



Stockholm
University

Bachelor Thesis

Degree Project in
Geology 15 hp

Metamorfoserade gråvackor på Stora Persholmen, nordöstra Utö - en geotermobarometrisk studie med EMPA analys

Linnéa Hedenberg Muje



Stockholm 2014

Department of Geological Sciences
Stockholm University
SE-106 91 Stockholm

Innehåll

Abstrakt	2
Mål.....	3
Område som studerats.....	4
Metod.....	4
Fältstudier.....	4
Förberedelse av prover	6
Petrografisk analys	6
Förberedelse inför EMPA	6
EMPA	6
THERMOCALC och AX_2	7
Geologisk bakgrundshistoria	8
Utö Shear Zone.....	9
Resultat.....	10
Fältobservationer	10
Analys av tunnslip.....	13
EMPA	21
THERMOCALC.....	21
Diskussion.....	23
Slutsats	24
Felmarginaler.....	24
Tack till.....	24
Referenser	25
Bilagor.....	26
1. THERMOCALC	26
2. EMPA – fullständiga mineralanalyser	66

Abstrakt

Målet med mitt projekt var att skapa en petrologisk och geotermobarometrisk profil över Stora Persholmen nordväst om Utö, som ligger i södra skärgården i Stockholm. För att kunna skapa denna profil samlades bergartsprover in, som sedan analyserades genom mikroskopering och elektronmikrosond-analys (EMPA). Berggrunden studerades även i fält längs med den ca 80 meter långa profilen. Bergarterna var mestadels metamorfoserad och migmatiserad gråvacka, med stora pegmatitgångar och boudiner i området.

Av de totalt 21 st. prover som togs på Stora Persholmen och som preparerades för tunnslip, användes 6 st. prover till EMPA vid Geocentrum i Uppsala. Utdata från EMPA användes sedan med datorprogrammet THERMOCALC (och även datorprogrammet AX_2 för att möjliggöra användningen av THERMOCALC) för att beräkna tryck- och temperaturförhållanden för provpunkterna. Vid ett tryck på 3 kbar var den lägsta temperaturen på 534 ± 17 °C till som högst 630 ± 24 °C längs den sydöstligaste delen av min profil, vilket visar på en enorm temperaturskillnad för en så pass kort sträcka. Den beräknade temperaturen och trycket placerar proverna i fasen för hornblände/hornfels och i stabilitetszonen för andalusit samt sillimanit (figur 14).

De lägsta temperaturerna hittades i samband med två skjuvzoner, vilket tyder på att skjuvningsprocessen orsakat avvikelserna i temperaturerna t.ex. genom kanalisering av metamorfa vätskor som orsakat retrogradation. Trots att tryck och temperatur inte kunnat beräknas för sydvästliga profilhalvan uppskattar jag det som att temperaturen varit hög då där förekommer sillimanit enligt Barrientos (2011) samt, enligt denna studie, migmatiserad gråvacka.

Den beräknade temperaturen för metamorfos på Stora Persholmen är markant högre än vad som beräknats för NÖ Utö (se t.ex. Bergkvist 2013, Lidström 2013, Daniel 2013) vilket kan förklaras av förskjutning längs en stor skjuvzon (Talbot 2008).



Figur 1. Foto över en stor rosafärgad pegmatitgång på Stora Persholmen.

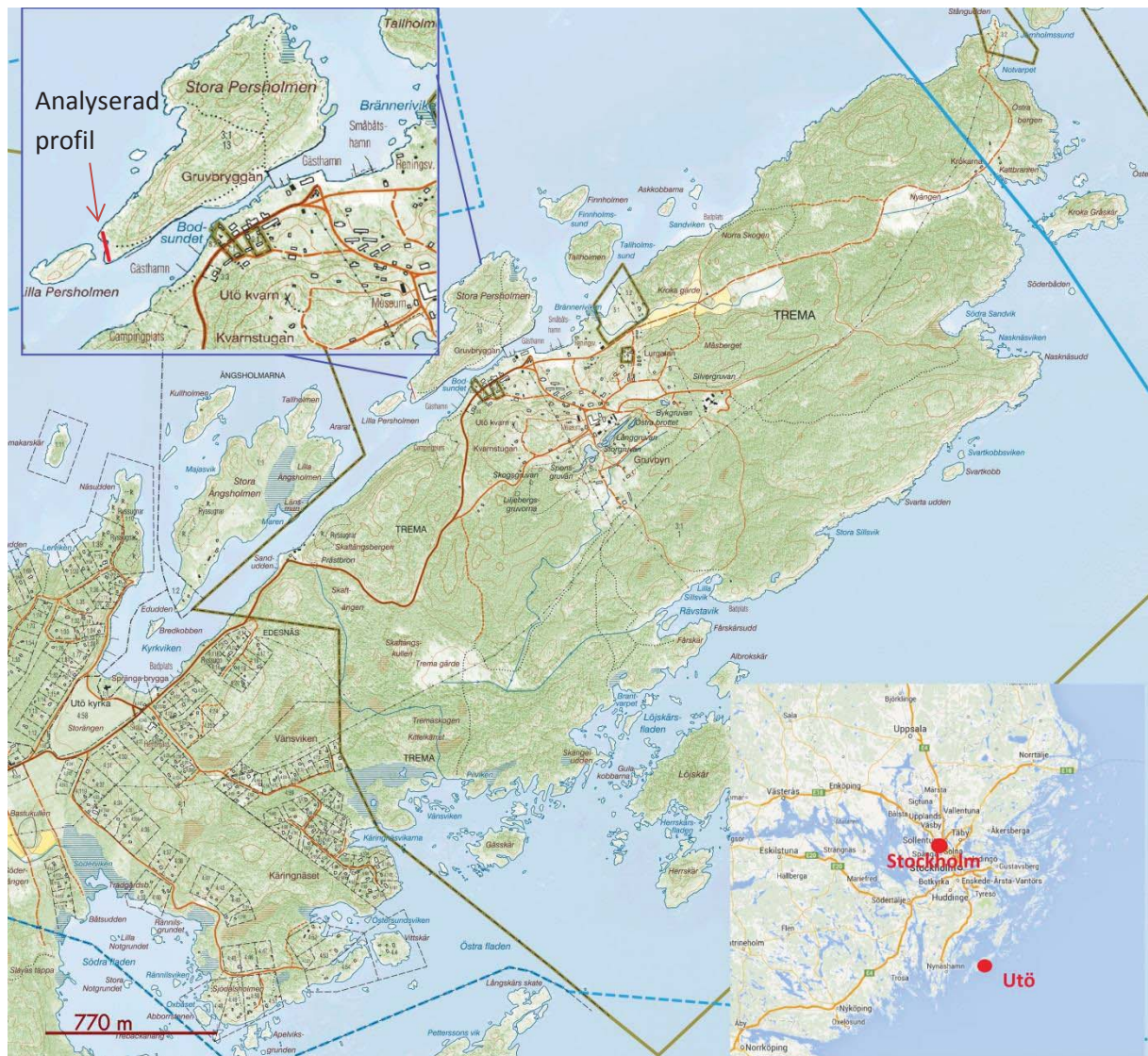
Mål

Målet med detta projekt är att skapa en geotermobarometrisk profil över Stora Persholmen för att försöka fastställa de förhållanden som var vid formationen av de metamorfa bergarterna i området.

Mitt mål var att studera och ta minst 20 st. prover längs en 80 meter lång profil över den sydvästra änden av Stora Persholmen. Målet var sedan att tillverka tunnslip och att utföra petrografisk analys. Efter att den petrografiska analysen avslutats var nästa mål att analysera tunnslipen med hjälp av EMPA och använda datorprogrammet THERMOCALC för att skapa den termobarometriska profilen.

Projektarbetet är en del av projektet Metamorphic Map of Sweden, som startade 2011 med finansiering från SGU (Sveriges Geologiska Undersökning) och som leds av Professor Alasdair Skelton.

Område som studerats



Figur 2. Karta över delar av Utö och Stora Persholmen. Närmare bild på Stora Persholmen och det område som analyseras (röd linje) syns i vänstra hörnet. Utös position i jämförelse med Stockholm syns i nedre högra hörnet.

Metod

Fältstudier

Mitt fältarbete inleddes den 11 juni 2012 med att spendera ca 1 vecka i fält på Stora Persholmen, på Utö. Professor Alasdair Skelton mötte mig på Utö på andra dagen av min vistelse för att vägleda mig i hur provtagningar och analyser av bergshällarna skulle ske.

Mätningarna och provtagningarna utfördes på den sydvästra sidan av Stora Persholmen (se figur 2). Profilen togs i en NV-SÖ riktning och var sammanlagt ca 80 meter lång inklusive ett gap på ca 24 meter på grund av en skjuvzon som skapat en vattenfylld vik på öns sydvästliga ände. Jag har valt att

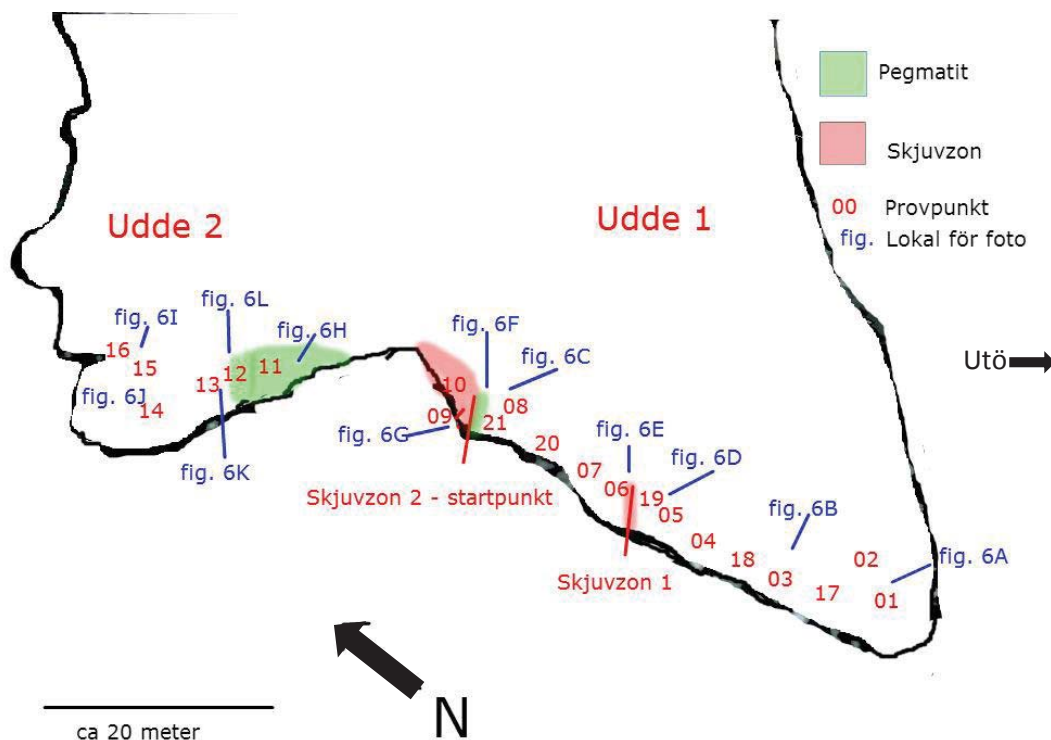
kalla den östligaste delen av änden (den närmast Utö) för udde 1 och den västligaste delen för Udde 2 (se figur 3 för skiss).

Innan proverna togs från berget analyserades bergsytan med hjälp av en lupp. Var 10:e cm antecknade jag vilka mineraler som kunde observeras på bergsytan, samt vilken storlek mineralerna uppskattas att ha. Även strukturer så som pegmatitgångar, kvartsvener, skjuvzoner och liknande noterades i anteckningsblock.

Totalt sett togs 21 st. prover på Stora Persholmen 14-15 juni 2012 (se figur 3 för lokaler). Målet var att ta proverna med så jämnt mellanrum som möjligt och att få med så mycket som möjligt av hela profilen. Då 24 m bestod av en vattenfylld vik så blev det provtagning på båda sidor om denna. Efter att sammanlagt 16 st. prover tagits längs med hela profilen, återvände jag sista dagen för att fylla igen några luckor i profilen.

Det var ofta inte möjligt att på ett bra sätt att få loss provbitarna i rak linje längs profilen, prover fick därför istället tas i nära anslutning (inom några meter från måttbandet) till profilen. Jag följde då foliationslagret som provet togs i tillbaka till min profil samt utförde trigonometriska beräkningar för att kompensera för att provet inte togs i korsande vinkel till foliationen. Relevanta och intressanta provtagningspunkter prioriterades före ett jämnt mellanrum mellan proverna när så var möjligt, t.ex. när granater observerades i bergshällen.

Till min hjälp hade jag en geologisk hammare, skyddsglasögon, en kil, kompass med klinometer, anteckningsblock, lupp och måttband.



Figur 3. Skiss över det som jag valt att kalla udde 1 och udde 2. Markerat finns även provpunkter, skjuvzoner, breda pegmatitförekomster samt lokaler för foton i figur 6.

Förberedelse av prover

Den 20 juni 2012 togs proverna med till Stockholms universitet för att förberedas inför tillverkningen av tunnslip. Förberedelserna gjordes med Dan Zetterbergs (tekniker på Stockholms Universitet) hjälp, som instruerade och även var behjälplig med att beskära proverna. Vi använde oss av en diamantsåg för att beskära stenarna, samt en vanlig hushållssil och vatten för att rengöra stenarna efter att de beskurits.

Förberedelserna av mina prover gick ut på att först identifiera lineations- och foliationsriktningar i stenen och sedan beskära stenarna till en provstorlek motsvarande en mässingskloss i tunnslipsrummet. Mässingsklossens dimensioner uppskattar jag till ca 1 cm x 2,5 cm x 4 cm. De prover som tillverkades uppmätte inte exakt samma storlek som mässingsblocket, men strävan fanns om att göra dem så lika den i dimensionerna som möjligt. Proverna beskärdes parallellt med lineationsriktningen och i vinkel (90 grader) mot foliationsriktningen i stenen.

Vissa problem uppstod, så som att några av de mer folierade stenarna tenderade att spricka upp under beskärning. Prov 04 fick, efter att ha sågats till, läggas på värmebord för att torka och att invänta att limmas ihop.

Efter beskärningen av proverna fick de sköljas för att få bort stendamm. Tunnslipsprovet, samt de resterande delarna av varje prov, lades i respektive plastfat som numrerades på samma sätt som proverna i sig. Stenproverna skickades sedan till Vancouver för att prepareras inför den petrografiska analysen och bli tunnslip. Proverna skickades 21 juni och tillverkningstiden var beräknad till 17 dagar, på grund av problem i Vancouver tog det dock längre tid än så och jag fick tillbaka min tunnslip 27 juli 2012.

Petrografisk analys

När mina prover hade kommit tillbaka från Vancouver spenderade jag sammanlagt ca 2 veckor på Stockholms Universitet med att analysera min tunnslip i mikroskop. Jag tittade efter vilken mineraler och eventuella strukturer som förekom i tunnslipen samt uppskattade den modala sammansättningen av proverna genom ögonmått. Samtliga 21 st. prover analyserades och beskrevs vid mikroskoperingen. Jag tittade även efter områden som kunde vara intressanta vid EMPA, t.ex. områden där biotit och granat växte bredvid varandra. Även förändringarna i färg på biotiten var intressant att jämföra mellan proverna och jag tittade efter bevis på om mineralerna var i jämvikt med varandra.

Förberedelse inför EMPA

Efter att ha avslutat mikroskoperingen av samtliga 21 st. prover, valdes 6 st. prover ut för vidare analys. Dessa prover innehöll mineralerna biotit, granat, muskovit, klorit och plagioklas som lämpar sig bra för geotermobarometriska beräkningar. Målet var att välja prover med så jämnt mellanrum som möjligt längs min profil. Proverna fotograferades och scannades (se figur 7) efter instruktioner av Curt Broman och de områden som skulle användas vid EMPA ringades in.

Marianne Ahlbom hjälpte sedan med att täcka in proverna inför EMPA.

EMPA

Jag utförde analyser med hjälp av EMPA den 24 april 2013 på Geocentrum i Uppsala, vid Uppsala universitet. Dr. Jarek Majka var där till min hjälp och gav en genomgång av hur EMPA fungerar samt

hur maskinen ska användas. Till min hjälp fanns där även en doktorand från Stockholms Universitet, Barbara, som kunde handleda mig i processen.

Genom elektronmikrosond-analys (EMPA) går det att analysera kompositionen av mineral i tunnslipsprover. Den polerade tunnslipen placeras inne i maskinen och bombarderas med en stråle av elektroner som stimulerar atomerna på en liten del av provet. Det resulterar i att atomerna avger fluorescerande röntgenstrålar som sedan går till en detektor. I det här fallet separerade sedan maskinen våglängden och beräknade kompositionen av elementen i tunnslipen som analyserats i jämförelse med standardkompositionen av mineraler.

Den modell av elektronmikrosond som användes vid analysen hette Jeol JXA-8530F Hyperprobe och installerades 2011. Den metod som användes för att beräkna kompositionen var WDS (Wavelength dispersive spectrometer).

De 6 st. prover som var utvalda sedan tidigare analyserades i EMPA-systemet. För ett så bra mätresultat som möjligt strävade jag efter att i så stor mån som möjligt ta proverna på en ren mineralyta, utan sprickor och liknande. För klorit användes en stråle som var 2-3 μm och för granat och andra mineral användes 1 μm .

THERMOCALC och AX_2

THERMOCALC är ett termodynamiskt program, utvecklat av Roger Powell och Tim Holland (1988), som utför termobarometriska och fasdiagram-beräkningar på metamorfa bergarter. AX_2 (Holland 2011) är ett program som utifrån kemiska analyser av prover, beräknar aktiviteten av mineralernas ändled. Aktiviteten hos en komponent i en fas beskriver den kemiska potential som finns i komponenten under vissa tryck- och temperaturförhållanden (Winter 2010). De versioner jag använde var THERMOCALC version 3.33 Windows och AX_2 _2.

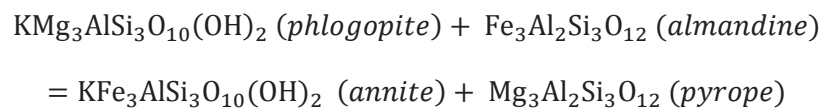
Till AX_2 användes mina utdata från EMPA-analysen i Uppsala. Datan fördes in i textfiler enligt mallar som finns för AX_2 och kördes därefter i programmet till dess standardvärden för temperatur (550 °C) samt ett utvalt tryck på 3 kbar. Utdata från AX_2 gjordes sedan om till textfiler för THERMOCALC och användes för att beräkna genomsnittligt tryck och temperatur. Efter att ha fått resultatet från THERMOCALC kalibrerade jag mina resultat genom att köra dem i AX_2 igen till den temperatur THERMOCALC visat på och använde den nya datan till textfiler för THERMOCALC-beräkningar. Detta upprepades till dess att inga eller mycket små förändringar sågs i resultatet.

Processen för hur jag använde AX_2 och THERMOCALC finns beskrivet i punktform nedan:

1. Datan från EMPA förs in i textfiler enligt format för AX_2.
2. Textfilerna körs i programmet AX_2.
3. AX_2 beräknar aktiviteten av mineralernas ändled och genererar utdata som används i THERMOCALC.
4. THERMOCALC utför beräkningar av tryck och temperatur och ger olika val för beräkningarna. Jag beräknade genomsnittligt tryck och temperatur.
5. I THERMOCALC anges vilken indatafil som ska användas, om provet innehåller H₂O, om alla förekommande mineraler ska analyseras etc.
6. THERMOCALC beräknar tryck och temperatur för de potentiella reaktioner som skett mellan ändleden i provet.

Ett prov som innehåller klorit, biotit och granat ger en god grund för geotermobarometriska beräkningar. En bergart som innehåller dessa sammansättningar kan vara stabil över ett spann på 100 °C och ett tryckintervall över 0.8 GPa och då många av mineralerna är fasta lösningar, varierar kompositionen över ett divariant fält (Philpotts & Ague 2009). Variationerna möjliggör geotermobarometriska beräkningar då samexisterande mineralers komposition är funktioner av tryck och temperatur (Philpotts & Ague 2009). Ett exempel på hur kompositionen kan användas för att beräkna tryck och temperatur, är att beräkna halten av Fe och Mg mellan samexisterande mineraler och hur halten varierar när trycket och temperaturen ändras. Resultatet kan med hjälp av vidare analyser ge ett precist mått på metamorfa tryck- och temperaturförhållanden.

Efter att ha uppmätt den kemiska sammansättningen av mineralerna, t.ex. genom EMPA, kan mineralernas reaktioner över ett P-T fält beräknas. Detta görs med hjälp av termodynamiska dataset och aktivitetsmodeller från laboratorieexperiment (Philpotts & Ague 2009). Datorprogrammet THERMOCALC använder sig av sådana dataset för att beräkna tryck och temperatur. Ett exempel på dataset är GARB, framtagen av Ferry och Spear (1978), som beskriver utbytesreaktionen av Fe och Mg i granat och biotit:

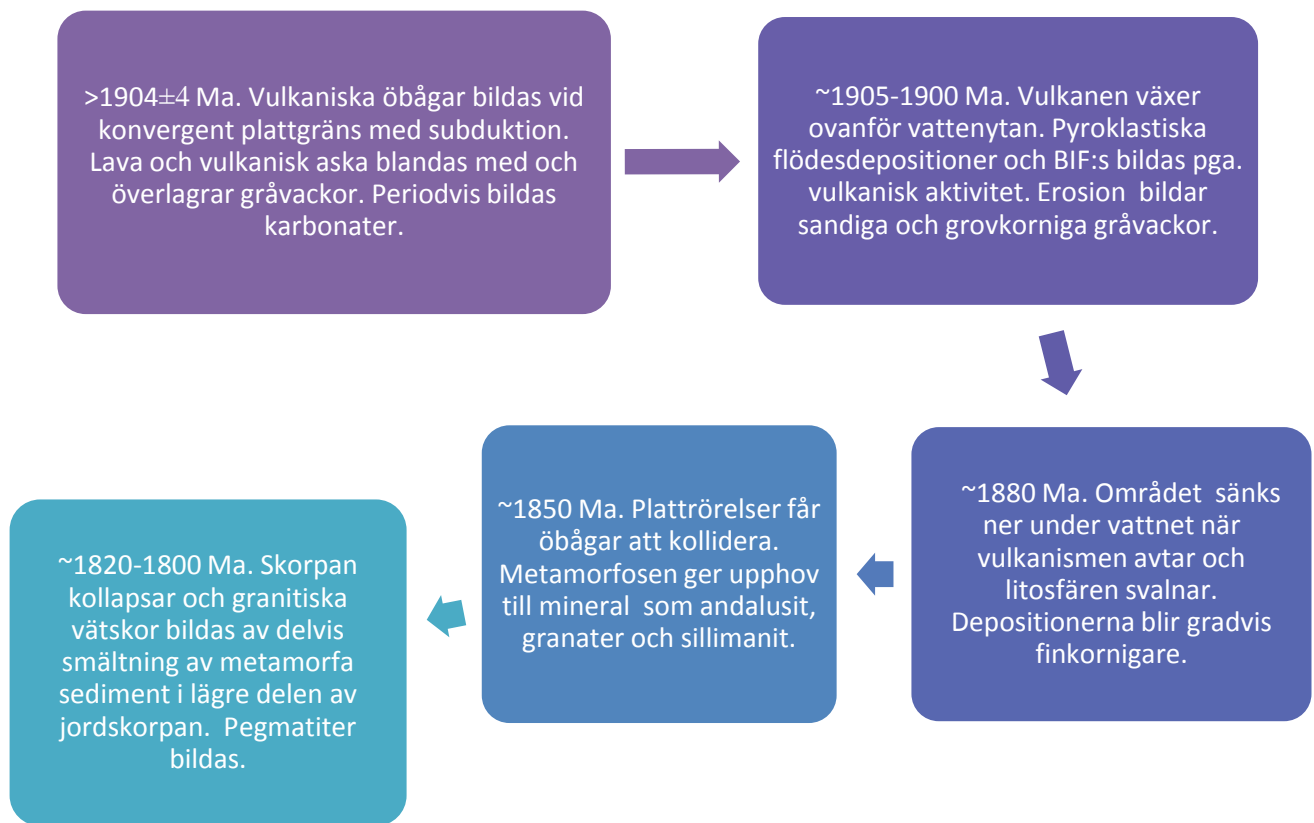


Samtliga 6 st. prover användes i datorprogrammet THERMOCALC och datorprogrammet AX_2 men då mina mätvärden för prov 10, vilken saknade analyserade värden för biotit, visade på orimliga tryck- och temperaturförhållanden för området så valde jag att inte ta med det provet i min graf som går att se i resultatdelen av mitt arbete (figur 14).

Geologisk bakgrundshistoria

Stora Persholmen är en del av Utö, som i sin tur är en del av den södra skärgården i Stockholm, Sverige. Utö är en del av den geologiska regionen Bergsslagen, som karaktäriseras av järnberikad berggrund. Utö är känt för den lättillgängliga och geologiskt intressanta berggrunden med flera olika sorters strukturer och bergarter.

Enligt tidigare U-Pb-studier av zirkoner i pyroklastiska flödesdepositioner på Utö, har man uppskattat berggrunden till en ålder om ca 1904 ± 4 Ma (Lundström et al. 1998) eller ca 1900 – 1880 Ma (Andersson et al. 2006). Under den här tidsperioden uppskattas det som idag kallas Utö ha varit del av en konvergent plattform med subduktionszon som gett upphov till vulkaniska öbågar (Mansfeld 2012). Detta resulterade i bergsarter såsom kalksten, vulkanisk sten samt gråvackor. Konvergensen av plattorna fortsatte när vulkanismen avtagit och de vulkaniska öarna kolliderade därför och deformerades samt utsattes för metamorfos. Efter metamorfosen av berggrunden skedde en kollaps av skorpan vilket resulterade i att lägre delen av skorpan troligtvis har smält och granitoider intruderade då den äldre berggrunden (Mansfeld 2012). Vi kan se spår av detta på Stora Persholmen i form av pegmatiter, vilket är det sista som bildas från granitisk magma.

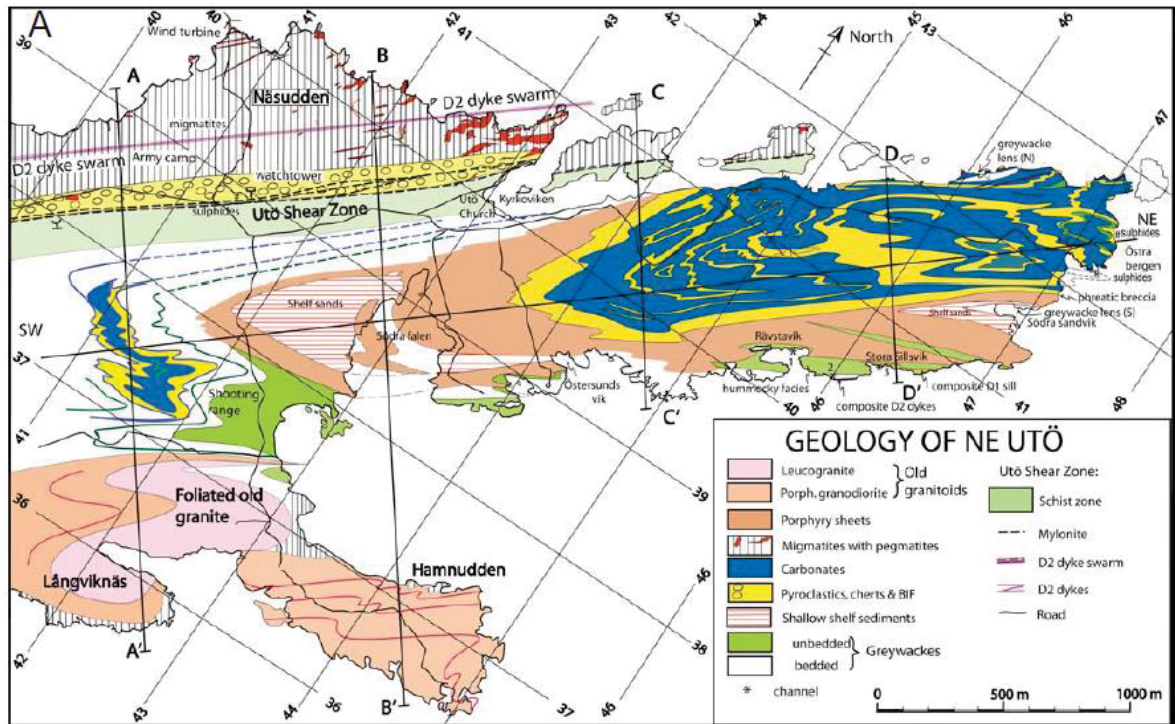


Figur 4. Flöde visar formationsprocessen av berggrunden. Årtal och händelser från Talbot (2008) och Mansfeld (2012).

Enligt tidigare studier på Utö har berggrunden uppskattats ha bildats vid en temperatur på ca 400-550 °C (Bergkvist 2013, Lidström 2013, Daniel 2013). Berggrunden på Utö idag består av bland annat pegmatiter, migmatit, metamorfoserade gråvackor, felsiska vulkaniska bergarter, BIF:s och karbonater (Talbot 2008, Mansfeld 2012). Andalusit är den stabila Al_2SiO_5 -polymorfen över merparten av nordöstra Utö medan sillimanit är stabil på nordvästra delen av Stora Persholmen (Barrientos 2011).

Utö Shear Zone

Som vi kan se i figur 5 ligger Stora Persholmen mitt i en stor skjuvzon som kallas för Utö Shear Zone av Talbot (2008). Utö Shear Zone, eller USZ, är en ca 300 meter bred skjuvzon som troligtvis sträcker sig vidare genom Stockholms skärgård (Talbot 2008). Den deformerade skjuvzonen separerar de migmatiserade gnejsiga strukturerna av gråvackor i den nordvästliga delen av Utö från skifferstrukturerna av gråvackor till nordöst om USZ (Talbot 2008).

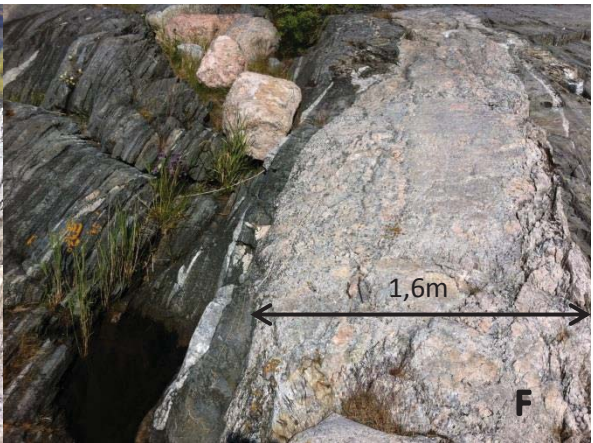


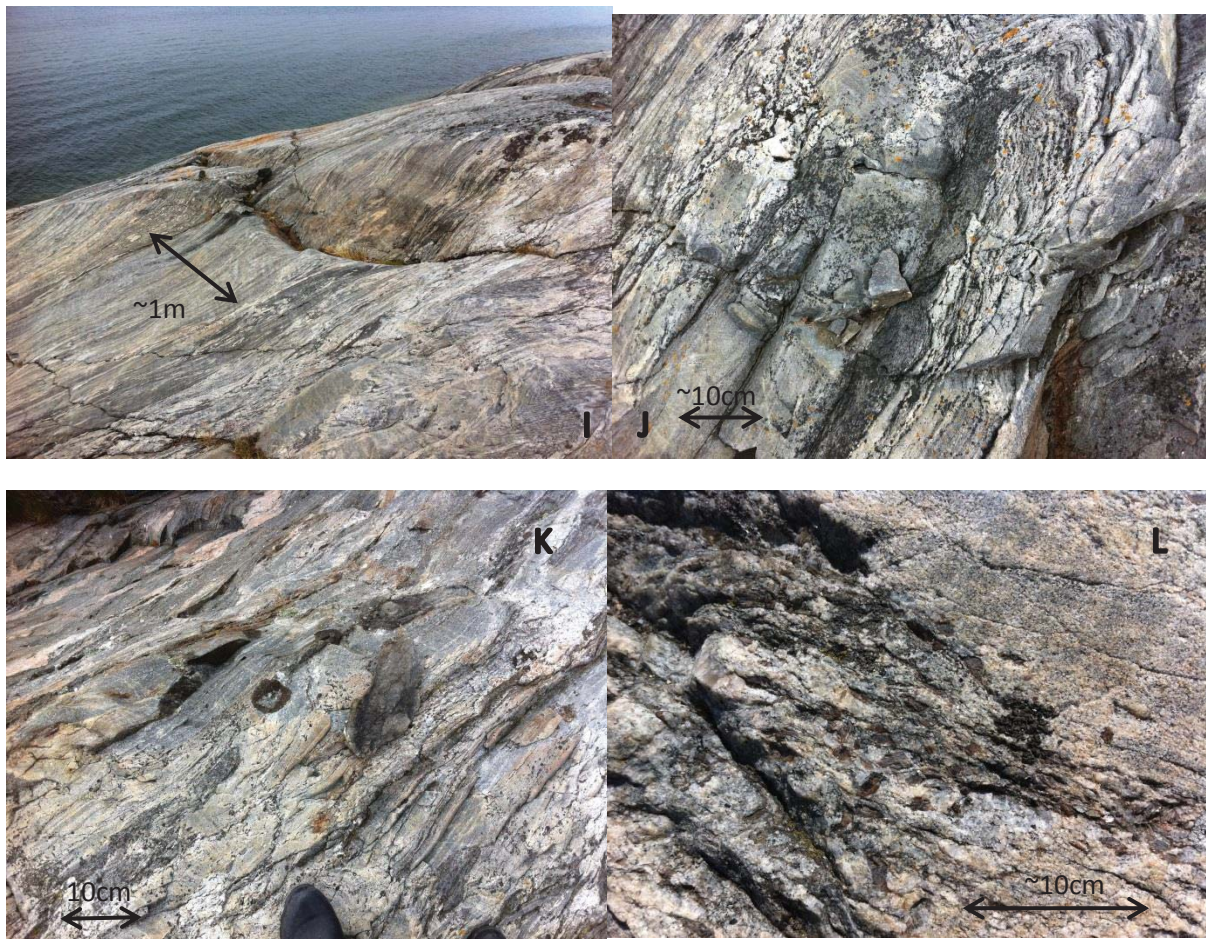
Figur 5. Karta över geologin på Utö (från Talbot 2008).

Resultat

Fältobservationer







Figur 6. Bild på olika strukturer i berget på Stora Persholmen längs min profil. Lokaler för fotografierna kan ses i figur 3. A) Vid starten av min profil (0m), på den östligaste änden av sträckan, ser vi metagråvacka med tydlig lagring av pelitisk – psammitisk sammansättning. B) Närbild på struktur på udde 1. C) Boudin av pegmatit/kvartsgång på udde 1. D) Närbild på granat på udde 1. E) Skjuvzon mellan prov 19 och 06 på udde 1, ca 23,5 m på profilen. F) Stor pegmatitgång samt del av stor skjuvzon vid viken som avdelar udde 1 och 2. Bilden är tagen på udde 1. G) Skjuvzonen/viken som delar av den östliga och västliga sidan av profilen. H) Flera meter bred pegmatitgång vid början på udde 2. I) Struktur över udde 2, den västligaste delen av profilen. Här ser vi migmatiserad gråvacka. J) och K) Närbild på struktur av udde 2. L) Närbild på kluster av glimmer på udde 2, som inte är i foliationsriktning.

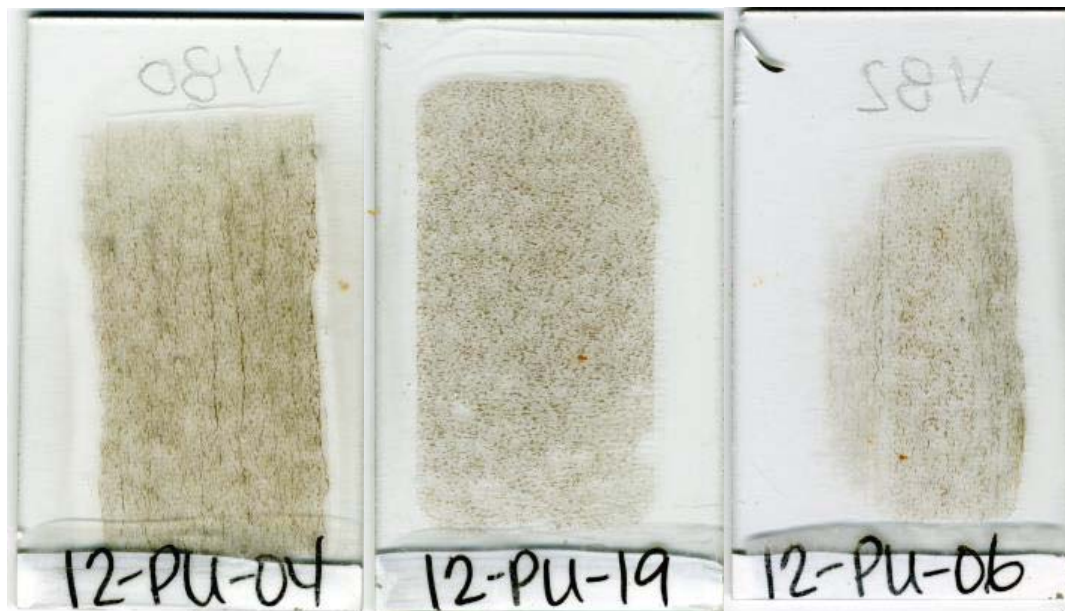
De mest återkommande mineralerna längs min profil var kvarts och såväl muskovit som biotit. Men även granat och klorit identifierades samt kalifältspat (framförallt i de massiva pegmatitgångarna som kunde vara flera decimeter breda, se figur 6F och 6H). Brungrå, avlånga porfyroblaster som kan vara andalusit sågs från början av min profil och minskade något en bit in på profilen för att sedan öka i storlek och antal. Efter de mikroskopiska analyserna kunde dock andalusit inte hittas i något av de 21 st. prover som tagits, det är därför möjligt att det tidigare funnits andalusit i berget som omvandlats till andra mineral via retrogradation. De första granaterna upptäcktes efter ca 20 meter in på min profil (figur 4D), granaterna var mindre än 0,5 mm. Förutom i pegmatit- och kvartsgångarna var den vanligast förekommande kornstorleken <0.5-1 mm stora kristaller. Pegmatitgångarna kunde dock ha centimeter- till decimeterstora kristaller.

På den sydöstligaste halvan av mätningområdet (udde 1) syntes tydlig foliation i berget som gick i en riktning av NÖ 060 – SV 230 (figur 4A och 4B). Det är tydligt att berggrunden här är metamorf och inte sedimentär då kristallerna är orienterade i samma riktning. En tydlig lagringsbild syns av pelitisk – psammitisk sammansättning och jag tolkar berget som metagråvacka. Ca 23 meter in på min profil fanns en skjuvzon som var ca 70 cm bred, hade en lutning på ca 71 grader (Figur 4E) och strök i samma riktning som foliationen (NÖ 060 – SV 230). Efter skjuvzonen fortsatte den tydliga foliationen av metagråvackan men det förekom fler och större pegmatitgångar samt även boudiner av pegmatit (se Figur 4C och 4F). Pegmatitgångarna var upp till >1 meter breda och boudinerna upp till någon decimeter. Udde 1 avslutades med en skjuvzon som troligtvis fortsätter under vattenytan i viken (figur 4F och 4G). Skjuvzonens lutning uppmättes vara ca 68 grader och tolkas stryka i samma riktning som foliationen. Avståndet över vattnet uppskattades vara ca 24 m, mätt med måttband.

Den nordvästligaste delen av Stora Persholmens ände (udde 2) började med stora rosafärgade pegmatitgångar som var upp till nära 4 meter breda (figur 4H). Pegmatiterna innehöll centimeterstora kristaller av kvarts och kalifältspat. Vidare längs profilen fanns en gnejsig struktur i berget där glimmermineralerna efter någon meter inte längre låg orienterade i samma riktning som de övriga mineralerna i gnejsen. De låg istället i en mer oordnad riktning. Glimmern förekom större kluster (se figur 4L) och strukturen i berget skiljde sig från udde 1 (se figur 4I, 4J och 4K). Folieringsriktningen på denna gnejsiga bergart är ca 212 SW och riktningen för mätningen gick i en riktning av ungefär 343 NW. Jag tolkar bergarten på den här sidan av profilen som migmatiserad gråvacka. Proverna som togs på udde 2 numrerades från 11 till prov 16 men förekommer inte i vidare analys med EMPA.

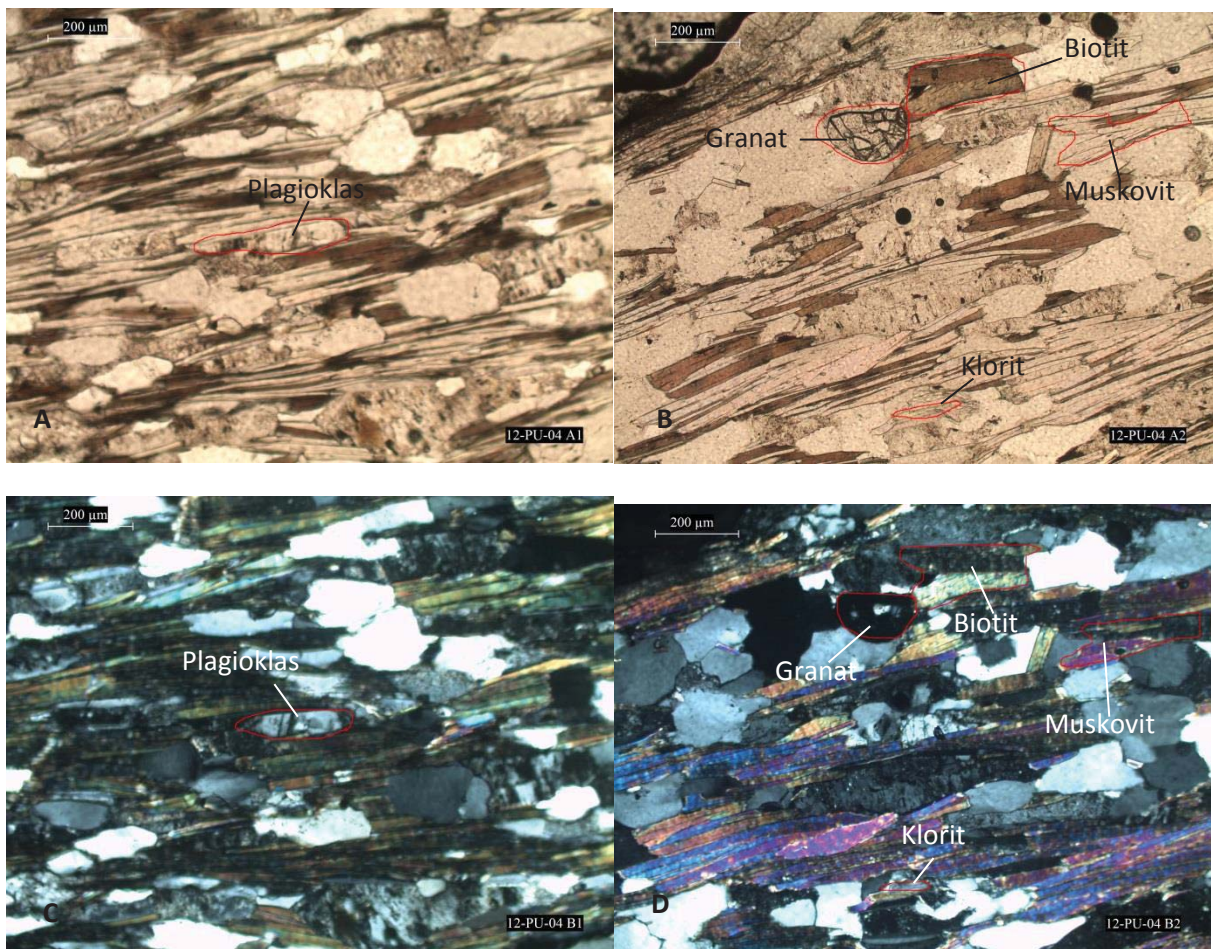
Analys av tunnslip

Här presenterar jag resultaten från min analys i fält samt den petrografiska analysen genom mikroskop.





Figur 7. Scannade bilder på den tunnslip som senare analyserades vid EMPA.



Figur 8. Prov 04 i plain polar och crossed polar i mikroskop. A) Vy över bl.a. plagioklas i plan polar. B) Vy över bl.a. biotit, granat, klorit och muskovit i plain polar. C) Vy över bl.a. plagioklas i crossed polar. D) Vy över bl.a. biotit, granat, klorit och muskovit i crossed polar.

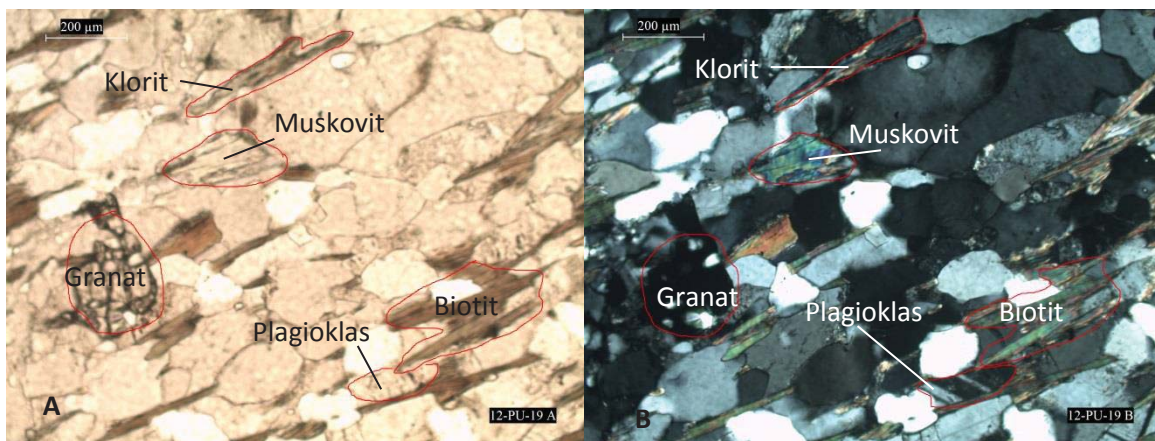
Prov 04

Innehåller: 40 % kvarts, 39 % muskovit, 12 % biotit, 5 % plagioklas, 2 % turmalin, 1 % granat, >1 % klorit (uppskattat enligt ögonmått)

Prov 04 togs ca 16 meter in på min mätningsträcka, i närheten fanns en ca 5 cm bred kvartsgång med kristaller något större än 3 mm. Området var täckt av mossa och därför svårare att analysera, men det gick att se kvarts och glimmer med blotta ögat och kornstorleken var ca 0,5 mm.

Tunnslipen observerades vara rik på muskovit som förekom i stora vågformade och raka stråk genom provet. Biotiten uppskattas vara brunare i färgen än de prover som togs innan 16 m (dessa redogörs inte för i det här stycket då de inte använts vidare i projektarbetet) vilket tyder på en högre halt av Fe. Glimmermineralerna biotit och muskovit följer foliationsriktningen i tunnslipen.

Utöver glimmer observeras även mycket kvarts samt några turmaliner, plagioklas och enstaka granater i tunnslipen. En stor andel av plagioklasen är under process att omvandlas till muskovit.



Figur 9. Prov 19 genom plain polar och crossed polar i mikroskop. A) Vy över bl.a. biotit, granat, klorit, plagioklas och muskovit i plain polar. B) Vy över bl.a. biotit, granat, klorit, plagioklas och muskovit i crossed polar.

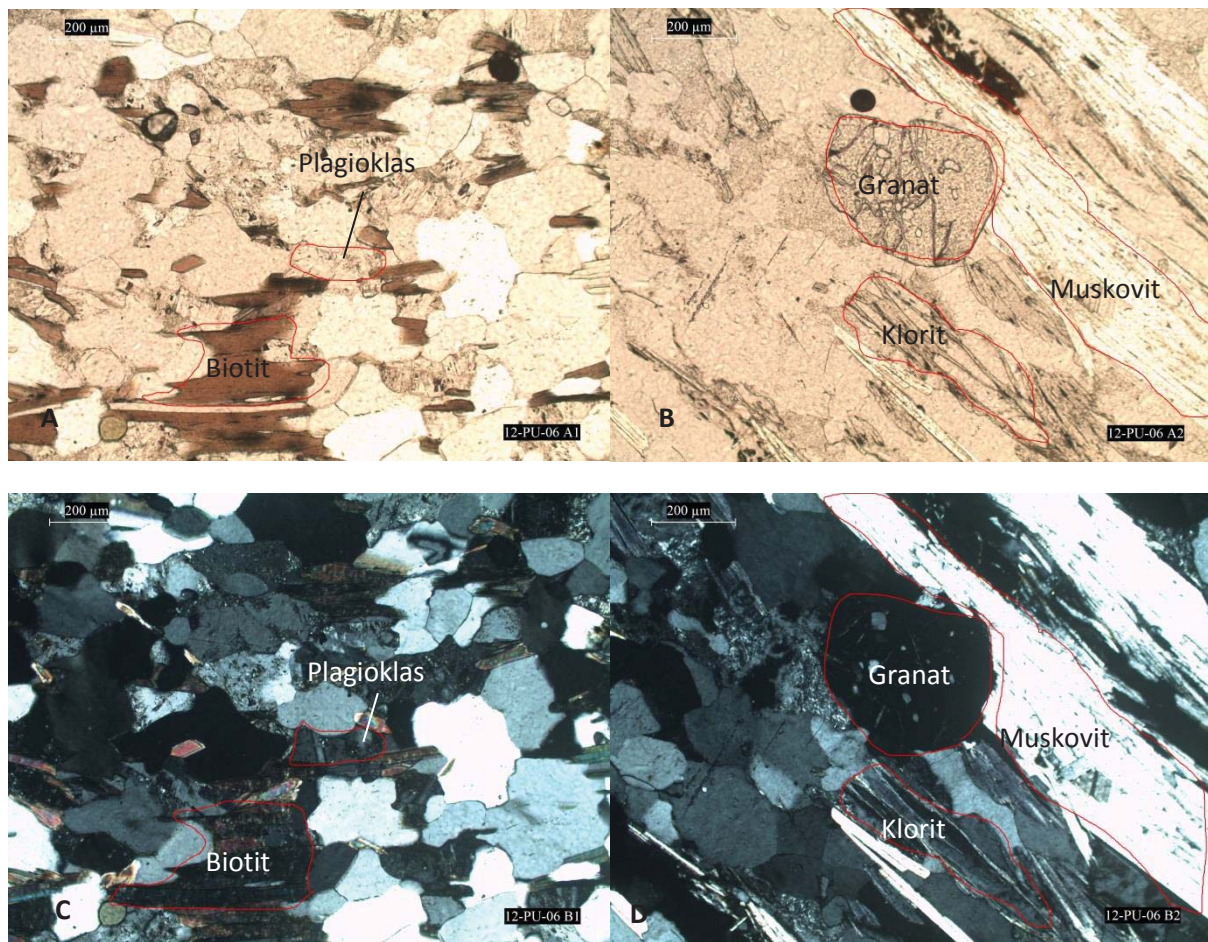
Prov 19

Innehåller: 40 % kvarts, 40 % biotit, 8 % muskovit, 5 % klorit, 3 % plagioklas, 3 % granat, 1 % turmalin (uppskattat enligt ögonmått)

Prov 19 togs ca 21 meter in på min profil. Med blotta ögat liknade området prov 04 med att kvarts och glimmer syntes på platsen och att kornstorleken var ca 0.5-1 mm. En mindre skreva observerades i närheten samt en mindre kvartsven ca 2 cm bred, kristallerna i venen var 1-3 mm. Prov 19 togs även inom några meter från den första skjuvzonen på udde 1.

I tunnslipen förekom, förutom kvarts, mycket biotit som var brunt till färgen och format som flak. Muskovit, som förekom i lägre halt än prov 04, ses i så väl stråk som flak i provet. Båda glimmermineralerna är orienterade i foliationsriktningen och områden observeras där granat och biotit växer bredvid varandra. Ingen reaktionszon observeras mellan dessa två vilket tyder på att mineralerna var i jämvikt. Klorit observeras att delvis ersätta en del av biotiten i provet, vilket tyder på att kloriten är retrograd.

Tunnslipen innehåller även några granater, plagioklas och turmaliner.



Figur 10. Prov 06 genom plain polar och crossed polar i mikroskop. A) Vy över bl.a. biotit och plagioklas i plain polar. B) Vy över bl.a. muskovit, granat och klorit i plain polar. C) Vy över bl.a. biotit och plagioklas i crossed polar. D) Vy över bl.a. muskovit, granat och klorit i crossed polar.

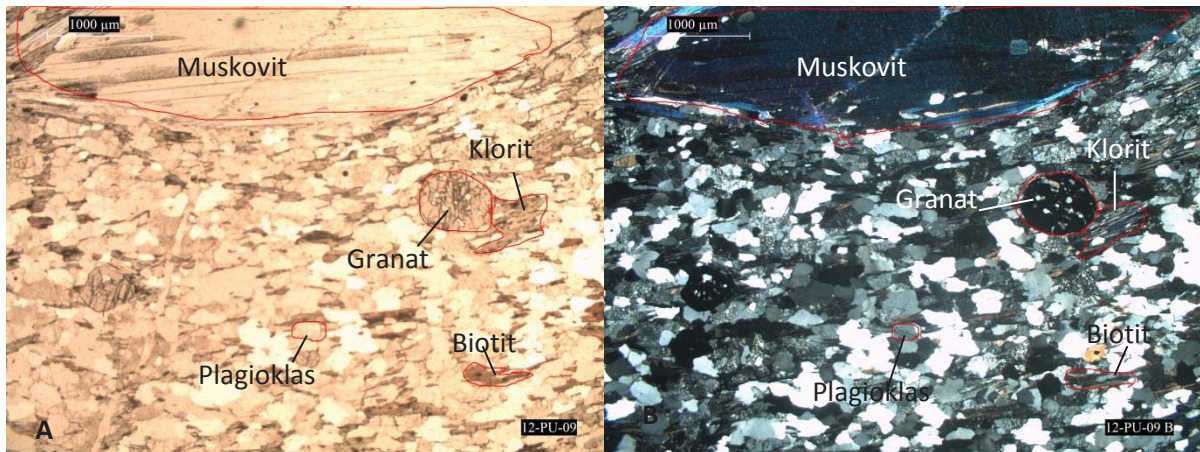
Prov 06

Innehåller: 38 % kvarts, 29 % biotit, 12 % muskovit, 10 % klorit, 6 % plagioklas, 3 % granat, 2 % turmalin (uppskattat enligt ögonmått)

Prov 06 togs ca 1 meter från den första skjuvzonen på udde 1 som var ca 70 cm bred. Provet ligger på ca 25 meter från startpunkten av min profil. I fält observerade kvarts, glimmer och granater i området och något som jag tolkade som andalusit. Detta observerades dock inte i tunnslipen. Kornstorleken var ca 0,5 mm.

Tunnslipen för prov 06 innehåller breda stråk av glimmermineralerna biotit och muskovit, som förekommer i samma riktning som foliationen. Stråken upplevs mer samlade, att de förekommer tätare varandra, framförallt i kanterna av provet. I den högra kanten av tunnslipen förekommer mer klorit medan resten av tunnslipen är rikare på biotit. Spår kan ses av att klorit ersätter biotit mellan dessa områden, något som tyder på att kloriten är retrograd.

Provet innehåller även kvarts, mer klorit än tidigare, samt en del plagioklas och några granater och turmaliner. Plagioklasen håller på att ersättas av muskovit och vi ser dem i en del stråk i tunnslipen. Omvandlingen gör det svårt att uppskatta den faktiska mängden av plagioklas.



Figur 12. Prov 09 genom plain polar och crossed polar i mikroskop. A) Vy över bl.a. plagioklas, granat, biotit, muskovit och klorit i plain polar. B) Vy över bl.a. plagioklas, granat, biotit, muskovit och klorit i crossed polar.

Prov 09

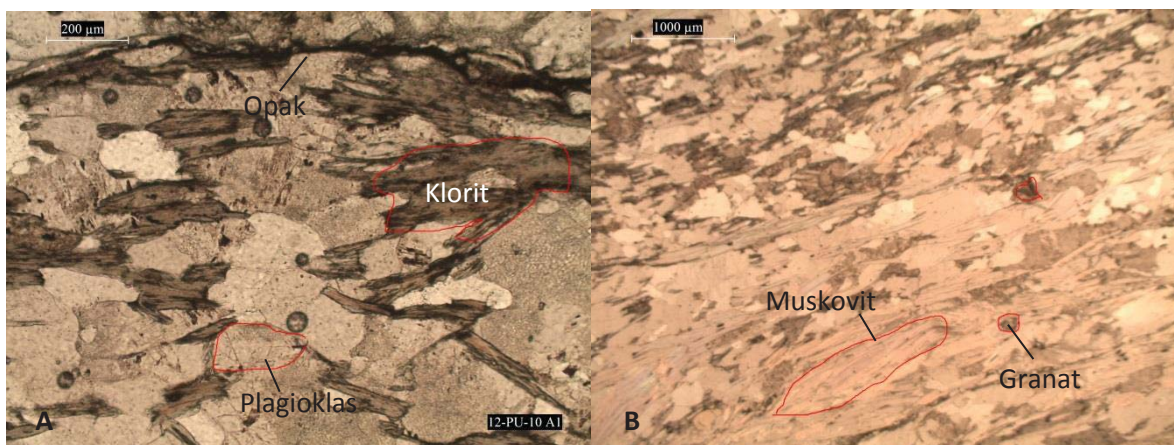
Innehåller: 33 % kvarts, 25 % muskovit, 15 % klorit, 15 % biotit, 8 % plagioklas, 4 % granat, > 1 % turmalin (uppskattat enligt ögonmått)

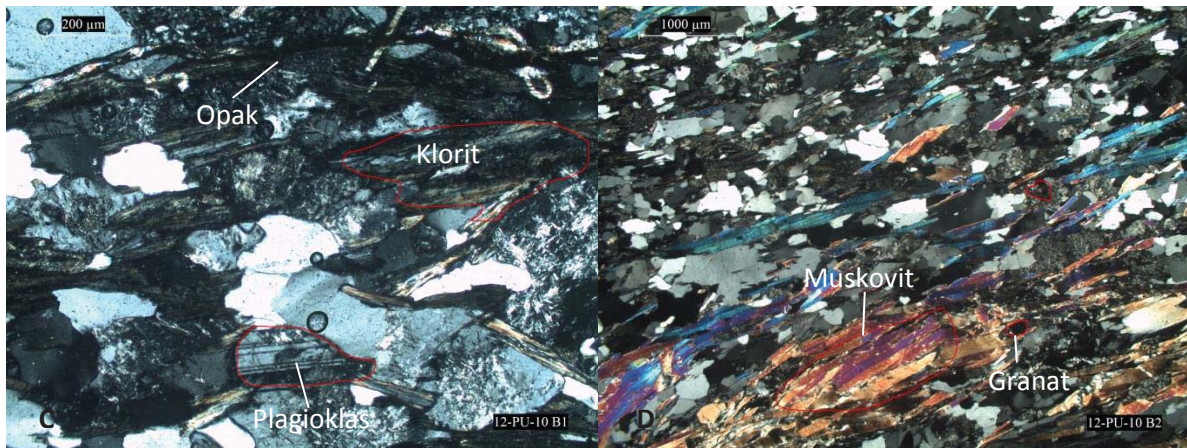
Prov 09 togs ca 43 meter in på min profil, inne i den stora skjuvzonen som separerar udde 1 och 2. Här observerade jag muskovit, biotit och kvarts med kornstorlek om 0,5 mm. Färgen var något grönare än tidigare.

I tunnslip observerades att klorit förekom i en större utsträckning än vad som setts vid tidigare provpunkter, samtidigt minskade biotiten (som här även är ljusare i färgen) i antal. Kloriten sågs finnas intill granater i provet och vissa granater innehöll även inklusioner av klorit. Ingen reaktionszon kunde observeras och jag tolkar det därför som att kloriten och granaten var i jämvikt. Klorit kunde dock observeras ersätta vissa biotitmineraler vilket visar på en retrograd klorit.

Förutom klorit och biotit, fanns även mycket kvarts och muskovit i tunnslipen. Granater, turmaliner och plagioklas är även dessa mineraler som observerades förekomma.

Utseendet på tunnslipen skiljer sig från prov 08 då foliationen inte upplevs vara lika tydlig, utan istället förekommer många små kristaller av kvarts, klorit och biotit. Muskovit ses förekomma i stora ögonformade muskovitkristaller, så kallade mica fishes, vilket tyder på skjuvspänning.





Figur 13. Prov 10 genom plain polar och crossed polar i mikroskop. A) Vy över bl.a. klorit, plagioklas och opakt mineral i plain polar. B) Vy över bl.a. muskovit och granat i plain polar. C) Vy över bl.a. klorit, plagioklas och opakt mineral i crossed polar. D) Vy över bl.a. muskovit och granat i crossed polar.

Prov 10

Innehåller: 30 % kvarts, 21 % klorit, 18 % muskovit, 16 % plagioklas, 11 % biotit, 3 % granat, 1 % turmalin (uppskattat enligt ögonmått)

Prov 10 är också taget i den stora skjuvzonen, provet togs ca 46 m från utgångspunkten. Färgen på stenen var något grönare än tidigare prover men i övrigt observerades inget annat än kvarts och glimmer, området var täckt med en del mossa och andra växtligheter då det är placerat i närheten av vatten. Kornstorleken var ca 0,5 mm. Ca 50 cm bort fanns ännu en pegmatit/kvartsgång ca 20 cm bred, med riktigt stora kristaller om 4-30 cm.

I tunnslipen observerades en del stora kvartsstråk, en del var uppbyggda av stora kristaller medan andra var av mindre kvartsmineraler. Ett stråk av opakt mineral observerades även (se figur 12).

Provet saknade lika stora och utmärkande muskovitformationer som i prov 09 och det innehåller även mer klorit. Muskoviten och biotiten i provet är något mer oordnad än i tidigare prov och mineralerna är inte i lika självklar foliationsriktning som tidigare.

Det förekommer en del plagioklas som ersätts av muskovit i prov 10, det gör det svårt att uppskatta hur mycket plagioklas som verkligen finns i provet. Det är därför möjligt att det är betydligt mindre än 17 %.

Sammanfattning av tunnslipsanalys

Vi kan se hur förekomsten av klorit ökar ju närmare provpunkten är till en skjuvzon. Till exempel innehåller prov 04 (som togs längst bort från någon av skjuvzonerna) mindre än 1 % klorit och 39 % muskovit, medan prov 10 (som togs mitt i den stora skjuvzonen) uppskattas innehålla så mycket som 21 % klorit men enbart 18 % muskovit. Även prov 06, 09 och 19 som är tagna i närhet av skjuvzoner, innehåller mer klorit än prov 04 och 08. I prov 09, 06 och 19 kan vi se hur kloriten håller på att ersätta biotiten i provet, något som visar på en retrograd process.

Även kvarts och till viss del även granat ökar något i antal längs profilen. Kvarts är den vanligaste förekommande mineralen i samtliga prover, även om biotit, muskovit och ibland även klorit även dessa är stora andelar av den modala sammansättningen.

Tabell 1 Utdata från EMPA i Uppsala. Resultatet är presenterat i viktprocent.

Prov	Mineral	Na2O	Al2O3	SiO2	MgO	CaO	MnO	K2O	TiO2	Cr2O3	FeO	Total
04	G core	0,00	21,09	36,54	1,43	1,60	14,08	0,00	0,00	0,00	25,52	100,26
	G rim	0,02	20,85	36,61	1,28	1,47	15,38	0,05	0,00	0,00	24,32	99,99
	Bi	0,04	19,39	34,38	8,25	0,00	0,55	8,76	2,11	0,00	22,21	95,69
	Pl	7,30	25,52	59,15	0,02	7,37	0,06	0,13	0,01	0,00	0,04	99,64
	Mu	0,44	35,32	45,53	0,70	0,00	0,06	10,53	0,43	0,00	1,07	94,10
19	G core	0,01	21,17	34,46	1,78	1,57	14,24	0,00	0,00	0,00	25,19	100,42
	G rim	0,10	21,01	36,41	1,72	1,33	14,49	0,01	0,01	0,00	25,45	100,56
	Bi	0,23	19,58	35,16	8,79	0,04	0,41	9,16	1,63	0,01	19,5	94,53
	Pl	7,33	25,89	58,62	0,00	7,41	0,09	0,24	0,01	0,00	0,00	99,60
	Mu	0,38	35,13	46,06	0,83	0,00	0,01	10,84	0,36	0,00	0,98	94,62
	Chl	0,00	20,79	25,83	12,94	0,03	0,95	0,06	0,01	0,02	28,25	88,90
06	G core	0,00	21,55	36,25	2,14	1,46	9,72	0,00	0,01	0,01	29,32	100,47
	G rim	0,01	21,71	36,47	1,86	1,26	9,78	0,00	0,00	0,00	29,73	100,84
	Bi	0,30	20,37	34,96	8,28	0,00	0,29	8,86	1,83	0,05	19,98	94,93
	Pl	7,58	25,51	59,48	0,00	6,81	0,03	0,10	0,01	0,08	0,14	99,76
	Mu	0,69	36,30	45,47	0,58	0,04	0,10	10,24	0,46	0,02	1,24	95,16
	Chl	0,04	20,60	25,81	11,97	0,04	0,43	0,03	0,06	0,00	28,44	87,45
08	G core	0,09	21,19	36,69	1,94	1,35	11,31	0,01	0,01	0,01	28,29	100,9
	G rim	0,00	21,32	37,03	1,63	1,45	12,14	0,01	0,00	0,01	27,83	101,43
	Bi	0,04	20,58	34,76	8,12	0,06	0,70	8,79	1,68	0,10	20,80	95,64
	Pl	7,43	25,76	59,25	0,00	7,35	0,00	0,12	0,00	0,00	0,07	99,99
	Mu	0,59	35,20	45,79	0,67	0,01	0,03	10,34	0,34	0,04	0,83	93,88
		Incl	0,33	20,65	35,44	9,83	0,03	0,53	8,96	1,74	0,01	18,30
09	G core	0,00	21,00	37,10	1,79	1,46	12,78	0,00	0,02	0,03	26,96	101,14
	G rim	0,00	20,82	36,93	1,49	1,61	14,31	0,02	0,02	0,00	25,76	100,98
	Bi	0,10	20,62	35,18	7,79	0,01	0,33	9,38	1,76	0,01	19,66	94,85
	Pl	7,47	26,52	58,41	0,00	7,58	0,05	0,16	0,02	0,00	0,00	100,23
	Mu	0,47	35,57	45,38	0,72	0,00	0,01	10,70	0,37	0,03	1,11	94,38
		Chl	0,01	20,38	26,68	11,77	0,02	0,78	0,14	0,11	0,00	27,73
	Incl	0,00	20,90	26,41	11,45	0,01	0,94	0,50	0,15	0,03	28,28	88,69
10	G core	0,05	21,4	36,67	1,83	1,59	13,69	0,00	0,00	0,00	25,84	101,07
	G rim	0,00	21,38	36,75	1,76	1,43	13,91	0,03	0,05	0,00	25,60	100,92
	Pl	7,42	25,50	59,34	0,00	7,01	0,02	0,20	0,00	0,01	0,00	99,52
	Mu	0,34	35,34	45,00	0,97	0,00	0,02	10,52	0,37	0,00	1,39	93,95
		Chl	0,11	20,36	27,26	12,52	0,05	0,66	0,25	0,11	0,00	26,01

EMPA

Utdata som jag fick från analysen (angiven i viktprocent av oxiderna i provet) finns listade i tabell 1. För att få en bra överblick har jag valt att använda 2 decimaler i tabellen och att använda beteckningar för inklusion (incl), granatkärna (core) och granatkant (rim). Då C, O och H inte räknas med i analysen uppnår inte totalviktprocenten av mineralerna alltid 100 %.

Dessa data användes sedan för beräkningarna i datorprogrammet THERMOCALC. Vissa av mineralerna observerades inte i de områden som valdes ut för EMPA. De mineraler som saknades var klorit i prov 08 och 4, samt biotit i prov 10.

THERMOCALC

Efter att ha fört in mineralernas viktprocent av oxiderna som jag fick fram genom analysen med EMPA, skapade jag filer för AX_2 och THERMOCALC. Prov 10 valde jag att inte använda då resultatet blev missvisande eftersom provet saknade biotit från analysen, det gav därför (för Utö) onormala tryck och temperaturer. Till en början beräknade jag både genomsnittlig temperatur och tryck men i samråd med Professor Alasdair Skelton valde jag att göra mina THERMOCALC-beräkningar på nytt och istället använda ett fast tryck på 3 kbar, då trycket var dåligt begränsat. 3 kbar valdes för att det är inom andalusitzonen och tidigare studier på Utö (Engström 2011, Barrientos 2011) har fastställt ett tryck på 3 kbar.

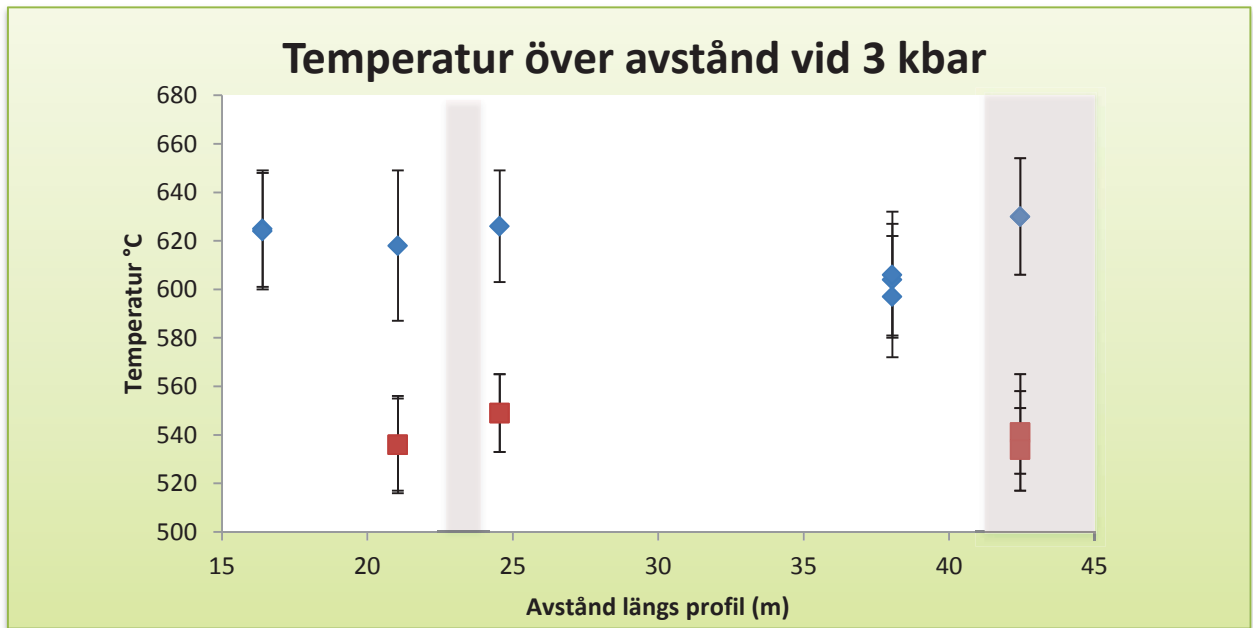
Då klorit tolkats vara retrograd i prov 19, 06 och 09 har dessa prover beräknats såväl med som utan klorit i datorprogrammet THERMOCALC. Den körning som gjorts utan klorit har jag valt att kalla för prograde, då körningen som inkluderar klorit representerar retrograd process.

Som vi kan se i tabell 2 och även diagrammet (figur 14) nedan varierar temperaturen längs min profil från 534 ± 17 °C till som högst 630 ± 24 °C. Vi kan se att de högsta beräknade temperaturerna är från de provpunkter som inte låg i direkt anslutning till skjuvzonerna, samt i proven från skjuvzonerna när klorit uteslutits ur beräkningarna. De lägsta temperaturerna uppmättes för de prover som togs i, eller i närhet av, skjuvzonerna och när klorit ej uteslutits från provet, jag tolkar dessa temperaturer som retrograda. Mina prover placeras mellan fältet för hornblände hornfels och amfibolit i fasdiagrammet från Winter (2010), se figur 13. Proverna är i stabilitetszonen för andalusit men även sillimanit för de högst uppmätta temperaturerna.

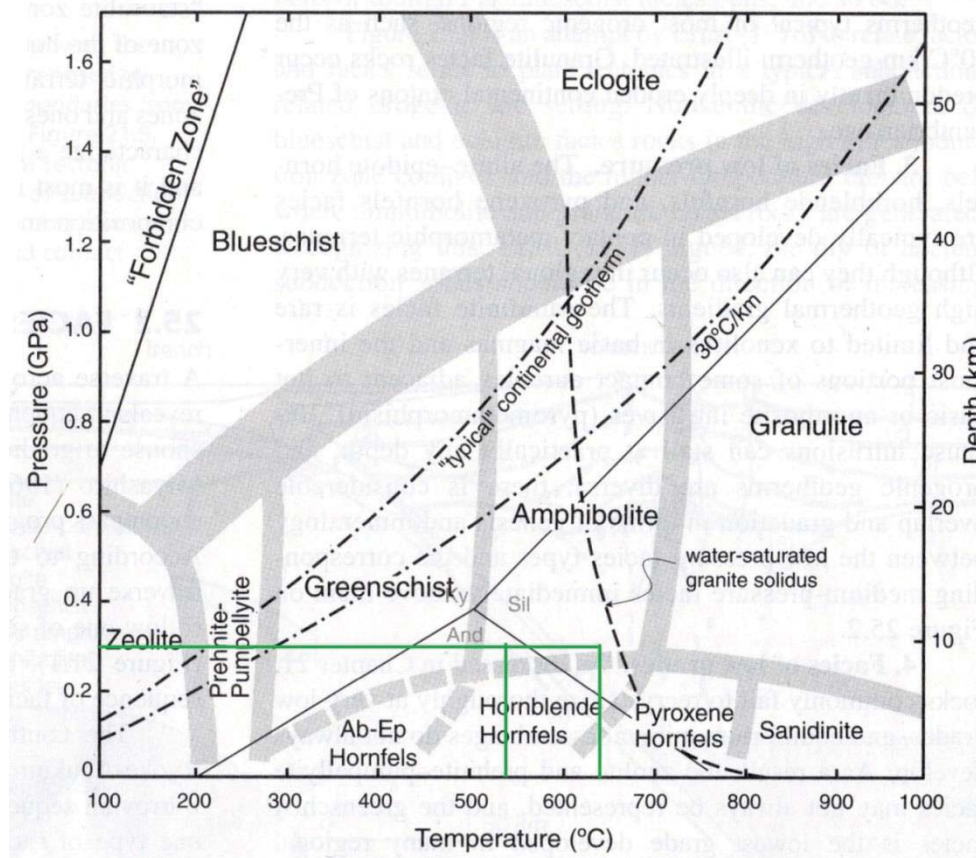
Bilaga 1 innehåller utdata-filerna från beräkningarna av datorprogrammet THERMOCALC. Om e^* för något av ändleden överstiger 2,5 tyder det på att ändledet kan ge ett felaktigt resultat för beräknat tryck och temperatur. Om hat överstiger 0,43 indikerar det att ändledet har stort inflytande. Som utdatafilerna i bilaga 1 visar, så har ett fåtal av ändleden värden som med små marginaler överstiger de för rekommenderade för e^* och hat , men då inget av ändleden som har ett högre e^* -värde har stort inflytande över resultaten (hat är under 0,43), har jag valt att inte exkludera dessa ur beräkningarna.

Tabell 2 Resultat från THERMOCALC-beräkningar med 3 kbar som fast tryck.

Prov	Temperatur °C
04 core	625±24
04 rim	624±24
19 core	536±19
19 rim	536±20
19 prograde	618±31
06 core	549±16
06 rim	549±16
06 prograde	626±23
08 core	604±23
08 inclusion	606±26
08 rim	597±25
09 core	541±17
09 inclusion	541±17
09 rim	534±17
09 prograde	630±24



Figur 14. Diagram över hur temperaturen varierar över min profil. De blå punkterna representerar beräknad temperatur för prov 19, 06 och 09 utan klorit (prograd) samt prov 04 och 08. De röda punkterna visar beräknad temperatur för prov 19, 06 och 09 inklusive klorit (retrograd). Avstånd börjar vid 15 m och slutar vid 45 m då data från EMPA saknas för resterande provpunkter. Standardavvikelse finns representerat genom staplar i diagrammet och de tonade områdena representerar skjuvzonerna i området.



Figur 15. Fasdiagram från Winter (2010) med modifieringar för att visa placeringen av min data på diagrammet. Notera att standardavvikelse inte är representerade i bilden.

Diskussion

Mina fältanalyser av berggrunden på Stora Persholmen indikerar att sydöstra delen av min profil (udde 1) består av metamorfoserade gråvackor med skiffrig lagringsstruktur. Folieringen är i en riktning om NÖ 60 – SV 230 och vi kan se centimeter – decimeter breda lager av pelitisk – psammitisk sammansättning. Det förekommer även en del kvartsvener, pegmatitgångar samt boudiner. Vid lokalen för profilanalysen finns även en mindre skjuzon (<1 meter bred) och en större skjuzon (USZ) som separerar den sydöstra och sydvästra delen av min profil. På den sydvästra delen (udde 2) hittar vi breda pegmatitgångar samt en gnejsig struktur, jag tolkar strukturen som syns på den sidan av ön baserat på mitt fältarbete samt tidigare studier (Talbot 2008) som att berggrunden här är migmatiserad gråvacka.

Enligt beräkningar i datorprogrammen AX_2 och THERMOCALC observeras de lägsta temperaturerna hos prov 19, 06 och 09 som togs ca 21 meter, 25 meter respektive 43 meter in på profilen. Samtliga av dessa prover är tagna i, eller i nära anslutning till, skjuzoner som är flera decimeter till flera meter breda. Min tolkning är att prov 19, 06 och 09 uppvisar lägre temperaturer (som minst 534 ± 17 °C) då de har genomgått retrograd metamorfos. Tolkningen baseras på att klorit ökar ju närmare skjuzonen proven har tagits och klorit observeras även ersätta biotit i dessa prover, något som tyder på en retrograd process. Den retrograda metamorfosen kan t.ex. bero på att metamorfa vätskor har kanaliserats längs skjuzonerna och detta har då gett upphov till att mineralerna omformats på nytt vid en lägre temperatur än omringande berggrund.

Att det rör sig om en retrograd process styrks även av att prov 04 och 08, som beräknas ha metamorfoserats vid högre temperaturer (som högst 625 ± 24 °C), inte togs i eller i direkt närhet till skjuzoner. Det tyder på att prov 04 och 08 tagits i berggrund som inte genomgått samma retrograda metamorfos de prover som tagits närmare skjuzonerna. Exkluderas klorit ur prov 19, 06 och 09, i körning med THERMOCALC och AX_2, uppvisar provpunkterna ha metamorfoserats vid liknande temperatur som 04 och 08. Detta tyder ytterligare på att berggrunden nära skjuzonerna genomgått retrograd metamorfos som orsakat omvandlingsprocessen av biotit till klorit.

Tryck och temperatur för den sydvästligaste änden av profilen (udde 2) har inte kunnat beräknas på grund avsaknad av relevanta mineral för vidare analys. Men berggrunden som finns i området tyder på att udde 2 har metamorfoserats vid högre temperaturer än den sydöstligaste delen, udde 1. Min tolkning är att berggrunden här är migmatiserad, något som även studier av Talbot (2008) visar på (se figur 5). Min tolkning av att berggrunden är migmatiserad styrks av att den högsta temperaturen som beräknats för udde 1 ligger nära water-saturated granite solidus som indikerar vart delvis smältning är uppskattat till att påbörja (figur 15). Temperaturen vid metamorfos på udde 2 förutsätts vara högre än på udde 1 då tidigare studier (Barrientos 2011) har uppvisat förekomst av sillimanit, som bildas vid högre temperaturer. En högre temperatur skulle därför medföra att temperaturen på udde 2 placeras ännu närmare eller passerar gränsen för delvis smältning (water-saturated granite solidus i figur 15) som beräknas kunna påbörja vid ca 680 °C vid ett tryck på 3 kbar.

Tidigare studier har visat på att temperaturen för metamorfos av bergarter på NÖ Utö varit ca 400-550 °C (Bergkvist 2013, Lidström 2013, Daniel 2013), vilket är en betydligt lägre temperatur än den som bergarten har metamorfoserats vid på Stora Persholmen. Värt att notera är temperaturen på Stora Persholmen troligtvis varit omkring 600-700 °C innan den retrograda metamorfosen längs skjuzonerna orsakade de lägre temperaturerna, medan NÖ Utö metamorfoserats vid ca 400-550 °C

utan samma återställning av temperaturer genom skjuvningsprocess. Talbot (2008) beskriver hur rörelsen längs USZ har förflyttat områden av migmatit så att dessa nu är placerade jämte områden som bildats vid längre temperaturer och tryck (områden som bildats högre upp i skorpan jämfört med längre ned som migmatiten). Att det är en markant temperaturskillnad mellan NÖ Utö och Stora Persholmen kan därför förklaras av att områdena har bildats under olika förutsättningar och sedan förskjutits längs USZ tills de är orienterade som i dagens läge, bredvid varandra.

Slutsats

Fältanalyser utförda i samband med detta projekt indikerar att sydöstra delen av min profil består av metamorfoserade gråvackor med skiffrig lagringsstruktur. Folieringen av gråvackorna går i en riktning om NÖ 60 – SV 230 och vi kan se centimeter–decimeter breda lager av pelitisk – psammitisk sammansättning. Kvartsvener, pegmatitgångar samt boudiner förekommer längs profilen på udde 1 och här observeras även en mindre skjuvzon (<1 meter bred) och en större skjuvzon (upp till 24 meter) som separerar den sydöstra och sydvästra delen av min profil.

Enligt beräkningar med hjälp av THERMOCALC och AX_2 kan temperaturen för metamorfosen av berggrunden på den sydöstra delen (udde 1) av Stora Persholmen uppskattas till som minst 534 ± 17 °C, och som mest 630 ± 24 °C vid ett fast tryck om 3 kbar. De lägsta temperaturerna finns för prover tagna i närheten av skjuvzonerna, vilket indikerar att metamorf vätska kanaliserats i skjuvzonerna och orsakat en retrograd metamorfos. Tidigare studier tyder på att den sydvästligaste delen upplevt högre temperaturer då sillimanit förekommer (Barrientos 2011) och enligt denna fältanalys är berggrunden här migmatiserad.

Sammanfattningsvis indikerar detta att Stora Persholmen har metamorfoserats vid en betydligt högre temperatur än bergarterna på NÖ Utö, som till stor del, enligt tidigare studier, metamorfoserats vid ca 400-550 °C (Bergkvist 2013, Lidström 2013, Daniel 2013). Den stora skillnaden i temperaturer kan bero på att de geologiska terrängerna har förskjutits längs med skjuvningszonen (Talbot 2008).

Felmarginaler

Mitt mål var att använda hela 80 m sträckan med prover jämnt utspridda, för att göra mina EMPA-analyser och beräkningar i THERMOCALC. Mineralsammansättningen för proverna som togs på udde 2 möjliggjorde inte vidare analys av EMPA och kunde därmed inte användas för att ge en beräknad temperatur för metamorfosen i området. Slutsatser har dock kunnat dras på grund av migmatisering observerad i fält samt förekomsten av sillimanit enligt tidigare studie (Barrientos 2011).

Tack till

Professor Alasdair Skelton för mycket värdefull handledning genom mitt projektarbete och för bra återkoppling på min uppsats. Jag vill även tacka Dr. Jarek Majka som hjälpte mig med EMPA i Uppsala och tack till Dan Zetterberg, Marianne Ahlbom och Curt Broman för bra hjälp med att förebere mina prover inför analyserna.

Referenser

- Andersson, U.B., Högdahl, K., Sjöström, H., Bergman, S., 2006: Multistage growth and reworking of the Palaeoproterozoic crust in Bergslagen area, southern Sweden: evidence from U-Pb geochronology. *Geological Magazine*, 679-297.
- Barrientos, N., 2011: Determinations of metamorphic conditions in metapelites on Stora Persholmen, NE Utö, with EMPA analysis. Kandidatavhandling. Institutionen för geologiska vetenskaper. Stockholms Universitet. 29 s.
- Bergkvist, O., 2013: Pressure Temperature-time path model of Fårskär-Rävstavig greywacke formation, NE Utö, with EMPA generated data. Kandidatavhandling. Institutionen för geologiska vetenskaper. Stockholms Universitet. 54 s.
- Daniel, M., 2013: Geotermobarometrisk analys av granatförande metagråvackor på nordöstra Utö. Kandidatavhandling. Institutionen för geologiska vetenskaper. Stockholms Universitet. 24 s.
- Lidström, A., 2013: Metamorfa förhållanden på nordöstra Utö; en mikrosondanalys av karbonatberg och gråvacka. Kandidatavhandling. Institutionen för geologiska vetenskaper. Stockholms Universitet. 22 s.
- Lundström, I., Allen, R.L., Persson, P., Ripa, M., 1998: Stratigraphies and depositional ages of Svecofennian, Palaeoproterozoic metavolcanic rocks in E. Svealand and Bergslagen, south central Sweden. *GFF*, 120:3, 315-320.
- Mansfeld, J., 2012: The geology of Utö – excursion guide. Stockholms Universitet.
- Philpotts, A. R., Ague, J. J., 2009: Principles of Igneous and Metamorphic Petrology 2nd ed. *Cambridge University Press*. Cambridge.
- Talbot, C. J., 2008: Palaeoproterozoic crustal building in NE Utö, southern Svecofennides, Sweden. *GFF*, 130:2, 49-70.
- Winter, J.D., 2010: Principles of Igneous and Metamorphic Petrology 2nd ed. *Pearson Education, Inc.* New Jersey.

Bilagor

1. THERMOCALC

I denna bilaga presenteras output-filerna från datorprogrammet THERMOCALC. Dessa visar, för varje prov, vilka reaktioner som har identifierats och som ska analyseras för att beräkna temperatur baserat på det tryck som valts (3 kbar).

Prov 04 core

an independent set of reactions has been calculated

Activities and their uncertainties

	py	gr	alm	phl	ann	east	an	
a	0.000290	0.000126	0.180	0.0249	0.0590	0.0340	0.530	
sd(a)/a	0.78480	0.81202	0.17060	0.42558	0.33566	0.39913	0.06627	

	ab	mu	cel	fcel	pa	q	H2O	
a	0.650	0.770	0.0134	0.0114	0.214	1.00	1.00	
sd(a)/a	0.05000	0.10000	0.74627	0.87719	0.18534	0		

Independent set of reactions

- 1) $gr + 2pa + 3q = 3an + 2ab + 2H_2O$
- 2) $east + cel = phl + mu$
- 3) $phl + east + 6q = py + 2cel$
- 4) $2ann + mu + 6q = alm + 3fcel$
- 5) $gr + alm + mu = ann + 3an$
- 6) $4py + 3gr + 3east + 3fcel = alm + 6phl + 9an$

Calculations for the independent set of reactions

at P = 3.0 kbar (for $x(H_2O) = 1.0$)

T(P)	sd(T)	a	sd(a)	b	c	ln_K	sd(ln_K)
------	-------	---	-------	---	---	------	----------

1	608	24	146.82	0.69	-0.27567	9.333	9.297	0.920
2	864	579	-22.74	0.32	-0.01196	0.329	3.740	0.953
3	810	334	57.79	1.08	0.03890	-4.287	-9.696	1.784
4	978	502	62.06	2.19	0.03962	-5.038	-9.215	2.723
5	511	54	35.10	1.15	-0.12517	7.461	6.221	0.922
6	620	122	-168.40	2.59	-0.33130	22.334	53.501	5.573

Average temperatures at P = 3.0 kbar (for x(H₂O) = 1.0)

corresponding average T

	avT	sd	fit
lsq	625	24	0.97

diagnostics on this average T

for 95% confidence, fit (= sd(fit) = sqrt(MSWD)) < 1.49 (but larger may be OK)

column:

1-3: result of doubling the uncertainty on ln a.

4: e* = ln a residuals normalised to sd(ln a) : |e*| >2.5 suspect?

5: hat = diagonal elements of the hat matrix : hat >0.43 influential.

6-7: observed and calculated activities of endmembers.

8-9: regression-through-origin x,y values

	T	sd	fit	e*	hat	a(obs)	a(calc)	x	y
py	630	25	0.93	0.7	0.09	0.000290	0.000488	0.01	10.06

gr	633	27	0.92	-0.7	0.20	0.000126	7.19e-5	-0.02	-15.83
alm	621	25	0.88	-0.6	0.02	0.180	0.163	0.01	5.47
phl	627	25	0.96	-0.3	0.05	0.0249	0.0221	-0.01	-7.96
ann	614	26	0.72	1.2	0.07	0.0590	0.0886	-0.01	-10.71
east	626	25	0.97	0.2	0.01	0.0340	0.0365	0.00	4.09
an	626	25	0.96	0.2	0.01	0.530	0.536	0.00	3.88
ab	624	26	0.97	-0.1	0.03	0.650	0.647	0.01	6.89
mu	624	25	0.96	-0.1	0.01	0.770	0.759	0.00	4.37
cel	627	25	0.86	-1.1	0.01	0.0134	0.00584	-0.00	-2.15
fcel	625	24	0.95	-0.5	0.00	0.0114	0.00767	-0.00	-0.40
pa	610	36	0.94	0.3	0.47	0.214	0.228	-0.03	-25.54
q	625	24	0.97	0	0	1.00	1.00	0	0
H2O	625	24	0.97	0	0	1.00	1.00	0	0

For P = 3.0 kbar, av T = 625 jC, sd = 24, sigfit = 1.0

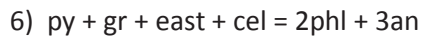
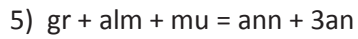
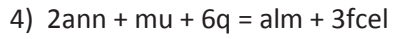
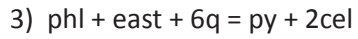
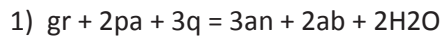
Prov 04 rim

an independent set of reactions has been calculated

Activities and their uncertainties

	py	gr	alm	phl	ann	east	an		
a	0.000210	9.60e-5	0.160	0.0249	0.0590	0.0340	0.530		
sd(a)/a	0.79619	0.81947	0.18806	0.42558	0.33566	0.39913	0.06627		
	ab	mu	cel	fcel	pa	q	H2O		
a	0.650	0.770	0.0135	0.0114	0.214	1.00	1.00		
sd(a)/a	0.05000	0.10000	0.74074	0.87719	0.18534		0		

Independent set of reactions



Calculations for the independent set of reactions

at $P = 3.0$ kbar (for $x(H_2O) = 1.0$)

	T(P)	sd(T)	a	sd(a)	b	c	ln_K	sd(ln_K)	
1	618	25	146.82	0.69	-0.27567	9.333	9.569	0.927	
2	868	576	-22.74	0.32	-0.01196	0.329	3.732	0.948	
3	749	333	57.79	1.08	0.03890	-4.287	-10.004	1.780	
4	952	502	62.06	2.19	0.03962	-5.038	-9.333	2.724	
5	546	55	35.10	1.15	-0.12517	7.461	6.610	0.932	
6	658	98	-32.43	0.78	-0.12336	7.499	16.116	1.667	

Average temperatures at $P = 3.0$ kbar (for $x(H_2O) = 1.0$)

corresponding average T

	avT	sd	fit
lsq	624	24	0.89

diagnostics on this average T

for 95% confidence, $\text{fit} (= \text{sd}(\text{fit}) = \text{sqrt}(\text{MSWD})) < 1.49$ (but larger may be OK)

column:

1-3: result of doubling the uncertainty on $\ln a$.

4: e^* = $\ln a$ residuals normalised to $\text{sd}(\ln a)$: $|e^*| > 2.5$ suspect?

5: hat = diagonal elements of the hat matrix : $\text{hat} > 0.43$ influential.

6-7: observed and calculated activities of endmembers.

8-9: regression-through-origin x,y values

	T	sd	fit	e^*	hat	a(obs)	a(calc)	x	y
py	630	25	0.79	0.9	0.09	0.000210	0.000431	0.01	10.31
gr	627	27	0.88	-0.3	0.19	9.60e-5	7.58e-5	-0.02	-15.72
alm	619	25	0.81	-0.5	0.02	0.160	0.144	0.01	5.93
phl	626	25	0.87	-0.3	0.05	0.0249	0.0219	-0.01	-8.25
ann	614	25	0.69	1.0	0.07	0.0590	0.0834	-0.01	-10.52
east	624	25	0.89	0.0	0.02	0.0340	0.0345	0.01	4.54
an	624	25	0.89	0.1	0.01	0.530	0.532	0.00	3.81
ab	623	26	0.89	-0.1	0.03	0.650	0.648	0.01	6.88
mu	623	25	0.89	-0.1	0.01	0.770	0.766	0.00	4.34
cel	626	24	0.78	-1.1	0.01	0.0135	0.00614	-0.00	-2.59
fcel	624	24	0.87	-0.4	0.00	0.0114	0.00774	-0.00	-0.48
pa	612	36	0.87	0.3	0.47	0.214	0.225	-0.03	-25.50
q	624	24	0.89	0	0	1.00	1.00	0	0
H2O	624	24	0.89	0	0	1.00	1.00	0	0

For $P = 3.0$ kbar, $\text{av } T = 624$ jC, $\text{sd} = 24$, $\text{sigfit} = 0.9$

Prov 19 core

an independent set of reactions has been calculated

Activities and their uncertainties

	py	gr	alm	phl	ann	east	an
a	0.000590	0.000128	0.160	0.0400	0.0560	0.0410	0.580
sd(a)/a	0.75536	0.81157	0.18806	0.38400	0.34308	0.38162	0.05292

	ab	clin	daph	ames	mu	cel	fcel
a	0.640	0.0148	0.0400	0.0174	0.770	0.0210	0.0140
sd(a)/a	0.05000	0.46289	0.38967	0.45215	0.10000	0.47619	0.71429

	pa	q	H2O
a	0.244	1.00	1.00
sd(a)/a	0.17146	0	

Independent set of reactions

- 1) $py + 2gr + 3ames + 6q = 6an + 3clin$
- 2) $3gr + 5ames + 11q = 9an + 4clin + 4H_2O$
- 3) $gr + 2pa + 3q = 3an + 2ab + 2H_2O$
- 4) $5py + 3daph = 5alm + 3clin$
- 5) $east + cel = phl + mu$
- 6) $2phl + ames + 6q = py + clin + 2cel$
- 7) $gr + alm + mu = ann + 3an$
- 8) $2gr + alm + 3mu + 6q = 6an + 3fcel$
- 9) $py + ann = alm + phl$

Calculations for the independent set of reactions

at P = 3.0 kbar (for $x(\text{H}_2\text{O}) = 1.0$)

	T(P)	sd(T)	a	sd(a)	b	c	ln_K	sd(ln_K)	
1	370	81	1.95	1.89	-0.23927	11.749	21.608	2.660	
2	502	45	262.29	2.94	-0.62573	19.540	25.392	3.833	
3	607	24	146.82	0.69	-0.27567	9.333	9.258	0.901	
4	677	1423	-219.19	5.51	0.02224	0.155	25.031	4.295	
5	950	443	-22.74	0.32	-0.01196	0.329	3.577	0.728	
6	810	404	60.80	1.04	0.02842	-3.941	-8.886	1.577	
7	540	54	35.10	1.15	-0.12517	7.461	6.541	0.920	
8	661	94	132.26	1.45	-0.21072	9.885	4.469	2.730	
9	521	497	-44.79	0.92	0.01377	-0.292	5.266	0.933	

Average temperatures at P = 3.0 kbar (for $x(\text{H}_2\text{O}) = 1.0$)

corresponding average T

	avT	sd	fit
lsq	536	19	1.72

diagnostics on this average T

for 95% confidence, $\text{fit} (= \text{sd}(\text{fit}) = \sqrt{\text{MSWD}}) < 1.39$ (but larger may be OK)

column:

1-3: result of doubling the uncertainty on $\ln a$.

4: $e^* = \ln a$ residuals normalised to $\text{sd}(\ln a)$: $|e^*| > 2.5$ suspect?

5: hat = diagonal elements of the hat matrix : hat >0.53 influential.

6-7: observed and calculated activities of endmembers.

8-9: regression-through-origin x,y values

	T	sd	fit	e*	hat	a(obs)	a(calc)	x	y
py	535	20	1.72	-0.4	0.12	0.000590	0.000426	0.03	25.98
gr	533	19	1.68	1.1	0.07	0.000128	0.000309	-0.02	-20.53
alm	535	23	1.72	-0.1	0.21	0.160	0.156	0.04	33.72
phl	538	19	1.69	0.9	0.02	0.0400	0.0576	0.01	9.00
ann	534	17	1.54	2.1	0.01	0.0560	0.113	-0.01	-7.92
east	537	19	1.72	0.4	0.07	0.0410	0.0479	0.02	18.63
an	536	19	1.72	-0.2	0.00	0.580	0.574	0.00	4.02
ab	535	18	1.66	-0.8	0.00	0.640	0.616	0.01	5.08
clin	534	19	1.70	0.8	0.05	0.0148	0.0214	-0.02	-16.44
daph	547	22	1.64	-1.2	0.26	0.0400	0.0253	-0.05	-36.11
ames	539	18	1.64	-1.4	0.02	0.0174	0.00912	-0.01	-10.02
mu	537	19	1.70	-0.5	0.00	0.770	0.732	-0.01	-3.90
cel	537	18	1.62	-1.8	0.00	0.0210	0.00895	-0.01	-2.31
fcel	536	19	1.71	-0.6	0.00	0.0140	0.00941	-0.01	-3.83
pa	529	16	1.39	2.7	0.04	0.244	0.385	-0.02	-17.43
q	536	19	1.72	0	0	1.00	1.00	0	0
H2O	536	19	1.72	0	0	1.00	1.00	0	0

For P = 3.0 kbar, av T = 536 jC, sd = 19, sigfit = 1.7

Prov 19 rim

an independent set of reactions has been calculated

Activities and their uncertainties

	py	gr	alm	phl	ann	east	an	
a	0.000540	7.80e-5	0.150	0.0400	0.0560	0.0410	0.580	
sd(a)/a	0.75939	0.82474	0.19769	0.38400	0.34308	0.38162	0.05292	

	ab	clin	daph	ames	mu	cel	fcel
a	0.640	0.0148	0.0400	0.0174	0.770	0.0210	0.0140
sd(a)/a	0.05000	0.46289	0.38967	0.45215	0.10000	0.47619	0.71429

	pa	q	H2O
a	0.244	1.00	1.00
sd(a)/a	0.17146	0	

Independent set of reactions

- 1) $py + 2gr + 3ames + 6q = 6an + 3clin$
- 2) $3gr + 5ames + 11q = 9an + 4clin + 4H_2O$
- 3) $gr + 2pa + 3q = 3an + 2ab + 2H_2O$
- 4) $5py + 3daph = 5alm + 3clin$
- 5) $east + cel = phl + mu$
- 6) $phl + east + 6q = py + 2cel$
- 7) $2phl + ames + 6q = py + clin + 2cel$
- 8) $gr + alm + mu = ann + 3an$
- 9) $2gr + alm + 3mu + 6q = 6an + 3fcel$

Calculations for the independent set of reactions

at $P = 3.0$ kbar (for $x(H_2O) = 1.0$)

T(P)	sd(T)	a	sd(a)	b	c	ln_K	sd(ln_K)
------	-------	---	-------	---	---	------	----------

1	470	82	1.95	1.89	-0.23927	11.749	22.688	2.677
2	525	45	262.29	2.94	-0.62573	19.540	26.878	3.858
3	625	24	146.82	0.69	-0.27567	9.333	9.753	0.913
4	673	1433	-219.19	5.51	0.02224	0.155	25.151	4.323
5	950	443	-22.74	0.32	-0.01196	0.329	3.577	0.728
6	999	250	57.79	1.08	0.03890	-4.287	-8.837	1.333
7	793	405	60.80	1.04	0.02842	-3.941	-8.974	1.579
8	596	55	35.10	1.15	-0.12517	7.461	7.101	0.934
9	713	95	132.26	1.45	-0.21072	9.885	5.524	2.746

Average temperatures at P = 3.0 kbar (for $x(\text{H}_2\text{O}) = 1.0$)

corresponding average T

	avT	sd	fit
lsq	536	20	1.85

diagnostics on this average T

for 95% confidence, $\text{fit} (= \text{sd}(\text{fit}) = \sqrt{\text{MSWD}}) < 1.39$ (but larger may be OK)

column:

1-3: result of doubling the uncertainty on $\ln a$.

4: $e^* = \ln a$ residuals normalised to $\text{sd}(\ln a)$: $|e^*| > 2.5$ suspect?

5: \hat{h} = diagonal elements of the hat matrix : $\hat{h} > 0.53$ influential.

6-7: observed and calculated activities of endmembers.

8-9: regression-through-origin x,y values

	T	sd	fit	e*	hat	a(obs)	a(calc)	x	y
py	535	21	1.84	-0.2	0.12	0.000540	0.000456	0.03	25.78
gr	532	20	1.76	1.7	0.07	7.80e-5	0.000320	-0.02	-20.96
alm	535	25	1.85	-0.1	0.23	0.150	0.148	0.04	35.06
phl	537	21	1.84	0.4	0.02	0.0400	0.0473	0.01	10.90
ann	534	18	1.65	2.2	0.01	0.0560	0.120	-0.01	-8.55
east	537	21	1.84	0.6	0.06	0.0410	0.0517	0.02	17.94
an	535	20	1.84	-0.3	0.00	0.580	0.570	0.00	4.03
ab	535	20	1.80	-0.7	0.00	0.640	0.618	0.00	4.60
clin	533	20	1.80	1.0	0.05	0.0148	0.0239	-0.02	-17.64
daph	548	23	1.74	-1.4	0.25	0.0400	0.0235	-0.05	-35.18
ames	538	20	1.78	-1.4	0.02	0.0174	0.00945	-0.01	-10.14
mu	536	20	1.84	-0.4	0.00	0.770	0.742	-0.01	-4.39
cel	537	19	1.69	-2.3	0.00	0.0210	0.00691	-0.00	-0.32
fcel	536	20	1.84	-0.5	0.00	0.0140	0.00998	-0.01	-4.21
pa	530	18	1.60	2.4	0.03	0.244	0.370	-0.02	-15.77
q	536	20	1.85	0	0	1.00	1.00	0	0
H2O	536	20	1.85	0	0	1.00	1.00	0	0

For P = 3.0 kbar, av T = 536 jC, sd = 20, sigfit = 1.8

Prov 19 utan klorit (prograde)

an independent set of reactions has been calculated

Activities and their uncertainties

	py	gr	alm	phl	ann	east	an
a	0.000560	0.000124	0.160	0.0400	0.0560	0.0400	0.530

sd(a)/a 0.75775 0.81248 0.18806 0.38400 0.34308 0.38400 0.06627

	ab	mu	cel	fcel	pa	q	H2O
a	0.640	0.780	0.0200	0.0130	0.213	1.00	1.00
sd(a)/a	0.05000	0.10000	0.50000	0.76923	0.18581	0	

Independent set of reactions

- 1) $gr + 2pa + 3q = 3an + 2ab + 2H_2O$
- 2) $east + cel = phl + mu$
- 3) $phl + east + 6q = py + 2cel$
- 4) $py + gr + mu = phl + 3an$
- 5) $gr + alm + mu = ann + 3an$
- 6) $2gr + alm + 3mu + 6q = 6an + 3fcel$

Calculations for the independent set of reactions

at P = 3.0 kbar (for $x(H_2O) = 1.0$)

	T(P)	sd(T)	a	sd(a)	b	c	ln_K	sd(ln_K)
1	608	24	146.82	0.69	-0.27567	9.333	9.291	0.921
2	903	453	-22.74	0.32	-0.01196	0.329	3.664	0.745
3	990	257	57.79	1.08	0.03890	-4.287	-8.874	1.367
4	525	78	-9.69	0.70	-0.11140	7.170	11.608	1.196
5	517	55	35.10	1.15	-0.12517	7.461	6.289	0.929
6	628	99	132.26	1.45	-0.21072	9.885	3.731	2.872

Average temperatures at P = 3.0 kbar (for $x(H_2O) = 1.0$)

corresponding average T

```

avT  sd  fit
lsq  618  31  1.29

```

diagnostics on this average T

for 95% confidence, fit (= sd(fit) = sqrt(MSWD)) < 1.49 (but larger may be OK)

column:

1-3: result of doubling the uncertainty on ln a.

4: e* = ln a residuals normalised to sd(ln a) : |e*| >2.5 suspect?

5: hat = diagonal elements of the hat matrix : hat >0.43 influential.

6-7: observed and calculated activities of endmembers.

8-9: regression-through-origin x,y values

	T	sd	fit	e*	hat	a(obs)	a(calc)	x	y
py	620	33	1.29	0.2	0.09	0.000560	0.000650	0.01	11.02
gr	623	34	1.28	-0.4	0.19	0.000124	8.80e-5	-0.02	-15.73
alm	613	30	1.20	-0.7	0.02	0.160	0.140	0.01	5.60
phl	619	32	1.29	-0.1	0.04	0.0400	0.0388	-0.01	-7.69
ann	607	27	1.08	1.3	0.06	0.0560	0.0887	-0.01	-10.04
east	620	30	1.24	0.8	0.02	0.0400	0.0540	0.01	3.96
an	619	32	1.29	0.1	0.01	0.530	0.534	0.00	3.85
ab	617	33	1.29	-0.1	0.03	0.640	0.638	0.01	6.91
mu	617	32	1.29	-0.1	0.01	0.780	0.773	0.00	4.48
cel	623	23	0.96	-2.1	0.01	0.0200	0.00692	-0.00	-2.10
fcel	619	31	1.28	-0.5	0.00	0.0130	0.00892	-0.00	-1.27

pa	608	46	1.28	0.2	0.48	0.213	0.222	-0.03	-25.68
q	618	31	1.29	0	0	1.00	1.00	0	0
H2O	618	31	1.29	0	0	1.00	1.00	0	0

For P = 3.0 kbar, av T = 618 jC, sd = 31, sigfit = 1.3

Prov 06 core

an independent set of reactions has been calculated

Activities and their uncertainties

	mu	cel	fcel	pa	phl	ann	east
a	0.770	0.00790	0.00950	0.305	0.0339	0.0560	0.0400
sd(a)/a	0.10000	1.26582	1.05263	0.14491	0.39940	0.34308	0.38400

	an	ab	py	gr	alm	clin	daph
a	0.540	0.670	0.00105	0.000107	0.240	0.0119	0.0490
sd(a)/a	0.06348	0.05000	0.72635	0.81657	0.15000	0.47624	0.36184

	ames	q	H2O
a	0.0127	1.00	1.00
sd(a)/a	0.47239	0	0

Independent set of reactions

- 1) $py + 2gr + 3ames + 6q = 6an + 3clin$
- 2) $3gr + 5ames + 11q = 9an + 4clin + 4H2O$
- 3) $2pa + gr + 3q = 3an + 2ab + 2H2O$
- 4) $5py + 3daph = 5alm + 3clin$
- 5) $cel + east = mu + phl$

6) cel + ames = mu + clin

7) mu + 2phl + 6q = 3cel + py

8) mu + 2ann + 6q = 3fcel + alm

9) mu + gr + alm = ann + 3an

Calculations for the independent set of reactions

at P = 3.0 kbar(for x(H2O) = 1.0)

	T(P)	sd(T)	a	sd(a)	b	c	ln_K	sd(ln_K)	
1	343	83	1.95	1.89	-0.23927	11.749	21.252	2.718	
2	511	46	262.29	2.94	-0.62573	19.540	25.988	3.941	
3	593	24	146.82	0.69	-0.27567	9.333	8.868	0.893	
4	756	1367	-219.19	5.51	0.02224	0.155	22.913	4.120	
5	606	841	-22.74	0.32	-0.01196	0.329	4.414	1.385	
6	900	465	-19.73	0.58	-0.02244	0.675	4.514	1.436	
7	705	564	80.53	1.14	0.05086	-4.616	-14.352	3.949	
8	944	596	62.06	2.19	0.03962	-5.038	-9.370	3.237	
9	501	54	35.10	1.15	-0.12517	7.461	6.100	0.924	

Average temperatures at P = 3.0 kbar(for x(H2O) = 1.0)

corresponding average T

	avT	sd	fit
lsq	549	16	1.50

diagnostics on this average T

for 95% confidence, $\text{fit} (= \text{sd}(\text{fit}) = \sqrt{\text{MSWD}}) < 1.39$ (but larger may be OK)

column:

1-3: result of doubling the uncertainty on $\ln a$.

4: e^* = $\ln a$ residuals normalised to $\text{sd}(\ln a)$: $|e^*| > 2.5$ suspect?

5: hat = diagonal elements of the hat matrix : $\text{hat} > 0.53$ influential.

6-7: observed and calculated activities of endmembers.

8-9: regression-through-origin x,y values

	T	sd	fit	e^*	hat	a(obs)	a(calc)	x	y
mu	550	15	1.44	-0.8	0.00	0.770	0.709	-0.01	-3.36
cel	549	16	1.50	-0.1	0.00	0.00790	0.00725	-0.00	-0.98
fcel	549	16	1.50	-0.3	0.00	0.00950	0.00705	-0.00	-2.34
pa	542	12	1.14	2.4	0.04	0.305	0.433	-0.02	-19.00
phl	550	16	1.48	0.7	0.01	0.0339	0.0449	0.01	8.32
ann	546	13	1.28	2.1	0.01	0.0560	0.116	-0.01	-11.26
east	550	16	1.50	0.2	0.06	0.0400	0.0438	0.02	18.67
an	549	16	1.50	-0.1	0.00	0.540	0.536	0.01	4.76
ab	548	15	1.43	-0.8	0.01	0.670	0.643	0.01	6.56
py	547	16	1.48	-0.9	0.10	0.00105	0.000554	0.03	26.48
gr	548	16	1.50	0.5	0.06	0.000107	0.000156	-0.02	-20.42
alm	549	19	1.50	0.0	0.18	0.240	0.240	0.04	33.51
clin	548	16	1.49	0.5	0.04	0.0119	0.0153	-0.02	-17.26
daph	562	17	1.37	-1.3	0.29	0.0490	0.0302	-0.05	-41.21
ames	551	15	1.46	-1.0	0.02	0.0127	0.00796	-0.01	-10.28
q	549	16	1.50	0	0	1.00	1.00	0	0
H2O	549	16	1.50	0	0	1.00	1.00	0	0

For P = 3.0 kbar, av T = 549 jC, sd = 16, sigfit = 1.5

Prov 06 rim

an independent set of reactions has been calculated

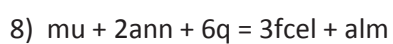
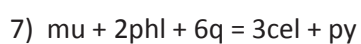
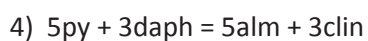
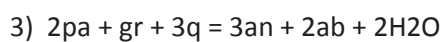
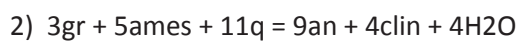
Activities and their uncertainties

	mu	cel	fcel	pa	phl	ann	east
a	0.770	0.00790	0.00950	0.305	0.0339	0.0560	0.0400
sd(a)/a	0.10000	1.26582	1.05263	0.14491	0.39940	0.34308	0.38400

	an	ab	py	gr	alm	clin	daph
a	0.540	0.670	0.000670	6.70e-5	0.260	0.0119	0.0490
sd(a)/a	0.06348	0.05000	0.74939	0.82838	0.15000	0.47624	0.36184

	ames	q	H2O
a	0.0127	1.00	1.00
sd(a)/a	0.47239	0	

Independent set of reactions



9) $\mu + gr + alm = ann + 3an$

Calculations for the independent set of reactions

at P = 3.0 kbar (for $x(H_2O) = 1.0$)

	T(P)	sd(T)	a	sd(a)	b	c	ln_K	sd(ln_K)	
1	464	83	1.95	1.89	-0.23927	11.749	22.638	2.739	
2	534	46	262.29	2.94	-0.62573	19.540	27.393	3.964	
3	610	24	146.82	0.69	-0.27567	9.333	9.336	0.904	
4	659	1400	-219.19	5.51	0.02224	0.155	25.560	4.222	
5	606	841	-22.74	0.32	-0.01196	0.329	4.414	1.385	
6	900	465	-19.73	0.58	-0.02244	0.675	4.514	1.436	
7	652	565	80.53	1.14	0.05086	-4.616	-14.801	3.954	
8	961	596	62.06	2.19	0.03962	-5.038	-9.290	3.237	
9	535	55	35.10	1.15	-0.12517	7.461	6.488	0.934	

Average temperatures at P = 3.0 kbar (for $x(H_2O) = 1.0$)

corresponding average T

	avT	sd	fit
lsq	549	16	1.53

diagnostics on this average T

for 95% confidence, $fit (= sd(fit) = \sqrt{MSWD}) < 1.39$ (but larger may be OK)

column:

1-3: result of doubling the uncertainty on ln a.

4: $e^* = \ln a$ residuals normalised to $sd(\ln a)$: $|e^*| > 2.5$ suspect?

5: hat = diagonal elements of the hat matrix : hat > 0.53 influential.

6-7: observed and calculated activities of endmembers.

8-9: regression-through-origin x,y values

	T	sd	fit	e^*	hat	a(obs)	a(calc)	x	y
mu	550	15	1.46	-0.8	0.00	0.770	0.711	-0.01	-3.49
cel	549	16	1.53	-0.1	0.00	0.00790	0.00704	-0.00	-1.04
fcel	549	16	1.52	-0.3	0.00	0.00950	0.00695	-0.00	-2.39
pa	542	12	1.14	2.5	0.04	0.305	0.440	-0.02	-18.83
phl	550	16	1.51	0.6	0.01	0.0339	0.0425	0.01	8.65
ann	546	13	1.29	2.2	0.01	0.0560	0.119	-0.01	-11.53
east	550	16	1.53	0.2	0.06	0.0400	0.0429	0.02	19.17
an	549	16	1.52	-0.2	0.00	0.540	0.533	0.01	4.65
ab	547	15	1.44	-0.9	0.01	0.670	0.641	0.01	6.50
py	548	16	1.53	-0.3	0.10	0.000670	0.000551	0.03	25.91
gr	547	16	1.50	0.9	0.06	6.70e-5	0.000144	-0.02	-20.23
alm	549	19	1.53	-0.1	0.18	0.260	0.258	0.04	33.86
clin	548	16	1.52	0.4	0.05	0.0119	0.0146	-0.02	-17.29
daph	562	18	1.40	-1.3	0.29	0.0490	0.0306	-0.05	-41.55
ames	551	16	1.48	-1.0	0.02	0.0127	0.00784	-0.01	-10.18
q	549	16	1.53	0	0	1.00	1.00	0	0
H2O	549	16	1.53	0	0	1.00	1.00	0	0

For P = 3.0 kbar, av T = 549 jC, sd = 16, sigfit = 1.5

Prov 06 utan klorit (prograde)

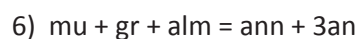
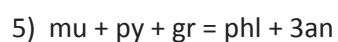
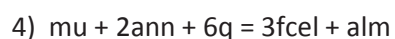
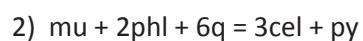
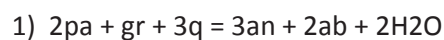
an independent set of reactions has been calculated

Activities and their uncertainties

	mu	cel	fcel	pa	phl	ann	east
a	0.770	0.00760	0.00910	0.277	0.0337	0.0560	0.0390
sd(a)/a	0.10000	1.31579	1.09890	0.15682	0.39993	0.34308	0.38642

	an	ab	py	gr	alm	q	H2O
a	0.500	0.670	0.00100	0.000104	0.240	1.00	1.00
sd(a)/a	0.07500	0.05000	0.72900	0.81734	0.15000	0	0

Independent set of reactions



Calculations for the independent set of reactions

at P = 3.0 kbar (for $x(H_2O) = 1.0$)

	T(P)	sd(T)	a	sd(a)	b	c	ln_K	sd(ln_K)
1	592	24	146.82	0.69	-0.27567	9.333	8.858	0.909
2	686	585	80.53	1.14	0.05086	-4.616	-14.505	4.094
3	589	869	-22.74	0.32	-0.01196	0.329	4.472	1.432
4	915	620	62.06	2.19	0.03962	-5.038	-9.499	3.372

5	324	78	-9.69	0.70	-0.11140	7.170	10.871	1.192
6	484	55	35.10	1.15	-0.12517	7.461	5.898	0.932

Average temperatures at P = 3.0 kbar (for x(H₂O) = 1.0)

corresponding average T

	avT	sd	fit
lsq	626	23	0.85

diagnostics on this average T

for 95% confidence, fit (= sd(fit) = sqrt(MSWD)) < 1.49 (but larger may be OK)

column:

1-3: result of doubling the uncertainty on ln a.

4: e* = ln a residuals normalised to sd(ln a) : |e*| > 2.5 suspect?

5: hat = diagonal elements of the hat matrix : hat > 0.43 influential.

6-7: observed and calculated activities of endmembers.

8-9: regression-through-origin x,y values

	T	sd	fit	e*	hat	a(obs)	a(calc)	x	y
mu	623	23	0.81	-0.3	0.02	0.770	0.745	0.01	5.26
cel	626	23	0.84	-0.2	0.00	0.00760	0.00608	-0.00	-1.75
fcel	626	23	0.84	-0.3	0.00	0.00910	0.00655	-0.00	-1.12
pa	613	33	0.81	0.3	0.40	0.277	0.291	-0.03	-25.51
phl	628	24	0.83	-0.3	0.06	0.0337	0.0303	-0.01	-9.61

ann	616	24	0.66	1.0	0.10	0.0560	0.0790	-0.01	-13.50
east	627	23	0.81	0.5	0.02	0.0390	0.0480	0.01	5.06
an	628	23	0.81	0.3	0.02	0.500	0.512	0.01	4.67
ab	624	24	0.84	-0.1	0.04	0.670	0.667	0.01	8.13
py	625	24	0.84	-0.2	0.08	0.00100	0.000893	0.01	11.49
gr	638	25	0.66	-1.2	0.21	0.000104	3.99e-5	-0.02	-16.97
alm	622	23	0.79	-0.4	0.02	0.240	0.225	0.01	5.95
q	626	23	0.85	0	0	1.00	1.00	0	0
H2O	626	23	0.85	0	0	1.00	1.00	0	0

For P = 3.0 kbar, av T = 626 jC, sd = 23, sigfit = 0.8

Prov 08 core

an independent set of reactions has been calculated

Activities and their uncertainties

	mu	cel	fcel	pa	phl	ann	east
a	0.770	0.0180	0.0121	0.311	0.0314	0.0620	0.0380
sd(a)/a	0.10000	0.55556	0.82645	0.14242	0.40620	0.32856	0.38888

	an	ab	py	gr	alm	q	H2O
a	0.540	0.650	0.000740	8.00e-5	0.210	1.00	1.00
sd(a)/a	0.06348	0.05000	0.74455	0.82411	0.15000	0	0

Independent set of reactions

- 1) $2pa + gr + 3q = 3an + 2ab + 2H_2O$
- 2) $cel + east = mu + phl$
- 3) $mu + py + gr = phl + 3an$

4) $2\mu + \text{phl} + \text{gr} + 6\text{q} = 3\text{cel} + 3\text{an}$

5) $\mu + \text{gr} + \text{alm} = \text{ann} + 3\text{an}$

6) $3\mu + 2\text{gr} + \text{alm} + 6\text{q} = 3\text{fcel} + 6\text{an}$

Calculations for the independent set of reactions

at P = 3.0 kbar (for x(H₂O) = 1.0)

	T(P)	sd(T)	a	sd(a)	b	c	ln_K	sd(ln_K)
1	600	24	146.82	0.69	-0.27567	9.333	9.059	0.898
2	957	484	-22.74	0.32	-0.01196	0.329	3.565	0.797
3	519	79	-9.69	0.70	-0.11140	7.170	11.594	1.202
4	952	231	70.84	1.11	-0.06054	2.554	-0.484	1.923
5	548	54	35.10	1.15	-0.12517	7.461	6.626	0.925
6	652	104	132.26	1.45	-0.21072	9.885	4.271	3.020

Average temperatures at P = 3.0 kbar (for x(H₂O) = 1.0)

corresponding average T

	avT	sd	fit
lsq	604	23	1.09

diagnostics on this average T

for 95% confidence, fit (= sd(fit) = sqrt(MSWD)) < 1.49 (but larger may be OK)

column:

1-3: result of doubling the uncertainty on ln a.

- 4: e^* = ln a residuals normalised to $sd(\ln a)$: $|e^*| > 2.5$ suspect?
- 5: hat = diagonal elements of the hat matrix : hat > 0.43 influential.
- 6-7: observed and calculated activities of endmembers.
- 8-9: regression-through-origin x,y values

	T	sd	fit	e^*	hat	a(obs)	a(calc)	x	y
mu	603	23	1.09	-0.0	0.02	0.770	0.768	0.01	6.47
cel	608	16	0.74	-2.0	0.02	0.0180	0.00598	-0.01	-4.04
fcel	604	22	1.06	-0.6	0.01	0.0121	0.00744	-0.00	-2.61
pa	600	33	1.08	0.1	0.39	0.311	0.315	-0.03	-26.14
phl	603	24	1.09	0.0	0.05	0.0314	0.0319	-0.01	-9.34
ann	595	22	0.98	0.9	0.11	0.0620	0.0832	-0.02	-14.76
east	605	22	1.05	0.7	0.02	0.0380	0.0491	0.01	5.30
an	604	23	1.09	0.0	0.01	0.540	0.541	0.00	4.08
ab	603	24	1.09	-0.0	0.05	0.650	0.649	0.01	9.18
py	603	24	1.09	-0.0	0.08	0.000740	0.000724	0.01	12.16
gr	605	25	1.08	-0.2	0.18	8.00e-5	7.01e-5	-0.02	-17.67
alm	601	23	1.05	-0.4	0.02	0.210	0.199	0.01	6.90
q	604	23	1.09	0	0	1.00	1.00	0	0
H2O	604	23	1.09	0	0	1.00	1.00	0	0

For P = 3.0 kbar, av T = 604 jC, sd = 23, sigfit = 1.1

Prov 08 inclusion

an independent set of reactions has been calculated

Activities and their uncertainties

	mu	cel	fcel	pa	phl	ann	east	
a	0.770	0.0180	0.0121	0.310	0.0480	0.0410	0.0520	
sd(a)/a	0.10000	0.55556	0.82645	0.14283	0.36589	0.38633	0.35756	

	an	ab	py	gr	alm	q	H2O	
a	0.540	0.650	0.000740	8.00e-5	0.210	1.00	1.00	
sd(a)/a	0.06348	0.05000	0.74455	0.82411	0.15000	0		

Independent set of reactions

- 1) $2pa + gr + 3q = 3an + 2ab + 2H_2O$
- 2) $mu + 2phl + 6q = 3cel + py$
- 3) $cel + east = mu + phl$
- 4) $mu + py + gr = phl + 3an$
- 5) $mu + gr + alm = ann + 3an$
- 6) $3cel + alm = 3fcel + py$

Calculations for the independent set of reactions

at P = 3.0 kbar (for $x(H_2O) = 1.0$)

	T(P)	sd(T)	a	sd(a)	b	c	ln_K	sd(ln_K)
1	600	24	146.82	0.69	-0.27567	9.333	9.066	0.898
2	902	282	80.53	1.14	0.05086	-4.616	-12.927	1.969
3	896	463	-22.74	0.32	-0.01196	0.329	3.676	0.762
4	785	78	-9.69	0.70	-0.11140	7.170	12.019	1.189
5	510	56	35.10	1.15	-0.12517	7.461	6.213	0.947
6	476	578	71.11	1.16	-0.03877	0.162	-6.840	3.082

Average temperatures at P = 3.0 kbar (for $x(H_2O) = 1.0$)

corresponding average T

```
avT sd fit
lsq 606 26 1.24
```

diagnostics on this average T

for 95% confidence, fit (= sd(fit) = sqrt(MSWD)) < 1.49 (but larger may be OK)

column:

1-3: result of doubling the uncertainty on ln a.

4: e^* = ln a residuals normalised to sd(ln a) : $|e^*| > 2.5$ suspect?

5: hat = diagonal elements of the hat matrix : hat > 0.43 influential.

6-7: observed and calculated activities of endmembers.

8-9: regression-through-origin x,y values

	T	sd	fit	e^*	hat	a(obs)	a(calc)	x	y
mu	605	27	1.23	-0.1	0.02	0.770	0.765	0.01	5.78
cel	610	21	0.99	-1.8	0.02	0.0180	0.00650	-0.01	-4.20
fcel	607	26	1.20	-0.7	0.01	0.0121	0.00663	-0.00	-2.64
pa	598	36	1.22	0.2	0.36	0.310	0.320	-0.03	-25.04
phl	607	27	1.23	-0.2	0.06	0.0480	0.0444	-0.01	-10.04
ann	593	22	0.97	1.5	0.09	0.0410	0.0742	-0.01	-14.24
east	607	26	1.21	0.5	0.03	0.0520	0.0630	0.01	6.16
an	606	27	1.23	0.1	0.01	0.540	0.542	0.00	4.17
ab	605	28	1.23	-0.1	0.04	0.650	0.647	0.01	8.76

py	609	27	1.21	0.5	0.12	0.000740	0.00108	0.02	13.76
gr	608	29	1.23	-0.3	0.20	8.00e-5	6.42e-5	-0.02	-18.07
alm	602	25	1.17	-0.6	0.02	0.210	0.193	0.01	5.69
q	606	26	1.24	0	0	1.00	1.00	0	0
H2O	606	26	1.24	0	0	1.00	1.00	0	0

For P = 3.0 kbar, av T = 606 jC, sd = 26, sigfit = 1.2

Prov 08 rim

an independent set of reactions has been calculated

Activities and their uncertainties

	mu	cel	fcel	pa	ppl	ann	east
a	0.770	0.0180	0.0121	0.314	0.0314	0.0620	0.0380
sd(a)/a	0.10000	0.55556	0.82645	0.14118	0.40620	0.32856	0.38888

	an	ab	py	gr	alm	q	H2O
a	0.540	0.650	0.000420	9.40e-5	0.220	1.00	1.00
sd(a)/a	0.06348	0.05000	0.77025	0.82002	0.15000	0	0

Independent set of reactions

- 1) $2pa + gr + 3q = 3an + 2ab + 2H_2O$
- 2) $mu + 2ppl + 6q = 3cel + py$
- 3) $cel + east = mu + ppl$
- 4) $mu + py + gr = ppl + 3an$
- 5) $mu + gr + alm = ann + 3an$
- 6) $3cel + alm = 3fcel + py$

Calculations for the independent set of reactions

at P = 3.0 kbar(for x(H₂O) = 1.0)

	T(P)	sd(T)	a	sd(a)	b	c	ln_K	sd(ln_K)	
1	593	24	146.82	0.69	-0.27567	9.333	8.879	0.894	
2	947	288	80.53	1.14	0.05086	-4.616	-12.644	2.010	
3	957	484	-22.74	0.32	-0.01196	0.329	3.565	0.797	
4	765	79	-9.69	0.70	-0.11140	7.170	11.999	1.215	
5	528	54	35.10	1.15	-0.12517	7.461	6.419	0.921	
6	439	579	71.11	1.16	-0.03877	0.162	-7.453	3.089	

Average temperatures at P = 3.0 kbar(for x(H₂O) = 1.0)

corresponding average T

	avT	sd	fit
lsq	597	25	1.18

diagnostics on this average T

for 95% confidence, fit (= sd(fit) = sqrt(MSWD)) < 1.49 (but larger may be OK)

column:

1-3: result of doubling the uncertainty on ln a.

4: e* = ln a residuals normalised to sd(ln a) : |e*| >2.5 suspect?

5: hat = diagonal elements of the hat matrix : hat >0.43 influential.

6-7: observed and calculated activities of endmembers.

8-9: regression-through-origin x,y values

	T	sd	fit	e* hat	a(obs)	a(calc)	x	y
mu	597	25	1.18	-0.0	0.02	0.770	0.768	0.01 6.46
cel	602	18	0.86	-2.0	0.02	0.0180	0.00582	-0.01 -3.83
fcel	598	24	1.16	-0.6	0.00	0.0121	0.00714	-0.00 -2.11
pa	592	35	1.18	0.2	0.38	0.314	0.321	-0.03 -25.97
phl	598	25	1.18	-0.1	0.05	0.0314	0.0301	-0.01 -9.29
ann	586	22	1.01	1.2	0.11	0.0620	0.0910	-0.02 -14.90
east	599	24	1.16	0.5	0.02	0.0380	0.0468	0.01 5.07
an	597	25	1.18	0.0	0.01	0.540	0.542	0.00 4.15
ab	596	26	1.18	-0.1	0.05	0.650	0.648	0.01 9.20
py	600	25	1.17	0.4	0.10	0.000420	0.000587	0.02 12.69
gr	599	27	1.18	-0.2	0.19	9.40e-5	8.04e-5	-0.02 -17.87
alm	593	24	1.13	-0.5	0.02	0.220	0.204	0.01 6.93
q	597	25	1.18	0	0	1.00	1.00	0 0
H2O	597	25	1.18	0	0	1.00	1.00	0 0

For P = 3.0 kbar, av T = 597 jC, sd = 25, sigfit = 1.2

Prov 09 core

an independent set of reactions has been calculated

Activities and their uncertainties

	mu	cel	fcel	pa	phl	ann	east
a	0.780	0.0137	0.0118	0.258	0.0332	0.0560	0.0380
sd(a)/a	0.10000	0.72993	0.84746	0.16517	0.40127	0.34308	0.38888

	an	ab	py	gr	alm	clin	daph

a 0.580 0.650 0.000540 9.70e-5 0.200 0.0116 0.0460
 sd(a)/a 0.05292 0.05000 0.75939 0.81920 0.15515 0.47772 0.37060

 ames q H2O
 a 0.0102 1.00 1.00
 sd(a)/a 0.48493 0

Independent set of reactions

- 1) $py + 2gr + 3ames + 6q = 6an + 3clin$
- 2) $3gr + 5ames + 11q = 9an + 4clin + 4H_2O$
- 3) $2pa + gr + 3q = 3an + 2ab + 2H_2O$
- 4) $5py + 3daph = 5alm + 3clin$
- 5) $cel + east = mu + phl$
- 6) $mu + 2phl + 6q = 3cel + py$
- 7) $phl + ames = east + clin$
- 8) $mu + gr + alm = ann + 3an$
- 9) $3mu + 2gr + alm + 6q = 3fcel + 6an$

Calculations for the independent set of reactions

at P = 3.0 kbar (for $x(H_2O) = 1.0$)

	T(P)	sd(T)	a	sd(a)	b	c	ln_K	sd(ln_K)	
1	522	84	1.95	1.89	-0.23927	11.749	23.123	2.744	
2	543	46	262.29	2.94	-0.62573	19.540	27.920	3.975	
3	614	24	146.82	0.69	-0.27567	9.333	9.455	0.903	
4	663	1418	-219.19	5.51	0.02224	0.155	25.440	4.279	
5	787	562	-22.74	0.32	-0.01196	0.329	3.907	0.925	
6	840	351	80.53	1.14	0.05086	-4.616	-13.336	2.455	

7	215	613	3.00	0.62	-0.01048	0.346	0.264	0.881
8	544	54	35.10	1.15	-0.12517	7.461	6.582	0.921
9	651	106	132.26	1.45	-0.21072	9.885	4.249	3.060

Average temperatures at P = 3.0 kbar (for x(H₂O) = 1.0)

corresponding average T

	avT	sd	fit
lsq	541	17	1.62

diagnostics on this average T

for 95% confidence, fit (= sd(fit) = sqrt(MSWD)) < 1.39 (but larger may be OK)

column:

1-3: result of doubling the uncertainty on ln a.

4: e* = ln a residuals normalised to sd(ln a) : |e*| >2.5 suspect?

5: hat = diagonal elements of the hat matrix : hat >0.53 influential.

6-7: observed and calculated activities of endmembers.

8-9: regression-through-origin x,y values

	T	sd	fit	e*	hat	a(obs)	a(calc)	x	y
mu	542	16	1.57	-0.8	0.00	0.780	0.724	-0.01	-3.69
cel	541	17	1.60	-0.8	0.00	0.0137	0.00778	-0.00	-1.12
fcel	541	17	1.61	-0.3	0.00	0.0118	0.00881	-0.00	-3.31
pa	533	13	1.19	2.8	0.04	0.258	0.411	-0.02	-19.23

phl	542	17	1.59	0.8	0.02	0.0332	0.0456	0.01	9.23
ann	538	15	1.40	2.1	0.01	0.0560	0.117	-0.01	-9.48
east	541	17	1.61	0.3	0.06	0.0380	0.0426	0.02	18.26
an	540	17	1.61	-0.2	0.00	0.580	0.573	0.00	3.84
ab	539	16	1.54	-0.9	0.00	0.650	0.623	0.01	5.82
py	539	18	1.61	-0.4	0.11	0.000540	0.000392	0.03	25.75
gr	538	17	1.58	1.1	0.06	9.70e-5	0.000242	-0.02	-19.81
alm	540	20	1.62	-0.1	0.18	0.200	0.198	0.04	33.16
clin	540	17	1.61	0.3	0.05	0.0116	0.0132	-0.02	-16.82
daph	553	19	1.50	-1.3	0.30	0.0460	0.0286	-0.05	-41.09
ames	542	17	1.58	-0.9	0.02	0.0102	0.00656	-0.01	-10.56
q	541	17	1.62	0	0	1.00	1.00	0	0
H2O	541	17	1.62	0	0	1.00	1.00	0	0

For P = 3.0 kbar, av T = 541 jC, sd = 17, sigfit = 1.6

Prov 09 inclusion

an independent set of reactions has been calculated

Activities and their uncertainties

	mu	cel	fcel	pa	phl	ann	east	
a	0.780	0.0137	0.0118	0.258	0.0332	0.0560	0.0380	
sd(a)/a	0.10000	0.72993	0.84746	0.16517	0.40127	0.34308	0.38888	
	an	ab	py	gr	alm	clin	daph	
a	0.580	0.650	0.000540	9.70e-5	0.200	0.00980	0.0490	
sd(a)/a	0.05292	0.05000	0.75939	0.81920	0.15515	0.48709	0.36184	

	ames	q	H2O
a	0.00970	1.00	1.00
sd(a)/a	0.48763	0	

Independent set of reactions

- 1) $py + 2gr + 3ames + 6q = 6an + 3clin$
- 2) $3gr + 5ames + 11q = 9an + 4clin + 4H_2O$
- 3) $2pa + gr + 3q = 3an + 2ab + 2H_2O$
- 4) $5py + 3daph = 5alm + 3clin$
- 5) $cel + east = mu + phl$
- 6) $mu + 2phl + 6q = 3cel + py$
- 7) $2phl + 3ames + 6q = 2mu + py + 3clin$
- 8) $mu + gr + alm = ann + 3an$
- 9) $3mu + 2gr + alm + 6q = 3fcel + 6an$

Calculations for the independent set of reactions

at P = 3.0 kbar (for $x(H_2O) = 1.0$)

	T(P)	sd(T)	a	sd(a)	b	c	ln_K	sd(ln_K)	
1	479	84	1.95	1.89	-0.23927	11.749	22.768	2.764	
2	536	47	262.29	2.94	-0.62573	19.540	27.497	4.001	
3	614	24	146.82	0.69	-0.27567	9.333	9.455	0.903	
4	687	1419	-219.19	5.51	0.02224	0.155	24.744	4.282	
5	787	562	-22.74	0.32	-0.01196	0.329	3.907	0.925	
6	840	351	80.53	1.14	0.05086	-4.616	-13.336	2.455	
7	234	1042	21.33	1.64	-0.01647	-2.591	-1.180	2.353	
8	544	54	35.10	1.15	-0.12517	7.461	6.582	0.921	
9	651	106	132.26	1.45	-0.21072	9.885	4.249	3.060	

Average temperatures at P = 3.0 kbar (for $x(\text{H}_2\text{O}) = 1.0$)

corresponding average T

	avT	sd	fit
lsq	541	17	1.63

diagnostics on this average T

for 95% confidence, fit (= $\text{sd}(\text{fit}) = \sqrt{\text{MSWD}}$) < 1.39 (but larger may be OK)

column:

1-3: result of doubling the uncertainty on $\ln a$.

4: $e^* = \ln a$ residuals normalised to $\text{sd}(\ln a)$: $|e^*| > 2.5$ suspect?

5: \hat{h} = diagonal elements of the hat matrix : $\hat{h} > 0.53$ influential.

6-7: observed and calculated activities of endmembers.

8-9: regression-through-origin x,y values

	T	sd	fit	e^*	\hat{h}	a(obs)	a(calc)	x	y
mu	542	17	1.58	-0.7	0.00	0.780	0.726	-0.01	-3.79
cel	541	17	1.61	-0.8	0.00	0.0137	0.00767	-0.00	-0.86
fcel	541	17	1.63	-0.3	0.00	0.0118	0.00893	-0.00	-3.34
pa	533	13	1.23	2.8	0.04	0.258	0.408	-0.02	-19.04
phl	542	17	1.61	0.7	0.02	0.0332	0.0435	0.01	9.62
ann	538	15	1.41	2.2	0.01	0.0560	0.120	-0.01	-9.46
east	541	17	1.63	0.2	0.06	0.0380	0.0413	0.02	18.13

an	540	17	1.63	-0.2	0.00	0.580	0.573	0.00	3.86
ab	539	16	1.56	-0.8	0.00	0.650	0.623	0.01	5.76
py	539	18	1.62	-0.5	0.10	0.000540	0.000372	0.03	25.37
gr	538	17	1.59	1.1	0.06	9.70e-5	0.000246	-0.02	-19.89
alm	540	20	1.63	-0.0	0.19	0.200	0.200	0.04	33.67
clin	539	17	1.62	0.4	0.05	0.00980	0.0122	-0.02	-17.05
daph	554	19	1.50	-1.4	0.29	0.0490	0.0300	-0.05	-40.84
ames	542	17	1.60	-0.9	0.02	0.00970	0.00614	-0.01	-10.88
q	541	17	1.63	0	0	1.00	1.00	0	0
H2O	541	17	1.63	0	0	1.00	1.00	0	0

For P = 3.0 kbar, av T = 541 jC, sd = 17, sigfit = 1.6

Prov 09 rim

an independent set of reactions has been calculated

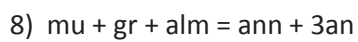
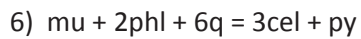
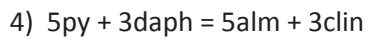
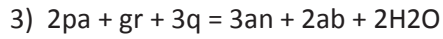
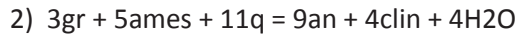
Activities and their uncertainties

	mu	cel	fcel	pa	phl	ann	east
a	0.780	0.0138	0.0119	0.261	0.0332	0.0560	0.0380
sd(a)/a	0.10000	0.72464	0.84034	0.16384	0.40127	0.34308	0.38888

	an	ab	py	gr	alm	clin	daph
a	0.590	0.650	0.000320	0.000119	0.170	0.0116	0.0460
sd(a)/a	0.05043	0.05000	0.78109	0.81364	0.17905	0.47772	0.37060

	ames	q	H2O
a	0.0103	1.00	1.00
sd(a)/a	0.48439	0	

Independent set of reactions



Calculations for the independent set of reactions

at P = 3.0 kbar (for $x(H_2O) = 1.0$)

	T(P)	sd(T)	a	sd(a)	b	c	ln_K	sd(ln_K)
1	547	84	1.95	1.89	-0.23927	11.749	23.311	2.741
2	534	46	262.29	2.94	-0.62573	19.540	27.412	3.960
3	608	24	146.82	0.69	-0.27567	9.333	9.278	0.896
4	606	1457	-219.19	5.51	0.02224	0.155	27.243	4.398
5	790	559	-22.74	0.32	-0.01196	0.329	3.900	0.921
6	770	350	80.53	1.14	0.05086	-4.616	-13.838	2.447
7	210	613	3.00	0.62	-0.01048	0.346	0.254	0.880
8	544	54	35.10	1.15	-0.12517	7.461	6.592	0.919
9	646	105	132.26	1.45	-0.21072	9.885	4.131	3.036

Average temperatures at P = 3.0 kbar (for $x(H_2O) = 1.0$)

corresponding average T

```
avT sd fit
lsq 534 17 1.57
```

diagnostics on this average T

for 95% confidence, fit (= sd(fit) = sqrt(MSWD)) < 1.39 (but larger may be OK)

column:

1-3: result of doubling the uncertainty on ln a.

4: e* = ln a residuals normalised to sd(ln a) : |e*| >2.5 suspect?

5: hat = diagonal elements of the hat matrix : hat >0.53 influential.

6-7: observed and calculated activities of endmembers.

8-9: regression-through-origin x,y values

	T	sd	fit	e*	hat	a(obs)	a(calc)	x	y
mu	535	16	1.53	-0.7	0.00	0.780	0.730	-0.01	-4.02
cel	534	17	1.56	-0.7	0.00	0.0138	0.00821	-0.00	-1.61
fcel	534	17	1.57	-0.3	0.00	0.0119	0.00914	-0.00	-3.32
pa	527	13	1.17	2.7	0.04	0.261	0.407	-0.02	-17.84
phl	535	17	1.55	0.7	0.02	0.0332	0.0438	0.01	8.84
ann	532	14	1.35	2.1	0.01	0.0560	0.116	-0.01	-8.11
east	534	17	1.57	0.0	0.06	0.0380	0.0384	0.02	18.66
an	534	17	1.57	-0.2	0.00	0.590	0.583	0.00	3.84
ab	533	16	1.50	-0.8	0.00	0.650	0.624	0.01	5.44
py	534	17	1.57	-0.0	0.11	0.000320	0.000312	0.03	25.39

gr	531	17	1.52	1.2	0.07	0.000119	0.000316	-0.02	-20.65
alm	533	20	1.57	-0.1	0.21	0.170	0.168	0.04	35.28
clin	533	17	1.57	0.4	0.05	0.0116	0.0138	-0.02	-16.78
daph	546	19	1.46	-1.2	0.27	0.0460	0.0290	-0.05	-38.26
ames	535	16	1.53	-1.0	0.02	0.0103	0.00647	-0.01	-9.89
q	534	17	1.57	0	0	1.00	1.00	0	0
H2O	534	17	1.57	0	0	1.00	1.00	0	0

For P = 3.0 kbar, av T = 534 jC, sd = 17, sigfit = 1.6

Prov 09 utan klorit (prograde)

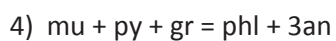
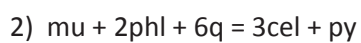
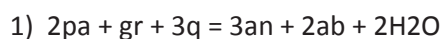
an independent set of reactions has been calculated

Activities and their uncertainties

	mu	cel	fcel	pa	phl	ann	east
a	0.780	0.0132	0.0114	0.226	0.0325	0.0560	0.0370
sd(a)/a	0.10000	0.75758	0.87719	0.17972	0.40317	0.34308	0.39138

	an	ab	py	gr	alm	q	H2O
a	0.530	0.650	0.000520	9.40e-5	0.200	1.00	1.00
sd(a)/a	0.06627	0.05000	0.76107	0.82002	0.15515	0	0

Independent set of reactions



5) $\mu + gr + alm = ann + 3an$

6) $3cel + alm = 3fcel + py$

Calculations for the independent set of reactions

at $P = 3.0$ kbar (for $x(H_2O) = 1.0$)

	T(P)	sd(T)	a	sd(a)	b	c	ln_K	sd(ln_K)	
1	615	24	146.82	0.69	-0.27567	9.333	9.480	0.923	
2	825	362	80.53	1.14	0.05086	-4.616	-13.443	2.531	
3	769	576	-22.74	0.32	-0.01196	0.329	3.949	0.948	
4	590	79	-9.69	0.70	-0.11140	7.170	11.751	1.210	
5	522	55	35.10	1.15	-0.12517	7.461	6.343	0.929	
6	506	668	71.11	1.16	-0.03877	0.162	-6.392	3.563	

Average temperatures at $P = 3.0$ kbar (for $x(H_2O) = 1.0$)

corresponding average T

	avT	sd	fit
lsq	630	24	0.94

diagnostics on this average T

for 95% confidence, $fit (= sd(fit) = \sqrt{MSWD}) < 1.49$ (but larger may be OK)

column:

1-3: result of doubling the uncertainty on $\ln a$.

4: $e^* = \ln a$ residuals normalised to $sd(\ln a)$: $|e^*| > 2.5$ suspect?

5: hat = diagonal elements of the hat matrix : hat >0.43 influential.

6-7: observed and calculated activities of endmembers.

8-9: regression-through-origin x,y values

	T	sd	fit	e*	hat	a(obs)	a(calc)	x	y
mu	629	25	0.93	-0.2	0.01	0.780	0.765	0.00	4.63
cel	632	24	0.84	-1.0	0.01	0.0132	0.00601	-0.00	-2.23
fcel	631	24	0.92	-0.5	0.00	0.0114	0.00767	-0.00	-1.02
pa	617	36	0.91	0.3	0.46	0.226	0.239	-0.03	-25.83
phl	634	25	0.91	-0.4	0.06	0.0325	0.0276	-0.01	-8.40
ann	620	25	0.70	1.2	0.07	0.0560	0.0841	-0.01	-11.23
east	632	24	0.91	0.5	0.02	0.0370	0.0454	0.01	4.44
an	631	24	0.93	0.1	0.01	0.530	0.535	0.00	3.84
ab	629	25	0.93	-0.1	0.04	0.650	0.647	0.01	7.19
py	634	25	0.92	0.4	0.09	0.000520	0.000723	0.01	10.85
gr	637	26	0.89	-0.6	0.19	9.40e-5	5.66e-5	-0.02	-15.86
alm	627	25	0.86	-0.5	0.02	0.200	0.185	0.01	5.14
q	630	24	0.94	0	0	1.00	1.00	0	0
H2O	630	24	0.94	0	0	1.00	1.00	0	0

For P = 3.0 kbar, av T = 630 jC, sd = 24, sigfit = 0.9

2. EMPA – fullständiga mineralanalyser

I denna bilaga presenteras resultatet från EMPA-analys i Uppsala. Värdena anges i viktprocent av oxiderna i den analyserade mineralen. Vissa mineraler har analyserats flera gånger och förekommer därför fler än en gång.

Na2O	Al2O3	SiO2	MgO	CaO	MnO	K2O	TiO2	Cr2O3	FeO	Total	Prov_mineral
0,6946	36,3	45,47	0,5814	0,0414	0,1027	10,24	0,464 4	0,0262	1,245 2	95,165 9	12PU06_A1_mu
0,3027	20,37	34,96	8,28	0	0,2936	8,86	1,83	0,0598	19,98	94,936 1	12PU06_A1_bt
0,5389	20,39	33,99	7,91	0	0,2317	9,03	1,81	0	20,27	94,170 6	12PU06_A1_bt2
7,58	25,51	59,48	0,0009	6,81	0,0355	0,1034	0,012 3	0,0839	0,149 8	99,765 9	12PU06_A1_pl
0,0004	21,55	36,25	2,14	1,46	9,72	0	0,015 9	0,0167	29,32	100,47 29	12PU06_A2_grt_core
0,0173	21,71	36,47	1,86	1,2682	9,78	0,0097	0,004 2	0	29,73	100,84 93	12PU06_A2_grt_rim
0,7526	36,23	45,66	0,6129	0	0	10,08	0,32	0	0,798 4	94,454	12PU06_A2_mu2
0,2836	18,41	63,68	0,0908	0,0197	0,0507	15,81	0,035 2	0,012	0,204 1	98,596 1	12PU06_A2_ksp
0	20,05	26,94	12,3	0,0266	0,4788	0,518	0,247 4	0,0546	27,74	88,355 5	12PU06_A2_chl3
0,0402	20,6	25,81	11,97	0,0484	0,4327	0,0386	0,069 2	0,0021	28,44	87,451 3	12PU06_A2_chl4
0,1191	20,36	27,26	12,52	0,0557	0,6662	0,2531	0,110 6	0,0084	26,01	87,363 2	12PU10_A1_chl1
0,1073	20,69	27,17	12,63	0,0488	0,6273	0,104	0,089 1	0,0042	25,67	87,140 8	12PU10_A1_chl2
7,42	25,5	59,34	0,0056	7,01	0,0202	0,2076	0	0,012	0,005 7	99,521 2	12PU10_A1_pl
0,0584	21,4	36,67	1,83	1,59	13,69	0	0	0	25,84	101,07 83	12PU10_A2_grt_core
0,0087	21,38	36,75	1,76	1,43	13,91	0,0373	0,052 7	0	25,6	100,92 86	12PU10_A2_grt_rim
0,3421	35,34	45	0,974	0	0,0206	10,52	0,372 2	0	1,39	93,959	12PU10_A2_mu
0,013	21,17	36,46	1,78	1,57	14,24	0	0	0,0021	25,19	100,42 5	12PU19_A1_grt_core
0,0071	21,28	36,59	1,5519	1,68	14,79	0,0143	0,000 5	0,0697	24,95	100,93 34	12PU19_A1_grt_rim
0,2305	19,58	35,16	8,79	0,0459	0,4148	9,16	1,638 6	0,0177	19,5	94,537 6	12PU19_A1_bt
0,1045	21,01	36,41	1,72	1,3379	14,49	0,0188	0,018 4	0,0084	25,45	100,56 79	12PU19_A1_grt_rim2
7,33	25,89	58,62	0	7,41	0,096	0,2428	0,015	0,0048	0	99,608	12PU19_A1_pl

							2			8	l
0,04	20,93	26,1	12,71	0,011	0,9028	0,4166	0,145	0	27,67	88,9255	12PU19_A1_c hl1
0	20,79	25,83	12,94	0,0339	0,9542	0,0662	0,0176	0,0208	28,25	88,9028	12PU19_A1_c hl2
0,3892	35,13	46,06	0,8334	0,001	0,0129	10,84	0,3606	0,0095	0,9893	94,626	12PU19_A1_ mu
7,3	25,52	59,15	0,0207	7,37	0,0677	0,1395	0,0139	0,0095	0,0486	99,64	12PU04_A1_p l
0	21,09	36,54	1,4309	1,6	14,08	0	0	0	25,52	100,2608	12PU04_A2_g rt_core
0,0234	20,85	36,61	1,2827	1,47	15,38	0,0554	0,0083	0	24,32	99,9998	12PU04_A2_g rt_rim
0,0471	19,39	34,38	8,25	0	0,5526	8,76	2,11	0	22,21	95,6998	12PU04_A2_b t
0,4471	35,32	45,53	0,7083	0	0,0636	10,53	0,4309	0	1,0739	94,1039	12PU04_A2_ mu
0,48	35,69	45,73	0,6821	0	0	10,52	0,3793	0,0519	1,0985	94,6319	12PU04_A2_ mu2
0,0902	21,19	36,69	1,94	1,3542	11,31	0,011	0,0188	0,0125	28,29	100,9066	12PU08_A1_g rt_core
0	21,32	37,03	1,6323	1,45	12,14	0,018	0	0,0188	27,83	101,439	12PU08_A1_g rt_rim
0,0421	20,58	34,76	8,12	0,065	0,7006	8,79	1,68	0,1094	20,8	95,6471	12PU08_A1_b t
0,3357	20,65	35,44	9,83	0,0388	0,5325	8,96	1,74	0,0177	18,3	95,8447	12PU08_A1_i ncl
7,43	25,76	59,25	0,0065	7,35	0	0,1272	0	0	0,0717	99,9955	12PU08_A1_p l
0,5925	35,2	45,79	0,6788	0,0133	0,0397	10,34	0,3491	0,0473	0,8323	93,8831	12PU08_A2_ mu
0,0286	21,2	36,82	1,69	1,52	13,3	0,0018	0,011	0,0229	26,65	101,2443	12PU09_A1_g rt_core
0,0699	21,11	36,88	1,83	1,47	13,25	0	0,0099	0,0042	26,74	101,364	12PU09_A1_g rt_core2
0	20,9	26,41	11,45	0,0135	0,949	0,5074	0,1523	0,0332	28,28	88,6955	12PU09_A1_g rt_incl
0,0176	20,38	26,68	11,77	0,0299	0,789	0,1428	0,1183	0	27,73	87,6577	12PU09_A1_c hl
0,0071	20,82	36,93	1,4966	1,61	14,31	0,0215	0,0292	0	25,76	100,9843	12PU09_A1_g rt_rim
0	21	37,1	1,79	1,46	12,78	0,0037	0,0243	0,0316	26,96	101,1495	12PU09_A1_g rt_core3
0,1032	20,62	35,18	7,79	0,0126	0,3309	9,38	1,76	0,0177	19,66	94,8545	12PU09_A1_b t
7,47	26,52	58,41	0,0063	7,58	0,051	0,1666	0,028	0	0,0054	100,2373	12PU09_A1_p l
0,4737	35,57	45,38	0,7231	0	0,016	10,7	0,3731	0,0377	1,1105	94,3841	12PU09_A1_ mu