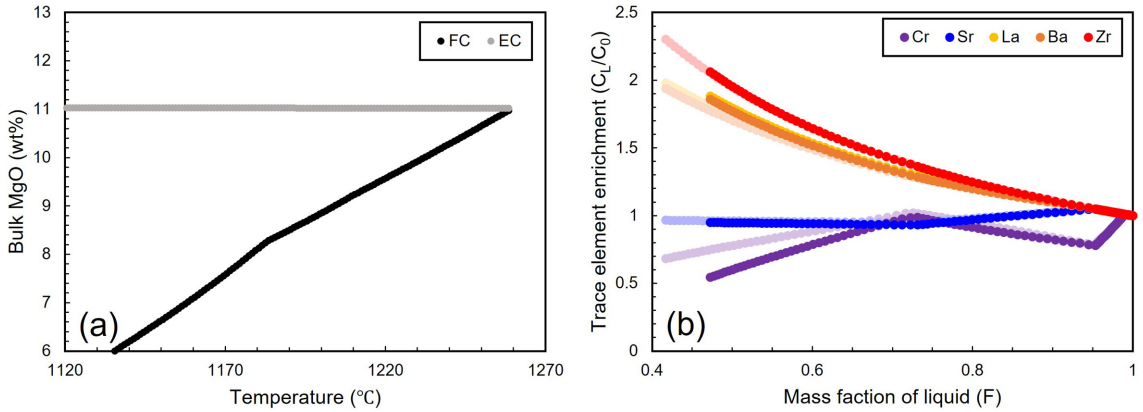


Fig. 4. The comparison between fractional and equilibrium crystallization models. (a) The diagram of bulk MgO contents against temperature (℃). (b) The diagram of extent of trace element enrichment against the mass fraction of liquid (F). Dark and light symbols represent the result of fractional crystallization model and equilibrium crystallization model, respectively.

여 액체상의 질량 분율에 따른 미량원소 함량 변화를 도표로 나타내보자(Fig. 4b). 본 예시에서는 정출한 광물의 존재비가 크지 않아 두 결정화 작용의 미량원소 결과가 크게 차이 나지는 않지만, 그럼에도 분별 결정 작용(진한 색 점, Fig. 4b)이 평형 결정 작용(연한 색 점, Fig. 4b)보다 더 급격한 미량원소의 변화를 보임을 확인할 수 있다.

동화-분별 결정(assimilation-fractional crystallization)

마그마는 암석권 내에 정치하여 식어가며 분별 결정 작용을 겪기 때문에 주변의 지각 또는 상부 맨틀과의 상호작용을 피할 수 없다. 결과적으로 상호작용에 오래 노출된 분화도가 높은 마그마는 이러한 동화작용의 영향을 받은 지화학 성분을 갖는다. 본 예제는 alphaMELTS를 이용하여 동화-분별 결정 작용을 구현하여, Wanless *et al.* (2010)에서 보고된 9°N 동태평양 중앙해령에서 산출되는 데사이트(dacite)의 지화학 성분을 설명한다.

***settings_file* 수정:** 동화작용을 동반하는 분별 결정 작용을 재현하기 위해 **frac_xtal_env.txt**에서 다음 환경 변수들을 활성화 및 수정한다.

```
ALPHAMELTS_IMPOSE_FO2 true
ALPHAMELTS_ASSIMILATE true
ALPHAMELTS_MODE isenthalpic
ALPHAMELTS_DELTAT 0
```

특정 산소 퓨가시티 조건에서 동화-분별 결정 작용 모델링을 수행하기 위해 ' ALPHAMELTS_IMPOSE_FO_2'와 'ALPHAMELTS_ASSIMILATE'을 활성화한다. 그리고 모델링이 온도의 감소가 아닌 동화작용이 진행됨에 따라 수행되도록 'ALPHAMELTS_DELTAT'을 0으로 설정한다. 이때, 본 예시의 모델링은 두 물질의 혼합이 일어나지만 외부와의 열 교환이 없음을 가정하기 때문에 등엔탈피 과정으로 가정한다(ALPHAMELTS_MODE isenthalpic).

***melts_file* 및 *enrichment_file* 작성:** Wanless *et al.* (2010)에서 보고한 9°N 동태평양 중앙해령 데사이트의 지화학 성분을 재현하기 위해 동일한 지역에서 산출되는 현무암(265-43; Wanless *et al.*, 2010)의 지화학 성분을 초기 성분으로 이용하였다. 파일명은 **265_43.melts**로 하였으며, 내용은 아래와 같다.

```
Title: 265-43 Wanless et al. 2010
Initial Composition: SiO2 50.5
Initial Composition: TiO2 1.92
Initial Composition: Al2O3 13.9
Initial Composition: Fe2O3 0
Initial Composition: FeO 11.6
Initial Composition: MnO 0.21
Initial Composition: MgO 6.98
Initial Composition: CaO 11.14
Initial Composition: Na2O 2.86
Initial Composition: K2O 0.13
Initial Composition: P2O5 0.19
Initial Temperature: 1400
Initial Pressure: 1000
Log fO2 Path: FMQ
Log fO2 Delta: -1
```

동화작용에 이용한 지각의 성분은 Nakamura *et al*. (2007)에서 보고한 저온 변질 현무암의 평균값을 참고하였다. 이를 프로그램에 입력하기 위해 *enrichment_file*로 작성하였으며 내용은 아래와 같다. 파일명은 **Mean_Ltype_basalt.melts**로 한다.

```
Title: Mean L-type Basalt (Nakamura et al., 2007)
Initial Composition: SiO2 50.29
Initial Composition: TiO2 1.22
Initial Composition: Al2O3 16.15
Initial Composition: FeO 0
Initial Composition: Fe2O3 8.93
Initial Composition: MnO 0.14
Initial Composition: MgO 8.07
Initial Composition: CaO 11.73
Initial Composition: Na2O 2.76
Initial Composition: K2O 0.17
Initial Composition: P2O5 0.11
Initial Temperature: 500
Initial Pressure: 1000
```

모델링 수행: 앞선 예시에서 진행했던 *melts_file* 입력, 액상선 찾기, 상평형도 모드 해제를 수행한다. 수행해야 할 명령을 정리하면 다음과 같다.

```
1 [Enter]
265_43.melts [Enter] // melts_file 경로
10 [Enter]
2 [Enter]
3 [Enter]
liquid [Enter]
10 [Enter]
0 [Enter]
```

옵션 4를 이용하여, 동화-분별 결정 작용 모델링을 수행한다. 계산 수행 횟수는 65이며, 초기 계산 조건은 액상선 초과 조건(1)으로 설정한다. 동화작용에 이용할 물질(assimilant)의 수는 1개이며, 각 단계별로 공급되는 물질의 질량은 1 g으로 설정한다. 마지막으로 **Mean_Ltype_basalt.melts**의 경로를 입력하여 모델링을 시작한다.

```
4 [Enter]
65 [Enter] // 원하는 계산 수행 횟수
1 [Enter]
1 [Enter] // 동화작용에 이용할 물질(assimilant)의 수
1 [Enter] // 각 단계별로 공급되는 유체의 질량(g)
Mean_Ltype_basalt.melts [Enter] // enrichment_file 경로
```

성공적으로 모델링이 수행되면, 'Maximum number of iterations reached. Successful return from alphamelts...' 이 출력된다.

옵션 0을 이용하여, 프로그램을 종료하고, 모델링 결과를 *output_path*로 이동한다.

```
0 [Enter]
```

모델링 결과: *output_path* 내 **Liquid_comp_tbl.txt**에서 MgO 및 K_2O, FeO, Fe_2O_3 성분을 이용하여 K_2O-MgO, FeO_T-MgO 도표를 그려보자(Fig. 5). 동화작용의 영향을 확인하기 위해 동일한 초기 성분 및 온도, 압력 조건에서 수행한 단순 분별 결정 작용 모델링의 결과를 함께 도시하였다(붉은 실선, Fig. 5). 단순 분별 결정화 모델은 동태평양 데사이트의 높은 K_2O 함량과 낮은 FeO_T 함량을 설명할 수 없지만 변질된 지각과의 동화작용을 고려한 모델(파란색 실선, Fig. 5)은 동태평양 데사이트의 지화학 성분을 잘 설명한다. 마그마의 진화 과정 중 동화작용 영향의 정도를 규명하기 위해서는 동화작용에 민감한 여러 동위원소 및 지화학 인자를 함께 논의할 필요가 있지만, 해당 모델링 결과를 통해 주원소 성분만으로도 동화작용이 해당 마그마의 진화 과정에 관여하였을 가능성을 확인할 수 있다.

맨틀 용융

환경 변수 및 초기 성분, 조건(settings_file, melts_file)

맨틀 부분용융 모델링에 필요한 환경 변수는 *installation_folder* 내 **isentropic_melt_env.txt**에 포함되어 있다. 해당 *settings_file*은 pMELTS를 이용하여(ALPHAMELTS_VERSION pMELTS) 단열 감압 용융 과정(ALPHAMELTS_MODE isentropic)을 모델링하는 환경 변수를 포함한다. 압력 및 온도 범위는 각각 10000-40000 bar (ALPHAMELTS_MAXP 40000; ALPHAMELTS_MINP 10000), 500-2400 ℃(ALPHAMELTS_MAXT

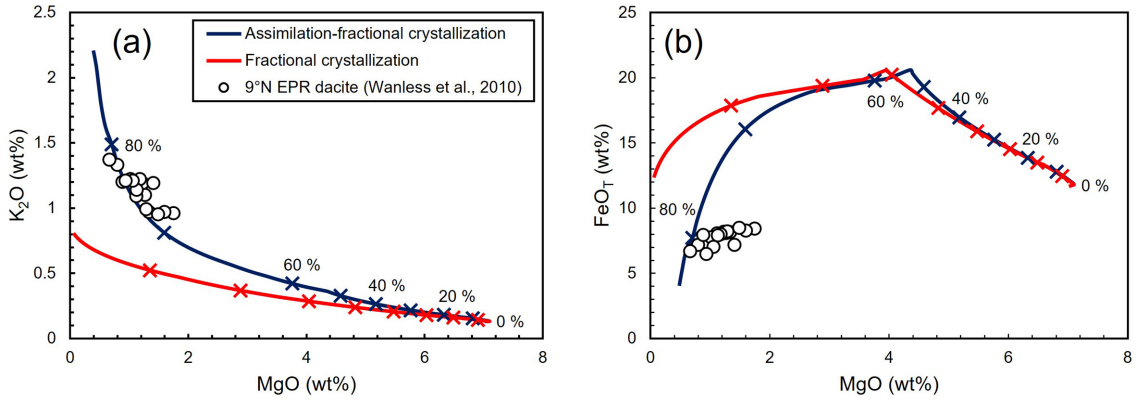


Fig. 5. Diagrams illustrating the result of assimilation-fractional crystallization model. For the comparison, the fractional crystallization model is displayed together as a red curve. Cross marks represent the crystallization extents with 10% intervals. Open circles are data of dacites from ~ 9°N East Pacific Rise (Wanless *et al*., 2010).

2400; 1ALPHAMELTS_ MINT 500)로 제한되며, 모델링 각 단계 간 압력의 변화량은 –1000 bar(ALPHAMELTS_DELTAP –1000)이다. 비활성화된 환경 변수 'ALPHAMELTS_CONTINUOUS_MELTING'는 모델링 중 마그마가 제거되지 않도록 alphaMELTS에게 명령한다.

installation_folder 내 **Sun_McDonough_PM.melts**와 **Workman_Hart_DMM.melts**는 부분용융 모델링에 적합한 맨틀 초기 성분 및 조건을 포함한다. 다만, 부분용융 모델링을 수행할 때 이용하는 pMELTS는 MnO와 NiO에 대해 캘리브레이션되지 않았기 때문에 'Initial Composition: MnO'와 'Initial Composition: NiO'는 삭제하고, 해당 원소들은 미량원소 성분으로 취급해야 한다. 그리고 pMELTS는 K_2O or P_2O_5을 감람암의 광물 조합(감람석, 사방휘석, 단사휘석, 첨정석)에 분배할 수 없기 때문에 두 원소 또한 미량원소 성분으로 취급해야 한다. 이에 근거하여 수정한 *melts_file*을 각각 **Sun_McDonough_PM_modified.melts**와 **Workman_Hart_DMM_modified.melts**로 정의하였다. 본 장은 **isentropic_melt_env.txt**를 *settings_file*로, **Sun_McDonough_PM_modified.melts**와 **Workman_Hart_DMM_modified.melts**를 *melts_file*로 이용하여 몇 가지 부분용융 과정에 대한 모델링을 수행하고 자연 시료의 자료와 비교하며 그 결과를 논의한다. 결정화 예제와 마찬가지로, 모델링의 목적에 따른 *melts_file*과 *settings_file*의 수정 사항은 각 예제에서 설명한다.

고상선 구하기

부분용융 과정을 모델링하기 위해 제일 먼저 수행해야 하는 작업은 초기 온도와 압력을 규제하는 것이다. 부분용융 과정을 수행할 온도, 압력 조건이 선행 연구 등을 통해 이미 규제되어 있다면 해당 조건을 모델링에 활용할 수 있지만, 그렇지 않은 경우 alphaMELTS의 기능을 통해 모델링에 적용하고자 하는 초기 조건을 계산할 수 있다. 이와 관련된 내용을 본 장과 후술할 '특정 잠재온도, 압력 조건에서의 초기 온도 구하기' 장에서 서술한다. 특정 압력 조건에서 부분용융이 시작되도록 하고자 한다면, 고상선을 먼저 계산해야 한다. 본 장은 해당 방법을 기술한다.

***settings_file* 수정:** 유효 고상선을 계산하기 위해 **isentropic_melt_env.txt**에서 다음 환경 변수를 활성화한다.

```
ALPHAMELTS_CONTINUOUS_MELTING true // 활성화
ALPHAMELTS_MINF 0.005 // 활성화
```

이는 'ALPHAMELTS_CONTINUOUS_MELTING true'와 'ALPHAMELTS_MINF 0.005'를 활성화함으로써 모델링 중 액체상의 질량비가 0.5% 이상이 되면 계에서 마그마가 제거되는 연속 용융을 설정한다. 계 내 액체상의 최대 질량비를 0이 아닌 값으로 설정하여 유효 고상선을 계산하는 것은 아래 모델링에서 질량비를 0으로 설정하였을 때 발생할 오류를 예방하기 위함이다.

모델링 수행: 옵션 1을 선택하여, **Workman_Hart_DMM_modified.melts**를 읽어들인다.

```
1 [Enter]
Workman_Hart_DMM_modified.melts [Enter] // melts_file 경로
```

40000 bar에서의 고상선을 구하기 위해 옵션 2를 선택하여 초기 온도는 유지하고, 초기 압력을 40000 bar로 변경한다. 그리고 옵션 10을 선택하여 상평형도 모드를 활성화한다.

```
2 [Enter]
0 [Enter]
40000 [Enter]
10 [Enter]
1 [Enter]
```

옵션 3과 뒤따르는 명령을 입력하면 계의 온도가 유효 고상선에 도달할 때까지 계산을 실행한다. 이때, 유효 고상선 계산을 위해 설정해주어야 하는 최대 액체상 분율을 'ALPHAMELTS_MINF' 값으로 설정하기 위해 액체상의 분율 값을 입력하는 대신에 명령 '1'을 이용한다.

```
3 [Enter]
1 [Enter]
liquid [Enter]
1 [Enter]
-1 [Enter] // settings_file의 'ALPHAMELTS_MINF' 값을 사용
0 [Enter]
```

옵션 2를 선택하여, 명령 프롬프트 또는 터미널 창의 'Starting Temp'에 표기된 고상선의 온도 값을 확인한다. 본 예제에서 구한 고상선은 1535.20 ℃이다

```
2 [Enter]
            … 고상선 확인 …
0 [Enter]
0 [Enter]
```

해당 작업을 수행하면 자동으로 초기 온도 조건이 고상선으로 설정되기 때문에, 바로 다음 의도한 모델링을 진행할 수 있다.

특정 잠재온도, 압력 조건에서의 초기 온도 구하기

맨틀 부분용융 모델링의 시작 온도는 고상선 온도가 아닌 특정 잠재온도(potential temperature)를 이용해서 설정하기도 한다. 잠재온도는 특정 온도, 압력 조건에서의 맨틀 암석을 용융 없이 단열 과정을 통해 1 bar, 즉 지표면으로 감압시켰을 때를 가정한 가상의 온도이다. 따라서 온도와 압력 조건을 각각 잠재온도와 1 bar로 설정한 후, 특정 압력까지 단열 압축 과정을 수행하면 주어진 잠재온도에 대응하는 특정 압력에서의 온도 조건을 알 수 있다.

***settings_file* 수정:** 잠재온도를 계산하기 위해 **isentropic_melt_env.txt**에서 'ALPHAMELTS_MINP' 값을 10000에서 1로 변경하여, 최소 압력 범위를 1 bar로 조절한다.

```
ALPHAMELTS_MINP 1 // 값 변경
```

모델링 수행: 옵션 1을 선택하여, **Workman_Hart_DMM_modified.melts**을 읽어들인다.

```
1 [Enter]
Workman_Hart_DMM_modified.melts [Enter]
```

옵션 2를 선택하여 잠재온도를 1350 ℃로 설정하기 위해 초기 온도와 압력을 각각 1350 ℃와 1 bar로 변경하고, 옵션 9를 선택하여 모델링 중 액체상을 제거한다.

```
2 [Enter]
1350 [Enter]
1 [Enter]
9 [Enter]
0 [Enter]
```

옵션 3을 선택하여 1350 ℃와 1 bar에서의 안정상과 엔트로피를 계산한다. 이때, 액체상이 존재하지 않도록 설정했기 때문에 초기 계산 조건을 고상선 미만 조건(0)으로 설정하고, 예상되는 고체상 목록을 입력한다. 본 예제의 경우에는 감람석과 사방휘석, 단사휘석, 첨정석, 장석이다.

```
3 [Enter]
0 [Enter]
olivine [Enter]
orthopyroxene [Enter]
clinopyroxene [Enter]
spinel [Enter]
feldspar [Enter]
x [Enter]
```

옵션 7을 선택하여, 계산된 엔트로피(current total entropy)를 확인하고, 임의의 음수를 입력하여 초기 엔트로피로 적용한다. 본 예제에서 구한 엔트로피는 256.363 J/K이다.

```
7 [Enter]
                … 엔트로피 확인 …
-1 [Enter] // 해당 엔트로피를 초기 엔트로피로 설정
```

옵션 2를 이용하여 초기 압력 조건만 변경하고, 모델링을 수행하면, 해당 엔트로피에 해당하는 초기 온도 조건(즉, 해당 잠재온도에 대응하는 초기 온도)에서 모델링이 수행된다. 추후에 동일한 초기 성분과 잠재온도를 적용하여 모델링하고자 한다면, 옵션 7을 이용하여 해당 엔트로피를 입력하면 된다.

부분용융

부분용융 모델은 액체상의 거동에 따라 평형 용융, 분별 용융, 연속 용융으로 구분될 수 있다. 본 장에서는 alphaMELTS을 이용하여 각 모델들을 구현하는 방법을 설명하고 그 결과를 Wang and Liu (2025)에서 제시된 동피레니안 러졸라이트(Eastern Pyrenean lherzolite)의 지화학 성분과 비교하였다.

***settings_file* 수정:** 평형 용융부터 구현해보자. **isentropic_melt_env.txt**에서 다음의 환경 변수를 수정한다.

```
ALPHAMELTS_IMPOSE_FO2 true
ALPHAMELTS_DELTAP -100
ALPHAMELTS_MINP 5000
ALPHAMELTS_CONTINUOUS_MELTING true
ALPHAMELTS_MINF 1 // 액체상이 빠져나갈 수 있는 최소의 질량비
```

모델링 수행: 다음과 같이 옵션 1을 이용하여, **Sun_McDonough_PM_modified.melts**을 읽어들인다. 이때, '특정 잠재온도, 압력 조건에서의 초기 온도 구하기' 장에서 설명한 방법을 이용하여 계산한, 본 예제의 전체 조성(**Sun_McDonough_PM_modified.melts**)의 잠재온도 1350 ℃에 해당하는 엔트로피는 255.907 J/K이다. 옵션 7을 선택하여, 초기 엔트로피를 255.907 J/K로 설정한다.

```
1 [Enter]
Sun_McDonough_PM_modified.melts [Enter]
7 [Enter]
255.907 [Enter]
```

옵션 5를 선택하여, 산소 퓨가시티를 FMQ-1로 설정하고, 옵션 2를 선택하여, 초기 압력을 4 GPa로 설정한다.

```
5 [Enter]
3 [Enter]
-1 [Enter]
2 [Enter]
0 [Enter]
40000 [Enter]
```

옵션 4를 선택하고 고상선 미만 조건(0)을 선택하여, 모델링을 수행한다. 예상되는 광물상 목록(감람석, 사방휘석, 단사휘석, 첨정석)을 입력한다.

```
4 [Enter]
0 [Enter]
olivine [Enter]
orthopyroxene [Enter]
clinopyroxene [Enter]
spinel [Enter]
x [Enter]
0 [Enter]
```

초기 엔트로피를 설정했기 때문에 입력된 압력(4 GPa) 및 성분(**Sun_McDonough_PM_modified.melts**), 엔트로피 조건(255.907 J/K)을 근거로 alphaMELTS가 자동으로 초기 온도를 계산하여 모델링이 수행된다.

본 장에서 수정된 **isentropic_melt_env.txt**에서 'ALPHAMELTS_MINF' 값을 0(분별 용융), 0.005(액체상이 빠져나갈 수 있는 최소 질량비가 0.5%인 연속 용융)으로 바꿔 동일한 작업을 반복한다.

모델링 결과: 세 종류의 부분용융 모델의 결과 중 **Solid_comp_tbl.txt**에서 MgO, Al_2O_3, TiO_2 함량을 가져와 TiO_2/Al_2O_3-MgO 도표를 그리고 이를 동피레니안 러졸라이트의 성분과 비교해보자(Fig. 6). 평형 용융 모델은 동피레니안 러졸라이트의 성분보다 높은 TiO_2/Al_2O_3 비율을 출력한 반면, 분별 용융과 연속 용융 모델은 러졸라이트의 성분을 잘 재현한다. 이는 동피레니안 러졸라이트가 약 8-20% 정도의 분별 용융 또는 연속 용융으로 형성되었음을 지시한다. 본 모델링에서는 주원소만을 고려하였지만, 미량원소 성분과 동위원소 성분 자료를 함께 고려하면 동피레니안 러졸라이트의 형성 과정을 더욱 자세히 논의할 수 있을 것이다.

수화 용융 및 혼합 용융물(aggregated melt) 성분 계산

MELTS와 pMELTS는 무수 광물 내 물의 분배 모델을 포함하지 않기 때문에 수화 용융을 구현하기 위해서는 pHMELTS를 이용해야 한다. 본 예제에서는 맨틀 내 물 함량을 300 ppm으로 가정한 수화 용융 모델링을 수행하여 중앙해령 화산암의 지화학 성분을 설명하고자 한다. 이때, 중앙해령 화산암은 단일 압력 조건의 맨틀에서 형성된 용융물이 바로 분출한 것이 아닌, 다양한 깊이에서 형성된 마그마가 지표로 상승하며 주변의 용융물과 합쳐진 혼합 용융물(aggregated melt)로 해석되기 때문에 본 예제는 혼합 용융물의 성분을 계산하는 방법도 포함한다.

***settings_file* 수정:** pHMELTS 모드를 활성화하기 위해 **isentropic_melt_env.txt**에서 다음 환경 변수를 변경한다.

```
ALPHAMELTS_IMPOSE_FO2 true
ALPHAMELTS_DELTAP -100
ALPHAMELTS_MINP 1
ALPHAMELTS_CONTINUOUS_MELTING true
ALPHAMELTS_MINF 0.005
ALPHAMELTS_DO_TRACE true // 미량원소 계산
ALPHAMELTS_DO_TRACE_H2O true // pHMELTS 계산 활성화
```

4 GPa부터 부분용융 모델링을 수행하기 때문에 'ALPHAMELTS_VERSION'을 pMELTS 모드로 설정한다. 이때, pHMELTS 모드를 활성화하기 위해 환경 변수 'ALPHAMELTS_DO_TRACE'와 'ALPHAMELTS_DO_TRACE_H_2O'을 활성화한다.

모델링 수행: 옵션 1을 선택하여, **Workman_Hart_DMM_modified.melts**을 읽어 들인다.

```
1 [Enter]
Workman_Hart_DMM_modified.melts [Enter]
```

옵션 6을 선택하여, 초기 물 함량을 설정한다. 본 예제에서는 300 ppm으로 설정하였다.

```
6 [Enter]
300 [Enter]
```

'특정 잠재온도, 압력 조건에서의 초기 온도 구하기' 장에서 설명한 방법을 이용하여 잠재온도 1350 ℃일 때의 엔트로피를 계산한다. 옵션 7을 선택하여 계산된 엔트로피를 확인하고(256.787 J/K), 임의의 음수를 입력하여 이를 초기 엔트로피로 설정한다.

```
7 [Enter]
            … 엔트로피 확인 …
-1 [Enter]
```

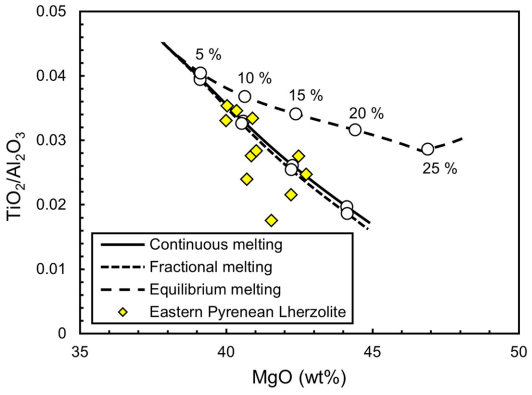


Fig. 6. The results of equilibrium, continuous and fractional partial melting modelling. For the comparison, the data of the Eastern Pyrenean lherzolites (Wang and Liu, 2025) are plotted together. Open circles represent the partial melting degrees with 5% intervals.

옵션 5와 2를 이용하여 산소 퓨가시티와 초기 압력을 설정하고, 옵션 4를 통해 모델링을 수행한다. 본 예제에서는 산소 퓨가시티를 FMQ로 설정하였다.

```
5 [Enter]
3 [Enter]
0 [Enter]
2 [Enter]
0 [Enter]
40000 [Enter]
4 [Enter]
```

초기 계산 조건(고상선 미만 조건(0)) 및 초기 엔트로피를 설정했기 때문에 입력된 압력(4 GPa) 및 성분(**Workman_Hart_DMM_modified.melts**), 엔트로피 조건(256.787 J/K)을 근거로 alphaMELTS가 자동으로 모델링 시작 온도를 계산하여 모델링이 수행된다. 성공적으로 모델링이 완료되면 'Minimum Pressure reached Successful return from alphamelts...'이 출력된다.

옵션 16을 선택하여, 혼합 용융물의 성분을 계산한다. 각 압력별로 혼합 용융물의 성분을 출력하기 위해 'pressure integral' (1)을 선택한다. 모델링의 압력 변화량이 일정하기 때문에 'simple rectangle rule' (1)을 선택한다. 마지막으로 혼합 용융물의 주원소와 미량원소 성분 출력 파일의 이름을 설정한다. 이때, 파일명이 **_tbl.txt**로 끝나도록 설정해야 프로그램 종료 후 자동으로 *output_path*로 이동된다.

```
16 [Enter]
1 [Enter]
1 [Enter]
aggmajor_tbl.txt [Enter] // 원하는 파일명 입력
aggtrace_tbl.txt [Enter] // 원하는 파일명 입력
0 [Enter]
0 [Enter]
```

모델링 결과: *output_path* 내 **aggmajor_tbl.txt**를 열어 'Aggregated Liquid:'의 CaO와 Fe_2O_3, FeO, MgO 성분을 이용하여 FeO_T-MgO, CaO-MgO 도표에 도시하자(Fig. 7). 비교를 위해 태평양 중앙해령 화산암 성분도 함께 도시하였다. 다만, 중앙해령 화산암은 다양한 정도의 결정화를 겪었기 때문에 혼합 용융물 모델링 결과를 이용하여 수행한 분별 결정 작용 모델링 결과를 함께 도시하였다(파란 마름모, Fig. 7). 태평양 중앙해령 지역의 지각의 두께가 약 5-6 km이기 때문에 (Aghaei *et al*., 2014) 분별 결정 작용 모델링에는 1500 bar에서의 혼합 용융물 성분을 초기 성분으로 이용하였으며, 마그마가 중부 지각에 정치하는 것을 가정하여 분별 결정 작용이 일어나는 압력은 500 bar로 설정하였다. 모델링 결과는 중앙해령 화산암에서 관찰되는 FeO_T와 CaO 성분의 변화 경향성을 잘 재현한다. 이를 통해 중앙해령 화산암의 초생 마그마(primary magma, 분화를 겪지 않은 마그마)의 형성에는 맨틀 내 소량의

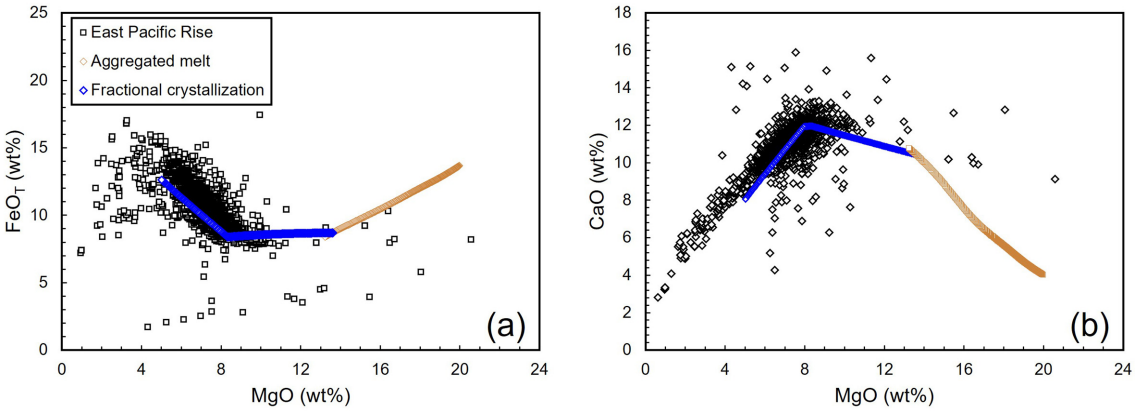


Fig. 7. Diagrams illustrating the compositions of aggregated melts calculated from hydrous mantle melting modelling. For the comparison compositions of volcanic rocks from the East Pacific Rise (EPR) are plotted together. The blue diamonds represent the result of fractional crystallization modelling at 500 bar using the aggregated melt composition at 1500 bar as a starting composition.

물과 용융물 혼합 과정이 필요함을 알 수 있다.

융제 용융

융제 용융은 유체 또는 교대작용 물질의 공급으로 용융점이 낮아지며 발생하는 맨틀 용융이다. 본 예제는 특정 온도, 압력 조건에서 일정량의 유체를 공급하며 융제 용융을 구현하고, Kimura (2017)에서 제시된 일본 이와테 산 쏠레아이트(tholeiite)의 장반경친석원소(LILE, large-ion lithophile elements)와 희토류원소 성분과 그 결과를 비교한다.

***settings_file* 및 *melts_file* 수정:** 융제 용융을 구현하기 위해 **isentropic_melt_env.txt**에서 다음 환경 변수를 수정 및 추가한다.

```
ALPHAMELTS_MODE isobaric
ALPHAMELTS_DELTAP 0
ALPHAMELTS_CONTINUOUS_MELTING true
ALPHAMELTS_MINF 0.005
ALPHAMELTS_DO_TRACE true
ALPHAMELTS_ASSIMILATE true
```

융제 용융 과정은 등온 및 등압 조건에서 구현하기 때문에 모델링 조건을 등압(ALPHAMELTS_MODE isobaric) 조건으로 변경하고, 압력과 온도 변화량을 0으로 설정한다. 본 예제에서는 유체의 주원소와 미량원소 성분을 모두 이용할 것이기 때문에 'ALPHAMELTS_DO_TRACE'와 'ALPHAMELTS_ASSIMILATE'를 활성화하였지만, 미량원소 성분만 모델링에 활용하고자 한다면 'ALPHAMELTS_FLUX_MELTING'을 활성화하면 된다.

Workman_Hart_DMM_modified.melts에서 장반경친석원소와 희토류원소 성분만 계산에 활용하기 위해 아래 6개 원소 정보를 삭제한다.

```
Initial Trace: K 50
Initial Trace: P 20
Initial Trace: Ni 1886
Initial Trace: Cr 3900
Initial Trace: Mn 822
Initial Trace: Ti 716.3
```

***enrichment_file* 작성:** 공급되는 유체의 성분은 Kimura (2017)에서 제시된 유체 성분(퇴적물 기원 10 %, 상부해양지각 기원 90 %)을 활용하였다. 파일명은 **hydrousfluid.melts**로 하며, 내용은 아래와 같다.

```
Title: hydrousfluid
Initial Composition: H2O 100
Initial Mass: 0.02
Initial Trace: Rb 27.3
Initial Trace: Ba 801
Initial Trace: Th 1.28
Initial Trace: U 0.53
Initial Trace: Nb 1.87
Initial Trace: Ta 0.06
Initial Trace: La 12.4
Initial Trace: Ce 40.2
Initial Trace: Pb 12
Initial Trace: Pr 2.73
Initial Trace: Nd 8.93
Initial Trace: Sr 1450
Initial Trace: Zr 19.8
Initial Trace: Hf 0.85
Initial Trace: Sm 0.94
Initial Trace: Eu 0.22
Initial Trace: Gd 0.51
Initial Trace: Tb 0.05
Initial Trace: Dy 0.24
Initial Trace: Ho 0.04
Initial Trace: Y 1.02
Initial Trace: Er 0.08
Initial Trace: Yb 0.05
Initial Trace: Lu 0.01
Log FO2 Path: None
```

모델링 수행: 옵션 1을 선택하여, 수정된 **Workman_Hart_DMM_modified.melts**을 읽어들인다.

```
1 [Enter]
Workman_Hart_DMM_modified.melts [Enter]
```

'고상선 구하기' 장의 방법을 이용하여 계산한 1 GPa에서의 유효 고상선 온도는 1237.18 ℃이다.

옵션 4을 입력하여, 융제 용융 모델링을 수행한다. 이미 평형 계산을 수행하였기 때문에 추가적인 선택 사

항은 입력하지 않는다. 계산 수행 횟수는 700 회로 입력한다. 유체의 수는 1개이며, 각 단계별로 공급되는 유체의 질량은 *enrichment_file* 내에 입력된 'Initial Mass' 값으로 설정하기 위해 -1을 입력한다. 마지막으로 *enrichment_file* 경로를 입력하여 모델링을 시작한다.

```
4 [Enter]
700 [Enter] // 원하는 계산 수행 횟수
1 [Enter] // 유체의 수
-1 [Enter] // 공급되는 유체의 질량을 'Initial Mass' 값으로 설정
hydrousfluid.melts [Enter] // enrichment_file 경로
```

'Maximum number of iterations reached. Successful return from alphamelts...'이 출력되면, 모델링이 성공적으로 완료된 것이다.

옵션 16을 선택하여, 혼합 용융물의 성분을 출력한다. 이때, 등압 과정이므로 'aggregated melts only' (0)을 선택하여 최종 혼합 용융물의 성분만 출력한다. 주원소와 미량원소 성분 출력 파일의 파일명을 설정한다.

```
16 [Enter]
0 [Enter]
aggmajor_tbl.txt [Enter] // 원하는 파일명 입력
aggtrace_tbl.txt [Enter] // 원하는 파일명 입력
0 [Enter]
0 [Enter]
```

모델링 결과: *output_path* 내 **aggtrace_tbl.txt**에서 미량원소 성분을 선택하여 보통중앙해령현무암(N-MORB) 값에 표준화한 거미 도표(Fig. 8)에 도시하였다. 부분용융 정도가 증가할수록 형성된 용융물의 미량원소 함량은 감소하지만 Rb, Ba, Sr과 같은 장반경친석원소의 양의 이상은 더욱 뚜렷하다(Fig. 8). 25% 부분용융으로 형성된 마그마의 성분은 Kimura (2017)이 제시한 이와테 산 쏠레아이트에서 관찰되는 부화된 장반경친석원소 성분과 잘 일치한다(Fig. 8). 이러한 관찰 결과는 외부로부터 맨틀로의 유체 또는 용융물 유입으로 인해 맨틀 용융이 발생하여 해당 암석의 초생 마그마가 형성되었음을 지시한다.

결론 및 제언

본 논문에서는 alphaMELTS 설치 및 사용 방법을 소개하고, 다양한 조건의 결정화 및 맨틀 용융 과정을 포함하는 화성과정을 직접 구현하였다. 이 과정에서 화성과정과 관련된 여러 변수가 마그마 조성에 미치는 영향을 확인할 수 있었다. 모델링 결과와 실제 지화학 자료를 비교한 결과, 부분용융 및 분별 결정 작용의 양상과 물 함량, 산소 퓨가시티 조건이 태평양 중앙해령 화산암의 다양한 지화학 성분을 설명할 수 있음을 확인하였다. 또한, 맨틀의 연속 용융 및 분별 용융 모델링은 동피레니안 러졸라이트의 주원소 조성을 설명하는 데 효과적이었으며, 융제 용융 모델링은 이와테 산 쏠레아이트의 부화된 장반경친석원소 성분이 외부에서 유입된 유체로부터 기원함을 보여준다.

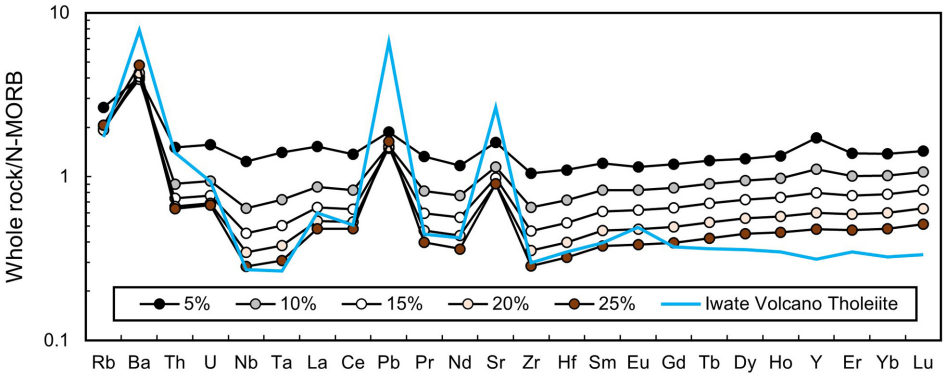


Fig. 8. The spider diagram showing results of flux melting modelling. For the comparison, the primary magma composition of the Iwate volcano tholeiite is plotted together (Kimura, 2017). Normalization is conducted using the compositions of normal mid-ocean ridge basalt (N-MORB) reported by Sun and McDonough (1989).

다만, alphaMELTS 1.9는 몇 가지 한계점을 갖기 때문에 사용에 주의가 필요하다. 먼저, 높은 물 함량을 가진 규장질 마그마에서의 화성과정이나 고상선 아래에서 발생하는 변성과정을 정확하게 구현하지 못하는 한계를 갖는다. 이 경우에는 alphaMELTS 1.9보다 Rhyolite-MELTS(Gualda *et al*., 2012; Ghiorso and Gualda, 2015)나 alphaMELTS 2.3의 사용을 권장한다. 또한, MELTS 시리즈는 특정 광물의 실측 조성값을 바탕으로 계의 온도와 압력, 성분 조건을 역산하는 기능이 없다. 따라서 화성 작용의 열역학적 조건을 추정하고자 한다면, 지온지압계나 조성계(chemometer), 또는 실험 데이터를 활용한 직접 비교가 보다 적합하다(e.g., Putirka, 2008; 2016). 마지막으로 MELTS 시리즈의 열역학 계산은 평형 상태를 전제로 하기 때문에 alphaMELTS는 원소의 확산과 같은 비평형 현상은 구현하지 못한다. 따라서 이러한 한계점을 인지하고, 목적에 따라 다른 열역학 모델과 비교하여 적절한 도구를 선택하는 것이 필요하다(e.g. Connolly, 1990; Holland and Powell, 2004; Putirka, 2008; de Capitani and Petrakakis, 2010; Gualda *et al*., 2012).

비록 alphaMELTS 1.9는 업데이트가 종료되었지만, MELTS 열역학 모델 자체는 꾸준히 개선되고 있다. 예를 들어, MELTS에 Cl-F-S 성분계가 포함되었고(Ghiorso *et al*., 2023), 베이지안(Bayesian) 캘리브레이션을 통해 혼합 모델을 수정하는 등(Wolf and Ghiorso, 2024) MELTS의 열역학 모델은 지속적으로 개선되고 있다. 최근에 출시된 alphaMELTS 2.3 또한 pHMELTS를 포함하는 등 추가적인 업데이트가 예정되어 있다. 이에 더해 최근 MELTS 개발 그룹에서는 현존하는 열역학 모델링 프로그램이 모두 호환 가능하도록 하여, 사용자가 목적에 맞는 프로그램을 자유롭게 활용하거나 개발할 수 있는 작업공간을 만들고 있다(ENKI portal 설명 웹페이지, https://enki-portal.org/index.html; alphaMELTS 2 설명 웹페이지, https://magmasource.caltech.edu/alphamelts/version2.php). 따라서 화성과정에 대한 더욱 정확하고 정밀한 열역학 계산을 수행하기 위해서는 MELTS를 포함한 열역학 모델링 프로그램의 업데이트 사항을 점검하고, 연구 목적에 맞게 적절히 활용할 것을 권장한다.

사 사

이 논문은 2022년도 정부(과학기술정보통신부)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 연구임(No. RS-2022-NR070842).

REFERENCES

Aghaei, O., Nedimović, M.R., Carton, H., Carbotte, S.M., Canales, J.P. and Mutter, J.C., 2014, Crustal thickness and Moho character of the fast-spreading East Pacific Rise from 9°42'N to 9°57'N from poststack-migrated 3-D MCS data. Geochemistry, Geophysics, Geosystems, 15(3), 634-657. https://doi.org/10.1002/2013GC005069.

Antoshechkina, P. and Asimow, P., 2016, AlphaMELTS software manual.

Asimow, P.D., Dixon, J.E. and Langmuir, C.H., 2004, A hydrous melting and fractionation model for mid-ocean ridge basalts: Application to the Mid-Atlantic Ridge near the Azores. Geochemistry, Geophysics, Geosystems, 5(1), https://doi.org/10.1029/2003gc000568.

Asimow, P.D. and Ghiorso, M.S., 1998, Algorithmic modifications extending MELTS to calculate subsolidus phase relations. American Mineralogist, 83(9-10), 1127-1132. https://doi.org/10.2138/am-1998-9-1022.

Connolly, J., 1990, Multivariable phase diagrams; an algorithm based on generalized thermodynamics. American Journal of Science, 290(6), 666-718. https://doi.org/10.2475/ajs.290.6.666.

de Capitani, C. and Petrakakis, K., 2010, The computation of equilibrium assemblage diagrams with Theriak/Domino software. American Mineralogist, 95(7), 1006-1016. https://doi.org/10.2138/am.2010.3354.

Frost, B. R., 1991, Chapter 1. INTRODUCTION TO OXYGEN FUGACITY AND ITS PETROLOGIC IMPORTANCE. In Oxide Minerals (eds. H. L. Donald), De Gruyter, Berlin, Boston, 1-10.

Gennaro, E., Iacono-Marziano, G., Paonita, A., Rotolo, S.G., Martel, C., Rizzo, A.L., Pichavant, M. and Liotta, M., 2019, Melt inclusions track melt evolution and degassing of Etnean magmas in the last 15 ka. Lithos, 324-325, 716-732. https://doi.org/10.1016/j.lithos.2018.11.023.

Ghiorso, M., Matthews, S. and Sverjensky, D., 2023, MELTS+DEW: Modeling major element+Cl+F+S phase equilibria, redox reactions and elemental partitioning in magmatic-hydrothermal systems (abstract). Goldschmidt2023 abstracts.

Ghiorso, M.S. and Gualda, G.A.R., 2015, An H_2O-CO2 mixed fluid saturation model compatible with rhyolite-MELTS. Contributions to Mineralogy and Petrology, 169(6), https://doi.org/10.1007/s00410-015-1141-8.

Ghiorso, M.S., Hirschmann, M.M., Reiners, P.W. and Kress, V.C., 2002, The pMELTS: A revision of MELTS for improved calculation of phase relations and major element partitioning related to partial melting of the mantle to 3 GPa. Geochemistry, Geophysics, Geosystems, 3(5), 1-35. https://doi.org/10.1029/2001gc000217.

Ghiorso, M.S. and Sack, R.O., 1995, Chemical mass transfer in magmatic processes IV. A revised and internally consistent thermodynamic model for the interpolation and extrapolation of liquid-solid equilibria in magmatic systems at elevated temperatures and pressures. Contributions to Mineralogy and Petrology, 119(2), 197-212. https://doi.org/10.1007/BF00307281.

Gualda, G.A.R., Ghiorso, M.S., Lemons, R.V. and Carley, T.L., 2012, Rhyolite-MELTS: a Modified Calibration of MELTS Optimized for Silica-rich, Fluid-bearing Magmatic Systems. Journal of Petrology, 53(5), 875-890. https://doi.org/10.1093/petrology/egr080.

Holland, T.J.B. and Powell, R., 2004, An internally consistent thermodynamic data set for phases of petrological interest. Journal of Metamorphic Geology, 16(3), 309-343. https://doi.org/10.1111/j.1525-1314.1998.00140.x.

Kimura, J.-I., 2017, Modeling chemical geodynamics of subduction zones using the Arc Basalt Simulator version 5. Geosphere, https://doi.org/10.1130/ges01468.1.

Laubier, M., Schiano, P., Doucelance, R., Ottolini, L. and Laporte, D., 2007, Olivine-hosted melt inclusions and melting processes beneath the FAMOUS zone (Mid-Atlantic Ridge). Chemical Geology, 240(1-2), 129-150. https://doi.org/10.1016/j.chemgeo.2007.02.002.

Nakamura, K., Kato, Y., Tamaki, K. and Ishii, T., 2007, Geochemistry of hydrothermally altered basaltic rocks from the Southwest Indian Ridge near the Rodriguez Triple Junction. Marine Geology, 239(3-4), 125-141. https://doi.org/10.1016/j.margeo.2007.01.003.

Putirka, K., 2016, Amphibole thermometers and barometers for igneous systems and some implications for eruption mechanisms of felsic magmas at arc volcanoes. American Mineralogist, 101(4), 841-858. https://doi.org/10.2138/am-2016-5506.

Putirka, K.D., 2008, Thermometers and Barometers for Volcanic Systems. Reviews in Mineralogy and Geochemistry, 69(1), 61-120. https://doi.org/10.2138/rmg.2008.69.3.

Sun, S.-S. and McDonough, W.F., 1989, Chemical and isotopic systematics of oceanic basalts: implications for mantle composition and processes. Geological Society, London, Special Publications, 42(1), 313-345. https://doi.org/10.1144/GSL.SP.1989.042.01.19.

Wang, Y. and Liu, J., 2025, Deciphering multiple episodes of partial melting, metasomatic and remelting processes in the Eastern Pyrenean orogenic mantle massif. Geochimica et Cosmochimica Acta, 389, 14-29. https://doi.org/10.1016/j.gca.2024.11.033.

Wanless, V.D., Perfit, M.R., Ridley, W.I. and Klein, E., 2010, Dacite Petrogenesis on Mid-Ocean Ridges: Evidence for Oceanic Crustal Melting and Assimilation. Journal of Petrology, 51(12), 2377-2410. https://doi.org/10.1093/petrology/egq056.

Wolf, A.S. and Ghiorso, M., 2024, MELTS 2.0: A Bayesian calibration for silicate melting with a robust redox model (abstract). Goldschmidt2024 abstracts.

Yoder, H.S., JR. and Tilley, C.E., 1962, Origin of Basalt Magmas: An Experimental Study of Natural and Synthetic Rock Systems. Journal of Petrology, 3(3), 342-532. https://doi.org/10.1093/petrology/3.3.342.

Received May 29, 2025
Review started May 29, 2025
Accepted June 20, 2025

[저 자 정 보]

• 박규찬 : 서울대학교 지구환경과학부/대학원생
• 임성환 : 서울대학교 지구환경과학부/대학원생
• 박정우 : 서울대학교 지구환경과학부/교수