

岩石化学计算系统

谭光国 江晓波 张玉生 何桂芝

提要 岩石化学是以岩石全分析数据为基础,研究各种岩石及其自然组合的化学联系,分类命名,成因,演化及其与成矿元素的内在联系的一门科学。

岩石化学计算系统主要由数据的编辑处理,岩石化学计算与成图,岩石化学数据管理三大部份组成。

该系统汇集了国内外岩石化学计算方法202种,附图242张,使岩石化学分析数据的搜集,整理,计算成图等形成一个完整的微机处理系统。

关键词: 岩石化学 计算系统 数据

岩石化学是以岩石全分析数据为基础,研究各种岩石及其自然组合的化学联系,分类命名,成因,演化及其与成矿元素的内在联系的一门科学。岩石化学数据及各种岩石化学计算结果在岩石的分类命名,原岩恢复,岩浆岩成因及其形成时的物理化学条件,岩石与大地构造位置的关系,上地幔岩的研究以及岩石的含矿性诸方面有着十分广泛的用途。是地质工作中不可缺少的基础性研究工作。

随着地质工作的不断深入发展,如何搜集,整理,保存和利用大量的岩石化学数据,为地质工作者在地质学的理论研究和找矿勘探工作中提供理论依据,是每一个地质工作者十分关心,且急待解决的问题。

近年来,随着计算机在地质工作中的普及应用,有的单位已编制了部分岩石化学计算程序,但大多数程序均只能完成少数几种岩石化学计算方法,且不能成图,更没有考虑到岩石化学数据的管理问题,不能充分利用这些宝贵数据,因此不能满足地质找矿工作发展的需要。为此,我院承担了冶金部1985年科研专题:“地质数据处理及科学计算程序系统开发”。(后经研究确定以岩石化学为主)汇集了国内外岩石化学计算方法202种,附图242张,使岩石化学分析数据的搜集,整理,计算成图等形成一个完整的微机处理系统—岩石化学计算系统。

岩石化学计算系统主要由数据的编辑处理,岩石化学计算与成图,岩石化学数据管理三大部份组成。岩石化学数据的编辑处理主要由数据文件的建立,岩石化学数据的输入,打印,检索,修改,查错和文件类型转换等模块组成,岩石化学计算主要由选择岩石化学方法,形成用户程序,岩石化学计算与成图等模块组成,岩石化学数据管理主要是对岩石化学数据进行建库,入库,出库,追加,插入,删除,修改,检索,打印等一系列操作组成。

一、系统结构

本系统是一个多层树状结构，如图 1 所示：

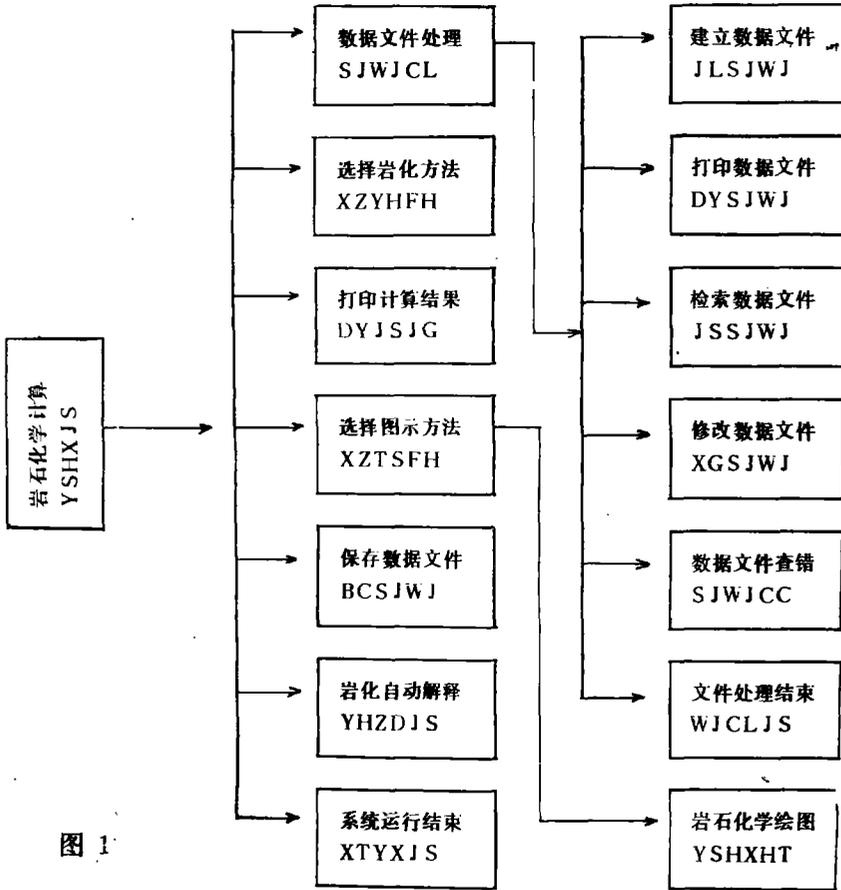


图 1

二、岩石化学计算程序的形成

形成岩石化学计算程序如图 2 所示：

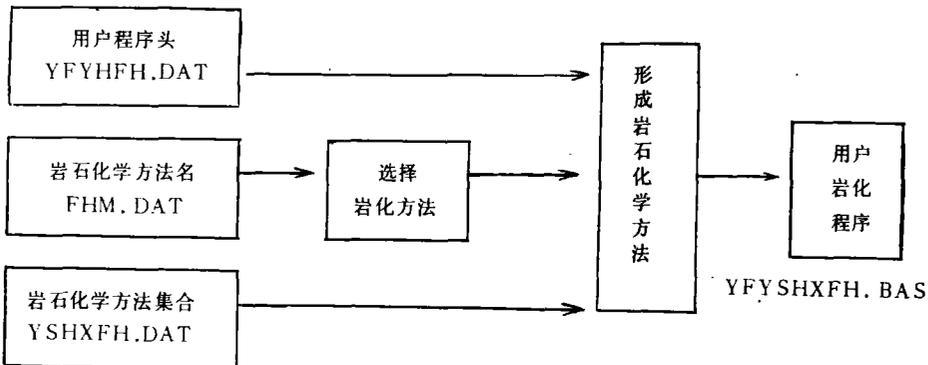


图 2

模块功能表

表1

模块名称	主要功能	控制块	处理块	DBASE III 块
YSHXJS	显示系统功能, 控制转移到各功能块	*		
SJWJCL	显示数据编辑功能, 控制转移到各子块	*		
XZYHFFH	选择岩石化学方法, 形成用户程序		*	
XZTSFH	选择图示方法, 形成绘图程序		*	
DYJSJG	打印岩石化学计算结果		*	
BCSJWJ	将数据追加到新建的岩石化学数据库中		*	
YHZDJY	对岩石化学标本作自动分类		*	
XTYXJS	系统运行结束		*	
JLSJWJ	建立系统用随机字符文件		*	
DYSJWJ	打印用户岩石化学数据		*	
JSSJWJ	检索用户岩石化学数据		*	
XGSJWJ	修改用户岩石化学数据		*	
SJWJCC	检查用户岩石化学数据中的错误		*	
WJCLJS	数据处理结束, 将字符文件改为数值文件		*	
TSHXHT	绘制岩石化学图件		*	
DYYHTL	打印岩石化学图例		*	
YSHXSJC	岩石化学数据库处理			*
EMPFMT	数据库格式文件			*

系统起动模块 XZYHFFH.BAS, 当用户选择第一个功能时, 系统从 FHM.DAT 文件中每五个名字一组显示在屏幕上, 由用户选择方法, 直到用户输入“N”而结束选择; 系统记下用户所选择的方法号数, 然后用户选择第二功能时, 系统把用户程序头 YFYHFFH.DAT 考备到用户岩石化学程序文件 YFYSHXFFH.BAS 中, 并从岩石化学方法集合文件 YSHXFFH.DAT 中根据用户所选岩石化学方法的编号取出相应编号的程序块, 写入 YFYHFFH 文件中, 与一起组成用户程序, 再调入内存运行。

用户岩石化学程序 YFYSHXFFH.BAS 是一个临时文件, 系统运行一次 XZYHFFH 后, 它伴随用户选择的方法而变动。

三、岩石化学数据库

系统岩石化学数据库管理如图 3 所示, 进入数据库的数据可以共享。

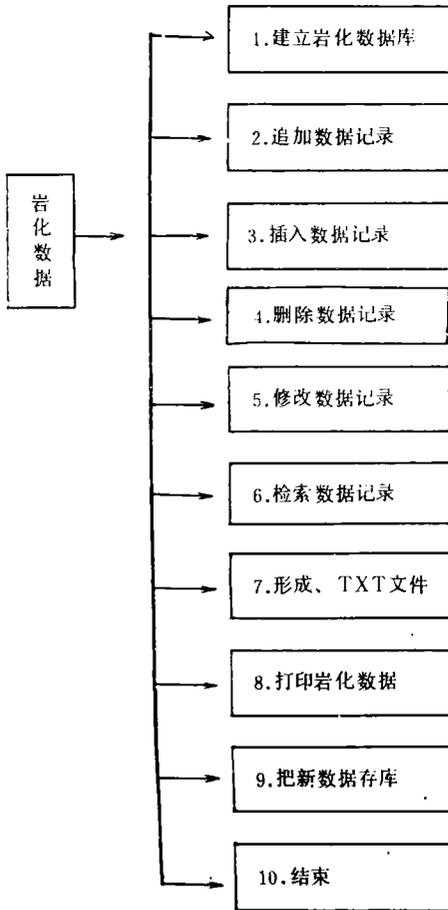


图 3

四、系统特点

1. 系统汇集了国内外岩石化学计算方法202种, 附图件242张, 其中变质岩计算方法43种, 附图69张。沉积岩的计算方法25种, 附图22张, 火成岩的计算方法134种, 附图151张。系统既可进行单个方法计算, 也可以根据地质工作者的需要选择多个方法同时计算。

2. 系统功能选择, 系统提示, 错误处理等均以汉字提示, 使用十分方便。

3. 系统具有很强的数据编辑, 修改, 打印, 检索和查错等功能。在修改错误数据时, 既可以按行, 也可以按列或对单个数据进行修改。还可以进行插入, 追加, 合并等。在用户输入数据时, 系统不仅对每一个数据提示范围, 而且只定义数字和小数点键, 避免了输入出错。在查错过程中, 系统不仅指出错误性质, 而且能显示出错的氧化物位置。

4. 系统对用户数据具有库管理能力,

便于数据长期保存, 以备后用。对计算结果也可用文件保存, 以供打印多份数据。

5. 当操作人员不知选择什么方法进行计算时, 本系统提供一个智“能”系统, 先对本标本按沉积岩, 火成岩和变质岩进行岩类划分, 然后再对某一岩石进行更详细的划分。例如: 火成岩可划分为酸性岩, 中性岩, 基性岩和超基性岩四类, 基性岩又可分为拉斑玄武岩类和碱性玄武岩类等。最后得到该岩石的分类命名。

五、应用

岩石化学可以应用于以下几个领域:

1. 岩石分类: 一般岩石学的分类是建立在造岩矿物定性定量分类基础上, 这对于显晶质的岩石是适宜的。但对于隐晶质岩石, 尤其是火山岩, 由于结晶程度差, 严重影响着实际矿物的精确鉴定, 而使以矿物成分为基础的分类方案十分不准确。这时若采用岩石的化学分类, 则会显示出优越性来, 尤其随着岩石化学计算方法的改进。计算出的标准矿物更接近实际矿

物使岩石的化学分类方案更接近传统的矿物分类方案。更宜为人所接受,岩石的化学分类一般有三种形式:(1)直接用氧化物的重量百分数。例如:苏联科学院岩石学委员会用 SiO_2 和 $\text{K}_2\text{O} + \text{Na}_2\text{O}$ 为参数,对火成岩进行分类,将火成岩按 SiO_2 划分为酸性岩,中性岩,基性岩和超基性岩。再按 $\text{K}_2\text{O} + \text{Na}_2\text{O}$ 和 SiO_2 之比将岩石分为碱性岩,次碱性岩和碱度正常岩石。(2)将氧化物重量百分比换算成某种参数或标准矿物分子。例如:国际地质委员会用标准矿物中P, F, Q, A为参数对火成岩进行分类。(3)某种参数与氧化物重量百分比相结合。例如:汤桑的岩浆岩分类图解是用 SiO_2 和分异指数DI为参数进行岩石分类。

2. 变质岩的原岩恢复:在变质岩的工作中一般要解决恢复原岩和确定变质程度两大问题。对于不同性质的变质岩要采用各种不同的方法,其中岩石化学方法是应用较广泛,而且效果较好的方法,尤其在变质程度强烈的地区,原岩的结构构造完全消失,岩石化学方法就会显示其独特作用。尤其是将实验室中的模拟实验结合野外地质,把变质相与矿物共生组合研究,利用岩石化学数据建立起各种相图。使变质岩的研究更深入了一步。原岩恢复大体有以下几种方式:(1)建立判别函数,区分正,付变质岩。例如:Shs w (1972)建立的变质岩判别式可直接用于区分正,付变质岩。(2)利用氧化物的重量百分比或阳离子建立各种图解。例如:K. R 沃克用 $\text{FeO} - \text{MgO} - \text{CaO}$ 三角图解判别正变质岩。(3)利用尼格里数值法的参数,或其它参数组成各种图解。例如:长春地质学院用尼格里数值为参数作图进行变质岩原岩恢复。(4)计算交代物量的进出量,主要用于交代岩的原岩成分的确定和形成过程中组分的变化规律,以及演化趋势,有巴尔特氧法,原子体积法等等。(5)利用变质相图和变质岩矿物共生组合,恢复原岩或计算矿物共生组合。用岩石化学数据建立AFC图解,可用于研究变质相和矿物共生组合,以确定原岩成分及变质程度。

3. 岩相及岩石成因:这是岩石化学理论发展的基础,也代表了岩石化学的发展方向。其中包括了以下几个方面:

1 岩石的矿物及岩浆演化:鲍温(Bowen)根据在硅酸盐熔融体实验基础上提出了著名的鲍温反应原理,虽然其理论基础有严重缺陷,却为岩石学的发展开拓了道路。现在在多元体系下进行的各种岩石学,矿物学的实验更接近于天然岩石形成时的状况。为岩浆岩演化理论和变质作用理论提供了坚实的基础。而岩石化学理论也随之得到发展开始利用岩石化学数据建立各种相图解释。描述岩石成因演化规律。约德(YODER)在多元体系下的玄武岩岩浆演化实验,较系统地解释了玄武岩岩浆的生成和演化过程。

2 确定岩石矿物形成时的条件:自从热力学,动力学和数理统计广泛应用到地质科学以来,在高温,高压熔融实验的基础上,及大量对火山的实地考察的资料,使对温度,压力的确定由定性阶段走向定量阶段。从对单矿物的测温向到利用岩石化学资料,计算某种矿物的结晶温度。由于岩石化学数据比较易得,又具有一定精度。所以用岩石化学方法测温,测压得到广泛的应用。大体也可分为三种方式:(1)直接用氧化物重量百分数。例如:用橄榄玄武岩中六种氧化物重量百分比可直接计算出橄榄石和斜长石的结晶温度。(2)用氧化物的分子数或离子数。Nartan (1978)用九种氧化物的阳离子数来计算岩石中九种矿物的结晶温度。(3)用岩石化学数据换成某种矿物成分求其结晶温度。例如:二长石温度计的应用。

3. 岩石成因学: 目前对岩石成因的研究已经不仅局限在地表露头的范围内, 而已发展到对地壳, 地球的形成及整个天体演化的研究, 主要包括:

(1) 对超镁铁质, 超基性岩的研究: 对比陨石的成分更深入地认识到天体演化和地球形成。一般认为超镁铁质岩是地幔的信使。在地球化学和岩石化学上有其独特的特点。而超基性岩也可分为地幔岩冷侵入的产物和岩浆成因两种, 又可以据其岩石化学成分上的不同。将岩浆成因的超基性岩分为由玄武岩浆分异而成和由超基性橄榄岩浆直接结晶的产物。

(2) 花岗岩: 花岗岩的成因是地质学和岩石学领域中曾经争论最激烈的问题之一。目前公认, 花岗岩可以由玄武岩浆结晶分异而成, 但主要是由地壳重熔和交代形成, 从岩石化学的角度可以区别这两类不同成因的花岗岩。德黑纳秘 (1972) 用 $K-Na-Ca$ 图解来确定这两种不同成因的花岗岩。70年代, 又根据源岩物质和形成环境的差异, 把重熔型花岗岩进一步划分成 I 型和 S 型, 这两种类型的花岗岩又各有其独特的岩石化学特点。而这种划分为找矿提供了依据。例如: 日本的田中节也 (1979) 用 $A-F-C$ 图解区分 I, S 型花岗岩, 同时认为 I 型花岗岩与磁铁矿有关, S 型与钛铁矿关系密切。

(3) 碳酸岩与碱性岩: 过去认为碳酸岩都是沉积形成的, 而碱性岩是岩浆岩同化灰岩的产物, 而现在已经证明碳酸质岩浆的存在, 而岩浆碳酸岩与沉积碳酸岩在岩石化学上是有区别的。沃特克维其 (1970) 曾用 $MgO-CaO$ 图解区分不同成因的碳酸质岩石。而碱性岩也可以是岩浆形成的, 根据岩石化学特点可以对碱性岩进行分类, 这种分类对于研究碱性岩含矿性有着重要意义。

4. 岩石学与构造地质学相结合: 过去构造地质学很难涉及到化学问题。可现代构造地质学却与岩石的化学成分有了密切联系。全球构造体系的形成与地球组分的化学分异相伴随。从发现洋壳几乎由玄武岩组成, 到证明板块的产生, 发展和消亡伴生着岩石的化学成分上的变化。使物理学与化学有机地结合起来, 而岩石化学的应用有以下几个方面:

1 火山岩形成的构造环境: 板块构造证明火山岩的化学成分与构造位置有某些依赖关系。例如: 钙碱性岩系多见于造山带地区, 碱性岩多见于非造山带的断裂区。可以用组合指数和戈蒂尼指数区分火山岩形成时的构造环境。是形成于造山带, 还是形成于稳定区。也可以用皮尔斯判别函数确定不同构造位置中形成的玄武岩类型。

2 岩浆岩的形成深度: 板块构造理论认为, 火山岩的形成与板块构造的俯冲有关, 火山岩中碱金属含量随着震源深度的增加而增加。所以利用岩石化学资料可以推测火山岩的形成深度, 为了解岩浆成因提供线索。NinKovich (1972) 曾研究了火山岩中 K_2O 的含量与其喷发深度的关系, 提出用 K_2O-SiO_2 图解来确定岩浆形成的深度。

3 测定板块运动速度: 由于活火山常沿板块边界产出, 不同性质的板块边界产出的岩石类型不同。由于板块边界运动速度的差异, 可造成岩浆类型的不同。所以根据岩石化学资料可以判断板块动力学的状况。R. Sugisahi (1976) 经研究发现, 岩石中碱金属的含量与板块边界的性质呈相关关系, 可用 K_2O 含量确定板块运动速度。

5. 岩石的含矿性: 岩石与矿石本为一体, 两者在成因上有着密切联系。随着矿床学理论的发展, 尤其是“火山成矿论”和“层控矿床”的理论的出现, 从整体上研究矿床成因已成

为矿床学的发展趋势,这对促进岩石化学的发展起了积极的推动作用,使岩石化学与地质找矿工作的关系日益密切。例如:吴利仁教授对超基性岩的含矿性研究,提出用铁镁指数来判别基性岩和超基性岩的含矿性。江苏地质一队在工作中发现岩石化学与铜矿的关系,用A-SiO₂图解研究岩石的含矿性及斑岩铜、钼矿床的成因。南京大学对花岗岩与稀有、稀土矿产关系的研究等等,都是岩石化学与地质找矿相结合的成果,也代表着岩石化学的发展方向。

岩石化学工作今后的任务是:

1. 研究岩石的分类命名,岩石组合及岩系的化学分类。
2. 研究岩石的化学成分与造岩矿物成分之间的关系。
3. 探讨新的岩石化学计算方法。
4. 寻找岩石含矿性的岩石化学标志。
5. 探讨地质学和岩石化学的理论问题。

该系统在CCDOC控制下,用BASICA和DBASE II语言编制程序。系统结构清晰,可读性好,可靠性高,以菜单方式提供功能选择。本系统功能齐全,图文并茂,运行可靠,具有很强的查错能力。

该系统简单易学,操作方便。系统功能选择和系统提问错误处理等,全部以汉字显示,用户只需几小时的简单学习即可使用自如。

本系统对202种方法及附图均有方法原理,计算步骤和应用实例等详细的说明,以备参考。

THE PETROCHEMISTRY CALCULATION SYSTEM

Tan Guangguo Jing Xiaobo

Zhang Zusheng He Guizhi

Abstract

petrochemistry is a branch of geology based on the chemical analysis of bulk composition studying all kinds of rocks and their native series, classification, naming, origin, evolution and the internal relations with ore-forming elements.

The petrochemistry calculation system is composed of three parts: the data edition and process, the calculation and diagram, and the data management of the petrochemistry.

The system including 202 petrochemistry calculating methods and 242 graphics applied in petrochemistry is an entire microcomputer processing system for collecting, processing, calculating and diagraming of the chemical analysis data.