

6791

56.7

数学地质丛书

岩石化学 与多元统计

刘昌实 牟惟熹 辛克礼



地质出版社

数学地质丛书

岩石化学与多元统计

刘昌实 牟惟熹 辛克礼

地质出版社

岩石化学与多元统计

刘昌实 牟惟熹 辛克礼

责任编辑：高书平 杨友爱

地质出版社出版

(北京西四)

地质出版社印刷厂印刷

(北京海淀区学院路29号)

新华书店北京发行所发行·各地新华书店经售

开本：850 × 1168 $\frac{1}{32}$ 印张：8 $\frac{1}{4}$ 插页2 字数 180000

1987年6月北京第一版·1987年6月北京第一次印刷

印数：1—1970册 国内定价：2.40 元

统一书号：13038·新303

前 言

本世纪初,在火成岩研究的推动下,化学方法逐步渗透到岩石学领域,使岩石化学成为岩石学研究的一个不可缺少的方面。许多著名的岩石学家,如尼格里、巴尔特、克劳斯、伊丁斯、皮尔逊、华盛顿(CIPW)以及查瓦里茨基等相继创建了各自的为表示岩石化学成分特征的数据归纳方法,促进了这个领域的开拓。这些方法都有各自的适用范围而一直应用至今。本书第一篇以很简要的篇幅阐明了这些方法的原理以及运用,并且设计了相应的BASIC程序,给出了近二十年来在岩石化学研究方面被认为行之有效的许多参数,供读者选用,这无疑是很必要的。作者在第一篇的第六章,针对目前广为流行的CIPW标准矿物计算方法中存在的缺点,提出了含黑云母的标准矿物计算方法,经过较长时间的计算考验,证明是合理的。我们相信这对我国南方广泛分布的中—酸性火成岩的化学成分的研究将起推动作用。

随着近代岩石学的发展,经典岩石化学研究方法已不敷应用,对岩石化学提出了新的要求。多元统计方法的引进给岩石化学研究的深化拉开了新的序幕。它不但由于计算机的使用而加快了成果的取得,更重要的是合理的数学模型使所提供的成果具有更高的精度,更强的综合能力和更丰富的地质信息。作者在第二篇中以华南花岗岩的同位素年龄、化学成分、稀土配分、黑云母演化等丰富资料为素材,运用多元统计方法,总结出许多有关华南花岗岩成因、分类、时空分布、演化等诸方面的重要结论,作了较成功的尝试,值得借鉴。我们相信,随着计算机在这个领域的应用和推广,经典和统计方法的结合,势将拓宽岩石化学研究的路子,促进岩石化学不断向前发展,预料将会取得更可喜的成果。

王德滋

1985.4.27

目 录

第一篇 岩石化学计算方法及计算机程序..... (1)

第一章 P. 尼格里数值法..... (3)

一、计算概要..... (3)

二、程序简易框图..... (5)

三、尼格里数值法程序..... (5)

四、输出格式..... (5)

五、程序使用说明..... (6)

六、应用实例..... (7)

第二章 A. H. 查瓦里茨基数值法..... (10)

一、计算概要..... (10)

二、程序简易框图..... (13)

三、查瓦里茨基方法程序..... (13)

四、输出格式..... (14)

五、程序使用说明..... (14)

第三章 T. 巴尔特等体积阳离子数 算法(氧离子法)..... (15)

一、计算概要..... (15)

二、巴尔特氧离子法程序..... (16)

三、输出格式..... (16)

四、程序使用说明..... (16)

五、应用实例..... (16)

第四章 CIPW 标准 矿物 算法..... (21)

一、计算概要..... (21)

二、程序简易框图..... (26)

三、CIPW 标准 矿物 计算程序..... (27)

四、输出格式..... (27)

五、程序使用说明..... (28)

六、问题 讨论..... (31)

第五章 T. 巴尔特-P. 尼格里 标准矿物 分子法.....	(38)
一、计算概要	(38)
二、巴尔特-尼格里标准矿物分子法计算程序.....	(41)
三、输出格式	(41)
四、程序使用说明	(41)
五、应用	(42)
第六章 含黑云母标准矿物的计算方法(DGNU) 程序设 计	(44)
一、问题的提出	(44)
二、黑云母在岩石中的含量	(44)
三、黑云母化学成分与主岩化学成分的对联系	(46)
四、有关氧化物扣除量的计算	(48)
五、DGNU 程序的钠长石分配.....	(49)
六、DGNU 程序的岩石分类命名	(51)
七、结果检验	(51)
八、含黑云母标准矿物计算程序(DGNU).....	(55)
九、输出格式	(55)
十、综合应用例	(56)
第七章 火成岩钙碱系数的计算.....	(64)
一、计算原理	(64)
二、火成岩钙碱系数计算程序	(66)
三、程序使用说明	(66)
四、计算实例	(66)
五、输出格式	(67)
第八章 岩石化学数据顺序文件的建立	(70)
一、概说	(70)
二、建立数据顺序文件的DATAR程序.....	(73)
三、读出顺序文件的 DATAW 程序	(73)
第九章 APPLE II 微机简述	(74)
一、系统起动	(75)
二、新磁盘格式化	(75)
三、全盘拷贝	(76)

四、列磁盘目录	(77)
五、部分拷贝	(77)
六、询问磁盘中文件所占空间和剩余空间	(78)
七、与打印机联机	(79)
八、MBASIC 进驻内存	(79)
九、键入应用程序	(79)
十、程序存入磁盘	(80)
第一篇参考文献	(81)
第二篇 统计学方法在岩石化学研究中的应用	(85)
绪论	(85)
第一章 参数估计	(88)
一、数据整理	(88)
二、平均值 标准差 变异系数	(89)
三、频率表和直方图	(94)
四、分布型式	(99)
第二章 多元统计方法概要	(105)
一、聚类分析	(105)
二、对应分析	(112)
三、因子分析	(115)
四、判别分析	(117)
五、趋势面分析	(119)
第三章 花岗岩类岩石化学成分聚类分析	(123)
一、多元统计方法在岩石分类研究中的意义	(123)
二、华南花岗岩类岩石化学成分聚类分析	(124)
第四章 华南花岗岩的时空分布及其演化的统计规律	(134)
一、华南花岗岩分布概况	(134)
二、地壳构造运动与花岗岩形成作用	(135)
三、华南花岗岩同位素年龄值的频率分布	(136)
四、同位素年龄值最优分段结果及解释	(138)
五、花岗岩年龄值的空间分布	(148)
六、华南不同时代花岗岩成分演化	(151)
第五章 华南不同成因类型花岗岩的化学成分统计对比	

.....	(165)
一、花岗岩成因类型	(165)
二、参与统计的原始材料	(168)
三、两类花岗岩岩石化学基本特征	(168)
四、两类花岗岩的聚类	(172)
五、化学成分提供的花岗岩源区的性质	(177)
第六章 花岗岩中黑云母化学成分及岩石 稀 土 元 素 提	
供的成因信息	(185)
一、华南两类不同成因花岗岩的黑云母化学成分的统计特征	
.....	(185)
二、花岗岩成因的稀土证据	(203)
第二篇参考文献	(217)
附录 I	(224)
附录 II	(227)
附录 III	(229)
附录 IV	(230)
附录 V	(237)
附录 VI	(241)
附录 VII	(251)
附录 VIII	(254)
附录 IX	(256)

第一篇 岩石化学计算方法 及计算机程序

火成岩化学成分是用氧化物重量百分比表示的。岩石中主要造岩氧化物有： SiO_2 、 TiO_2 、 Al_2O_3 、 Fe_2O_3 、 FeO 、 MnO 、 MgO 、 CaO 、 Na_2O 、 K_2O 、 P_2O_5 等。人们研究火成岩化学成分的目的旨在完成火成岩石学研究中二项基本任务：其一是划分火成岩系列的碱性程度，查明碱性程度差别的化学性标志及其区域性分布特点；其二是确立火山岩化学成分行之有效的分类方法，这对玻璃质、隐晶质火山岩的划分尤为重要。为此，数十年来岩石学家提出了多种不同的计算方法，从不同角度寻找火成岩化学成分之间的内在联系，探讨火成岩在全球不同构造单元内的分布规律，阐述在不同岩浆作用下火成岩系列的演化特点，查明成岩元素的演变与成矿元素演化间的内在联系，为矿产预测提供必要的岩石学依据。随着岩石学基础理论研究的步步深入，岩石化学已成为岩石学研究领域中一支不可缺少的方面军。

本篇重点介绍若干经典性的岩石化学算法。这些方法在国内、外有较广泛的应用。主要有尼格里数值特征法、查瓦里茨基数值特征法、巴尔特等体积阳离子数算法、CIPW标准矿物算法以及作者拟定的含黑云母的标准矿物算法等。为了使上述计算方法有更广的应用范围，在编制上述方法计算机程序时加入了近几十年来新提出的若干岩石化学指数，如里特曼岩系指数、赖特的碱度率、绍汤和塔特尔的分异指数等，以尽量完善输出数据，利于在岩石演化方面的综合研究工作的开展。

本篇程序中与原子量有关的转换系数的计算，均以南京大学化学系（1974）编制的元素周期表为准。所用元素的原子量为：

$\text{Si}=28.086$, $\text{Ti}=47.90$, $\text{Al}=26.98154$,

Fe=55.847,	Mn=54.9380	Mg=24.305,
Ca=40.08,	Na=22.98977,	K=39.098,
H=1.0079,	C=12.011,	Ni=58.70,
Cr=51.996,	O=15.994,	S=32.06.

第一章 P.尼格里数值法

一、计算概要

岩石的化学成分是鉴别岩石的重要标志。其化学成分以如下氧化物的组合来加以表示：

AL 表示岩石化学成分中 Al_2O_3 的总分子数。该值在火成岩中含量较为稳定。

FM 表示 $2 \times \text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{FeO} + \text{MnO} + \text{MgO}$ 分子数之总和。在火成岩中该值高表示岩石基性程度高。反之，酸性程度高。

C 表示 CaO 分子数。在火成岩中该值高标志着岩石中斜长石富钙，属基性程度高的岩石。反之，属酸性程度高的岩石。

ALK 表示岩石化学成分中 $\text{Na}_2\text{O} + \text{K}_2\text{O}$ 分子数之和。在火成岩中ALK值高，岩石碱性程度高。

火成岩中上述四组数值在一定范围内变化，彼此相互制约。但在沉积岩或由沉积变质而形成的不同成分变质岩中，其变化范围十分宽阔。粘土岩的AL值特高，石灰岩和泥质灰岩的C值特高等。因而，在fm—al—c—alk四面体投影图内不同成因的岩石在一定地段集中，可借此判断变质岩的原岩类型（正变质岩或副变质岩）。见图1-1-1。

计算步骤

1° 把氧化物重量百分数换算成分子数，将 Fe_2O_3 分子数乘以2并加入到FeO分子数内。

$$\text{AL} = \text{Al}_2\text{O}_3 \quad \text{FM} = \text{FeO} + \text{MgO} + \text{MnO}$$

$$\text{C} = \text{CaO} \quad \text{ALK} = \text{Na}_2\text{O} + \text{K}_2\text{O}$$

$$\Sigma = \text{AL} + \text{FM} + \text{C} + \text{ALK}$$

$$al = AL \times 100 / \Sigma \quad fm = FM \times 100 / \Sigma$$

$$c = C \times 100 / \Sigma \quad alk = ALK \times 100 / \Sigma$$

$$Si = SiO_2 \text{ (分子数)} \times 100 / \Sigma$$

$$p = P_2O_5 \text{ (分子数)} \times 100 / \Sigma$$

2° 计算补充数值 (氧化物用分子数)

$$mg = MgO / FM \quad o = 2 \times Fe_2O_3 / FM$$

$$k = K_2O / ALK \quad t = al - (alk + c)$$

t 为岩石铝过饱和程度的指标, $t > 0$ 为铝过饱和类型。

$t < 0$ 为碱过饱和或正常类型。

3° 石英值(qz)的计算

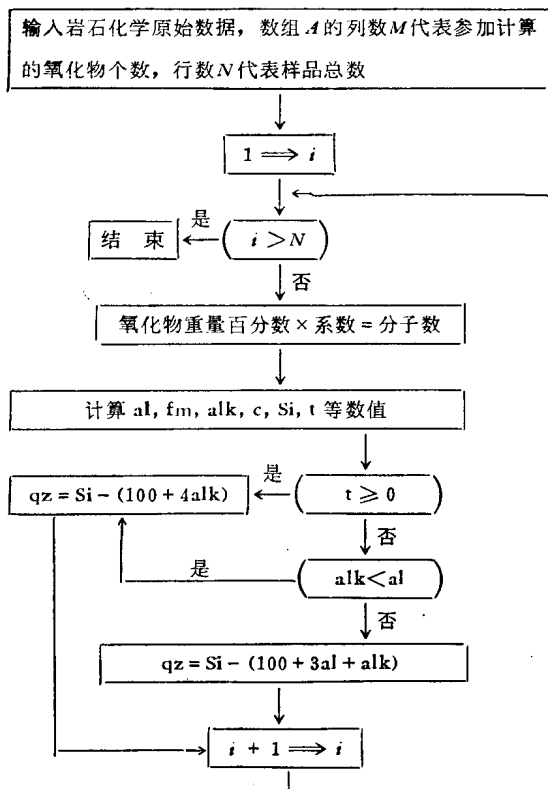
$$\text{若 } t \geq 0 \quad qz = Si - (100 + 4alk)$$

若 $t < 0$

$$(1) \text{ 若 } alk < al < alk + c \quad qz = Si - (100 + 4alk)$$

$$(2) \text{ 若 } alk > al \quad qz = Si - (100 + 3al + alk)$$

二、程序简易框图



三、尼格里数值法程序

(见附录 I)

四、输出格式

广西贺县英阳关细碧岩平均值 ($N = 9$) 尼格里数值计算结果

(资料由林承毅提供)。

NO = 1

SiO ₂ = 52.770	TiO ₂ = 0.780	Al ₂ O ₃ = 16.400	Fe ₂ O ₃ = 6.530
FeO = 4.360	MnO = 0.230	MgO = 5.000	CaO = 4.880
Na ₂ O = 4.850	K ₂ O = 1.320	P ₂ O ₅ = 0.180	

NIGGLI PARAMETERS

al = 26.37	fm = 44.23	alk = 15.13	c = 14.27
Si = 144.01	t = 1.60	p = 0.21	mg = 0.46
o = 0.30	k = 0.15	qz = -16.51	c/m = 0.32
No = 3.00	Mesla X = 0.69	Mesla Y = 0.78	Ok M = 24.85
Ok C = 24.26	Ok F = 29.21	Moel X = 211.07	Moel Y = 473.89
Ceml aY = 41.21	Lek Y = 11.24	Lek MG = 64.32	Le kC = 19.95
Lek AL = 15.73	Cemeh A = 34.12	Cemeh C = 10.15	Cemeh FM = 55.72
Shaw F1 = -6.86	Shaw F2 = 1.30		

五、程序使用说明

1° 岩石化学原始数据按二维半动态数组 $A(N, M)$ 输入。数组 A 的行数 (N) 代表样品个数，数组 A 的列数 (M) 代表变量的个数，程序中安排的 M 值以不超过 16 为限。变量中氧化物安排的先后顺序为 SiO₂, TiO₂, Al₂O₃, Fe₂O₃, FeO, MnO, MgO, CaO, Na₂O, K₂O, P₂O₅, H₂O (包括烧失量), CO₂, S, Cr₂O₃, NiO 等。数据由行号 610 DATA 键入，每行可键入二个样品。第一个样品键入完毕后再键入第二个，以此类推，直至全部样品键毕。

2° 程序执行时进行人机对话。当见到屏幕上出现 NUMBER OF SAMPLE? 时，操作者需键入本次计算的样品个数 N 。接着当出现 NUMBER OF VARIATION? 时，需键入本次计算的变量个数 (即氧化物个数)。

3° 每个样品输出表中，在 (NIGGLI PARAMETER) 栏目下，第 1—11 参数为尼格里特征数值，代号同 (计算概要)。c/m 是 c/fm 值，No 是作四面体展开投影时所要选择的面号码，第 14—30 是为恢复变质岩原岩成分时所要考虑的参数，其代号和含

义如下:

(1) Mesla X, Mesla Y 米斯拉^①(1971)为区分正一副角闪岩所作的直角坐标图解。Mesla X=F, Mesla Y=TiO₂。

(2) Ok M, Ok C, Ok F 沃克^①(1960)提出的区分正一副角闪岩的三组分图解。Ok M=MgO, Ok C=CaO, Ok F=FeO。

(3) Moel X, Moel Y 莫依内^①(1968)提出的直角坐标图解,用以区分基性组分的正一副变质岩。Moel X=Ca+Mg, Moel Y=Al+Fe+Ti(Ca, Mg, Al, Fe, Ti为原子数乘以1000)。

(4) Cemla Y 西蒙南^①(1953)提出的直角坐标图解。用于区分酸性—基性组分的正一副变质岩。Cemla Y=(al+fm)-(c+alk), X=Si。

(5) Lek Y 利克^[36](1964)提出的直角坐标图解,用以区分成分呈系列变化的正一副变质岩。Lek Y=(al-alk), X=c。

(6) Lek MG, Lek C, Lek AL 利克^[36](1964)提出的用于变质岩原岩类型恢复的三组分图解。Lek MG=100 mg, Lek C=c, Lek AL=al-alk。

(7) Cemeh A, Cemeh C, Cemh FM 谢缅年科^①(1966)提出的A—C—FM图解,用以划分变质岩的原岩成分。A=Al₂O₃, C=CaO, FM=2(Fe₂O₃+FeO)+MgO。将A, C, FM换算成百分数。

(8) Shaw F1 肖^[51](1965)提出区分正一副角闪岩的判别函数。

(9) Shaw F2 肖^[52](1972)提出区分正一副变质岩的判别函数。以上两判别函数大于零时为正变质岩,反之为副变质岩。

六、应用实例

在不同成因的区域变质作用地区,往往发育着程度不同的区

● 中国地质科学院情报所(1975);变质岩的原岩识别及其恢复方法。

域变质岩类。恢复这些变质岩类的原岩成分，尤其是在深变质岩出露地区，区分原岩是火成岩，还是沉积岩是一个重要的课题。它对于恢复区域性构造环境有着重要的意义。

火成原岩和沉积原岩形成于截然不同的地质环境里，两大类原岩在主元素丰度、分布模式等方面都具有明显的差异。利用这种差异来判断正一副变质岩是变质岩原岩成分恢复的重要方法之一。

将程序输出的尼格里数值 al , alk , c , fm 在三维空间等边四面体内进行投影。由于三维空间的立体投影不够直观，尼格里建议将立体投影转换成平面投影（图1-1-1）。其方法是在 $c-fm$ 棱上选取 $c/fm = 5/95$ 、 $15/85$ 、 $25/75$ 、 $35/65$ 、 $45/55$ 、 $55/45$ 、 $65/35$ 、 $75/25$ 、 $85/15$ 、 $95/5$ 的点。并通过上述诸点与 al , alk 角顶作 10 个切面（I, II, ..., X），这些切面可作为 $c/fm = 0/100 \sim 10/90$ ， $10/90 \sim 20/80$ ，..., $90/10 \sim 100/0$ 这 10 个小四面体的中切面。凡投影点落在 $c/fm = 0/100 \sim 10/90$ 小四面体内的所有点，都可近似地看作投影在 I 号平面内，余类推。这样划分后，再将 I—X, II—IX, ..., V—VI 的切面依次沿 $al-alk$ 棱展开，成为五个菱形切面，这样便将菱形四面体的立体投影转换成在五个菱形切面上的平面投影。

由上述转化可知，投影第一步必须计算 c/fm 比值，以便选择投影面号。然后再依据 al , alk , $(c + fm)$ 值进行三组分投影。

尼格里四面体展开图能区分火成岩和沉积岩。因而也能区分正变质岩和副变质岩。但在正变质岩情况下，靠尼格里图解无法区分岩石类型，因而具有很大局限性。在此情况下可参考本程序输出的其他有关参数。

图 1-1-1 为广西贺县英阳关板溪群变质火山杂岩的尼格里数值的投影。辉绿岩、细碧岩、角斑岩、微晶闪长岩等均落在尼格里四面体展开图上的火成岩区段内。多数样品密集地集中在第 3、4 号平面内。证实该变质岩层的原岩为火成岩。

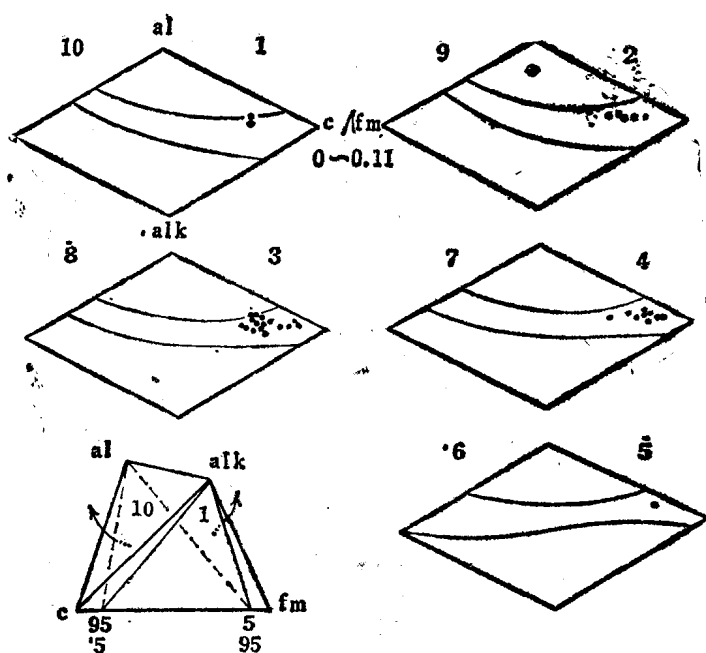


图 1-1-1 广西贺县英阳关变质火山杂岩(晚元古代) 尼格里四面体投影. 左下角为尼格里 $al-alk-c-fm$ 四面体展开方法示意图.