

C.I.P.W 标准矿物计算方法的 PC—1500袖珍计算机BASIC语言程序

文 子 中

(山东省地质矿产局第六地质队)

提要 C.I.P.W 标准矿物计算是火成岩岩石学中常做的工作。倘若手算,耗时费力,且难保一次性计算结果无误。为此,针对12种氧化物设计的,上机运行通过的 BASIC 语言程序可以换算20种基本标准矿物,适用于碱性、酸性、中性、基性和超基性岩类中火山岩及侵入岩的数十个岩石种属。

计算和输出,一件样品约一分钟即可完成,且精度颇高。

计算结果采用格式化输出,清晰醒目,易于查阅和使用。

在火成岩岩石学研究工作中,诸如火山岩的种类和演化规律、已知岩石及岩石结晶实验的物理化学条件分析,岩石学一些常用参数等往往需要计算C.I.P.W标准矿物。但是手算工作相当耗费精力,效率也很低;倘达数十乃至百件样品更难保一次性计算结果准确无误。针对这一问题而设计的 BASIC 语言程序从计算开始到结果的打印输出结束,一件样品仅约一分钟即可完成,有事半功倍之效。

程序按略臻完善的《火成岩岩石学》^[1]所述计算步骤设计编写,在PC—1500A机上运行通过后又对该书中的算例,附录七的全部,附录五的大部分样品数据,包括碱性、酸性、中性、基性和超基性岩类中火山岩及侵入岩的数十个岩石种属进行了试算,其结果十分理想;之后,在山东省金矿资源总量预测工作中又运行了98件样品数据也获得相同的效果,今介绍如下。

一、主要标识符

1. 氧化物及其标识符

氧化物	百分含量	分子数
SiO ₂	SI	S
TiO ₂	TI	T
Al ₂ O ₃	AL	L
Fe ₂ O ₃	F3	F

FeO	F2	}	E
MnO	MN		
MgO	MG		M
CaO	CA		A
Na ₂ O	NA		N
K ₂ O	KO		K
P ₂ O ₅	PO		P
CO ₂	CO		C2

2. 程序设计换算的20种基本标准矿物及其代号

方解石 Cc	钛铁矿 Il
菱镁矿 Ms	磁铁矿 Mt
矽灰石 Ap	赤铁矿 Hm
钾长石 Or	钠长石 Ab
钙长石 An	
刚玉 C	透辉石 Di {
霓石 Ac	Wo
	De
	Df
硅酸钠 Ns	
霞石 Ne	紫苏辉石 Hy {
	En
	Fs
石榴石 Lc	
石英 Qz	橄榄石 Ol {
	Fo
	Fa

其中De和Df分别为组成透辉石的顽火辉石与正铁辉石，以便和组成紫苏辉石的该两基本标准矿物相区别。此外，菱镁矿（Magnesite）的代号笔者未查及，暂以Ms表示。

3. 其他重要标识符

- NO. 样品序号
- KLN 正常类型
- KNL 碱过饱和类型
- ALO 铝过饱和类型

二、程序框图(图1)

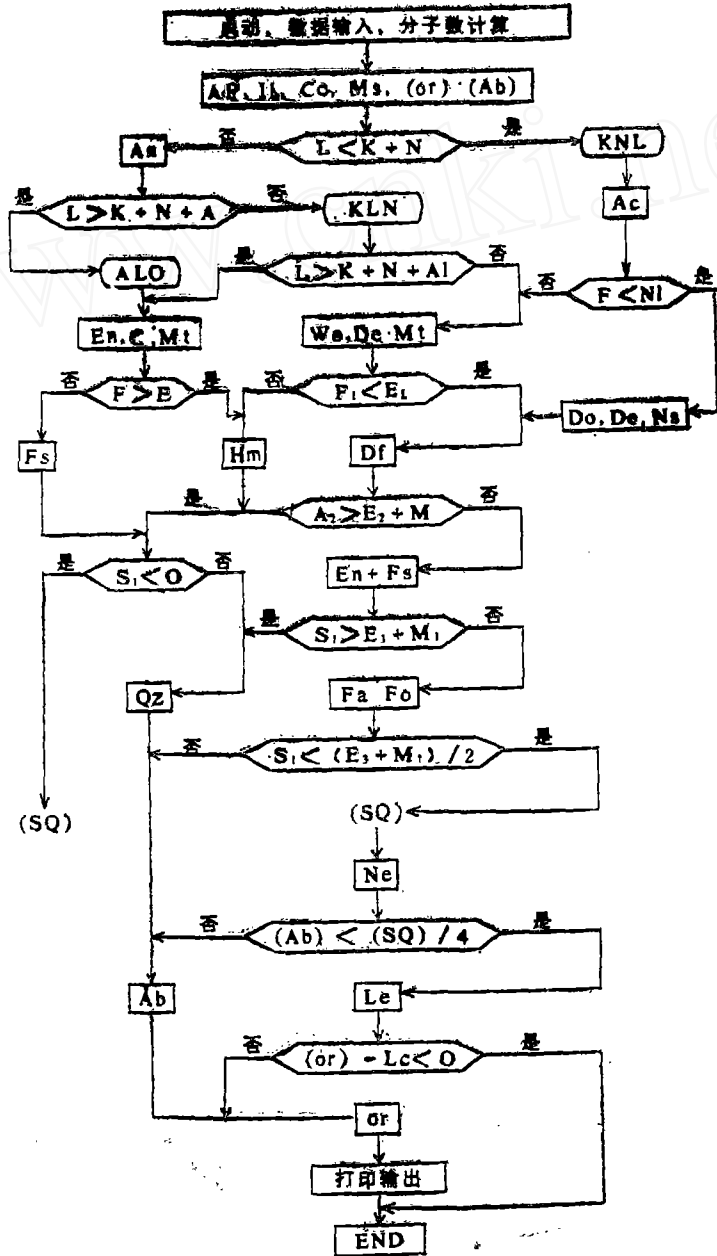


图1 程序框图

- 注: (1) $E_1, E_2, E_3 \dots$ 经某步计算后剩余的 $FeO + MnO$ 分子数, 余类推。
 (2) $(Or), (Ab) \dots$ 预算的钾、钠长石分子数。
 (3) $(SQ) \dots SiO_2$ 极度不饱和时需由钾长石释放出来的 SiO_2 分子数。

三、程序清单

```

10: "Z" CLEAR
12: INPUT "NO. ="; NO,
    "SiO2 ="; SI, "TiO2 =";
    TI, "Al2O3 ="; AL,
    Fe2O3 ="; F3, "FeO =";
    F2, "MnO ="; MN
14: INPUT "MgO ="; MG,
    "CaO ="; CA, "Na2O =";
    NA, "K2O ="; KO,
    "P2O5 ="; PO, "CO2 =";
    CO: CLS
16: WAIT 0: CURSOR
    2: PRINT "Just a minute,
    Please."
18: SP = SI + TI + AL + F3
    + F2 + MN + MG + CA
    + NA + KO + PO + CO
20: S = SI / 0.0600848: T = TI /
    0.0798988
25: L = AL / 0.10196128: F =
    F3 / 0.1596922
30: E = F2 / 0.0718464 + MN
    / 0.0709374
35: M = MG / 0.0403044: A =
    CA / 0.0560794
40: N = NA / 0.06197894: K =
    KO / 0.0941954
45: P = PO / 0.14194452: C2 =
    CO / 0.04401
50: AP = P: G1 = P * 0.31018
    27: A1 = A - 3 * P
52: IF C2 > A1 THEN 58
55: CC = C2: VC = CC * 0.1
    000894: A1 = A1 - C2:
    GOTO 65
58: CC = A1: VC = CC * 0.1
    000894
60: MS = C2 - A1: VM = MS
    * 0.0843144: M = M - MS
    : A1 = 0
65: IL = T: G2 = T * 0.15174
    52
70: EI = E - T
75: RO = K: G5 = K * 0.5566
    654
80: IF L > K + N + A GOTO
    155
85: IF L > K + N GOTO 205
90: R$ = "KNL"
95: L1 = L - K
100: BA = L1
105: N1 = N - L1
110: A2 = A1
120: IF F < N1 GOTO 135
125: AC = N1: G9 = N1 * 0.
    4620103
130: F1 = F - N1: GOTO 2
    40
135: N2 = N1 - F
140: NS = N2: V1 = N2 * 0.
    1220637
145: AC = F: G9 = F * 0.46
    20103
150: E2 = E1: GOTO 255
155: R$ = "ALO"
160: BA = N
165: AN = A1: G7 = A1 * 0.
    2782102
170: L1 = L - K - N - A1
175: C = L1: G8 = C * 0.10
    19613
180: EN = M: V5 = M * 0.10
    03892
185: IF F > E1 LET F1 =
    F: GOTO 450
190: E2 = E1 - F
195: FS = E2: V6 = E2 * 0.13
    19312
200: E1 = F: GOTO 460
205: R$ = "KLN"
210: IF L > K + N + A1
    THEN 160
215: L1 = L - K - N
220: BA = N
225: AN = L1: G7 = L1 * 0.
    782103
230: A2 = A1 - L1
235: F1 = F
240: IF F1 > E1 THEN 440
245: MT = F1: G3 = F1 * 0.
    2315386
250: E2 = E1 - F1
255: WO = A2: V2 = A2 * 0.
    1161642
260: IF A2 > E2 + M THEN
    425
265: Y1 = A2 * E2 / (M + E2)
270: DF = Y1: V4 = Y1 * 0.
    319312
275: Y2 = A2 - Y1
280: DE = Y2: V3 = Y2 * 0.
    1003892
285: GOSUB 545
290: E3 = E2 - Y1: M1 =
    M - Y2
295: IF S1 > E3 + M1
    THEN 345
300: IF S1 < (E3 + M1) /
    2 THEN 365
305: OL = E3 + M1 - S1

```

```

310: Y3=E3*OL/(M1+E
3)
315: FA=Y3:V8=Y3*0.20
37776
320: Y4=OL-Y3
323: FO=Y4:V7=Y4*0.1
406936
325: M2=M1-2*Y4
330: EN=M2:V5=M2*0.
1003892
333: E4=E3-2*Y3
335: FS=E4:V6=E4*0.13
19312
340: GOTO 480
345: EN=M1:V5=EN*0.
1003892
350: FS=E3:V6=FS*0.13
19312
355: S1=S1-E3-M1
360: GOTO 475
365: SQ=(E3+M1)/2-S1
370: FO=M1/2:V7=FO*
0.1406936
375: FA=E3/2:V8=FA*0.
2037776
380: IF BA<SQ/4 THEN
395
385: NE=SQ/4:V9=NE*
0.2841098
390: GOTO 480
395: NE=BA:V9=NE*0.
2841098
400: ST=SQ-4*NE
405: LC=ST/2:VL=LC*
0.4364958
410: IF K-LC<0
LPRINT NO; " =KP"
·GOTO 540
415: RO=K-LC:G5=RO*
0.5566654
420: GOTO 485
425: DF=E2:V4=E2*0.
1319312
430: DE=M:V3=M*0.1
003892
435: GOTO 465
440: DE=M:V3=M*0.1
003892
445: WO=A2:V2=A2*0.
1161642
450: F4=F1-E1
455: HM=F4:G4=F4*0.
1596922
460: MT=E1:G3=E1*0.
2315386
465: GOSUB 545
470: IF S1<0 LET SQ=
-S1: GOTO 380
475: Q=S1:Q1=Q*0.06
00848
480: AB=BA-NE:G6=
AB*0.524449
485: COLOR 3:LPRINT
TAB 4; "NO."; NO,
TAB 12; R$
486: H$="#####.###":K
$="#####.#####"
487: COLOR 2:LPRINT
TAB 4; "SiO%=";
TAB 9; USING K$;
SP USING:
COLOR 0
490: COLOR 1:LPRINT
TAB 2; "MINE":
TAB 15; "% "
495: B$="#####.#####"
505: FOR I=1 TO 22
510: READ J$, X, U
515: IF X=0 THEN 530
520: COLOR 0: LPRINT
J$; USING H$; X;
TAB 10; USING B$;U
525: GV=GV+U
530: NEXT I: RESTORE
535: USING: LPRINT
TAB 7; "SGM=";
TAB 10; USING B$;
GV: USING
540: LF 1: BEEP 3: END
545: S1=S-6*K-6*BA
-2*AN-4*AC-
WO-DE-EN-FS
-DF-NS
550: RETURN
552: DATA "Cc=", CC, VC,
"Ms=", MS, VM
555: DATA "Ap=", AP, G1
, "I1=", IL, G2, "Mt="
, MT, G3, "Hm=", HM,
G4, "Or=", RO, G5,
"Ab=", AB, G6
560: DATA "An=", AN,
G7, "C=", C, G8, "Ac
=", AC, G9, "Ns=",
NS, V1, "Wo=", WO,
V2
565: DATA "De=", DE, V
3, "Df=", DF, V4, "En
=", EN, V5, "FS=",
Fs, V6, "Fo=", FO, V7
570: DATA "Fa=", FA, V
8, "Ne=", NE, V9, "Lc
=", LC, VL, "Qz=",
Q, Q1
STA. 1 2768

```

四、程序设计说明

1. 程序设计了对12种氧化物的计算语句，可以换算20种基本标准矿物，已列如前。

2. 一般文献记述的计算步骤中有氧化物 Cr_2O_3 同时当 TiO_2 分子数大于 $\text{FeO} + \text{MnO}$ 分子数时就要换算榍石。但是笔者所猎及的数百件分析结果中两种情况均未出现过，因此程序中没有安排相应的计算语句，这样可以少占内存、提高运算速度。倘真出现，对 Cr_2O_3 应先行处理后再电算，输出结果中涉及 FeO 的标准矿物若出现负值则属后一种情况，应手算处理。

3. 正常岩石化学类型是 $\text{K}_2\text{O} + \text{Na}_2\text{O} + \text{CaO} > \text{Al}_2\text{O}_3 > \text{K}_2\text{O} + \text{Na}_2\text{O}$ ，换算时不会因 Al_2O_3 过剩而出现刚玉。但是由于副矿物矽灰石等先行换算耗去一定数量 CaO 后恰巧出现 $\text{K}_2\text{O} + \text{Na}_2\text{O} + \text{剩余CaO} < \text{Al}_2\text{O}_3$ 的情况，这时将出现刚玉。

4. 输出结果中没有直接给出透辉石Di、紫苏辉石Hy和橄榄石Ol的换算结果，而是它们相应的基本标准矿物的分子数与百分含量，这样处理除便于查阅使用外，是因为透辉石的换算远非文献中所述计算步骤那样简单。透辉石是由正铁辉石和顽火辉石按一定比例与硅灰石组成的，并且“硅灰石在岩浆岩中不能孤立存在”^[1]，甚至“在火成岩中不能孤立存在”^[1]。但是当 $\text{Fe}_2\text{O}_3 > \text{FeO} + \text{MnO}$ 分子数时， $\text{FeO} + \text{MnO}$ 已在组成磁铁矿时耗尽，正铁辉石不复存在，只有顽火辉石，有时剩余 $\text{FeO} + \text{MnO}$ 及 MgO 全部组成正铁、顽火辉石后的和仍然小于硅灰石。这两种情况留待计算者根据输出结果中的基本标准矿物数据自行处理。

5. 在 SiO_2 极度不饱和时，事先预算的钠长石将转化为霞石并释放出 SiO_2 ，当全部钠长石转化为霞石后尚不足 SiO_2 需求量时，进而将钾长石转化为白榴石，这一系列计算过程程序中都做了妥善安排。极端情况下钠、钾长石全部转化后仍然不足 SiO_2 需求量时，将会出现钾霞石($\text{K}_2\text{O} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2$)、硅酸钾($\text{K}_2\text{O} \cdot \text{SiO}_2$)、甚至硅酸钙($2\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$)等极度贫硅的标准矿物。这些罕见的情况未安排相应计算语句，一旦出现即打印“KP”后停机，需手算处理。

6. 氧化物和标准矿物分子量以《火成岩岩石学》^[1]附录三和四所载数据为准。需要说明的是，按附录四载矽灰石分子量为310.1827 ($3\text{CaO} \cdot \text{P}_2\text{O}_5$)，而算例中却使用

$330.31(3\text{CaO} \cdot \text{P}_2\text{O}_5 + \frac{\text{CaF}_2}{3})$ ，未说明缘由。显然，这样做会人为地夸大矽灰石含量，并且随 P_2O_5 含量的增加而增加，因此本程序采用 $3\text{CaO} \cdot \text{P}_2\text{O}_5$ 分子量。

上述参数直接参加计算，输出结果中标准矿物分子数保留两位小数，百分含量保留三位小数；整个计算过程未做四舍五入处理，因此计算精度很高。实际计算结果表明，换算出来的标准矿物与参加计算的氧化物百分含量和之差都在 $-0.001 \sim +0.003\%$ 范围内，而绝大多数是 $0.001 \sim 0.003\%$ ，即标准矿物含量几乎都大于氧化物含量。这种现象显然是由于把 MnO 分子并入 FeO 分子，继又按 FeO 分子量计算标准矿物造成的，增大的程度取决于 MnO 的含量及其在标准矿物中的分配情况。

7. 输出结果采用格式化(参见输出结果表), 清晰醒目, 易于查阅和使用。其中, 第一行分别为样品序号、岩石化学类型标识符; 第二行为参加计算的氧化物百分含量和; 其余为标准矿物的代号、分子数和百分含量、百分含量总和。

五、使用说明

1. 本程序共有2768个字节, 在程序状态下手动键入后按STATUS 1 ENTER 即显示出机内程序字节数, 若相符则可认为无误。

2. 转入执行状态后, 按DEFZ 或 RUN ENTER 均可启动程序。启动后

显示屏上出现NO. =, 键入样品序号; 接着显示SiO₂ =, 键入SiO₂百分含量; 继又显示TiO₂ =, 键入TiO₂百分含量; ……。当某氧化物含量低于分析灵敏度或缺少该项分析结果时均键入0。

一件样品计算结束后, 再次启动, 进入下一个样品计算。

3. 对某计算结果欲需手算核证, 在该样品计算结束后, 再次启动前(一旦启动则该样品存贮数据全部清除), 且换算结果中无菱镁矿的条件下, 按S ENTER 可求得SiO₂分子数; 按T ENTER 可求得TiO₂分子数……, 然后手算其他项目, 颇为方便。

程序框图承韦霞同志清绘, 谨致谢意。

参 考 文 献

- [1] 南京大学, 1980, 火成岩岩石学。地质出版社。
- [2] 武汉地质学院, 1980, 岩浆岩岩石学。地质出版社。

输出结果表*

NO. 2	ALO
SiO% = 98.24	
MINE	%
Ap = 1.97	0.611
Il = 7.13	1.082
Mt = 3.59	0.832
Hm = 19.19	3.065
Or = 49.57	27.598
Ab = 69.37	36.385
An = 24.57	6.836
C = 14.27	1.455
En = 32.00	3.213
Qz = 285.57	17.159
SGM = 98.240	

* 原始数据来自《火成岩岩石学》[1] 296页算例。

BASIC LANGUAGE PROGRAMS FOR THE CALCULATION OF C.I.P.W NORMS ON THE PC-1500 POCKET CALCULATOR

Wen Zhizhong

(The 6th Geological team, Shandong Bureau of Geology and Mineral Resources)

Abstract

The calculation of C. I. P. W norms is a common job in the petrological study of igneous rocks. Manual calculation takes more time and effort, and cannot guarantee the correct results by the calculation at once. Thus a BASIC Language program has been written particularly for converting twelve oxides into twenty standard minerals. The program has been run on the PC-1500calculator to be correct, and is applicable to the C. I. P. W norms calculations for alkaline, acid, intermediate, basic and ultrabasic volcanic and intrusive rocks of scores of varieties.

It takes only one minute for the calculation and outputting of data of one sample, besides the advantage of high accuracy and precision.

The results are output in formatting, which is clear, eye-catching and easy to retrieve and use.