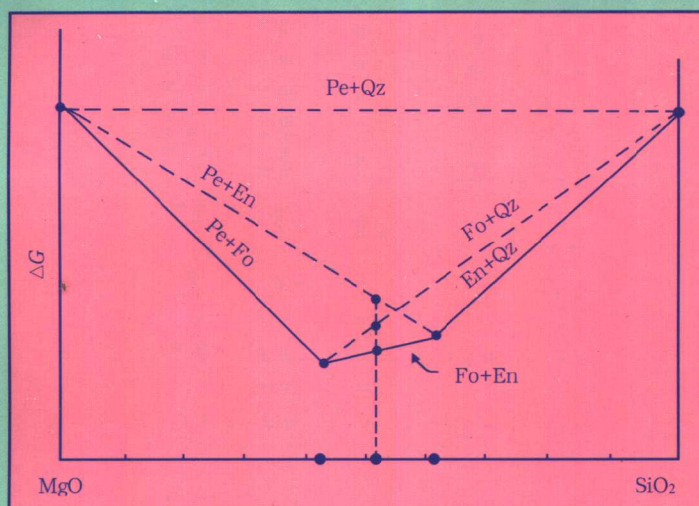


结晶岩热力学软件

马鸿文 著



地质出版社

结晶岩热力学软件

马鸿文 著

地质出版社

· 北 京 ·

内 容 提 要

本书是马鸿文(1993)编著的《结晶岩热力学概论》的续篇,内容为配合前书中的结晶岩热力学原理与方法而编写的结晶岩热力学软件(FORTRAN77)与应用实例。

本书中的应用软件涉及矿物晶体化学计算、岩石学混合计算、地质温压计、矿物-熔体相平衡及岩浆结晶作用模拟、岩浆物理性质、岩浆不混溶作用模拟、CIPW 标准矿物及岩石化学参数计算、花岗岩成因类型判别分析、结晶岩密度及地震波速计算等内容。为便于对岩石学数据的科学管理和统计分析,书中还设计了用 Visual FoxPro3.0 软件管理原始数据和应用程序的内容。

本书中的大部分软件都在 IBM-PC 机上经过了 3~5 年以上的使用。本书适用于有关专业的高校教师、研究生和科研人员作为教学和科研参考书或软件使用工具书使用。

图书在版编目(CIP)数据

结晶岩热力学软件/马鸿文著.-北京:地质出版社,1999.2

ISBN 7-116-02723-8

I. 结… II. 马… III. 结晶岩-热力学-研究-应用软件 IV. P588.12

中国版本图书馆 CIP 数据核字(98)第 38271 号

地质出版社出版发行

(100083 北京海淀区学院路 29 号)

责任编辑:赵俊磊 陈军中

北京印刷学院实习工厂印刷 新华书店总店科技发行所经销
开本:850×1168¹/₃₂ 印张:21.75 字数:516千字

1999 年 3 月北京第 1 版·1999 年 3 月北京第一次印刷

印数:1—1000 册 定价:48.00 元

ISBN 7-116-02723-8

P·1958



(凡购买地质出版社的图书,如有缺页、倒页、脱页者,本社发行处负责调换)

序 言

本书是作者(1993)编著的普通高等教育地质矿产类规划教材《结晶岩热力学概论》的续篇。前书的内容主要涉及结晶岩热力学原理与方法,本书则主要介绍作者在近十年来为配合上述内容的教学与科研工作所编写的结晶岩热力学软件(FORTRAN77)与应用实例,其中包括1993年以来国内外新发表的某些重要的热力学方法。

本书中的应用软件主要涉及矿物晶体化学计算、岩石学混合计算、地质温度计与压力计、矿物-熔体平衡热力学及岩浆结晶作用模拟、岩浆物理性质、岩浆不混溶作用模拟等。为方便读者使用,书中还收入了火成岩CIPW标准矿物及常用岩石化学参数计算、花岗岩成因类型判别分析、结晶岩密度及地震波速计算等内容。

本书中的实用软件采用FORTRAN77语言写成,大部分软件都在IBM-PC微机(486型或配置有数学协处理器的386型)上经过了3~5年以上的使用。按照FORTRAN77标准文本,软件中提供原始数据的方式,大多数采用数据文件方式;少数要求输入原始数据较少的软件,则采用直接由键盘输入数据的方式。为了方便用户对矿物学、岩石学和地球化学原始数据的管理,书中设计了使用Visual FoxPro3.0数据库软件管理原始数据和应用程序的内容。由于采用了下拉菜单式屏幕设计,实际使用甚为方便;同时,也避免了用户必须严格按照输入语句格式准备原始数据文件的麻烦。

本书中的主要应用软件,曾于1994年作者访问澳大利亚Macquarie大学期间使用,S.Y. O'Reilly教授、W.L. Griffin博士、D.A. Ionov博士、M. Zhang博士等就有关的热力学方法曾作过多次建设性的讨论。目前,这套软件仍被Macquarie大学的大陆地球化学演化与矿床成因研究中心(GEMOC)应用于他们的教学和科研活动中(O'Reilly, 1996, 个人通讯)。在这套软件编写的前期,已故的中国科学院院士池际尚教授曾给予多方面的关心与指导。软件和本书的编写还曾受到游振东、邱家骧、孙善平、周珣若、路凤香、邓晋福、莫宣学、赵崇贺、蔡克勤、袁家铮等几位教授的关心与指正。罗照华、白志民、李博文、赖兴运四位副教授和我校1987~1996届部分博士、硕士研究生就本书中有关的内容作过许多有益的讨论。作者特别感谢1994年以来所指导的博士研究生杨静、方同辉、俞心刚、白志民、王英滨、余晓燕、李天福、陶红,以及1990年以来所指导的硕士研究生张爱民、刘焰、罗飞、张常青、胡颖、王万金、孙小玲。他们在使用这些软件的过程中,与作者作过许多深入的研讨,提出了不少改进意见。正是由于他们的共同参与,才使得这些软件达到现在的水平。

作者感谢陶春华编写第九章使用Visual FoxPro3.0软件管理原始数据和应用程序的内容,并完成书稿的录入和排版。全书由杨静、李天福、陶红等核校。本书中的全部软件将于近期出版正式的软件版(PetroPro1.0),欢迎感兴趣的读者使用,并提出改进意见。

作 者

1998年10月

程序文本说明

由于受计算机键盘的限制，以及程序是历经十余年的逐渐积累而形成的，本书的程序文本及计算实例中使用了以下单位和符号，其与规范表示的对比及含义见下表。

程序文本	规范表示	含 义
cm ³ /mol	cm ³ /mol	摩尔体积
g/cm ³	g/cm ³	密度单位
lnfco2	$\ln f_{\text{CO}_2}$	二氧化碳逸度值的自然对数
lnfH2O	$\ln f_{\text{H}_2\text{O}}$	水逸度值的自然对数
lnfo2	$\ln f_{\text{O}_2}$	氧逸度值的自然对数
lnfs2	$\ln f_{\text{S}_2}$	硫逸度值的自然对数
logfco2	$\lg f_{\text{CO}_2}$	二氧化碳逸度值的常用对数
logfH2O	$\lg f_{\text{H}_2\text{O}}$	水逸度值的常用对数
logfo2	$\lg f_{\text{O}_2}$	氧逸度值的常用对数
logfs2	$\lg f_{\text{S}_2}$	硫逸度值的常用对数
mol%	x_{B}	物质 B 的摩尔分数(%)
P(GPa)	p	压力，单位为 GPa
ppm	10^{-6}	百万分之一
T(°C)	t	温度，单位为 °C
T(K)	T	热力学温度，单位为 K
wt%	w_{B}	物质 B 的质量分数(%)

目 录

第一章 矿物晶体化学计算	1
一、矿物化学式与端员组分计算	1
二、矿物理论化学组成计算	14
三、矿物晶胞参数计算	19
第二章 岩石学混合计算	38
一、结晶岩矿物含量和成分的线性规划法计算	38
二、分离结晶作用的最小二乘法计算	47
第三章 地质温度计与压力计	56
一、镁铁质岩体系	56
二、长英质岩体系	79
三、二长石温度计	94
第四章 矿物-熔体平衡热力学	107
一、橄榄石-熔体平衡	107
二、橄榄石、斜方辉石-熔体平衡	112
三、橄榄石、单斜辉石-熔体平衡	121
四、镁铁质岩浆体系的矿物-熔体平衡	134
第五章 岩浆结晶作用模拟	144
一、镁铁质岩浆液相线温度计算	144
二、镁铁质岩浆结晶作用模拟	151
三、二长石平衡结晶作用模拟	170
四、Di-An-Ab 体系矿物结晶作用模拟	186
第六章 岩浆物理性质	191
一、岩浆氧逸度计算	191
二、花岗岩浆固结温度-氧逸度趋势计算	195
三、岩浆物理性质计算	200
四、岩浆中的磷、锆溶解度计算	210
第七章 岩浆不混溶作用模拟	217
一、碳酸盐熔体不混溶作用模拟	217
二、硫化物熔体不混溶作用模拟	223
三、硅酸盐熔体不混溶作用模拟	235
第八章 岩石物理与岩石化学	244
一、岩石密度与地震波速计算	244
二、CIPW 标准矿物及岩石化学参数计算	254
三、花岗岩成因类型判别分析	273
第九章 原始数据和应用程序管理	281
一、PetroPro1.0 系统结构设计	281

二、数据管理系统 285

三、程序管理系统 288

四、PetroPro1.0 系统应用 289

附录一 岩石学计算函数与程序库 PETROL.LIB 292

附录二 常见氧化物、元素的摩尔质量和氢当量 323

附录三 常见造岩矿物和流体的端员组分热力学参数 326

参考文献 335

第一章 矿物晶体化学计算

一、矿物化学式与端员组分计算

1. 程序功能

程序 MIFORM 的功能包括：①常见造岩矿物晶体化学式计算；②硫化物族矿物晶体化学式计算；③常见铁镁矿物电子探针分析结果的 Fe^{3+} 、 Fe^{2+} 含量计算；④常见造岩矿物端员组分计算；⑤矿物摩尔质量的计算；⑥辉石族矿物八面体阳离子占位的计算；⑦辉石族矿物晶胞体积、密度和平均折射率 $[n=(n_g+n_m+n_p)/3]$ 计算；⑧矿物的比折射能(即格拉斯顿-代尔常数)计算。根据格拉斯顿-代尔定律，由矿物的比折射能和密度，可进一步求出其平均折射率(叶大年，1988)。

2. 方法原理

本程序中计算矿物晶体化学式的方法采用 Jackson 等(1976)提出的以阴离子为基准计算矿物化学式的氢当量法(马鸿文，1993a)。硫化物晶体化学式的计算则采用以阴离子为基准的硫原子法(含类质同像替代元素 Se、Te、As、Sb)。

常见铁镁矿物中 Fe^{3+} 、 Fe^{2+} 含量的计算采用电价平衡原理(Droop, 1987)。其中闪石族矿物中的 Fe^{3+} 、 Fe^{2+} 含量计算采用 Holland 和 Blundy(1994)的方法。

常见造岩矿物端员组分的计算见马鸿文(1993a)归纳的方法。辉石族矿物八面体阳离子占位的计算据 Brey 等(1990)。

辉石族的晶胞体积、密度和平均折射率计算据马鸿文等(1998，未发表资料)。矿物比折射能和平均折射率的计算据叶大年(1988)。

3. 程序结构

程序框图见下页。

4. 使用说明

(1) 输入格式

程序运行过程中，按照屏幕提示，依次提供下列参数：

Miner1	矿物族名
IFN/OFN	输入/输出文件名(选择硫化物时 IFN 缺省)
JFe3	$\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}$ 标定选择
Tot1	分析总量下限
Totu	分析总量上限

输入文件格式：A7，13F6.2。

各变量排列顺序依次为：Sample(样品号)、 SiO_2 、 TiO_2 、 Al_2O_3 、 Cr_2O_3 、 Fe_2O_3 、 FeO 、 MnO 、

NiO、MgO、CaO、Na₂O、K₂O、Li₂O。

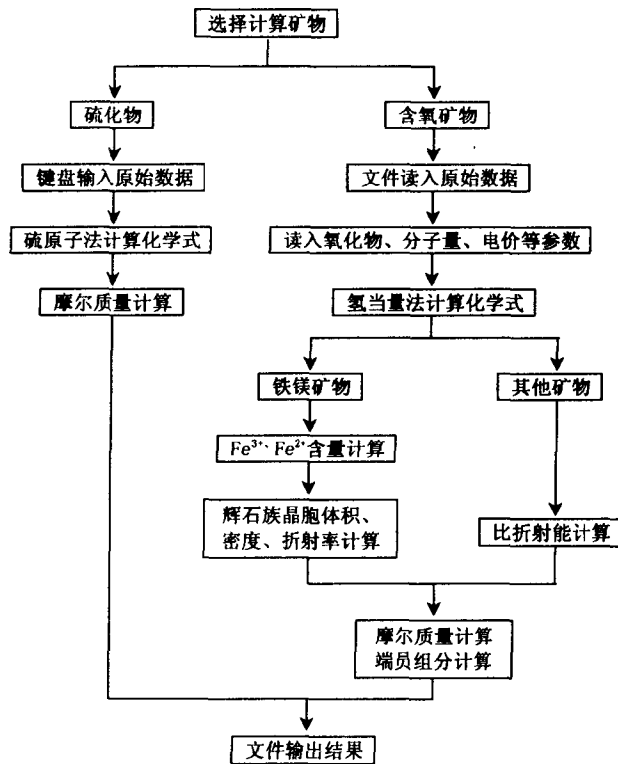
每次计算的样品个数和矿物数不限。

若实际应用中需增加其他变量，只需改变 parameter 语句中的参数 m 和 data 语句中的 OXT 参数，不影响程序的正常运行。

(2) 输出格式

全部计算结果输出到文件 OFN 中。输出结果除矿物阳离子系数和端员组分外，还包括下列内容：

GFW	摩尔质量（即分子量）
REK	矿物比折射能 K
Vcell	晶胞体积（单斜辉石）或其值的 1/2（斜方辉石）
DST	密度（辉石族）
RI	平均折射率（辉石族）



5. 程序文本

```
*****
program MIFORM
*   For deriving formulas from chemical analyses of minerals with anion-
* based, hydrogen-equivalent method (Jackson et al, 1967; US Geol SURVEY
* PROF PAPER 575C, P. C23-31).
```

```

*      Written by MA Hongwen, Nov. 1988
*      China University of Geosciences, Beijing 100083
*      Link:      MINORM----SULFID
*                  ----READEL
*                  ----Fe3cal
*                  ----TREK(f)
*                  ----Volpyx(f)
*                  ----PYXOCT
*      Sample----Sample name      m----component numbers
*      EQW----equivalent weights  NVL----cation valances
*      OXD(m)----oxide data(wt%)  COEF----coefficients
*      V.08/11/96
*      parameter (n=10,m=13,nm=12)
*      character OXT(m)*6,ELM(m)*6,Sample*6,Sams(n)*6,ET(10,10)*6,
$ IFN*10,OFN*10,JFe3
*      dimension EQW(m),NVL(m),IOX(nm),OXD(m),OXW(n,m),COEF(n,m),
$      Total(n),GFW(n),Vcell(n),DST(n),REK(n),RI(n),EM(n,10),NCT(m),
$      IM(10)
*      data OXT/'SiO2','TiO2','Al2O3','Cr2O3','Fe2O3','FeO','MnO','NiO',
$      'MgO','CaO','Na2O','K2O','Li2O'/
*      , 'H2O+', 'F', 'Cl' /
*      data IOX/24,8,6,8,2*12,2*48,24,16,2*20/
*      data IM/2*6,2,7,2*10,2*3,5,3/
*      data ET/'Pyr','Alm','Spe','Gro','And','Uva',4*' ',
$      'MgAl','FeAl','FeCr','FeTi','Mgt','MgCr',4*' ',
$      'Ilm','Hm',8*' ',
$      'Fo','Fa','Mg','Fe','Ni','Mn','Ca',3*' ',
$      'Wo','En','Fs','MgM1','MgM2','FeM1','FeM2','AlM1',
$      'AlM1ts','CrM1','Wo','En','Fs','MgM1','MgM2','FeM1',
$      'FeM2','AlM1','AlM1ts','CrM1','Ca','Mg','Fe',7*' ',
$      'Ca','Mg','Fe',7*' ',
$      'Fe3+', 'Fe2+', 'Mg', 'OH', 'F', 5*' ',
$      'An', 'Ab', 'Or', 7*' ' /
*      data Avog/0.602252/
10 format (A)
20 write (*,30)
30 format (/5X,'MIFORM option(0-12):',
$      /9X,'1. garnet      8. Ca amphibole',
$      /9X,'2. spinel     9. biotite',

```

```

$      /9X,'3. ilmenite          10. feldspars ',
$      /9X,'4. olivine          11. sulfide',
$      /9X,'5. orthopyroxene     12. others',
$      /9X,'6. clinopyroxene     0. exit',
$      /9X,'7. Mg-Fe amphibole')
read (*,*) Minerl
if (Minerl.eq.0) goto 320
if (Minerl.eq.11) then
    call sulfid
    goto 320
end if
write (*,*) 'Input/Output filename = ?'
read (*,10) IFN,OFN
open (3,file=IFN,status='old')
open (4,file=OFN,status='unknown')
if (Minerl.eq.12) then
    write (*,*) 'Oxygen atoms(pfu) = ?'
    read (*,*) Nox
    Nox=2*Nox
else if (Minerl.ge.1.and.Minerl.le.10) then
    Nox=IOX(Minerl)
end if
if (Minerl.le.9.and.Minerl.ne.4) then
    write (*,*) 'Fe3 calibration(Y/N) ?'
    read (*,10) JFe3
end if
write (*,*) 'Lower/Upper total limit = ?'
read (*,*) Totl,Totu
call READEL(m, OXT, ELM, EQW, NVL, NCT)
do j=1,m
    EQW(j)=EQW(j)/(NVL(j)*NCT(j))
end do
78 i=0
80 if (i.eq.n) goto 200
read (3,82,ERR=160,END=200) Sample, (OXD(j), j=1,m)
82 format (A6,13F6.2)
write (*,82) Sample, (OXD(j), j=1,m)
i=i+1
Sams(i)=Sample

```

```

Total(i)=0
do j=1,m
    OXW(i,j)=OXD(j)
    Total(i)=Total(i)+OXD(j)
end do
if (Total(i).lt.Totl.or.Total(i).gt.Totu) then
    write (*,92) Sams(i)
92    format (/5X,'Sample ',A,' : out of total limits !')
    i=i-1
    goto 80
end if
do j=1,m
    OXD(j)=OXD(j)/EQW(j)
end do
Csum=0
do j=1,m
    Csum=Csum+OXD(j)
end do
if (Miner1.ge.7.and.Miner1.le.9.and.OXD(14).eq.0)
$   Nox=IOX(Miner1)-2
Fact=Nox/Csum
do j=1,m
    OXD(j)=Fact*OXD(j)/NVL(j)
end do
if (JFe3.eq.'y'.or.JFe3.eq.'Y') then
    call Fe3cal(m,OXD,NVL,Miner1,Nox)
    TFe=0.8998*OXW(i,5)+OXW(i,6)
    Total(i)=Total(i)-OXW(i,5)-OXW(i,6)
    OXW(i,5)=1.1113*(TFe*OXD(5)/(OXD(5)+OXD(6)))
    OXW(i,6)=TFe*OXD(6)/(OXD(5)+OXD(6))
    Total(i)=Total(i)+OXW(i,5)+OXW(i,6)
end if
do j=1,m
    COEF(i,j)=OXD(j)
end do
GFW(i)=0
do j=1,m
    OXD(j)=NVL(j)*EQW(j)*OXD(j)
    GFW(i)=GFW(i)+OXD(j)

```

```

end do
do j=1,m
    OXD(j)=100*OXD(j)/GFW(i)
end do
REK(i)=TREK(m, OXD)
do j=1,m
    OXD(j)=COEF(i, j)
end do
if (Minerl.eq.5.or.Minerl.eq.6) then
    Vcell(i)=Volpyx(m, OXD)
    DST(i)=4.0*GFW(i)/(Avog*Vcell(i))
    RI(i)=REK(i)*DST(i)+1.0
end if
if (Minerl.eq.1) then
    EM(i,1)=(OXD(9)+OXD(8))/3
    EM(i,3)=OXD(7)/3
    EM(i,2)=OXD(6)/3
    EM(i,5)=2*OXD(5)/3
    EM(i,6)=2*OXD(4)/3
    EM(i,4)=OXD(10)/3-EM(i,5)-EM(i,6)
    Sum=EM(i,1)+EM(i,2)+EM(i,3)+EM(i,4)+EM(i,5)+EM(i,6)
    do j=1,6
        EM(i,j)=EM(i,j)/Sum
    end do
else if (Minerl.eq.2) then
    EM(i,4)=OXD(1)+OXD(2)
    EM(i,5)=0.5*OXD(5)
    SMg=OXD(8)+OXD(9)+OXD(10)
    if (SMg.ge.0.5*OXD(3)) then
        EM(i,1)=0.5*OXD(3)
        EM(i,2)=0
    else
        EM(i,1)=SMg
        EM(i,2)=0.5*(OXD(3)-2*SMg)
    end if
    if (OXD(6)+OXD(7).ge.0.5*OXD(4)) then
        EM(i,3)=0.5*OXD(4)
        EM(i,6)=0
    else

```

```

        EM(i, 3)=OXD(6)+OXD(7)-EM(i, 2)-2*EM(i, 4)-EM(i, 5)
        EM(i, 6)=(0. 5*(OXD(4)-2*EM(i, 3))+(SMg-EM(i, 1)))/2
    end if
    Sum=EM(i, 1)+EM(i, 2)+EM(i, 3)+EM(i, 4)+EM(i, 5)+EM(i, 6)
    do j=1, 6
        EM(i, j)=EM(i, j)/Sum
    end do
else if (Minerl.eq. 3) then
    EM(i, 1)=OXD(1)+OXD(2)
    EM(i, 2)=0. 5*(OXD(3)+OXD(4)+OXD(5))
    EM(i, 1)=EM(i, 1)/(EM(i, 1)+EM(i, 2))
    EM(i, 2)=EM(i, 2)/(EM(i, 1)+EM(i, 2))
else if (Minerl.eq. 4) then
    EM(i, 1)=OXD(9)/(OXD(9)+OXD(6))
    EM(i, 2)=OXD(6)/(OXD(9)+OXD(6))
    Sum=OXD(6)+OXD(7)+OXD(8)+OXD(9)+OXD(10)
    EM(i, 3)=OXD(9)/Sum
    EM(i, 4)=OXD(6)/Sum
    EM(i, 5)=OXD(8)/Sum
    EM(i, 6)=OXD(7)/Sum
    EM(i, 7)=OXD(10)/Sum
else if (Minerl.ge. 5.and. Minerl.le. 8.) then
    Sum=OXD(10)+OXD(9)+OXD(6)
    EM(i, 1)=OXD(10)/Sum
    EM(i, 2)=OXD(9)/Sum
    EM(i, 3)=OXD(6)/Sum
    if (Minerl.eq. 5.or. Minerl.eq. 6) then
        call PYXoct(m, OXD, EM(i, 4), EM(i, 5), EM(i, 6), EM(i, 7), EM(i, 8),
$                EM(i, 9))
        EM(i, 10)=OXD(4)
    else if (Minerl.eq. 7.or. Minerl.eq. 8) then
        EM(i, 4)=OXD(13)/(OXD(13)+OXD(14)+0. 0001)
        EM(i, 5)=OXD(14)/(OXD(13)+OXD(14)+0. 0001)
    end if
else if (Minerl.eq. 9) then
    Sum=OXD(5)+OXD(6)+OXD(9)
    EM(i, 1)=OXD(5)/Sum
    EM(i, 2)=OXD(6)/Sum
    EM(i, 3)=OXD(9)/Sum

```

```

        EM(i, 4)=OXD(13)/(OXD(13)+OXD(14)+0.0001)
        EM(i, 5)=OXD(14)/(OXD(13)+OXD(14)+0.0001)
    else if (Miner1.eq.10) then
        Sum=OXD(10)+OXD(11)+OXD(12)
        EM(i, 1)=OXD(10)/Sum
        EM(i, 2)=OXD(11)/Sum
        EM(i, 3)=OXD(12)/Sum
    end if
    goto 80
160 write (*,180)
180 format (' File read error, data skipped !')
    goto 320
200 write (4,220) (Sams(k),k=1,i)
220 format (/ ' Sample ',10A7)
    do j=1,m
        do k=1,n
            if (OXW(k, j).gt.0.005) then
                write (4,222) OXT(j), (OXW(kk, j), kk=1, i)
222         format (1X,A7,10F7.2)
                exit
            end if
        end do
    end do
    write (4,225) (Total(k),k=1,i)
225 format (1X,' Total ',10F7.2)
    write (4,*)
    do j=1,m
        do k=1,n
            if (COEF(k, j).gt.0.0005) then
                write (4,230) ELM(j), (COEF(kk, j), kk=1, i)
230         format (1X,A7,10F7.3)
                exit
            end if
        end do
    end do
    write (4,*)
    if (Miner1.le.10) then
        do j=1,IM(Miner1)
            write (4,230) ET(j,Miner1), (EM(k, j), k=1, i)

```

```

        end do
    end if
    write (4,240) (GFW(k),k=1,i)
240  format (/1X,'GFW',4X,10F7.2)
    if (Miner1.eq.5.or.Miner1.eq.6) then
        write (4,242) (Vcell(k),k=1,i)
242  format (1X,'Vcell',2X,10F7.2)
        write (4,244) (DST(k),k=1,i)
244  format (1X,'DST',4X,10F7.3)
        write (4,246) (RI(k),k=1,i)
246  format (1X,'RI',5X,10F7.3)
    end if
    write (4,248) (REK(k),k=1,i)
248  format (1X,'REK',4X,10F7.4)
    if (i.lt.n) then
300  write (*,310) OFN
310  format (/5X,'Edit ',A,' to look over the result !')
        goto 20
    end if
    goto 78
320  end
*****
subroutine SULFID
*   For deriving formulas of sulphides from probe analyses.
*   Written by MA Hongwen, Feb. 1996
*   China University of Geosciences, Beijing 100083
*   Sample----Sample name      m----element numbers
*   EQW----equivalent weights  SUL(m)----element analyses data(wt%)
*   Coef----coefficients(anion-based)
*   V.02/23/96
    parameter (n=10,m=20)
    character ELM(m)*3, Sample*6, Sams(n)*6, OFN*10, Job
    dimension EQW(m), SUL(m), NEL(m), Coef(n,m), Total(n), GFW(n), SWT(n,m)
    data ELM/  'Fe','Co','Ni','Cu','Zn','Cd','Hg','Pb','Ag',
$  'Au','Al','Ga','In','Tl','Ge','S','Se','Te','As','Sb'/
    data EQW/55.847,58.9332,58.70,63.546,65.38,112.41,200.59,207.2,
$  107.868,196.9665,26.9815,69.72,114.82,204.37,72.59,32.06,78.96,
$  127.60,74.9216,121.75/
    write (*,*) 'Output filename = ?'

```

```

      read (*,10) OFN
10  format (A)
      open (4,file=OFN,status='unknown')
      write (*,*) 'Anion atoms(pfu) = ?'
      read (*,*) NSul
      write (*,*) ' Select elements:'
      ne=0
      do j=1,m
          write (*,15) ELM(j)
15      format (1X,A3,' (Y/N)?')
          read (*,10) Job
          if (Job.eq.'Y'.or.Job.eq.'y') then
              ne=ne+1
              NEL(ne)=j
          end if
      end do
      i=0
20  i=i+1
      do j=1,m
          SUL(j)=0
      end do
      write (*,*) 'Sample = ?'
      read (*,10) Sample
      do j=1,ne
          write (*,30) ELM(NEL(j))
30      format (1X,A3,' = ?')
          read (*,*) SUL(NEL(j))
      end do
      Sams(i)=Sample
      Total(i)=0
      do j=1,ne
          SWT(i,j)=SUL(NEL(j))
          Total(i)=Total(i)+SUL(NEL(j))
      end do
      do j=1,ne
          SUL(NEL(j))=SUL(NEL(j))/EQW(NEL(j))
      end do
      Csum=0
      do j=16,20

```