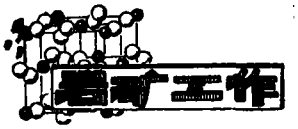

尼格里岩石化学计算的电算程序

天津地质矿产研究所　秦正永

笔者在研究五台山变质岩的过程中，用DJS—6算法语言，拟编了尼格里岩石化学计算的电算程序，在国产108机上一次可同时计算约600个岩石化学分析数据，取得了良好的效果。简要过程如下：

（1）将岩石化学分析结果的重量百分数，换算成分子数；

（2）将Al_2O_3，FeO′（包括Fe_2O_3和FeO）+MgO+MnO，CaO，Na_2O+K_2O的分子数的总和S换算成100，即

$AL = Al_2O_3 \times 100/S$

$FM = (FeO' + MgO + MnO) \times 100/S$

$C = CaO \times 100/S$

$ALK = (Na_2O + K_2O) \times 100/S$；

（3）计算参数SI，即$SI = (SiO_2/S) \times 100$；

（4）计算补充参数

$TI = TiO_2 \times 100/S$

$P = P_2O_5 \times 100/S$

$H = H_2O \times 100/S$

$K = K_2O/(Na_2O + K_2O)$

$MG = MgO/(2Fe_2O_3 + FeO + MnO + MgO)$

$F = 2Fe_2O_3/(2Fe_2O_3 + FeO + MnO + MgO)$

$T = AL - (ALK + C)$；

（5）上述代表岩石中SiO_2饱和程度的石英数QZ，可根据T值的大小分别按下列各式计算

当T为负，且AL＜ALK时，QZ=SI-(100-3AL+ALK)，否则，当T为负时则QZ=SI-(100+4ALK)；当T为正，且50＜AL＞ALK+C时，QZ=SI-(100+4ALK+0.5T)，否则，当T为正时则QZ=SI-(100+4ALK)；

（6）计算比值C/FM，以第（2）项所得C，FM值比即可求得。

标志符说明

N—样品数（12—岩石化学分析项目数）；

I—整型量，样品顺序号；

J—整型量，岩石化学分析项目顺序号，其中，J=1(SiO_2)；2(TiO_2)，3(P_2O_5)，4(Al_2O_3)，5(Fe_2O_3)，6(FeO)，7(MnO)，8(MgO)，9(CaO)，10(Na_2O)，11(K_2O)，12(H_2O)，13(SUM)；

A〔1：N，1：12〕—二维数组，存放岩石化学全部原始数据；

ME〔1：12〕—氧化物的分子量；

R〔1：14〕—一维数组，存放计算最终结果；

F_1—实型量，等于Fe_2O_3分子数×2；

F_2—实型量，等于F_1+FeO分子数；

S—实型量，等于$Al_2O_3+Fe_2O_3+FeO+MgO+MnO+CaO+Na_2O+K_2O$各氧化物分子数的总和；

SUM—实型量，12项分析结果总和。

使用说明

（1）N预先在控制台变量III上给出；

（2）若按样品穿孔，IIIB=0，按变量穿孔，IIIB≠0；

（3）其他微量的Cr_2O_3，NiO，CoO，BaO，SrO，Li_2O和ZrO_2等，因一般未做分析，故程序中未予考虑。如果分析了这些元素，则可预先归并，将Cr_2O_3，并入Al_2O_3，NiO和CoO并入FeO，BaO和SrO并入CaO，Li_2O并入Na_2O+K_2O。

程序

```
'Page'
1  'Begin'
2  'Integer'N,Dy;
3  N=III; Dy=IIIB;
4  'Begin' 'Integer'I,J,L,K;
5  'Real'F1,F2,S,SUM;
6  'Array'A[1:N,1:12],ME[1:12],R[1:14];
7  'Procedure'Out 1;
8  'Begin'L:=0; Page; Line; Line;
9  Line; Line; Line;
```

```
10 Space(8); Puts('(NO')),
11 Space(6); Purs('(SiO2')),
12 Space(6); Puts('(TiO2')),
13 Space(6); Puts('(P2O5')),
14 Space(5); Puts('(Al2O3')),
15 Space(5); Puts('(Fe2O3')),
16 Space(7); Puts('(FeO')),
17 Space(7); Puts('(MnO')),
18 Space(7); Puts('(MgO')),
19 Space(7); Puts('(CaO')),
20 Space(6); Puts('(Na2O')),
21 Space(7); Puts('(K2O')),
22 Sapce(7); Puts('(H2O')),
23 Space(7); Puts('(SUM)),
'Page'
1 Line'End',
2 'Procedure'Out2;
3 'Begin'L:=0; Page; Line; Line; Line;
  Line; Line; Space(10); Puts('(JI SUAN
  JIE GUO'); Line; Line;
4 Space(7); Puts; ('(NO')),
5 Space(7); Puts('(AL')),
6 Space(7); Puts('(FM')),
7 Space(8); Puts('(C')),
8 Space(6); Puts('(ALK')),
9 Space(7); Puts('(SI')),
10 Space(7); Puts('(TI')),
11 Space(8); Puts('(P')),
12 Space(8); Puts('(H')),
13 Space(8); Puts('(K')),
14 Space(7); Puts('(MG')),
15 Space(8); Puts('(F')),
16 Space(8); Puts('(T')),
17 Space(7); Puts('(QZ')),
18 Space(5); Puts('(C/FM')); Line;
19 'End';
'Page'
1 'IF'Dy=0'Then'Input(A)'I/se';
2 'Begin' 'Array'AA[1:12, 1:N];
3 Input(AA);
4 'For'I:=1 'Step'1'Until'12'DO'
5 'For' J:=1'Step'1'Until'N'DO'
6 A[J, I]:=AA[I, J]
7 'End';
8 Out 1;
9 'For'I:=1'Step'1 'Until'N'DO'
10 'Begin'
11 PUTVI(I, 10); SUM:=0;
12 'For' J:=1 'Step' 1 'Until'12'DO'
13 'Begin'
14 SUM:=SUM+A(I, J);
15 PUTVR(A(I, J), 31, 0);
16 'End';
17 PUTVR(SUM, 10, 3);
18 Line; L:=L+1;
19 'IF'L=45'Then'Out 1;
20 'End';
'Page'
1 Out 2;
2 ME(1):60.6; ME(2):=79.90;
3 ME(3):=142.04; ME(4):=101.94;
4 ME(5):=159.68; ME(6):=71.94;
5 ME(7):=70.93; ME(8):=40.32;
6 ME(9):=56.08; ME(10):=61.994;
7 ME(11):=94.20; ME(12):=18.016;
8 'For'I:=1 'Step' 1 'Until'N'DO'
9 'Begin'
10 'For'J:=1 'Step' 1 'Until' 12'DO'
11 A(I, J):=(A(I, J)/ME(J))*1000;
12 F1:=A(I, 5)*2;
13 F2:=F1+A(I, 6);
14 A(I, 7):=F2+A(I, 7)+A(I, 8);
15 A(I, 10):=A(I, 10)+A(I, 11);
16 S:=A(I, 4)+A(I, 7)+A(I, 9)+A(I,10);
17 S:=100/S;
18 R(1):=A(I, 4)*S;
19 R(2):=A(I, 7)*S;
20 R(3):=A(I, 9)*S;
21 R(4):=A(I, 10)*S;
22 R(5):=A(I, 1)*S;
23 R(6):=A(I, 2)*S;
24 R(7):=A(I, 3)*S;
25 R(8):=A(I,12)*S;
26 R(9):=A(I, 11)/A(A(I, 10);
27 R(10):=A(I, 8)/A(I, 7);
28 R(11):=F1/A(I, 7);
29 R(12):=R(1)-(R(4)+R(8));
'Page'
1 'IF'R(12)'LS'0 'Then'
2 'Begin'
3 'IF'R(1)'LS'R(4)'Then'
4 R(13):=R(5)-(100+8*R(1)+R(4))
5 'ELSE'
6 R(13):=R(5)-(100+4*R(4))
7 'End' 'ELSE'
8 'IF'R(1)'GR'50'Then'
9 R(13):=R(5)-(100+4*R(4)+0.5*R
  (12))
10 'ELSE'R(13):=R(5)-(100+4*R(4));
11 R(14):=R(3)/R(2);
12 PUTVI(I, 9);
13 'For'K:=1'Step'1'Until'14'DO'
14 PUTVR(R(K), 9, 3); Line;
15 L:=L+1;
16 'IF'L=45'Then'
17 Out2; 'End'
18 'End'
19 'End'
```

本程序以宽行输出原始数据及计算结果。电算实例及计算结果见附表。

尼格里法岩石化学电算实例（样品取自山西五台山区五台群）

1.原始数据

No	SiO_2	TiO_2	P_2O_5	Al_2O_3	Fe_2O_3	FeO	MnO	MgO	CaO	Na_2O	K_2O	H_2O	SUM	岩石名称
1	50.590	0.790	0.040	14.080	2.550	8.320	0.150	5.780	8.950	3.230	0.500	0.890	95.870	角闪片岩
2	49.820	1.050	0.110	13.920	3.410	9.670	0.170	6.550	8.930	2.430	0.930	0.700	97.690	细碧岩
3	48.760	1.250	0.050	14.090	3.320	9.480	0.130	6.370	9.000	2.570	0.830	0.950	96.800	细碧岩
4	46.290	0.450	0.140	12.720	2.430	7.400	0.140	7.950	11.890	1.200	0.200	3.840	94.650	细碧岩
5	60.230	0.370	0.010	15.050	0.920	3.740	0.100	2.620	4.880	4.840	0.350	1.910	95.020	角斑质凝灰岩
6	52.580	1.150	0.080	16.110	10.820	1.890	0.130	6.470	3.210	2.170	0.980	4.280	99.870	角闪片岩
7	46.450	0.000	0.080	12.670	10.450	2.020	0.130	4.070	8.850	1.170	0.140	2.610	98.640	绿泥透闪片岩
8	44.580	0.650	0.050	12.160	4.620	9.660	0.250	4.790	17.210	0.150	0.070	0.640	94.830	细碧岩
9	46.940	0.700	0.050	13.210	2.100	8.520	0.140	6.500	7.980	2.180	0.180	4.660	93.160	黑云绿泥片岩
10	57.110	0.450	0.130	14.700	1.160	5.170	0.070	4.600	6.740	2.600	0.540	2.440	95.710	黑云斜长片岩
11	48.430	0.220	0.100	14.250	3.640	8.650	0.100	6.170	12.070	1.060	0.270	1.650	96.610	细碧岩
12	49.890	0.650	0.050	15.130	2.590	6.900	0.130	7.140	8.070	1.720	0.600	1.940	94.810	细碧质凝灰岩

2.计算结果　　JI SUAN JIE GUO

No	AL	FM	C	ALK	SI	II	P	H	K	MG	F	T	QN	C/FM
1	21.309	45.212	24.622	8.857	129.952	1.525	0.043	7.621	0.092	0.489	0.109	-12.170	-5.476	0.545
2	19.881	49.790	23.184	7.144	120.772	1.913	0.113	5.657	0.201	0.475	0.125	-10.447	-7.805	0.466
3	20.262	38.843	23.526	7.369	119.014	2.293	0.052	7.750	0.175	0.474	0.125	-10.633	-10.461	0.482
4	18.065	48.150	30.695	3.110	111.583	0.815	0.143	30.858	0.099	0.593	0.092	-15.740	-0.856	0.638
5	33.077	29.103	19.496	18.324	224.677	1.037	0.016	23.752	0.045	0.500	0.089	-4.743	51.381	0.670
6	27.025	55.422	9.786	7.765	149.769	2.461	0.096	40.625	0.229	0.495	0.418	9.472	18.650	0.177
7	15.302	62.761	19.430	2.507	95.220	0.000	0.069	17.837	0.073	0.685	0.257	-6.634	-14.806	0.310
8	16.037	42.279	41.259	0.425	99.793	1.094	0.047	4.776	0.235	0.376	0.184	-25.647	-1.908	0.976
9	21.007	49.616	23.067	6.010	126.695	1.420	0.057	41.930	0.052	0.524	0.085	-8.071	2.654	0.462
10	28.081	39.232	23.404	9.283	185.166	1.097	0.178	26.373	0.120	0.566	0.072	-4.606	48.044	0.597
11	20.106	46.065	30.957	2.872	115.982	0.396	0.101	13.173	0.144	0.478	0.142	-13.722	4.495	0.672
12	23.421	49.488	22.708	5.383	131.081	1.284	0.056	16.992	0.187	0.576	0.106	-4.670	9.548	0.468