

岩浆岩分类命名的袖珍计算机程序设计

陈良忠

(云南省地质科学研究所)

用BASIC语言编制了根据岩石化学分析数据对岩浆岩分类、命名的PC—1500袖珍计算机程序。该程序采用CIPW标准矿物计算法和A. Rittmann长石配分法相结合,以Streckeisen APQF双三角图对岩石进行分类、命名,效果较好。

关键词: 岩浆岩; 分类命名; 计算机程序



岩石矿物工作

根据岩石化学数据对岩浆岩进行分类、命名的方案甚多。CIPW标准矿物法简单易算,但解决不了将平均长石成分Or、Ab、An分配成斜长石(P)和碱性长石(A)。而A、P又是A. Streckeisen APQF双三角图分类、命名的关键值。A. Rittmann稳定矿物组合算法^[1]更接近实际情况,但计算方法较为繁杂,使其使用受到一定限制。1982年吴利仁提出了将CIPW法与A. Rittmann法中的长石配分法相结合,对火山岩进行分类、命名的计算方法^[2]。笔者认为该方法较合理,且适用。但手算仍较困难,且易出错。笔者参考吴利仁提出的方法,编制了整个计算过程及岩石分类、命名的PC-1500袖珍计算机程序。使用该程序能提高精度和速度。

分类、命名方案

该程序对深成岩的分类、命名采用1972年国际地科联推荐的方案。对火山岩采用A. Streckeisen(1979)提出的火山岩分类、命名方案。该方案采取对主要火山岩与深成岩分类命名相一致的APQF双三角形图解。

笔者将二者合在一张图上(图1),图上对应的岩石名称见表1。

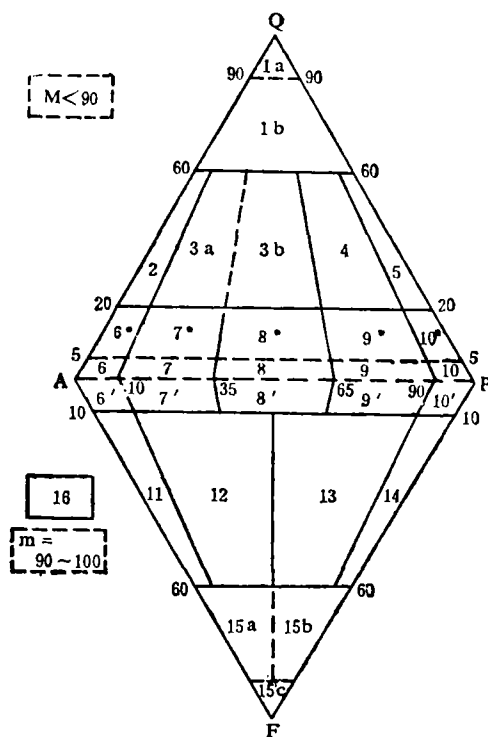


图1 岩浆岩分类、命名图解

(据国际地科联, 1972, 和A. Streckeisen, 1979, 略有修改)

Q—石英, A—碱性长石(包括钠长石 An_{0-5});
P—斜长石 An_{5-100} ; F—似长石, M—铁镁暗色矿物及有关矿物、副矿物等

图解上的名称

表 1

深成岩岩石名称	火山熔岩岩石名称
1a. 石英岩 Quartzolite	硅质岩 Silicollite
1b. 富石英花岗岩 Qz-Rich Granitoid	富硅流纹岩 Qz-Rich Rhyolite
2. 碱长花岗岩 Kf.Granite	碱长流纹岩 Kf.Rhyolite
3a. 花岗岩 Granite	流纹岩 Rhyolite
3b. 二长花岗岩 Monzo-Granite	英安流纹岩 Daciteliparite
4. 花岗闪长岩 Granodiorite	英安岩 Dacite
5. 英云闪长岩 Tonanite	安山质英安岩 Andesitic Dacite
6* 石英碱长正长岩 Qz-Kf.Syenite	石英碱长粗面岩 Qz-Kf.Trachyte
7* 石英正长岩 Qz-Syenite	石英粗面岩 Qz-Trachyte
8* 石英二长岩 Qz-Monzonite	石英安粗岩 Qz-Latite
9* 石英二长闪长岩/ 石英二长辉岩 Qz-Monzodiorite/ Qz-Monzogabbro	石英粗安岩/ 石英粗面玄武岩 Qz-Trachyandesite/ Qz-Trachybasalt
10* 石英闪长岩/ 石英辉长岩 Qz-Diorite/ Qz-Gabbro	石英安山岩/ 安粗玄武岩 Qz-Andesite/ Latitebasalt
6. 碱长正长岩 Kf.Syenite	碱长粗面岩 Kf.Trachyte
7. 正长岩 Syenite	粗面岩 Trachyte
8. 二长岩 Monzonite	安粗岩 Latite
9. 二长闪长岩/ 二长辉长岩 Monzodiorite/ Monzogabbro	粗面安山岩/ 粗面玄武岩 Trachyandesite/ Trachybasalt
10. 闪长岩/辉长岩 Diorite/Gabbro	安山岩/ 玄武岩 (拉斑玄武岩) Andesite/ Tholeiite
6' 含似长石碱长正长岩 Foid-bearing Kf. Syenite	含似长石碱长粗面岩 Foid-bearing Kf. Trachyte
7' 含似长石正长岩 Foid-bearing Syenite	含似长石粗面岩 Foid-bearing Trachyte
8' 含似长石二长岩 Foid-bearing Monzonite	含似长石安粗岩 Foid-bearing Latite
9' 含似长石二长闪长岩/ 二长辉长岩 Foid-bearing Monzodiorite/ Monzogabbro	含似长石粗面安山岩/ 含似长石粗面玄武 Foid-bearing Trachyandesite Foid-bearing Trachybasalt

深成岩岩石名称	火山熔岩岩石名称
10' 含似长石闪长岩/ 辉长岩 Foid-bearing Diorite/Gabbro	含似长岩安山岩/碱玄岩 Foid-bearing Andesite/ Alkali basalt
11. 似长正长岩 Foid Syenite	响岩 Phonolite
12. 似长二长正长岩 Foid Monzosyenite	灰玄响岩
13. 似长二长闪长岩/ 似长二长辉岩 同义词碱性辉长岩 Essexite	响灰玄岩/响碧玄岩 Phono-tephrite/ Phono-basanite
14. 似长闪长岩/ 似长辉长岩 同义词霞斜岩 Theralite	灰玄岩/碧玄岩 Tephrite/Basanite
15. 似长石 Foidolites	———
15a. ———	响似长岩 Phonolitic Foidite
15b. ———	灰玄似长岩 Tephritic Foidite
15c. ———	似长岩 Foidolites
16. 超镁铁岩 Ultramafic rocks	超镁铁岩 Ultramafic rocks

说明:

1. 为使火山岩与深成岩相对应, 在 1 区 Q 为 90% 处为界分为 1a 区和 1b 区 (原未分)、其名称见表 1。

2. 闪长岩类与辉长岩类的分界, 以斜长石牌号为 50% 为界。An > 50% 为闪长岩类, An < 50% 为辉长岩类。

3. 安山岩和玄武岩的区分参考图 2。

4. 13 区和 14 区如为火山岩, 当橄榄石含量 > 10% 时, 则以“碧玄岩”代替“灰玄岩”。

5. 玄武岩进一步划分为拉斑玄武岩 (Q < 5%, 一般情况)、碱性玄武岩 (F < 10%)。

计算步骤及计算机程序设计

1. 计算步骤

第一步: 由岩石化学数据计算 CIPW 标

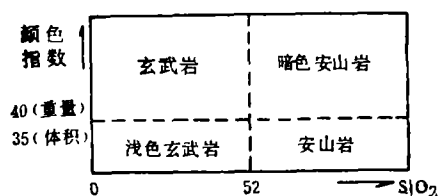


图2 区分玄武岩及安山岩图解
(A. Streckeisen, 1973)

准矿物分子数及体积百分数。

第二步：长石配分。按CIPW法计算出的长石，只是一种平均长石成分。若按A. Streckeisen双三角图分类、定名，还必须

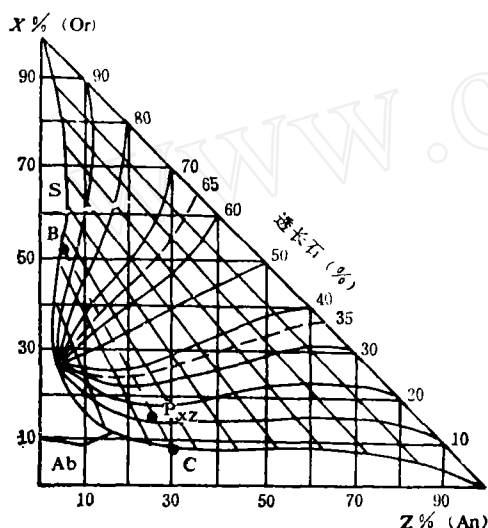


图3 纯火山相共存长石图
(据A. Rittmann, 1973)

求出碱性长石和斜长石的含量。目前常用的方法有三氏法、勒·曼特尔法和里特曼法。前两种方法简单易行，但使用有一定局限。里曼特法目前看来是比较合理的一种长石配分法，它可以求出两种共存长石的组成成分和相对含量。本程序采用里特曼法对长石进行配分。

里特曼法是根据实验资料编制而成的纯火山相和深成相（图3、4）的两幅长石诺模图，根据诺模图可求出两个共存长石的组成成分和含量^[1]。其方法如下：

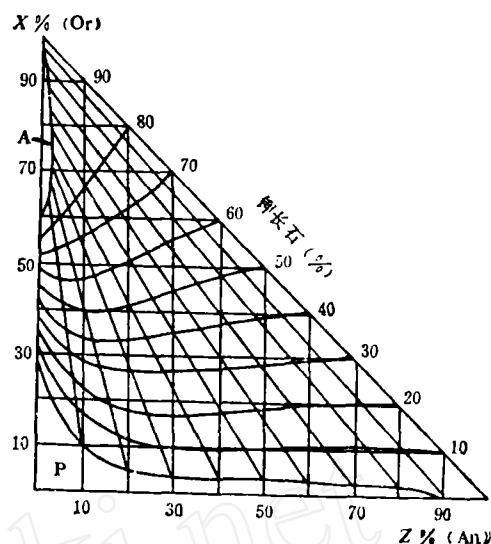


图4 纯深成相中共存的长石
(据A. Rittmann, 1973)

(1) 由CIPW法计算出的Or、Ab、An（分子数），计算投图坐标：

$$X' = \frac{2Or}{2Or + 2Ab + An}$$

$$Y' = \frac{2Ab}{2Or + 2Ab + An}$$

$$Z' = \frac{An}{2Or + 2Ab + An}$$

(2) 用 X' 、 Z' 可在图上（图3）得一点 P_{xz} 。如果此点落入混溶区，则稳定矿物组合中只有一种长石（透长石、歪长石或斜长石），即所有长石分子进入这一种长石中。若该点落在混溶间断区，则有两种长石共存，其成分可通过 P_{xz} 点连接线的两个端点B、C的坐标求得。而两种长石的相对百分含量与通过 P_{xz} 连线的两个终点的长度成反比。图中，这一比值可在表示全部长石中透长石含量的曲线（每条曲线代表10%）之间内插。

例如： P_{xz} 点落在混溶间断区的B—C连线上（图3）。B点位于S（透长石）区的边界线上，其坐标为 $X_B = 65$ ， $Z_B = 4$ ， $Y_B =$

100-56-4=40。故透长石的组成为Or₅₆Ab₄₀An₄。同法可求出C点的坐标为: $X_c = 9$, $Y_c = 61$, $Z_c = 30$ 。则斜长石的组成为Or₉Ab₆₁An₃₀。可得透长石分子数(S_m): 斜长石分子数(P_m)=17:83。

第三步: 计算A、P、Q、F百分比。

①求透长石中Ab全岩标准矿物总体积的百分数 A_{Ab}

$$A_{Ab} = V_Y K_Y$$

其中: V_Y ——岩石CIPW标准矿物Ab的体积百分数; K_Y ——透长石中Ab分子数占岩石中Ab总分子数的比值(透长石中Ab分子数等于透长石分子数 S_m 乘透长石中Ab的分子百分数 Y_B)。

用同样方法, 求出透长石中An、Or占全岩标准矿物总体积的体积百分数 A_{An} 、 A_{Or} 。

② 求共存的两种长石的含量
岩石中透长石的体积(%)

$$A = A_{Or} + A_{Ab} + A_{An}$$

则, 岩石中斜长石的体积(%):

$$P = (V_X + V_Y + V_Z) - A$$

其中: V_X 、 V_Y 、 V_Z 分别为岩石CIPW标准矿物Or、Ab、An的体积百分数。

③ 将求得的A、P与Q(或F)计为百分之百。再将A、P、Q(或F)投影到A.Streckeisen双三角图中, 就可得到对应的岩石名称。

2. 计算机程序设计

程序总框图见图5。该程序的难点是A.Rittmann长石配分法。限于篇幅, 这里仅作简要介绍。

笔者从X轴和Z轴两个方向拟合图3、图4的边界, 各得两个5次多项式, 其表达式如下:

$$\begin{aligned} X \text{轴方向上为: } X = & a_0 + a_1 z + a_2 z^2 \\ & + a_3 z^3 + a_4 z^4 \\ & + a_5 z^5 \end{aligned}$$

$$Z \text{轴方向上为: } Z = b_0 + b_1 x + b_2 x^2$$

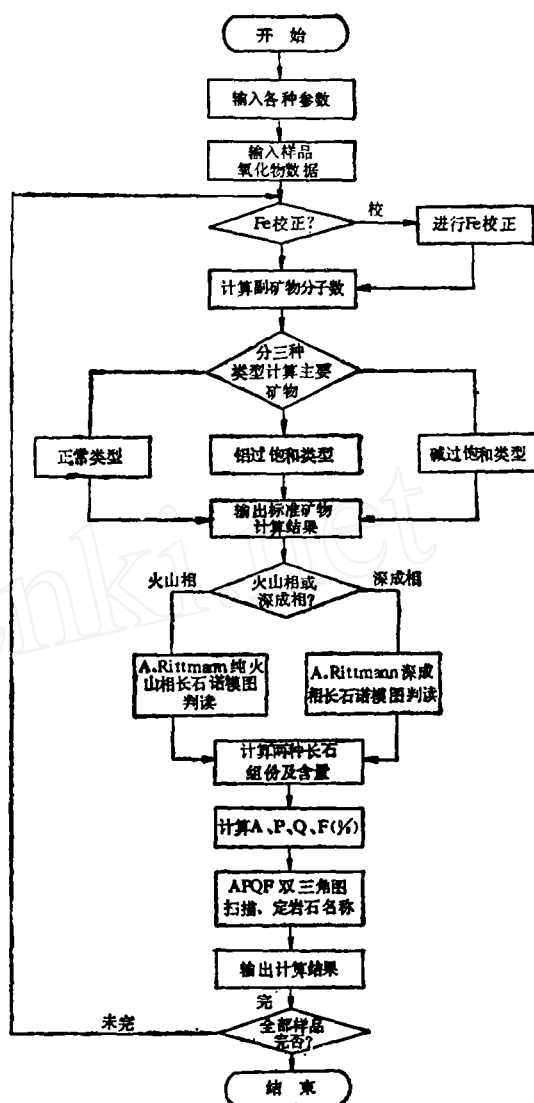


图5 计算机程序总框图

$$\begin{aligned} & + b_3 x^3 + b_4 x^4 \\ & + b_5 x^5 \end{aligned}$$

再以10个直线方程代表图中的10条直线, 由于边界是从两个方向拟合的, 故其直线方程也应在两个方向上与其对应, 故有:

$$X \text{轴方向上有 } X = C_0 + C_1 z$$

$$\begin{aligned} Z \text{轴方向上有 } Z = & C'_0 + C'_1 x (C'_1 \\ & = 1/C_1) \end{aligned}$$

据 X' 、 Z' 得 P_{xz} 点(图3), 再根据邻近的两个直线方程, 可建立过 P_{xz} 点的直线方程。通过求该直线方程和边界多项式方程

的公共解, 即得B点坐标 X_B 、 Z_B 和C点坐标 X_C 、 Z_C (也就是两种共存长石的组成成分含量), 而透长石 (或碱性长石) 在两种长石中的含量比由下式求得:

$$S = \sqrt{\frac{(Z_C - Z')^2 + (X' - X_C)^2}{(Z_C - Z_B)^2 + (X_B - X_C)^2}} \times 100\%$$

程序功能

1. 计算岩石CIPW标准矿物28个。
2. 用户可根据需要使用铁氧化物校正。

正。
该程序采用勒·曼特尔的校正公式^[3],
即:

$$\overline{OX}_{\text{火山岩}} = 0.93 - 0.0042(\text{SiO}_2) - 0.022(\text{K}_2\text{O} + \text{Na}_2\text{O})$$

$$\overline{OX}_{\text{深成岩}} = 0.88 - 0.016(\text{SiO}_2) - 0.027(\text{K}_2\text{O} + \text{Na}_2\text{O})$$

$$OX = \text{FeO} / (\text{FeO} + \text{Fe}_2\text{O}_3)$$

($\overline{OX}$ —平均氧化率、 OX —实际氧化率)

如果 $OX < \overline{OX}$ 则校正后的 Fe_2O_3^* 和 Fe^*O 的重量百分数为:

$$\text{Fe}_2\text{O}_3^* = \frac{(1 - \overline{OX})(\text{FeO} + 0.9\text{Fe}_2\text{O}_3)}{0.1\overline{OX} + 0.9}$$

$$\text{FeO}^* = \text{FeO} + 0.9(\text{Fe}_2\text{O}_3 - \text{Fe}_2\text{O}_3^*)$$

3. 对A·Rittmann纯火山相和深成相长石诺模图判读, 其精度超过人工读图。可得到长石组成和含量, 求出A、P、Q、F值。

4. 按Streckeisen双三角图可对火山岩、深成岩的70余种岩性定名。

程序使用说明

1. 全岩岩石化学数据由DATA3020读入。每个样品最多可输入16个数据, 顺序为 SiO_2 、 TiO_2 、 Al_2O_3 、 Fe_2O_3 、 FeO 、 MnO 、 MgO 、 CaO 、 Na_2O 、 K_2O 、 P_2O_5 、 H_2O (包括烧失量)、 CO_2 、S、 Cr_2O_3 、NiO等。

2. 执行程序后, 屏幕出现:

Number of Sample? 键入样品数目

Number of Variable? 键入样品分析项目数

Vol or Pluto? —V or P如果是火山相

本文电算结果与Rittmann、吴利仁计算结果对比

表 2

矿物成分 (%)	夏威夷拉斑玄武岩			二辉安山岩			含英闪石流纹岩		
	Rittmann ^①	吴利仁 ^②	电 算	Rittmann	吴利仁	电 算	Rittmann	吴利仁	电 算
A	—	—	—	12.7	11.7	12.0	55.1	56.7	58.0
P	98.1	96.0	95.8	54.5	55.1	55.0	10.0	8.1	6.72
Q	1.9	4.0	4.2	32.8	33.1	33.0	34.8	35.2	35.2
F	—	—	—	—	—	—	—	—	—
APQF图解 岩石名称	10区 拉斑玄武岩	10区 拉斑玄武岩	10区 拉斑玄武岩	4区 英安岩	4区 英安岩	4区 英安岩	3a区 流纹岩	3a区 流纹岩	3a区 流纹岩
矿物成分 (%)	玻质流纹岩			方钠霞石响岩			碱性玄武岩		
	Rittmann ^①	吴利仁 ^②	电 算	Rittmann	吴利仁	电 算	Rittmann	吴利仁	电 算
A	76.9	77.0	76.3	85.0	86.0	86.3	2.0	—	0.7
P	—	—	—	—	—	—	97.2	—	98.3
Q	23.3	23.0	23.7	—	—	—	—	—	—
F	—	—	—	15.0	14.0	13.7	0.8	—	0.9
APQF图解 岩石名称	2区 碱流岩	2区 碱流岩	2区 碱流岩	11区 霞石响岩	11区 霞石响岩	11区 霞石响岩	10'区 碱玄岩	—	10'区 碱玄岩

① Rittmann稳定矿物组合算法,

② 吴利仁手算结果,

键入V, 是深成相键入P

Correct Fe? —Y or N 若需进行铁校正则键入Y, 否则键入N

结果输出CIPW标准矿物重量百分数及体积百分数; 碱性长石和斜长石的组成; A、P、Q、F百分数; 斜长石牌号; 岩石名称。

实例

为检验该程序对岩浆岩分类命名的可靠性, 笔者对《火成岩的稳定矿物组合计算方法》(A. Rittmann 1973)一书中的6个例子进行了电算处理, 并与吴利仁手算的结果和书中的结果进行比较(表2)。

从表2可见, 三者的计算结果是很接近的。需要说明的是: 本程序计算出来的标准矿物与A. Rittmann法计算的标准矿物稍有出入, 但一般不影响岩石的分类、定名。

笔者用该程序处理了大量岩石化学数据, 其速度和精度均较为满意, 结果与地质情况相符合, 有些还有实测矿物定名验证。

对该程序有兴趣者, 可与作者联系。

参考文献

- [1] A. Rittmann (金秉慧译): 《火成岩的稳定矿物组合》, 地质出版社, 1973年。
- [2] 吴利仁等: 地质科学, 1982, 第1期, 21~28页。
- [3] Le Mante, R. W.: Contr. Miner. Petrol. 1976, V. 56.

A Microcomputer Program for Classifying and Nominating Magmatic Rocks

Chen Liangzhong

By means of the C.I.P.W. system of rock classification, integrated with A. Rittmann's feldspar distribution system a BASIC language program has been compiled to classify and nominate magmatites according to the petrochemical analysis data by using Streckeisen's APQF double triangular diagram.

磁性胶体法——磁黄铁矿同质多象变体的一种快速鉴定方法

顾连兴

(南京大学地球科学系)

硫化物矿床中的磁黄铁矿, 往往同时存在六方和单斜两种同质多象变体。徐国风(1978)曾对六方磁黄铁矿和单斜磁黄铁矿的晶体结构和物理化学特性作过系统介绍。

在矿相显微镜下研究磁黄铁矿, 目前通常采用铬酸饱和液浸蚀法。由于单斜磁黄铁矿比六方磁黄铁矿更容易受到铬酸腐蚀, 故浸蚀后单斜磁黄铁矿反射率降低更加显著。但是, 这种浸蚀方法有两个显著的缺点: 第一, 每次浸蚀耗时1小时左右, 工作效率甚低; 第二, 浸蚀强度不易控制, 浸蚀过度 and 浸蚀不足都会使两种变体之间的反差降低。

近年来, 国外多采用磁性胶体法研究磁黄铁

矿。磁性胶体的具体配方(J. R. Craig等, 1981)是:

1. 将 $\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 2g 和 $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ 5.4g 溶于300ml蒸馏水中(70°C时);
2. 将NaOH 5g溶于50ml蒸馏水中;
3. 将两液混合, 过滤出黑色沉淀物, 并用蒸馏水和0.01 mol HCl漂洗。将此黑色沉淀物置于500ml 0.5%的油酸钠溶液中, 煮沸几分钟。

这样所得的黑褐色磁性胶体可长期地保存。据笔者的经验, 即使出现沉淀亦无碍使用, 在用前摇匀即可。

磁性胶体其实为一种含有黑色铁磁性微粒的胶