

扎瓦里茨基岩石化学算法在TI—59 可编程序计算器上的应用

曾 均

(青海地矿局第三地质队)

A·H·扎瓦里茨基岩石化学算法,是将岩浆岩中主要矿物形成时有关联的元素的原子进行合并,用若干数值特征来反映岩浆岩的化学成分并将其分类。故将大量的岩石化学分析资料,用扎瓦里茨基岩石化学计算、投影后,就能一目了然地看出其化学成分的变化规律,相互联系和所属类型,并可对比不同岩区的岩浆岩化学成分特点及火山岩自然共生组合等。所以该法应用极为广泛。

由于参与计算的氧化物有十种,在不同的类型中计算方法又不尽相同,且公式及数据繁琐,用一般计算器进行手算,一天能完成十来个样品的计算已属不易,而且在计算中既费时费力,又易发生差错。

近几年来虽然电子计算机在全国地质系统已逐步推广应用,但因技术条件、资金等原因,至今各基层地质队仍购制不多,而各种可编程序计算器的配备则比较普遍。事实上许多小型的数据处理或计算,无需计算机进行,用可编程序计算器即可完成,因它具有价廉体积小特点,更适合于野外流动性大的情况,如美国TI—59型就是其中之一,并为许多地质队所拥有。

本程序经反复使用,确实行之有效,用它进行岩石化学计算,一天算200多个样品并不感到紧张,它不但能提高工效20余倍,而且还可使某些对扎瓦里茨基岩石化学算法尚不完全理解的初学者或对程序设计毫无知识的人,也极易掌握其操作,计算者只需按顺序输入氧化物的数据,按指令键后即可自行计算并打印各计算结果。因为岩石类型的判别及数值特征的计算都是由计算器自动进行的,所以避免了人的干预所可能产生的差错,从而大大提高了质量。同时本程序极易改编为其他可编程序计算器的实用程序,而且可用BASIC语言方便地改编为其他计算机的应用程序。

(一) 数学模型

根据岩石中 K_2O 、 Na_2O 、 CaO 、 Al_2O_3 的分数的关系,可把岩石分为四种类型:

(1) 正常成分 $CaO + Na_2O + K_2O > Al_2O_3 > Na_2O + K_2O$

(2) 铝过饱和 $Al_2O_3 > CaO + Na_2O + K_2O$

(3) 碱过饱和 $Na_2O + K_2O > Al_2O_3$

(4) 碱强烈过饱和 $\text{Na}_2\text{O} + \text{K}_2\text{O} > \text{Al}_2\text{O}_3 + \text{FeO} + \text{Fe}_2\text{O}_3$

计算式：为简便起见，在每个等式后面用(1)，(2)，(3)，(4)标上其所属类型，且全部用分子数进行计算。

$$S = \text{SiO}_2 + \text{TiO}_2 \cdots \cdots (1), (2), (3), (4)$$

$$A = (\text{K}_2\text{O} + \text{Na}_2\text{O}) \times 2 \cdots \cdots (1), (2)$$

$$A = \text{Al}_2\text{O}_3 \times 2 \cdots \cdots (3), (4)$$

$$C = \text{Al}_2\text{O}_3 - (\text{Na}_2\text{O} + \text{K}_2\text{O}) \cdots \cdots (1)$$

$$C = \text{CaO} \cdots \cdots (2)$$

$$\bar{C} = [(\text{Na}_2\text{O} + \text{K}_2\text{O}) - \text{Al}_2\text{O}_3] \times 2 \cdots \cdots (3)$$

$$\bar{C} = \text{FeO}' \cdots \cdots (4) \quad (\text{FeO}' = \text{FeO} + 2 \times \text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{MnO})$$

$$B = \text{FeO}' + \text{CaO}' + \text{MgO} \cdots \cdots (1) \quad (\text{CaO}' = \text{CaO} - C)$$

$$B = \text{FeO}' + \text{Al}_2\text{O}_3' + \text{MgO} \cdots \cdots (2) \quad (\text{Al}_2\text{O}_3' = [\text{Al}_2\text{O}_3 - (\text{CaO} + \text{Na}_2\text{O} + \text{K}_2\text{O})] \times 2)$$

$$B = \text{FeO}'' + \text{CaO} + \text{MgO} \cdots \cdots (3) \quad (\text{FeO}'' = \text{FeO}' - C)$$

$$B = \text{CaO} + \text{MgO} + \text{Na}_2\text{O}' \cdots \cdots (4) \quad (\text{Na}_2\text{O}' = [(\text{Na}_2\text{O} + \text{K}_2\text{O}) - \text{Al}_2\text{O}_3] \times 2 - \bar{C})$$

$$N = A + B + C(\bar{C}) + S$$

$$s = \frac{S}{N} \cdot 100 \quad a = \frac{A}{N} \cdot 100 \quad C(\bar{C}) = \frac{C(\bar{C})}{N} \cdot 100 \quad b = \frac{B}{N} \cdot 100$$

$$m' = \frac{\text{MgO}}{B} \cdot 100 \cdots \cdots (1), (2), (3), (4) \quad f' = \frac{\text{FeO}'}{B} \cdot 100 \cdots \cdots (1), (2)$$

$$f' = \frac{\text{FeO}''}{B} \cdot 100 \cdots \cdots (3) \quad n' = \frac{\text{Na}_2\text{O}'}{B} \cdot 100 \cdots \cdots (4) \quad c' = \frac{\text{CaO}}{B} \cdot 100 \cdots \cdots (1)$$

$$a' = \frac{\text{Al}_2\text{O}_3'}{B} \cdot 100 \cdots \cdots (2) \quad c' = \frac{\text{CaO}}{B} \cdot 100 \cdots \cdots (3), (4)$$

$$n = \frac{2\text{Na}_2\text{O}}{A} \cdot 100 \cdots \cdots (1), (2) \quad n = \frac{A - 2\text{K}_2\text{O}}{A} \cdot 100 \cdots \cdots (3), (4)$$

$$Q = s - (3a + 2c + b) \cdots \cdots (1), (2) \quad Q = s - (3a + 2c + b) \cdots \cdots (3), (4)$$

代号含义：S—硅原子数；

A—组成碱铝硅酸盐的碱金属原子；

B—铁镁矿物中所有其他金属的原子数；

C—组成钙铝硅酸盐的钙原子数；

$\bar{C}$ —组成钠铁硅酸盐的钠原子数；

s—硅原子相对含量；

a—与铝结合组成碱铝硅酸盐的碱金属原子相对含量；

b—除硅、钛以外的组成铁镁矿物中的所有其他金属的原子相对含量；

c—与铝结合组成钙铝硅酸盐的钙原子

相对含量；

$\bar{c}$ —与铁结合组成钠铁硅酸盐的钠原子

相对含量；

m' —铁镁矿物中镁原子的百分比；

f' —铁镁矿物中铁原子的百分比；

n' —铁镁矿物中钠原子的百分比；

c' —铁镁矿物中钙原子的百分比；

a' —铁镁矿物中铝原子的百分比；

n —碱铝硅酸盐中钠原子的百分比；

Q—岩石中硅原子的过剩或不足

(二) 计算程序

000	76	LBL	042	93	•	084	42	STO	126	45	Y ×
001	11	A	043	09	9	085	02	02	127	43	RCL
002	58	FIX	044	04	4	086	91	R/S	128	29	29
003	02	02	045	42	STO	087	99	PRT	129	85	+
004	06	6	046	16	16	088	72	ST *	130	43	RCL
005	00	0	047	04	4	089	02	02	131	30	30
006	93	•	048	00	0	090	01	1	132	95	=
007	00	0	049	93	•	091	44	SUM	133	42	STO
008	06	6	050	03	3	092	02	02	134	04	04
009	42	STO	051	42	STO	093	61	GTO	135	85	+
010	11	11	052	17	17	094	00	00	136	43	RCL
011	07	7	053	05	5	095	86	86	137	28	28
012	09	9	054	06	6	096	76	LBL	138	95	=
013	93	•	055	93	•	097	12	B	139	42	STO
014	09	9	056	00	0	098	98	ADV	140	05	50
015	42	STO	057	08	8	099	02	2	141	98	ADV
016	12	12	058	42	STO	100	01	1	142	43	RCL
017	01	1	059	18	18	101	42	STO	143	24	24
018	00	0	060	06	6	102	02	02	144	65	×
019	01	1	061	01	1	103	76	LBL	145	02	2
020	93	•	062	93	•	104	45	Y ×	146	85	+
021	09	9	063	09	9	105	73	RC *	147	43	RCL
022	06	6	064	08	8	106	02	02	148	25	25
023	42	STO	065	42	STO	107	55	+	149	85	+
024	13	13	066	19	19	108	73	RC *	150	43	RCL
025	01	1	067	09	9	109	01	01	151	26	26
026	05	5	068	04	4	110	65	×	152	95	=
027	09	9	069	93	•	111	01	1	153	42	STO
028	93	•	070	02	2	112	00	0	154	06	06
029	06	6	071	04	4	113	00	0	155	53	(
030	08	8	072	42	STO	114	00	0	156	43	RCL
031	42	STO	073	20	20	115	95	=	157	23	23
032	14	14	074	01	1	116	99	PRT	158	75	-
033	07	7	075	00	0	117	72	ST *	159	43	RCL
034	01	1	076	42	STO	118	02	02	160	05	05
035	93	•	077	00	00	119	01	1	161	54	)
036	08	8	078	01	1	120	44	SUM	162	65	×
037	05	5	079	01	1	121	02	02	163	02	2
038	42	STO	080	42	STO	122	44	SUM	164	95	=
039	15	15	081	01	01	123	01	01	165	42	STO
040	07	7	082	02	2	124	97	DSZ	166	07	07
041	00	0	083	01	1	125	00	00	167	43	RCL

168	23	23	210	02	2	252	71	SBR	294	43	RCL
169	32	X : T	211	03	3	253	10	E'	295	27	27
170	43	RCL	212	01	1	254	53	(	296	95	=
171	05	05	213	07	7	255	43	RCL	297	42	STO
172	77	GE	214	03	3	256	28	28	298	34	34
173	01	01	215	01	1	257	75	-	299	99	PRT
174	96	96	216	02	2	258	43	RCL	300	71	SBR
175	61	GTO	217	02	2	259	33	33	301	19	D'
176	02	02	218	69	OP	260	54	)	302	71	SBR
177	70	70	219	02	02	261	65	×	303	10	E'
178	43	RCL	220	69	OP	262	43	RCL	304	43	RCL
179	23	23	221	05	05	263	10	10	305	07	07
180	85	+	222	71	SBR	264	95	=	306	65	×
181	43	RCL	223	16	A'	265	99	PRT	307	43	RCL
182	24	24	224	71	SBR	266	71	SBR	308	10	10
183	85	+	225	17	B'	267	44	SUM	309	95	=
184	43	RCL	226	43	RCL	268	71	SBR	310	99	PRT
185	25	25	227	23	23	269	23	LNx	311	71	SBR
186	95	=	228	75	-	270	91	R/S	312	44	SUM
187	32	X : T	229	43	RCL	271	02	2	313	71	SBR
188	43	RCL	230	04	04	272	07	7	314	23	LNx
189	01	04	231	95	=	273	04	4	315	91	R/S
190	77	GE	232	42	STO	274	01	1	316	02	2
191	03	03	233	33	33	275	69	OP	317	05	5
192	79	79	234	99	PRT	276	02	02	318	02	2
193	61	GTO	235	43	RCL	277	69	OP	319	04	4
194	03	03	236	06	06	278	05	05	320	01	1
195	15	15	237	75	-	279	71	SBR	321	03	3
196	43	RCL	238	43	RCL	280	16	A'	322	03	3
197	04	04	239	33	33	281	71	SBR	323	01	1
198	32	X : T	240	85	+	282	17	B'	324	69	OP
199	43	RCL	241	43	RCL	283	43	RCL	325	02	02
200	23	23	242	28	28	284	28	28	326	69	OP
201	77	GE	243	85	+	285	99	PRT	327	05	05
202	02	02	244	43	RCL	286	42	STO	328	71	SBR
203	07	07	245	27	27	287	33	33	329	16	A'
204	61	GTO	246	95	=	288	43	RCL	330	71	SBR
205	01	01	247	42	STO	289	06	06	331	18	C'
206	78	78	248	34	34	290	85	+	332	53	(
207	91	R/S	249	99	PRT	291	43	RCL	333	43	RCL
208	04	4	250	71	SBR	292	07	07	334	04	04
209	06	6	251	19	D'	293	85	+	335	75	-

336	43	RCL	378	23	LNK	420	42	STO	462	76	LBL
337	23	23	379	91	R/S	421	34	34	463	18	C'
338	54	)	380	02	2	422	99	PRT	464	43	RCL
339	65	×	381	07	7	423	71	SBR	465	23	23
340	02	2	382	02	2	424	19	D'	466	65	×
341	95	=	383	04	4	425	43	RCL	467	02	2
342	42	STO	384	01	1	426	03	03	468	95	=
343	33	33	385	07	7	427	65	×	469	99	PRT
344	99	PRT	386	69	OP	428	43	RCL	470	42	STO
345	43	RCL	387	02	02	429	10	10	471	32	32
346	06	06	388	69	OP	430	95	=	472	92	RTN
347	75	-	389	05	05	431	99	PRT	473	76	LBL
348	43	RCL	390	71	SBR	432	71	SBR	474	19	D'
349	33	33	391	16	A'	433	42	STO	475	43	RCL
350	85	+	392	71	SBR	434	71	SBR	476	31	31
351	43	RCL	393	18	C'	435	50	I×I	477	85	+
352	28	28	394	43	RCL	436	71	SBR	478	43	RCL
353	85	+	395	06	06	437	23	LNK	479	32	32
354	43	RCL	396	99	PRT	438	91	R/S	480	85	+
355	27	27	397	42	STO	439	76	LBL	481	43	RCL
356	95	=	398	33	33	440	16	A'	482	33	33
357	42	STO	399	43	RCL	441	43	RCL	483	85	+
358	34	34	400	04	04	442	21	21	484	43	RCL
359	99	PRT	401	75	-	443	85	+	485	34	34
360	71	SBR	402	43	RCL	444	43	RCL	486	95	=
361	19	D'	403	23	23	445	22	22	487	42	STO
362	43	RCL	404	95	=	446	95	=	488	35	35
363	06	06	405	65	×	447	99	PRT	489	99	PRT
364	75	-	406	02	2	448	42	STO	490	98	ADV
365	43	RCL	407	75	-	449	31	31	491	35	1/X
366	33	33	408	43	RCL	450	92	RTN	492	65	×
367	95	=	409	33	33	451	76	LBL	493	01	1
368	65	×	410	95	=	452	17	B'	494	00	0
369	43	RCL	411	42	STO	453	43	RCL	495	00	0
370	10	10	412	03	03	454	04	04	496	95	=
371	95	=	413	85	+	455	65	×	497	42	STO
372	99	PRT	414	43	RCL	456	02	2	498	36	36
373	71	SBR	415	27	27	457	95	=	499	65	×
374	42	STO	416	85	+	458	99	PRT	500	43	RCL
375	71	SBR	417	43	RCL	459	42	STO	501	31	31
376	50	I×I	418	28	28	460	32	32	502	95	=
377	71	SBR	419	95	=	461	92	RTN	503	99	PRT

504	42	STO	536	00	0	568	76	LBL	600	54	)
505	37	37	537	55	÷	569	42	STO	601	65	×
506	43	RCL	538	43	RCL	570	43	RCL	602	43	RCL
507	36	36	539	32	32	571	28	28	603	08	08
508	65	×	540	95	=	572	65	×	604	95	=
509	43	RCL	541	42	STO	573	43	RCL	605	99	PRT
510	32	32	542	08	08	574	10	10	606	92	RTN
511	95	=	543	01	1	575	95	=	607	76	LBL
512	99	PRT	544	00	0	576	99	PRT	608	23	LNx
513	42	STO	545	00	0	577	92	RTN	609	43	RCL
514	38	38	546	55	÷	578	76	LBL	610	37	37
515	43	RCL	547	43	RCL	579	44	SUM	611	75	-
516	36	36	548	34	34	580	02	2	612	53	(
517	65	×	549	95	=	581	65	×	613	03	3
518	43	RCL	550	42	STO	582	43	RCL	614	65	×
519	33	33	551	10	10	583	29	29	615	43	RCL
520	95	=	552	65	×	584	65	×	616	38	38
521	99	PRT	553	43	RCL	585	43	RCL	617	85	+
522	42	STO	554	27	27	586	08	08	618	02	2
523	39	39	555	95	=	587	59	=	619	65	×
524	43	RCL	556	99	PRT	588	99	PRT	620	43	RCL
525	36	36	557	92	RTN	589	92	RTN	621	39	39
526	65	×	558	76	LBL	590	76	LBL	622	85	+
527	43	RCL	559	10	E'	591	50	I×I	623	43	RCL
528	34	34	560	43	RCL	592	53	(	624	09	09
529	95	=	561	06	06	593	43	RCL	625	54	)
530	99	PRT	562	65	×	594	32	32	626	95	=
531	42	STO	563	43	RCL	595	75	-	627	99	PRT
532	09	09	564	10	10	596	02	2	628	98	ADV
533	98	ADV	565	95	=	597	65	×	629	98	ADV
534	01	1	566	99	PRT	598	43	RCL	630	92	RTN
535	00	0	567	92	RTN	599	30	30			

(三) 程序使用方法

本程序共630步, 各氧化物的分子量作为常数寄存于R₁₁—R₂₀号寄存器, 各分析重量先寄存于R₂₁—R₃₀号寄存器, 待计算为分子数后又返存于R₂₁—R₃₀号寄存器, 整个程序分录于二张磁卡的三条边上, 编号为No.1, No.2, No.3。开机后先划分贮存区, 然后读入磁卡, 接着输入数据, 操作步骤如表1:

计算其他样品, 重复3—6的操作即可。计算器自动判别并打印ZHENG(正), LU(铝), JIAN(碱), LIE(烈)四个汉语拼音之一, 分别代表正常、铝过饱和、碱过饱和、碱强烈过饱和四种类型。

表 1 操 作 步 骤 表

步序	说 明	输 入	按 键	显 示 或 打 印
1	划 分 贮 存 区		4 2nd op 17	639 39
2	读 入 程 序	No.1	1	1
		No.2	2	2
		No.3	3	3
3	起 动 程 序		A	
4	按 顺 序 输 入 氢 化 物 重 量 数 据	SiC ₂	R/S	显示并打印输入的数据
		TiO ₂	R/S	
		Al ₂ O ₃	R/S	
		Fe ₂ O ₃	R/S	
		FeO	R/S	
		MnO	R/S	
		MgO	R/S	
		CaO	R/S	
		Na ₂ O	R/S	
		K ₂ O	R/S	
5	计 算 分 子 数		B	显示并打印分子数
6	判 别 类 型 及 计 算 数 值 特 征		R/S	打印所属类型及特征

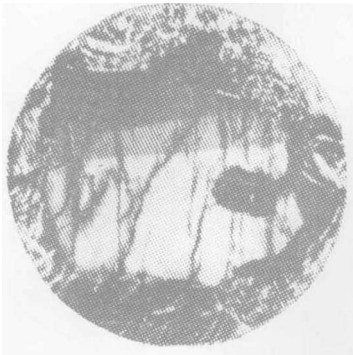
(四) 计算实例

表 2 不 同 岩 石 类 型 氧 化 物 数 据 表

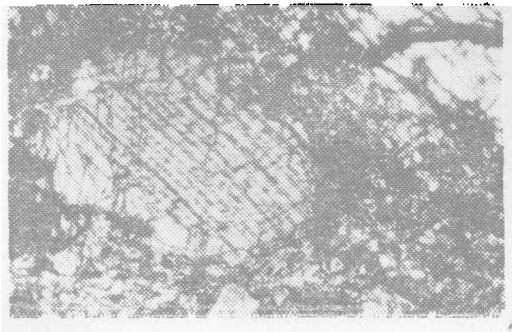
所 属 类 型		(1)	(2)	(3)	(4)
氧 化 物 (%)	SiO ₂	46.24	70.68	56.9	53.75
	TiO ₂	2.02	0.32	1.6	1.61
	Al ₂ O ₃	16.19	14.26	7.0	18.71
	Fe ₂ O ₃	4.46	0.91	17.41	4.6
	FeO	6.66	2.09	1.25	0.56
	MnO	0.12	0.08	0.27	0.13
	MgO	7.27	0.59	1.22	0.03
	CaO	9.08	1.52	1.62	1.11
	Na ₂ O	3.36	3.41	6.86	5.43
	K ₂ O	1.66	5.21	5.36	12.64

将上述数据按表 1 的方法操作, 即可将四种类型的结果打印如下:

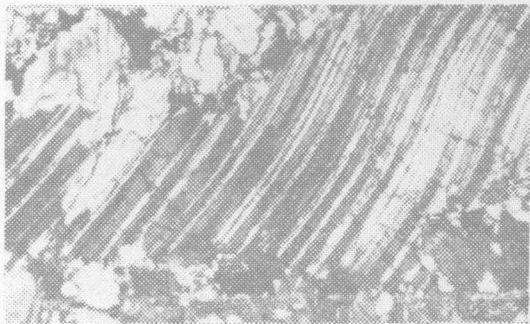
ZHENG(正常)	LU(铝过饱和)	JIAN(碱过饱和)	LIE(碱强烈过饱和)
795.18 S'	1180.83 S'	967.41 S'	915.09 S'
143.65 A	220.60 A	137.31 A	367.01 A
86.96 C	27.10 C	197.81 C	67.24 C



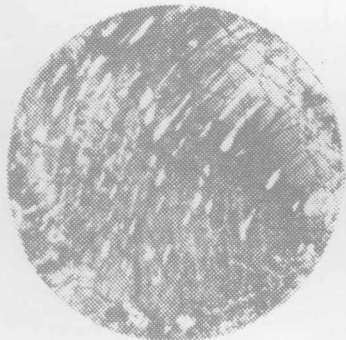
1.板状铝顽辉石的多级扭折双晶阶梯状消光
正交×20 （科果拉）



2.尖晶石二辉橄榄岩的碎斑结构，铝顽辉
石残斑呈扁圆形，具叠层状弯曲消光束条
带 正交×20 （达拉布特）



3.尖晶石二辉橄榄岩中长条形透辉石碎斑具多级滑移
扭曲消光带及碎裂纹叠加 正交×75（科果拉）



4.尖晶石二辉橄榄岩中铝顽辉石残斑沿
（100）解理出溶透辉石细小页片并一
起受力弯曲 正交×75（达拉布特）

405.59	B	61.16	B	100.62	B	29.76	B
1431.38	N	1489.70	N	1403.14	N	1379.10	N
55.55	s	79.27	s	68.95	s	66.35	s
10.04	a	14.81	a	9.79	a	26.61	a
6.08	c	1.82	c	14.10	c	4.88	c
28.34	b	4.11	b	7.17	b	2.16	b
44.48	m'	23.94	m'	30.09	m'	2.50	m'
37.04	f'	68.04	f'	41.20	f'	30.99	n'
18.48	c'	8.02	a'	28.71	c'	66.51	c'
75.48	n	49.88	n	17.16	n	26.91	n
-15.04	Q	27.10	Q	4.22	Q	-25.39	Q

在实际计算中，每输入一个数据随即打印在纸带上,待数据输入完，按B键后立即计算，并打印各分子数，表2将打印结果从略。

（参考文献略）