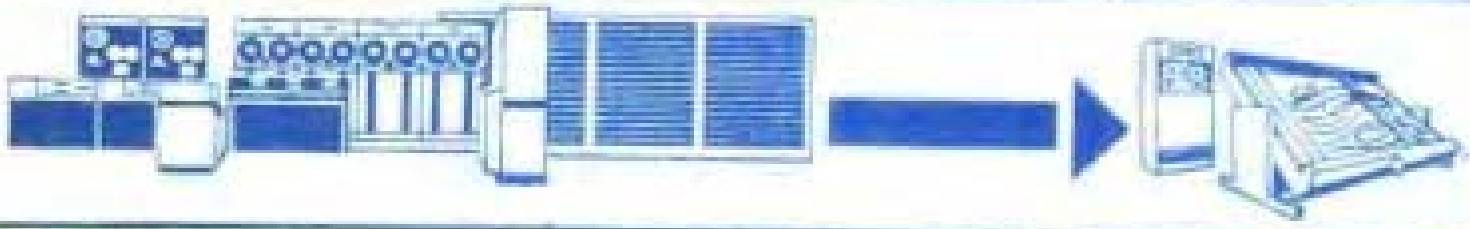
6791
56.7

岩石化学与多元统计

刘昌实　牟惟蓁　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 1/32 印张：8 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计算法(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标准矿物计算法……（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应联系 …… (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在于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计算法。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计算法、CIPW标准矿物计算法以及作者拟定的含黑云母的标准矿物计算法等。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：

Si＝28.086,　　Ti＝47.90,　　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$2\times Fe_2O_3+FeO+MnO+MgO$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Na_2O+K_2O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，值此相互制约。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。

$AL=Al_2O_3$　　$FM=FeO+MgO+MnO$

$C=CaO$　　$ALK=Na_2O+K_2O$

$\Sigma=AL+FM+C+ALK$

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

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

$Si = SiO_2$（分子数）$\times 100/\Sigma$

$p = P_2O_5$（分子数）$\times 100/\Sigma$

2° 计算补充数值（氧化物用分子数）

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

$k = K_2O/ALK$　　$t = al - (alk + c)$

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

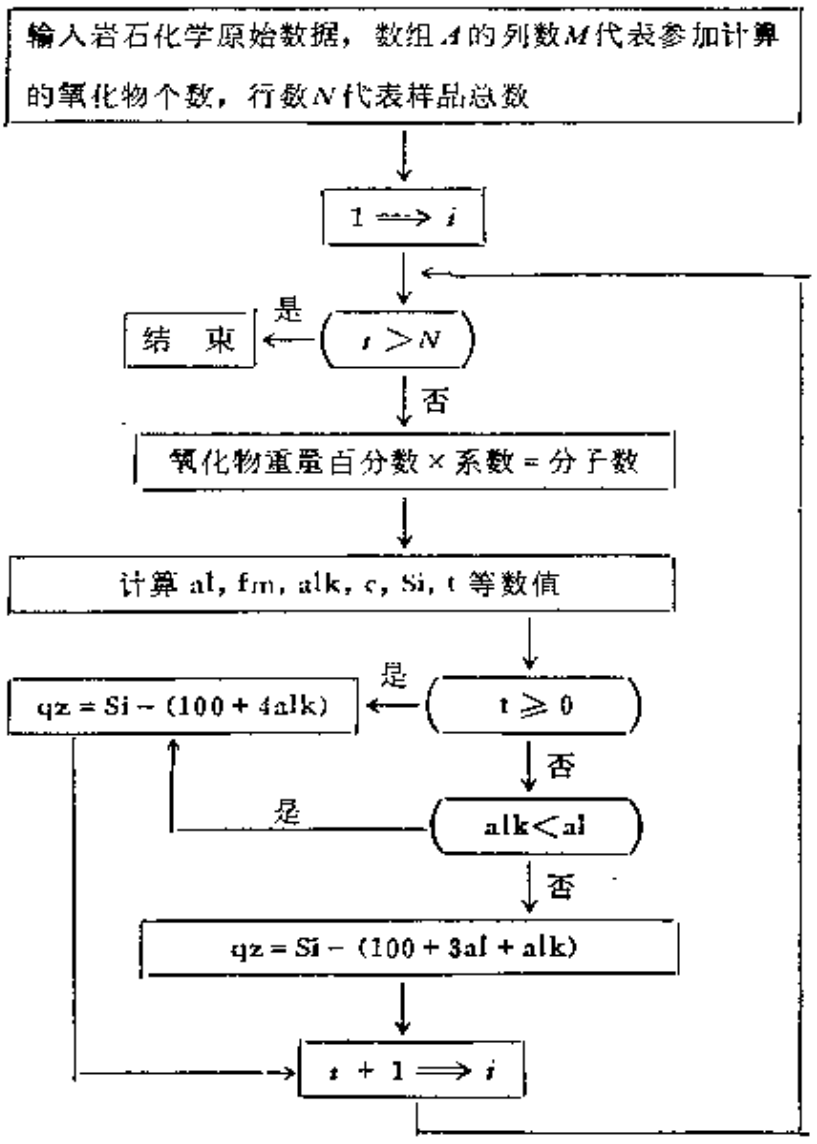
若 $t \geqslant 0$　　$qz = Si - (100 + 4alk)$

若 $t < 0$，

（1）若 $alk < al < alk + c$　　$qz = Si - (100 + 4alk)$

（2）若 $alk > al$　　$qz = Si - (100 + 3al + alk)$

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_2O_3 = 16.400	Fe_2O_3 = 6.530
FeO = 4.360	MnO = 0.230	MgO = 5.000	CaO = 4.880
Na_2O = 4.850	K_2O = 1.320	P_2O_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SiO_2，TiO_2，Al_2O_3，Fe_2O_3，FeO，MnO，MgO，CaO，Na_2O，K_2O，P_2O_5，H_2O（包括烧失量），CO_2，S，Cr_2O_3，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实际样品个数 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❶（1971）为区分正—副角闪岩所作的直角坐标图解。Mesla X=F, Mesla Y=TiO_2。

（2） Ok M,Ok C,Ok F 沃克❶(1960)提出的区分正—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❶(1968)提出的直角坐标图解，用以区分基性组分的正—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❶(1953)提出的直角坐标图解。用于区分酸性—基性组分的正—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—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❶(1966)提出的A—C—FM图解，用以划分变质岩的原岩成分。A=Al_2O_3, C=CaO, FM=2(Fe_2O_3+FeO)+MgO。将A, C, FM换算成百分数。

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

（9） Shaw F2 肖[53](1972)提出区分正—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

---

❶ 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—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＝0/100～10/90, 10/90～20/80, …, 90/10～100/0 这 10 个小四面体的中切面。凡投影点落在 c/fm＝0/100～10/90 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，因面具有很大局限性。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。

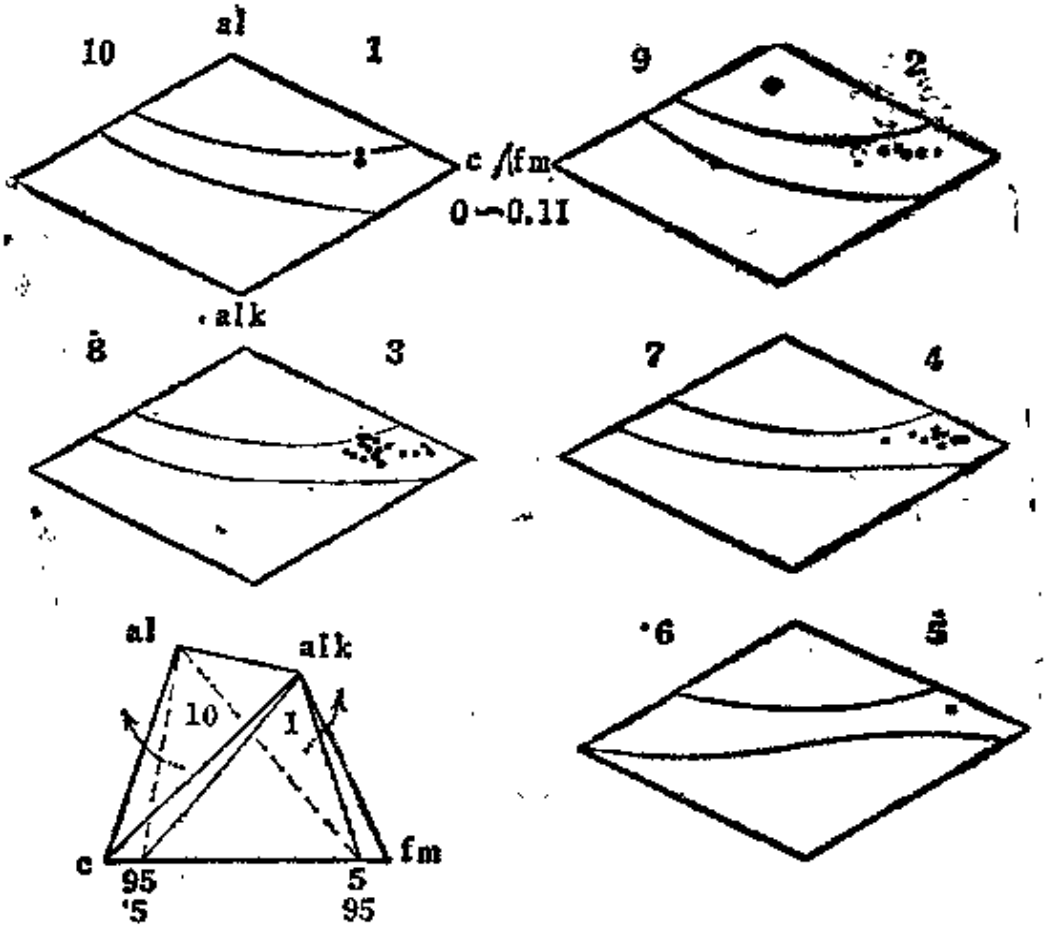


图 1-1-1　广西贺县英阳关变质火山杂岩(晚元古代) 尼格里四面体投影.左下角为尼格里al—alk—c—fm四面体展开方法示意图.

第二章　A. H.查瓦里茨基数值法

一、计算概要

在岩石化学成分中起重要作用的元素有下列七种：Si，Al，Fe，Mg，Ca，Na，K。根据这七种元素在组成造岩矿物时的性质可将它们合并成四组：

A组　组成碱性长石的钠、钾原子数之总和。在正常情况下A＝Na＋K(原子数)。

C组　组成钙长石的Ca的原子数，代表岩石中斜长石的基性程度。

B组　组成深色矿物（碱性深色矿物除外）的Fe、Mg和一部分Ca原子数之和。

S组　硅的总原子数。它的大小可以间接确定石英存在与否，代表岩石酸性程度。

上述四个数值中，如A值很大，岩石趋于碱性；如B、C值很大，岩石趋于基性；如S值很大，则属酸性。因此，这四个数值在岩石学上具有重要意义。

计算步骤

1°　把氧化物重量百分数计算成原子数，并将所得数值乘以1000。

2°　确定岩石化学成分类型，依不同类型选举如下不同的计算程序：

正常类型　　$Na+K<Al<Na+K+2Ca$

$A=Na+K$　　$Al'=Al-(Na+K)$

$C=0.5Al'$　　$Ca'=Ca-C$

$Fe'=Fe^{2+}+Fe^{3+}+Mn$　　$B=Fe'+Mg+Ca'$

$S=Si+Ti$

$c'=Ca'\times 100/B$　　$m'=Mg\times 100/B$

$f'=Fe'\times 100/B$　　$n=Na\times 100/A$

铝过饱和类型　$Al>Na+K+2Ca$

$A=Na+K$　　$C=Ca$

$Al'=Al-(Na+K)-2C$　　$Fe'=Fe^{2+}+Fe^{3+}+Mn$

$B=Fe'+Al'+Mg$　　$S=Si+Ti$

$a'=Al'\times 100/B$　　$m'=Mg\times 100/B$

$f'=Fe'\times 100/B$　　$n=Na\times 100/A$

碱过饱和类型　$Na+K>Al$ 且 $Na+K-Al\leqslant Fe^{2+}+Fe^{3+}+Mn$

$A=Al$　　$Na'=Na+K-Al$

$\bar{C}=Na'$　　$Fe'=Fe^{2+}+Fe^{3+}+Mn-\bar{C}$

$B=Fe'+Mg+Ca$　　$S=Si+Ti$

$c'=Ca\times 100/B$　　$m'=Mg\times 100/B$

$f'=Fe'\times 100/B$　　$n=(Al-K)\times 100/A$

强碱过饱和类型　$Na+K>Al$ 且 $Na+K-Al>Fe^{2+}+Fe^{3+}+Mn$

$A=Al$　　$\bar{C}=Fe^{2+}+Fe^{3+}+Mn$

$Na'=Na+K-Al-\bar{C}$　　$B=Ca+Mg+Na'$

$S=Si+Ti$

$n'=Na'\times 100/B$　　$c'=Ca\times 100/B$

$m'=Mg\times 100/B$　　$n=(Al-K)\times 100/A$

3° 主要数值百分比的计算　分别将各种类型中A、B、C($\bar{C}$)、S相加，设等于N，则

$a=A\times 100/N$　　$b=B\times 100/N$

c(或$\bar{c}$)$=C$(或$\bar{C}$)$\times 100/N$　　$s=S\times 100/N$

4° 石英值(qz)的计算

正常和铝过饱和类型　$qz=s-(3a+2c+b)$；

碱过饱和类型 $qz=s-(3a+2\bar{c}+b)$

总结上述计算可知，不同类型的岩石具有不同的数值特征。组合如下：

正常类型　a, b, c, s和c′, m′, f′, n

铝过饱和类型　a, b, c, s和a′, m′, f′, n

碱过饱和类型　a, b, $\bar{c}$, s和c′, m′, f′, n

5° 利用以上八个数值在四面体展开图内进行投影。向右延伸的轴为a，向左延伸的轴为c，向下延伸的轴为b。asb称为碱性面。csb称为钙碱性面。投影时具体操作如下（见图1-2-1）：

（1） 由s点向下截取b值。

（2） 由s点向右截取a值，在asb平面内得一交点F_1。

（3） 由s点向左截取c值，由(1)和(3)结合得交点F_2。所以每一岩石在平面展开图上都有两个投影点，它们在同一个水平线上。

（4） 若碱过饱和，$\bar{c}$值便向右截取，F_2点也落在asb平面内。

（5） 在asb平面内由F_1点出发，向下截取c′，向右截取m′，连接四边形对角线，该对角线即代表 c′:m′:f′ 向量线，指向右下方。如有a′，则向左截取，向量线指向左下方。

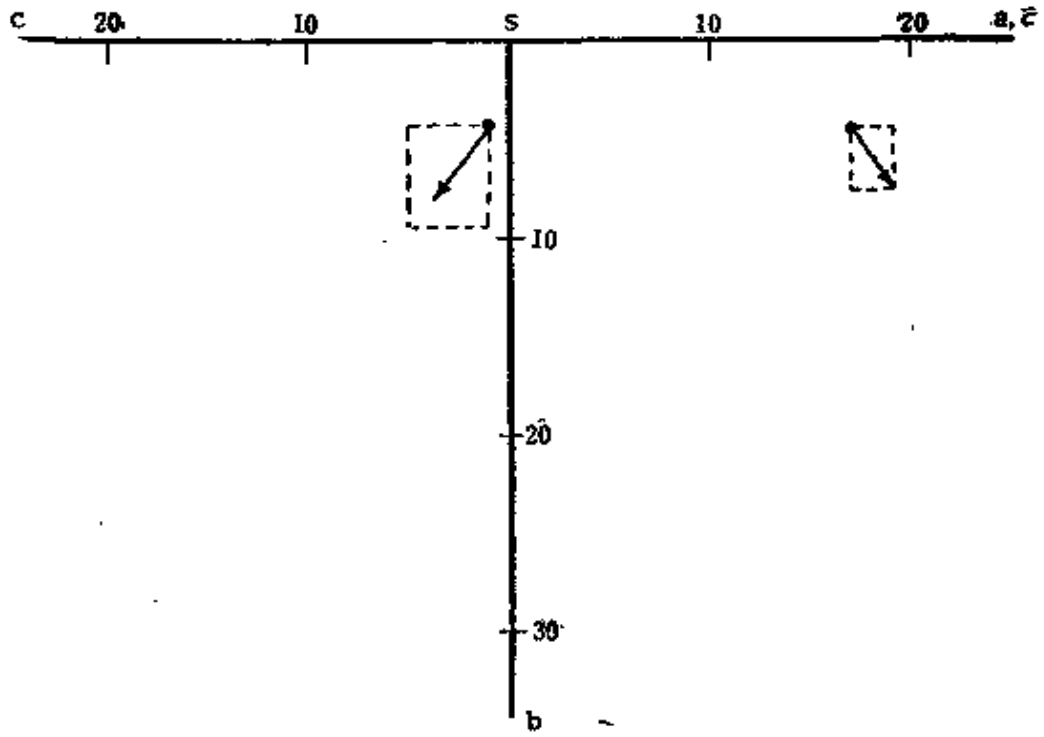
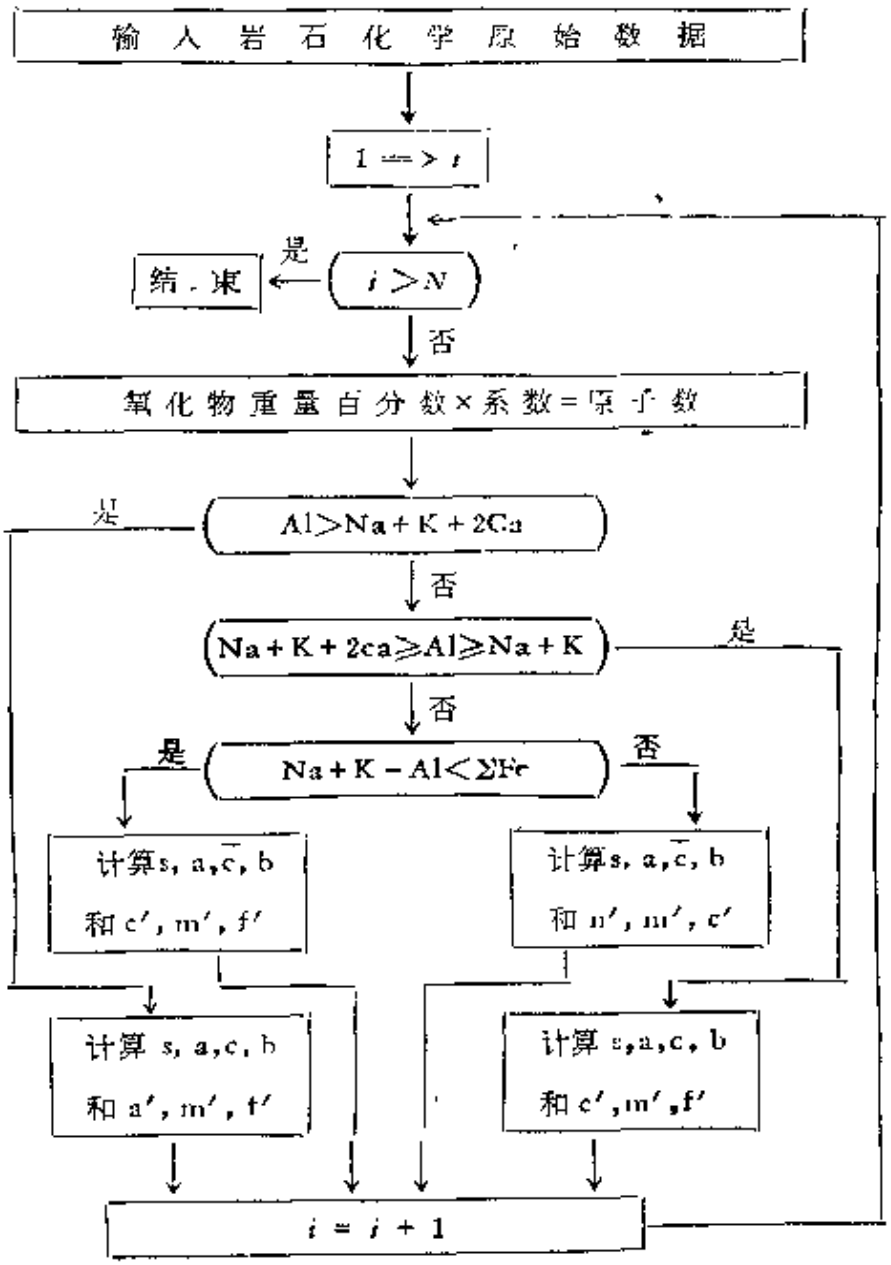


图 1-2-1　青岛红岛流纹岩查氏向量投影（右侧圆点为F_1，左侧圆点为F_2）

（6） 在csb平面内（碱过饱和时在asb），由F_2点出发，向下截取n，向左截取（100—n）。所得矩形对角线便表示n：（100—n）的向量线。为易于观察，规定该向量线末端可延伸或缩短，以便和F_1向量线末端处在同一水平线上。在（6）作图中，坐标比例尺为主坐标比例尺的1/10。

二、程序简易框图



三、查瓦里茨基方法程序

（见附录Ⅱ）

四、输出格式

青岛红岛的流纹岩计算结果如下：

NO = 1

SiO_2 = 70.210	TiO_2 = 0.300	Al_2O_3 = 14.690	Fe_2O_3 = 1.060
FeO = 1.910	MnO = 0.060	MgO = 0.750	CaO = 1.410
Na_2O = 4.850	K_2O = 5.550	P_2O_5 = 0.130	

ZABALESKE PARAMETERS

s = 77.38	a = 17.04	c = 0.99	-c = 0.00	b = 4.59
Q = 19.68	a/c = 17.25	c′ = 14.64	m′ = 26.78	f′ = 58.58
a′ = 0.00	n′ = 0.00	n = 54.36	k = 45.64	= 0.32
Fe₃ = 19.10				

五、程序使用说明

数据键入方法和人机对话同（尼格里方法程序使用说明），但数据需从行号600 DATA 键入。

第三章　T.巴尔特等体积阳离子数计算法(氧离子法)

一、计算概要

大多数火成岩或其蚀变产物是由硅酸盐矿物所组成的。在硅酸盐矿物中,因氧离子半径很大($O^{2-}=1.36$ Å),占据着极大的空间,故在岩石蚀变、交代作用下的物质转移,可以看作是充填在这些大体积氧离子之间的体积小的阳离子相互交换的过程。在规定1600个氧离子所占据的单位体积内,计算出各个阳离子的相对数量,对比蚀变前和蚀变后这些阳离子数目的变化,从而可以用定量方法来表达岩石在不同类型蚀变下哪些元素带进,哪些元素带出,以及它们迁移的相对数量。由子氧离子法具有这样的优点,因而在蚀变岩石、地球化学、矿床学研究中获得广泛的应用。

计算步骤

1° 将氧化物重量百分数换算成原子数(或称离子数)。

2° 氧离子总数 $=2Si+2Ti+1.5Al+1.5Fe^{3+}+Mg+Ca+Mn+0.5K+0.5Na+2.5P+H$

3° 转换系数 $k=1600/$氧离子总数。

4° 计算1600个氧离子所占据的单位体积内各阳离子数目 $Si'=Si\times k$, $Ti'=Ti\times k$, …, $P'=P\times k$。

5° 将$(OH)^-$合并到氧离子中,并将计算出的单位体积内阳离子数作为下标标在元素的右下角,依 K, Na, Ca, Mg, Fe^{2+}, Fe^{3+}, Al, Ti, Si, P, [O, OH]顺序列出"岩石"化学式。

6° 用最有代表性的阳离子的数量变化(如钠长石化用 Na,钾长石化用K,云英岩化用Na、K、Si等)在坐标图上作变异图解,

以说明在蚀变过程中元素的带进和带出（图1-3-1）。

二、巴尔特氧离子法程序

（见附录Ⅲ）

三、输出格式

南岭某地钨锰铁矿区黑云母花岗岩及其蚀变围岩计算结果（原始数据见表1-3-1）。

BARTH PARAMETER

NO	Si	Ti	Al	Fe^{2+}	Fe^{3+}	Mn
1	651.70	1.11	145.20	5.11	3.79	0.41
2	590.46	0.00	183.28	17.64	2.92	0.00
3	738.62	0.25	41.41	10.59	6.27	0.57
4	678.21	0.05	106.39	16.02	14.82	1.62
5	502.54	0.59	262.58	26.19	38.52	0.00

NO	Mg	Ca	Na	K	P	OH
1	3.37	5.78	60.44	50.65		
2	12.27	26.36	87.44	64.84		
3	2.76	15.26	13.73	16.02		
4	3.76	12.57	16.51	37.69		
5	15.68	36.00	37.71	103.05		

四、程序使用说明

原始数据由行号 230 DATA 键入，执行时人机对话同尼格里方法使用说明2°。

五、应用实例

在蚀变作用研究中的应用 根据徐克勤[1]，胡受奚、季寿元[5]等研究，我国南岭一带的钨锰铁矿-石英脉两旁岩石经常经受强烈的围岩蚀变，尤以云英岩化和碱性长石化为强烈。矿脉两旁的

蚀变岩石在垂直方向上和水平方向上都具有明显的分带现象。在水平方向上自脉壁向外，蚀变的带状排列其顺序为：富云母云英岩→正常云英岩→富石英云英岩→云英岩化、长石化花岗岩→黑云母花岗岩。

在垂直方向上，带状分布表现为随着深度加深，云英岩化逐渐减弱并消失，但长石化则逐渐加强。根据对成矿元素W，Sn，Mo，Bi等原生晕的研究表明，成矿元素随着碱性长石化加强而贫化，但随着富云母云英岩化的加强而富集。富云母云英岩化阶段是钨、锡的主要成矿阶段，两者在时空上有密切的联系。

表1-3-1、2列出了不同蚀变带岩石的平均化学成分和1600个氧占据的单位体积内的阳离子数。由表1-3-1、2和图1-3-1可明显看出在整个蚀变过程中碱质溶液的酸碱度变化以及元素迁移的一般规律。

1．将图1-3-1中的Ⅱ带和Ⅰ带对比可得出在碱性长石化作用下，主要元素从溶液中带进、带出的数量。

带进元素（进入围岩）	带出元素（进入溶液）
K＝147	Si＝61
Na＝2	Fe^{2+}＝1
Ca＝20	
Al＝38	
Fe^{3+}＝13	
Mg＝9	

这表明第一阶段的碱质交代作用中带进围岩中的主要元素有Na，K和Al，并且带进的(Na＋K)离子数之和近似等于Al，表明本阶段的交代作用在形式上是以钾长石化和钠长石化为主。但由于成矿溶液原来有较高的碱度，因而钨、锡、钼等造矿元素仍能以碱性络合物方式在溶液中进行搬运。本阶段一般无矿化或有不明显的矿化。

在碱性长石化阶段，Si被大量带进到溶液里，为第Ⅲ阶段富石英云英岩化创造了必要的物质条件。

2．将Ⅲ带和Ⅱ带对比可以得出在富石英云英岩化作用下元素的迁移数量为：

带进的元素（进入围岩）	带出的元素（进入溶液）
$Si=148$	$Na=73$
$Fe^{2+}=3$	$K=49$
	$Al=13$
	$Ca=11$
	$Mg=9$
	$Fe^{3+}=7$

由上面元素迁移表可见，在富石英云英岩化阶段里，Si以石英方式大量沉淀，而Na，K，Al又转为活动组份进入溶液，使溶液的碱度有明显增高以利于成矿元素的搬运，并为后继的正常云英岩化及富云母云英岩化准备了物质条件。

3．将Ⅴ带与Ⅲ带对比可知，在富云母云英岩化阶段里，造岩元素的迁移有：

带进的元素（进入围岩）	带出的元素（进入溶液）
$K=87$	$Si=237$
$Na=24$	
$Al=219$	
$Ca=21$	
$Fe^{3+}=15$	
$Fe^{2+}=33$	
$Mg=13$	

应注意到在富云母云英岩化阶段里，被带进的造岩元素中有$(K+Na)/Al\approx1/2$．说明该阶段的碱质交代作用是以云母化为主，钠长石化次之，并且可以预料到由于Si大量地进入到溶液内，促使成矿溶液由碱性变为酸性，不利于钨、锡络合物的继续搬运。因而本阶段有最强的矿化。

综上所述，通过对南岭地区钨锰铁矿-石英脉蚀变围岩的巴尔特氧离子法的计算和分析，较清楚地描绘出蚀变作用的类型、蚀

表 1-3-1 南岭某地钨锰铁矿-石英脉蚀变围岩的化学成分

蚀变带	SiO_2	TiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	FeO	MnO	MgO	CaO	Na_2O	K_2O	样品个数	资料来源
黑云母花岗岩 (Ⅰ)	74.85	0.17	14.15	0.78	0.52	0.055	0.26	0.62	3.58	4.56	26	〔5〕表27
长石化花岗岩 (Ⅱ)	65.99	——	17.38	2.62	0.39	——	0.92	2.75	5.04	5.68	2	〔5〕表 4
富石英云英岩 (Ⅲ)	87.62	0.04	4.47	1.67	0.89	0.08	0.22	1.69	0.84	1.49	4	〔5〕表 8
正常云英岩 (Ⅳ)	78.06	0.008	10.39	2.45	2.04	0.22	0.29	1.35	0.98	3.40	4	〔5〕表 6
富云母云英岩 (Ⅴ)	54.00	0.085	23.94	3.74	4.95	——	1.13	2.61	2.09	8.68	2	〔5〕表10

表 1-3-2 蚀变围岩的阳离子数(以1600氧为单位)

蚀变带	K	Na	Ca	Mg	Mn	Fe^{2+}	Fe^{3+}	Al	Ti	Si
黑云母花岗岩 (Ⅰ)	51	60	6	3	0	4	5	145	1	652
长石化花岗岩 (Ⅱ)	65	87	26	12	—	3	18	183	—	591
富石英云英岩 (Ⅲ)	16	14	15	3	1	6	11	14	—	739
正常云英岩 (Ⅳ)	38	17	13	4	2	15	16	106	—	678
富云母云英岩 (Ⅴ)	103	38	36	16	—	39	26	263	—	502

变矿物的发育程度、成矿溶液的酸碱度变化以及蚀变和成矿作用的内在联系，可为预报找矿方向提供某些线索。这也是巴尔特氧离子法所具备的独特优点。

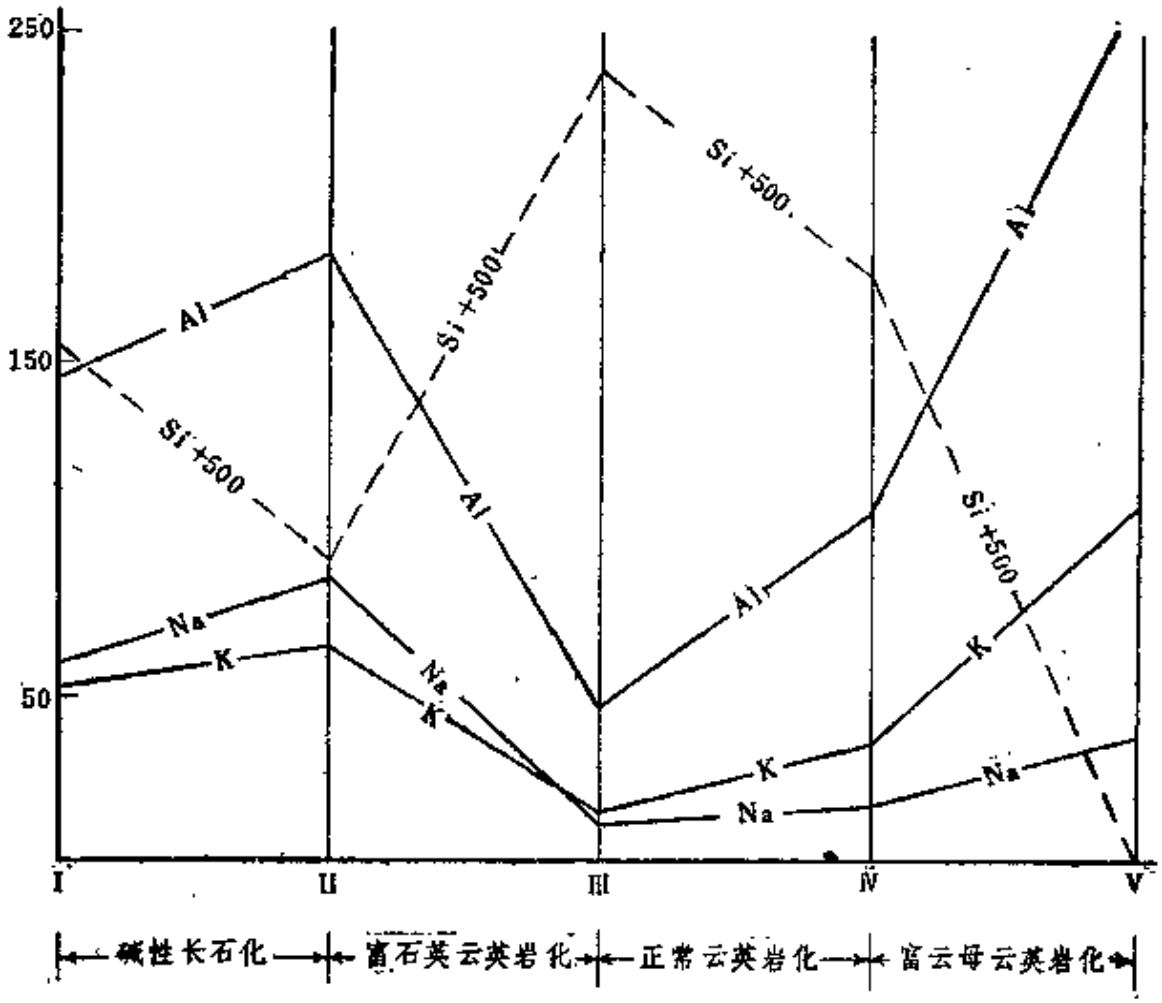


图 1-3-1　南岭某地钨锰铁矿-石英脉脉旁围岩蚀变类型及元素迁移图解

第四章 CIPW标准矿物计算法

一、计算概要

CIPW 计算方法是把岩石化学成分中各主要氧化物按其化学性质特点结合成成分较简单的标准矿物。这些标准矿物一般都是火成岩中较为常见的。将化学成分转换成标准矿物后，便可按其标准矿物组合、含量等特点将岩石进行分类对比，这可为玻璃质或隐晶质的火成岩定名提供依据。根据 SiO_2 在矿物中的含量可将标准矿物分为：饱和矿物，如正长石($KAlSi_3O_8$)；不饱和矿物，如白榴石($KAlSi_2O_6$)。岩石中若 SiO_2 过剩，则形成石英＋饱和矿物的组合，反之，形成饱和矿物＋不饱和矿物组合。约定的常见标准矿物的代号、化学成分列于表1-4-1。

计算步骤

1° 将氧化物重量百分数换算成分子数。

2° 将微量组分结合成副矿物。

A． $X\ P_2O_5 + 3.3333X\ CaO = X\ ap$

$CaO' = CaO - 3.3333\ ap$

B． 判别 $TiO_2 \geqslant FeO$

是	否
$X\ FeO + X\ TiO_2 = X\ il$	$X\ TiO_2 + X\ FeO = X\ il$
$X\ TiO_2' + X\ CaO + X\ SiO_2 = Xtn$	$FeO' = FeO - il$
$CaO \Leftarrow CaO - tn$	

3° 将主要组分结合成标准矿物。首先判别岩石化学类型，按不同类型选择计算公式

A． 正常类型 $CaO' + K_2O + Na_2O > Al_2O_3 > K_2O + Na_2O$

表 1-4-1 主要标准矿物分类、代号、化学成分

		铝硅型 SAL	
	Q	SiO_2	石英
	C	Al_2O_3	刚玉
	Z	$ZrO_2 \cdot SiO_2$	锆石
or	F	$K_2O \cdot Al_2O_3 \cdot 6SiO_2$	钾长石
ab		$Na_2O \cdot Al_2O_3 \cdot 6SiO_2$	钠长石
an		$CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 2SiO_2$	钙长石
lc	L	$K_2O \cdot Al_2O_3 \cdot 4SiO_2$	白榴石
ne		$Na_2O \cdot Al_2O_3 \cdot 2SiO_2$	霞石
kp		$K_2O \cdot Al_2O_3 \cdot 2SiO_2$	钾霞石
		铁镁型 FEM	
ac	P	$Na_2O \cdot Fe_2O_3 \cdot 4SiO_2$	霓石
ns		$Na_2O \cdot SiO_2$	硅酸钠
ks		$K_2O \cdot SiO_2$	硅酸钾
di		$CaO \cdot (Mg,Fe)O \cdot 2SiO_2$	透辉石
hy		$(Mg,Fe)O \cdot SiO_2$	紫苏辉石
en		$MgO \cdot SiO_2$	顽火辉石
fs		$FeO \cdot SiO^2$	正铁辉石
wo		$CaO \cdot SiO_2$	硅灰石
ol	O	$2(Mg,Fe)O \cdot SiO_2$	橄榄石
fo		$2MgO \cdot SiO_2$	镁橄榄石
fa		$2FeO \cdot SiO_2$	铁橄榄石
cs		$2CaO \cdot SiO_2$	硅酸钙
mt	H	$FeO \cdot Fe_2O_3$	磁铁矿
cm		$FeO \cdot Cr_2O_3$	铬铁矿
hm		Fe_2O_3	赤铁矿
il	T	$FeO \cdot TiO_2$	钛铁矿
tn		$CaO \cdot TiO_2 \cdot SiO$	榍石
pf		$CaO \cdot TiO_2$	钙钛矿
ap	A	$3(3CaO \cdot P_2O_5) \cdot CaF_2$	磷灰石
fr		CaF_2	萤石
pr		FeS_2	黄铁矿
cc		$CaO \cdot CO_2$	方解石

① $X\ K_2O + X\ Al_2O_3 + 6X\ SiO_2 = X$ or

② $X\ Na_2O + X\ Al_2O_3 + 6X\ SiO_2 = X$ ab

$Al_2O_3' = Al_2O_3 - (Na_2O + K_2O)$

③ X Al_2O_3' + X CaO + 2X SiO_2 = X an

$CaO' \Leftarrow CaO - Al_2O_3'$

④ X CaO' + X SiO_2 = X wo（待⑧项计算）

⑤ 判别 $Fe_2O_3 \geqslant FeO$

是	否
X FeO + X Fe_2O_3 = X mt	X Fe_2O_3 + X FeO = X mt
$Fe_2O_3' = Fe_2O_3 - mt$	$FeO' \Leftarrow FeO - mt$
Fe_2O_3' = hm	X FeO' + X SiO_2 = X fs

⑥ X MgO + X SiO_2 = X en

⑦ $SiO_2' = SiO_2 - (6\ or + 6\ ab + 2\ an + wo + en + fs)$

⑧ 判别 wo ≥ en + fs

是	否
wod[1] = en + fs	wod = wo
den[1] = en	den = wo × en/(en + fs)
fsd[1] = fs	fsd = wo − den
di = wod + den + fsd（重量%）	di = wod + den + fsd（重量%）
$wo' \Leftarrow wo - wod$	en ⇐ en − den
fs = en = 0	fs ⇐ fs − fsd
	wo = 0

⑨判别 $SiO_2' \geqslant 0$

是：$Q = SiO_2'$ 转入4°

否：令 $Y = |SiO_2'|$ $Z = 0.5(en + fs)$

$G = Z + tn$ $P = G + 4\ ab$

$U = P + 2\ or$ $V = U + 0.5wo$

$R = V + 0.5(den + fsd + wod)$

$L = R + 2or$

(a) 若 $Y < Z$

$fa = Y \times fs/(en + fs)$

---

[1] wod, den, fsd分别代表进入透辉石(di)中的wo, en, fs的分量

fo＝Y－fa　　ol＝fa＋fo（重量%）

en⇐en－2 fo　　fs⇐fs－2 fa

hy＝en＋fs（重量%）

(b) 若 Z≤Y＜G

fo＝0.5 en　　fa＝0.5 fs

ol＝fo＋fs(重量%)　pf＝Y－Z

tn′⇐tn－pf

(c) 若 G≤Y＜P

ol＝0.5 en＋0.5 fs

pf＝tn,　ne＝0.25(Y－G)

ab⇐ab－ne

(d) 若 P≤Y＜U

前二项同 (c),　　ne＝ab

lc＝0.5(Y－P)　　or⇐or－lc

(e) 若 U≤Y＜V

前三项同 (d),　　lc＝or

cs＝Y－U　　wo⇐wo－2 cs

(f) 若 V≤Y＜R

前四项同 (e),　　cs＝0.5 wo

csd● ＝0.5(Y－V)　　cs⇐cs＋csd

fad● ＝0.5(Y－V)×fsd/(den＋fsd)

fod● ＝0.5(Y－V)－fad

ol⇐ol＋fod＋fad（重量%）

di⇐(wod＋den＋fsd)－2(csd＋fod＋den)

(g) 若 R≤Y＜L

前五项同 (f)　　ol⇐ol＋0.5(den＋fsd)

cs⇐cs＋0.5 wod

kp＝0.5(Y－P)　　lc⇐lc－kp

● csd, fod, fad分别表示从透辉石组份中转化成的cs, fo, fa的分量

(h) 若 Y>L

前七项同 (g)　　kp=lc

Qm=L−Y(负值)，说明无法再从饱和矿物中析出SiO_2，此种情况极少遇见。

B． 铝过饱和类型　$Al_2O_3>K_2O+Na_2O+CaO$

① X K_2O+X Al_2O_3+6X SiO_2=X or

② X Na_2O+X Al_2O_3+6X SiO_2=X ab

③ XCaO+XAl_2O_3+2XSiO_2=X an

$Al_2O_3-(K_2O+Na_2O+CaO)=c$

④ mt, fs, en　计算同正常类型④

⑤ $SiO_2'=SiO_2-$(6 or+6 ab+2 an+en+fs

判别 $SiO_2'\geqslant 0$，其后计算同正常类型⑨

C． 碱过饱和类型　$K_2O+Na_2O>Al_2O_3$

① X K_2O+X Al_2O_3+6X SiO_2=X or

$Al_2O_3'=Al_2O_3-K_2O$

② X Al_2O_3'+X Na_2O+6X SiO_2=X ab

③ 判别　$Na_2O'\geqslant Fe_2O$

是	否
X Fe_2O_3+X Na_2O+4X SiO_2 =X ac	XNa_2O'+XFe_2O_3+4XSiO =Xac
$Na_2O'\Leftarrow Na_2O-ac$	$Fe_2O_3'=Fe_2O_3-ac$
X Na_2O'+X SiO_2=X ns	判别$Fe_2O_3'\geqslant FeO'$，其后计算与正常系列⑤同。
mt=0	

④ X CaO+X SiO_2=X wo

⑤ X MgO+X SiO_2=X en

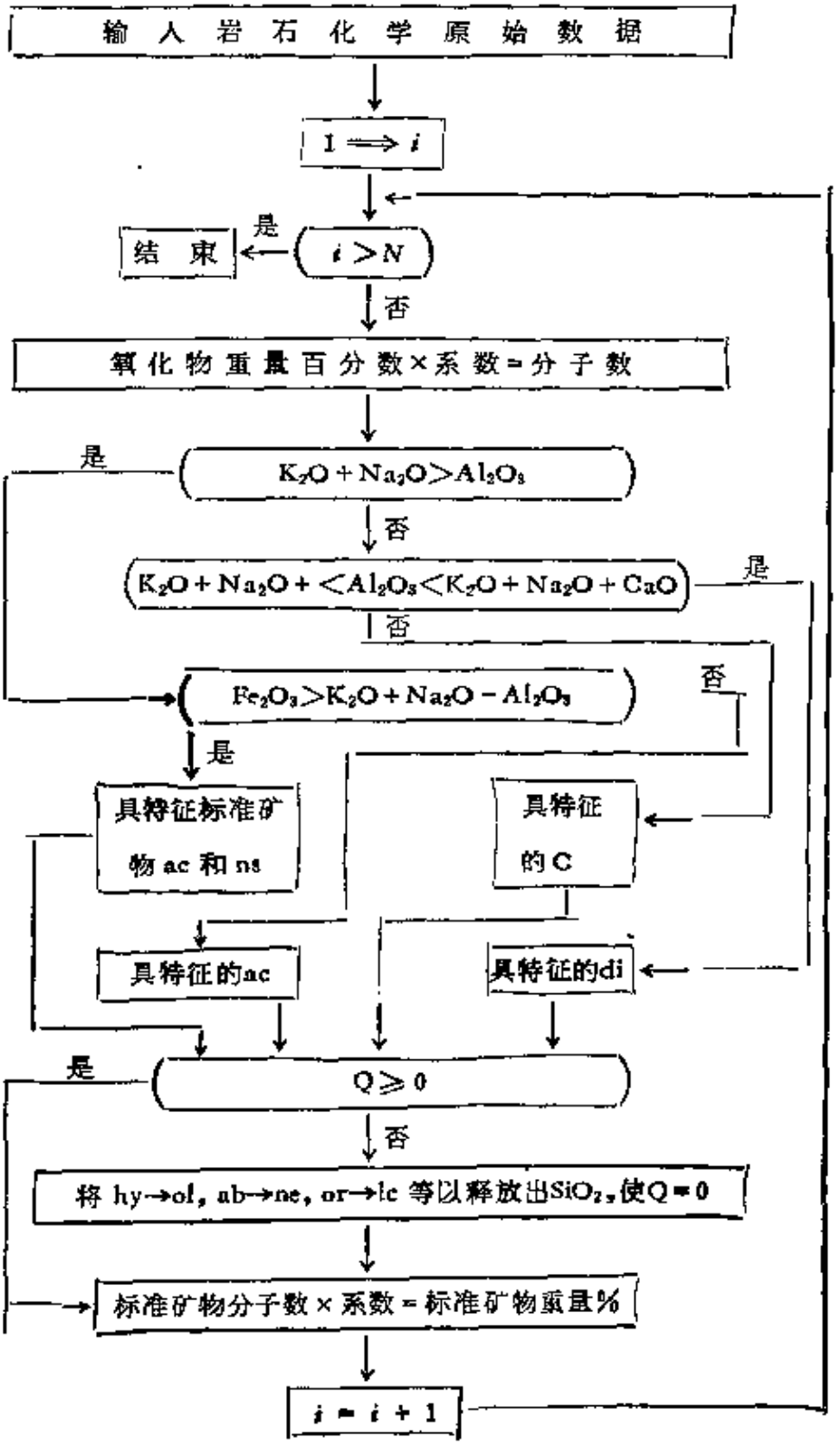
⑥ $SiO_2'=SiO_2-$(6 or+6 ab+4 ac+wo+en+fs+ns)

其后计算同正常类型⑧

4　将3°计算的标准矿物分子数乘以相应系数转换成标准矿

物重量百分数。

二、程序简易框图



三、CIPM标准矿物计算程序

（见附录Ⅳ）

四、输出格式

下面是夏威夷拉斑玄武岩181个样品的平均值CIPW标准矿物计算结果（资料取自〔39〕）。

NO 1

SiO_2 = 49.36	TiO_2 = 2.50	Al_2O_3 = 13.91	Fe_2O_3 = 3.03
FeO = 8.53	MnO = 0.16	MgO = 8.44	CaO = 10.30
Na_2O = 2.13	K_2O = 0.38	P_2O_5 = 0.26	

MOLECULAR NUMBERS

SiO_2 = 821.50	TiO_2 = 31.29	Al_2O_3 = 136.72	Fe_2O_3 = 18.97
FeO = 118.73	MnO = 2.26	MgO = 209.41	CaO = 183.67
Na_2O = 34.37	K_2O = 4.03	P_2O_5 = 1.83	

CIPW-NORMATIVE MINERAL

CC = 0.00	PR = 0.00	TN = 0.00	PF = 0.00
IL = 4.75	AP = 0.60	MT = 4.39	HM = 0.00
CM = 0.00	OR = 2.25	AB = 18.02	AN = 27.35
C = 0.00	WO = 0.00	DW = 9.21	DF = 5.95
DF = 2.64	EN = 15.08	FS = 6.69	Q = 2.11
FA = 0.00	FO = 0.00	CS = 0.00	AC = 0.00
NS = 0.00	NE = 0.00	LC = 0.00	KP = 0.00
ER = 0.0001			

OTHER PARAMETERS

SEMA = 0.99	OR = 0.74	A·R = 1.23	
D·I = 22.38	F% = 50.69	M% = 38.01	
A% = 11.30	OR% = 4.71	AB% = 37.85	
AN% = 57.44	K% = 3.50	Na% = 17.53	
CA% = 78.97	Q% = 4.24	P% = 0.00	
OR% = 4.51	PL% = 91.24	PEARF1 = 0.26	
PEARF2 = − 1.56	PEARF3 = − 2.39	LEMEV1 = −33.93	
LEMEV2 = −11.33	LEMEV3 = −12.65	LEMDF1 = 29.85	
LEMDF2 = 14.60	LEMDF3 = 5.78	O′ = 39.15	
NE′ = 23.31	OL′ = 37.55		

五、程序使用说明

1° 岩石化学原始数据从行号9000 DATA 键入。氧化物排列顺序同尼格里法程序说明1°。

2° 人机对话 执行后屏幕出现：

NUMBER OF SAMPLE? 键入被计算的样品个数

NUMBER OF VARIABLE? 键入氧化物个数

CORRECT FE3? ——Y OR N 是否要作Fe_2O_3的校正，见本章之六。键入Y是要，N是不要。

MODE OF CORRECT?——P OR V 问校正方式。键入P选深成岩，键入V选火山岩。

3° 在栏目 MOLECULAR NUMBERS 下印出各氧化物乘以1000的分子数。在CIPW-NORMATIVE MINERAL栏目下印出各标准矿物含量，其中 DW，DE，DF 相加等于 DI(透辉石)，EN和FS相加等于 HY(紫苏辉石)，ER为计算误差，即氧化物重量百分数(除H_2O外)之和减去标准矿物重量百分数之和。其他标准矿物代号同计算概要。

4° 程序引进的其它参数计算。其结果在 OTHER PARAMETER栏目下印出，其标号及在岩石学中应用说明如下：

①Q′，NE′，OL′ 为波尔德瓦特[48]的 Q′，Ne′，Ol′ 值。作 Q′－Ne′－Ol′ 三组分图解，以区别拉斑系和碱性系玄武岩。据笔者对149个夏威夷玄武岩（引自[39]）的计算，其中只有二个碱性玄武岩样品混到橄榄拉斑玄武岩区内，正确率达99%。Q′－Ne′－Ol′ 图解是以约德等[56]的热力学实验为依据，经波尔德瓦特修正后与岩相学的研究相一致，因而该图解是区分碱性系与拉斑系玄武岩的一种很有效的方法（图1-4-1）。

② SEMA 里特曼岩系指数σ值[49,50]。

③ F%，M%，A% 区分拉斑玄武岩与钙碱玄武岩的 FMA 图解[39]。

④ A. R. 赖特碱度率　适用于硅铝质火成岩的钙碱、弱碱、碱性系列的划分[58]。

⑤ OR%，AB%，AN%　按CIPW计算的钾长石、钠长石钙长石所占的重量百分数比。可作 or—ab—an 图解。

⑥ Q%，OR%，pl%或F%，OR%，pl%

令OR＝or，pl＝ab＋an

若ne＝0，则将OR，pl，Q计算为百分数并输出。

若ne＞0，则F＝ne＋lc＋kp，将OR，pl，F 计算为百分数并输出。

应用上述数据可作QAPF双三角形图解[53]，供岩石命名时参考。

⑦ D. I 分异指数[54]　用于制作分异指数图，分析火成岩系列演化特征。

⑧ K%，NA%，CA%　为岩石化学成分中该三种元素原子重量百分数，用于判别岩浆成因和交代成因花岗岩[27]。

⑨ PEAR F1，PEAR F2，PEAR F3 皮尔斯[47]的三个判别指标。用以作双直角坐标图，判断玄武质火山岩的地质构造（板块）环境。

⑩ LEME V1，LEME V2，LEME V3 勒·曼特尔的三个特征向量[37]，用以作火山岩分类图解（参见图1-4-4）

⑪ LEMD F1，LEMD F2，LEMD F3 勒·曼特尔划分玄武岩—安山岩—英安岩—流纹岩的三个判别函数值[37]。其判别方法是：若DF1＜36.7，为玄武岩，否则有可能是安山岩、英安岩或流纹岩。继续考察DF2，若DF2＜23.5，为安山岩，否则可能是英安岩或流纹岩。再考察DF3，若DF3＜13.3，则为英安岩，否则为流纹岩。

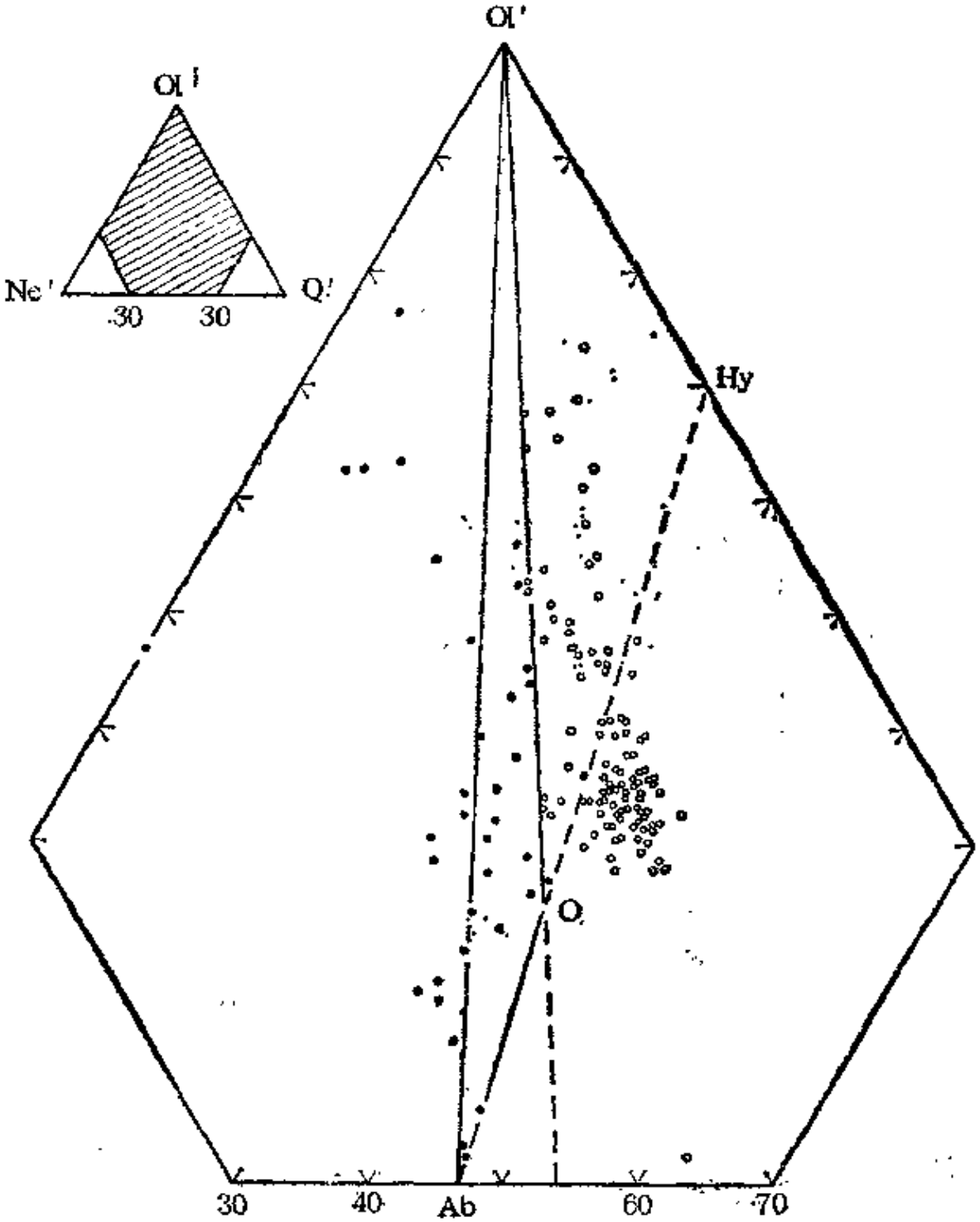


图1-4-1 夏威夷地区碱性玄武岩和拉斑玄武岩的Ol′—Ne′—Q′图解。空心圆圈表示原定的拉斑玄武岩，黑圆点表示碱性玄武岩（资料取自〔39〕）。图中Ol′—O—Ab为区分界线，该线右侧为拉斑系，左侧为碱性系（按波尔德瓦特，1964）

六、问题讨论

1．铁氧化物的校正　约德等[56]作过一次有意义的实验，表明经不同热处理的玄武岩标本，其铁氧化状态的差别使标准矿物组合发生显著变化．表1-4-2中A为未经加热的天然橄榄玄武岩，B为加热处理后的化学分析结果．后者与A的差别在于由于强烈氧化使Fe_2O_3自A的1.60%上升到B的11.50%．用CIPW方法对A，B两个样品进行计算发现：样品A含标准矿物橄榄石，应定为橄榄玄武岩；样品B含石英，宜定为石英拉斑玄武岩．由此可见，在其它氧化物含量完全相同的情况下，仅由于铁氧化物氧化程度的不同，就会使标准矿物组合产生明显的变化，从而影响到岩石的命名．

铁氧化程度的差异对于铁镁质火山岩标准矿物计算影响尤甚．为了充分利用受过不同氧化作用的岩石化学分析数据，必须使氧化系数标准化，即对FeO和Fe_2O_3的含量进行合理的校正．

表 1-4-2　热处理前后样品的标准矿物差异

氧化物	样品A	样品B	标准矿物	样品A	样品B
SiO_2	50.87	50.87	Q	—	5.82
TiO_2	0.79	0.79	or	3.34	3.34
Al_2O_3	17.62	17.62	ab	24.63	24.63
Fe_2O_3	1.60	11.50	an	33.36	33.36
FeO	9.94	0.98	di	10.58	9.94
MnO	0.08	0.08	hy	18.90	11.00
MgO	6.25	6.25	ol	5.38	—
CaO	9.32	9.32	mt	2.32	1.16
Na_2O	2.94	2.94	hm	—	10.72
K_2O	0.59	0.59	il	1.52	1.52

勒·曼特尔[37]对存储在澳大利亚的25894个样品（取自世界各地已发表的文献），将氧化率$ox=FeO/(FeO+Fe_2O_3)$对所有不同氧化物组进行回归分析，得出下面二个平均氧化率方程式：

$$\overline{ox}_{\text{火}}=0.93-0.0042(SiO_2)-0.022(K_2O+Na_2O)$$

（适用于火山岩）。

$\overline{ox}_{深}=0.88-0.0016(SiO_2)-0.027(K_2O+Na_2O)$ （适用于深成岩）。

若计算的真实氧化率 $ox_{计}=FeO/(FeO+Fe_2O_3)$ 小于平均氧化率（$\overline{ox}_{火}$ 或 $\overline{ox}_{深}$），则需要进行铁氧化物的调整。设 x 为调整后的Fe_2O_3重量百分数，y 为调整后的FeO重量百分数。则

$$x=\frac{(1-\overline{ox})(FeO+0.9Fe_2O_3)}{0.1\ \overline{ox}+0.9}$$

$$y=FeO+0.9(Fe_2O_3-x)$$

表1-4-3中列出从我国东南沿海新生代玄武岩中有意识选出的五个化学分析资料[6]。从岩相上看，这些玄武岩具橄榄石和富钙单斜辉石斑晶，基质内常见歪长石填间，无疑是碱性玄武岩系列。由于样品被过分地氧化，使Fe_2O_3数量明显陡增。若不作铁氧化物校正，计算的标准矿物多为石英拉斑玄武岩组合，与岩相鉴定相矛盾。在按勒·曼特尔方法作校正后，标准矿物就复原为碱性玄武岩组合。由此说明，对于玄武质火山岩在作标准矿物计算前使铁氧化率处于标准状态是件极其重要的工作。

2．钠长石的分配　前已述及，CIPW 标准矿物计算法目的在于提供模拟矿物或分和相对数量，为岩石正确命名提供依据。碱性长石和斜长石的相对数量是岩石命名时重要的参考指标。因此，如何将计算的钠长石(ab)合理分配到钾长石(or)和钙长石(an)中，就成为岩石化学研究亟待解决的问题之一。

勒·曼特尔[37]把近二万个岩石化学数据，按下面四种不同方案分配钠长石：

① $A=or+ab$　　$P=an$

② $A=or$　　$P=an+ab$

③ $A=or+0.5ab$　　$P=an+0.5ab$

④ $A=or\times T$　　$P=an\times T$

其中　$T=(or+ab+an)/(or+an)$

在上述四种情况下各有：

若Q＞0，则计算Q，A，P为百分数；

若ne＞0，则F＝ne＋lc＋kp，计算F，A，P为百分数；

若Q，ne＝0，则计算A，P为百分数。

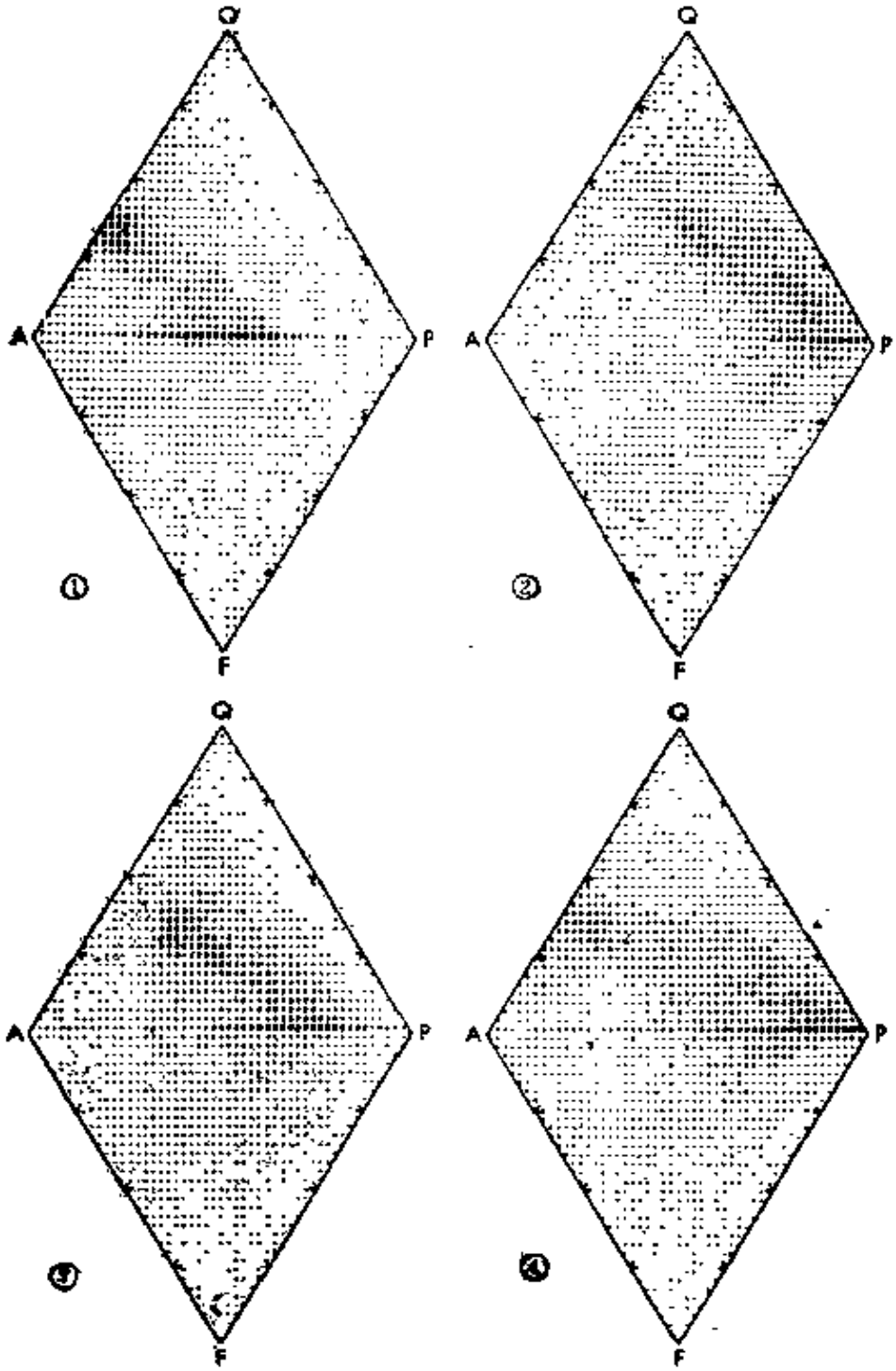


图 1-4-2 将25894个火成岩化学全分析资料用不同方案分配钠长石后所构成的QAPF图解。图中按落入每一格子内的点数不同，将浓度分五个等级由计算机自动打印出（按勒·曼特尔，1976）。

计算结果由计算机自动清绘成QAPF双三角形（图1-4-2）。由图可见，按①、②、③分配钠长石，投影点都过分集中，分辨力低，不利于岩类的划分。按④方案分配钠长石，投影点分布均匀，有利于岩石分类。勒·曼特尔用方案④将预分好的六千余个样品逐个计算并投影于图1-4-3上。图中流纹岩和英安岩能完全分开。但安山岩与英安岩，安山岩与玄武岩有较大重叠区。投影在重叠区内的岩石很可能是过渡性岩类，如玄武安山岩等。

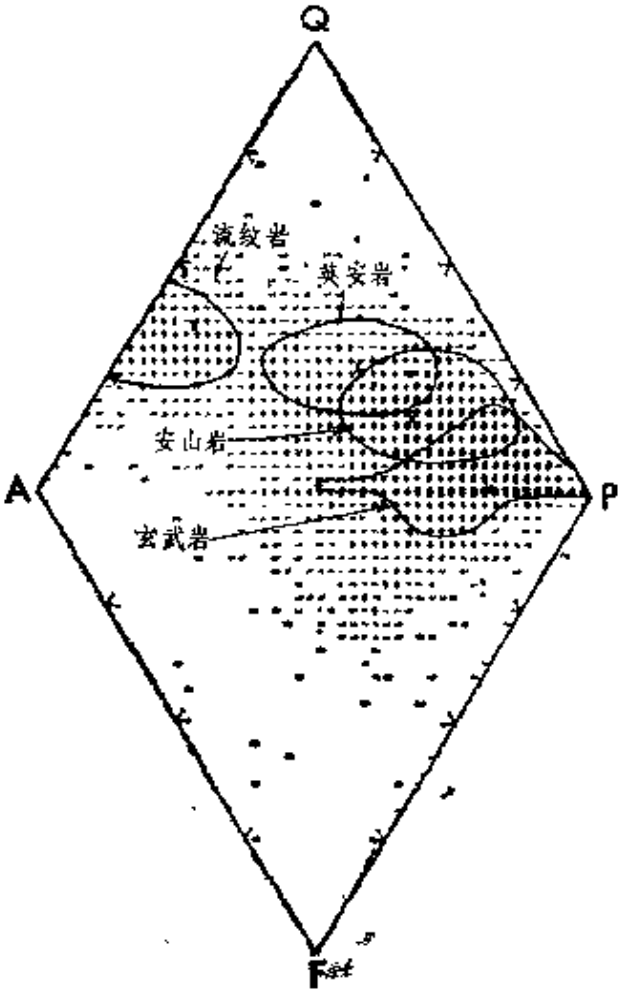


图 1-4-3 玄武岩、安山岩、英安岩、流纹岩的CIPW标准矿物QAPF的投影密度。在圈出的范围内包含每类岩石约80%的分析数(按勒·曼特尔，1976)。

勒·曼特尔分配钠长石的方法和QAPF图解，为火山岩，特别是深变质火山岩的命名提供了较可靠的依据。但许多作者认为，勒·曼特尔钠长石分配方法很可能夸大碱性长石的数量，特别是对基性岩影响更显著。按CIPW方法，全部K_2O组成or，不考虑黑云母、角闪石成分中有相应的钾质，因而or数量本来就夸大了，由于系数T总大于1，经T系数分配后的碱性长石（A=or×T）其数量又进一步加大，这样，势必有可能将真正的玄武岩误投到粗面玄武岩区内。表1-4-4列出了诺科斯[44]依据几种岩石的化学成分平均值计算的or，ab，an含量以及按T分配的A和P的数量。分配后的A/P比值明显偏高，原来的安山岩被定为粗安安山岩；正常的拉

斑玄武岩被定为粗安玄武岩等。但若按里特曼长石诺模图分配钠长石，A/P比值比例适中.所作定名与诺科斯原来名称非常接近。所以我们认为在现有条件下，里特曼[49]分配钠长石方法更可取。笔者已发表的 CIPW 标准矿物附里特曼分配钠长石方法（深成岩）的计算机程序[13]可供读者参考。

表 1-4-4 不同方法分配钠长石对岩石定名的影响

岩石名称		安山岩平均值	拉斑玄武安山岩平均值	正常拉斑玄武岩平均值	流纹英安岩平均值
标准矿物	or	6.7	6.1	5.0	26.7
	ab	30.9	27.2	18.9	30.9
	an	27.2	18.1	25.9	9.5
勒·曼特尔法	T	1.9115	2.1240	1.6117	1.8536
	A	19.8	25.2	16.2	73.8
	P	80.2	74.8	83.6	26.2
	投影区域*	9	9	9	3a
里特曼法	A	0	0	0	35
	P	100	100	100	75
	投影区域*	10	10	10	3b

* 投影区域是按斯特雷凯逊[53]火山岩分类的 QAPF 图解中区域代号：9—粗安安山岩或粗安玄武岩；10—玄武岩或安山岩；3a—流纹岩；3b—英安流纹岩

3．火山岩岩石化学分类　按我们的理解，勒·曼特尔的钠长石T分配法，由于存在夸大 or 作用的缺陷，造成在 QAPF 分类图解中（图1-4-3）玄武岩与安山岩，安山岩与英安岩间相互重叠覆盖比较严重，作为火山岩岩石化学分类不够理想.因此，勒·曼特尔在同一篇文章中[37]推荐用主分量分析方法（参见第二篇）而确立的火山岩分类图解（图1-4-4）。他收集了包括玄武岩（2900）个，安山岩（2342个）、英安岩（526个）和流纹岩（557个）等近六千余个样品，先换算成 100 %的九种主要氧化物，以其作为变量，进行主分量分析，从中找出能较好地把四个岩类区分开来的三个特征向量（EV1，EV2，EV3，见表1-4-5），将近六千余个样品用表1-4-5的载荷逐个计算样品的坐标值，并投影于直角坐标图内（图1-4-4）。然

后用人工方法将每类中约含80%的投影点圈出，构成供读者使用

表 1-4-5　用九个氧化物计算的头三个特征向量及特征值

	EV1	EV2	EV3
SiO_2	−0.829	−0.320	−0.231
TiO_2	0.048	0.049	−0.066
Al_2O_3	−0.059	0.538	0.401
Fe_2O_3	0.093	0.037	0.156
FeO	0.213	0.027	−0.496
MgO	0.114	−0.727	0.260
CaO	0.264	0.214	−0.550
Na_2O	−0.053	0.129	0.304
K_2O	−0.092	0.021	0.223
特　征　值	70.4	17.5	4.2

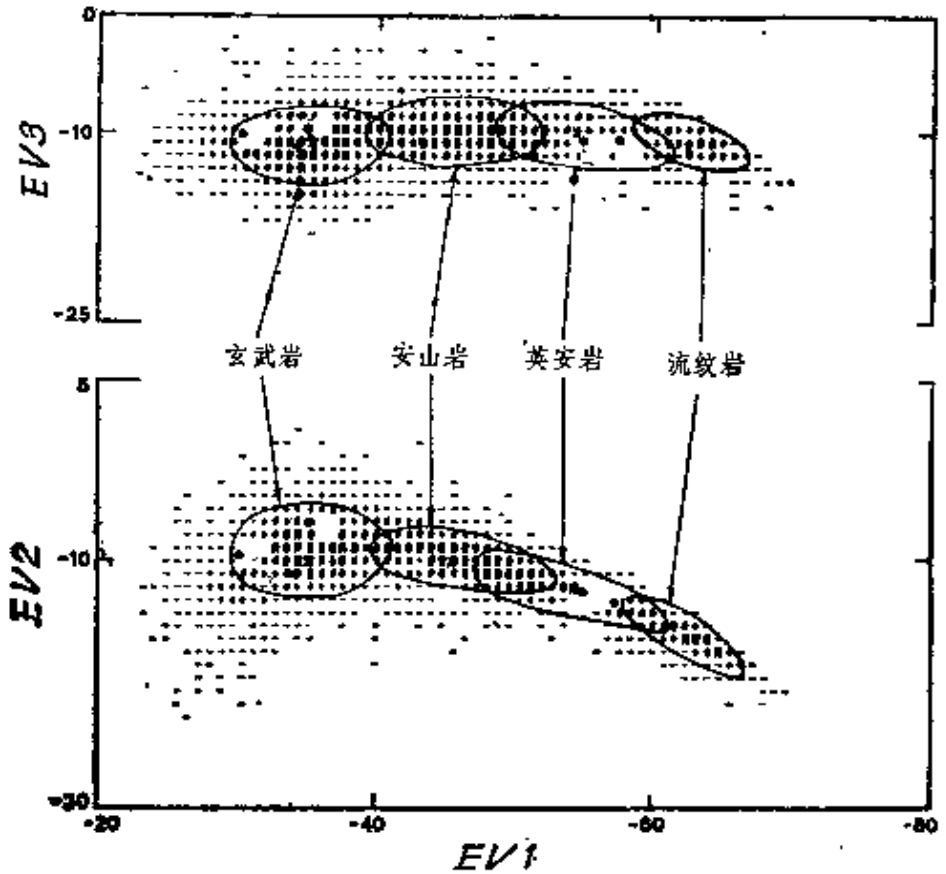


图 1-4-4　由头三个特征向量所构成的玄武岩、安山岩、英安岩、流纹岩的投影密度。在圈出的范围内含每类分析数的80%（按勒·曼特尔，1976）

的分类底图．由图可见，各类间覆盖面积较小，只在英安岩和安山岩之间有较大的重叠(约占12.7%)。所以，作为火山岩的化学成分分类是个比较理想的图解。样品的坐标值EV1, EV2, EV3在笔者编制的程序中已有输出（LEME V1, LEME V2, LEME V3)。可供读者投点。若投点落在某两类重叠区，还可进一步使用判别函数法（LEMD F1, LEMD F2, LEMD F3）判明。

4．模拟标准矿物成分的代表性 CIPW标准矿物计算方法发表于1903年，当时还没有电子计算机．为了使计算步骤不至于过分繁琐，原作者们在模拟标准矿物成分时总是采取尽量简化的方法，不过多考虑真实矿物中尚存在的某些次要组份，更不考虑同一岩浆在不同的物理化学环境里会有不同的稳定矿物组合。如在CIPW体系中，单斜辉石成分里只考虑en, fs, wo等三种主要组份的存在，不顾及在单斜辉石中常有一定数量的长英质（以Na—硬玉、K—硬玉、契尔马克分子等形式存在)。据戈蒂尼（1973，[80]—206页)计算，造岩的单斜辉石中一般约含5—26 %的长英质组份，这说明CIPW体系所模拟的铁镁质矿物的成分与真实矿物差距较大。在酸性岩情况下，CIPW 体系用辉石替代成分很复杂的云母、闪石类的矿物，不考虑有部分的钾质进入到暗色矿物中。这一切造成了由CIPW 体系所计算的标准矿物与镜下所观察的真实矿物有明显的差异。针对这一缺陷，笔者拟定了含黑云母的标准矿物计算法（见第六章），使计算的矿物种类和数量尽量与真实岩石中的相一致。

尽管CIPW 方法存在上述若干缺点，但由于该法计算出的矿物组份大都与目前高温高压实验体系中的组份相一致，因面在物理化学温-压平衡图解配合下，对于说明岩浆成因、演化、岩相、岩类的划分仍有很广泛的应用.❶

❶刘昌实编（1981），岩石化学研究方法，湖南地质学会印.

第五章　T.巴尔特-P.尼格里标准矿物分子法

一、计算概要

此法与CIPW法基本相似，将氧化物重量百分数换算成阳离子离子百分数，标准矿物的数量以该矿物中阳离子的总数来表示，并以标准矿物阳离子数百分比近似地表示岩石中标准矿物重量百分比，省略标准矿物重量百分数的换算，这在手算情况下简单易行。

表1-5-1列出计算中常用的标准矿物代号、分子式及每一矿物分子中阳离子的总数。

计算步骤

1° 将氧化物重量百分数换算成原子数，并转换成阳离子数的百分比。

2° 将微量组份结合成副矿物

$Cc=2CO_2$　　$Ca'=Ca-CO_2$

$Pr=1.5S$　　$Fe^{2+\prime}=Fe^{2+}-0.5S$

$Ap=2.67P$　　$Ca'\Leftarrow Ca'-1.67P$

$Il=2Ti$　　$Fe^{2+\prime}\Leftarrow Fe^{2+\prime}-Ti$

3° 主要组份结合成标准矿物

$En=2Mg$　　$Or=5K$

A．正常类型　$K+Na\leqslant Al<K+Na+2Ca'$

① $Ab=5Na$

② $An=2.5(Al-Na-K)$

③ $Wo=2[Ca'-0.5(Al-Na-K)]$

表 1-5-1 巴尔特-尼格里标准矿物成分

矿物	符号	分子式	阳离子数
	硅铝质组		
石英	Q	SiO_2	1
刚玉	C	Al_2O_3	2
正长石	Or	$KAlSi_3O_8$	5
钠长石	Ab	$NaAlSi_3O_8$	5
钙长石	An	$CaAl_2Si_2O_8$	5
白榴石	Lc	$KAlSi_2O_6$	4
霞石	Ne	$NaAlSiO_4$	3
钾霞石	Kp	$KAlSiO_4$	3
	铁镁质组		
硅灰石	Wo	$CaSiO_3$	2
顽火辉石	En	$MgSiO_3$	2
铁辉石	Fs	$FeSiO_3$	2
镁橄榄石	Fo	Mg_2SiO_4	3
铁橄榄石	Fa	Fe_2SiO_4	3
锥辉石	Ac	$NaFeSi_2O_6$	4
磁铁矿	Mt	Fe_3O_4	3
钛铁矿	tl	$FeTiO_3$	2
赤铁矿	Hm	Fe_2O_3	2
磷灰石	Ap	$Ca_5P_3O_{12}F$	8
方解石	Cc	$CaCO_3$	1
黄铁矿	Pr	FeS_2	1

④ 判别 $Fe^{3+} \geqslant 2Fe^{2+}$

是	否
$Mt=3Fe^{2+}$	$Mt=1.5Fe^{3+}$
$Hm=Fe^{3+}-2Fe^{2+}$	$Fs=2(Fe^{2+}-0.5Fe^{3+})$

B．铝过饱和类型 $Al>Na+K+2Ca'$

① $Ab=5Na$ ② $An=5Ca'$

③ $C=Al-K-Na-2Ca'$

④同正常类型④。

C．碱过饱和Ⅰ类型　$K+Na>Al$且$Fe^{3+}>K+Na-Al$

①　$Ab=5(Al-K)$

②　$Ac=4(Na+K-Al)$　③　$Wo=2Ca'$

④　$Fe^{3+\prime}=Fe^{3+}-0.25Ac$

⑤同正常类型④.

D．碱过饱和Ⅱ类型　$K+Na>Al$且$Fe^{3+}<K+Na-Al$

①　$Ab=5(Al-K)$　②　$Ac=4Fe^{3+}$

③　$Ns=1.5[Na+K-(Al+Fe^{3+})]$　$Ac\Leftarrow Ac+Ns$

④　$Wo=2Ca'$　⑤　$Fs=2Fe^{2+\prime}$

4° 判别　$Wo\geqslant En+Fs$

是	否
$Di=2(En+Fs)$	$Di=2Wo$
$Wo\Leftarrow Wo-En-Fs$	$Hy=En+Fs-Wo$
$Hy=0$	$Wo=0$

5° $Si'=100-(Mt+Cc+Pr+Ap+Il+Or+Ab+An+Wo+Hm+Ac+C+Fs+En)$

若 $Si'\geqslant 0$，$Q'=Si'$

若 $Si'<0$，令 $Y=|Si'|$，$Z=Hy/4$，$P=Ab/2.5+Z$，$U=Or/5+P$，$R=Or/5+U$

① 若 $Y<Z$，$Ol=3Y$，$Hy=Hy-4Y$

② 若 $Z<Y\leqslant P$，$Ol=0.75Hy$，

$Ne=1.5(Y-Z)$，$Ab=Ab-(5/3)Ne$

③ 若 $P<Y<U$，$Ol=0.75Hy$

$Ne=0.6Ab$，$Lc=4(Y-P)$

$Or=Or-5(Y-P)$

④ 若 $U<Y\leqslant R$，$Ol=0.75Hy$

$Ne=0.6Ab$，$Lc=0.8Or$

$Kp=3(Y-U)$，$Lc=Lc-4(Y-U)$

⑤ $Y>R$，$Ol=0.75Hy$，$Ne=0.6Ab$

$Kp=0.6Or$　$-Q=R-Y$（为 SiO_2 无法补偿）

6° SUM＝Mt＋Cc＋Pr＋Ap＋Il＋Or＋Ab＋An＋Wo
＋Ac＋C＋Di＋Hy＋Ol＋Ne＋Lc＋Kp＋Q，

若 SUM＝100，则计算正确。

二、巴尔特-尼格里标准矿物分子法计算程序

（见附录V）

三、输出格式

夏威夷拉斑玄武岩181个样品的平均值的巴尔特-尼格里标准矿物计算结果：

NO 1

SiO_2 = 49.360	TiO_2 = 2.500	Al_2O_3 = 13.940	Fe_2O_3 = 3.030
FeO = 8.530	MnO = 0.160	MgO = 8.440	CaO = 10.300
Na_2O = 2.130	K_2O = 0.380	P_2O_5 = 0.260	

NIGLI-BARTH NORMATIVE MINERAL

CC = 0.00	PR = 0.00	TN = 0.00	IL = 3.56	AP = 0.56
MT = 3.24	HM = 0.00	OR = 2.29	AB = 19.51	AN = 27.95
WO = 0.00	DI = 18.02	HY = 22.85	Q = 2.00	OL = 0.00
AC = 0.00	NE = 0.00	LC = 0.00	KP = 0.00	C = 0.00
CM = 0.00	Q′ = 34.98	NE′ = 26.42	OL′ = 38.61	

四、程序使用说明

1° 岩石化学原始数据，按尼格里数值法使用说明键入，由行号2000 DATA 开始键入。

2° Q′, Ne′, Ol′ 为波尔德瓦特[48]Q′ — Ne′ —Ol′三组分图解。其中 Q′＝ Q＋0.4Ab ＋ 0.25Hy, Ne′＝Ne＋0.6 Ab, Ol′ ＝ Ol＋0.75 Hy。将Q′, Ne′, Ol′ 换算成百分数，以 Q′, Ne′, Ol′ 输出。

五、应用

欧文等[31]曾用巴尔特-尼格里标准矿物计算方法系统整理了加拿大地区火成岩岩石化学数据，提出了若干用巴尔特-尼格里

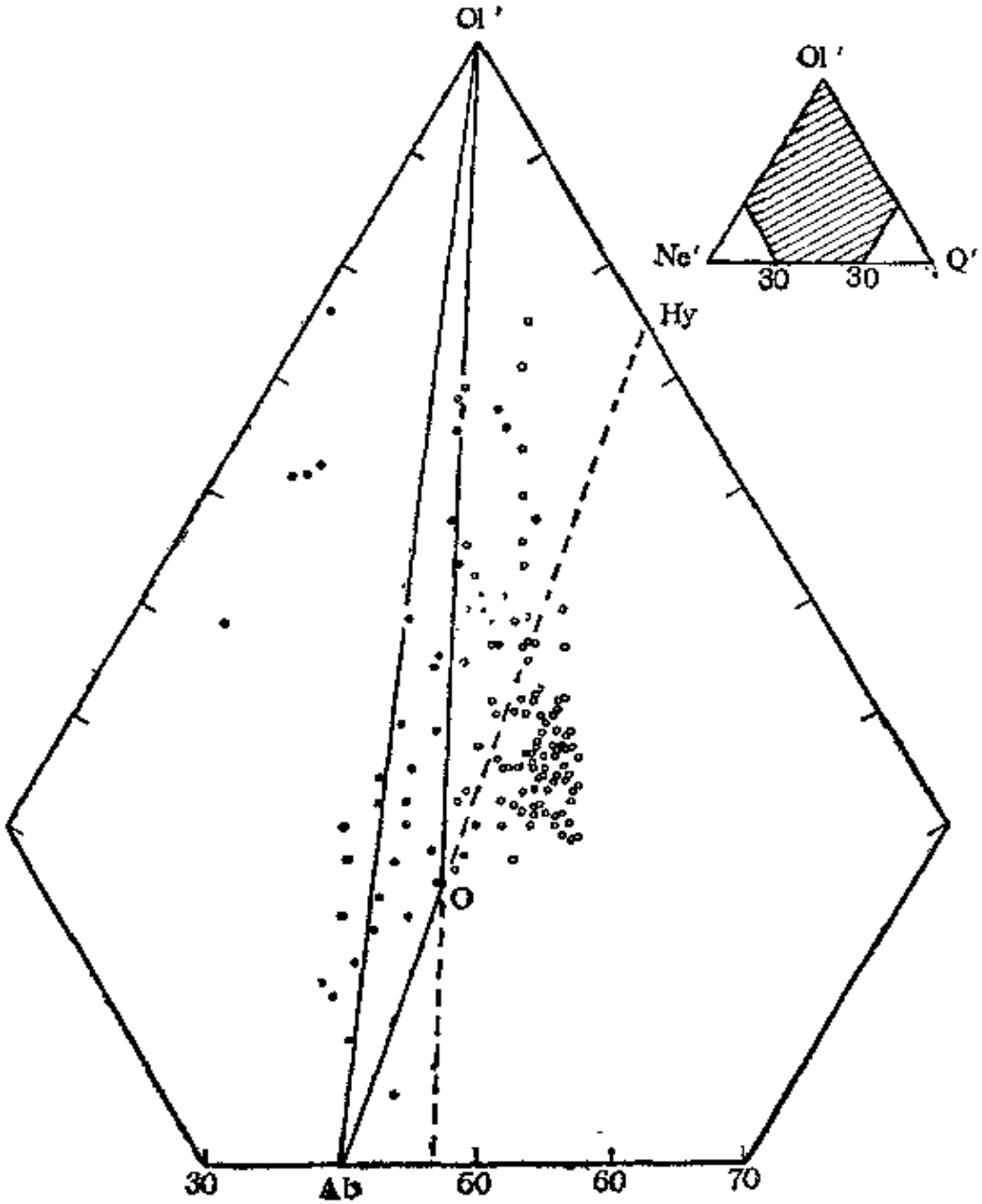


图 1-5-1　夏威夷地区碱性玄武岩和拉斑玄武岩的 Ol′—Ne′—Q′ 图解（按巴尔特-尼格里标准矿物）。空心圆圈为拉斑玄武岩，黑圆点为碱性玄武岩（资料取[39]）。Ol′—O—Ab 为分界线，线右侧为拉斑系，左侧为碱性系（按波尔德瓦特，1964）

标准矿物划分岩系碱性程度，区分钠质、钾质亚系以及鉴别岩石类型等一系列方法，其中曾引用波尔德瓦特[48]原理，用 Q′—Ne′—Ol′ 图解区分碱性系与拉斑系玄武岩，其效果与 CIPW 法极为相似。图 1-5-1 是夏威夷玄武质岩石的 Q′—Ne′—Ol′图解。在被计算的149个样品中有四个样品互相混淆，与图1-4-1相似，都具有较佳的效果。

第六章 含黑云母标准矿物的计算方法(DGNU)程序设计

一、问题的提出

CIPW 计算体系未考虑黑云母标准矿物的模拟，将化学分析中全部 K_2O与等量 Al_2O_3和六倍的SiO_2 结合形成钾长石．在这种情况下显然夸大了钾长石在岩石中的数量，使计算的标准矿物组合和数量与实际矿物组合和数量相差很大，特别是对于富钾质的中—酸性岩石，其影响尤著，因为在这些岩石中黑云母往往是最主要的铁镁矿物．可以说如何妥善处理K_2O在云母类和钾长石矿物间的分配比例这样的重要问题，至今未获得完满解决．

笔者在部分维持 CIPW标准矿物计算的体系下，设计了含黑云母标准矿物的DGNU程序，以弥补原 CIPW计算之不足，在中—酸性岩石中合理地分配黑云母矿物和钾长石矿物中的 K_2O，使标准矿物计算更趋合理．

二、黑云母在岩石中的含量

为了取得岩石中黑云母含量与全岩化学成分间的内在联系，笔者收集了162个样品，对这些样品除要求有精确的全岩化学分析数据外，还必须在求积台下测出黑云母矿物的相对含量．多数样品是取自华南地区花岗岩类岩石学近期研究成果，少数样品取自约翰逊[32]的著作．首先根据这些样品化学成分计算出ANKC值(=$Al_2O_3/(Na_2O+K_2O+CaO)$，分子数)，将ANKC值>1的分为一组$\leqslant 1$的分为另一组．分组后看出岩石中黑云母含量与化学成分间

的内在联系很有规律。

1．对于铝过饱和(ANKC＞1)的中—酸性岩石，一般含较高数量的黑云母。因为黑云母组份中 Al/K 一般大于 1，并大于钾长石中 Al/K 之比，所以云母类矿物的高含量对全岩的铝过饱和度有较大的贡献。又由于在铝过饱和情况下岩石的铁镁矿物通常以黑云母占优势，角闪石和辉石的含量甚微，因此，黑云母的含量与全岩的FeO^*+MgO（$FeO^*=0.9\times Fe_2O_3+FeO$)值呈密切的正相关。对109个样品计算（图1-6-1）获得的线性方程为

$$黑云母(Bi)\%=2.75\times(FeO^*+MgO)-0.95 \qquad (1)$$

2．对于正常类型的中—酸性岩石(ANKC≤1)，以$FeO^*+MgO=9\%$为界可分为两个亚组。当$(FeO^*+MgO)<9\%$时，岩石中铁镁矿物仍以黑云母占优势，黑云母含量与(FeO^*+MgO)呈

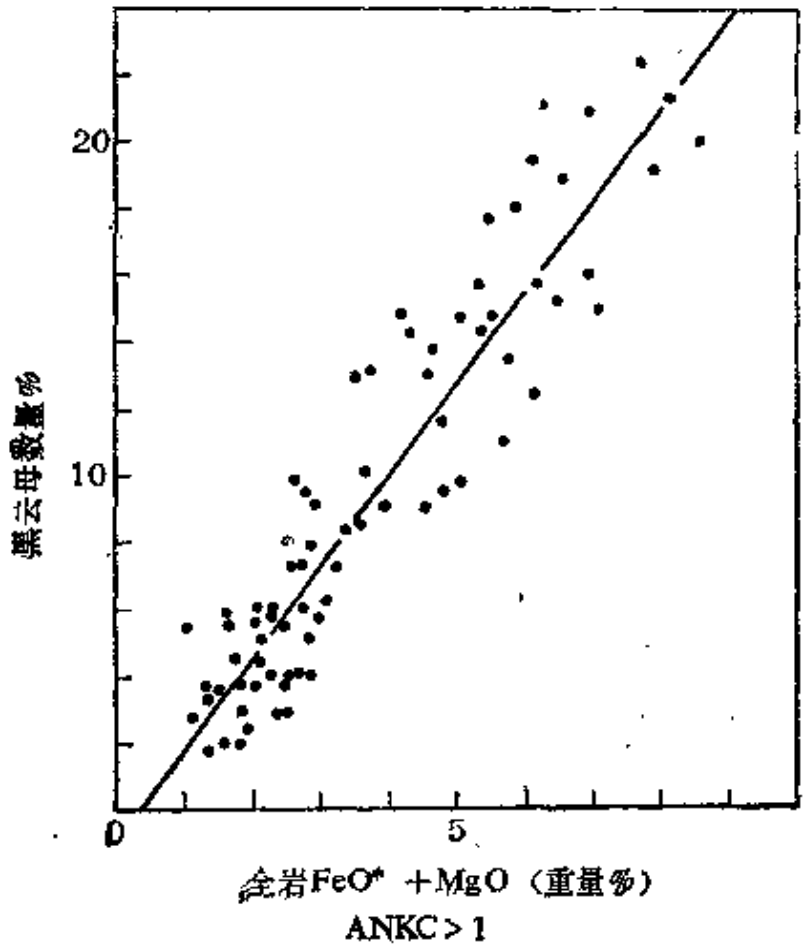


图 1-6-1　中—酸性火成岩中黑云母含量与全岩(FeO^*+MgO)含量的线性关系(ANKC＞1时)

正相关（图1-6-2）。据43个样品计算，其回归方程为

$$\text{黑云母(Bi)}\% = 1.66 \times (FeO^* + MgO) - 0.91 \qquad (2)$$

在$(FeO^* + MgO) > 9\%$的正常类型岩石中（大半是闪长岩和辉长岩类），黑云母降为次要铁镁矿物，而角闪石、辉石代之为主要铁镁矿物。在这种情况下，岩石中黑云母含量与$(FeO^* + MgO)$呈负相关。据10个样品计算，其回归方程为

$$\text{黑云母(Bi)}\% = 27.34 - 1.56(FeO^* + MgO) \qquad (3)$$

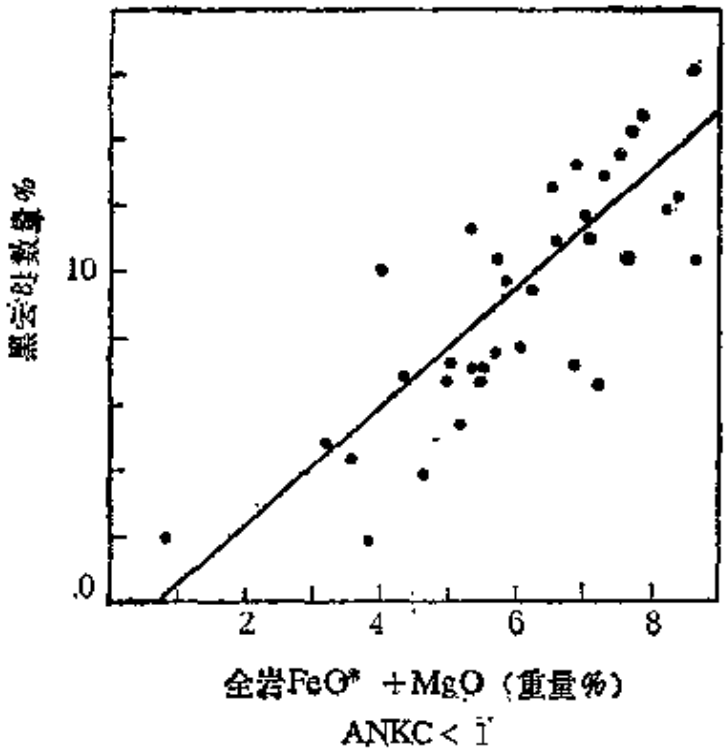


图 1-6-2 中—酸性火成岩中黑云母含量与全岩$(FeO^* + MgO)$含量的线性关系〔ANKO<1，$(FeO^* + MgO) < 9\%$，重量%〕

三、黑云母化学成分与主岩化学成分的对应联系

在火成岩的铁镁矿物中黑云母类的化学成分比较复杂[28, 29]。在黑云母的八面体片中，由于$Fe^{2+} \rightleftharpoons Mg$，$^{VI}Al^{3+} \rightleftharpoons Mg$，$^{VI}Al^{3+} \rightleftharpoons Fe^{2+}$等不同离子对的复杂的类质同象替换，使黑云母化学成分呈现极其复杂的变化，因此在模拟黑云母标准矿物计算时，简单地以黑云

母平均化学成分代替实际样品的化学成分的作法会给计算结果带来很大误差。为了找到黑云母自身化学组成与全岩化学成分间的有机联系，笔者收集了在同一块标本上既作了黑云母化学全分析，又作了全岩全分析的样品共52件。首先将黑云母化学组份分解为四个端员，即白云母端员（mu，其成分为$K_2O\cdot 3Al_2O_3\cdot 6SiO_2$），金云母端员（phy，其成分为$K_2O\cdot 6MgO\cdot Al_2O_3\cdot 6SiO_2$），羟铁云母端员（ann2，其成分为$K_2O\cdot 6FeO\cdot Al_2O_3\cdot 6SiO_2$），高铁铁黑云母端员（ann3，其成分为$K_2O\cdot 2Fe_2O_3\cdot Al_2O_3\cdot 6SiO_2$）。计算每一黑云母样品中这四种端员组份的百分含量，分别以mu，phy，ann2，ann3表示。将全岩的SiO_2含量分别对相应的黑云母四种端员组份百分数作散点图（图1-6-3），我们获得如下规律：

1．在$SiO_2<65\%$的中—酸性岩石中，包括花岗闪长岩、英

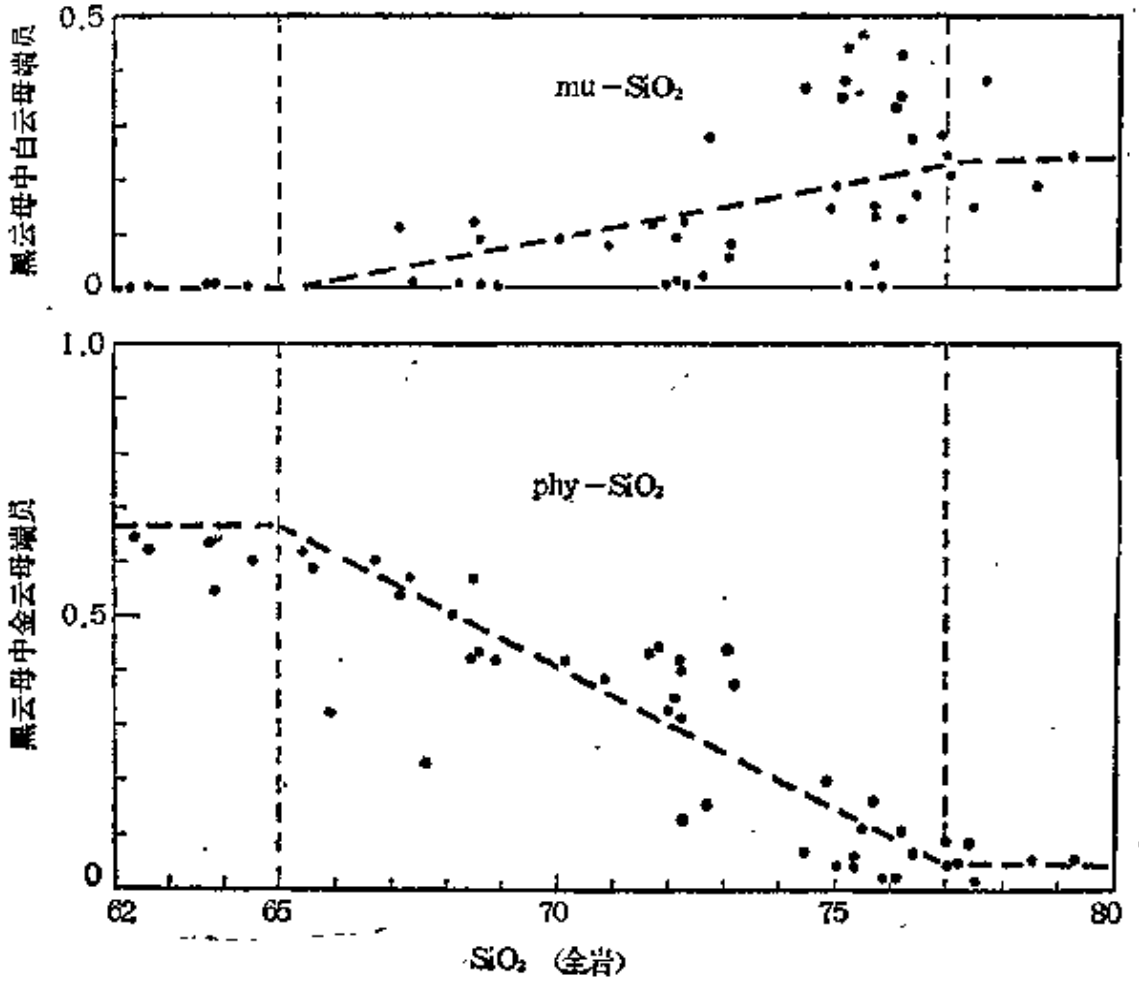


图 1-6-3　中—酸性岩石中黑云母的金云母端员、白云母端员组份与全岩SiO_2含量的散点图

云闪长岩、石英闪长岩以及成分与其相当的其他花岗质岩石，其黑云母主要为镁质黑云母，以金云母端员占优势，其平均组份为

$$\left.\begin{aligned} &mu = 0 \\ &phy = 0.63 \\ &ann2 + ann3 = 0.35 \end{aligned}\right\} \qquad (4)$$

2．在 $65\% \leqslant SiO_2 < 77\%$ 的中—酸性岩中，包括二长花岗岩、普通花岗岩以及一部分石英二长岩，其黑云母的种属随全岩 SiO_2 含量增高由镁质黑云母过渡为铁质黑云母或铁叶云母．其组成与全岩 SiO_2 含量的线性方程为

$$\left.\begin{aligned} &mu = 0.0204 \times SiO_{2全岩} - 1.33 \\ &phy = 4.063 - 0.052 \times SiO_{2全岩} \\ &ann2 + ann3 = 1 - mu - phy \end{aligned}\right\} \qquad (5)$$

3．在 $SiO_2 \geqslant 77\%$ 的超酸性岩石中，主要包括花岗岩、碱性长石花岗岩等，其黑云母种属以铁叶云母为主，组成为

$$\left.\begin{aligned} &mu = 0.25 \\ &phy = 0.05 \\ &ann2 + ann3 = 0.70 \end{aligned}\right\} \qquad (6)$$

4．ann2和ann3所占的分数的确定大致可依据全岩的氧化系数值OX 求得，令 $OX = FeO/(FeO + Fe_2O_3)$，则

$$\left.\begin{aligned} &ann2 = OX \times (ann2 + ann3) \\ &ann3 = (1 - OX) \times (ann2 + ann3) \end{aligned}\right\} \qquad (7)$$

四、有关氧化物扣除量的计算

将根据（1）、（2）、（3）式计算的黑云母百分数分别乘以由（4）、（5）、（6）、（7）式计算的黑云母四种端员组份百分数，再乘以（8）式矩阵中每一端员组份中各氧化物重量百分数，便得到某一岩石为形成黑云母矿物时各氧化物需要的量（重量%）．自岩石化学分析数据中扣除形成黑云母所需的各氧化物重量后再转入正常的CIPW体系的计算．

端员名称	层间 K_2O	八面体片	四面体片	
			Al_2O_3	$6SiO_2$
白云母端员	0.124	$2Al_2O_3$ 0.268	0.134	0.474
金云母端员	0.118	$6MgO$ 0.303	0.128	0.451
羟铁云母端员	0.095	$6FeO$ 0.437	0.103	0.365
高铁铁黑云母端员	0.108	$2Fe_2O_3$ 0.365	0.116	0.411

(8)

五、DGNU程序的钠长石分配

在标准矿物计算完成后，必须妥善处理钠长石在钾长石和钙长石中的合理分配，以便使应用标准矿物含量而命名的岩石名称与依据实际矿物成分命名的岩石名称尽可能地吻合.为此，勒·曼特尔[37]曾提出按An和Or的多少成比例地分配Ab的T分配方法。据笔者上千个岩石化学计算的验证，表明该法在斜长系统中不尽合理，因为分配因子T总是大于1，让 Af（碱性长石）=Or×T，这在斜长系统中会进一步人为地扩大碱性长石的数量，使得对英云闪长岩、花岗闪长岩等类型岩石计算的碱性长石含量超过长石总量的1/3,与实际矿物成分统计的不太吻合。DGNU程序由于已考虑黑云母矿物的形成，所以最终获得的钾长石数量比较适中。笔者采用简易的在800 ℃温度下斜长石和正长石共生图解（仿里特曼[22]，经笔者加以简化），对钠长石进行分配，这在精度上既可满足要求且又便于程序的设计。在图1-6-4进入程序时我们作了如下具体规定：

1．第Ⅰ和Ⅱ域为碱性长石(Af)＝100，斜长石Pl＝0的域；

2．第Ⅲ域的Pl＝100，Af＝0；

3．第Ⅳ域为Af和Pl共存的域，它们的相对数量取决于长石成分在图1-6-4中的投影位置．如计算后获得的Or＝30，Ab＝20，An＝10，则Σ＝60，An%＝16.6（横坐标值），Or%＝50.0（纵坐标值）．由投影点在图1-6-4中的位置，可方便地得出分配后的Af＝67.7%，Pl＝32.3%等．

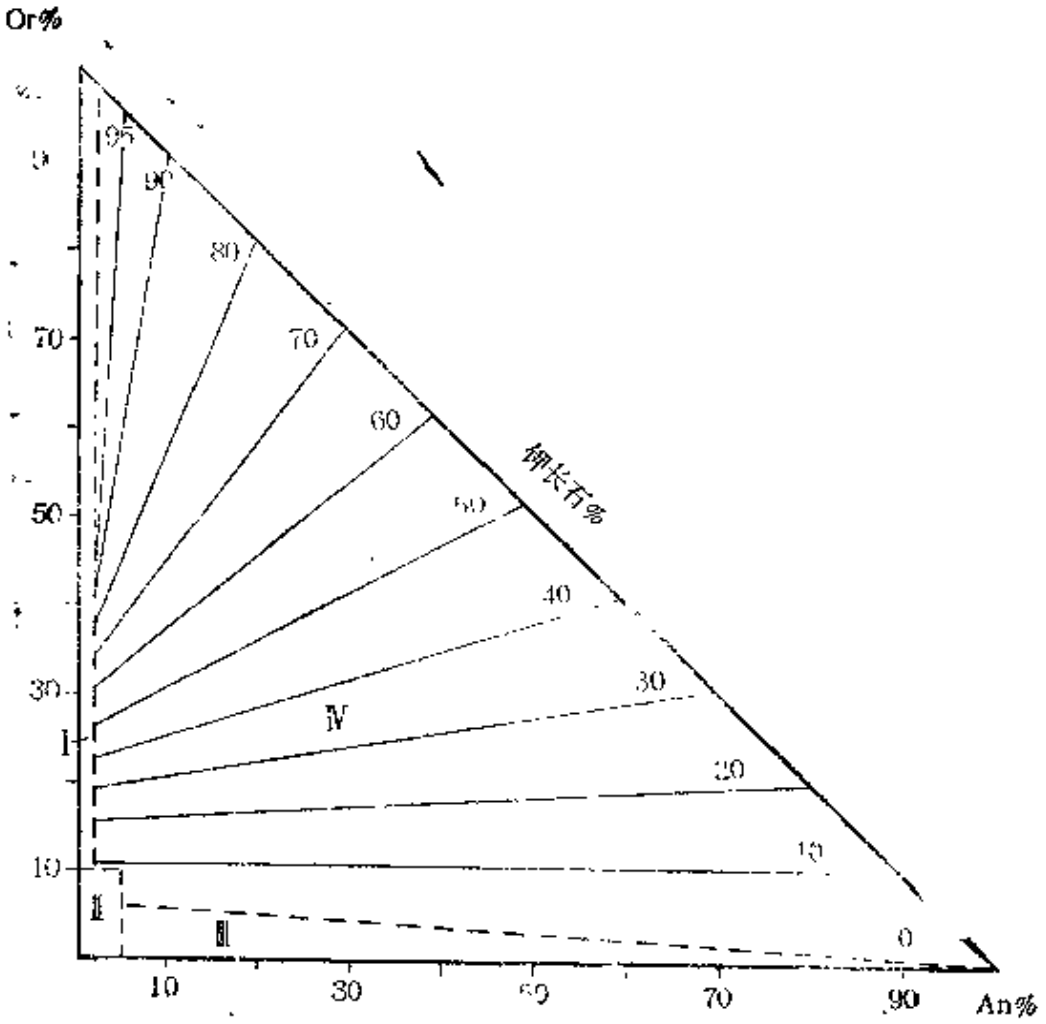


图 1-6-4　两种长石分配图解（仿里特曼，1973，简化）

4．Ⅳ域内对于Af＝0，10，20，……95等十一条直线（Af%＝$a+b\times$An%），用二点法求得截距a和斜率b分别为

线号（Af%）	a 值	b 值
0	6.444	−0.06444
10	10.8125	−0.00875
20	15.4286	0.05714

30	18.9474	0.175438
40	22.0723	0.32128
50	25.3178	0.5426
60	28.8936	0.85106
70	31.2231	1.38846
80	32.3824	2.5588
90	28.1250	6.1875
95	20	15

计算 $y_i = a_i + b_i(\mathrm{An}\%)$。若到$k$步，有 $y_k < \mathrm{Or}\% < y_{k+1}$，则分配后的 $\mathrm{Af} = [k-1+(\mathrm{Or}\% - y_k)/(y_{k+1}-y_k)] \times 10$，$\mathrm{Pl} = 100 - \mathrm{Af}$。

六、DGNU程序的岩石分类命名

采用通用的国际地质科学联合会(1972)公布的分类方案（参见〔53〕）。用Pl%，Q（或F）值进行扫描，得到对应域后自动打印岩石名称。有一点需加说明。对于含标准矿物 Ac，而 pl = 0 的岩石用前缀"Alkali" 印出，如碱性花岗岩为 Alkali Granite。不含Ac，但 0 <Pl< 10 时，用"Kf" 印出，如钾长花岗岩为 Kf. Granite，以示它们在碱性程度上的区别。

七、结果检验

1，计算的黑云母量的精度检验　对另外收集的 90 个有矿物统计资料的岩石化学分析样(表1-6-1)，经DGNU 程序计算，其计算的黑云母量与实测量的吻合程度笔者分三组进行统计。计算量与实测量相差±3%者为第一组，共65个样品，占72%；计算量与实测量相差为±6%者为第二组，共19个样品，占21%；计算量大于实测量+6%或小于实测量-6%者为第三组，共7个样品，占7%。计算的黑云母与实测黑云母量基本吻合的岩石样品占绝大多数。若按

表 1-6-1　计算黑云母的量与实测量的对比

岩体编号	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
实测黑云母量	3	4	3.3	4.2	4.7	2.7	1.6	3.1	3.6	3—5	3	3	4	4	2—7	4—5	3	2—3
计算黑云母量	3.04	2.69	3.27	2.5	2.12	1.91	2.61	1.7	8.44	5.13	3.12	2.94	4.97	3.00	3.65	3.83	2.43	3.84
误差分组	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
岩体编号	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
实测黑云母量	1—5	4—5	3	4	0.5	1—2	1	7—8	3.8	2.7	1.5	4.1	2.7	2.7	2.6	4.0	2—12	3—6
计算黑云母量	5.78	2.82	3.35	2.32	2.29	3.6	2.63	4.37	4.37	8.19	4.13	6.78	7.2	6.19	8.00	4.54	13	9.66
误差分组	1	1	1	1	1	1	1	1	1	2	1	1	2	2	2	1	1	2
岩体编号	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
实测黑云母量	4	2—4	3—5	3—4	3—4	3—6	3—6	4—7	3—7	2—3	7	3—6	4—9	3—7	5—6	3—6	2—4	5
计算黑云母量	9.23	7.39	6.21	5.03	7.19	7.33	5.07	9.04	7.74	7.25	7.81	8.34	6.63	9.50	5.23	9.23	4.46	3.05
误差分组	2	2	1	1	2	1	1	1	1	2	1	1	1	1	1	2	1	1

续表

岩体编号	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72
实测黑云母量	3—4	3.5	3—4.4	3—4	3	1—5	3.5	5	5—10	3—7	3—18	2—13	12	6	8	8	5	10
计算黑云母量	2.77	3.86	5.27	1.67	4.46	5	1.97	9.32	14.41	13.28	13.03	19.26	8.58	6.64	16.8	7.85	9.24	11.66
误差分组	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	1	3	2	1	3	1	2	1
岩体编号	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	87	88	89	90
实测黑云母量	3—4	6.8	5—10	6—8	3—6	8-10	14—16	5—13	15	5—15	5—20	6—12	6—16	4—7	6—15	3—5	10—11	8—9
计算黑云母量	7.99	8.84	11.09	8.84	16.70	12	4.43	15.41	9.72	9.13	17.49	20.57	17.58	9.22	12.92	10.29	12.40	24.17
误差分组	2	1	1	1	3	1	3	1	2	1	1	3	1	1	1	2	1	3

注　岩性：1—25　碱性长石花岗岩，26—62　花岗岩，63—77　二长花岗岩，78—89　花岗闪长岩，90　英云闪长岩

引文：1—9,27—34　引自澳大利亚A-型花岗岩，W.J. Collins,1982

10—姑婆山岩体,11—三标,12—单观嶂，13—柯树北，14—廖坑，15—尖嶂岭，16—南昆山，17—歪头山，18—花岗草，19—永泰，20—石祭头，21—北环，22—南昆山，23—三坪,24—方壶山,25—金刚山，26—上犹，35—大容山，36—台马,37—花山,38—佛岗,39—新丰江，40—广宁，41—大埔，42—莲花山，43—中坝，44—古田，45—桂溪，46—大帽山,47—胡坊,48—诸广山，49—金鸡岭,50—贵东,51—骑田岭,52—小陶,53—西华山,54—九龙脑,55—千里山，56—瑶岗仙，57—那琴，58—七娘坛，59—甲子，60—古山，61—莽蓬，62—罗湾，63—汤湖，64—越城岭，65—那余，66—薄竹圹，67—龙窝，68—老雅山，69—杏花，70—新州，71—大望山，72—中村，73—大东山，74—蓬壶，75—汤泉，76—和溪，77—陆川，78—本洞，79,80—蒙洞口，81—香粉，82—太保，83—汤湖,84—海洋山，85—那丽，86—岗尾，87—列市，88—流水，89—长泰，90—蝎马。以上引自南岭花岗岩地质学，莫柱孙等，1980

岩石类型划分对碱性长石花岗岩、花岗岩和二长花岗岩计算和实测的黑云母量吻合程度最好，而花岗闪长岩和英云闪长岩吻合程度较差，这是因为这些岩石的铁镁矿物中除黑云母外尚有大量角闪石存在，它们之间的量比与全岩化学成分之间的规律目前在计算中尚未予考虑。

2）岩石命名精确度的检验　笔者由诺科斯平均值[44]中随机选出各种类型岩石共40个样品，包括辉长岩、闪长岩、英云闪长岩、花岗闪长岩、二长花岗岩、花岗岩等。用DGNU程序计算并检索出岩石名称以检验程序的合理性（表1-6-2）。由DGNU程序计算的标准矿物命名的岩石名称与诺科斯根据实际矿物成分命名的岩石名称完全一致的占88%，有偏差的为12%。其中正长岩偏差数较高，有二个正长岩定为二长岩，但其Pl=35～38，仍很

表 1-6-2　DGNU程序岩石命名正确性的检验

原定名	样品数	分配后Pl含量范围(DGNU)	计算后定名		文献 Nockolds[44]
			正确	偏差	
英云闪长岩	3	100	3		表2:10,11,V
花岗闪长岩	3	75—78	3		表2:7,Ⅳ,6
石英二长岩（二长花岗岩）	3	45—52	3		表2:2,3,6,Ⅰ
花岗岩	4	15—28	4		表1:2,7,Ⅰ,Ⅲ
碱性花岗岩	6	0	6		表1:9,10,11,12,13,V
正长岩	3	0	1		表3:Ⅵ
		35—41		2	表3:1,Ⅳ
二长岩	5	52—60	5		表4:1,2,3,4,Ⅰ
纹长二长岩	5	71—84	5		表5:1,2,3,Ⅰ,Ⅲ
闪长岩（或辉长岩）	8	91—98	6		表6:1,2；表7:1,2,3,Ⅰ
		86—89		2	表6:3,Ⅰ
占总数%			88	12	

接近于正长岩的域（Pl<35），另二个闪长岩略向二长岩偏离，其Pl=86～87，亦很接近于闪长岩的域。这表明即使在12%有偏差的岩石命名中其偏差程度也是较小的。作为分类命名的要求已能满足。

八、含黑云母标准矿物计算程序(DGNU)

（见附录Ⅵ）

九、输出格式

下表是诺科斯[44]角闪黑云二长岩平均值DGNU程序计算结果。其中 x 为Pl在长石总量中的百分数。y 若＞0，表示Q在(Q+Af+Pl)中所占百分数；y＜0，$-y$表示F(Ne+Kp+Lc)在(F+Af+Pl)中所占的百分数。最后打印岩石名称(Monzonite)。输出的其他参数的意义见第四章。原始数据由行号9000DATA键入。

NO 1

SiO_2 = 54.58	TiO_2 = 0.84	Al_2O_3 = 16.83	Fe_2O_3 = 3.02
FeO = 4.71	MnO = 0.13	MgO = 3.72	CaO = 6.62
Na_2O = 3.52	K_2O = 4.79	P_2O_5 = 0.42	

MOLECULAR NUMBERS

SiO_2 = 908.38	TiO_2 = 10.51	Al_2O_3 = 165.06	Fe_2O_3 = 18.91
FeO = 65.56	MnO = 1.83	MgO = 92.30	CaO = 118.05
Na_2O = 56.79	K_2O = 50.85	P_2O_5 = 2.96	

CIPW--NORMATIVE MINERAL

CC = 0.00	PR = 0.00	TN = 0.00	PF = 0.00	IL = 1.59
AP = 0.97	MT = 3.66	HM = 0.00	CM = 0.00	OR = 21.73
AB = 29.78	AN = 15.97	C = 0.00	WO = 0.00	DW = 5.90
DE = 3.10	DF = 2.63	EN = 1.29	FS = 1.09	Q = 1.51
FA = 0.00	FO = 0.00	CS = 0.00	AC = 0.00	NS = 0.00
NE = 0.00	LC = 0.00	KP = 0.00	BI = 9.95	ER = 0.0049

OTHER PARAMETERS

SEMA = 5.96	OR = 0.61	A·R = 1.86
D·I = 53.02	F% = 38.17	M% = 19.12
A% = 42.71	OR% = 32.20	AB% = 44.13
AN% = 23.67	K% = 35.13	Na% = 23.07

Ca% = 41.80	Q% = 2.19	F% = 0.00
OR% = 31.50	PL% = 66.32	PEARF1 = 0.48
PEARF2 = − 1.12	PEARF3 = −2.50	LEMEV1 = −42.84
LEMEV2 = − 8.79	LEMEV3 = −8.43	LEMDF1 = 39.13
LEMDF2 = 17.84	LEMDF3 = 10.31	Q′ = 46.80
NE′ = 47.93	OL′ = 5.18	
X = 57.02	Y = 2.1?	Monzonit?

十、综合应用例

在广西贺县英阳关，前震旦纪板溪群类复理石建造内含有一套厚度较大的变细碧-角斑岩系❶，主要由喷出的细碧-角斑岩、浅成或超浅成的辉绿岩和微晶闪长岩以及与其有关的火山碎屑岩所组成，为一套火成变质杂岩系.广西271地质队将本区板溪群划为四段。火山变质杂岩系为第一段，本段下部以火山碎屑岩、凝灰质沉积岩为主，夹有细碧-角斑岩熔岩流；上部为正常沉积的泥质岩。第一段总厚度约1140 m。

细碧岩常具片理化，主要矿物成分为钠长石、阳起石、黑云母、绿泥石、磁铁矿等。在化学成分上，SiO_2含量较高(52.04～53.3%)，其平均值高于海恩德曼[30]的细碧岩平均值。全碱(Na_2O+K_2O)为3.94～7.12%，与典型的细碧岩相近。

角斑岩构成本区变质火山杂岩的主体，常夹于角砾凝灰岩和凝灰质千枚岩中，具片理化，局部地段尚保留有气孔杏仁构造。主要矿物有石英、钠长石、更长石、角闪石、阳起石、黑云母、绿泥石等。在化学成分上，SiO_2 含量为 55.5～62.5 %，全碱为2.02～8.92%，含量较高。局部地段出现强烈的钾化。在钾化角斑岩内K_2O含量明显高于Na_2O。

对 5 个辉绿岩，9个细碧岩，17个角斑岩，5个微晶闪长岩，8 个火山碎屑岩，14个黑云母片岩和绿泥石、绢云母千枚岩样品，按

❶林承毅等，1977，广西贺县英阳关铁矿区火山作用、变质作用及其成矿关系，未刊稿。

各种方法进行了恢复原岩成分的尝试。

1．按西蒙南方法作[(al+fm)－(c+alk)]～Si图解，发现：①辉绿岩、微晶闪长岩、多数细碧岩和角斑岩的投影点均落在火山岩成分区内。集结于Si＝100～200之间。说明本区变质火山杂岩主要由中—基性成员组成，缺少酸性的石英角斑岩成员（图1-6-5）。有少数的细碧-角斑岩投影点落在火山岩成分区上方，这是因为个别样品具有较高的Al_2O_3（＞17％）；②火山碎屑岩投影点落在火山岩成分附近而略偏上方，表明在火山碎屑堆积时，有少量正常沉积物质（粘土质）加入，反映出物质成分具有火成的和沉积的混合特性，有可能形成于海底喷发的环境下；③板溪群的绿泥石绢云母千枚岩和黑云母片岩均落在图解顶部的泥岩成分区内，表明其原岩为具韵律层序的泥质岩；④板溪群的二个钙质千枚岩样品均正确地落在钙质沉积物区内。

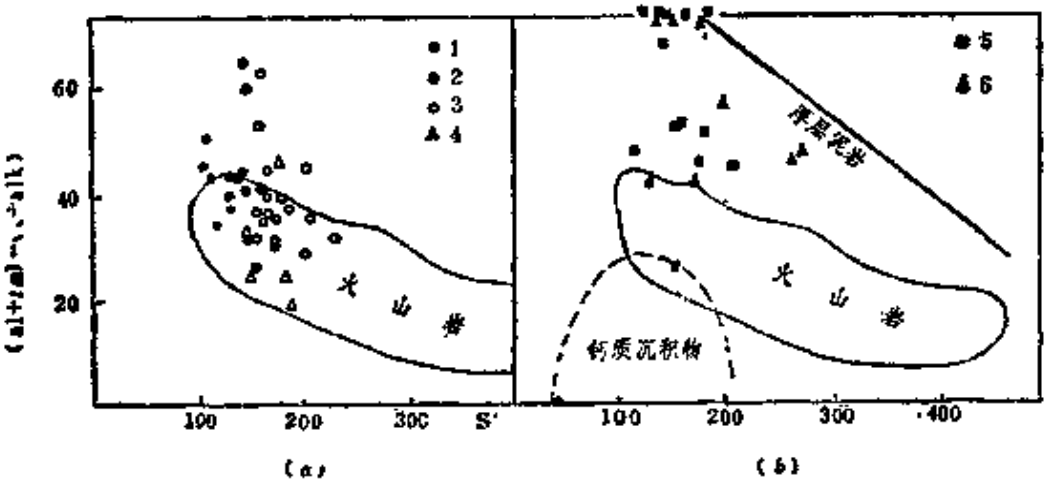


图 1-6-5　广西贺县英阳关细碧-角斑岩系的[(al+fm)-(c+alk)]～Si图解

(a)为变质火山杂岩系的投影：1—辉绿岩；2—细碧岩；3—角斑岩；4—微晶闪长岩；(b)为火山碎屑岩及绿泥石绢云母片岩的投影：5—火山碎屑岩；6—绿泥石绢云母千枚岩和钙质千枚岩。(按西蒙南，1953年方法作图)

2．用利克（1969）方法作(al－alk)～c图解表明：①所有变质火山杂岩的投影点均落在火成岩成分区内，并集结于具火成趋向的长石线附近，表现出(al—alk)与c值呈正相关，与苏格兰西北部的第三纪玄武岩和辉长岩系列的演化方向相类似(图1-6-6)；

②在 100mg～c～(al—alk)图解内，变质火山杂岩的投影点呈较明显的火成演化趋势，与一般钙碱性岩系的演化方向相一致；③绿泥石绢云母千枚岩等副变质岩系的投影点在该图解上均落在泥质、半泥质以及白云质、钙质泥岩区域内。变沉积岩夹层的这种化学特征也间接表明火山作用是在地槽发展早期阶段的浅海至中深海条件下发生的（图1-6-7）。

3．考虑到本区辉绿岩的 SiO_2 值均低于 50 %，宜采用肖

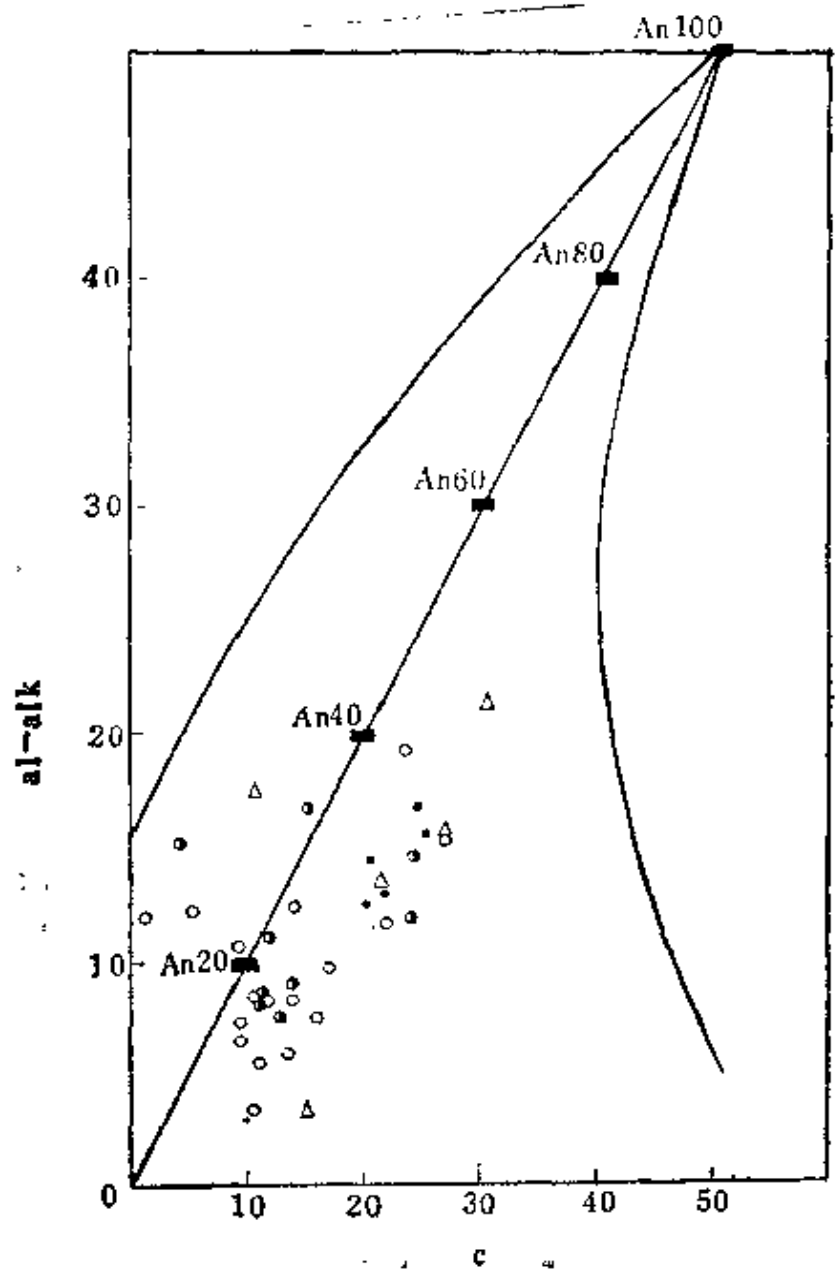


图 1-6-6　广西贺县英阳关细碧-角斑岩系(al—alk)～c图解。图例同图1-6-5（按利克，1969年方法作图）

(1965[51])的正—副角闪岩判别式恢复原岩。对5个辉绿岩样品别判的结果是：DF>0（正变质岩）的有三个，DF<0（副变质岩)的有二个，错判2/5．被错判为副变质岩的二个辉绿岩样品含钛较低（<1%）．对于细碧-角斑岩及片岩、千枚岩夹层用肖(1972,[52])方法进行判别,其结果是：①9个细碧岩样品，其DF

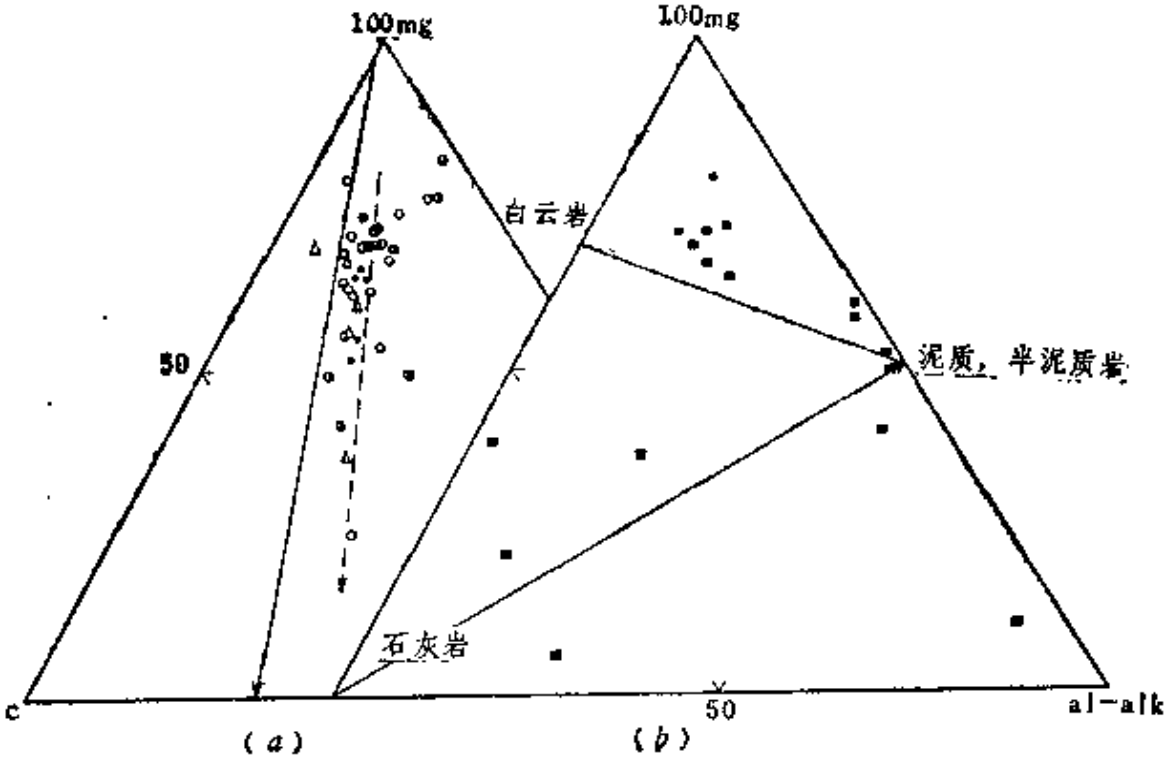


图 1-6-7　广西贺县英阳关细碧-角斑岩系100mg～c～(al—alk)图解

(a)细碧-角斑岩系包括辉绿岩、细碧岩、角斑岩、微晶闪长岩的投影．实线为布什维尔德杂岩体演化趋势,虚线为本区细碧-角斑岩演化趋势；(b)片岩、千枚岩的投影。图例同图1-6-5.（按利克1969年方法作图)．

为负值的有2个，错判2/9；②17个角斑岩样品，DF<0的有8个，错判8/17；③5个微晶闪长岩DF全为正值，错判0/5；④各类片岩、千枚岩共12个样品，DF为正值的只1个,错判1/12．正—副变质岩总错判率达25%，比肖等估计的可能错分率略高，这可能是由于细碧-角斑岩系本身成分变化较大，错分的机率也比正常火成岩高．但从定性的总体的角度看，肖的判别函数法对本区变质原岩的判别结果基本上是正确的，可取的。

1.至3.方法只能提供变质原岩成因类型的初步信息，在确定为正变质岩后，还需进一步阐明火成原岩的物质成分和岩系特征。

4．按勒·曼特尔[37]判别方法对辉绿岩、细碧岩、角斑岩、微晶闪长岩计算头三个特征向量EV1、EV2、EV3坐标值，并绘制成EV1—EV2图解（图1-6-8）。表明：①全部辉绿岩和少数细碧岩投影点均落在玄武质成分区内。5个辉绿岩样品的$DF1_{L.c}$<36.7，属玄武质；9个细碧岩样品其中6个$DF1_{L.c}$>36.7，但$DF2_{L.c}$<23.5，属安山质；②17个角斑岩样品和5个微晶闪长岩样品，其$DF1_{L.c}$>36.7，但$DF2_{L.c}$<23.5，属安山质。上述结果表明，勒·

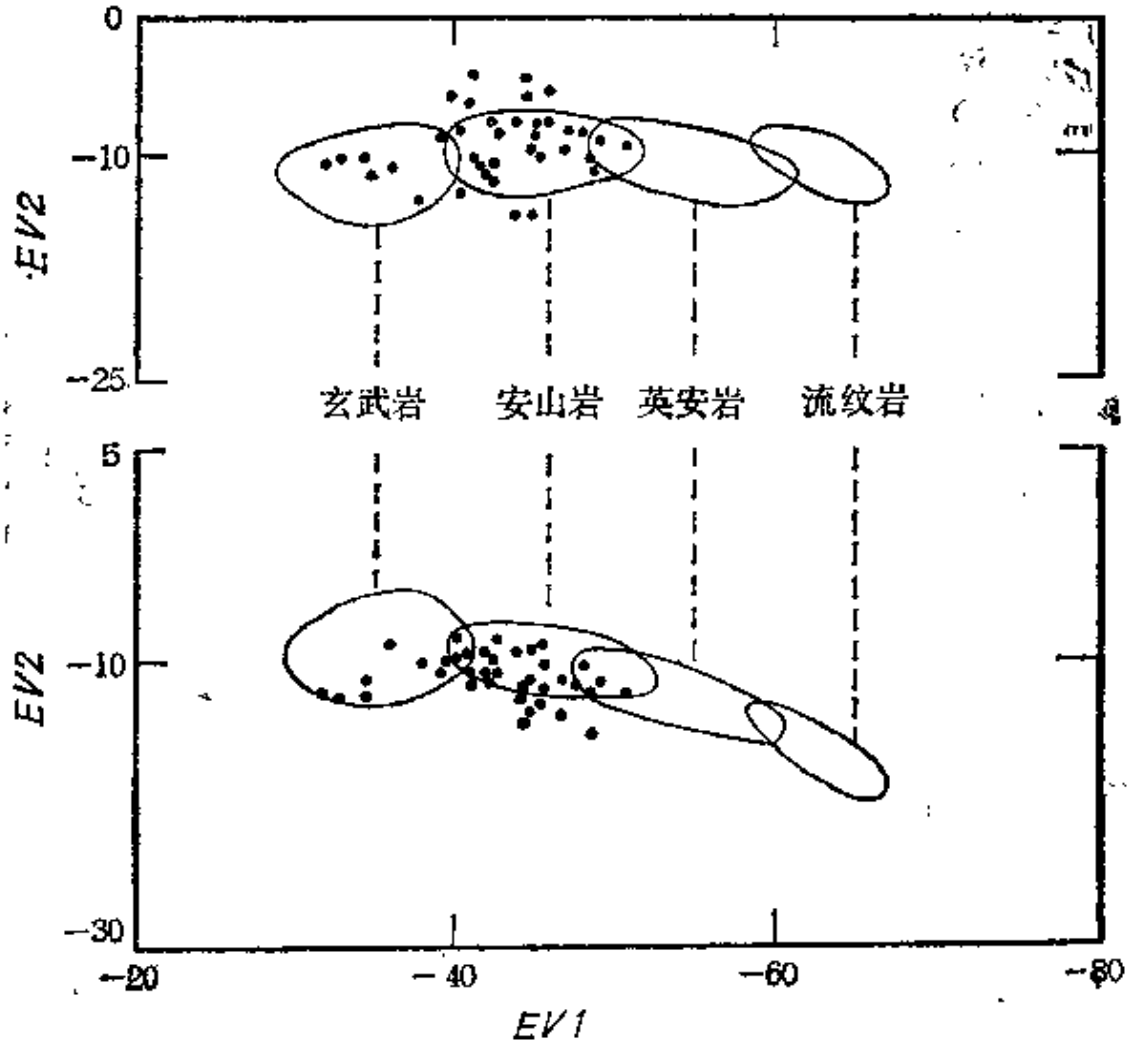


图 1-6-8　广西贺县英阳关细碧-角斑岩系EV1—EV2，EV1—EV3图解（按勒·曼特尔，1976年方法作图）

曼特尔的多组判别方法对变质火山岩的原岩成分的判断，就本例看，基本上是正确的。其中细碧岩有较大的错判，是因为细碧岩本身的化学成分变化较大，当MgO和CaO降低，SiO_2增高时，就逐渐向角斑岩靠拢。普遍认为，要在细碧岩与角斑岩之间划一明确的界线是困难的。从总体化学成分看，本区晚元古代火山活动的主要母岩浆应为玄武-安山质的，这与本区地层剖面中角斑岩及其有关的火山碎屑岩有较大厚度相一致的。

5．都城秋穗(1975[11])提出用RFeO～RFeO/MgO图解划分拉斑系与钙碱系火山岩组合，并指出在RFeO/MgO<2.5时，拉斑系与钙碱系在图解中相互交叉，当RFeO/MgO>2.5时，拉斑系与钙碱系能明显分开。英阳关细碧-角斑岩系RFeO/MgO>2.5的样品均落在拉斑系范围内（图1-6-9）。

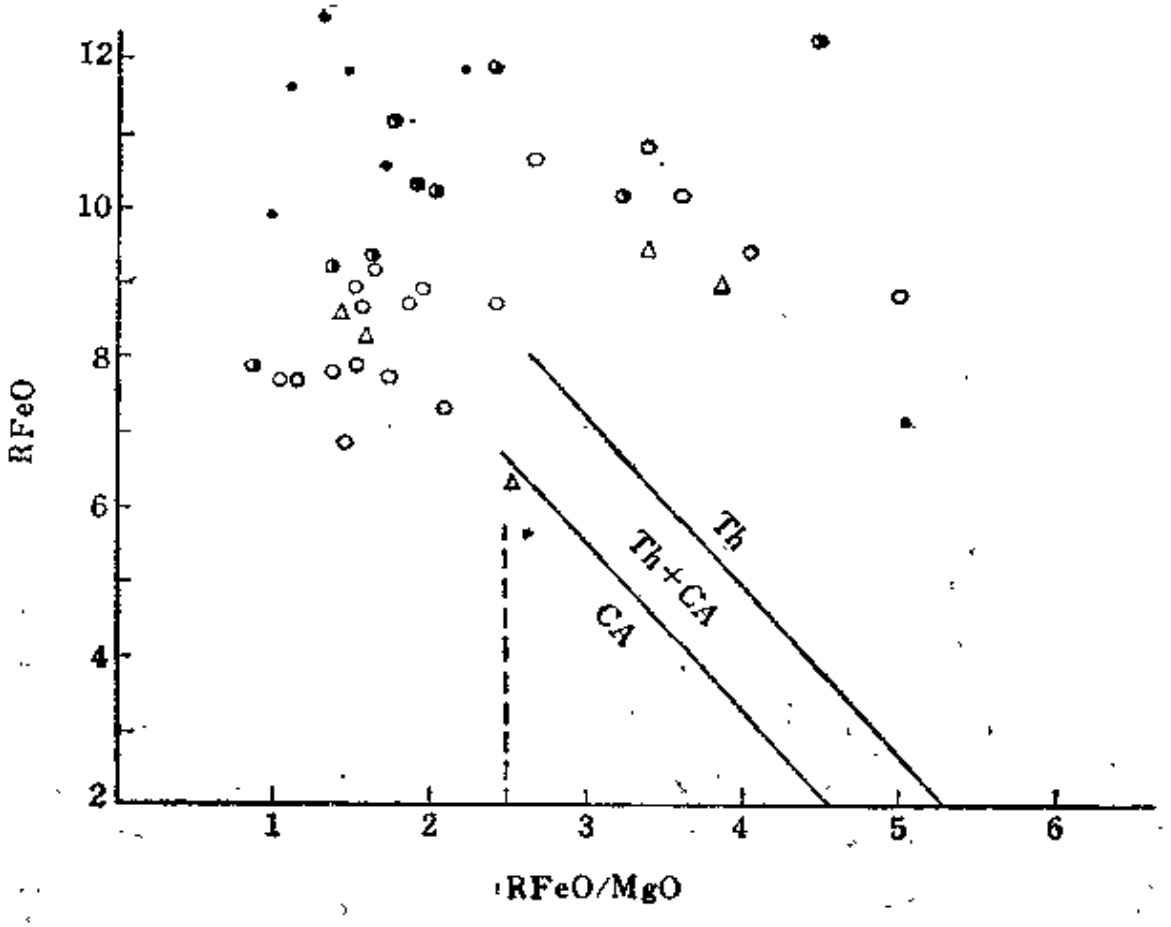


图 1-6-9　广西贺县英阳关细碧 角斑岩系RFeO～RFeO/MgO图解(按都城秋穗,1975)。Th—拉斑系；CA—钙碱系；CA＋Th—拉斑系与钙碱系重叠区。图例同图1-6-5

6．按波尔德瓦特（1964[18]）方法作 Ol′—Ne′—Q′ 图解（图1-6-10）。表明：英阳关细碧角斑岩系中辉绿岩、微晶闪长岩、多数细碧岩和角斑岩的投影点均落在波尔德瓦特界线的右侧，属拉斑系组合。其演化方向基本上是自橄榄拉斑玄武质（辉绿岩）向

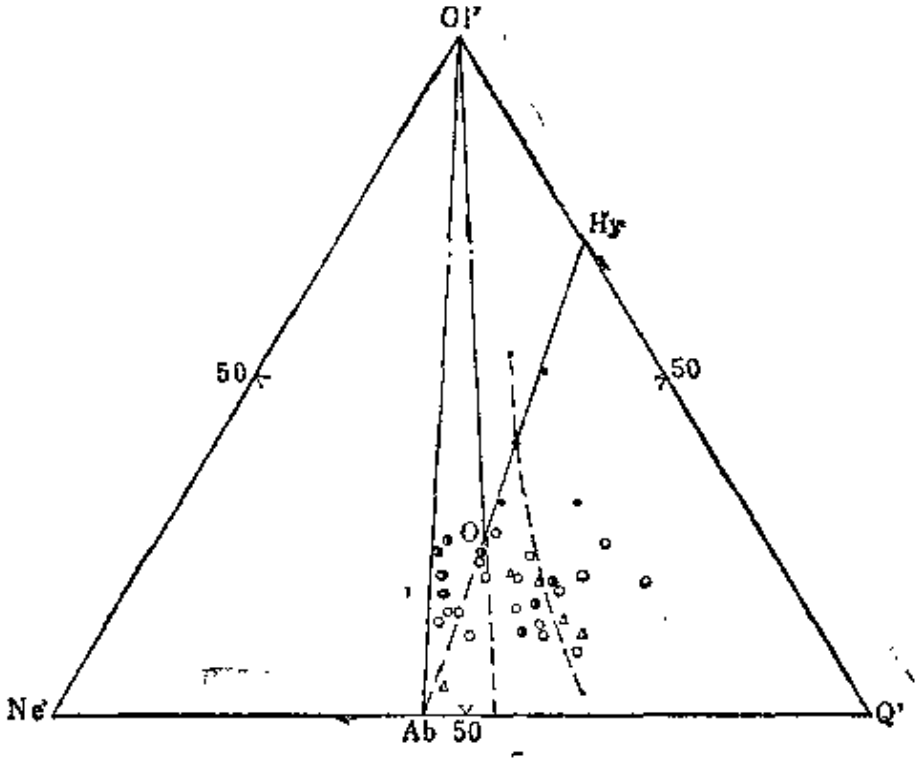


图 1-6-10　广西贺县英阳关细碧-角斑岩系 Ol′—Ne′—Q′ 图解（按波尔德瓦特，1964方法作图）。图例同图1-6-5。虚线表示本区细碧-角斑岩系具有拉斑质的演化趋势。Ol′—O—Ab 为划分界线。该线右侧为拉斑系；左侧为碱性系

石英拉斑玄武质（细碧岩）至拉斑安山质（微晶闪长岩、角斑岩）方向演化。岩系总演化特征显示出与拉斑系的一致性。但值得注意的是，有少数细碧岩、角斑岩的投影点落在碱性系内，与总体演化方向相背离。根据约德（1962[56]）的看法，拉斑系与碱性系是两种独立的岩浆体系，它们被“热岭”所分割，而不可能互相过渡。这样看来，那些落在碱性系内的细碧岩和角斑岩有可能是由于在海底喷发时，熔岩受到海水的交代或由于区域变质作用时钠质溶液的交代而导致钠质增高的结果。从本例岩石化学特点综合分析，似乎为细碧-角斑岩交代成因提供某些有利证据。因此可以得

出结论：本区细碧-角斑岩的母岩浆应是拉斑质玄武-安山岩浆。

综上所述，确认广西贺县晚元古代为一优地槽区。在优地槽发展早期阶段形成了浅海相至半深海相的海底火山活动。其方式为喷溢、喷发和次火山侵入交叉进行，在地层柱上形成熔岩和火山碎屑岩相互呈夹层。大约在晚元古代末，优地槽回返褶皱，上述火山岩系经受低级（绿片岩相）的区域变质作用，形成片理化的变质火山杂岩。由于在浅变质作用下，元素的迁移和交代不是主要的，因而目前广泛被采用的若干原岩成分恢复方法对该区的变质火山岩是适用的。各种方法检验表明：该区晚元古代火山活动的母岩浆为拉斑玄武-安山质的，并以安山质为主体。细碧角斑岩是由玄武-安山岩在喷发时，或在区域变质作用下钠质交代而成。本区细碧-角斑岩系应属于巨厚的优地槽建造中蛇绿岩套组成部分。但在地层柱上缺少巨大的蛇绿岩体以及巨厚的海相硅质层，因而该区变质火山杂岩只是一个发育极不完善的蛇绿岩套。

第七章　火成岩钙碱系数的计算

皮科克[46]提出用钙碱系数来区分火成岩系列的碱性程度。由于火成岩化学组份中Na_2O+K_2O(重量%)随SiO_2含量增高而相应地增高，CaO则随SiO_2含量增高而降低。在SiO_2—(Na_2O+K_2O)和SiO_2—CaO坐标图解中，这一对相关曲线必相交于一点，交点垂足的SiO_2值称钙碱系数(图1-7-1)。钙碱系数的数值越小，岩系的碱性程度越高。皮科克取51、56、61三个分界点作为区分碱性岩系（钙碱系数<51)、碱钙岩系（51<钙碱系数<56）、钙碱岩系(56<钙碱系数<61)和钙性岩系(钙碱系数>61)。必须指出，由于皮科克提出钙碱系数法时没有规定相应的精确的计算方法，后人多用图解法求之。图解法误差极大，且缺少统一的客观标准，应用起来有种种弊病。笔者今采用一元非线性回归、最小二乘拟合方法为皮科克钙碱系数的计算编制了一套完整程序，并用数理统计中的检验方法来检查结果的可靠性。

一、计算原理

1．用多项式函数拟合两组N个数据，以最小二乘法则求函数的解析表达式。若以$y_i^{(1)}=(K_2O+Na_2O)_i$，$x_i=(SiO_2)_i$，($i=1, 2, \cdots, N$) 对$y_i^{(1)}$，x_i配以适宜的m项多项式拟合曲线，则

$$\hat{y}_i^{(1)}=a_0^{(1)}+a_1^{(1)}x_i+\cdots+a_{m-1}^{(1)}x_i^{m-1} \qquad (1)$$

对应各点x_i值，$y_i^{(1)}$的离差平方和$\sum_{i=1}^{N}(y_i^{(1)}-\hat{y}_i^{(1)})^2$是多项式(1)各系数项的函数。即

$$F(a_0^{(1)}, a_1^{(1)}, \cdots a_{m-1}^{(1)})=\sum_{i=1}^{N}(y_i^{(1)}-\hat{y}_i^{(1)})$$

根据最小二乘法则，要使函数F为最小，则其对$a_0^{(1)}$，$a_1^{(1)}$，…，$a_{m-1}^{(1)}$之导函数必等于零。

$$\frac{\partial F}{\partial a_j^{(1)}}=0\ ,\ (j=0\ ,1\ ,\cdots,m-1)$$

$$2\sum_{i=1}^{N}(-1)[y_i^{(1)}-a_0^{(1)}-a_1^{(1)}x_i\cdots-a_{m-1}^{(1)}x_i^{m-1}][x_i^j]$$

$$=0\ ,\ (j=0\ ,1\ ,\cdots,m-1) \qquad (2)$$

将方程组(2)移项整理后可得正规方程组(3)

$$\left.\begin{cases}a_0^{(1)}N+a_1^{(1)}\Sigma x_i\cdots+a_{m-1}^{(1)}\Sigma x_i^{m-1}=\Sigma y_i^{(1)}\\ a_0^{(1)}\Sigma x_i+a_1^{(1)}\Sigma x_i^2\cdots+a_{m-1}^{(1)}\Sigma x_i^m=\Sigma x_i y_i^{(1)}\\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\\ a_0^{(1)}\Sigma x_i^{m-1}+a_1^{(1)}\Sigma x_i^m\cdots+a_{m-1}^{(1)}\Sigma x_i^{2m-2}=\Sigma x_i^{m-1}y_i^{(1)}\end{cases}\right\} \qquad (3)$$

以上用Σ表示$\sum_{i=1}^{N}$，以高斯消元法解方程组(3)，便可求得（1）式中系数项$a_0^{(1)}$，$a_1^{(1)}$，…$a_{m-1}^{(1)}$，则我们有方程（4）

$$y^{(1)}=a_0^{(1)}+a_1^{(1)}x\cdots+a_{m-1}^{(1)}x^{m-1} \qquad (4)$$

2．若以$y_i^{(2)}=(CaO)_i$，对$y_i^{(2)}$，x_i用相同方法配以适宜的m项多项式拟合曲线，得方程（5）

$$y_i^{(2)}=a_0^{(2)}+a_1^{(2)}x\cdots+a_{m-1}^{(2)}x^{m-1} \qquad (5)$$

3．将方程（4）、（5）联立，欲求拟合曲线交点（$y^{(1)}=y^{(2)}$）的x值，先给初始值$x_0=50$，以下降法解方程(4)、(5)，以求x的精确解。

4．用相关指数(R)作为评价钙碱系数法划分火成岩系列可靠与否。若R足够大，则拟合曲线与原始数据吻合程度佳，用钙碱系数区分火成岩系列碱性程度的方法可取，否则说明区域火成岩系列各个成员间组合关系复杂，可能有复合岩系存在，或同化、混染作用强烈，此时不宜用皮科克钙碱系数法区分岩系，而应另选其他方法。

$$\hat{y}_i^{(1)}=\sum_{j=0}^{m-1}a_j^{(1)}x_i^j,\quad \bar{y}^{(1)}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}y_i^{(1)}$$

$$R_0^{(1)}=1-\frac{\sum_{i=1}^{N}(y_i^{(1)}-\hat{y}_i^{(1)})^2}{\sum_{i=1}^{N}(y_i^{(1)}-\bar{y}^{(1)})^2}\qquad(SiO_2\sim(K_2O+Na_2O))$$

同理

$$R_0^{(2)}=1-\frac{\sum_{i=1}^{N}(y_i^{(2)}-\hat{y}_i^{(2)})^2}{\sum_{i=1}^{N}(y_i^{(2)}-\bar{y}^{(2)})^2}\qquad(SiO_2\sim CaO)$$

二、火成岩钙碱系数计算程序

(见附录Ⅶ)

三、程序使用说明

原始数据由行号3000 DATA 键入，先键入SiO_2全部数据，其后为(Na_2O+K_2O)，最后为CaO。程序执行时屏幕出现NUMBERS OF SAMPLE?时，键入本次计算的样品数。输出格式见本章之五。

四、计算实例

福建平和县钟腾地区有一晚侏罗世形成的破火山机体[12]。破火口中央有一花岗岩类岩株体，面积约90km^2，自外而内呈环状分布有石英二长闪长岩、石英二长岩、二长花岗岩和细粒花岗岩。从地质产状、岩石化学和矿物成分的演化规律说明它们是由

同源岩浆分三阶段侵入形成的环状杂岩体。钟腾岩体的周围以南园组上段酸性火山岩为主，呈围斜状向内倾斜，总厚约1620m，

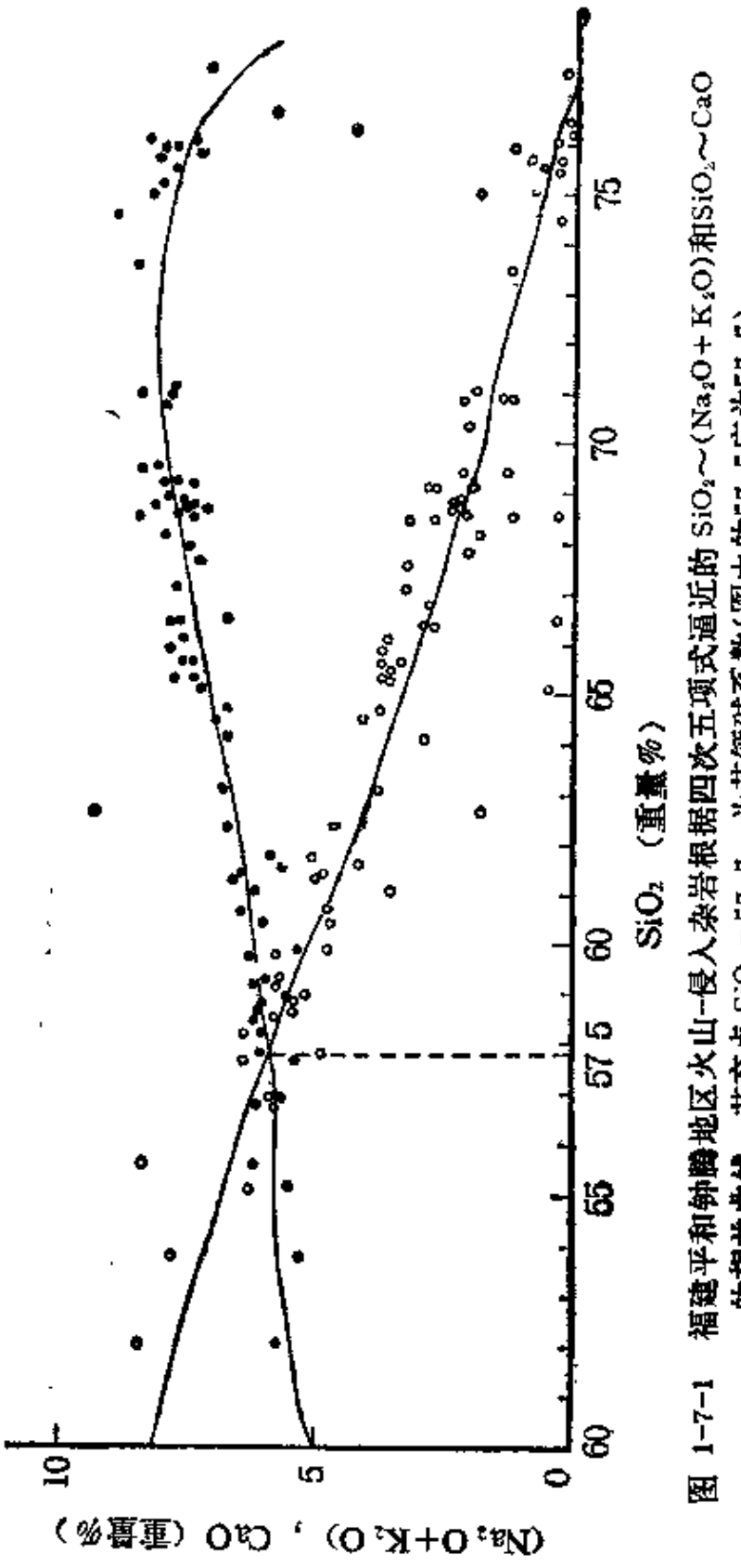


图 1-7-1 福建平和钟腾地区火山-侵入杂岩根据四次五项式逼近的 SiO_2～(Na_2O+K_2O)和SiO_2～CaO的相关曲线。其交点 $SiO_2=57.7$，为其钙碱系数(图中的57.5应为57.7)。

破火口中央塌陷，岩体外围分布有四个寄生火山口和二个隐爆岩筒，呈半环状围绕中央岩株体。

采自钟腾晚侏罗世破火山机体内的酸性火山-侵入杂岩的81个岩石化学全分析资料、计算的钙碱系数值及拟合的多项式方程均见本章第五部分输出格式.计算表明，钟腾火山-侵入杂岩明显属钙碱岩系，其钙碱系数为57.7（$m=5$时），相应的相关指数$R^2_{SiO_2\sim Na_2O+K_2O}=0.508$，$R^2_{SiO_2\sim CaO}=0.829$，拟合度较佳。$m=5$时的理论曲线见图1-7-1。

五、输出格式

（原始数据第一组为SiO_2，第二组为(Na_2O+K_2O)，第三组为CaO）

53.87	55.63	58.73	61.36	59.21	58.93	59.87	58.84	61.88	58.52
58.98	58.22	61.41	57.61	58.86	59.19	60.46	64.67	65.32	65.65
65.23	65.57	65.91	62.34	66.21	68.71	66.31	68.95	66.32	69.90
67.04	66.10	66.19	69.08	68.57	69.71	69.45	70.72	68.61	75.11
75.83	73.57	75.86	68.99	67.87	69.41	70.89	68.87	57.60	57.71
55.14	59.95	52.06	60.79	61.12	61.59	65.15	74.75	64.12	65.10
63.19	62.67	69.14	71.05	70.29	70.09	68.65	68.72	75.58	77.14
74.61	76.02	68.45	68.46	67.55	76.30	75.61	75.11	76.32	75.81
76.66									

5.19	6.19	6.05	6.58	6.01	5.70	6.15	6.11	5.89	6.20
6.35	5.99	6.29	5.30	6.05	5.90	5.99	6.95	7.26	7.51
7.69	7.31	7.78	6.70	6.67	8.00	7.89	7.82	7.68	7.76
7.73	7.51	7.43	7.87	7.59	8.16	8.19	7.94	5.10	8.01
7.60	8.42	7.90	7.97	7.43	8.04	8.43	7.52	5.86	6.00
5.35	5.22	5.80	6.47	6.10	5.60	7.04	6.78	6.80	6.43
6.69	9.83	7.33	7.68	8.99	7.75	7.54	7.36	7.76	7.01
8.87	8.32	7.26	8.42	7.20	6.75	8.08	7.94	4.16	7.72
5.78									

7.77	8.27	5.42	4.98	5.72	5.83	5.79	7.00	5.35	5.85
6.14	6.38	4.95	6.33	5.42	5.70	4.88	4.05	3.68	3.30
3.64	3.71	3.73	4.59	2.70	2.36	2.81	2.11	2.87	2.73
3.22	3.57	3.60	2.78	1.06	1.39	1.49	1.08	0.13	1.98
1.14	1.11	0.81	1.80	2.06	2.14	1.24	2.35	2.92	4.89
6.19	4.65	7.41	4.76	3.49	4.08	0.38	3.71	2.93	3.65

3.89	1.83	1.99	1.90	2.02	2.05	2.13	2.23	0.22	0.11
0.23	0.39	3.32	2.57	3.33	0.24	0.53	0.70	0.05	0.29
0.22									

B = 0.702001 0.095620
R = 0.332 (SiO_2～K_2O + Na_2O)
B = 22.588594 −0.293363
R = 0.816 (SiO_2～CaO)
CALC-ALKALI INDEX = 56.2123

B = −35.661427 1.208090 −0.008430
R = 0.447 (SiO_2～K_2O + Na_2O)
B = 46.532694 −1.025888 0.005551
R = 0.829 (SiO_2～CaO)
CALC-ALKALI INDEX = 57.4007

B = −50.988430 1.907559 −0.018999 0.000053
R = 0.439 (SiO_2～K_2O + Na_2O)
B = 35.117154 −0.504924 −0.002321 0.000089
R = 0.829 (SiO_2～CaO)
CALC-ALKALI INDEX = 57.4034

B = 41.654605 −1.161704 −0.009632 0.000582 −0.000004
R = 0.508 (SiO_2～K_2O + Na_2O)
B = 22.306148 −0.080495 −0.003616 −0.000034 0.000001
R = 0.829 (SiO_2～CaO)
CALC-ALKALI INDEX = 57.6519

第八章　岩石化学数据顺序文件的建立

一、概　　说

岩石化学数据一般都以二维数组的方式列表。本书所附的所有 BASIC 程序内原始数据$A(N, M)$都统一为：行(N)代表样品数，列(M)代表氧化物个数。当一次计算样品不多时(数十个)，原始数据可直接由DATA语句键入，执行时程序由READ语句读入。这样做计算的数据不能被保留在磁盘中。但若一次计算样品较多(数百个)时，用DATA语句键入，其中难免有出错之处（特别是错位），致使计算结果不能使用。为了使收集的数据能长期保存在磁盘中且可以为多种计算调用，就需要将数据写入磁盘，这个操作称为"顺序文件"的建立。

笔者提供一个将二维数组写入磁盘的 BASIC 程序，名DATAR(见附录Ⅷ).这个程序附有修改数据的功能，使用极为方便。现将具体操作以一实例加以说明。

1．下面有二个样品11个氧化物数据要写入磁盘，并命名为"EX1"文件

SiO_2	TiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	FeO	MnO	MgO
48.00	1.52	15.84	4.42	6.50	0.17	6.52
70.21	0.30	14.69	1.06	1.91	0.06	0.75
CaO	Na_2O	K_2O	P_2O_5			
8.23	4.16	0.96	0.52			
1.41	4.35	5.55	0.13			

2．将已格式化的磁盘放入A盘，将程序DATAR键入内存，行号 4100 OPEN"O", #1, "YCH-1" 改为4100 OPEN"O", #1, "EX1".

3． 2 DATA 48.00, 0.52, …，（为练习改错请按下面5的数据逐个键入，每个数据用逗号分开，若键入较多样品时，每行键二个样品为宜，以后换行。如4 DATA……，等，至键毕。）

4． RUN并‹CR›●（执行），屏幕上出现人机对话 SAMPLE NUMBER? 2 ‹CR›（回答：2个样品。）VARIABLE NUMBER? 11 ‹CR›（回答：11个变量。）

5． 程序执行后，立即由打印机印出刚才键入的数据矩阵，设印出的结果如下：

```
 48.00  0.52  15.84  4.42  6.50  0.17  6.52  6.52  8.23  4.16  0.96
  0.52 70.21   0.30 14.69  1.06  1.91 0.06  0.75  1.41  4.35  5.55
```

同时屏幕上出现询问是否要修改数据的提示，并给出四种选择

1. C(ORRECT)（修改一个数据）
2. D(ELETE)（删去一个数据）
3. I(NSERT)（插入一个数据）
4. N(O)（不要求修改）

从打印出的数据中，我们看到第1行第2列的0.52，应为1.52，这是由于键错了数据，故应修改，第1行第8列的6.52重复，必须删去，于是我们可作如下命令：

6． C‹CR›（要求修改），同时屏幕上出现 LINE? 1‹CR›，COLUM? 2‹CR›（提问哪行哪列，回答：要求修改第1行第2列的数据）.此时屏幕出现 X(N1, M2)? 1.52‹CR›（将第1行第2列的正确数据1.52键入）。改好一个数据后，屏幕又出现C，D，，N四种选择。现在要把第1行第8列的6.25删去，于是选择D命令。

7． D‹CR›（要求删去一数据），LINE? 1‹CR›，COLUM? 8‹CR› 程序将第1行第8列的6.25删去，同时自动将矩阵中该数据以后的数向前顺，移并询问矩阵中最后一个元素的值．X(N,

---

●‹CR›表示敲一次回车键，即 RETURN

M)？ 0.13‹CR›（键入矩阵中最末一个元素的值0.13）.

8. 上面二个错误修改完毕，当屏幕出现C, D, I, N时，可键入N‹CR›. 程序询问是否要重打印一次数据，并给Y或N的选择(ARE YOU WANT TO PRINT DATA AGAIN?, TO PRESS Y OR N). 这时先键入Y‹CR›，打印机重新将修改过的矩阵印出，有必要检查前面二处错误是否已改妥. 若已改妥，在C, D, I, N选择中选N‹CR›，在Y OR N选择中选N‹CR›，此时可见到驱动器的红灯亮起，内存将数据写入磁盘. 待灯熄后键入FILES‹CR› 在屏幕上可见到文件"EX1"已存入磁盘. 记住此时写入磁盘的数据前后顺序是：2（样品数），11（氧化物个数），48.00，…0.13.

9. 给出SAVE"DATAR"‹CR›命令，将程序存入磁盘，供下次使用.

10. 可能因一时粗心或时间久隔，忘记存在磁盘中的顺序文件是哪些数据. 这时可调用笔者编的 DATAW 程序，它与DATAR相辅相成，可完成顺序文件的读出. 将DATAW键入内存时，注意须将行号20 OPEN"I", #1, "EX改为OPEN"I", #1, "EX1"（文件名需和磁盘内文件名一致）. 然后RUN‹CR›，便可从打印机中打印出磁盘中文件名为"EX1"的一系列数据. 最后下SAVE"DATAW"‹CR›命令，也将它存入磁盘供下次使用.

11. 本书所附的BASIC程序都是由READ语句读入的. 若要从磁盘中输入数据，只需将程序中少数几句作适当修改即可. 现以NIGGLI程序为例加以对照.

(原来程序句)	(修改后对应程序句和加入部分)
20 INPUT "NUMBER OF SAMPLE"; N	19 OPEN "I", #1, "EX1"
30 INPUT "NUMEER OF VARIABLE"; M	20 INPUT #1, N 30 INPUT #1, M
90 FOR I=1 TO N, FOR J=1 TO M, READ A(I,J): NEXT J,I	90 FOR I=1 TO N, FOR J=1 TO M, INPUT #1, A(I,J), NEXT J,I 91 CLOSE

读者不妨将刚才练习中二个样品作一次调用计算。

12．若再次需要在磁盘中记录数据，千万要记住将DATAR中行号4100句中文件名加以更改，如"EX2"。否则，若两次文件名相同，会把前一次的记录冲洗掉。只要清醒地记住这一点，以若干张磁盘作为数据库便足够供个人统计使用（更完善的数据库必须在dBASE Ⅱ 下进行操作）。顺序文件的文件名以七个字符为限，聪明的读者应自己规定好字符的内函，以便一见文件名称就可明白这一文件存的是什么数据，取自什么地点等。

二、建立数据顺序文件的DATAR程序

（见附录Ⅷ）

三、读出顺序文件的DATAW程序

（见附录Ⅸ）

第九章　APPLE Ⅱ　微机简述

本书所附的BASIC应用程序，是以扩展BASIC语言编写的，供在APPLEⅡ微电脑上运行(也可在IBM　PC上运行)。读者若要使本书所附程序不作任何修改而顺利运行，除主机外必须具备下列附件：①一个EPSON FX—80 打印机，其硬开关盒内的两排开关需拨到如图1-9-1的位置上。特别是开关2之NO1开关必须在 ON上，打印机才能按本书设计的132列输出；②16K 的RAM版，插在0号槽口内(左起第一个)，使主机内存扩充到56KB；③Z—80版，插入 5 号槽口(左起第 6 个)；④二个磁盘驱动器，其支持板一块插在 6 号槽口(左起第 7 个)；⑤CP/M2.2软件一盘，内附子程序目录如下(下有槽线者是进行基本操作不可少的)：

A：FORMAT	COM:	COPY	COM
A：MBASIC	COM:	GBASIC	COM
A：CONFIGIO	BAS:	PIP	COM
A：STAT	COM:	ED	COM
A：ASM	COM:	DDT	COM
A：LOAD	COM:	RW13	COM
A：APDOS	COM:	SUBMIT	COM
A：XSUB	COM:	DUMP	ASM
A：DUMP	COM:	DOWNLOAD	COM
A：CPM56	COM		

⑥若干张新磁盘。



图 1-9-1　EPSON打印机内硬开关位置状态

一、系统起动

按说明书安装就绪后，将CP/M2.2磁盘插入A驱动器，关上驱动器的门，打开显示器和打印机的开关，最后再打开主机，经数秒钟自举(Booting)后，屏幕若出现CP/M文本的如下告示：

APPLE II CP/M
56K VER. 2.20B
(C) 1980 MICROSOFT

并出现提示符 A>，表明起动成功，主机处于CP/M 系统控制下。若数秒钟后屏幕上仅出现 COMPUTER 字样，则起动失败。这时应关上主机电源，将磁盘拉出，对好纸封与片子的中心位置，再放入重新起动，直至出现A>提示符为止。

二、新磁盘格式化

由商店购回的新磁盘上面没有任何信息，面APPLE II 使用的磁盘要求被划分为16扇区，所以一个新磁盘必须先格式化。在完成第一步基础上，将新磁盘放在B驱动器，关上门，键入A>FORMAT B：‹CR›。屏幕出现格式化程序的文件告示如下

```
A>FORMAT  B : ‹CR›
      APPLE  II  CP/M
16 Sector Disk Formatter
  (C) 1980 Microsoft
Insert disk to be formatted in drive B:
Press RETURN to begin ‹CR›
Disk in drive B : will be ERASED
Continue (Y/N)?  Y ‹CR›
Formatting…
```

FORMAT Complete

按屏幕上提示作好准备后，敲下 RETURN 键，格式化开始。开始时程序会提示在驱动器B内的磁盘信息将要消除（如果是有信息的盘，格式化时已有信息都要被清除）.键入Y ‹CR› 后，格式化开始，驱动器动作数秒钟后，显示格式化已经完成的英文句子，同时系统回到A>状态。

三、全 盘 拷 贝

在完成第二步后，按下面提示和步骤，先键入 A>COPY B：=A：*.* ‹CR› 其中前一个 * 代表 A 盘中所有文件名，第二个 * 代表A盘中所有的扩展名，亦即 A 盘全体拷贝到B 盘上。按屏幕上提示检查一次是否把被拷贝的 盘（主导盘）放在 A 驱动器，把拷贝的盘放在B驱动器。若是，则敲 RETURN 键，拷贝开始.完成后，程序询问是否还要作其他拷贝.这时若键入 Y，第二次拷贝开始，若打入N ‹CR›，系统回到待命状态 A>。此时可关闭主机电源，将放在A 盘中的磁盘拉出，将拷贝好的原放在B盘中磁盘放入 A 盘，打开主机电源，若启动成功，出现提示符 A>，表示已获得 CP/M 系统盘，可供以后上机使用。拷贝好的磁盘现仍放在A 盘上。

```
A>COPY B:=A:*.* ‹CR›
  APPLE Ⅱ CP/M
16 Sector Disk Copy Program
  (C) 1980 Microsoft
Insert MASTER disk into drive A:
Insert SLAVE disk into drive B:
Press RETURN to begin ‹CR›
Copying…
COPY Complete
Do you wish to make another copy? Y ‹CR›
```

Insert MASTER disk into drive A:
Insert SLAVE disk into drive B:

四、列磁盘目录

键入 A> DIR‹CR›，屏幕显示磁盘内一切文件的清单，如同在本章前言中所列，列毕又给出提示符A>。

五、部分拷贝

读者若只对CP/M系统磁盘中若干程序感兴趣，并拟将其拷贝进B盘磁盘中，则需调用部分拷贝PIP.COM程序。这时分二步进行，首先键入A>CPM56 B:‹CR›，使B盘磁盘先记载上56K CP/M系统（一个磁盘只需操作一次，下次调用PIP.COM前不必再做。若不做这一步，该盘无法自举），完成后按一次 RETURN 键，使系统回到待命状态A>，再进行第二步，即即键入A>PIP B:=A:MBASIC.COM‹CR›，主机便将A盘中文件名为MBASIC.COM程序拷进B盘，完成后又出现提示符A>按与此相同格式将DDT.COM, FORMAT.COM, STAT.COM逐一拷进B盘磁盘中，这时磁盘尚有很多自由空间，可供以后存放其他BASIC程序。它的好处在于既可完成CP/M系统下的重要操作，又有空间存放其他程序，使用时极为方便，这两步骤的屏幕响应如下：

```
A>CPM56 B:‹CR›
      Apple II CP/M
56K CP/M Disk update program
    (C) 1980 Microsoft
Insert 16 sector disk into drive B:
Hit RETURN to begin‹CR›
Disk has been updated to 56K
```

```
Hit RETURN to be—boot system ‹CR›
A>
```

六、询问磁盘中文件所占空间和剩余空间

在A>状态下，将CP/M系统盘放入A驱动器，键入A>STAT A：*.*，屏幕响应如下

Recs	Bytes	Ext	Acc	
13	2k	1	R/W	A：APDOS. COM
64	8k	1	R/W	A：ASM. COM
58	8k	1	R/W	A：CONFIGIO. BAS
8	1k	1	R/W	A：COPY. COM
84	11k	1	R/W	A：CPM56. COM
40	5k	1	R/W	A：DDT. COM
4	1k	1	R/W	A：DOWNLOAD. COM
33	5k	1	R/W	A：DUMP. ASM
4	1k	1	R/W	A：DUMP. COM
52	7k	1	R/W	A：ED. COM
18	3k	1	R/W	A：FORMAT. COM
200	25k	2	R/W	A：GBASIC. COM
14	2k	1	R/W	A：LOAD. COM
192	24k	2	R/W	A：MBASIC. COM
58	8k	1	R/W	A：PIP. COM
18	3k	1	R/W	A：RW13. COM
48	6k	1	R/W	A：STAT. COM
10	2k	1	R/W	A：SUBMIT. COM
6	1k	1	R/W	A：XSUB. COM
Rytes	Remaining On	A：	3k	

其中 Recs—逻辑操作数，Bytes—所占的 空间，以KB（千拜）为单位，Ext—所占的域数，一个域等于 16KB，Acc—读写状态，其后列出盘名以及文件全称。末一行指示该磁盘只剩下自由空间

为3KB。

七、与打印机联机

，逐一键入下列指令后，主机与打印机的联结动作始告完成。一旦有LLIST命令或应用程序中有LPRINT语句，打印机才执行打印。

A＞DDT‹CR›
DDT VERS 2.2
—SDD2F‹CR›
DD2F 3E 31‹CR›
CTRL—C （同时揿 CTRL 和C键）

八、MBASIC进驻内存

键入A＞ MBASIC‹CR› ，数秒钟后屏幕出现BASIC—80文本的告示：

BASIC—80 REV. 5.2
APPLE CP/M VERSION
COPYRIGHT (C) 1980 BY MICROSOFT
CREATED: 12—NOV—80
26483 BYTES FREE
OK
■

并出现方形光标提示符，此时主机处于CP/M系统下的 MBASIC状态(CP/M系统下还可有FORTHAN、PASICAL等不同状态)。

九、键入应用程序

在MBASIC状态下，将本书所附的一个最简短的巴尔特氧离

子法程序逐行键入内存，注意在 BASIC 的关键词前后都要空一格。一行键毕后按 ‹CR› 键移行。但愿操作者很细心，一个错误也没有。键毕，执行命令RUN ‹CR›，便获得一张由打印机打印的输出表。如有错误，机器会告诉出错的行号，视错误性质分两种情况处理：①若在光标前面有出错的行号，表明机器已自动进入编辑状态（EDIT）。敲动空格键，动一次出现一字符，并与正确的程序字符对照。将光标移至错字处（只是改错，不删不插），打入C，再打入正确字符。若要删去一字符，将光标覆盖在该字符之上，打入D，即删去。若要插入若干字符，打入I，以后再打入要插的字符。改好后键入 ‹CR›，退出编辑状态；②若机器检错后给出出错行号，光标出现在最左端，则需打入EDIT 行号 ‹CR› 命令，令进入编辑状态，然后按① 方法修改之，直至执行后无错误为止。

十、程序存入磁盘

将已格式化的新磁盘放入A 驱动器，先打入RESET ‹CR›（注意，在 MBASIC 状态下每更换一次磁盘，都要下一次RESET ‹CR› 命令，此称建立磁盘印象），以后键入SAVE"BARTH" ‹CR›（其中引号内为文件名，由读者自定），驱动器红灯点亮，将内存中程序写入磁盘并重现提示符 ■ 后，键入FILES ‹CR›，屏幕出现 BARTH. BAS，这是告诉操作者磁盘中有一名为BARTH的BASIC应用程序存在。应键入 NEW ‹CR› 命令，清去内存中程序，再键入 LOAD"BARTH" ‹CR› 命令，让主机从磁盘中把BARTH程序记入。使用LIST ‹CR› 命令，屏幕上便呈现出刚才打入的源程序。最后用 LLIST ‹CR› 命令，将程序打印出，作为有用资料保留起来。

读者掌握了以上十点操作技术，便基本上能使微机正确运行，使用本书所附的程序就不会有困难。

第一篇参考文献

〔1〕 徐克勤、孙鼐、王德滋、胡受奚，1963，华南多旋回的花岗岩类的侵入时代、岩性特征、分布规律及其成矿专属性的探论，地质学报，43卷，第1、2期。

〔2〕 徐克勤、孙鼐、王德滋、刘昌实、陈克荣，1982，华南两类不同成因花岗岩岩石学特征，岩矿测试，第2期。

〔3〕 孙鼐、刘昌实、康旭，1963，浙江某些燕山期花岗岩的岩石化学特征，南京大学学报，第2期。

〔4〕 孙鼐、周金城、刘昌实、陈克荣、曾家湖，1983，浙江桐庐火山侵入杂岩的地球化学特征，地球化学，第4期。

〔5〕 胡受奚、季寿元，1962，南岭一钨矿田中钨锰铁矿-石英脉两旁围岩蚀变的研究，地质学报，第42卷。

〔6〕 周新民等，1978，江苏及皖东新生代玄武质岩石岩石化学和矿物成分的研究，南京大学学报，第3期。

〔7〕 刘昌实、林承毅等，1976，福建永春桂洋片麻状花岗岩的成因，南京大学学报，第1期。

〔8〕 刘昌实、牟惟熹、潘恩沛，1982，主分量分析与华南两类不同成因花岗岩的划分，桂林冶金地质学院院报，第2期。

〔9〕 刘昌实、牟惟熹，1982，火成岩钙碱系数计算的数学模式，南京大学学报（自然科学版），第1期。

〔10〕 刘昌实、周金城、陈克荣等，1982，浙江桐庐火山侵入杂岩的特征和演化，南京大学学报（自然科学版），第2期。

〔11〕 刘昌实、杨心宜，1982，澄清一个重要的岩石化学参数，桂林冶金地质学院院报，第3期。

〔12〕 陈克荣、刘昌实、彭亚鸣等，1980，古破火山机构及其次火山花岗岩体特征的研究，南京大学学报（自然科学版），第1期。

〔13〕 牟惟熹、刘昌实、辛克礼，1979，CIPW 标准矿物电算程序，地质与勘探，第7期。

〔14〕 曹钦臣、刘昌实、牟惟熹，1981，青岛红岛地区火山—侵入杂岩的研究，山东海洋学院院报，第3期。

〔15〕 赵连泽、刘昌实、孙鼐，1983，安徽南部太平黄山多成因复合花岗岩基的岩石学特征，南京大学学报（自然科学版），第2期。

〔16〕 王德滋、周新民，1982，火山岩岩石学，科学出版社。

〔17〕 中国科学院贵阳地球化学研究所著，1979，华南花岗岩类的地球化学，科学出版社。

〔18〕 南京大学地质系著，1981，华南不同时代花岗岩类及其与成矿关系，

科学出版社.

〔19〕 莫柱孙、叶伯丹等，1980，南岭花岗岩地质学，地质出版社.

〔20〕 查瓦里茨基，A.H.著，王德滋译，1962，火成岩岩石化学导论，科学出版社.

〔21〕 契特维里科夫，C.Л.著，刘智星译，1963，岩石化学换算指南，中国工业出版社.

〔22〕 里特曼，A.著，金秉慧译，1979，火成岩稳定矿物组合，地质出版社.

〔23〕 张福炎等编著，1984，微型计算机IBM PC的原理与应用，南京大学出版社.

〔24〕 aliChayes, F., 1966, Alk and subalkaline basalts. Ame. Joun. Sci., Vol. 264.

〔25〕 Church, B. N., 1975, Quantitative classification and chemical compatison of Common volcanic rock. Geo. Socie. Ame. Bulletin, No2.

〔26〕 Condie, K. C., 1976, Plate tectonics and crustal evolution, New York. Pergamon Press, INC.

〔27〕 Dhada Raju, R., 1972, Chemical distinction between replacement and magmatic granitic rocks, Contr. Miner. Petrol., Vol. 35.

〔28〕 Foster, M. D., 1960, Interpretation of the composition of trioctahedral, Prof. paper, U. S. Geol. Surv, 354-B.

〔29〕 Foster, M. D., 1960, Interpretation of the composition of lithium micas, Prof. paper, U. S. Geol. Surv, 354-E.

〔30〕 Hyndman, D. W., 1972, Petrology of igneous and metamorphic rocks, McGrawhill Boom Com., New York.

〔31〕 Irvine, T. N. and Barager, W. R. A., 1971, A guide to the chemical classification of the common volcanic rocks, Canadian. J. Earth. Scien., No 5.

〔32〕 Johannsen, A., 1931, A descriptive petrography of the igneous rocks, University of Chicago press, Illinois, U. S. A.

〔33〕 Kuno, H., 1960, High-alumine basalt., J. Petrol., Vol. 1.

〔34〕 Kuno, H., 1966, Lateral variation of basalt magma type across continental maigin and island arcs., Bull. Volc., Vol. 29.

〔35〕 Kushiro, I. and Kuno, H., 1963, Origin of primary basalt magma. in"Basalt the poldervaart treatise on rock of basalt composition"Intercience, a division of wiley, New York.

〔36〕 Leake, B. E., 1964, The chemical distinction between ortho-and-para amphibolites., J. Petrol., Vol. 5.

[37] Le Maitre, R. W., 1976, A new classification of igneous rock using the basalt-andesite-dasite-rhyolite suite as an example, Contri. Miner. Petrol., Vol. 56.

[38] Lipman, P. W., 1966, Water pressures during differentiation and ystallization of some ash-flow magma from Southern Nevada., Ame. crJ. Sci., Vol. 264.

[39] Macdonald, G. A. and Katsura, T., 1964, Cheminal composition of Hawaiian lavas. J. Petrol., Vol. 5.

[40] Miyashiro, A. ,1974, Volcanic rocks series in island arcs and active continental margins, Ame. J. Sci., vol. 274.

[41] Miyashire, A. and Shido, E. ,1975, Tholeiitic and calc-alkali series in relation the behavious of tsiannium, vanadium, chromium and nickel, Ame. J. Sci., Vol, 275.

[42] Middlemost, E. A. K., 1972, A simple classification of volcanic rocks, Bulletic volcandogique, No2.

[43] Middlemost, E. A. K., 1975, The basalt clan, Earth Science Reviews, Vol. 11

[44] Nockolds, S. R., 1954, Average chemical composition of some igneous rocks, Bull. Geol. Soc. Ame., Vol. 65.

[45] O'Hara, M. J., 1965, Primary magmas and the origin of basalt Scottish. J. Geol., Vol. 1,

[46] Peacock, M. A., 1931, Classification of igneous rocks series, J. Geol. ,Vol. 39.

[47] Pearce, J. A., 1976, Statistical analysis of major element in basalt, J. Petrol., Vol. 17.

[48] Poldervaart, A., 1964, Chemical definition of alkali basalt and tholeiites, Geol. Soc. Ame. Bulletin, Vol. 75.

[49] Rittmann, A., 1962, Volcanoes and their activity, Wiley, New York,

[50] Rittmann, A., 1973, Stable mineral assemblages of igneout rocks, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York.

[51] Shaw, D. M. andKudo, A. M., 1965, A test of the discriminant function in the amphibolite problem, Mineralogical Magazine, Vol. 34.

[52] Shaw, D. M., 1972, The origin of the Apsley Gneiss, Ontairo, Canadian J. Earth Scien., Vol. 9,

[53] Streckeisen, A., 1967, Classification and nomenclatic of igneous

rocks, Neues Jahrb Mineral,Abh. 107.

[54] Thorton, C. P. and, Tuttle, O. F., 1960, Chemistry of igneous rocks, Part. I, Differentiation index, Ame. J. Sci. , Vol. 258.

[55] Tuttle, C. F. and, Bowen, N. L. , 1958, Origin of granite in the light of experimental studies n the system $NaAlSi_3O_8$-$KAlSi_3O_8$-SiO_2-H_2O, Geol. Soc. Ame. , No. 7.

[56] Yoder, H. S. and Tilley, C. E. , 1962, Origin of basalt magmas; A experimental study of natural and synthetic rocks system, J. Petrol. , Vol. 3.

[57] Winter, J. , 1974, The origin of a calcareous amphibolite from the Nagssugtopidian, West Greenland, Lithos, Vol. 7, No. 4.

[58] Wright, J. B. , 1969, A simple alkalinity ratio and its application to questions of non orogenic granite genesis, Geol. Mag., Vol. 106, No, 4.

第二篇 统计学方法在岩石化学研究中的应用

绪 论

本世纪初，由于研究火山岩的推动，开始大量使用化学分析方法研究在显微镜下无法识别其矿物成分的岩石，使得岩石化学作为火成岩石学的一个分支得到迅速发展。这一时期不但积累了可观的岩石化学分析数据，还根据这些数据对火成岩的起源、演化、分异、同化混染作用等一般理论性问题进行了广泛而有效的探讨，相应地创造了许多种整理分析数据的方法，称岩石化学计算方法（见第一篇），一直应用至今。

因为岩石化学数据是多变量数据结构，用经典方法作数据归纳时出现许多困难。限于计算的复杂性和为了作图清晰，总是采用少数几个变量，而丢掉许多信息。其次，经典方法在很大程度上依赖于岩石工作者的经验和技巧，因此用这种方法对岩石进行分类的本身就带有诸多主观性和不定性，统计学方法可以弥补这方面的不足。

自从电子计算机引入地质学以来，岩石学研究中应用数学方法得到长足的进展。

岩石化学研究中应用数学方法大致可分三个时期。

第一时期 可追溯到二次世界大战以前。当时主要应用单变量统计分析方法借以估计岩石成分的均值、变异性及频率分布。最有影响的例子是理查森(Richardson, 1922)和列文星-列星格(Ф. Ю. Левинсон Лессиг)的早期著作。

1917年，华盛顿(Washington)发表了地球上各种类型火成岩

的化学分析结果。理查森和斯尼斯拜(Snesby, 1922)利用这个材料作出火成岩中二氧化硅及其它氧化物的频率分布图。图中，二氧化硅显示两个峰，一个峰代表玄武岩成分(SiO_2 52.5%)，另一个峰代表花岗岩成分(SiO_2 73.0%)。同样，其它氧化物也不是单峰曲线。统计曲线的这种特点，标志着各类岩石的相对分布，表明火成岩中存在着两种分布最广的岩石。理查森依此推测花岗岩和玄武岩在成因上互不相关。查瓦里茨基(А.Н. Заварицкий)反对这种看法。

本世纪早期利用频率分布进行岩石分类还可例举列文星-列星格的研究。它通过岩浆系数的频率分布，进行玄武岩、安山岩、流纹岩的分类。

另一方面，这一时期在岩石化学研究领域中对计算方法和图解方法的探讨最活跃，这里有著名的CIPW计算方法(W. Cross, et al, 1902)、尼格里系统(Niggli, 1923)和查瓦里茨基方法(1941)。这些方法不论使用的虚拟标准矿物或是组合变量，所得的结果中均得出新的数学式，它们是原始数据的数学函数，接近元素集合中元素映射的概念，含有提出主成分的思想。

第二时期　自二次大战以后至六十年代末。这一时期的特点是电子计算机开始引入地质学，单变量和双变量的统计方法在岩石学研究中被广泛应用。例如切叶思(Chayes, 1965)等应用均值、方差、离散系数、多变量相关系数、t 准则和 F 检验来研究成分相近的岩石。巴尔特(Barth, 1962)通过数学制图方法对频率分布进行分解，结果发现有些混合母体频率图是由不同的地球化学过程产生的，是多种因素混合的结果。随着计算机的应用，多元统计方法日益推广。肖(Shaw, 1954)对变质岩原岩恢复的研究，切叶思和皮尔期(Pearce, 1971)对玄武岩构造环境的划分，以及维斯蒂利(Vistelius, 1969)和怀顿(Whitten, 1961)对花岗岩的统计分析等都是这方面的例子。这一时期多元统计方法也被我国地质工作者引入岩石学研究中。

第三时期　自七十年代以来至今。随着电子计算机的普及和

推广，计算技术在岩石学中的应用日趋活跃，出现了一大批综合性论文和著作。在此期间，我国也陆续出版了一批统计学在地质学中应用的方法书和理论书。

实践证明，聚类分析、回归分析、典型相关分析、判别分析、主成分分析、因子分析、对应分析、非线性映射分析、趋势面分析等方法，对讨论火成岩和变质岩的数字分类，进行变质岩原岩恢复，研究岩浆作用和成矿作用的关系，探论元素和矿物共生组合规律及其在时间上和空间上的分布规律，探讨花岗岩的成因等方面不失为一得力工具。

近年来，用电子计算机模拟地质过程和岩浆作用方面也有很大进展。有人用微分方程确定型数学模型模拟矿物相中元素的分布规律，阐明岩浆过程和交代过程的特点，研究岩浆结晶过程及热的扩散与传导。也有人用随机过程等随机类数学模型模拟两类花岗岩的成因。维斯捷列乌斯(Вистелиус,1980)用马尔柯夫链建立了岩浆成因与交代成因花岗岩数学模拟模型。它们的随机结构截然不同。

尽管成岩过程的数学模拟还在探讨阶段，但已有的研究表明，它不仅能解决岩石学上某些实际问题，也可提供一系列成因信息，是个值得大力开拓的领域。

第一章 参 数 估 计

本章介绍岩石化学研究中常用的几个参数：平均值、标准差、变异系数及算术均值的精度估计，频率分布。

一、数 据 整 理

为了便于统计分析，数据必须经过整理，剔除异常样品，并找出其含量过高或过低的原因。然后将原始资料列成如表 2-1-1 所示的数据矩阵。

表 2 1-1 原始数据矩阵

变量 j / 样品 i	1	2	……	m
1	x_{11}	x_{12}	…	x_{1m}
2	x_{21}	x_{22}	…	x_{2m}
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
n	x_{n1}	x_{n2}	…	x_{nm}

设有n个样品，每个样品有m个变量。在我们的研究中通常是硅酸盐氧化物或微量元素，由此构成m维空间$(R^m)$$n$个向量。若以行表示变量，列表示样品，则所得的数据矩阵可记为：

$$x=(x_{ij})_{n\times m}$$

其中x_{ij}表示第i个样品、第j个变量的分析数据。当研究的是样品之间的关系时，就是考察m维空间中n个点之间的关系；当研究的是变量之间关系时，则是找出n维空间中m个点之间的相互关系。

二、平均值　标准差　变异系数

任何一种化学元素在岩石中的分布不仅取决于它们的起源，同时也受环境（同化，混染）的影响。因此，在一个岩体的不同部位，化学元素的含量是不尽相同的。这样，从同一岩体中选出的样品，其元素含量有的高于平均值，有的低于平均值。但是在各种类型的自然体中，化学元素的分布都有一定的数量规律。统计分析可以查明这种规律性，以确定化学元素在岩体中的分布常数，即元素分布的数学期望，并以此作为相互对比和分类的标准。

表征化学元素含量分布规律的参数有算术平均值、标准差和变异系数。分布的偏度和峰度型是辅助参数。

1．算术平均值的估计方法

平均值表现一群数量的趋势，它是用一种特定方法计算得出的一种特定的代表数字。平均值中常用的是算术平均值，统计学中称为"样本均值"，应用最广。

算术平均值（算均）乃一群数量相加的总和除以项数所得。设$\bar{x}$为x_1，$x_2\cdots$，x_n的算均，则

$$\bar{x}=\frac{x_1+x_2\cdots+x_n}{n}$$

$$=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i \qquad 2.1.1$$

上式Σ为连加号，$\sum_{i=1}^{n}x_i$代表$x_1+x_2+\cdots+x_n$的总和，即表示对所有x_i求和，i的取值由1到n。

算均有两个重要特性；(1)一群数量中的每一个数与算均的差的总和总是等于零；(2)算均的离差平方的总和为最小。

实际工作中经常遇到前人已求得某个岩体n个样品的平均值$\bar{x}_n$，当有一新值加入时，则这$n+1$个样品的平均值可写作

$$\bar{x}=\left(\frac{n}{n+1}\right)\bar{x}_n+\left(\frac{1}{n+1}\right)x_{n+1} \qquad 2.1.2$$

x_{n+1}代表新观测值。

仅知道一批数据的平均值是不够的。因为平均值能代表样本的程度是依变量的变异程度而定。衡量数据离散程度和波动大小的方法在岩石化学研究中常用均方差和标准差。

设一批观测数据x_1, x_2, …, x_n, 共有n个观测值，平均值为$\bar{x}$，则定义均方差为

$$s^2=\frac{1}{n-1}\{(x_1-\bar{x})^2+(x_2-\bar{x})^2+\cdots+(x_n-\bar{x})^2\}$$

$$=\frac{1}{n-1}\left\{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2\right\} \qquad 2.1.3$$

均方差的平方根叫标准差。

显然，若观测值大于算均值$\bar{x}$时，则所有的离均差（某一数据与该批数据算均值的差值）$x_i-\bar{x}$都是正数；当观测值x_i小于算均值$\bar{x}$时，所有的$x_i-\bar{x}$都是负数。离均差的总和$\Sigma(x_i-\bar{x})=0$，不能表达离散程度。因此将离均差平方以便消除负号，同时加重较大的那些离均差分量，以增加度量变异的灵敏性。

用均方差s^2来衡量数据波动时，s越大，说明数据波动越大，越分散，这时算均值不能确切反映这一批数据的平均状况。反之，s越小，说明各观测值与算均值之间的差越小，则算均值能反映这一批数据的平均状况。

用式2.1.3计算均方差时，数据需做两次计算，先算$\bar{x}$，然后再计算s^2，较繁冗。巴罗代尔(Barrodale, 1971)给出一个比较方便的公式

$$s^2=\frac{1}{n-1}\{x_1^2+x_2^2\cdots+x_n^2-n\bar{x}^2\}$$

$$=\frac{1}{n-1}\left\{\sum_{i=1}^{n}x_i^2-n\bar{x}^2\right\}$$

$$= \frac{1}{n-1}\left\{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2\right\} \qquad 2.1.4$$

应用式2.1.4计算均方差时，只需对数据作一次处理，记下观测值的总和与观测值平方的总和就行了。

与2.1.2式相类似，当有一新值x加入时，这$n+1$个观测值的均方差可写为

$$S^2_{n+1} = \frac{n-1}{n} S_n^2 + \frac{1}{n+1}(x+\bar{x}_n)^2 \qquad 2.1.5$$

均方差或标准差只反映这批数据的绝对波动量大小。如果同时考虑均值与标准差，可用变异系数C_V

$$C_V = \frac{S}{\bar{x}} \qquad 2.1.6$$

变异系数表明这批数据的相对离散度。

2．算术平均值的精度估计

岩石化学成分的平均含量，一般是根据有限件数的样本确定的。在岩石化学研究中，经常使用化学成分的平均含量进行对比。但是，在很多场合下并没有考虑这个平均值的真实精度，往往造成错误的判断。所以有必要确定算均值的精度。如果可靠性不大，则应增加样本件数。

从概率论中得知，如果总体的频率分布是正态分布，则无论样本单元数为多少，样本平均值的概率分布必定是正态分布。如果总体的频率分布不是正态分布，则在一般情况下，只要样本单元数充分大，样本平均值的概率分布接近于正态分布，这就是中心极限定理。中心极限定理表明，当样本数N足够大时，可以不考虑随机变量服从什么分布，样本平均值总可以看为正态分布。这个理论的建立使统计推断理论分为大样本推断和小样本推断。

(1) 大样本平均数的可靠性估计　众多的数据构成一个甚大的样本，可提供许多重要的信息。从大样本计算出的算术平均值$\bar{x}$，可冀其与母体平均值$\bar{x}_p$无甚差异。样本越大，则$\bar{x}$代表的$\bar{x}_p$的可能性越大。但并非大样本平均值恰好等于母体平均值。事实上，

任意抽取同样大的样本，虽然多至千百个，其诸样本平均值彼此亦常是差异。根据中心极限定理，当样本数甚大时，样本平均值可视为正态分布。大样本平均值的概率误差（标准误差）可由式2.1.7计算

$$\pm\lambda = \pm u_\alpha \frac{s}{\sqrt{n}} \qquad 2.1.7$$

式中

λ—已知概率所决定的算术平均值的误差；

s—样本的标准差；

n—样本件数；

u_α—拉普拉斯赋范函数的自变量，随已知概率而变化，并且通过已知概率计算误差。当信度为0.05，置信水平为1－0.05＝0.95时，$u_\alpha = 1.96$.

例1 某区花岗岩SiO_2含量服从正态分布，用$n=71$件样品算得$\bar{x}=63.34\%$，$s=4.21$，试对该花岗岩SiO_2平均含量作区间估计，并给出平均值的误差。

解 设该批数据属大样本($n\geqslant 30$)，由式2.1.7得知

$$\alpha = 0.05 \quad u_\alpha = 1.96$$

则

$$\pm\lambda = \pm 1.96 \frac{4.21}{\sqrt{71}}$$

$$= \pm 0.98$$

结论 我们可以用95.5%的可靠性断定，该花岗岩SiO_2平均含量在〔63.34－0.98，63.34＋0.98〕区间内，即它的平均值变化范围为62.36%-64.32%，估计的误差限度为±0.98.

(2) 小样本平均值可靠性估计 上节讲到，当样本数甚大时，样本平均值服从正态分布。若样本数n甚小时，势必发生偏误。究其原因，盖因计算样本平均值标准差$\sigma\bar{x}$时，是以样本标准差s代替母体标准差的真实值σp，而s与σp的相差在大样本场合下并不足引起重视，然而在小样本情况下则出入颇大。t分布即针对此缺点所设计。按t分布特征，小样本概率误差可由式2.1.8计算

$$\pm\lambda = \pm t_\alpha \frac{s}{\sqrt{n}} \qquad 2.1.8$$

式中λ为已知概率所决定的算术平均值的误差；s为样本标准差；n为样本件数；t_α为服从自由度为$n-1$的t分布，可根据信度α，自由度$n-1$查t分布表获得（统计学书都附有t分布表）.

例2 某区花岗岩SiO_2含量服从正态分布，样品数$n=24$，均值$\bar{x}=63.65\%$，标准差$s=4.42$，求当信度$\alpha=0.05$时的平均值误差，并对平均含量作区间估计.

解 已知$n=24$属小样本. 当信度$\alpha=0.05$时，从t分布表中查得 $t_{0.05}=2.064$，代入2.1.8式

$$\pm\lambda = \pm 2.064\frac{4.42}{\sqrt{24}}$$

$$= \pm 1.87$$

结论 我们有95%的可靠性断定，该花岗岩SiO_2平均含量在〔63.65－1.87,63.65＋1.87〕区间内，即它的平均值变化范围为65.52%—61.78%，估计的误差为±1.87.

3．算术平均值的真确性与样本大小的关系

岩石化学研究中，仅仅知道平均数的误差还不够，如果误差过大，则需要校正. 校正的方法是通过增大样本，冀期使其控制在一定的误差范围内. 为符合此等误差或真确性，所需样本大小可按式2.1.9估计

$$N = \frac{K^2 C_v^2}{D^2} \qquad 2.1.9$$

式中：N为符合一定误差所需的样本数；

C_v为样本的变异系数

$$C_v = \frac{s}{\bar{x}};$$

D表示从样本所得的母体平均值与真实的母体平均值之间的差额，以比率或百分数表示之。可令D等于一定的百分数，比如

等于5%、10%等，然后决定误差大于此范围所冒的风险程度。

K为信任程度系数。

若信任程度为0.997，则$K=3$；信任程度为0.954，则$K=2$；信任程度为0.683，则$K=1$。

按式2.1.9，可根据D与K值来确定一个抽样结果的真实性，借以推算就结果不大于D的或然率所需样本大小。

例3 欲求某区花岗岩SiO_2含量平均值，已知其相对变异系数估计为0.5，今欲使该花岗岩SiO_2的真实平均值与估计平均值相差等于0.09，而其信任程度可达0.997，问需如何长度的样本？

解 已知$C_v=0.5$，$D=0.09$，$K=3$，代入2.1.9式

$$N=\frac{K^2C_v^2}{D^2}$$

$$=\frac{3^2(0.5)^2}{(0.09)^2}$$

$$=278$$

由此可知，欲达所要求的精确度，应该由278个样本求出平均值。

现在降低精确度要求，设花岗岩SiO_2的真实平均值与估计平均值相差等于0.2，而其信任程度仍达0.997，这时需要多长的样本？

解 已知 $C_v=0.5$，$D=0.2$，$K=3$，代入式2.1.9

$$N=\frac{K^2C_v^2}{D^2}=\frac{3^2(0.5)^2}{(0.2)^2}$$

$$=56$$

由此可知，欲达要求结果，只需56个样本求取其平均值即可。

三、频率表和直方图

1. 频率表和直方图的作法

如果观测数据很多，用上述计算平均值的方法不能直观看出数据的变化情况。因此，在实际工作中，常使用建立频率表或画直方图的方法。为此，首先统计一定含量区间样品的频数或频率，列出频率表，然后在直角坐标系中从X轴上以选取的比例作点，表示化学元素的含量，在Y轴上标出该含量相对应的样品频数，将得到的点用直线连结起来，获得频率直方图。

用频率直方图或频率曲线图对比岩石化学成分的差异能起到一目了然的作用。

作频率直方图的第一步是将资料分组。根据观测值的组合特点，以分成8—10组，每组不小于5个数据为宜。为编制计算机程序方便，分组数可采用2.1.10经验公式

$$K = 1 + 3.3\lg N \qquad 2.1.10$$

来确定。K为划分的组数；N是样品个数。

第二步　根据已有数据确定组距L，可按式2.1.11计算

$$L = \frac{x_{max} - x_{min}}{1 + 3.3\lg N} \qquad 2.1.11$$

这里x_{max}是数据的上限值；

x_{min}是下限值；

L是组距。

对于刚好落在组界线上的数据，可归于前一组，称之下限排外法；亦可归入后一组，称之上限排外法。为了便于计算和对比，组中距以选择整齐数为宜。

经过上述整理之后，每一组样本的观测值消失了，代之以组中值，即每一组上限与下限的中点数值。落在每个间隔内的数据个数叫做频数，频数的相对百分数叫频率。这样就得到数据频率表。由频率表可清楚地看出数据的波动规律。若用作图方法，在横坐标上标出分组点，纵坐标表示频数，以组距为底边，划出高度为频数的矩形，得到频数直方图。直方图绘出了频数分布的直观图形，往往比频率表中的具体数字更易被人理解，因而它在岩

石化学研究中很有用处。

2. 频率表和直方图实例

例4 我们以华南两类成因系列花岗岩为例，它们的SiO_2含量列于表2-1-2。现在我们来做两类成因花岗岩SiO_2频率分布。

表 2-1-2 华南两类成因花岗岩SiO_2含量

同	66.75	67.48	67.57	68.30	62.89	61.49	63.85	63.89	61.33
熔	62.30	62.72	64.86	63.37	64.11	64.44	66.95	65.11	64.15
型	69.63	66.11	58.46	59.81	59.12	59.36	57.53	52.08	53.87
花	53.63	61.36	59.21	56.93	59.87	66.84	61.88	58.52	58.98
岗	58.22	61.41	57.61	58.86	59.19	60.46	64.57	65.32	65.65
岩	65.23	65.57	65.91	62.34	68.71	66.34	66.32	69.90	67.04
(I)	66.10	66.19	69.45	68.87	75.11	65.40	62.94	65.36	62.02
N=71	64.44	63.50	63.69	72.26	62.10	65.52	66.54	58.57	
改	74.20	73.72	71.62	61.56	69.73	70.66	72.20	72.70	72.81
	74.32	73.83	74.66	74.45	74.66	73.39	69.22	72.37	66.37
造	74.44	75.61	70.90	73.70	67.54	66.76	68.47	70.90	70.87
	74.30	68.51	66.50	72.37	72.72	73.87	70.20	74.61	71.62
型	69.50	70.37	69.72	71.39	72.28	68.77	69.36	71.10	71.10
	69.97	69.99	68.65	67.00	70.40	73.82	70.54	71.48	67.92
花	71.34	66.41	67.50	75.50	71.70	66.68	72.26	72.26	72.70
	72.70	74.26	74.77	71.96	75.04	75.31	76.40	71.97	74.66
岗	74.70	75.48	75.98	76.26	76.31	74.81	75.82	76.00	76.36
	75.54	75.66	75.96	76.16	74.28	75.52	74.10	76.84	76.62
岩	73.12	71.94	75.30	68.92	65.36	68.61	72.35	72.74	73.13
(S)	72.79	74.42	73.29	75.07	73.72	74.09			
N=105									

(1) 提出极值 由表2-1-2知，两类成因花岗岩 SiO_2 含量的极值分别为表2-1-3所示

表 2-1-3

	x_{max}	x_{min}
同熔型 (I)	75.11	52.08
改造型 (S)	76.84	61.56

(2) 分组 按2.1.10式

$$K_{(I)}=1+3.3\lg 71 \qquad K_{(S)}=1+3.3\lg 105$$

$$=7 \qquad =8$$

(3) 确定组距

$$L_{(I)}=\frac{75.11-52.08}{1+3.3\lg 71} \qquad L_{(S)}=\frac{76.84-61.56}{1+3.3\lg 105}$$

$$=3.2\approx 3.0 \qquad =2.0$$

为了便于对比，改造型(S)花岗岩的组距也取3．它们的频率表见表2-1-4，2-1-5。

表 2-1-4 华南同熔型花岗岩SiO_2频率表

数值间距	组中值	频数	累积频数	频率(%)	累积频率 F%	绘图百分数	u 值
52—55	53.5	2	2	2.8	2.8	2.4	−1.91
55—58	56.5	4	6	5.6	8.4	7.9	−1.38
58—61	59.5	13	19	18.3	26.7	26.2	−0.62
61—64	62.5	17	36	23.9	50.6	50.0	0.02
64—67	65.5	23	59	32.4	83.0	82.2	0.96
67—70	68.5	10	69	14.2	97.2	96.3	1.91
70—73	71.5	2	71	2.8	100	99.1	3.09

表 2-1-5 华南改造型花岗岩SiO_2频率表

数值间距	组中值	频数	累积频数	频率(%)	累积频率 F%	绘图百分数	u 值
61—64	62.5	1	1	1.0	1.0	0.63	−2.33
64—67	65.5	6	7	5.7	6.7	6.33	−1.53
67—70	68.5	17	24	16.2	22.9	22.47	−0.74
70—73	71.5	31	55	29.5	52.4	51.90	0.06
73—76	74.5	42	97	40.0	92.4	91.77	1.43
76—79	77.5	8	105	7.6	100	99.36	3.09

(4) 以横坐标表示组中值，纵坐标表示频率所得的频率直方图见图2-1-1，2-1-2。分析频率直方图可见同熔型花岗岩SiO_2含量在58-67(%)之间的概率是78%，改造型花岗岩SiO_2在67-76%之间的概率是84%。若将两类花岗岩SiO_2含量频率直方图合并到一张图上(2-1-3)，明显看出它们的SiO_2含量范围不一样，68.5%

是两类花岗岩的界限。频率直方图起到直观判别的效果。此外，根据直方图推求平均值和众数也是常用的方法。但不能从频率直方图中直接提出岩石成因信息。但可根据直方图推出化学元素的分布型式，分布型式则含有岩石成因信息。

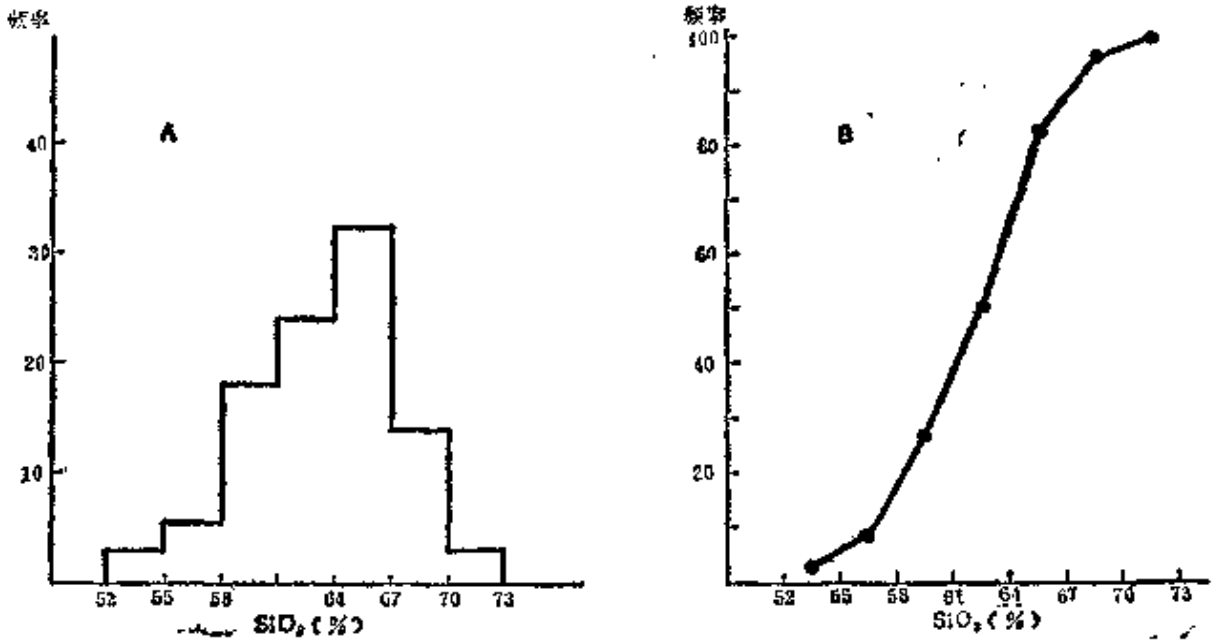


图 2-1-1 华南同溶型花岗岩SiO_2频率直方图(A)和累积频率曲线(B)

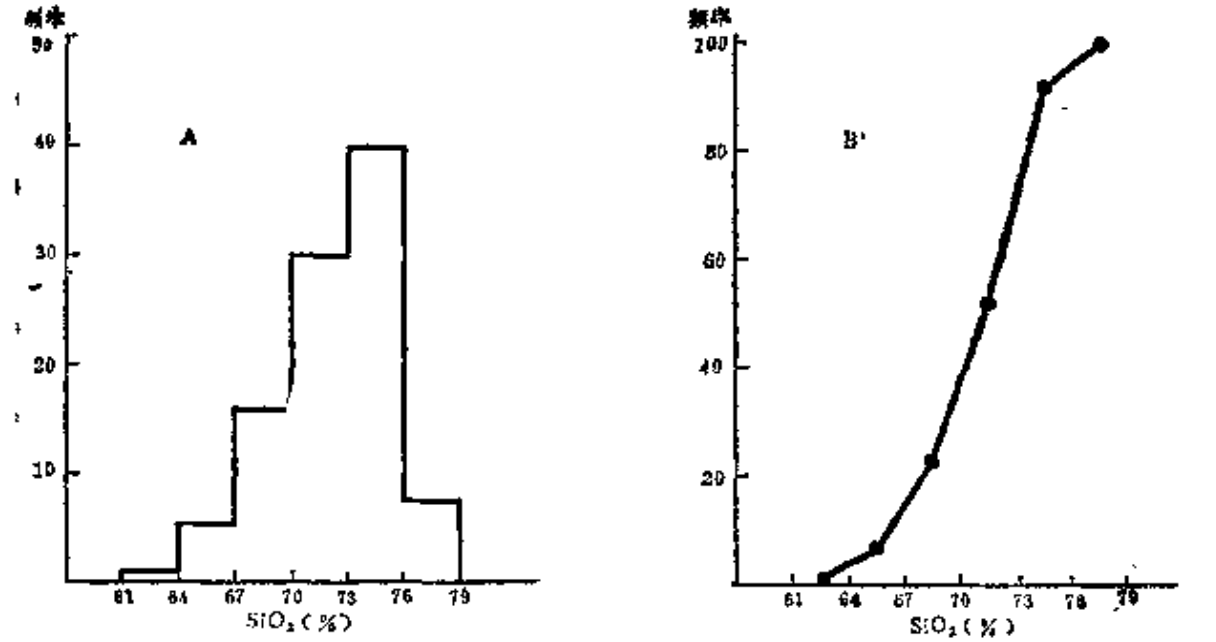


图 2-1-2 华南改造型花岗岩SiO_2频率直方图(A)和累积频率曲线(B)

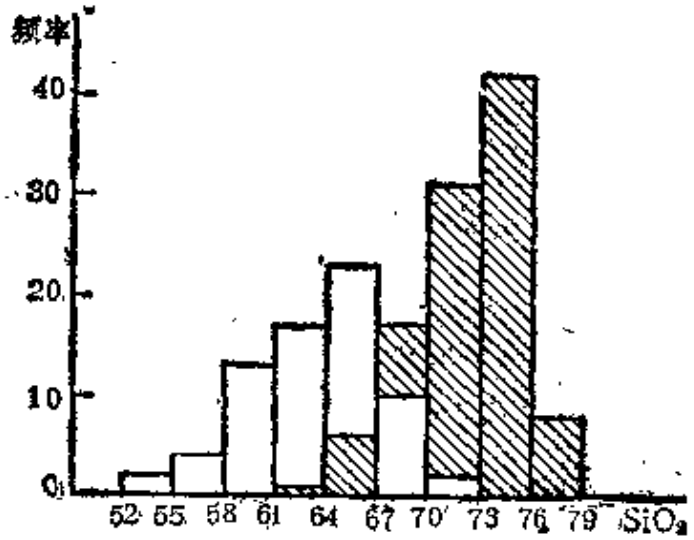


图 2-1-3 华南两类成因花岗岩SiO_2分布范围对比
空白区代表同熔型，斜线区代表改造型

四、分 布 型 式

1. 分布规律

在制作2-1-1直方图时，对71个样本取间距等于3，组距为7，共得出7个长方体．假设无限地增加样本分组数，使组间距Δx无限缩小，直方图将逐渐地变成一条光滑曲线，在选定的坐标系中该曲线称为x值的分布规律。岩石化学研究中最常见的x值的分布规律是正态分布和对数正态分布。正态分布的特点是曲线有一个高峰，为概率中值，其两侧的面积相等。正态分布曲线方程可由算术平均值μ，标准差σ来描述。凡峰值左偏者称正偏斜，右偏者称负偏斜。据研究，由岩浆分异作用形成的岩体和一般的无矿岩体，其氧化物，尤其是SiO_2，Al_2O_3，Na_2O的含量呈正态分布或近似正态分布，而含矿岩体中的大多数造岩元素及火成岩造矿元素的含量则呈对数正态分布。出现偏斜可能是同化、混染所致。例如铜陵凤凰山花岗闪长岩SiO_2的频率分布呈负偏斜。但当剔除边缘部分具显著同化、混染作用影响，其斜长石具反环带结构的样品之后，仍呈正态分布。由此可见，考查元素在岩石中的分布型式有其深刻的地质意义。

2. 分布规律的检验方法

所谓正态分布的检验，就是考察经验分布对理论分布的偏斜程度。

检验观测频率是否为正态分布，最简便的方法是把观测频率与理论高斯曲线相比较的正态概率格纸法。这是一种横坐标标志普通刻度，纵坐标按正态分布规律刻度的坐标纸。在这种格纸上画出的正态分布函数 $F(x)$ 曲线呈直线状，称展直图。如果手头没有正态概率格纸，可用展直坐标法，又称x—u法。

(1) 概率格纸法 以两类花岗岩 SiO_2 的频率分布为例说明概率格纸法的演算步骤。

第一步 计算绘图百分数

在通常的频率分布表上，最后一组的累积频率总是百分之百(100%)。这个值在概率标尺上是表示不出来的。为此，杜勒(Tukey,1962)等人提出一个改进方案，其方法是用2.1.12式求出所谓绘图百分数

$$\text{绘图百分数}=\frac{3\times\text{累积频率}}{(3n+1)/100} \qquad 2.1.12$$

式中 n 代表样本长度（数据数目）。

第二步 建立理论正态曲线

根据平均值 $\bar{x}$ 在理论上的累积频率等于50%，平均值加一个标准差 $\bar{x}+s_{(x)}$ 时的理论累积频率等于84.1%，或，$\bar{x}-s_{(x)}$ 时的理论累积频率等于15.9%。有了这三个数值，就可在概率图纸的横坐标上找出 $\bar{x}$，$\bar{x}+s_{(x)}$ 或 $\bar{x}-s_{(x)}$ 两点，分别与所对应的纵坐标概率值50%，及84.1%（或15.9%）相交于 P_1P_2。连接 P_1P_2 的直线即为理论正态曲线。

第三步 绘制观测频率

以纵坐标表示绘图百分数。将计算的绘图百分数与其相对应的中值一一投影到概率格纸上，如果各投影点的连线是一条直线或近似直线，表明是正态分布，否则不是正态分布。其拟合度视数据性质而异。

例5 华南两类花岗岩SiO_2经换算后的绘图百分数分别列在表2-1-4，2-1-5 中．它们的均值及标准差见表 2-1-6．试用概率格纸法检验两类花岗岩SiO_2是否为正态分布．

表 2-1-6

	$\bar{x}$	S	$\bar{x}+S_{(x)}$	$\bar{x}-S_{(x)}$
同 熔 型	63.34	4.21	67.55	59.13
改 造 型	72.33	3.07	75.40	69.26

A．作两类花岗岩 SiO_2分布理论正态曲线　在横坐标轴上截取63.34的点，其对应的概率值为50%；同理，67.55的点对应的

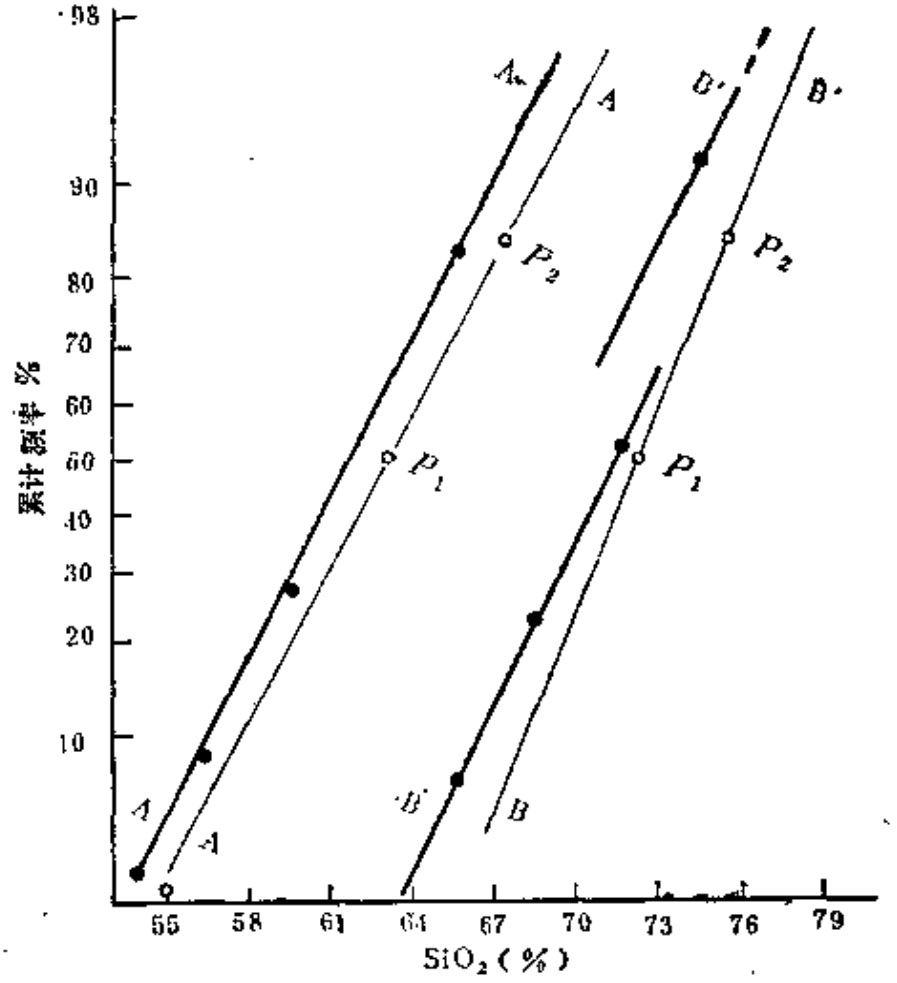


图 2-1-4　华南两类花岗岩SiO_2用概率格纸法检验分布规律

A—A′同熔型花岗岩理论正态曲线(细线) 和观测频率曲线（粗线）

B—B′改造型花岗岩理论正态曲线(细线) 和观测频率曲线（粗线）

概率值为84.1%。由此分别得到P_1P_2两点。P_1P_2的连线即同熔型花岗岩SiO_2分布的理论正态曲线，以A—A′表示。以同样操作方法得到改造型花岗SiO_2分布理论正态曲线B—B′（图2-1-4）。

B．绘制两类花岗岩 SiO_2 分布的观测频率曲线　按上述步骤三，用表2-1-4，2-1-5给出的绘图百分数及其对应的组中值，在同一张概率格纸上绘出观测频率曲线。从图2-1-4看到，华南同熔型花岗岩 SiO_2观测频率投影点的连线是一条直线，证明是正态分布，改造型花岗岩SiO_2观测频率投影点连线不是一条直线，是条折线，说明不是正态分布。

（2）展直坐标法　此法很简单。横坐标仍表示观测值x，纵坐标用u值（由 $F(u)$反查u值表获得）。其中u是x的标准化变量，二者关系为

$$u=\frac{x-\mu}{\sigma} \quad 或 \quad x=\mu+u\sigma$$

这样一来，就可以用普通方格纸代替正态概率格纸，只要在统计出实测数据的各累积频率F值之后，再由 $F(u)$反查u值表得出相应的u值即可。两类花岗岩SiO_2展直坐标图见2-1-5，其结果与概率格纸法一致。

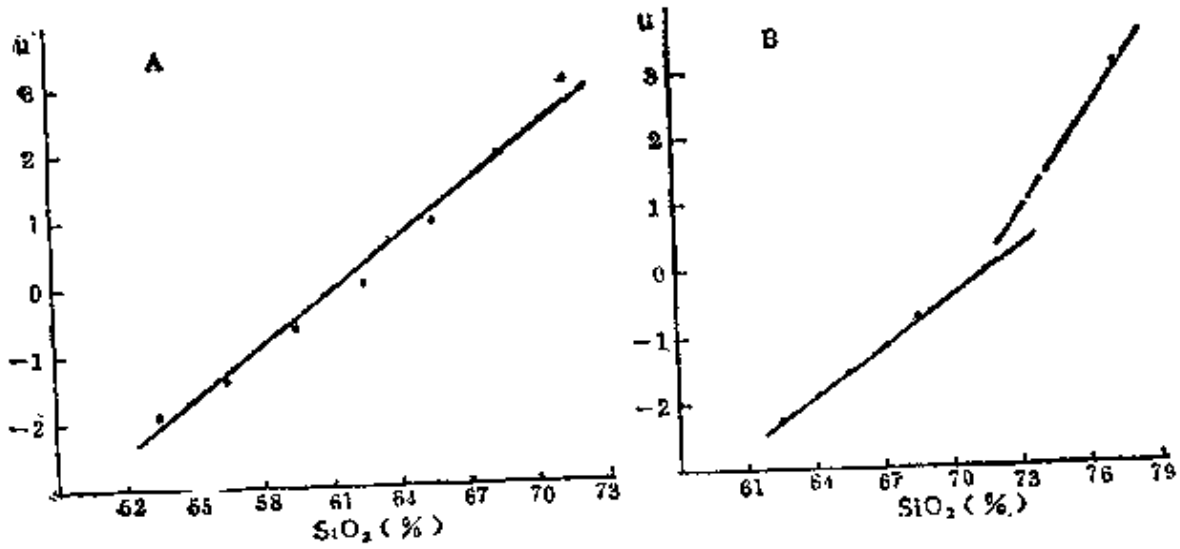


图 2-1-5　华南两类花岗岩SiO_2展直坐标图

(A)同熔型花岗岩，(B)改造型花岗岩。

3．正态分布直方图配线

对一批数据作出频率表，画出直方图，又用概率格纸法或展直坐标法证明属正态分布之后，还要求画出它的正态曲线，即正态分布直方图配线问题。

众所周知，影响一个地质过程的因素是很多的。如果这些因素对一个岩体形成过程影响微小，岩浆按其固有的方向演化，则其中主要造岩元素的分布应该是近乎正态分布的。凡是所作的直方图呈两头小中间大，两侧多少呈对称分布时，都可以近似地用正态分布来配线。

正态配线时可使用下述为变量作图用的正态分布方程

$$n_x = \frac{nc}{s} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-(X-\bar{x})^2/2s^2} \qquad 2.1.13$$

式中n_x表示各组其间内的个体频数；n是样本长度；c是组间距；s是标准差；$\bar{x}$是样品平均值；X是随机变量。为了减小繁冗的计算，式2.1.13可转化为

$$X = \bar{x} + \tau s$$

$$n_x = \frac{nc}{s} f(\tau) \qquad 2.1.14$$

其中τ和$f(\tau)$值已有现成表可查（表2-1-7的左侧）

配线作图步骤如下：

第一步　列出数据的均值$\bar{x}$，标准差s，组间距c，样品总数n；

第二步　按式2.1.14，并查找表2-1-7左侧的τ和$f(\tau)$值，求出X和n_x值；

第三步　以横坐标表示元素x含量，纵坐标表示n_x值，将每一对x与n_x的投影点联成一条平滑曲线，即为该直方图的正态分布曲线。

按上述步骤，华南同熔型花岗岩SiO_2频率直方图正态分布配线的计算值和结果列于表2-1-7及图2-1-6。

表 2-1-7　华南同熔型花岗岩SiO_2正态配线计算值

查表		计算	
τ	$f(\tau)$	X	n_x
-3	0.0044	50.71	0.22
-2	0.0540	54.92	2.73
-1	0.2420	59.13	12.24
-0.5	0.3521	61.24	17.81
0	0.3989	63.34	20.18
0.5	0.3521	65.45	17.81
1	0.2420	67.55	12.24
2	0.0540	71.76	2.73
3	0.0044	75.79	0.22

$\bar{x} = 63.34\%$　　$s = 4.21$

$n = 71$　　$c = 3\%$

$X = 63.34 + 4.21$

$$n_x = \frac{(71) \cdot (3)}{4.21} f(\tau) = 50.59 f(\tau)$$

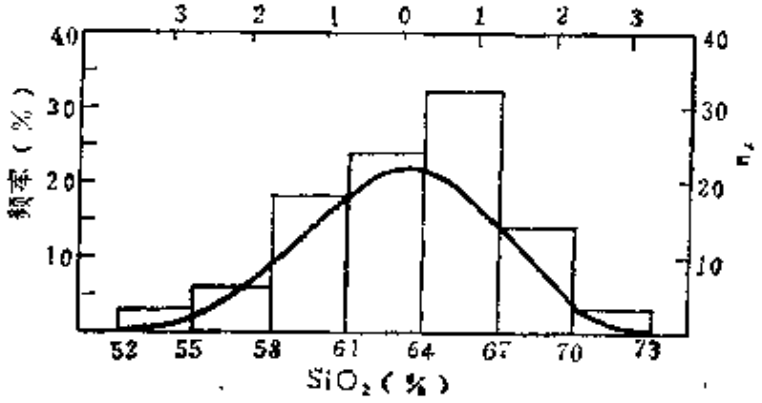


图 2-1-6　华南同熔型花岗岩SiO_2正态配线图

n_x表示各组其间内的个体频数

第二章　多元统计方法概要

本章着重讨论本书使用的各种多元统计方法的数学模型中各种参数可能赋予的岩石学意义。有关多元统计分析理论、数学推导及计算技巧，请参阅统计学和数学地质丛书。

一、聚类分析(Cluster analysis)

1.聚类分析的一般原则

聚类分析又称点群分析。它应用数学方法，根据标本之间性质的亲疏程度把标本逐步归类的一种方法。从数学意义讲，就是在一个大的对称矩阵中探索相似关系的一种客观数学分类法。地质学研究中，对标本进行分类称Q-型聚类分析，对变量进行分类称R-型聚类分析。为了分类，首先要规定一个相似统计量借以衡量变量与变量，标本与标本之间的亲疏关系。岩石化学研究中经常采用的相似性系数有距离系数和相关系数。

设有n个标本　$x_1, x_2, \cdots, x_n$;

m个变量　在我们的研究中它们是SiO_2, TiO_2, Al_2O_3, Fe_2O_3, FeO, (MnO), MgO, CaO, Na_2O, K_2O, 以及由上述氧化物通过某种组合而成的组合变量，例如

$$Al' = Al - \left(Na + K + \frac{1}{2}Ca\right)$$

等。

倘将标本看成R^m空间中的一个点，则标本x_i和x_j之间的欧氏距离定义为

$$d_{ij} = \sqrt{\sum_{k=1}^{m} (x_{ik} - x_{jk})^2} \qquad i, j = 1, 2, \cdots, n \qquad 2.2.1$$

若两块标本x_i和x_j的距离短，表明它们相应氧化物含量相近，两

标本相似，归为一类。若两块标本的距离长，它们的关系不密切，当属不同的类。即按距离远近将标本分类。

描述变量（标本）x_k 和 x_l 之间的关系也常用相关系数 r_{kl}

$$r_{kl}=\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_{ik}-\bar{x}_k)(x_{il}-\bar{x}_l)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_{ik}-\bar{x}_k)^2\sum_{i=1}^{n}(x_{il}-\bar{x}_l)^2}} \qquad 2.2.2$$

式中 $0\leqslant|r_{kl}|\leqslant 1$，$r_{kl}$ 的绝对值越近于 1，则两种氧化物关系越密切。当它们相等时，$r_{kl}=1$，反之，r_{kl} 越近于零，则 x_k 与 x_l 的关系越淡薄。

聚类分析的基本步骤 (1)按选定的相似统计量计算标本与标本(Q-型)，变量与变量(R-型)的相似系数，构成一个对称的相似系数矩阵；(2)按标本间相似程度的大小，把比较相似的两个标本归为一类。然后依次选择距离最近（或相关系数大）的两类合并成一个新类。以此类推，以至将所有标本(变量)一一联系起来，并以图的形式显示。结果得到一张以某个样品为起始点的表示标本间(变量间)相互关系的联接图，即为聚类分析谱系图。

岩石学中的类，是指岩石的化学成分和矿物成分上的差异所反映的岩石性质的变化。这里，相关系数和距离系数代表着标本间的亲疏关系。因此，在选定临界值 T 情况下，用G表示类，则定义

（1） 凡两标本 (i, j) 之间的距离 $d_{ij}\leqslant T$，称G为一类；

（2） 凡一组标本相互距离之和的均值小于 T，有

$\frac{1}{K-1}\sum_{j\in G}d_{ij}\leqslant T$，称G为另一类。

2．聚类分析类型

按解决地质问题和表叙方式不同，聚类分析分为三类：(1)系统聚类分析；(2)图论方法；(3)有序样品的聚类分析。

（1） 系统聚类分析 系统聚类分析不考虑标本点的空间位置，也无需事先知道标本的类型结构。常用于初始分类，是一种

应用最广泛的方法。它考虑的是m维空间中$(R^m)n$个点两两之间的相互关系，然后将所有的点联成一张谱系图。

当n个标本（或变量）之间的欧氏距离(或相关系数）计算出来之后，根据下列规则对标本（或变量）进行归并分类。

①若两标本在已形成的类中没有出现过，则形成一个新类；

②若两标本中的一个在已形成的类中出现过，则另一个也并入该类中去；

③若两标本分别在已形成的两类中出现过，则将此两类归并成一类；

④若两标本都在同一类中，则它们仍归在此类中，不另分类。

若已算得六个标本两两之间的欧氏距离如表2-2-1所示。

表 2-2-1

标本号	1	2	3	4	5
2	0.50⑤				
3	0.64	0.64			
4	0.72	0.42④	0.69		
5	0.30②	0.33③	0.66	0.53⑥	
6	0.58	0.54⑦	0.24①	0.55	0.67

从表2-2-1中首先选出最小的d_{ij}为$d_{3,6}=0.24$，按规则①将标本3、6联成一类。

以下逐次由小至大选出各个d_{ij}，按上述规则归并分类。

$d_{1,5}=0.30$，按规则①将标本1、5联成一类；

$d_{2,5}=0.33$，按规则②将标本2并入标本1、5所在的类；

$d_{2,4}=0.42$，按规则②把标本4并入标本1、5、2所在的类；

$d_{1,2}=0.50$，按规则④标本1、2已在标本1、5、2、4形成的类中出现过，故不另分类；

$d_{4,5}=0.53$，按规则④不另行分类；

$d_{2,6}=0.54$，按规则③，把标本3、6所在的类与标本1、5、

2、4所在的类归并成一个大类。

至此，所有标本均已在各类中出现过，则归并分类工作结束，可绘出下列形式的谱系图（图2-2-1）。

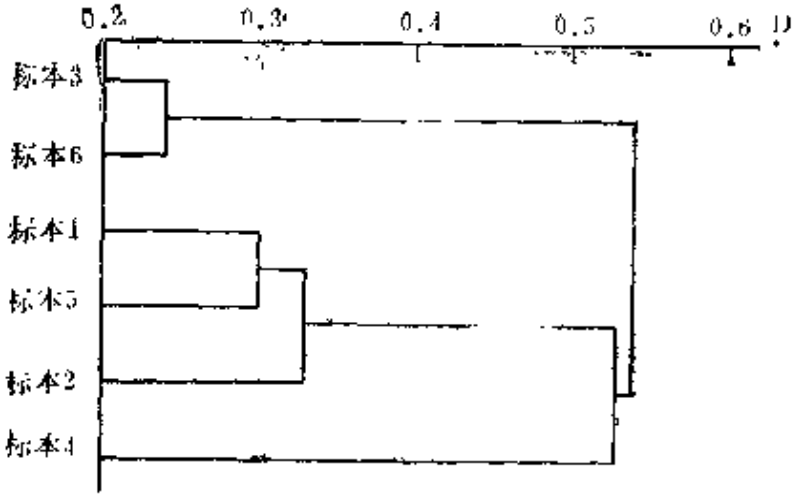


图 2 2 1 标本Q型聚类谱系图

相似性度量用距离系数d

据此，我们可以研究各欧氏距离条件下的客观分类问题。例如，在$d=0.53$的条件下，可将六个标本分成两大类；标本3、6为一类，标本1、5、2、4为另一类。在$d=0.42$条件下，六个标本分成三大类：标本3、6为一类，标本1、5、2为一类，标本4独成一类。可见d值取得越小，则标本的分类就越细。

对于上述各种方法的分类，当假设第e类和第f类两类母体方差相等，检验第e类和f类的显著性时，可采用下列公式

$$F_{ef}=\frac{(N-G-M+1)N_eN_f}{M(N-G)\ (N_e+N_f)}D_{ef}^2 \qquad 2.2.3$$

统计量F_{ef}服从F分布，自由度为M和$(N-G-M+1)$，其中

M为自变量数；

N为标本总数，N_e，N_f分别为第e类和第f类的标本数；

G为总分类数，

$D_{ef}^2=(\overrightarrow{X}_e-\overrightarrow{X}_f)'S^{-1}(\overrightarrow{X}_e-\overrightarrow{X}_f)$

为马氏距离，$\overrightarrow{X}_e$，$\overrightarrow{X}_f$分别为第e类和f类的均值向量；$S=(s_{ij})_{M\times M}$，S^{-1}为S逆矩阵，其中

$$s_{ij}=\frac{1}{N-G}\sum_{g=1}^{G}\sum_{k=1}^{Ng}(x_{igk}-\bar{x}_{ig})(x_{jgk}-\bar{x}_{jg})$$

如果给定信度α，计算值F_{ef}大于查表值$F_{\alpha}(M, N-G-M+1)$，则认为e，f 两个类存在显著的差异，分类具有代表性．反之则认为两类差异不显著．当我们把标本分成G 类时，则将诸类两两组合，进行上述显著性检验．当大多数通过检验时，可以认为G 类之间差异是显著的。

（2）图论方法　系统聚类方法能使标本分类，但不能表示类之间的过渡关系．不同于系统聚类方法，图论方法考虑的是m维空间中$(R^m)n$个点中的每一个点与其它点的直接联系．可以想象为以空间某标本点i为中心所构成的一个球体，并根据空间点群的密度进行分类．类与类之间以点密度稀薄或存在空白区为界限．分类的数学根据是图论中的最短距离法．分类结果可用图形表示，在平面图上呈一棵树形，称最小支撑树．潘恩沛等(1979)以最小支撑方法树讨论过花岗岩分类问题。

设m维空间中有n个点，每两个点都可联成一条边，两点间的距离叫边长，边形成链，所有链相联接组成一个联接图．没有回路的联接图叫树．如果树包含了联接图的所有点，称这棵树为联接图的支撑树．树的所有边长之和叫树的重量，具有最小重量的树叫最小支撑树，简记为 MST(Minimum Spanning Tree)，见图2-2-2。

在我们的分析中，实现最小支撑树的算法如下：从任何一点开始，记为A_1，在通过A_1的一切边中选出长度最短的一条，记为a_1，a_1的另一端记为A_2．然后找出通过A_1和A_2的边(不包括已选的边）中最短的一条，记为a_2，a_2的另一端点记为A_3．再找通过A_1、A_2和A_3的边中最短的边，如此继续下去，直至通过n个点的边都参加过试选为止。

标本之间的长度，这里采用的是它们的欧氏距离．每个标本的密度，是以它为球心，以某一规定的长度R为半径作一球，落在

球内的标本数称为该点的密度。显然，一个标本点的密度越高，表明它与其它标本之间关系越密切。在一个类的中心部位，点的密度较高，等密线逐渐向外变低。实际计算时，通常取R为MST各边长平均数的二倍，以使同一类的标本点在MST上相互以较短的边长相联接，而类与类之间在MST上表现为空白或低密度区，将高密区隔开，并由此得到标本的自然聚类。

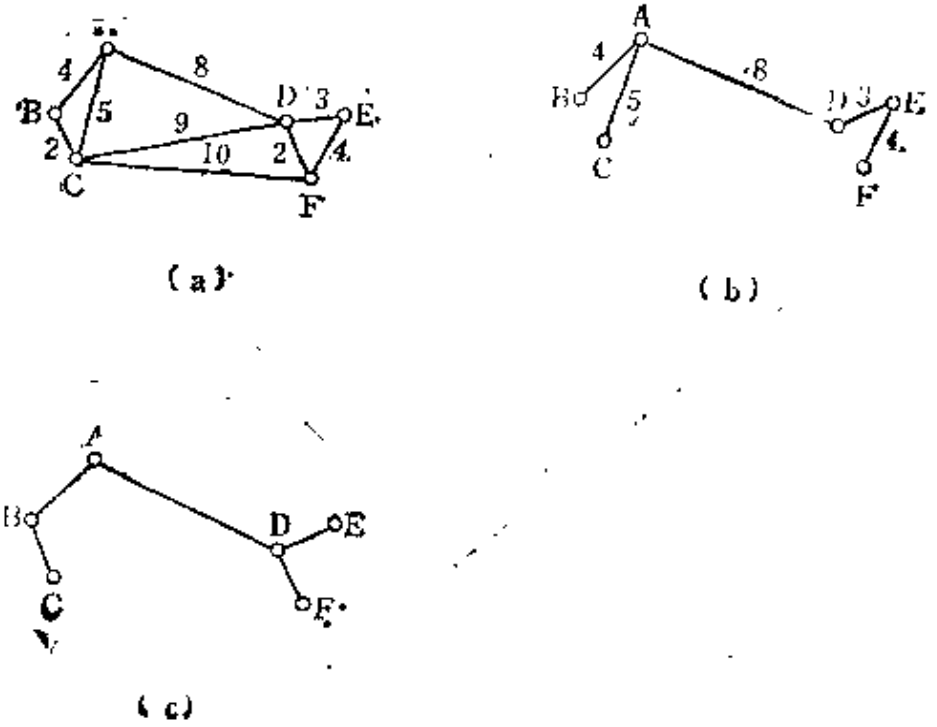


图2-2-2
(a)—联接图，(b)—(a)的支撑树，(c)—(a)的最小支撑树

作图时，空间点的分布可投影到平面上。只要支撑树的两个端点的位置固定下来，其它点的位置自然也就固定了下来。在我们的分析中，只有直接相联接的点才有几何意义。

（3） 有序样品的聚类方法　如果标本之间的顺序不是任意排列的，例如，一个岩体的相带、蚀变带、变质带，或一个岩层剖面成分上的变化，则要求分类时标本的顺序不能颠倒，互相邻接，这类样品的聚类叫有序样品的聚类。

对有序样本$x_1, x_2, \cdots, x_n$将它分割成k段，称为对$x_1, x_2, \cdots, x_n$的k分割，表示为

$$S_n(k/a_1, a_2, \cdots, a_{k-1})$$

这时各段标本分别是

第 1 段　$x_{a_1}, x_2, \cdots, x_{a_1}$

第 2 段　$x_{a_1+1}, x_{a_1+2}, \cdots, x_{a_2}$

⋮

第 k 段　$x_{a_{k-1}+1}, x_{a_{k-1}+2}, \cdots, x_n$

如果只分成两段，表示为$S_n(2/a)$，这两段的样品分别是

第 1 段　$x_1, x_2, \cdots, x_a$

第 2 段　$x_{a+1}, x_{a+2}, \cdots, x_n$

第一段的均值与方差是

$$\bar{x}(1, a) = \frac{1}{a}\sum_{i=1}^{a} x_i$$

$$s^2(1, a) = \frac{1}{a}\sum_{i=1}^{a}[x_i - \bar{x}(1, a)]^2$$

第二段的均值与方差是

$$\bar{x}(a+1, n) = \frac{1}{n-a}\sum_{i=a+1}^{n} x_i$$

$$s^2(a+1, n) = \frac{1}{n-a}\sum_{i=a+1}^{n}[x_i - \bar{x}(a+1, n)]^2$$

其中，$\bar{x}(i, j)$表示$x_i, x_{i+1}, \cdots, x_j$的均值，$s^2(i, j)$表示$x_i, x_{i+1}, \cdots, x_j$的方差。

用$v(i, j)$表示$x_i, x_{i+1}, \cdots, x_j$对$x(i, j)$的离差平方和，称为变差，故有

$$v(i, j) = \sum_{l=i}^{j}[x_l - \bar{x}(i, j)]^2$$

显然有

$$v(i, j) = (j-i+1)s^2(i, j) \qquad 2.2.4$$

对$x_1, x_2, \cdots, x_n$作所有可能的二分割，求出相应的两段均值、变差和总变差，使总变差达到最小的二分割称做最优的二分割。

采用类似上述做法，可以找出最优三分割，直至最优的 k 分割，再在它们当中找出总变差最小者，则它所对应的分割即是我们所寻找的某种最优分割法。这种聚类分析法，当标本很多时，计算量是很大的。

二、对应分析 (Correpondence analysis)

1．对应分析的一般原则

对应分析是研究m维空间(R^m)中n个标本点和n维空间(R^n)中m个变量点的聚类。通过降低多维空间的维数，找出这两个集合的主轴，把标本和变量同时投影到由某两个主轴所决定的因子平面上，使得变量和标本之间的关系了然，用因子来推断和解释数据。

在因子平面图上，变量和标本有如下关系：

（1）邻近的变量点表示这些变量的关系密切，它们有成因上的联系，指示一特定的地质作用或过程；

（2）每一主因子轴代表一特定的元素共生组合，反映特定的成岩成矿作用；

（3）相靠近的一些标本点具有相似的性质，它们有近乎共同的成分，可解释为它们是同一地质过程的产物，或说明它们属于同一类型；

（4）同一类型的标本由靠近它们的变量所表征，这一性质对标本类型的解释很有帮助。同时，通过标本点在空间的分布还可以了解地质过程的演化方向和成分的变化趋势。

2．对应分析方法概要

（1）数据转换　将原始数据矩阵　$X=(x_{ij})_{n\times m}$ 变成概率矩阵

$$P=(p_{ij})_{n\times m} \qquad 2.2.5$$

其中　$p_{ij}=\frac{x_{ij}}{T}$

$$T=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}x_{ij}$$

（2） 再将概率矩阵转变成标本的坐标矩阵Z，在R-型情况下，我们考虑以p_i为权，则n个标本点的坐标为

$$x_i=\left(\frac{p_{i1}}{p_{i\cdot}},\ \frac{p_{i2}}{p_{i\cdot}},\ \cdots,\ \frac{p_{im}}{p_{i\cdot}}\right)\quad i=1,2,\cdots,n$$

其中 $p_{i\cdot}=\sum_{j=1}^{m}p_{ij}\quad i=1,2,\cdots n$

表示在第i个标本条件下第j个变量的相对比例。经过这样的变换后，对n个标本的研究就成了对n个标本点相对关系的研究。任意两个标本点的相关程度，引用我们熟知的距离

$$d_{(l,\ q)}=\sqrt{\sum_{j=1}^{m}\left(\frac{p_{lj}}{p_{l\cdot}}-\frac{p_{qj}}{p_{q\cdot}}\right)^2}$$

这里m项累加表示m个变量对距离的总贡献。但是，实际问题中考虑的是变量的相对作用，因此，采用加权距离公式

$$d_{(l,\ q)}=\sqrt{\sum_{j=1}^{m}\left(\frac{p_{lj}}{p_{l\cdot}\sqrt{p_{\cdot j}}}-\frac{p_{qj}}{p_{q\cdot}\sqrt{p_{\cdot j}}}\right)^2}\qquad 2.2.6$$

其中 $p_{\cdot j}=\sum_{i=1}^{n}p_{ij}\qquad j=1,2,\cdots,m$

按2．2．6式计算，共得$n\times m$个标本间的距离．将n个标本点按概率p_i进行加权平均，得n个标本点的重心坐标

$$\sum_{i=1}^{n}p_{i\cdot}\frac{p_{ij}}{p_{i\cdot}\sqrt{p_{\cdot j}}}=\frac{1}{\sqrt{p_{\cdot j}}}\sum_{i=1}^{m}p_{ij}=\sqrt{p_{\cdot j}}$$

表示标本点中第j个变量的平均值，则n个标本点的均值坐标

$$(\sqrt{p_{\cdot 1}},\ \sqrt{p_{\cdot 2}},\ \cdots,\ \sqrt{p_{\cdot m}})$$

这样，第j个变量和第k个变量之间的协方差

$$v_{jk}=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{p_{ij}-p_{i\cdot}p_{\cdot j}}{\sqrt{p_{i\cdot}p_{\cdot j}}}\right)\left(\frac{p_{ik}-p_{i\cdot}p_{\cdot k}}{\sqrt{p_{i\cdot}p_{\cdot k}}}\right)$$

由此得到标本空间R^n中m个变量的协方差矩阵

$$\boldsymbol{V}=(v_{jk})_{m\times m}$$

同理，可以得到变量空间R^m中n个标本的协方差矩阵

$$\boldsymbol{S}=(s_{ik})_{n\times n}$$

其中

$$s_{ik}=\sum_{j=1}^{m}\left(\frac{p_{ij}-p_{i\cdot}p_{\cdot j}}{\sqrt{p_{\cdot j}p_{i\cdot}}}\right)\left(\frac{p_{kj}-p_{k\cdot}p_{\cdot j}}{\sqrt{p_{\cdot j}p_{k\cdot}}}\right)$$

令$\boldsymbol{Z}=(z_{jk})_{n\times m}$

这里

$$z_{ij}=\frac{p_{ij}-p_{i\cdot}p_{\cdot j}}{\sqrt{p_{i\cdot}p_{\cdot j}}}$$

则 $\boldsymbol{V}=\boldsymbol{Z}'\boldsymbol{Z}$

$\boldsymbol{S}=\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}'$ （$\boldsymbol{Z}'$是$\boldsymbol{Z}$的转置）

由这两个协方差矩阵（标本点群的$m\times m$协方差矩阵，变量点群的$n\times n$协方差矩阵）分别提出它们的公共特征值λ_n和特征向量$\boldsymbol{U}_k$，$\boldsymbol{V}_k$。特征向量给出一组独立因子，并给出所求主轴方向，特征值则表征相应因子所说明的变差百分数。

（3）R^n和R^m空间的对偶性　根据对应分析中在R^m空间中的第k个因子与在空间R^n中的第k个因子（$k=1,2,\cdots,r$）提供相同的方差，从几何意义说，即R^m中诸标本点与R^m中各因子轴的距离和R^n中诸变量点与R^n中相对应的各因子轴的距离完全相同。这样就能将变量和标本同时放在一个主因子平面上，既可研究标本之间或变量之间的关系，又可研究标本与变量之间的关系。

（4）因子载荷和贡献　因子载荷指m个变量在R^n的第k个因子轴上的投影，同样，亦指n个标本在R^m的第k个因子轴上的投影，用以说明第j个变量对i个标本的相对重要性。

所谓贡献，实际上是一个系数，它表明因子在空间中对标本和变量的拟合程度，以及标本和变量对因子的贡献是多少。每一个标本（或变量）应计算两个贡献系数，即绝对贡献和相对贡献。

绝对贡献表示标本i和变量j对于因子k的离差的贡献大小，反

映标本（或变量）是因子k出现的原因。

相对贡献是每一个因子对于标本i或变量j偏离平均条件的贡献，它表示每一个因子对于标本i或变量j的离差的贡献大小，可用以进行推断解释。

三、因子分析(Factor analysis)

1．因子分析的一般原则

因子分析是根据变量之间的相关关系，将多变量归纳为少数因子——原始变量的线性组合，借以表征变量的变异，而把每个变量看成是这些因子按不同的权相加的结果。每一个因子在地质意义上代表着变量间的一种结合关系，在我们的分析中，往往表示化学元素的共生组合和成因联系。因子分析是讨论岩石成因、岩浆演化、成矿关系的一个重要的数学工具。

因子分析有R-型和Q-型两种。R-型因子分析是以变量之间的相关系数为衡量它们之间亲疏程度的标准，以便对变量进行对比和分类，Q-型因子分析则是对标本而言，以标本之间的相似系数作为衡量它们之间的亲疏程度的标准，以便对标本进行分类和对比。

2．因子分析方法概要

进行因子分析时，第一步需将原始数据矩阵转换成相关矩阵。R-型因子分析选用相关系数，Q-型因子分析选用相似系数

$$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{T}$$

相关矩阵的内部结构由它的特征值和特征向量表征，共有N个特征值和特征向量。特征值的大小刚好是N个标本在该特征值所对应的特征向量方向上投影的平方和。特征向量称公因子，它与各变量有关，所以特征值又称该公因子上的方差贡献。公因子方差越大，说明相应的变量与其余变量的相互关系越密切。通常根据公因子方差大小作为选择有意义因子的标准。

因子分析中，标本和因子之间的关系有两种表示方法。

（1）因子模型　如果用 x_1，x_2，…，x_m 表示变量，f_1，f_2，…，f_k表示因子，则因子分析的数学模型可写作

$$x_i=\sum_{j=1}^{R}a_{ij}f_j+e_i \quad i=1,2,\cdots,m \qquad 2.2.7$$

这里，a_{ij}称x_i在f_j上的因子载荷，它表示第i个变量与第j个因子间的相关系数。在几何意义上它表示第i个变量在第j个因子上的投影。x_i和f_j之间的关系是互相消长的，或一长一消，取决于系数（因子载荷）a_{ij}的正负号。e_i称唯一因子，仅与相对应的一个变量有关。方程 2.2.7 称为因子模型，由R个因子载荷所组成的矩阵称为因子模型矩阵，以$\boldsymbol{A}$表示。

（2）因子结构　标本和因子之间的关系用相似系数表示，由标本和因子之间的相似系数所组成的矩阵叫因子结构矩阵，用 $\boldsymbol{S}$ 表示。它的数据大小反映标本与因子之间的相似程度。

由因子模型和因子结构组成一个完整的因子解。只有在因子正交情况下，因子结构中的元素才等同于因子模型中的因子系数。

总之，因子结构反映标本（或变量）与因子之间的相关关系，而因子模型则是以回归方程的形式将变量表示为因子的线性组合，因为一个因子模型中的任一个方程均可看为一个回归方程，其因变量为观测值，自变量为因子。在因子系数矩阵中，各列因子系数（载荷）的平方和表达了公因子F_j对各变量 x_1，x_2，…，x_m所提供的方差的总和，称为相应的公因子F_j的方差贡献。显然，方差贡献越大，提供的信息越多，重要性也越大。

上述的因子模型矩阵$\boldsymbol{A}$称为初始因子矩阵，它是通过主成分分析得到初始因子和变量的关系，是一种比较理想的求解方法。但得到的因子解不是唯一的。可通过将主因子轴绕原点旋转一定的角度，使各标本在每一个因子轴上的载荷的均方差最大，使尽量多的因子系数变成零或接近于零，以表明它只与最少数的几个变量有相关关系。

把初始因子矩阵进行线性转换，根据“简单结构”准则有两种方法。一种方法是使因子相互正交，即互不相关；另一种方法

是使因子斜交，将变量用相关因子进行描述。

在我们的分析中，使用的是主因子解、方差极大主因子解和Promax斜因子解。在Promax斜因子解中，因子轴之间的相关系数即是两因子轴之间的夹角余弦。

虽然正交和斜交因子解中载荷基本相同，但后者两极分化较大，可通过各标本在因子轴上载荷的大小，清楚地区分出因子与标本的关系，进行地质解释。

四、判别分析(Discriminatory analysis)

1．判别分析的一般原则

岩石化学研究中，在通过聚类分析、对应分析、因子分析研究岩石的类型和成因演化之后，总希望以此为基础，建立一个准则，以便考虑未知标本的类型，这可借助判别分析。

判别分析要求在事先已有分类样本的基础上进行。设A、B分别代表两类母体，标本数分别为n_A，n_B，每个标本都有m个特征(变量)，以x_{Aik}表示A类母体中第i个标本的第k个特征($i=1, 2, \cdots, n_A$; $k=1, 2, \cdots, m$)．类似的符号也用于B类。

设有某一标本，要求根据它的m个特征$x_1, x_2 \cdots, x_m$，决定它在A、B两类中的归属。

利用已知归类的N个历史标本的m个特征构成一个线性判别函数，则判别函数的数学模型记为

$$y_{gi}=\sum_{k=1}^{m} c_k x_{gik} \qquad 2.2.8$$

$$(g=\mathrm{A}, \mathrm{B}; i=1, 2, \cdots, N_g)$$

式中c_k为常系数，它可根据历史资料按照一定的准则计算出来．

当$g=$A时，可根据判别函数计算出A类标本N_A个y_{Ai}的值。当$g=$B时，可计算出B类标本N_B个y_{Bi}的值。总共有$n_A+n_B=N$个y值。我们总可以从中找到一个临界值y_c，作为区别y_{Ai}与y_{Bi}的指标，以此来区分两类不同的标本。

根据判别函数式计算两类标本的判别函数值时，因x_{gik}是已知的历史资料，只要知道c_k就可以进行。下面，我们就来讨论如何计算判别系数c_k的问题。

从统计的意义上讲，两类标本，若是各类判别函数的方差小，而两类判别函数的平均值的差异大，则视为理想的分类。用数学形式表达，要求λ最大

$$\lambda=\frac{(\bar{y}_A-\bar{y}_B)^2}{\sum_{i=1}^{n_A}(y_{Ai}-\bar{y}_A)^2+\sum_{i=1}^{n_B}(y_{Bi}-\bar{y})^2} \qquad 2.2.9$$

应用微积分中函数求极值原理，当满足条件

$$\frac{\partial\lambda}{\partial c_k}=0 \text{ 时} \quad (k=1,\ 2,\ \cdots,\ m)$$

λ取极大值。

将上式展开，整理后得到在使λ最大的准则下（常称为Fisher准则），计算判别函数c_k的线性方程组

$$\begin{cases} c_1S_{11}+c_2S_{21}+\cdots+c_mS_{m1}=d_1 \\ c_1S_{12}+c_2S_{22}+\cdots+c_mS_{m2}=d_2 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ c_1S_{1m}+c_2S_{2m}+\cdots+c_mS_{mm}=d_m \end{cases}$$

其中

$$S_{jl}=\sum_{i=1}^{n_A}x_{Aij}x_{Ail}-n_A\bar{x}_{Aj}\bar{x}_{Al}+\sum_{i=1}^{n_B}x_{Bij}x_{Bil}-n_B\bar{x}_{Bj}\bar{x}_{Bl}$$

2．判别临界值y_c的确定

理论上将两类判别函数的平均值作为y_c。可按下式进行计算

$$y_c=\frac{n_A\bar{y}_A+n_B\bar{y}_B}{n} \qquad 2.2.10$$

当$\bar{y}_A>\bar{y}_B$时，若某标本的判别函数计算值$y>y_c$，则将该标

本判为A类，反之判为B类。

当$\bar{y}_A<\bar{y}_B$时，若某标本的判别函数计算值$y>y_c$时，则将该标本判为B类，反之判为A类。

实际工作中，常将两类判别函数点在单坐标数轴上，根据历史样本拟合率最高为原则，重新决定一个临界值y'_c，使用效果更为理想。

3．两类判别效果的显著性检验

假设A类标本和B类标本的母体方差相等，则两类判别效果的显著性检验采用下列公式进行

$$F_{AB}=\frac{(n-2-m+1)n_An_B}{m(n-2)(n_A+n_B)}D^2_{AB} \qquad 2.2.11$$

F_{AB}服从自由度为m和$(n-2-m+1)$的F分布。这里

m为自变量个数；

n_A、n_B分别为A、B两类标本数；

$D^2_{AB}=(\vec{x}_A-\vec{x}_B)'S^{-1}(\vec{x}_A-\vec{x}_B)$ 为A、B两类间的马氏距离，x_A、x_B分别为A、B两类标本的均值向量，S^{-1}为协方差矩阵S的逆矩阵。S的元素为

$$s_{ij}=\frac{1}{n-2}\left(\sum_{l=1}^{n_A}(x_{Ali}-\bar{x}_{Ai})(x_{Alj}-\bar{x}_{Aj})+\sum_{l=1}^{n_B}(x_{Bli}-x_{Bi})(x_{Blj}-x_{Bj})\right)$$

给定信度水平α，若计算值$F_{AB}>F_\alpha(2,n-2-m+1)$，则认为两类判别效果显著，若$F_{AB}<F_\alpha(2,n-2-m+1)$，则认为两类判别效果不显著。

五、趋势面分析(Trend analysis)

1．趋势面分析的一般原则

趋势分析是利用多元回归的运算方法研究一个变量或一组变量在空间的系统变化。当变量观测点分布在二维平面上时，称趋

势面分析。趋势面是将地质数据划分为区域性和局部波动两个部分的数学方法在地质学上的专业名称。本书使用的是多项式趋势面。

任何地质要素总含有三部分变化：(1)区域性变化　受区域性因素制约，反映规律性变化部分；(2)局部性变化　反映局部变化特点，受局部因素控制；(3)随机性变化　由随机因素造成的偏差，包括观测误差。

趋势面分析的目的就在于把实测值分解为两部分：(1)趋势部分　反映区域性总的变化规律；(2)剩余部分　反映局部范围内的变化特点。趋势面分析结果，给出趋势值和剩余值，用趋势值圈划趋势等值线图，用剩余值圈出异常带。

2．数学表达式

具体方法就是用数学方法计算出一定的数学面来拟合数据中区域性变化的"趋势"，这个数学面就叫趋势面。这里采用多项式函数所代表的平面或曲面作为趋势面。这些面都可用方程式表示。根据多项式的次数，分别称为一次趋势面，二次趋势面，…，n次趋势面。

一次面　　$\hat{z}_1 = a_0 + a_1x + a_2y$

二次面　　$\hat{z}_2 = a_0 + a_1x + a_2y + a_3x^2 + a_4xy + a_5y^2$

其他多次面以此类推。一次面是平面，二次面是双曲面或椭圆面，三次以上的曲面形态更加复杂，可用多项式

$$\hat{z}_i = a_0 + a_1x + a_2y + a_3x^2 + a_4y^2 + \cdots + a_my^2$$

表示。

若记 z_i 为平面上一点的观测值，该点坐标为(x_i, y_i)。设共有 n 个值。当用多项式来拟合这 n 个值时，可用最小二乘方法确定方程中的待定系数 $a_0, a_1, \cdots, a_m$。因为x_i，y_i 是已知坐标点，所以可求出对应的趋势值 $\hat{z}_i$。

把所有点的趋势值 $\hat{z}_i$（$i=1, 2, \cdots, n$）求出后，可按 $\hat{z}_i$的一定间隔画出趋势等值线图。

用各点的观测值减去它的趋势值，得到残差（剩余）值

$$\Delta z_i = z_i - \hat{z}_i$$

按 Δz_i 值的一定间隔，画出残差图。

3．计算结果的验证

对一组数据作趋势分析时，有三个问题必须考虑。

（1）所选方程式对原始资料的逼近程度　可用离差平方和的变化表示。衡量逼近程度的标准谓之拟合度C。

$$C = \frac{SST}{SZZ} \times 100\%$$

式中　$SST = \sum_{i=1}^{n} (\hat{z}_i - \bar{z})^2$

$$SZZ = \sum_{i=1}^{n} (z_i - \bar{z})^2$$

其中　z_i—第i个点位置上的观测值；

$\bar{z}$—全部观测值的平均值。

（2）　上式给出了衡量拟合度的标准，拟合度究竟多大，趋势面所反映的变异才算显著？从数学上考虑，可用F分布进行检验

$$F = \frac{\Sigma(\hat{z}_i - \bar{z})^2/P}{\Sigma(z_i - \hat{z}_i)^2(n-P-1)}$$

F服从$F(P, n-P-1)$分布，其中：P为趋势多项式的项数（不含常数项a_0）n为标本数。

当给定信度α后，可由F分布表中查出临界值F_P。若$F > F_P$时，趋势面反映的变异性显著，反之则认为该次趋势面在信度α条件下没有显著意义。

（3）随着趋势面次数的增高，其逼近原始数据的程度也相应地增高。当趋势面次数过高时，则造成趋势值与剩余值混淆，以至失去趋势分析意义。有人建议，以选择拟合度较稳定的那次趋势面进行地质解释为宜。

（4）一次趋势走向的确定　一次趋势面是一个平面，平面的走向可用一次趋势面的系数a_1，a_2按下式换算

$$S=\tan^{-1}\left(\frac{a_1}{a_2}\right)$$

S为平面的走向与 y(y 正北）坐标方向正向间的夹角．如果 $\frac{a_1}{a_2}$为正，走向角按顺时针方向测定；如果$\frac{a_1}{a_2}$为负，走向角按反时针方向测定。

第三章　花岗岩类岩石化学成分的聚类分析

一、多元统计方法在岩石分类研究中的意义

分类及命名是岩石学研究的一个重要内容。随着岩石学研究的深入，分类的标志和方法亦在不断增加，使分类研究日趋完善。岩石的矿物成分及其共生组合与岩石的化学成分有着十分密切的联系，先后出现了二十余种岩石化学计算方法及相应的分类图解（见第一篇）。

花岗岩类岩石是大陆上分布最广泛的一种火成岩，种类繁多，相互过渡。纯化学成分分类法中常用的是按一定的地球化学原则把氧化物重量%换算成标准矿物，然后把标准矿物中Q（石英）、A（碱性长石）、P（斜长石）换算成100%并进行三角形投影。然而，这种纯化学成分的分类往往与实测矿物分类有较大出入，其原因在第一篇第四章中已作了介绍，为了使计算的标准矿物尽量（不可能完全）接近真实矿物成分，作者编制的DGNU程序可供分类参考（第一篇第六章）。

为了充分利用岩石化学成分中各种元素提供的分类信息，近年来已有一些文献试用多元统计方法进行岩石化学分类。在解决实际问题中，聚类分析、主分量分析、对应分析、非线性映射分析和判别分析都取得了较好效果.尤以聚类分析应用最广.因为聚类分析不需要预先知道标本分类情况，也无需选择作判别参考的历史样本。

二、华南花岗岩类岩石化学成分的聚类分析

本文选出华南有代表性的19个岩体，9种岩石，计56件标本。同时引用约翰逊的英云闪长岩以及戴里、诺科斯、黎彤等人的平均成分作参照标本。参与计算的氧化物有 SiO_2，TiO_2，Al_2O_3，Fe_2O_3，FeO，MnO，MgO，CaO，Na_2O，K_2O，共计10项。这些岩石的定名及产地见表2-3-1。材料取自南京大学地质系1965年编著的《华南不同时代花岗岩及其成矿关系》一书。按现在观点，需作如下说明：

(1)花岗闪长岩原指界于花岗岩和闪长岩之间的岩石(Becker,1892)，后来又有人引为界于石英二长岩和石英闪长岩之间的过渡岩石(Brogger, 1895)，因而造成花岗闪长岩命名混乱。

(2)富斜花岗岩，在国际分类中亦无这一岩石名称。对与其类似成分的岩石，国内外很多岩石学家将其归入花岗闪长岩。也人认为有(南京大学地质系,1981)，富斜花岗岩以其石英和二氧化硅含量高而有别于花岗闪长岩，它是花岗岩类岩石中非正常系列的岩石。我们主张不用富斜花岗岩这一名称。从下面的分析看，富斜花岗岩成分上相当于二长花岗岩(Adamellite)。

(3)斜长花岗岩和英云闪长岩是花岗岩系列中基性端员，以其钾长石与长石总量比值不足10%为特征。国际分类中不用斜长花岗岩而统归英云闪长岩。英云闪长岩本身应属石英闪长岩，只是石英含量较高，二氧化硅高于67%，暗色矿物是黑云母、角闪石，斜长石应为中长石。

引述以上岩石命名混乱情况之后，再考虑到岩石之间相互过渡，以及矿物包体、环带构造、钾长石条纹化等因素，不难理解定量矿物测定何以难以准确。了解了这些情况，对下述的岩石化学分类就容易理解了。

1.分裂法(Splitting)计算结果

分裂法是一种将类由少变多的聚类方法，用于标本之间是平

表 2-3-1 分析标本的原始定名和产地或资料来源

编号	岩石名称	产地或资料来源	编号	岩石名称	产地或资来料原
1—2	花岗闪长岩	广西大宁	28—30	英云闪长岩	约翰逊
3	花岗闪长岩	广西蒙洞口	31—36	富斜花岗岩	江西九岭山
4	花岗闪长岩	广西才滚	37—39	富斜花岗岩	广东冬瓜岭
5	花岗闪长岩	广西大寨	40	黑云母花岗岩	江西诸广山
6	花岗闪长岩	广西本洞	41—42	黑云母花岗岩	湖南彭公庙
7	花岗闪长岩	广西龙有	43—45	黑云母花岗岩	江西公馆
8	花岗闪长岩	广西密报	46—47	白云母花岗岩	湖南瑶岗仙
9	花岗闪长岩	戴里	48—49	白云母花岗岩	广西栗木
10	花岗闪长岩	诺科斯	50—51	二云母花岗岩	江西公馆
11—17	石英二长岩	福建冲腾	52—53	二云母花岗岩	江西安福塘
81	石英二长岩	戴里	54	二云母花岗岩	江西武功山小岩体
19	石英二长岩	诺科斯	55	一切时代花岗岩	戴里
20—24	石英正长岩	安徽黄梅尖	56	中国酸性岩平均值	黎彤
25—27	英云闪长岩	江西慈竹	57—62	碱性长石花岗岩	福州鼓山

等情况下的最优分段法。

进行分裂，需要一个合适的函数来衡量分类是否合理。这里选用分类函数

$$E=\frac{n_1n_2}{n}(\bar{x}_1-\bar{x}_2)'(\bar{x}_1-\bar{x}_2) \qquad 2.3.1$$

设$D_{欧}(1,2)$表示类G_1与G_2重心之间的欧氏距离，则E又可表示为

$$E=\frac{n_1n_2}{n}D_{欧}^2$$

$\frac{n_1n_2}{n}$可视成对距离$D_{欧}^2(1,2)$所加的权函数。

实现初始分类方法如下：用G_1和G_2表示G的一种分类，开始n个样品点全在G_1中，然后从中排出一个点（共有n种可能）放到G_2中，使分类函数达极小，如此继续下去，直至G_1中只有一个点（这时G_2中有$n-1$个点）为止。这个过程中G_1和G_2的分法共有$n-1$种，选择其中使分类函数达到极大的一个，即将G分裂成G_1和G_2，得到初始解。

华南62件花岗岩标本(含6件参考标本)的分裂法聚类结果见图2-3-1。从中看到，当分类函数$E=22685$时，得到初始解，62件标本分成甲、乙两大类。甲类包括本洞、慈竹、约翰逊的英云闪长岩、冲腾石英二长岩、九岭山富斜花岗岩（二长花岗岩）等29件，诺科斯及戴里花岗闪长岩(No 10,9)，戴里石英二长岩(No 18)亦落入此类，它们是花岗岩类中较基性的端员。乙类包括二长花岗岩、黑云母花岗岩、白云母花岗岩、福州鼓山碱性长石花岗岩及戴里的花岗岩(No 55)，黎彤的中国酸性岩平均值(No 56)亦归于此类，它们是花岗岩类中较酸性端员。诺科斯石英二长岩(No 19)也落在乙类，可见它较之戴里的同名岩石要酸性。

从地质情况看，九岭山岩体(No31—36)是一个混合岩化花岗岩基，原先定名为富斜花岗岩（南京大学地质系，1965年)，后来又定名为含堇青石二长花岗岩。在我们的分析中，甲、乙两类都含有九岭山岩体标本，从花岗岩成分的分类位置看，定二长花岗岩是合理的。

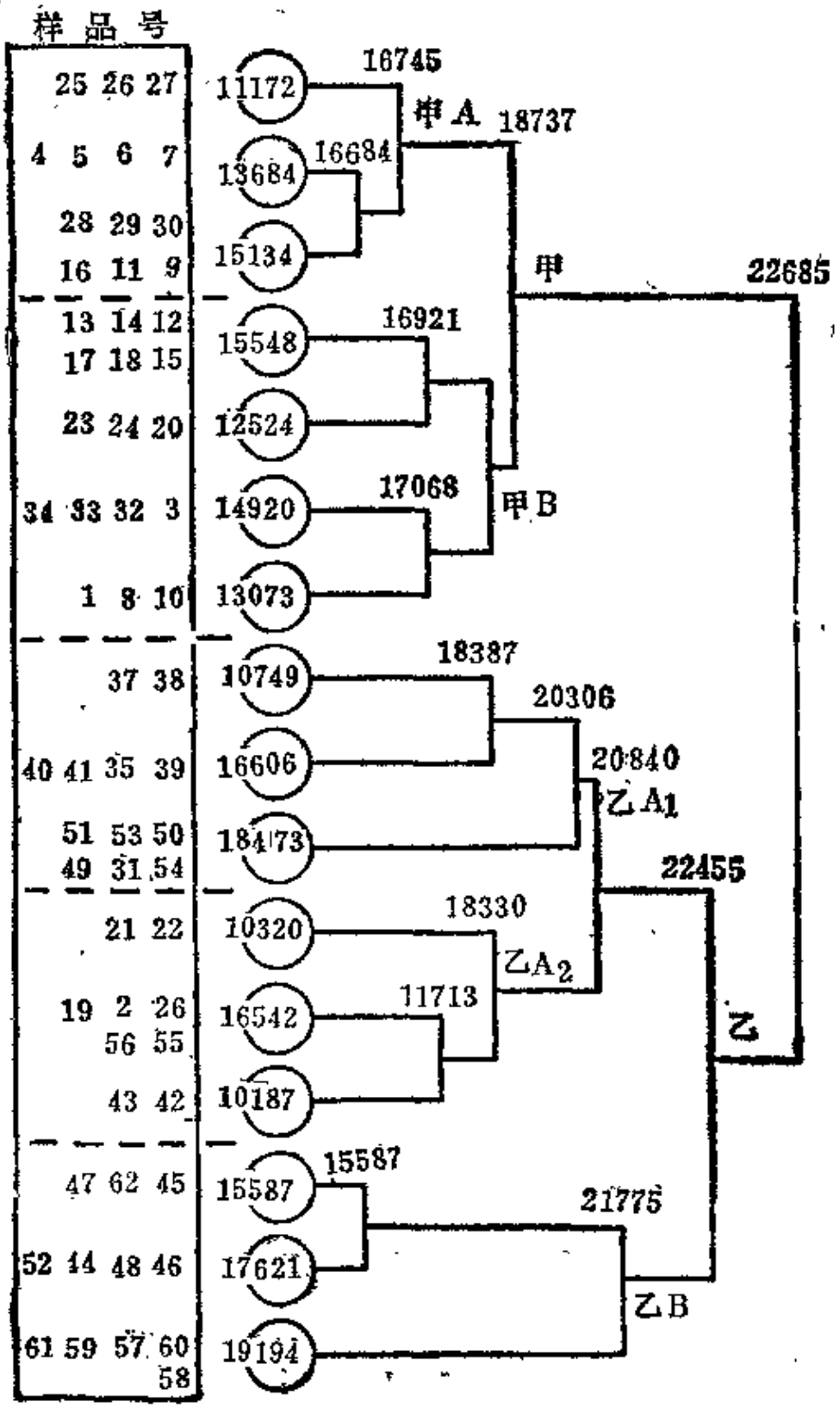


图2-3-1　华南花岗岩化学成分聚类图分裂法计算结果

谱系图中的数字系分类函数(E)，左侧数码是样品序号

图中下部的"19 2 26"应为"19 2 36"；图下部的"52 14 48 46"应为"52 44 48 46"

试分别将甲、乙两类分裂，相应的达到E的极大值，分别为：$E=18737$，$E=22455$，又各自分为两类。

甲A由英云闪长岩和花岗闪长岩组成；甲B由石英二长岩、石英正长岩和部分二长花岗岩组成。

乙类除分出乙A和乙B外，乙A可再一分为二，这时共形成三类(乙A_1、乙A_2、乙B)相应地达到E的极大值21775、20306、18330。乙A_1由九岭山、冬瓜岭二长花岗岩、彭公庙黑云母花岗岩及部分二云母花岗岩组成；乙A_2包括石英正长岩、石英二长岩、黑云母花岗岩；乙B包括：白云母花岗岩、二云母花岗岩、碱性长石花岗岩。

如果一直分裂下去，选择更小分类函数E值，亚类又可细分，直至分割到单个岩体、单个标本为止。对照表2-3-1可见，第一次分裂的两类中，第一类（甲）是花岗岩类中的基性端员，第二类（乙）属花岗岩类酸性端员。第一类再分为英云闪长岩-花岗闪长岩及花岗闪长岩-二长花岗岩；第二类又分裂为二长花岗岩-普通花岗岩（黑云母花岗岩）、石英二长岩-石英正长岩和二云母花岗岩-碱性长石花岗岩三亚类。综观分类谱系图，可见：

①谱系图中各类岩石的排列次序是按二氧化硅、全碱递增及镁铁组分递减排列；

②谱系图表现出的广西融水本洞等岩体（No1—8）不完全是英云闪长岩，也有花岗闪长岩。九岭山岩体以二长花岗岩为主，但也有向两侧过渡类型；

③从分裂的先后次序可以看出类之间的亲疏关系，当有对照岩石存在时，则表明了该类岩石的性质和成分；

④除碱性长石花岗岩和英云闪长岩外，本分析中的其他种属都有过渡和交叉，尤其是二长花岗岩和石英二长岩，另一方面由于这些岩石的定义原来就有混淆，不同作者把同种岩石定成不同的名称。

2.最小支撑树分类结果

62件华南花岗岩的最小支撑树见图2-3-2.在这棵树上，凡直接相连的标本彼此间有成分上的联系，而不直接相连的点没有成

分上的直接过渡。支撑树的边长是按比例画的，画圈内的数字代表标本序号，画圈外的数字表示落在给定半径所做的球内标本的个

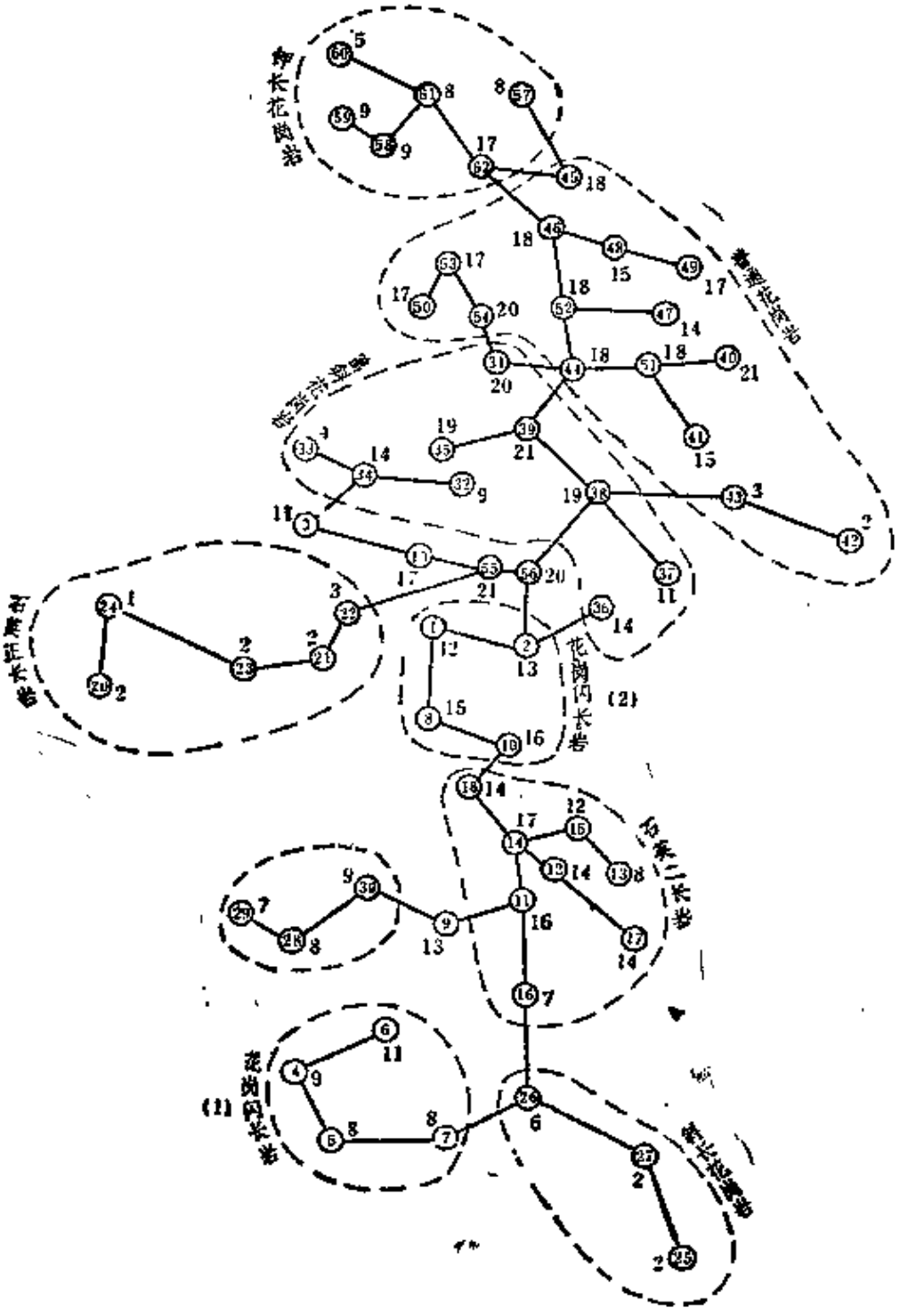


图 2-3-2　花岗岩岩石化学成分最小支撑树

圆内数字代表标本序号

圆侧数字表示密度

数，即密度。密度越大，成分上与其相近的标本越多，相互联系密切。分析图2-3-2看到：

①花岗岩平均值(No55,56)位于MST中心，这是合乎规律的；

②黑云母花岗岩、白云母花岗岩和二云母花岗岩(No40—54)相聚一起，统属普通花岗岩，它们的点密度甚高，表明这些标本的种属关系密切；

③原定名为富斜花岗岩的一些岩石，例如九岭山等岩体(No31—38)，介于普通花岗岩和花岗闪长岩之间，从化学成分上看，定名为二长花岗岩是恰当的；

④石英二长岩与英云闪长岩和斜长花岗岩有密切关系，它们的点密度也很高，表明花岗闪长岩，英云闪长岩、斜长花岗岩与石英二长岩有过渡关系；

⑤江西弋阳慈竹早加里东片麻状花岗岩，有人将其定名为斜长花岗岩，后来又改称英云闪长岩。根据最小支撑树的分析结果看，它与约翰逊的英云闪长岩并无标本连接，自成一类；广西融水本洞岩体，最近也有人将其定名为英云闪长岩，也与约翰逊英云闪长岩无直接联系。从化学成分看No4—7更接近斜长花岗岩，No1—2接近花岗闪长岩。造成这种定量矿物成分与岩石化学资料不很协调的原因，就慈竹岩体来说，可能是在花岗岩形成过程中，由于原岩中石英含量高，经过流化作用变成花岗岩类岩石以后，仍然保持了较高的石英含量，这是混合岩中保留原岩特色的一种现象，造成了矿物含量和岩石化学成分的不协调。从化学成分看，慈竹岩体和本洞岩体某些岩石还是定名为斜长花岗岩更好。

⑥石英正长岩自成一类，除与戴里平均花岗岩有联系外，与其它岩石无直接联系。

花岗岩岩石化学成分的最小支撑树反映了花岗岩各种属之间的相互关系，亦起到分类作用。

3.模糊聚类计算结果

说两种岩石成分"相似"，是个模糊概念，并没有严格的界限。为了处理这些模糊概念，可通过一个模糊矩阵来定义模糊分类关

系，这个矩阵的元素可以用样品之间的任一相似系数来表示。文实现模糊聚类步骤如下：

(1)计算任意两样品间的相似系数 R^*，这里采用夹角余弦。为了使它成为模糊分类关系，在不改变原来各元素的相对关系的前提下，作变换 $r_{ij}=\frac{1+r^*_{ij}}{2}$，使之压缩在〔0,1〕区间内，得相似系数矩阵$R$，称之模糊矩阵。

(2)通过R不断自乘求极限，对相似系数矩阵R进行改造，可得到模糊分类关系R^*。

(3)在分类有明朗结果的情况下，分类关系 R的元素非0即1。当分类还不很确定时，r_{ij} 有可能位于0与1之间，它的值越大，x_i 和x_j 同属于一类的事实就愈肯定。从而把普通分类关系推广为模糊分类关系，最后形成聚类图。

华南花岗岩62件标本的模糊聚类结果如下（图2-3-3）。

(1)当模糊等阶比 $R=0.992$时，62件花岗岩标本分成甲、乙两大类。甲类24件标本，由花岗岩类的基性端员组成，包括：花岗闪长岩、石英二长岩、约翰逊的英云闪长岩；乙类38件标本，由花岗岩类较酸性端员组成，包括：黑云母花岗岩、二云母花岗岩、白云母花岗岩和二长花岗岩（原资料定名为富斜花岗岩）。

(2)当模糊等阶比$R=0.998$时，62件标本共分成6类。

甲$_1$ 2件，由慈竹英云闪长岩(No25,27)组成；

甲$_2$ 13件，包括：约翰逊英云闪长岩 (No28,29,30)、福建钟腾石英二长岩(No11—16)戴里花岗闪长岩(No9)、诺科斯花岗闪长岩(No10)、戴里石英二长岩 (No18) 和广西密皈花岗闪长岩 (No 8)；

甲$_3$ 9件，包括：九岭山富斜花岗岩(前人定名)(No32、33、34)慈竹英云闪长岩(No26)、广西花岗闪长岩(No3—7)；

乙$_1$ 5件，全部由黄梅尖石英正长岩组成(No20—24)；

乙$_2$ 8件，包括：黑云母花岗岩 (No42、43)、白云母花岗岩 (No47)、福建鼓山碱性长石花岗岩 (No57—61)；

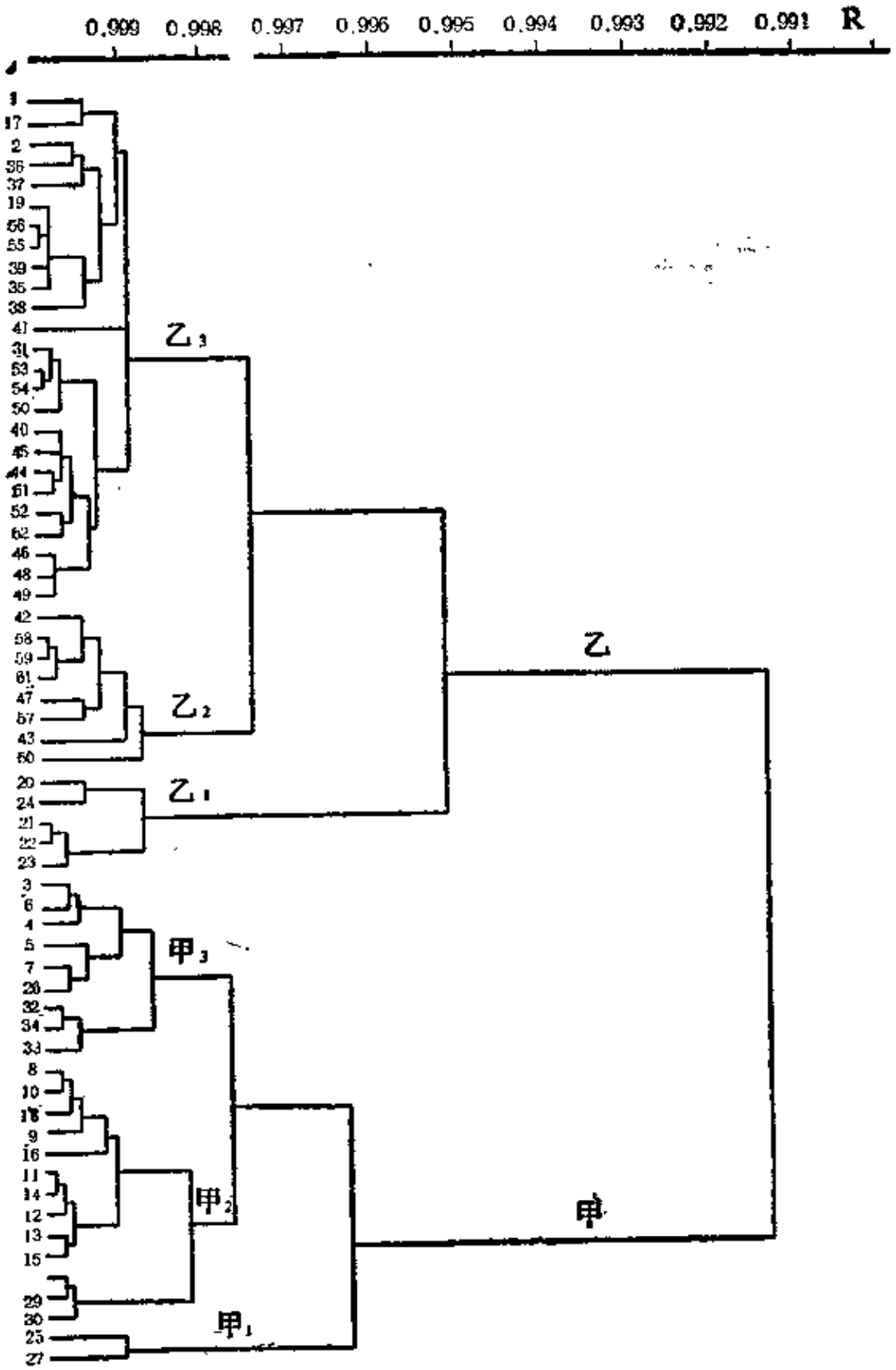


图 2-3-3 花岗岩标本模糊聚类谱系图($N=62$)
相似性度量R=模糊等阶比
图左侧部下数字15与29之间应有28

乙$_3$ 25件，包括：九岭山和冬瓜岭前人定名的富斜花岗岩(No 31、35、36、37、38、39)、黑云母花岗岩及白云母花岗岩和二云母花岗岩(No40、41、44、45、46、48、49、50、51、52、53、54)、钟腾石英二长岩(No17)、广西大宁花岗闪长岩(No1，2)和鼓山碱性花岗岩(No62)，中国酸性岩平均值(No56)、戴里的花岗岩(No55)和诺科斯的石英二长岩(No19)也在此类。

上述分类结果说明：

①富斜花岗岩应包括两部分：一部分在成分上更接近于花岗闪长岩，例如九岭山岩体的No32、33、34号标本，它们与花岗闪长岩组合在一组内；另一部分较酸性，与黑云母花岗岩、白云母花岗岩、二云母花岗岩分在一组，它们是九岭山和冬瓜岭的No31、35、36、37、38、39号标本，这一些标本应该是二长花岗岩。

②英云闪长岩在化学成分上接近花岗闪长岩，它们与戴里和诺科斯的花岗闪长岩分在一组。

③黄梅尖石英正长岩自成一类，与其他花岗岩没有交叉。

④广西大宁花岗闪长岩落在普通花岗岩组内，其成分应相当于二长花岗岩。

以上用分裂法、最小支撑树和模糊聚类方法对62件花岗岩标本进行的分类，尽管因为三种方法所取的分类标准不一样，三种分类结果有些差异，但在主要岩石类型的划分上则是一致的，所得的谱系图和支撑树不仅给出标本归类结果，同时直观地反映出它们之间的数字关系。这种谱系图的缺点在于不能直接表示每类的化学成分特点。

第四章　华南花岗岩的时空分布及其演化的统计规律

本章试利用同位素年龄值及岩石化学成分，借助数字方法讨论华南花岗岩的时空分布。

一、华南花岗岩分布概况

华南地区花岗岩类分布极其广泛。伴随着东安运动、雪峰运动、加里东运动、海西运动、印支运动及燕山运动，相应地都有不同成因花岗岩类形成。东安期花岗岩(1350—1450Ma)，如分布于江南地背斜带西南段的广西融水县本洞英云闪长岩岩体，其成因与蛇绿岩套有关，属幔源型。雪峰期花岗岩(1000—650Ma)，如分布于江南地背斜带西段的元宝山和摩天岭岩体，是一种富氧化钾的黑云母花岗岩，东段的九岭山岩体系含堇青石二长花岗岩，它们均属改造型。但位于这一古老花岗岩带东端与细碧角斑岩系有成因联系的浙江西裘岩体，属于幔源型。

华南加里东运动分早晚两期。早期发生于寒武纪，中、上奥陶世以及奥陶纪和志留纪之间，与其有关的主要是一套混合岩和同构造期的片麻状花岗岩（550—420Ma）。加里东晚期花岗岩为晚或后构造期的岩浆型黑云母花岗岩，亦属改造型。早加里东期花岗岩主要分布于武夷-赣南-云开早加里东隆起区；晚加里东期花岗岩广泛分布于加里东褶皱带中。

加里东隆起区的四周，由加里东褶皱基底所形成的海西-印支拗陷带中，分布着海西期（320—250Ma）及印支期花岗岩（250—190Ma），其中海西期花岗岩主要分布于继承性拗陷——钦州湾的九万大山和大容山地区。南岭印支期花岗岩受基底断裂长期控

制，它们形成三个东西向多期多阶段的复式岩带，从花岗闪长岩到很酸性花岗岩均有，明显地受地质背景制约，既有同熔型，也有改造型。

燕山运动和燕山期花岗岩华南最发育，一般可分早晚两期。燕山早期花岗岩形成于中、晚侏罗世(190—135Ma)，以黑云母花岗岩为主，分布于政和-大埔断裂以西。燕山晚期花岗岩形成于白垩纪(135—70Ma)，在政和—大埔断裂以东的浙闽粤沿海，大多是典型同熔型花岗岩。其间，长乐-南澳断裂与平谭-澳角断裂之间的狭长地带，因受库拉板块向大陆俯冲事件的影响，发育了一套由变质岩(角闪岩相)、混合岩和花岗岩三位一体的块断造山运动的产物，时间约在110Ma。这次热事件之后，沿海地区还发育了几个富碱性的碱性长石花岗岩。以福州魁歧岩体为代表，为A型花岗岩。

华南花岗岩的时空分布表现出为明显的发展和演化规律。随着大陆地壳的成长和成熟，造山运动自西北向东南推移，周期缩短而频率增大，相应地花岗岩体也依次由老至新向沿海推移。

二、地壳构造运动与花岗岩形成作用

造山运动导致花岗岩形成，早为学者们所肯定。1914年，戴里(Daly)指出花岗岩的发生与造山作用密切相关，斯蒂勒(Stille)把花岗岩侵入与地槽发展联系起来，认为花岗岩形成于地槽回返阶段。按造山运动与花岗岩形成作用的关系，分早造山花岗岩、同造山花岗岩、晚造山花岗岩及后造山花岗岩。尽管整个造山过程中都有花岗岩形成作用发生，但它的高潮是在造山作用晚期，甚至拖延至造山作用之后。因此，造山作用与其伴随的花岗岩形成作用之间有一时差，即花岗岩形成作用总是滞后于构造作用。

造山环境下花岗岩的形成作用是一个反复的多幕的过程，常常形成多期多阶段的复式岩体。例如，武功山混合岩-花岗岩穹窿，就是一个多期多阶段的复式岩体，混合岩本身年龄为409—

422Ma，属加里东期，分布在西部的张佳坊-新泉；花岗岩体年龄为246—249Ma，属印支期；在混合岩中心部位的浒坑岩体，年龄158Ma，属燕山早期；414含稀有元素花岗岩岩体的年龄为131—95Ma，属燕山晚期。其次，花岗岩形成过程的多阶段性被愈来愈多的事实所证明，其中研究较详细的是一些燕山期花岗岩和部分印支期花岗岩。如西华山-荡坪岩体，主要岩相分三期六个阶段。花岗岩形成作用的多期多阶段性造成了花岗岩体的相互穿插。然而，花岗岩体的相互穿插所标明的简单时间顺序并不能定量地确定花岗岩的侵位是否是连续的。因为接触关系所代表的时间间隔可能是短暂的。岩石和矿物的同位素年龄值可以弥补这一缺陷。

华南花岗岩，尤其是晚古生代以来的花岗岩，大部分分布在加里东运动以后的长期活动的断裂带中。虽然地层关系是确定岩体时代和划分先后的重要依据，但因地层出露不全，没有明显的和直接的地质证据，往往给确定岩体先后造成困难。因此，同位素年龄值在确定这些花岗岩体的形成时间和建立它们的相对时间序列方面就具有特殊的地质意义。

下面使用的同位素年龄值，采自全国同位素年龄数据汇编第一集(1975)、第二集(1977)，部分散见于文献（截至1982年）。

三、华南花岗岩同位素年龄值的频率分布

岩石和矿物的同位素年龄值是地壳周期性运动的记录。统计分析发现，世界各大陆的矿物同位素年龄值的频率分布显示八个峰，而且各大陆极为相似（见表2-4-1）。五个大陆的平均峰值（不计括号内数值）是105Ma、352Ma（标准差12Ma）、500Ma（标准差20Ma）、980Ma（标准差25Ma）、1360Ma、1780Ma（标准差20Ma）、2110Ma（标准差5Ma）及2605Ma。如果忽略不计B'，则这些峰之间的间隔是395Ma、480Ma、390Ma、410Ma、332Ma、493Ma，平均间隔为417Ma，它们反映了地壳运动的周期性。

表 2-4-1 矿物年龄值丰度峰值(Ma)(按G. Gastil1981)

	A	B	B′	C	D	E	F	G
欧州—西伯利亚	–	345	–	965	–	1800	2105	(2650)
北　美	100	365	530	1010	1370	1755	(2105)	2605
(北美延续部分)	105	360	530	1005	1360	1760	(2090)	2603
东南亚—澳大利亚	(165)	–	510	995	(1475)	(1700)	–	2695
南　美	–	–	475	–	1365	–	–	2515
非　州	–	–	485	950	–	(1655)	(2115)	(2640)
全　球	105	335	485	1000	1395	1785	2105	2605
K-Ar法	105	335	470	970	1330	1790	–	2545
Rb-Sr法	(105)	350	515	995	1390	1750	–	2630
U-Th-Pb法	105	360	490	1005	1430	1815	2105	2645

括号内的数值表示年龄数据很少。

图2-4-1是华南花岗岩441件年龄值的频率曲线图，横轴表示年龄值，时间间隔为100Ma。频率曲线图显示六个连续演化周期：50—190Ma、190—230Ma、230—310Ma、340—500Ma、700—900Ma、1350—1450Ma。大致相应于华南燕山期、印支

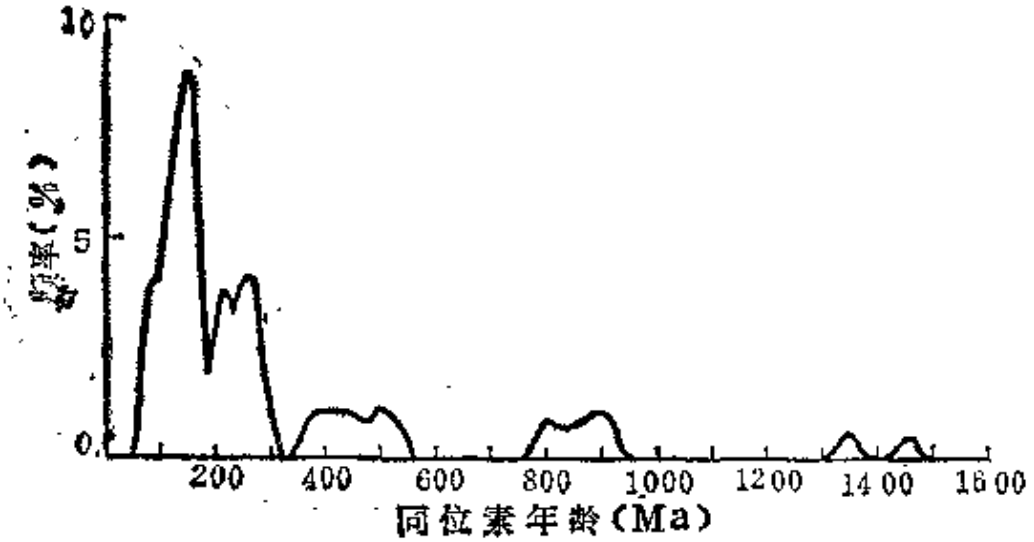


图 2-4-1 华南花岗岩同位素年龄值频率曲线图

期、海西期、加里东期、雪峰期及东安期花岗岩的年龄值。除缺失的太古代年龄值外，1350Ma、900Ma、500和340Ma完全可以与全球相应的周期对比。在190Ma处有一谷值，相当于印支期花岗岩的上限。关于燕山期花岗岩，年龄值在频率曲线图上呈近于正态分布，分不出更小的活动单元。这个结果与朱炳华等（1976）统计的中国大陆火成岩同位素年龄值的频率分布结果相吻合。若与古生代以前各旋回的矿物年龄值的平均间隔417Ma相比，中生代以来的构造-花岗岩形成作用的周期大大缩短，频率加快，以致燕山期花岗岩各期次相隔时间甚短，年龄值频率曲线图表示不出来。为了找出各期花岗岩在时间上的分布，我们试用最优分段法。

四、同位素年龄值最优分段结果及解释

1. 最优分段法计算结果

最优分段法是有序地质标本聚类的一种方法。它是根据

表 2-4-2 华南花岗岩年龄值最优分段结果

地 区	分组数	E	上行表示分组区间样品序号，下行表示年龄Ma值区间						
皖南修水沅水加里东边缘地槽（Ⅰ）	2	0.3007	1—20 110—176	21—23 210—270					
	3	0.1702	1—4 110—127	5—20 135—176	21—23 210—270				
江南地背斜带（Ⅱ）	2	0.4652	1—38 90—509	39—46 780—1450					
	3	0.2252	1—38 90—509	39—44 780—913	45—46 1350—1450				
	4	0.0748	1—30 90—271	31—38 294—509	39—44 780—913	45—46 1350—1450			
	5	0.0307	1—18 90—176	19—31 198—294	32—38 346—509	39—44 780—913	45—46 1350—1450		
	6	0.0227	1—18 90—176	19—31 198—294	32—37 346—403	38—38 509	39—44 780—913	45—46 1350—1450	
湘桂粤北海西-印支拗陷（含萍乐海西拗陷）（Ⅲ）	2	0.7718	1—42 74—202	43—45 217—422					
	3	0.3372	1—40 74—185	41—52 198—278	53—54 407—422				
	4	0.1101	1—12 74—114	13—42 147—202	43—52 217—278	53—54 407—422			
	5	0.0720	1—7 74—114	8—19 127—159	20—42 163—202	43—52 217—278	53—54 407—422		
	6	0.0417	1—7 74—114	8—19 127—159	20—40 163—185	41—47 198—228	48—52 246—278	53—54 407—422	

表 2-4-2 （续）

地　区	分组数	E	上行表示分组区间样品序号，下行表示年龄值Ma区间						
桂东南大瑶山-云开大山加里东隆起区(含钦州湾海西拗陷)(Ⅳ)	2	1.0106	1—40 90—220	41—65 231—497					
	3	0.3203	1—26 90—166	27—60 201—303	61—65 346—497				
	4	0.1665	1—26 90—166	27—42 201—236	43—60 248—303	61—65 346—497			
	5	0.1117	1—26 90—166	27—42 201—236	43—60 248—303	61—64 346—412	65 497		
	6	0.0732	1—7 90—125	8—26 129—166	27—42 201—236	43—60 248—303	61—64 346—412	65 497	
	7	0.0542	1—7 90—125	8—26 129—166	27—41 201—231	42—49 236—262	50—60 269—303	61—64 346—412	65 497
武夷-赣南后加里东隆起(Ⅴ)	2	0.9835	1—117 74—280	118—130 348—501					
	3	0.4592	1—98 71—196	99—117 209—280	118—130 348—504				
	4	0.2723	1—42 74—158	43—98 162—196	99—117 209—280	118—130 348—504			
	5	0.1541	1—42 74—158	43—98 162—196	99—117 209—280	118—126 348—422	127—130 463—504		
	6	0.1212	1—42 74—158	43—97 164—194	98—109 196—238	110—117 246—280	118—126 348—422	127—130 463—504	
	7	0.0924	1—3 74—114	4—42 126—158	43—97 164—194	98—109 196—238	110—117 246—280	118—126 348—422	127—130 463—504

表 2-4-2 （续）

地　区	分组数	E	上行表示分组区间样品序号，下行表示年龄值Ma区间						
浙西后加里东隆起区（Ⅵ）	2	0.1256	1—11 107—226	12—15 404—422					
	3	0.0338	1—2 107—160	3—11 180—226	12—15 404—422				
	4	0.0127	1 107	2—3 160—180	4—11 194—226	12—15 404—422			
	5	0.0058	1 107	2 160	3—5 180—198	6—11 208—226	11—15 404—422		
闽西南粤东南海西-印支拗陷（Ⅶ）	2	0.5270	1—19 107—204	20—28 219—377					
	3	0.2083	1—17 107—176	18—26 196—277	27—28 366—377				
	4	0.0990	1—12 107—149	13—19 155—204	20—26 219—277	27—28 366—377			
	5	0.0442	1—8 107—133	9—17 140—176	18—20 196—219	21—26 248—277	27—28 366—377		

表 2-4-2 （续）

区 地	分组数	E	上行表示分组区间样品序号，下行表示年龄值Ma区间						
粤东南燕山再生地槽（Ⅷ）	2	0.4808	1—13 99—132	14—29 142—200					
	3	0.2761	1—13 99—132	14—28 142—165	29 200				
	4		1—4 99—112	5—13 124—132	14—28 142—165	29 200			
	5		1—4 99—112	5—13 124—132	14—20 142—150	21—28 157—165	29 200		
浙闽粤沿海中生代活动带（Ⅸ）	2	0.5452	1—38 52—122	39—42 152—186					
	3	0.2566	1—13 52—87	14—38 88—122	39—42 152—186				
	4	0.1540	1—12 52—82	13—38 87—122	39—41 152—167	42 186			
	5	0.0758	1—12 52—82	13—28 87—101	29—38 106—122	39—41 152—167	42 186		

组内离差平方和最小、组间离差平方和最大、总离差平方和最小的原则，计算出分组数及其对应的最小误差函数。表2-4-2给出华南九个构造区花岗岩年龄值的分组点号、分组点的年龄值及最小

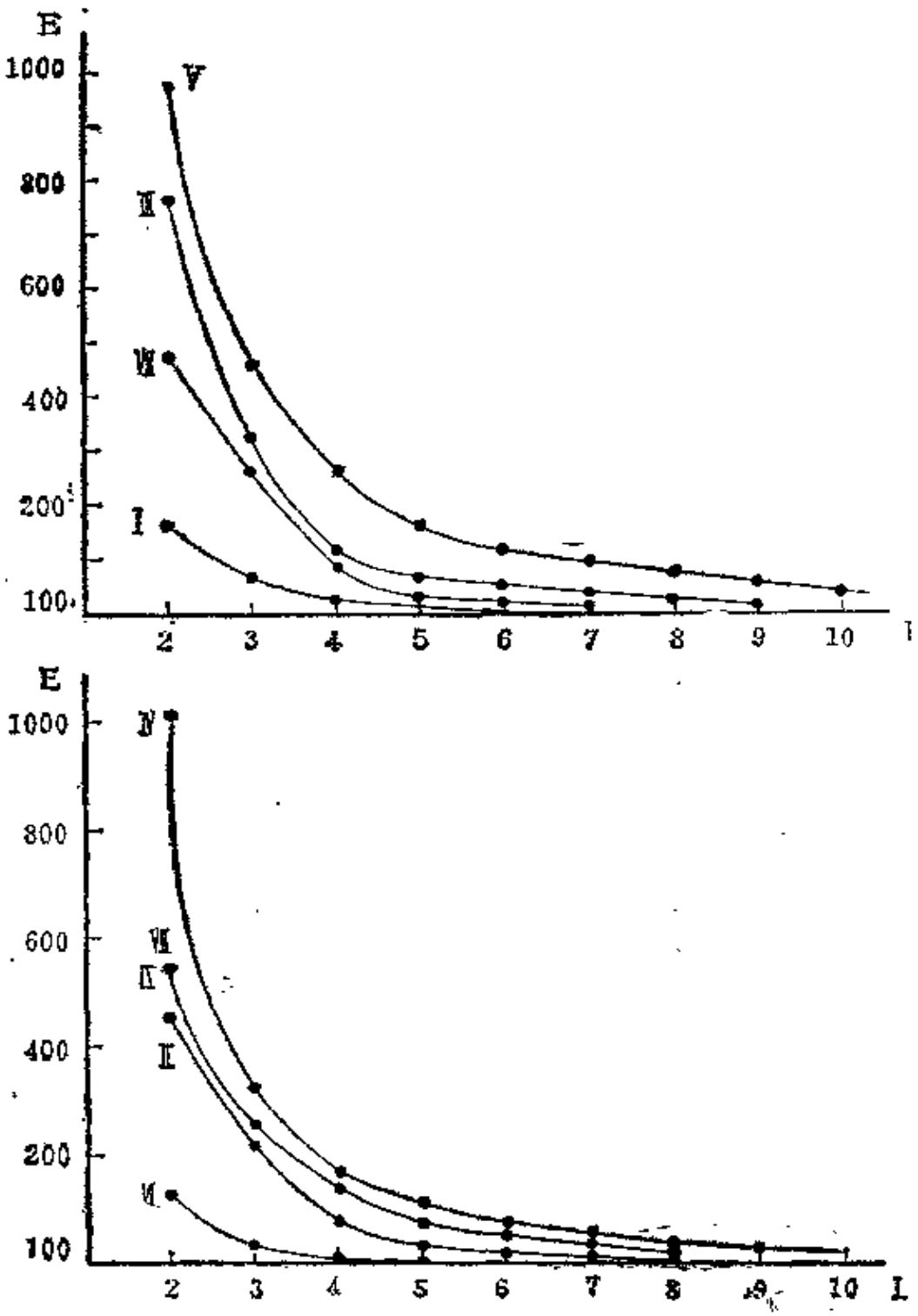


图 2-4-2 最小误差函数(E)对分组数(L)图

(曲线Ⅷ很靠近曲线V从略)

误差函数，确定最佳分组数采用最小误差函数(E)对分组数(L)作图。为作图方便，将最小误差函数扩大1000倍(图2-4-2)。曲线开始单调下降，尔后变缓，出现拐点。与拐点对应的组数即理想的分组数。当拐点不明显时，以曲线变缓，最小误差函数变化极小时所对应的分组数最佳。当然不论采用哪一种方法都必须结合地质情况。华南不同构造区花岗岩年龄值理想分组数见表2-4-3。

表 2-4-3 据根最小误差函数选出的理想分组数

构造区	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX
组数	3	5	6	6	7	4	5	5	5

下面我们来分析各区的分组情况：

I 皖南修水沅水加里东边缘地槽区，分三组：110—127Ma、135—176Ma和210—270Ma，分别相当于燕山晚期、燕山早期及印支期花岗岩；

II 江南地背斜带，分五组：90—176Ma、198—294Ma、346—509Ma、780—913Ma和1350—1450Ma，分别相当于燕山期、海西-印支期、加里东期、雪峰期和东安期花岗岩；

III 湘桂粤北海西-印支拗陷区，分六组：74—114Ma、127—159Ma、163—185Ma、198—228Ma、246—278Ma和407—422Ma，分别相当于燕山期、海西-印支期、加里东期花岗岩，其中燕山期又分三个阶段；

IV 桂东南大瑶山-云开大山加里东隆起区（含钦州湾海西拗陷），分六组：90—125Ma、129—166Ma、201—236Ma、248—303Ma、346—412Ma及497Ma；

V 武夷-赣南后加里东隆起区，分七组：74—114Ma、126—158Ma、164—194Ma、196—238Ma、246—280Ma、348—422Ma和463—504Ma；

VI 浙西后加里东隆起区，分四组：小于107Ma、160—180Ma、194—226Ma、404—422Ma；

Ⅶ　闽西南-粤东南海西-印支拗陷，分五组：107—133Ma、140—176Ma、196—219Ma、248—277Ma、366—377Ma；

Ⅷ　粤东南燕山再生地槽，分五组：99—112Ma、124—132Ma、142—150Ma、157—165Ma及大于200Ma；

Ⅸ　浙闽粤沿海中生代活动带，分五组：52—82Ma、87—

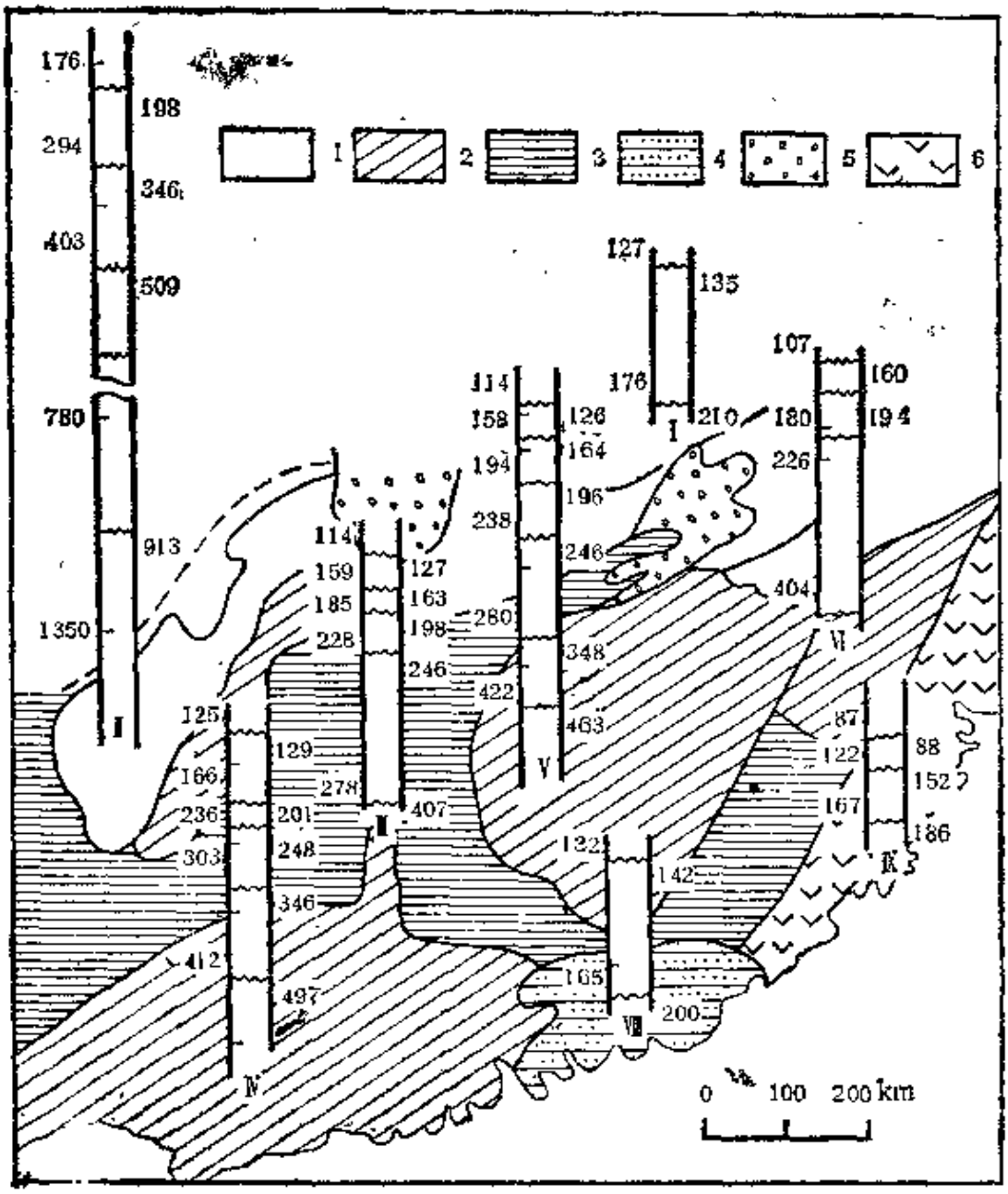


图 2-4-3　华南不同构造区花岗岩年龄值柱状图

1—江南地背斜带；2—后加里东隆起区；3—后印支隆起区；4—再生地槽形成的后燕山隆起；5—喜马拉雅期断陷盆地；6—火山断陷活动带形成的后燕山隆起。Ⅰ至Ⅸ的解释见正文

104Ma、106—122Ma、152—167Ma及186Ma。

上述结果，按九个构造区作年龄值柱状图（图2-4-3），柱侧数码代表分割点上下限的年龄值。比较这些年龄柱，可见：

（1）年龄值1350—1450Ma组相当于华南四堡群与板溪群之间的不整合，即东安运动，浙西称神功运动。相应的花岗岩为东安期花岗岩，主要分布在江南地背斜西段。

（2）年龄值780—913Ma组，相当于雪峰运动形成的雪峰期花岗岩，分布于江南地背斜内。

（3）年龄值 346—509Ma组，主要分布在后加里东隆起区，其中第一组年龄值大于422Ma，相当于发生在寒武纪末的郁南运动和中上奥陶纪之间的崇余运动所形成的加里东早期花岗岩；第二组，年龄值 346—422Ma，相当于造成泥盆系和前泥盆纪地层不整合的晚加里东运动所形成的加里东晚期花岗岩。对比不同构造区加里东花岗岩年龄值分割点，发现它们时间上不完全一致。这是由于华南加里东地槽褶皱回返隆起的形成和发展并非一个简单的过程，而是在不同地区，时间上有先后，强度上有差别的缘故。

2．晚古生代及中生代花岗岩年龄值的讨论

1976年以来，我国地质界应王联魁等倡议，就华南花岗岩的时代和分期问题进行过专门讨论。一致承认华南有七次主要造山运动，相应地形成七期花岗岩。但对印支期花岗岩年龄值的上限问题，意见尚不一致。

印支运动发生在早、中三叠世地层之间和晚三叠世与早侏罗世地层之间，是华南一次十分普遍和强烈的造山运动。伴随着这一造山运动所形成的花岗岩，在南岭西段最发育。关于印支运动的时间下限，国际年代表（1963）采用230Ma，有些作者根据地质证据和同位素年龄的相互验证资料，认为华南和东南亚的印支运动时间下限应为250Ma。胡受奚等（1979）在全面分析了国内外关于印支运动的时间上限，即J_1和T_3的时间界限的矛盾和不统一之后，根据地壳运动的延续性，各旋回之间不能截然分开，它

与燕山运动的时间间隔(T_3—J_1)仅相差2千万年等因素，认为印支期花岗岩完全可以拖曳，并过渡到与早期燕山运动有关的花岗岩形成过程中。另一个公认的事实是，燕山早期花岗岩形成的真正开始的时间应在早侏罗世末，因此，燕山期花岗岩的形成应在180—185Ma。

在我们的分析中，印支期花岗岩年龄值的下限，除在江南地背斜带与海西期花岗岩年龄值之间没有明显分割点外，在湘桂粤北海西-印支拗陷区，两者断在228和246Ma之间；桂东南大瑶山-云开大山加里东隆起区，两者断在236和248Ma之间；武夷赣南后加里东隆起区断在238和246 Ma之间；闽西南-粤东南海西-印支拗陷区两者断在219和248Ma之间。这些地区，海西期花岗岩的结束时间大致一样，约在246—248 Ma，而印支期花岗岩形成时间应在240Ma之后。

印支期花岗岩年龄值的时间上限，在皖南修水沅水加里东边缘地槽区，分割点落在176和210Ma之间，其间缺乏连续数据；江南地背斜带，分割点落在176和198Ma之间；湘桂粤北海西-印支拗陷区，分割点落在185和198Ma之间；桂东南大瑶山-云开大山加里东隆起区，分割点落在166和201Ma之间；武夷-赣南后加里东隆起区，分割点落在194和196Ma之间；浙西后加里东隆起区，分割点落在180和194Ma之间；闽西南-粤东南海西-印支拗陷区，分割点落在176和196Ma之间。从上述数据看，燕山期花岗岩形成于185Ma之后是无疑的。关于武夷-赣南后加里东隆起区分割点落在194和196Ma之间的情况，让我们分析一下该区180—196Ma之间的数据结构。这里共有27个年龄值，180—185Ma者占67%，186—190Ma者占29%，190—196Ma者只占4%，表明190—196Ma值是不连续的，与图2-4-1年龄值频率图结论一致。因此，印支期花岗岩年龄值上限可延至185—190Ma，180—185Ma是一个峰值，标志着燕山早期花岗岩广泛发育。

燕山期花岗岩通常分早、晚两期燕山早期与晚期花岗岩的时间界限定在J_3和K_1之间，即130Ma。我们这里分段的结果是：皖

南修水沅水加里东边缘地槽区，分割点落在127和135Ma之间；湘桂粤北海西-印支拗陷区，落在114和127Ma之间；桂东南大瑶山-云开大山加里东隆起区，落在125和129Ma之间；闽西南-粤东南海西印支拗陷区，落在133和140Ma之间；粤东南燕山再生地槽区，落在132和142Ma之间。总的看来，燕山早、晚两期花岗岩的年龄值分界值约在130Ma左右。

五、花岗岩年龄值的空间分布

世界许多地方发现花岗岩及其有关的火山岩的时空分布有一定规律。如智利北部和下加里福尼亚，花岗岩带由西向东迁移。我国华南地区，自元古代以来，花岗岩发生在一些与大区域构造线方向一致(NE)的若干相互平行的线状构造带内，并随着时间推后依次东移。

考虑到华南花岗岩的多期、多阶段特点，当用年龄值作趋势分析时，取主侵入体为代表。在有岩体出露地区大约每 100km²有一个控制点。

数据处理采用多项式不规则网格法趋势分析程序。年龄值的各次趋势面拟合度及F值见表2-4-4，从中可看出趋势分析的合理性。花岗岩年龄值的空间分布，可由趋势面分析结果看出。年龄值一次趋势面是一个平面，平面图上表现为一条直线，走向 40°16′，与华南主要构造线方向一致，反映岩体受构造控制限定于一定空

表 2-4-4　趋势面拟合度及F检验值

	一次趋势面	二次趋势面	三次趋势面	四次趋势面
拟合度	17.67	23.04	39.50	47.46
F_P临界值	31.12	6.67	19.26	8.43
F　值	31.12	17.18	20.53	17.94
走　向	40°16′			

间。

年龄值二次趋势图分解成两部分（图 2-4-4 A）：一部分是江南地背斜带，另一部分是后加里东隆起区，显示雪峰运动以后加里东旋回构造的基本轮廓。

东安期和雪峰期花岗岩类分布于江南地背斜带内，有两个活动中心，分别位于地背斜的东段和西段。西段的摩天岭和元宝山岩体呈南北向展布。东段的雪峰期花岗岩类受两种构造控制，一种分布在地背斜轴部，如九岭山二长花岗岩基；另一种岩体基本上沿着走向近东西向的断裂带分布，如休宁岩体和许村岩体。趋势等值线由地背斜西段的南北走向，向东转为北东东走向、正是上述情况的反映。

加里东地槽构造线方向是有变化的，由赣南大余-崇义向北，经宁冈至赣中永新-陈山-武功山一带，褶皱轴由南北走向逐渐变为北东东，甚至东西走向。武夷山以东、闽西、闽北、浙东构造线基本稳定在北东走向，在一系列与构造线方向一致的深大断裂中发育加里东早期花岗岩。趋势等值线的变化与区域构造线的空间变化完全一致。趋势等值线的连续性和相互平行，反映花岗岩随着时间的发展在空间分布上的顺序性。年龄值四次趋势图显示华南加里东运动之后的构造轮廓（图2-4-4 B）。南岭西段趋势线转向近东西向，这里恰是湘桂粤北海西-印支拗陷带，自南向北发育三个花岗岩带：（1）花山-姑婆山-连阳岩带；（2）麻江源-大东山-贵东岩带；（3）骑田岭-九峰岩带。这三个岩带属印支期，受北西西向基底大断裂控制，沿着这个断裂带，印支期花岗岩和加里东期及燕山期花岗岩形成复式岩体、分布在大容山、六万大山、十万大山一带的海西期花岗岩明显受北东向断裂控制，沿着断裂带形成加里东期和海西-印支期复式岩体，是华南海西期花岗岩最发育的一个地区。这里，年龄值四次趋势图上趋势等值线走向北东。

燕山期花岗岩，尤其是燕山晚期花岗岩，主要分布在政和-大埔断裂以东的沿海地区。

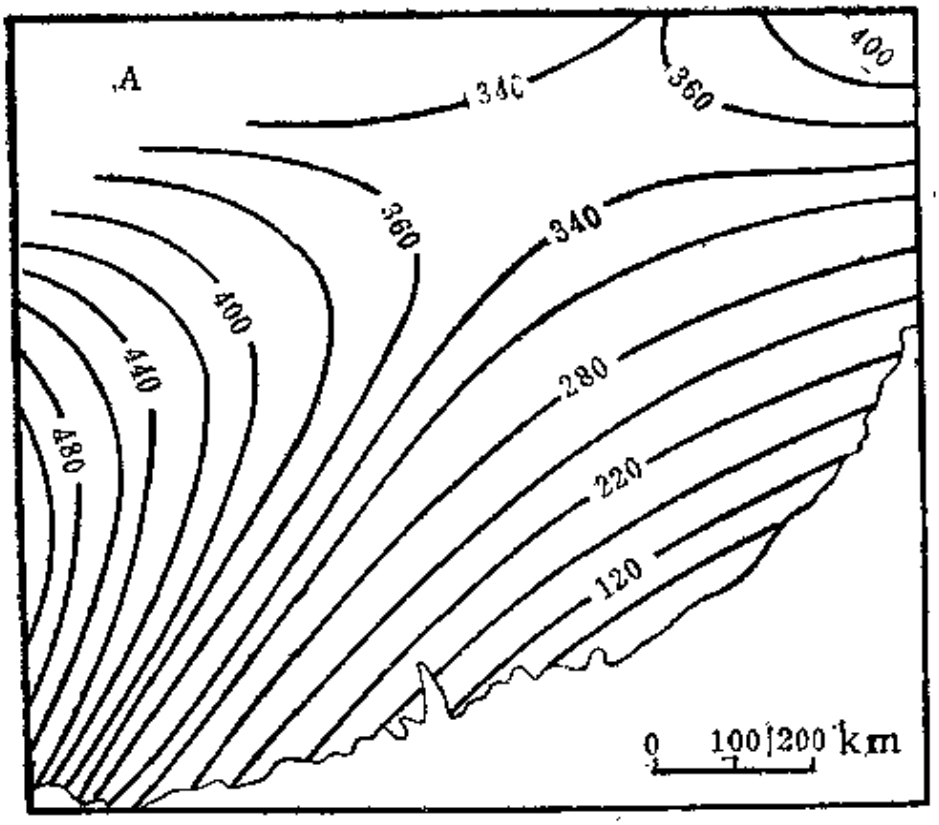


图 2-4-4A 华南花岗岩年龄值二次趋势图

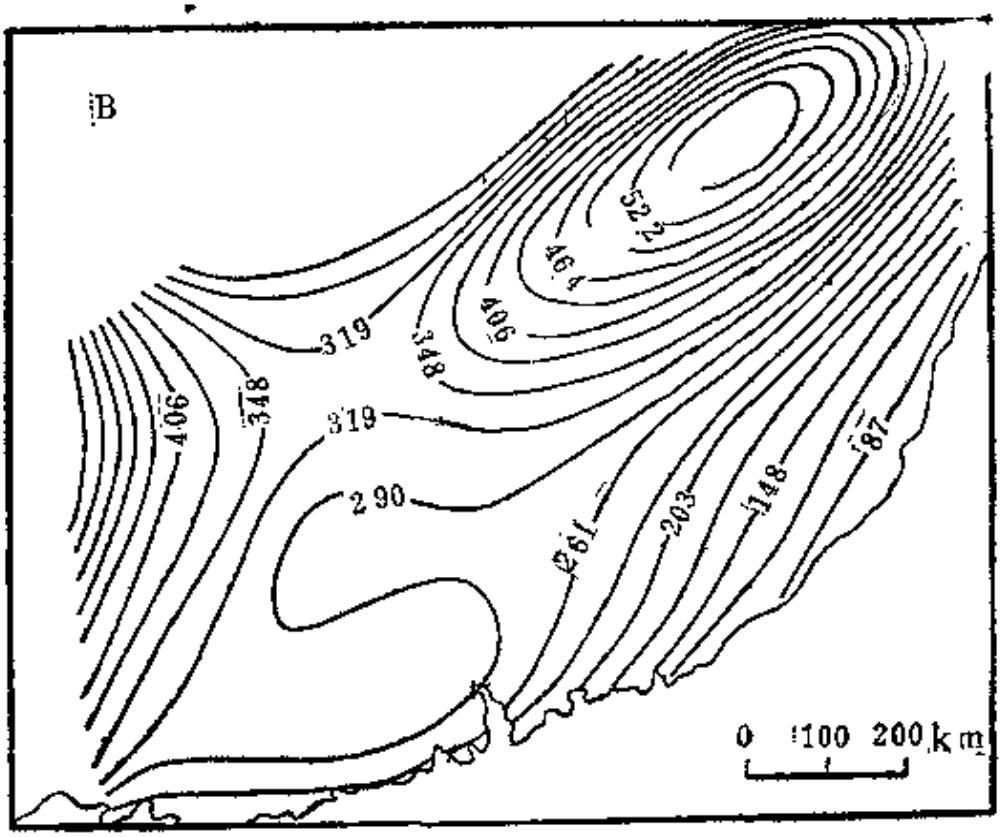


图 2-4-4B 华南花岗岩年龄值四次趋势图

从趋势图上可见，趋势等值线由西北向东南沿海方向年龄值依次降低。这也是大陆增生的一种反映。

花岗岩年龄值的最优分段和趋势分析结果，直观地数字化再现了华南不同时代花岗岩的时空分布，所得结果与地质事实一致。

六、华南不同时代花岗岩成分演化

华南不同时代花岗岩类，除发育于沿海断陷带及裂谷带中的某些燕山期花岗岩和部分印支期花岗岩是来自上地幔和下部地壳同熔产物外，大陆内部的绝大多数岩体，就形成花岗岩的物质源区而论，以陆壳为主。随着构造运动的多次发生，在有利的地段不仅可以有新岩体发生，而且先存的岩体也会受到影响，故而不同时代花岗岩应具有演变发展关系。

在同一大构造区内，同一时代的花岗岩类所处的地质背景，有许多共同之处。但随着时代由老到新的发展，主要造岩矿物含量有如下规律变化。

花岗岩中石英含量，反映岩石SiO_2含量。自雪峰期（江南地背斜东段）经加里东早期，加里东晚期，海西-印支期至燕山晚期（不含沿海断陷带），花岗岩中石英含量由30.79%→29.60%→26.27%→27.10%→29.56%至31.70%。由加里东晚期开始，石英含量逐增步高。雪峰期和加里东早期花岗岩中，石英含量高的原因在于这两个古老的花岗岩中混合岩占了很大比重，统计分析时只考虑了混合岩化程度较高部分，故而石英含量偏高，如果将混合岩化程度较低的混合岩也考虑估计的话，石英含量必定下降。排除上述干扰因素可见：时代愈新，花岗岩的演化愈彻底，岩石中石英含量越高，酸性程度增强。

钾长石含量变化也很明显，岩石时代由老至新，含量逐步增高：11.97%→35.22%→26.86%→32.41%→38.40%→39.35%。

斜长石的变化则相反，由老至新，含量逐步下降，自雪峰期起，变化顺序如下：35.95%→27.62%→34.71%→29.40%→26.06%→22.77%。

黑云母的变化是：岩石时代由老至新，云母含量为12%→6.61%→8.76%→6.9%→3.62%→4.44%。

上述各期花岗岩主要造岩矿物含量，除加里东早期花岗岩由于混合岩化不均匀产生偏差外，其他各期花岗岩明显呈现逐步演化趋势。相应地，不同时代花岗岩的化学成分，也有着十分明显的演化规律，表现在SiO_2随着时代的变新而增高；全碱在古老花岗岩中低于典型花岗岩的平均值，而在年轻花岗岩中则近于典型花岗岩平均值，总的趋势是钾、钠含量随着花岗时代变新而增加。如果用经典变异曲线图来同时表示多组份随时间的变化，是不可能的。而对应分析则可直观地反映华南不同时代花岗岩化学成分随年龄值变化的规律。

1．花岗岩成分随时间的变化

对取自华南有同位素年龄值岩体（绝大多数属陆壳改造型花岗岩）的187个样品，用年龄值(Ma)及岩体SiO_2、Na_2O、K_2O的平均值(重量%)为变量，进行对应分析，变量R型的主因子载荷列于表2-4-5.第一主因子(F_1)的方差贡献为51.77%，第二主因子(F_2)的方差贡献为36.78%，两者之和达88.55%，主因子F_1和F_2说明全部变量变化的88%以上。我们用这两个主因子进行地质解释。

表 2-4-5 主因子载荷表 ($N = 187$)

	K_2O	Na_2O	SiO_2	年 龄 值	方 差	累计方差(%)
F_1	−0.300	−1.246	−0.359	2.620	0.099	51.77
F_2	−0.288	4.847	−0.294	0.467	0.071	88.55
F_3	−1.116	−0.020	1.069	0.072	0.022	100

在第一主因子(F_1)上，按变量的因子载荷大小排列是Na_2O(−1.246)、SiO_2(−0.359)、K_2O(−0.30)、年龄值(2.620)，年龄值的载荷符号与Na_2O、SiO_2、K_2O的载荷符号相反，呈反消长关系，反映华南花岗岩随着时代由老到新，Na_2O、SiO_2、K_2O含量增加，反之亦然．第二主因子(F_2)上，各变量的因子载荷分

别是 Na_2O (4.847)、年龄值 (0.467)、K_2O (−0.288)、SiO_2 (−0.294)，年龄值与Na_2O的因子载荷符号相同，同步消长。这说明随着花岗岩年龄增加，花岗岩中斜长石含量增加，而年龄值与SiO_2、K_2O的反消长关系，则说明随着花岗岩变年轻 SiO_2、K_2O含量增加。因此，主因子F_1和主因子F_2都反映花岗岩的年龄值与成分的关系。

根据样品的Q型因子得分，将187个样品点投影到F_1对F_2对应因子载荷图上（图2-4-5），也可见不同时代花岗岩成分随着年龄值有规律地变化。古老花岗岩的投影点都落在F_1轴右端，年轻花岗岩的投影点则落在F_1轴左端，表明随着年龄值减小，花岗岩的SiO_2、K_2O、Na_2O的含量增高。对应因子得分图直观地反映出华南花岗岩由老至新钾质和硅酸趋于富集的规律。

2．不同时代花岗岩成分对比

根据华南不同时代花岗岩有代表性的 103 个岩体的平均化学成分，10 个氧化物：SiO_2、TiO_2、Al_2O_3、Fe_2O_3、FeO、MgO、CaO、Na_2O、K_2O及MnO，经对应分析计算所得的前四个主因子的变量载荷列子表 2-4-6。其中：第一主因子 F_1的方差贡献占总方差的53.39%，说明占全部变量变化一半以上；第二主因子F_2的方差贡献13.94%，前两个主因子的累计方差达67.33%；第三主因子方差9.23%，累计方差为76.56%；第四主因子方差7.7%，累计方差84.26%。

第一主因子F_1中，按变量的因子载荷大小可分两部分：因子载荷符号为正的变量有：SiO_2(1.222)、Na_2O (0.904)、K_2O (0.838)；因子载荷符号为负的变量有：MgO (−1.777)、FeO (−1.131)、CaO(−1.069)、TiO_2(−1.024)。其余变量的因子载荷较小，略而不计。前一组变量是组成花岗岩中石英和碱性长石族矿物的主要组份，表示岩石的酸性程度；后一组变量是组成暗色矿物的主要组份，表示花岗岩的基性程度。这两组变量的因子载荷符号相反，说明互为反消长关系。主因子 F_1 代表着花岗岩的分异演化作用，按变量因子载荷大小排列，由小至大依次为MgO—FeO

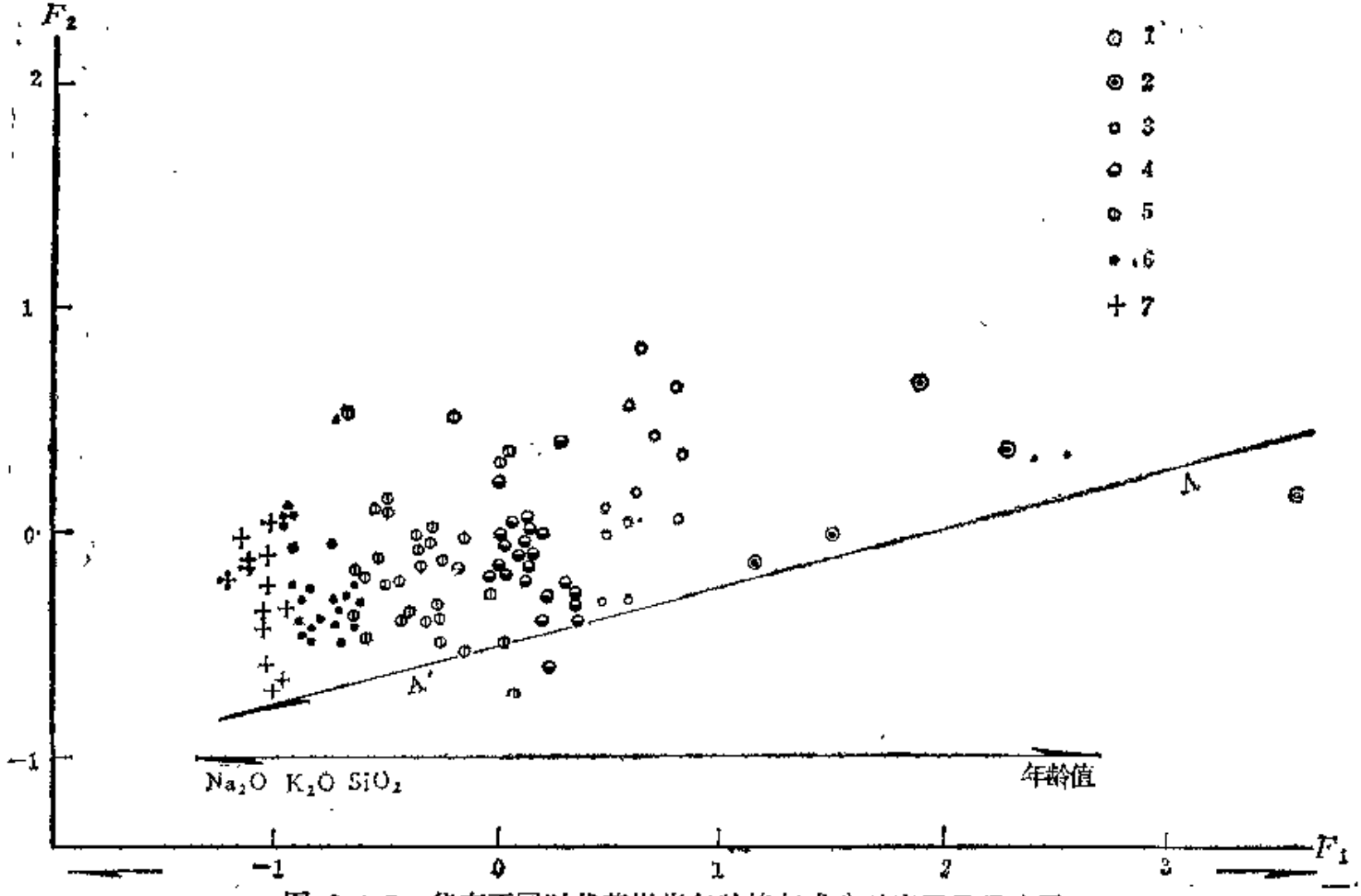


图 2-4-5　华南不同时代花岗岩年龄值与成分对应因子得分图

1-东安期花岗岩；2-雪峰期花岗岩；3-加里东早期花岗岩；4-加里东晚期花岗岩；5-海西-印支期花岗岩；6-燕山早期花岗岩；7—燕山晚期花岗岩

表 2-4-6 不同时代花岗岩R型分析结果

	F_1	F_2	F_3	F_4
SiO_2	1.222	0.036	−0.458	−0.072
TiO_2	−1.024	−0.592	−0.247	−0.862
Al_2O_3	−0.448	0.472	0.290	1.176
Fe_2O_3	0.328	−2.305	2.496	0.659
FeO	−1.131	0.220	−0.893	−0.999
MnO	0.160	3.889	3.370	−1.511
MgO	−1.777	0.025	−0.171	0.779
CaO	−1.069	0.020	0.082	0.638
Na_2O	0.904	0.649	−0.782	1.465
K_2O	0.838	−0.445	−0.166	−1.256
方 差	0.159	0.041	0.027	0.023
累计方差(%)	53.39	67.33	76.56	84.26

$CaO—K_2O—Na_2O—SiO_2$，由基性向酸性演化。主因子 F_2 中负高载荷为 Fe_2O_3(−2.305)，正高载荷为FeO(0.220)、MnO(3.889)注1，因此主因子 F_2 代表花岗岩演化过程中氧化还原条件。主因子 F_3 具高载荷的变量是 Fe_2O_3(2.496) 和 FeO (−0.893)，其地质意义雷同 F_2。主因子 F_4 具高载荷的变量是 Al_2O_3(1.176)和 Na_2O(1.465)，K_2O(−1.256)代表长石的演化，FeO(−0.999)和 MgO(0.779)的反消长关系反映黑云母中铁、镁的类质同象替代。

取 F_1 对 F_2 为坐标，将变量R型因子载荷及标本的Q型因子得分分别投影到图2-4-6中。10个变量（MnO位于 F_2 轴上端，图中未表示。）中，SiO_2、K_2O、Na_2O在 F_1 轴右端；FeO、MgO、CaO、TiO_2分布在 F_1 轴左端103件花岗岩Q型因子得分投影点中，东安期花岗岩和部分雪峰期花岗岩（分布于江南地背带东段）以富含FeO、MgO、CaO为特点（Ⅰ区）；加里东早期花岗岩以富 Al_2O_3 为特点，加里东晚期花岗以富 TiO_2 和氧化程度高为特征

注 1 MnO在岩石中含量较低，但由于以往分析中常缺该项分析，计算时将其当零输入，引起方差增大，载荷入为增大。其实在火成岩的化学分析中MnO的变化一般甚小，不足以反映地质作用的过程。

（Ⅱ区）；燕山期花岗岩的投影点大部分落在F_1轴右端，以富含SiO_2、K_2O、Na_2O为特点，海西-印支期花岗岩演化系列甚长，从中—酸性花岗岩类到酸性花岗岩均有。

不同时代花岗岩的对应因子载荷图反映了不同时代花岗岩成

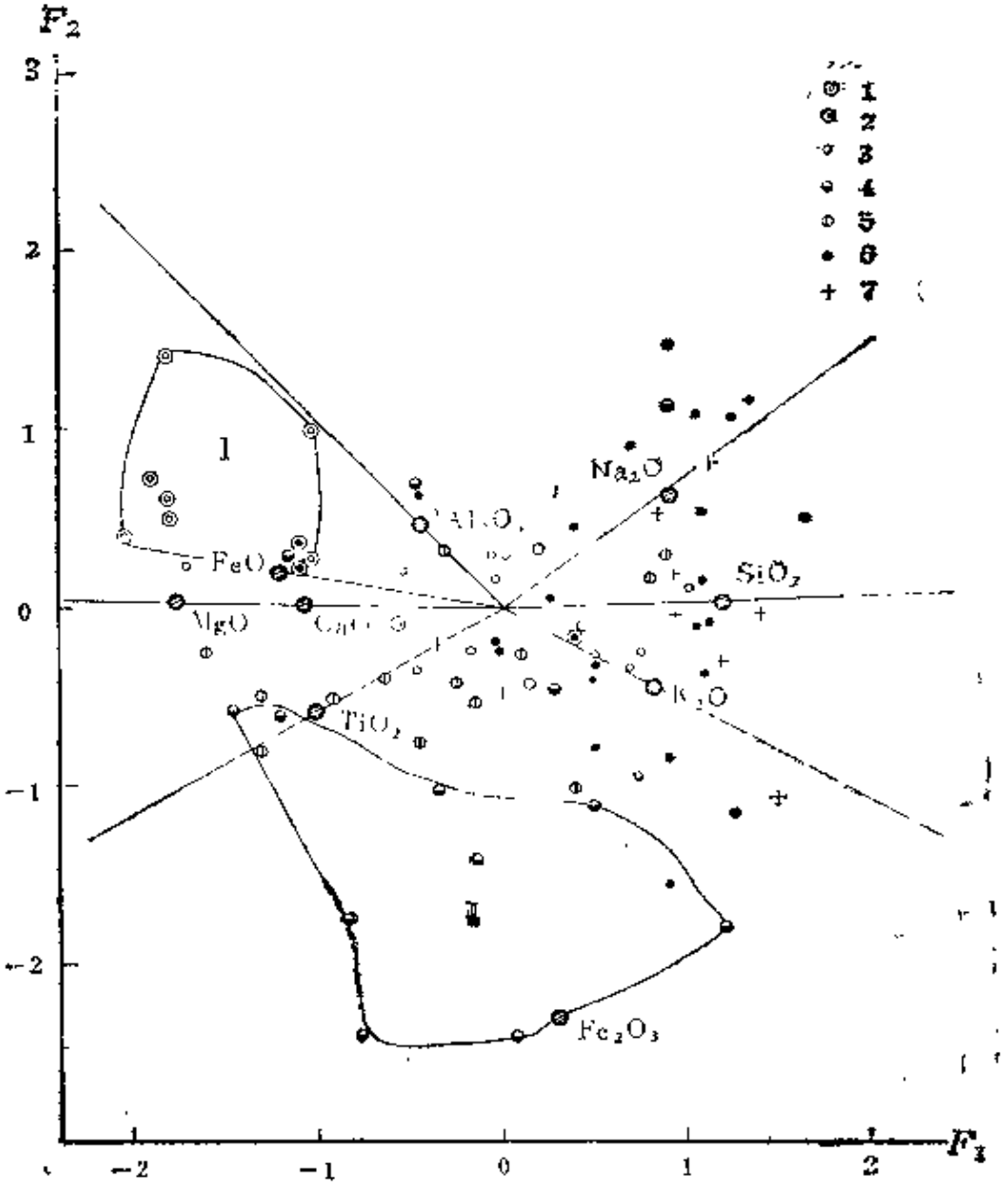


图 2-4-6　华南不同时代花岗岩化学成分对应因子载荷点聚图

1—东安期花岗岩；2—雪峰期花岗岩；
3—加里东早期花岗岩；4—加里东晚期花岗岩；
5—海西-印支期花岗岩；6—燕山早期花岗岩；
7—燕山晚期花岗岩

分特点和演化方向：由老至新，基性组份逐渐减小，酸性组份逐渐增多。

3．华南花岗岩SiO_2、K_2O、Na_2O的区域分布

华南花岗岩的成分和分布受三个因素控制：1)花岗岩的成因类型或成因系列；2)花岗岩的形成时代；3)花岗岩所处的大地构造单元或地质背景。对改造型花岗岩来说，除了花岗岩本身及其演化规律外，还应考虑花岗岩形成时被改造地层的源区性质。因此，不同时代和不同构造单元内花岗岩的成分有着明显的差别，表现在花岗岩成分随着时间演化在空间上有规律的分布。

传统的推求区域岩石化学成分分布的估算方法主要用算术平均法，或根据点观测值绘制等成分线。这两种方法简便，但平均值不能反映岩石化学成分区域性变化，用内插法勾绘的等成分线又受主观因素影响，都有缺点。实践表明，趋势等值线是个理想方法。趋势分析的目的是通过数学方法把地质数据分解，抛弃由随机变化引起的随机误差和由局部变化造成的异常，而提取受区域性因素制约的区域性变化趋势，并允许对未设观测点的地段用数学方法根据全区情况估算岩石化学成分。因此，趋势面分析与主观内插法相比有较大优越性，能反映岩石化学成分的空间分布规律。

这里用于趋势分析的原始数据采自华南各省1:20万区测报告。以岩体为单位，取SiO_2、K_2O、Na_2O平均值。在有岩体出露地带，大约每100km^{2}有一个控制点。参与讨论的岩体绝大多数属改造型。

数据处理采用多项式趋势分析程序，拟合度列于表2-4-7。从中可看出趋势面拟合度所决定的各次趋势分析的合理性。SiO_2、K_2O的高次拟合度达25.54%—24.18%，Na_2O的五次拟合度只有11.80%。这说明由于多次的碱质交代作用使不同时代(含不同成因)花岗岩化学成分变化不规则，其总体特征不易得到分离。尽管如此，趋势图还是显示出岩石化学成分区域性变化的某些规律。

表 2-4-7 趋势面拟合度

元素 / 趋势面次数	SiO_2	K_2O	Na_2O
1	7.48	8.65	1.89
2	19.45	10.17	3.41
3	20.31	22.49	4.04
4	25.54	24.18	10.00
5	34.56	33.26	11.80
一次趋势面走向	24°19′	46°27′	4°55′

SiO_2、K_2O 的一次趋势图的走向 NNE—NE，与华南主构造线方向一致。Na_2O的一次趋势线走向近 SN向，但拟合度甚低，不足以反映区域情况。

在对比SiO_2、K_2O、Na_2O趋势线的空间分布之前，有必要首先说明华南不同时代花岗岩的化学成分变化特征。加里东期以前的古老花岗岩主要分布在江南地背斜带的东西两段，西段有摩天岭、元宝山两岩基。东段有三个岩体：一是江西九岭山岩体，为一巨大岩基。另二个位于皖南休宁和歙县境内，即许村岩体和休宁岩体。由于江南地背斜带东西两段地质背景和发展历史很不相同，因而东西两部分岩体的岩性颇不一致。西段的摩天岭和元宝山岩体都呈长圆形，长轴方向呈近南北向，与区域构造线方向大致平行.从矿物和岩石化学成分看，这两个岩体均为普通花岗岩，含石英 30%左右，SiO_2 74.37%—74.52%，K_2O 4.18—4.69%，Na_2O 2.40—2.55%。江南地背斜带东段的三个岩体中，九岭山岩体为一岩基，NEE 方向延伸，与围岩构造线方向一致。岩体南部有各类混合岩出现，北部主要是二长花岗岩，平均含石英35%，SiO_2 68.53%、K_2O 3.51%、Na_2O 2.56%.休宁和许村岩体出露面积约100km² 或不足100km²，是小型岩基，岩性为二长花岗岩，含石英28.2%、$SiO_2$69.14%、K_2O3.72%、Na_2O38.4%.

加里东早期花岗岩多数属于区域性混合岩，分布于武夷-云开后加里东隆起带和赣南后加里东隆起北缘武功山地区。混合岩化作用在加里东早期花岗岩形成过程中起重要作用，混合岩化的原岩是前泥盆系地层：龙山群、建瓯群、上下板溪群。混合岩区主要集中在武夷-云开后加里东区，由东北向西南延伸，北自浙江龙泉，南经浙赣交界的武夷山区，再南延至粤桂交界的云开大山。这一带的混合花岗岩含石英20—38%，平均$SiO_2$71．57%、K_2O 4.21%、Na_2O 3.14%。加里东晚期花岗岩分布在所有加里东隆起区内，以普通花岗岩为主，少数岩体为花岗闪长岩和二长花岗岩，含石英25—35%，平均SiO_2 70.49%、K_2O 4.34%、Na_2O 2.76%。

海西-印支期花岗岩类主要分布在海西-印支拗陷带内。岩体多数为多期多阶段复式岩体，岩体的产出明显受断裂构造控制。南岭地区的三条印支期岩带及其北面的宏夏桥、板杉铺、张家坊等岩体都明显地受东西向断裂构造控制。这一期花岗岩，以普通花岗岩为主，往北则以稍偏中性的岩体为主。如湖南的宏夏桥、板杉铺、江西的张家坊、麦垄等岩体都是花岗闪长岩。这一期花岗岩的平均石英含量 35%、SiO_2 70.58%、K_2O 4.05%、Na_2O 3.04%。

华南燕山期花岗岩，尤其燕山早期花岗岩，分布最广的地带在政和-大埔深断裂以西，武夷-云开后加里东隆起区以东。燕山期花岗岩都与断裂活动有关。断裂方向主要有 NE、NEE、NW、EW 向。因而岩体的形态和分布也大致平行于这几组方向。这一期岩体的自变质作用和碱质交代作用比较发育，尤以白云母化、锂云母化、云英岩化和钠长石化等作用显著。本期岩体的岩石类型以普通花岗岩和超酸性花岗岩为主，部分有二长花岗岩，平均含SiO_2 73.25%、K_2O 4.75%、Na_2O 3.39%。

解上述不同时代花岗岩成分和分布的一般情况，有助于我们分析SiO_2、K_2O、Na_2O的趋势等值线分布。

（1） SiO_2的空间分布　图2-4-7给出SiO_2的二次趋势图(A)和四次趋势图(B)。根据趋势等值线的空间分布，可分三个区：

①江南地背斜西段有一SiO_2高值区，趋势线呈南北向延伸，反映摩天岭岩体和元宝山岩体的地质情况。②江南地背斜东段的等值线呈近东西向延伸，趋势等值线值比西段低，反映休宁、许村岩体花岗闪长岩的分布。图2-4-7的中心部位，相当于后印支隆起区处，为印支期花岗岩的主要分布区，趋势等值线呈东西向，SiO_2趋势值由南向北递减。这是因为南部的三条印支期花岗岩以黑云母花岗岩占优势，而向北，板沙铺、宏夏桥等岩体则以花岗闪长岩为主。③加里东期花岗岩主要见于武夷-赣南-云开大山一线，沿海地区则为燕山期花岗岩分布，这一带，SiO_2趋势等值线走向NE，趋势值在武夷山附近约为70%，向沿海方向逐渐增至74%，反映花岗岩由老至新，由内陆到沿海SiO_2呈递增的演化趋势。

（2）K_2O的空间分布　花岗岩中的K_2O主要来自被改造的地槽或拗陷带沉积物。由于钾有强的被吸附性以及与粘土矿物有强的结合能力，集中于粘土质沉积岩中。当这些富钾沉积物被改造或重熔形成花岗岩时，钾活化转移到花岗岩中，因而在花岗岩演化晚期，K_2O趋于富集。有下列地质证据　①华南褶皱区不同变质相的花岗岩类，从硅线石亚相花岗岩（高级角闪岩相）→堇青石亚相花岗岩（低级角闪岩相）→黑云母亚相花岗岩（高级绿片岩相）→浅变质相（低级绿片岩相）花岗岩至燕山早期花岗岩，其化学成分变化表现为：SiO_2含量逐步增高；K_2O和Na_2O的含量也逐步增高，并且随着变质程度的降低，K_2O增加的速度大于Na_2O；②不同时代花岗岩的平均成分及其换算的标准矿物在Or—Ab—An三角形投影图中，新的一期花岗岩依次叠置在老的一期花岗岩之上，并逐步向低温槽方向发展，表明不同时代花岗岩成分存在着继承和发展的关系。这种继承与发展在空间分布上表现为K_2O与SiO_2有同步消长关系，由内陆至沿海趋势值增高，趋势等值线呈NE向展布（图2-4-8）。此外，形成花岗岩的源区性质也起一定的控制作用。例如，在湘南、桂东北、粤北和湘中一带，上部古生代至早三叠世地层发育，碳酸盐、泥质碳酸盐及含煤建造等沉积物厚达5000m，大大影响了印支期花岗岩的成分。因此，

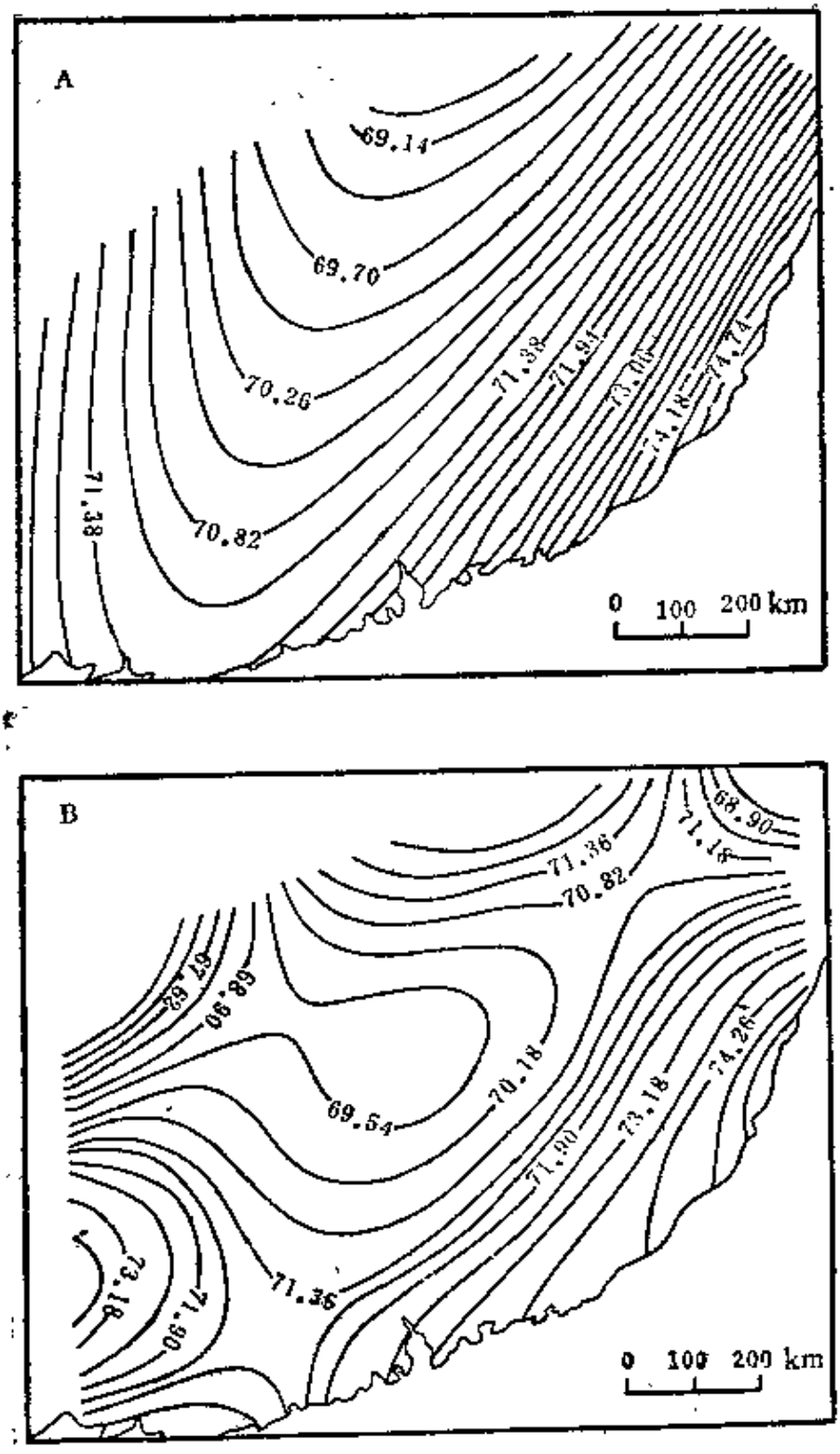


图 2-4-7 华南不同时代花岗岩SiO_2趋势图

A 二次趋势图；B 四次趋势图

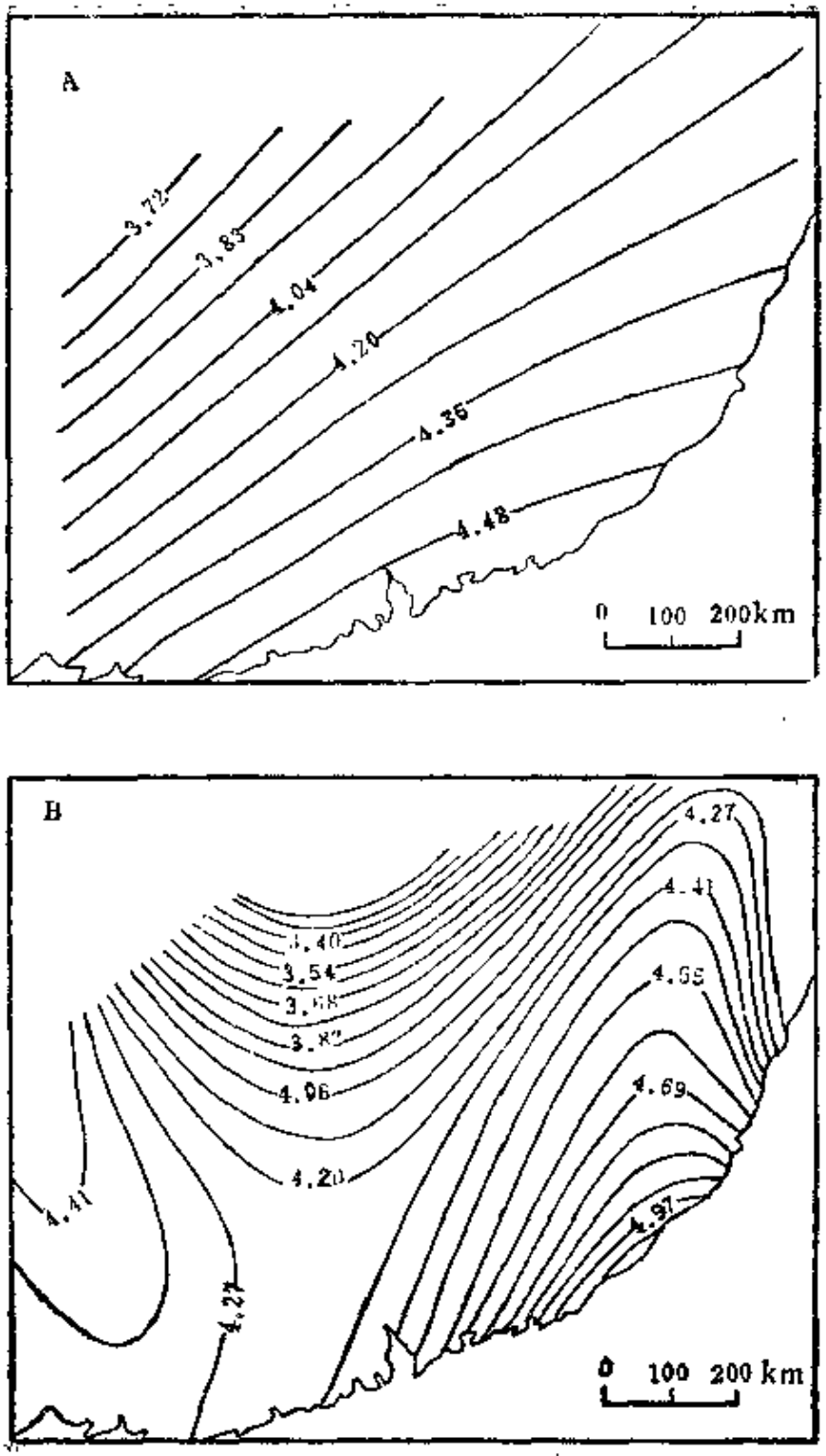


图 2-4-8 华南不同时代花岗岩K_2O趋势图

A 二次趋势图；B 四次趋势图

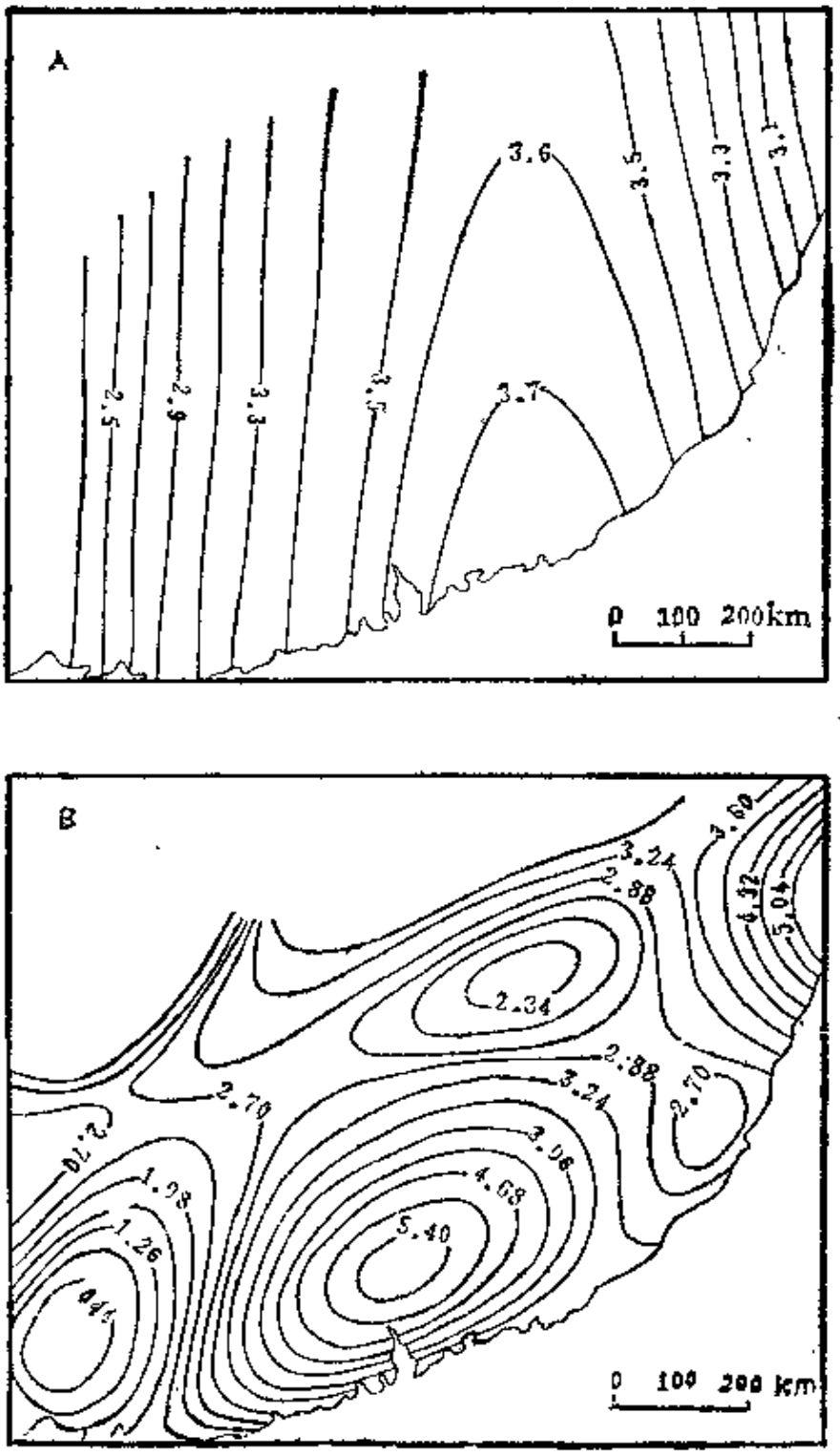


图 2-4-9 华南不同时代花岗岩Na_2O趋势图

A 二次趋势图；B 五次趋势图

SiO_2和K_2O趋势值在这一带偏低（图2-4-8B）。

（3） Na_2O的空间分布 Na_2O的各次趋势面的拟合度都不高。这也许由于钠长石化的影响不均匀，区域变化不规则所至。Na_2O的二次趋势等值线近南北方向(图2-4-9A)，五次趋势图(图2-4-9B)中，南岭地区有一个Na_2O的高值区，其长轴方向为NE，内圈的Na_2O趋势值为5.40%，向外递减。这使人联想到南岭地区是华南一个重要多金属矿化区，花岗岩中Na_2O的这种分布是否与成矿作用有直接关系，有待研究。

第五章　华南不同成因类型花岗岩的化学成分统计对比

本章试用岩石化学成分，借助相关分析、聚类分析、对应分析、因子分析等多元统计方法，讨论华南同熔型和改造型花岗岩的岩石化学特征和判别标志。

一、花岗岩成因类型

1．花岗岩成因类型与构造环境

花岗岩的成因是多样的。早在二十年代初期，翁文灏(1920)首先将我国华南与成矿有关的花岗岩类划分为两种类型：它们分别是长江中下游的偏中性花岗岩类，与铁铜矿床有关；及以南岭为代表的偏酸性花岗岩，与钨锡矿床有关。尔后，谢家荣(1936)曾分别称之为杨子式与香港式花岗岩。

七十年代以来，随着对花岗岩岩石化学和地球化学性质的深入了解，人们从成因角度把花岗岩类岩石划分为若干系列.澳大利亚的查佩尔等(Chappelle et al.，1974)根据形成花岗岩物质的源区性质不同提出划分为I型和S型花岗岩。I型(源区是火成岩)，成分上相当于黑云母-角闪石英云闪长岩组合；S型（源区为沉积岩)，广义上相当于二云母花岗岩组合。日本石原舜三(Ishihara，1977）根据氧化程度的差异把花岗岩划分为磁铁矿系列（Mt）和钛铁矿系列(Il)。南京大学地质系自1957年在华南发现不同时代花岗岩之后，就逐步认识到我国东南部有三个成因系列的花岗岩存在。

①陆壳改造型花岗岩（Transformation type）由地槽沉积物经混合岩化、花岗岩化及重熔—再生作用反复改造而成。具有

面型分布特点，以正常花岗岩为主，缺少同源火山岩。

②过渡型地壳同熔型（Syntexis type） 由上地幔衍生物或下部地壳部分熔融所形成的岩浆侵入地槽或拗陷堆积物中，兼有混染而产生的一系列花岗岩，常伴有火山岩和次火山岩，呈带状分布，以花岗闪长岩—二长花岗岩组合为主。

③幔源型花岗岩(Mantle-derived type.) 一种钙碱性英云闪长岩，直接来源于上地幔并经岩浆分异而成，与超镁铁质岩石及基性火山岩有成因联系。

怀特(White)把另一种来自地幔以钠质为主的碱性花岗岩称A型。以含碱性角闪石、碱性辉石、星叶石为特征，见于地盾区或裂谷带，也是造山带最终深成活动的产物。

近年来，在讨论花岗质岩浆成因方面，对花岗岩的形成与地质背景的关系已有足够重视，认识到不同成因类型的花岗岩形成于特定的构造环境。按照皮切尔(Pitch,1983)意见，幔源型花岗岩形成于大洋岛弧；I 型形成于活动大陆边缘；与其鲜明对照 的是包括克拉通内和大陆碰撞褶皱带的过铝质花岗岩组合，即 S 型花岗岩；A 型花岗岩产于稳定了的褶皱带内以及克拉通膨胀—裂谷带。

研究花岗岩的成因类型和构造环境，对了解每一种花岗岩所伴生的金属元素富集有实际意义。例如含金斑岩铜矿与幔源型共生，含铜斑岩铜矿与I型共生，锡钨矿床与某些S型花岗岩共生，稀土元素同A型花岗岩有关等。

2．不同成因花岗岩在华南的分布

华南幔源型花岗岩 目前仅见于江南地背斜西南端——广西融水县本洞岩体和地背斜东端，即浙江西裘岩体。前者形成于东安期，后者属雪峰期，且与含金斑岩铜矿共生。幔源型花岗岩的主要特点：① 无 原 生钾长石，暗色矿物为普通角闪石、黑云 母、辉石。黑云母富镁，MF 值〔$Mg/(Mg+Fe^{3+}+Fe^{2+}+Mn)$〕一般为0.47—0.59；②副矿物中富含铬矿物；铬铁矿和铬铁尖晶石．岩石中铬含量范围216—80ppm，镍含量范围 48—26ppm；③常量

化学元素中SiO_2、MgO与分异指数DI呈线性关系，Na_2O/K_2O=2.17—2.24；④稀土元素中轻稀土大于重稀土，无铕的异常。

造山带环境下的两类花岗岩，同熔型和改造型，在华南广泛分布。前者见于政和-大埔断裂以东的沿海地区及内陆裂谷带；后者呈面型分布于华南内陆。

同熔型花岗岩　化学成分偏于中一酸性，有一系列分异产物，均属钙碱性岩系。钾长石为高温型。黑云母一般富镁，MF>0.38。尚含普通角闪石、磁铁矿和榍石；稀土矿物和放射性矿物少见。SiO_2变化范围较宽，K_2O/Na_2O=0.78—1.25，ANKC〔$Al_2O_3/(K_2O+Na_2O+CaO)$，分子数〕<1.05，过渡元素Cr平均15ppm Ni 13 ppm Rb/Sr<1，平均0.52，U<10ppm平均6.6ppm，F/Cl平均0.04，一般无铕异常，$^{87}Sr/^{86}Sr$=0.705—0.710。

改造型花岗岩　多偏于酸性和超酸性。SiO_2变化范围较窄。Al_2O_3含量较高，大多数属铝过饱和类型。以浅色二长花岗岩和黑云母花岗岩为主。含黑云母、白云母，有时有堇青石、红柱石、硅线石等高铝矿物。黑云母贫镁富铁，MF<0.36。此外尚有钛铁矿、独居石、石榴石。石榴石大部分是贵榴石—锰铝榴石，常具黑云母反应边，晶体形态不规则，呈嵌晶结构，其间充满了黑云母包体。石榴石核心一般富钙—锰质，向外趋于富镁—铁质。化学成分上K_2O/Na_2O=0.40—1.27，ANKC>1.05，过渡性元素Cr平均2ppm，Ni 1ppm，Rb/Sr>1，平均为5.7，U平均为13.6ppm，F/Cl平均为36.7。稀土中以铕具极强负异常为特征。$(^{87}Sr/^{86}Sr)_i$>0.710。

上述常量元素在鉴别花岗岩成因类型时是个有效的方法，也比较实用，但综合信息能力较差。下面试根据华南有地质证据的13个岩体、176件岩石硅酸盐全分析，用多元统计方法，重点讨论难度较大的同熔型和改造型花岗岩的化学区分方法。

二、参与统计的原始材料

参与统计的13个岩体的地质概况见表2-5-1。同熔型3个岩体71件硅酸盐全分析，改造型10个岩体105件硅酸盐全分析。经因子分析验证，MnO常给出极大方差，呈第一因子出现，P_2O_5也有类似情况，从而掩盖了其他常量元素的作用，因此剔除不用。Al_2O_3在地球化学性质上具双重性，一方面大量存在于钙长石分子中，显示同熔型特点；另一方面存在于富铝硅酸盐中，如堇青石、硅线石、红柱石、白云母等，显示出改造型特点。所以它在多元统计中提供的信息往往有交叉，不易分清。为清晰起见，加入组合变量Al′(Al′=Al−K−Na−2Ca)，表示过剩铝。当Al′>0时，表示理论上岩石中有堇青石、白云母等存在；Al′<0表示全部铝进入长石组分或暗色矿物中。由火成岩源区形成的花岗岩与经过风化旋回由地槽沉积物形成的花岗岩间，在碱金属、Ca和Al，F^{2+}和Fe^{3+}方面肯定有根本性差别，因此选择SiO_2、TiO_2、Al_2O_3、Fe_2O_3、FeO、MgO、CaO、Na_2O、K_2O、Al′共计10项来讨论两类花岗岩的差别。

三、两类花岗岩岩石化学基本特征

1．统计估计量

华南两类花岗岩各氧化物的平均含量$\bar{x}$，标准差s，变异系数Cv列于表2-5-2。为了衡量平均值$\bar{x}$在置信水平1−0.05=0.95时的误差，引进λ值。使用分散率$F(F=s_1/s_2$方差比)估算两类花岗岩之间的分散水平.这些参数表明，同熔型花岗岩中SiO_2、FeO、Fe_2O_3、CaO、Na_2O等氧化物的变化范围比改造型花岗岩大，尤其是SiO_2。反映出同熔型花岗岩演化系列长；而Al_2O_3、K_2O则是在改造型花岗岩中变化幅度大这，与其源区性质有关.根据信

表 2-5-1 岩体名称及地质概况表

	岩体名称	岩石化学数据序号	岩石组合	区域构造部位	时代	$(^{87}Sr/^{86}Sr)i$
同熔型	1. 浙江桐庐次火山花岗岩侵入杂岩	1—25	石英二长岩，石英二长闪长岩，石英二长斑岩，二长花岗斑岩	钱塘江海西·印支拗陷	燕山早期 169Ma年	0.706
	2. 福建钟腾次火山侵入杂岩	26—60	石英闪长岩，花岗闪长岩 石英二长岩，辉石闪长岩	闽粤沿海中生代火山活动带	燕山早期 101.9Ma年	0.704
	3. 德兴城门山与斑岩铜矿有关小侵入体	61—71	花岗闪长斑岩，二长花岗斑岩	浙西后加里东隆起	燕山早期	
改造型	4. 江西葱竹岩体	72—75	英云闪长岩	武夷山后加里东隆起	加里东早期 477Ma年	
	5. 福建桂洋岩体	76—80	片麻状花岗岩	闽西南—粤东南海西印支拗陷	印支期 201Ma年	
	6. 广西北流岩体	81—85	混合花岗岩	云开大山—大瑶山后加里东隆起	加里东早期	
	7. 广东罗定那逢岩体	86—99	混合花岗岩	云开大山—大瑶山后加里东隆起	加里东早期	
	8. 江西武功山岩体	100—107	混合花岗岩	武夷山后加里东隆起	加里东早期 422Ma年	
	9. 海南占县岩体	108—113	片麻状花岗岩	闽西南—粤东南海西-印支拗陷	海西期 249Ma年	
	10. 海南抱板岩体	114—124	混合花岗岩	闽西南—粤东南海西·印支拗陷	加里东早期	
	11. 广西摩天岭岩体	125—149	片麻状花岗岩	江南地背斜	雪峰期	0.735①
	12. 广西元宝山岩体	150—158	花岗岩	江南地背斜	雪峰期	
	13. 湖南邓埠仙岩体	159—176	斑状花岗岩		燕山早期	0.723—0.736

① 北京第三研究所，1976，同位素年龄资料集，第三集。

表 2-5-2 华南两类花岗岩平均成分

	同熔型 $N=71$				改造型 $N=105$				$F=s_1/s_2$
	$\bar{x}$	λ	s	Cv	$\bar{x}$	λ	s	Cv	
SiO_2	63.34	0.98	4.21	28.33	72.33	0.58	3.07	4.24	1.88
TiO_2	0.68	0.05	0.22	7.35	0.28	0.04	0.20	1.42	1.21
Al_2O_3	15.27	0.12	1.03	6.87	13.90	0.21	1.12	8.06	0.85
Fe_2O_3	2.11	0.26	1.11	59.24	0.86	0.14	0.72	83.72	2.37
FeO	3.30	0.26	1.12	38.18	2.27	0.23	1.20	53.30	2.50
MgO	1.90	0.20	0.86	40.00	0.79	0.11	0.60	75.95	3.48
CaO	3.95	0.33	1.40	49.62	1.33	0.20	1.08	81.20	1.20
Na_2O	3.31	0.10	0.43	5.74	2.78	0.07	0.34	12.23	1.54
K_2O	3.78	0.18	0.79	16.75	4.13	0.20	1.05	25.42	0.59

度95%的概率及分散率F看出，两类花岗岩化学成分不交可叉，辨性清楚。

2．元素相互关系

估算花岗岩元素含量间的相互关系，使用成对元素相关系数（表2-5-3）。元素相关系数表明，同熔型花岗岩的SiO_2与K_2O有较强的正相关，$R_{SiO_2—K_2O}=0.78$，而与TiO_2、MgO、CaO、Al_2O_3则有强负相关。镁铁质组分和硅酸或碱质互为消长关系是同熔型岩浆分异作用的结果。改造型花岗岩中 SiO_2 与 K_2O 呈弱正相关，$R_{SiO_2-K_2O}=0.32$，与TiO_2、FeO、MgO、CaO 虽也呈负相关，但

表 2-5-3　同熔型花岗岩氧化物相关系数

	SiO_2	TiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	FeO	MgO	CaO	Na_2O	K_2O
SiO_2	1.00	−0.82	−0.83	−0.60	−0.80	−0.88	−0.88	0.11	0.78
TiO_2		1.00	0.69	0.28	0.88	0.67	0.61	−0.01	−0.59
Al_2O_3			1.00	0.39	0.67	0.65	0.69	0.11	−0.60
Fe_2O_3				1.00	0.19	0.62	0.62	−0.15	−0.66
FeO					1.00	0.63	0.64	0.01	−0.63
MgO						1.00	0.90	−0.34	−0.73
CaO							1.00	−0.33	−0.75
Na_2O								1.00	−0.14
K_2O									1.00

改造型花岗岩氧化物相关系数

	SiO_2	TiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	FeO	MgO	CaO	Na_2O	K_2O
SiO_2	1.00	−0.74	−0.71	−0.18	−0.70	−0.70	−0.74	0.05	0.32
TiO_2		1.00	0.29	0.20	0.75	0.82	0.42	−0.36	−0.32
Al_2O_3			1.00	0.30	0.36	0.16	0.55	0.16	−0.26
Fe_2O_3				1.00	0.17	−0.11	0.08	−0.19	−0.19
FeO					1.00	0.75	0.35	−0.27	−0.50
MgO						1.00	0.40	−0.41	−0.27
CaO							1.00	0.16	−0.37
Na_2O								1.00	−0.22
K_2O									1.00

不及同熔型强。这反映陆壳改造过程中源区成分的多样变化，其岩浆分异作用造成组分分离不及同熔型强。

四、两类花岗岩的聚类

1．系统聚类分析

用 SiO_2、TiO_2、FeO、MgO 四个氧化物及组合参数A/′ 作变量，用相关系数作相似统计量，对176件花岗岩进行Q 型聚类分析。按标本间相关系数构成的谱系图（图2-5-1），两标本间相关系数越大说明标本间差异越小。

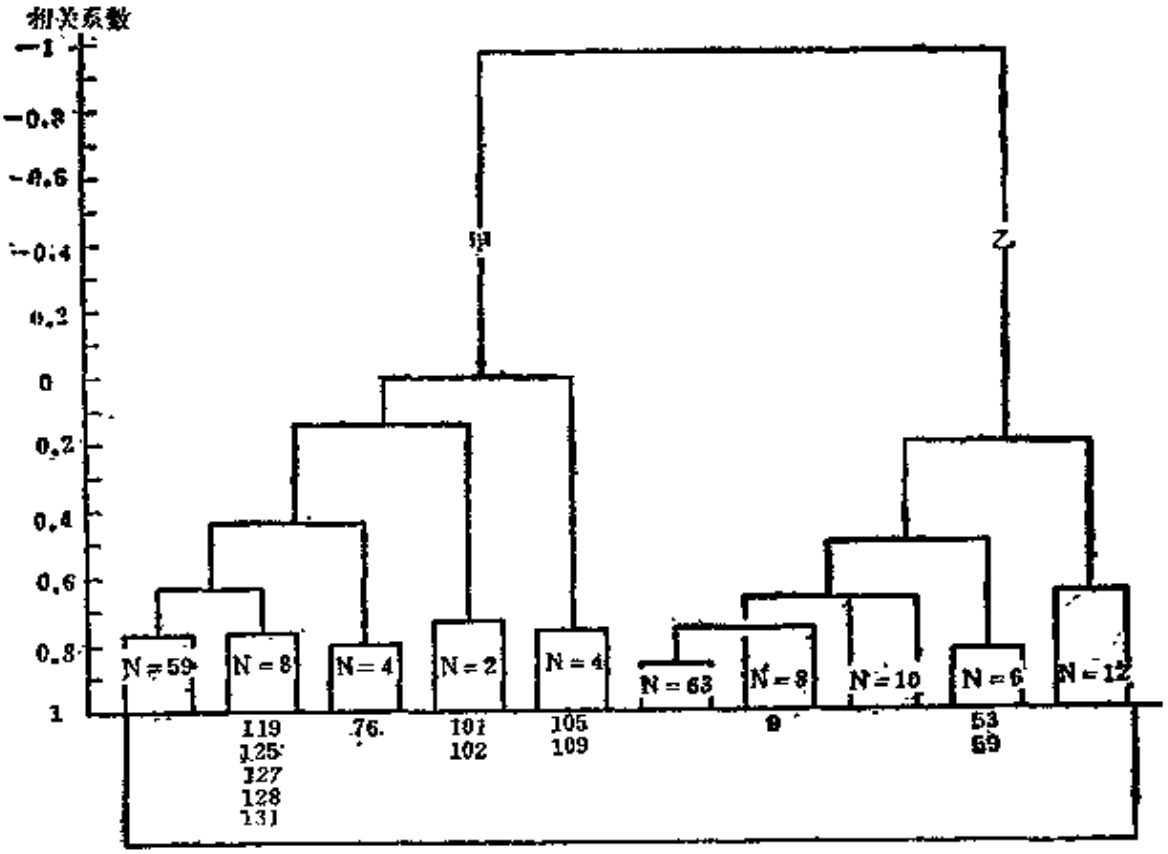


图 2-5-1　两类花岗岩Q型谱系图

横坐标下面的数码为错分标本编号

176件花岗岩标本明显地分成甲、乙两大群和若干亚群。甲群绝大多数标本属于同熔型。甲群又分五组：I 组59件标本，全部属同熔型，其相关系数绝大部分在0.8以上；II 组 8 件标本，彼此间也有较高的相关系数，其中 5 件是改造型（它们的样品号为119，125，

127,128,131)。此外，Ⅲ、Ⅳ、Ⅴ组的10件标本中也有5件属改造型(样品号为76，101，102，105，109)。后四组标本与全部由同熔型花岗岩组成的Ⅰ组的相关系数较低。乙群的绝大多数标本属于改造型，其中只混入3件同熔型标本(样品号为9，53．59)。如果增加变量Al_2O_3、Fe_2O_3、CaO、Na_2O和K_2O后重新计算，分类结果稍有改善。这时只有7件改造型花岗岩错分到甲群（同熔型）中，它们是武功山岩体的101、105号标本，海南占县岩体的109号标本，抱板岩体的119、120号标本，摩天岭岩体的127、128号标本。这7件标本的共同特点是SiO_2低，铁、镁、钙氧化物含量高，成分上相似于同熔型(表2-5-4)。这使我们注意到，在这些混合花岗岩出露地区，前寒武纪变质岩系中夹有巨厚的中—基性变质火山岩，或相当成分的火山碎屑岩（陆续已有报导)，它们的混合岩化或部分熔融，可能形成成分上介于同熔型和改造型之间的花岗岩类。这里，源区性质起了重要作用。另一方面，乙群中也有2件同熔型标本，它们是钟腾岩体的53、59号标体，其特点是SiO_2含量高，分别为69.9%和75.11%。钟腾岩体是一个从辉石闪长岩到花岗岩演化相当完善的次火山花岗岩体。这2件标本是这个演化系列的酸性端员代表，这表明同熔型花岗岩演化到晚阶段，随着上部陆壳组份不断混染，其化学成分也向

表 2-5-4　七件改造型花岗岩标本的成分

	SiO_2	FeO	MgO	CaO
101	66.59	1.53	1.72	4.60
105	70.27	2.97	0.53	3.02
109	70.37	2.90	0.92	3.12
119	68.65	4.70	0.97	2.32
120	67.00	2.36	0.89	2.24
127	66.44	4.78	1.67	3.67
128	66.50	4.97	2.00	4.20
同熔型均值	63.34	3.30	1.90	3.95
改造型均值	72.33	2.27	0.79	1.33

改造型花岗岩接近。

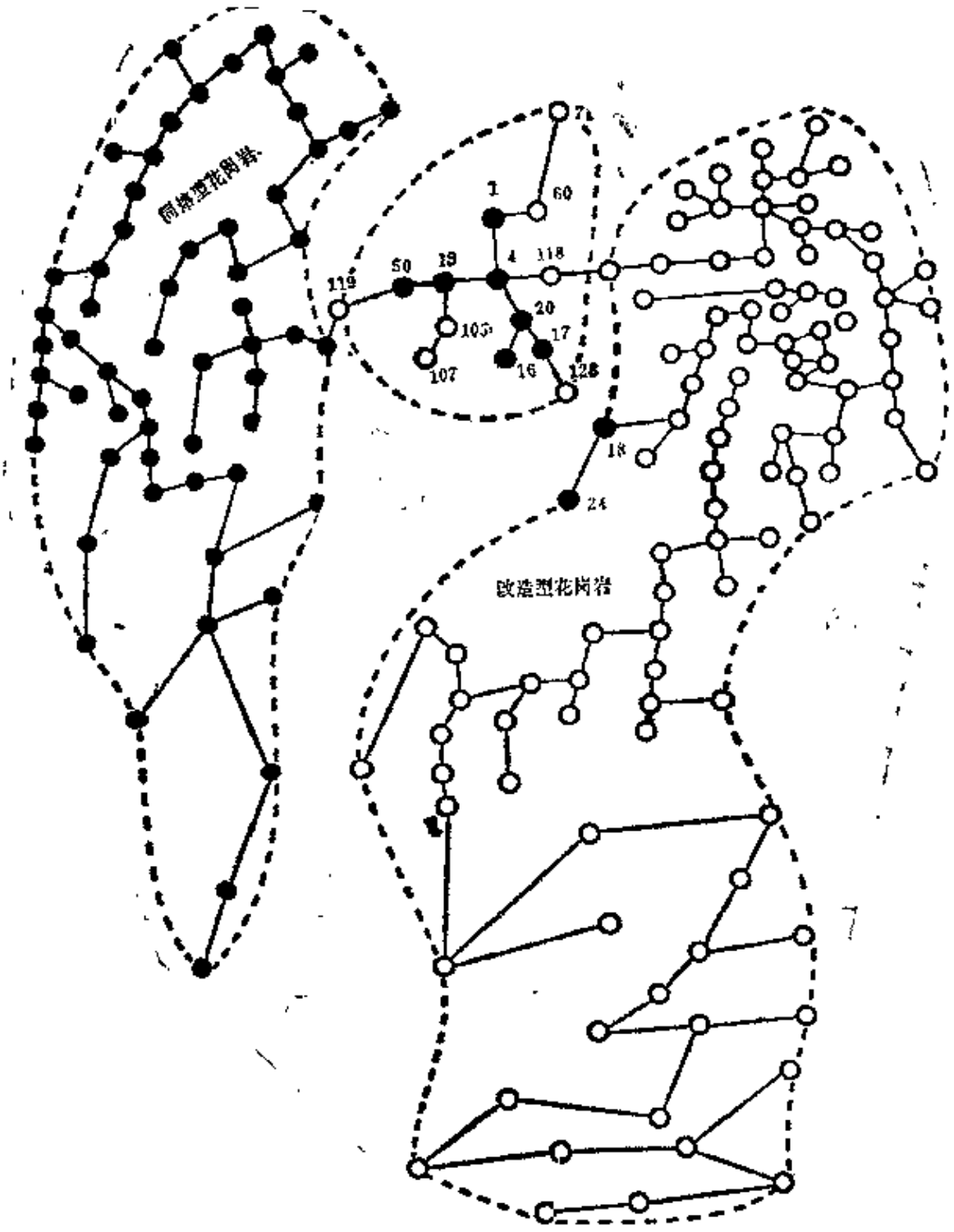


图 2-5-2　花岗岩标本最小支撑树

实心圆代表同熔型花岗岩，空心圆代表改造型花岗岩

2．花岗岩标本最小支撑树

图2-5-2是176件花岗岩标本的最小支撑树。标本点间的距离采用欧氏距离.这棵树上边长是按比例画的，只有直接相联接的标本点的距离才有几何意义。凡边长短的标本之间的成分更相似。由两个端点规定了支撑树的空间位置。凡被空白或低密度区隔开的连续高密区，可认为是一类，并由此得到标本点的自然聚类。

从这棵树上可直观地看到 176 件标本分成两大类。一类位于图 2-5-2 的左方，由59件标本聚成一类，全部是同熔型花岗岩。其中桐庐岩体、钟腾岩体各自聚在一起，且标本点间边长较短。德兴岩体标本点较分散，边长也大，说明其成分分散。另一类由改造型花岗岩组成，位于图右方，除样品号18、24属同熔型外，其余全部是改造型花岗岩。其中摩天岭岩体、元宝山岩体、邓埠仙岩体的标本点位于右上部，标本点间距短，它们大部分由陆壳重熔岩浆结晶而成，在上部陆壳出熔百分数接近时，造成它们成分相近，标本点间边长较短。下半部主要为占县、北流、抱板等混合花岗岩，它们多数与花岗岩化的交代作用有成因联系，由于交代彻底性程度不一，造成成分间变化较大，标本点之间边长也较长。和系统聚类一样，在同熔型和改造型两类之间，尚有14个过渡性标本 No1，4，16,17,19,20,50,60,71,105,107,118,119,128）它们的地质意义已在系统聚类中作了分析。

3．主分量分析结果

主分量分析与R型因子分析相似，也是从原始数据x'的相关矩阵或协方差矩阵$\boldsymbol{R}=(r_{jk})$出发，求$\boldsymbol{R}=(r_{jk})$的特征值λ和其对应的特征向量λ_k。可以证明，第k个主分量的系数向量对应于λ_k的特征向量，从而形成一组新变量。

$$y_{ik}=\sum_{j=1}^{m}p_{jk}x_{ij}$$

表示第 i 个样品的第 k 个主分量

176件标本的10个变量(SiO_2，TiO_2，Al_2O_3，Fe_2O_3，FeO，MgO，CaO，Na_2O，K_2O，Al'），通过主分量计算求得前三个特

征值与相应的特征向量，见表 2-5-5。显然，第一主分量已集中了原始数据方差的 98.51%，前二个主分量共集中了原始数据方差的99.8%，因而取前二个主分量点图，已经具有足够的代表性。

表 2-5-5 华南地区两类不同成因花岗岩十个变量计算的头三个特征向量及特征值

变 量	P_1	P_2	P_3
SiO_2	0.06240	-0.90858	0.00307
TiO_2	-0.00192	0.01590	0.05129
Al_2O_3	-0.00710	0.20975	-0.59014
Fe_2O_3	-0.00877	0.11231	-0.13761
FeO	-0.00320	0.17618	0.74140
MgO	-0.00606	0.14188	0.09224
CaO	-0.02510	0.22673	0.00374
Na_2O	-0.00852	-0.00632	-0.25991
K_2O	0.00087	-0.09337	0.66255
Al′	0.9976	0.06656	-0.00474
特 征 值	2179.4	28.4	1.39
特征值累计 %	98.51	99.8	99.86

主分量分析中，特征向量的每一个元素又称为“载荷”。由表2-5-5清楚看到，第一主分量中，Al′具有最大载荷；第二主分量中，SiO_2具有最大载荷；第三主分量最大载荷集中在FeO和K_2O上。这些结果与我们前面指出的表征不同成因花岗岩化学成分特点的主要要素是一致的。

在用前二个主分量所点的图上(图2-5-3)，同熔型和改造型花岗岩各自相聚而占据一定的域，两类花岗岩之间的界线是根据标本点的自然分布人工划定的。可以看出，用这条界线对华南两类不同成因花岗岩进行划分，其错分率仅2%左右，在总共176个样品中，只有三个原属于改造型花岗岩样品错落在同熔型域内，一个原属于同熔型样品错落在改造型域内。

应该指出，我们这里得到的表2-5-5和图2-5-3是有普遍意义的，即把待判的花岗岩分析数据，按照 $y_{ik}=\sum_{j=1}^{m} p_{jk}x_{ij}(k=1,2;$ $j=1,2,\cdots,10;\ i=1,2,\cdots,n)$公式，利用表2-5-5 中系数，即可求得第一、第二主分量坐标，再在图上投点，视所落的区域，即可确定它所属的成因类型。经用澳大利亚已知I型和S型花岗岩的化学分析数据，以及华南已证实属于改造型的广西大容山花岗岩和已证实属同熔型的皖南太平花岗闪长岩的化学分析数据共51件，用上述给出的主分量函数换算，均正确落在分界线两侧相应的域内，无一错判。

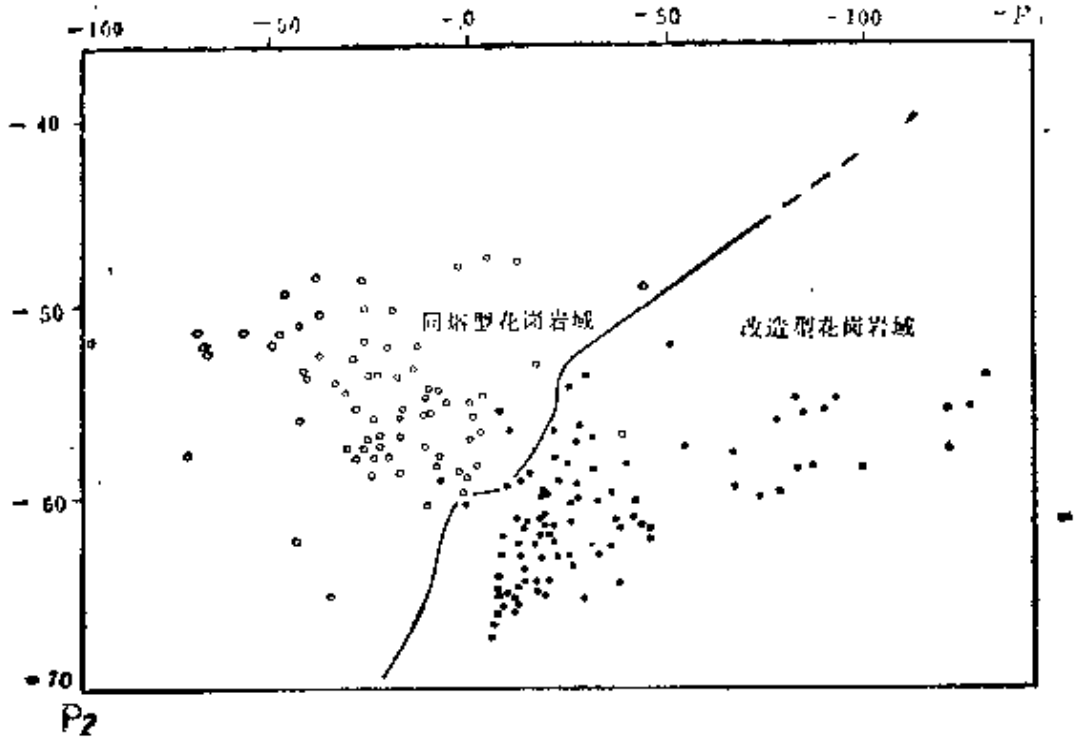


图 2-5-3 华南两类花岗岩化学成分主分量图

实心圆代表同熔型花岗岩，空心圆代表改造型花岗岩

五、化学成分提供的花岗岩源区的性质

关于两类花岗岩的形成过程，尤其是它们的源区性质，目前已有数种近似模型。这些模型主要是根据岩石性质、共生组合、

形成环境，并借助相图理论来推断的。这里，我们根据花岗岩主要元素组合讨论两类花岗岩源区性质及演化系列。

1．花岗岩主要元素共生组合一对应分析结果

图2-5-4给出两类花岗岩176件标本，10个变量的R型聚类谱系图。10种氧化物分成两大类，TiO_2、FeO、MgO之间的相关系数大于0.8，关系密切。CaO与上述三种氧化物的相关系数为0.7。从成因角度看，这四种元素（Ti，Fe，Mg，Ca）来自上地幔或下部地壳。组成暗色矿物和斜长石中An分子。而SiO_2、K_2O Al′三个元素组成一类。Al′多半来自地壳泥质沉积物，是改造型花岗岩中富铝矿物红柱石、堇青石、石榴石、白云母的组成部分，是上部地壳或地壳沉积物中的特征元素。这两类元素在花岗岩中的不同分布决定了两类花岗岩化学成分上的差异。表2-5-6给出对应分析R型主因子载荷。第一主因子F_1的方差贡献62.52%，第二主因子F_2的方差贡献13.51%，两者之和达76.04%；第三主因子方差贡献8.18%，累计之和为84.22%。因此，前三个主因子就足以反映花岗岩化学成分变化趋势。

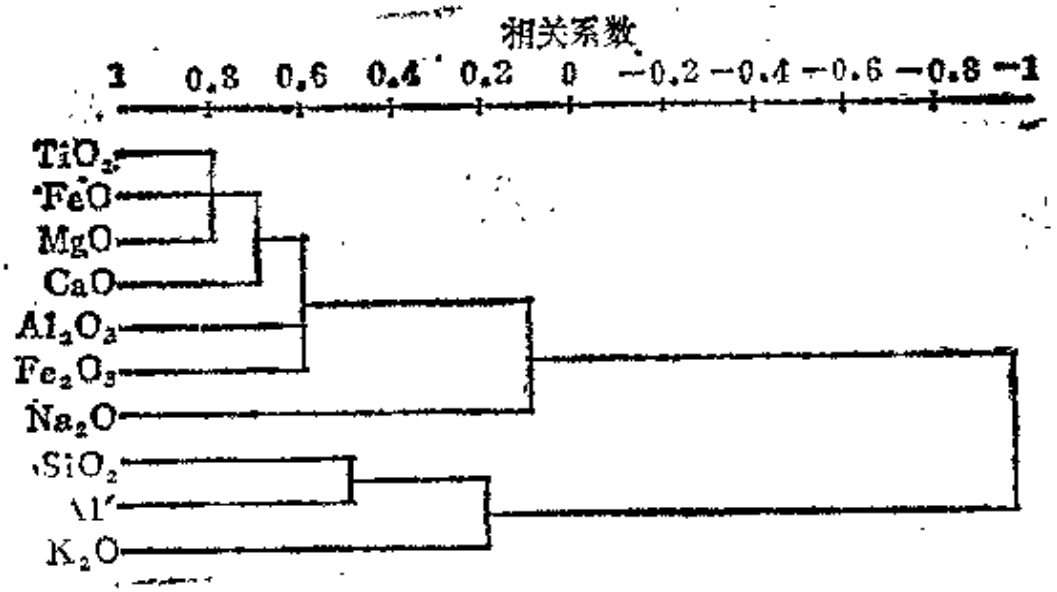


图 2-5-4 华南两类花岗岩R型谱系图

主因子F_1是花岗岩重要的成因和演化轴。F_1的负端具高载荷的变量有 TiO_2(−1.287)、CaO(−1.418)、MgO(−1.382)和

表 2-5-6 前五个因子及它们的方差贡献

因子 / 元素	F_1	F_2	F_3	F_4	F_5
SiO_2	1.321	0.026	−0.185	−0.003	−0.877
TiO_2	−1.287	−0.986	0.091	0.653	−0.135
Al_2O_3	−0.418	0.559	0.200	−1.327	2.046
Fe_2O_3	−0.013	2.129	−2.934	1.027	−0.577
FeO	−0.765	−1.897	0.434	0.244	−0.562
MgO	−1.382	−0.479	−9.773	−0.301	−0.738
CaO	−1.418	0.928	1.125	0.234	−0.025
Na_2O	0.311	0.912	1.039	−1.129	−1.119
K_2O	0.811	0.144	0.497	1.633	0.920
Al'	0.935	−1.280	−1.612	−1.209	0.737
方差贡献	0.134	0.029	0.018	0.012	0.008
累计方差贡献 (%)	62.516	76.043	84.219	89.699	93.382

FeO(−0.765)，这些反映地壳深部花岗岩源区化学成分特点，同熔型或I型花岗岩起源于地壳深部，富含铁镁组份，必然分布于F_1轴负端，并随着岩浆分异演化，其最终端员会逐渐向原点靠拢；F_1轴正端高载荷变量是 SiO_2(1.321)、Al'(0.935)和K_2O(0.811)，它们反映上部地壳花岗岩源区的化学成分特点——富硅、富钾、富铝.改造型花岗岩源于上部地壳，贫铁镁质而富硅、钾、铝.必然分布于F_1轴正端，并随着它们的演化越成熟，其最终端员逐渐背离原点移动。

主因子F_2正端突出的高载荷变量是 Fe_2O_3(2.129)，其负端高载荷变量是 FeO(−1.897)、Al'(−1.280)、TiO_2(−0.986)。这显然反映了花岗岩源区的氧化还原环境，并与于石原舜三以钛铁矿与磁铁矿系列所划分的矿物组合标志极为吻合。石原舜三认为，上部地壳的地层柱因含有大量碳质地层，它促使熔融时体系处于相对还原状态，其氧逸度低于发生在地壳深部的部分熔融体系。因此，同熔型花岗岩其铁钛矿物应该以磁铁矿为主，集中在F_2轴正端，而改造型花岗岩以钛铁矿为主，集中在F_2轴的负端。

我们认为，尽管 F_2 独立于F_1而存在，但F_2 的方差贡献明显小于 F_1。因此，在花岗岩成因分类中，F_2所反映的成因信息只能作为第二性标志加以考虑.不幸的是,石原舜三将它当作第一性标志，因此往往会出现许多例外。

主因子 F_3 正端高载荷是 CaO（1.125）和Na_2O（1.039），负端高载荷是 Fe_2O_3（−2.934）、Al′（−1.612）和(MgO−0.773)，后者似乎提供岩浆上升过程中的同化混染作用信息正端可能表示碳酸盐化和钠钙交代作用，负端代表铁镁质同化混染作用。

将 10 个变量按因子载荷投影到中F_1对 F_2 因子平面图（图2-5-5)，中可见MgO、CaO、FeO、TiO_2、Al_2O_3位于F_1轴左侧，SiO_2、K_2O、Al′ (Na_2O) 位于F_1轴右侧。当把 176 个标本的Q 型因于得分也投影到2-5-5 图中时，71 个同熔型花岗岩绝大部分标本落在F_1轴左侧MgO、CaO、FeO和 TiO_2投影点的四周，而105个改造型花岗岩的标本点则落在F_1轴右侧SiO_2、K_2O、Al′投影点的周围。已知对应因于平面图上，变量和标本有如下关系：

①邻近的变量点表示这些变量的关系密切，它们有成因上的联系，指示一特定的地质过程；

②每一个主因子轴代表一特定元素共生组合，反映特定成岩作用；

③相靠近的标本点具有相似的性质，它们有近乎共同的成分，可解释为属同一类型；

④同一类型的标本点由靠近它们的变量所表征。

按上述四条原则，我们根据地质情况和 176 个标本点在对应因子图上的分布，圈出同熔型花岗岩和改造型花岗岩的分布域，发现前者以富MgO、CaO、FeO、TiO_2 为特征，后者以富 SiO_2、K_2O、Al′为特征。由子改造型花岗岩形成的地质背景和混合岩化程度不尽相同，故而在因子平面图上投影点分散。这一信息单根据氧化物均值和标准差是反映不出来的。

2．广义对应分析结果

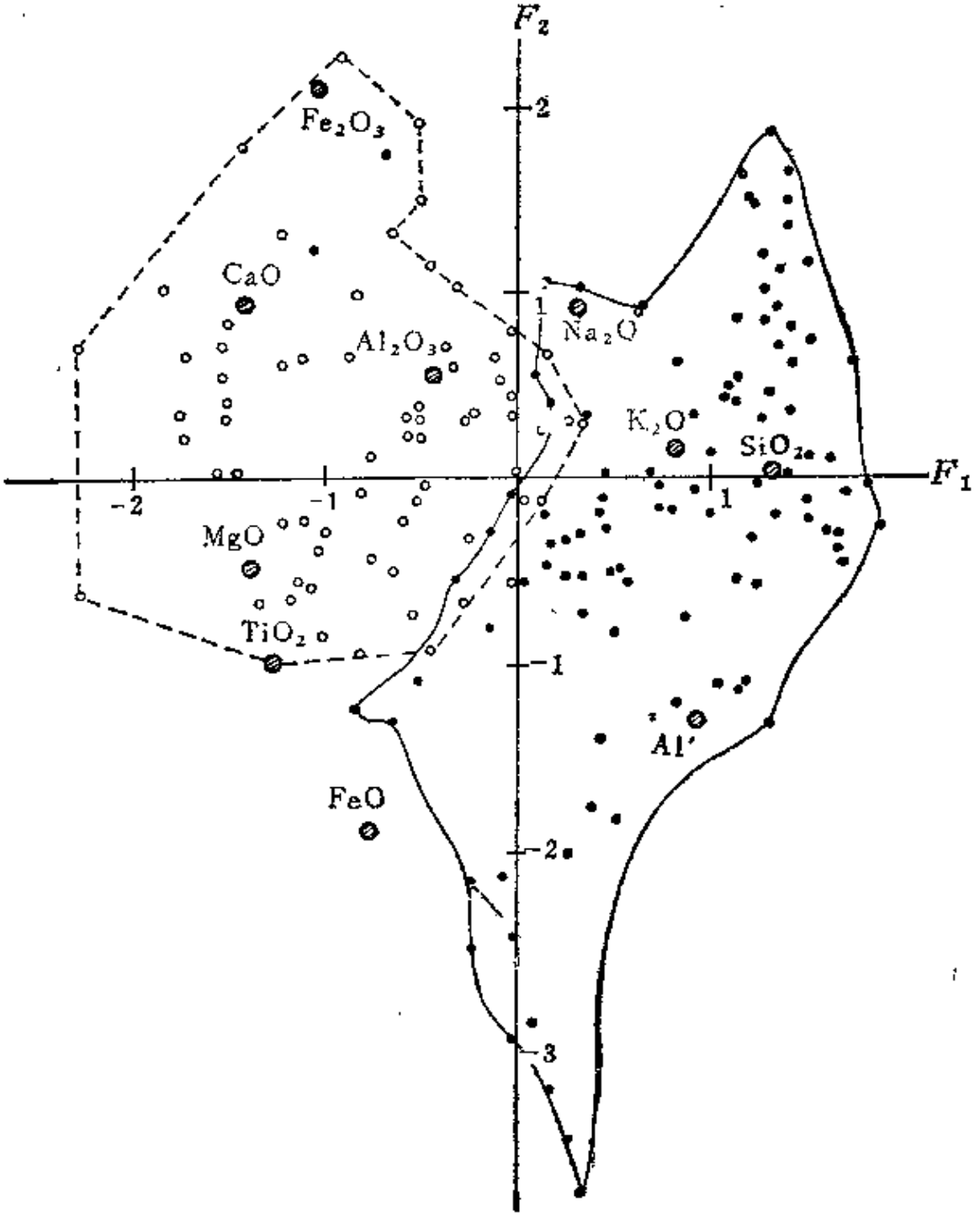


图 2-5-5　两类花岗岩化学成分对应因子平面图

白圈代表同熔型花岗岩；黑点代表改造型花岗岩

广义对应分析是在因子分析基础上，把随机变量用其概率统计的数字特征表示为向量或伪样品点，把R型与其对应的Q型统一起来，在同一因子空间综合研究变量、样品和主因子关系的一

种多元统计方法。

表2-5-7 给出10 个因子的特征值及其累计贡献率。从中可见前三个主因子的特征值累计贡献率达 79.81%。我们取前三 个主因子进行地质解释。表 2-5-8 给出华南两类花岗岩广义对应分析前三个主因子的特征向量。在F_1，F_2坐标下，两类花岗岩的分布域见图2-5-6。

表 2-5-7 主因F_i轴的累计贡献率

主 因 子	λ_i	$\lambda_i/\Sigma\lambda_k$	$\Sigma\lambda_i$	$\Sigma\lambda_i/\Sigma\lambda_k$
F_1	966.50	55.22	956.50	55.22
F_2	274.73	15.70	1241.20	70.92
F_3	155.40	8.90	1396.6	79.81
F_4	127.72	7.30	1520.3	87.10
F_5	100.40	5.74	1624.8	92.85
F_6	51.88	2.97	1676.7	95.81
F_7	39.40	2.26	1716.1	98.06
F_8	16.81	0.96	1732.9	99.02
F_9	13.11	0.74	1746.0	99.77
F_{10}	2.97	0.22	1749.9	100.00

表 2-5-8 前三个特征向量

	F_1	F_2	F_3
SiO_2	0.9715	−0.0170	−0.1205
TiO_2	−0.8863	−0.2322	0.1371
Al_2O_3	−0.7438	0.0734	−0.1628
Fe_2O_3	−0.6877	0.0869	0.0416
FeO	−0.7480	−0.4746	0.0881
MgO	−0.8430	−0.2536	−0.0275
CaO	−0.9279	0.1649	0.1445
Na_2O	−0.2419	0.8162	−0.3250
K_2O	0.5891	0.0997	0.7271
Al′	0.4936	−0.7140	−0.3725

与上一节对应分析结果一样，主因子 F_1 反映形成花岗岩源区性质，正端高载荷的变量为 SiO_2 (0.9715)、K_2O(0.5891)、Al′ (0.4936)，反映改造型花岗岩特点；负端具高载荷的变量依次是 CaO(−0.9279)、TiO_2(−0.8863)、MgO(−0.8430)、FeO(−0.7480)Fe_2O_3(−0.6877)，反映了同熔型花岗岩源区性质。尤其有意义的是，这里Na_2O(−0.2419)落到了同熔型花岗岩域，比对应分析更进一步符合两类花岗岩变量组合关系。

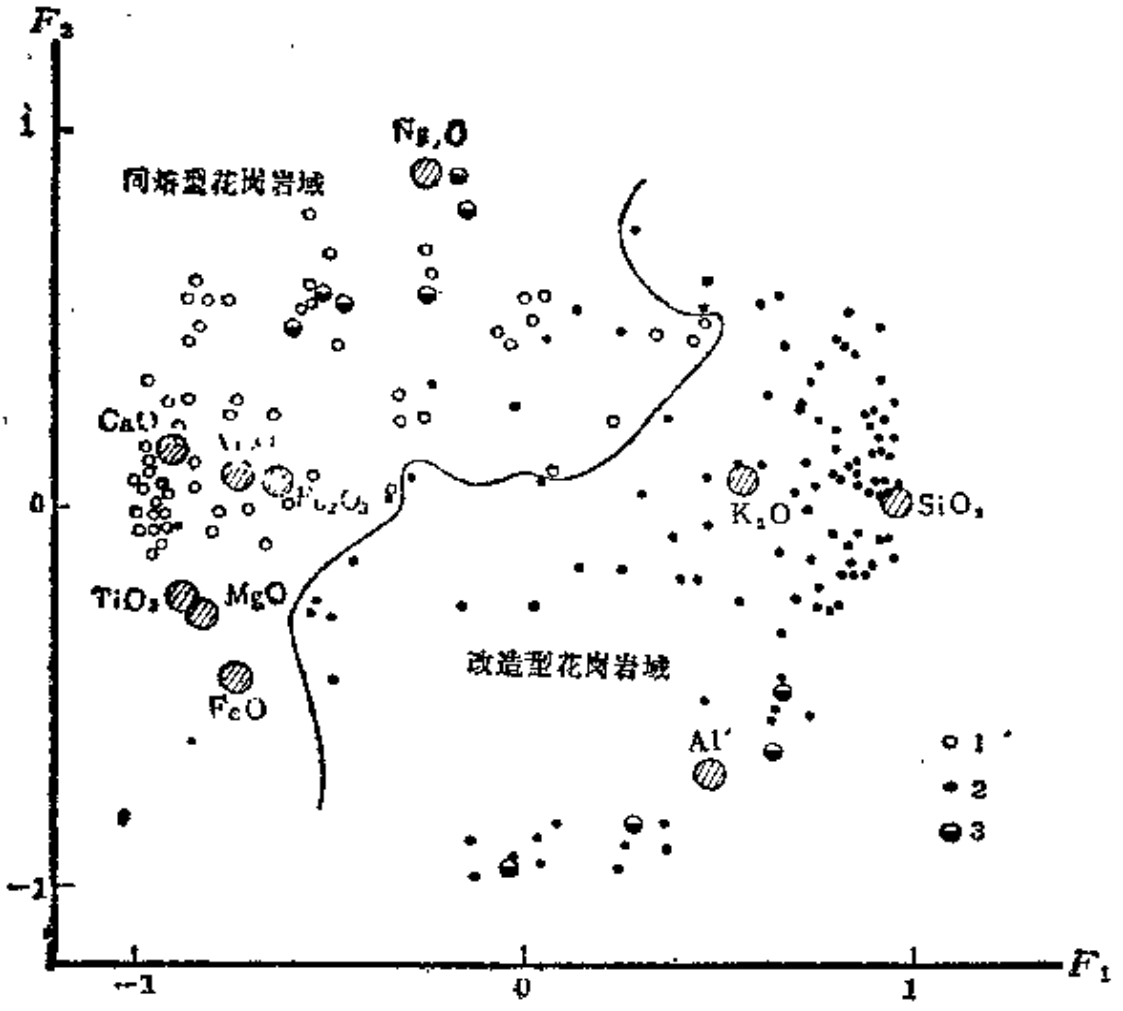


图 2-5-6　两类花岗岩在 $(\vec{0}, F_1, F_2)$ 坐标下主因子平面点聚图

1—同熔型花岗岩；2—改造型花岗岩；3—待判样品

通过上述一系列分析，可以看到如下几方面事实：

(1)　华南同熔型花岗岩和改造型花岗岩的化学成分基本上不交叉，差异明显，可辨性清晰。

(2) 同熔型花岗岩以富MgO、TiO_2、CaO为特征，其源区在地壳下部；改造型花岗岩以富SiO_2、K_2O、Al'为特征，其源区在地壳上部或地槽堆积物内。这些组份在各种因子分析中都位于第一主因子两端。应该把这些组份作为划分两种成因类型花岗岩的第一级标志。它反馈到矿物学上，表现为同熔型花岗岩铁镁矿物以含辉石（少量）、角闪石（少量）和富Mg的黑云母为主，以铁钛氧化物为主的副矿物含量相对高，浅色矿物中斜长石含量相对高，并随着岩浆演化斜长石中 An % 逐渐减少；改造型花岗岩的铁镁矿物以富铁的黑云母或铁叶云母为主，一般不含辉石或角闪石，有时含原生白云母或堇青石、石榴石等富铝硅酸盐矿物浅，色矿物中钾长石含量相对高。

(3) 两种成因花岗岩岩石化学因子分析中第二个因子是由Fe_2O_3、FeO (TiO_2)占据，呈反消长关系，反映形成花岗岩过程中的氧化还原环境，它反馈到矿物成分上说明同熔型花岗岩在高氧逸度下形成，铁呈三价态(Fe^{3+})，有利于磁铁矿形成，改造型花岗岩形成于低氧逸度的环境下，铁形成二价态，有利于钛铁矿的形成。这可作为两类花岗岩划分的第二级标志。

(4) 两类花岗岩中Na_2O与其他任何氧化物的关系都不密切在对应因于图上，Na_2O介于SiO_2、K_2O、Al'与TiO_2、MgO、FeO、CaO这两组氧化物之间.在广义对应因子图上，Na_2O更偏向同熔型花岗岩一侧，但仍保留其独立性。这表明在花岗岩形成过程中，有一部分Na_2O独自起作用。钠长石化在华南花岗岩中普遍存在，晚期晚阶段尤其发育。

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

本章试用黑云母化学成分和全岩稀土元素借助多元统计方法，讨论两类花岗岩的成因。

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

1. 华南两类花岗岩黑云母的一般特征

黑云母在各类花岗岩中广泛分布。不同成因类型的花岗岩产出不同种属的黑云母。黑云母化学成分与花岗岩源区成分有关，故有指示岩石成因意义。

黑云母化学成分是$K_2(Mg, Fe)_6[Si_6Al_2O_{20}](OH, F)_4$，混入物中有Ti、Na、Li、Mn等。同熔型花岗岩中以镁质黑云母为主，占85%，其次为富镁的铁质黑云母，占15%，其八面体Y位离子数为6.00—5.47，平均5.72，极接近三八面体的理论值6，表明Y位离子中以二价阳离子为主。镁在八面体片中占位率较高，一般大于36%。黑云母的羟铁云母摩尔数变化很小，表明岩浆结晶过程中氧逸度保持恒定。

改造型花岗岩中黑云母种属比较多样，以相对贫镁、富铁、富铝、富锂为特征。Y位上镁占位率小于36%，大致可分两类：一类是镁铁云母系列的铁质黑云母和铁叶云母，大部分在不含矿的改造型花岗岩中产出；另一类是锂铁云母系列的黑鳞云母和铁锂云母等，大部分在含矿的改造型花岗岩中产出。其总的趋势是随着岩石向富酸、富铝、富碱方向演化，黑云母中$^{\text{VI}}Al^{3+}$，$^{\text{VI}}Li$和$^{\text{IV}}Si^{4+}$的占位率增高，镁的占位率减少，羟铁云母的摩尔数升高，

氧逸度和温度则系统下降。

2. 资料来源

参与统计分析的黑云母计132件。幔源型本洞英云闪长岩体4件；同熔型有如下岩体：江西德兴花岗闪长斑岩体7件，福建钟腾次火山杂岩体5件，浙江桐庐石英二长岩体4件，安徽太平花岗闪长岩体2件，安徽桃冲花岗岩体5件，安徽凤凰山花岗闪长岩体6件，江苏安基山花岗闪长斑岩体3件，新乡-杨新花岗闪长岩体10件，为了对比，还引用了美国内华达花岗岩体21件，日本和苏联磁铁矿系列花岗岩2件。以上两种类型共计69件；改造型花岗岩计有安徽黄山花岗岩体10件，广西摩天岭片麻状花岗岩体1件，江西大茅山花岗岩体3件，江西西华山花岗岩体8件，江西上犹花岗岩体1件，福建建宁花岗岩体2件，广西花山花岗岩体1件，姑婆山花岗岩体4件，江苏苏州花岗岩体2件，湖南千里山花岗岩体2件，诸广山花岗岩体5件，江西慈竹英云闪长岩体1件，江西九岭山混合二长花岗岩体1件，宁岗花岗岩体1件，我国南方与铌钽矿化有关的花岗岩19件，为了对比引用了日本东南部和苏联东北部钛铁矿系列花岗岩共2件。以上共计63件。

3. 两类花岗岩黑云母成分对比

(1) 黑云母平均成分 132件黑云母的平均化学成分见表2-6-1，同时给出当信度为0.05，置信水平1−0.05=0.95时所决定的算术平均值误差λ，标准差s，变异系数C_v。由此可见，花岗岩的黑云母主要氧化物含量变化较大，变异系数超过50%的

表 2-6-1 黑云母平均化学成分 $n=132$

	SiO_2	TiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	FeO	MgO	CaO	Na_2O	K_2O
$\bar{x}$	37.35	2.60	16.35	4.30	16.14	7.92	0.61	0.28	8.44
λ	0.53	0.23	0.56	0.40	0.87	0.95	0.10	0.04	0.28
s	3.12	1.32	3.30	2.36	5.08	5.55	0.60	0.26	1.64
C_v	8.35	50.76	20.17	54.17	31.47	70.08	99.36	92.86	19.43

有TiO_2、Fe_2O_3和MgO。黑云母中各元素间的相关系数见表2-6-2。132件黑云母的9个氧化物的R型聚类谱系图见图2-6-1。鉴于黑云母成分介于$K_2Mg_6[Al_2Si_6O_{20}](OH)_4$—$K_2Fe_6[Al_2Si_6O_{20}](OH)_4$之间的连续类质同象系列，镁、铁类质同象替换反映在元素组合上是第一组元素，TiO_2、MgO和FeO，相当于占据Y位的阳离子。其中钛与镁呈正相关，相关系数$R_{Ti-Mg}=0.70$，镁与铁呈负相关，$R_{Mg-Fe}=-0.26$。第二组元素SiO_2、K_2O、Al_2O_3和Na_2O相当于占据X位和Z位的阳离子。

表 2-6-2 黑云母主要氧化物间相关系数

	SiO_2	TiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	FeO	MgO	CaO	Na_2O	K_2O
SiO_2	1.00	-0.67	0.50	-0.15	-0.63	-0.39	-0.42	0.17	0.67
TiO_2		1.00	-0.77	-0.02	0.25	0.70	0.39	-0.22	-0.53
Al_2O_3			1.00	-0.08	-0.17	-0.73	-0.30	0.20	0.37
Fe_2O_3				1.00	-0.07	-0.08	-0.09	-0.07	-0.08
FeO					1.00	-0.26	0.16	-0.09	-0.29
MgO						1.00	0.25	-0.16	-0.40
CaO							1.00	-0.07	-0.48
Na_2O								1.00	0.12
K_2O									1.00

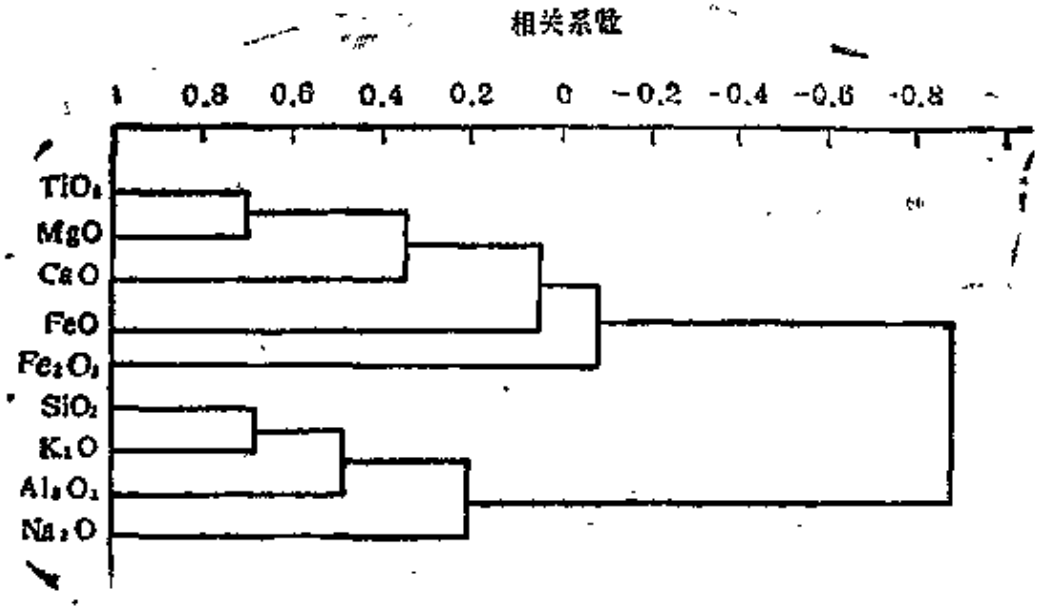


图 2-6-1 黑云母化学成分R型谱系图

(2) 主分量分析结果对132件黑云母P个变量(SiO_2, TiO_2, Al_2O_3, Fe_2O_3, FeO, MgO, CaO, Na_2O, K_2O)进行主分量分析获得的协方差矩阵见表 2-6-3。清楚表明，MgO具有最大的方差

表 2-6-3 黑云母化学成分协方差矩阵

	SiO_2	TiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	FeO	MnO	MgO	CaO	Na_2O	K_2O
SiO_2	9.75	−2.80	5.16	−1.08	−9.86	1.25	−6.96	−0.79	0.14	3.43
TiO_2		1.75	−3.36	−0.07	1.65	−0.52	5.19	0.31	−0.08	−1.16
Al_2O_3			10.88	−0.55	−2.49	1.07	−13.38	−0.59	0.17	2.02
Fe_2O_3				5.54	−1.16	−0.09	−1.14	−0.13	−0.04	−0.31
FeO					25.87	−0.96	−7.00	−0.46	−0.11	−2.34
MnO						0.31	−1.97	−0.12	0.02	0.49
MgO							31.01	0.85	−0.24	−0.69
CaO								0.36	−0.01	−0.47
Na_2O									0.07	0.05
K_2O										2.66

(31.01)，其次是FeO(25.87)，再次是Al_2O_3(10.88)。

表 2-6-4 前三个特征向量及特征值

	P_1	P_2	P_3
SiO_2	−0.24	−0.41	0.28
TiO_2	0.16	0.09	−0.01
Al_2O_3	−0.42	−0.15	0.12
Fe_2O_3	−0.01	−0.01	−0.91
FeO	−0.12	0.87	0.18
MnO	−0.05	−0.04	0.02
MgO	0.84	−0.11	0.17
CaO	0.03	0.03	0.00
Na_2O	−0.01	−0.01	0.01
K_2O	−0.12	−0.12	−0.12
特征值	42.26	32.43	6.43
特征值累计百分数	48%	85%	92%

表2-6-4给出前三个主分量及其特征值。第一主分量 p_1 中，MgO的载荷最重达 0.84，其次是 Al_2O_3(−0.42)。第二个主分量 p_2中，FeO的载荷最重，达0.87，其次是 SiO_2(−0.41)。第三个主分量 p_3中，Fe_2O_3 的载荷最重，达−0.91。这些结果说明两类花岗岩黑云母成分所以有许多差别，主要是由于黑云母八面体中 $Fe^{2+} \rightleftharpoons Mg$，$^{VI}Al^{3+} \rightleftharpoons Fe^{2+}$，$^{VI}Al^{3+} \rightleftharpoons Mg$ 三个离子对的类质同象替换的结果。由于 $Mg—Fe^{2+}$ 离子半径差约为 0.08 Å，而 $^{VI}Al^{3+}—Mg$，$^{VI}Al^{3+}—Fe$的离子半径差约为 0.25 Å，第一对离子的替换远比后两对容易的多，它们形成完全的类质同象系列（镁铁云母系列），在花岗岩类岩石中广泛分布。同熔型岩浆一般相对富镁铁质，其晶出的黑云母富MgO.根据132件两类成因花岗岩黑云母的统计，同熔型花岗岩黑云母 MgO(wt%) 一般均高于 8%，变化于 8—16%之间。而改造型花岗岩贫镁、富铝、富铁，其晶出的黑云母MgO均小于8%，变化于7—0.1%之间。主分量分析所揭示的MgO、FeO方差贡献，较大与黑云母晶格中$Mg \rightleftharpoons Fe^{2+}$ 易于替换的结论是一致的。

根据

$$y_{ik}=\sum_{j=1}^{m} x_{ij}p_{jk}$$

可计算第i个标本在第k个主分量上的坐标，由于第一主分量已集中原始数据总方差的48%，第二主分量集中原始数据总方差的37%，合计85%。头两个主分量已集中原始变量总方差的绝大部分，说明了原始数据变化特征的85%，具有较高的代表性。将历史样本中的每个样品的m个变量分析值乘表 2-6-4 给出主分量 p_1、p_2的特征向量，得到标本的主分量值F_1、F_2用F_1、F_2坐标作图（图2-6-2），表明：同熔型花岗岩黑云母集中分布在图解的右侧，改造型花岗岩黑云母位于左侧，样品点按黑云母成分中MgO/ΣFeO 值自大而小自右而左作有规律的分布。按样品点分布的自然边界，我们人工给出两类花岗岩黑云母各自所占的域，在同熔型花岗岩域内只混进二个改造型花岗岩黑云母样品，在改造型花岗岩域内只混进一个同熔型花岗岩样品，总错分率小于2%。

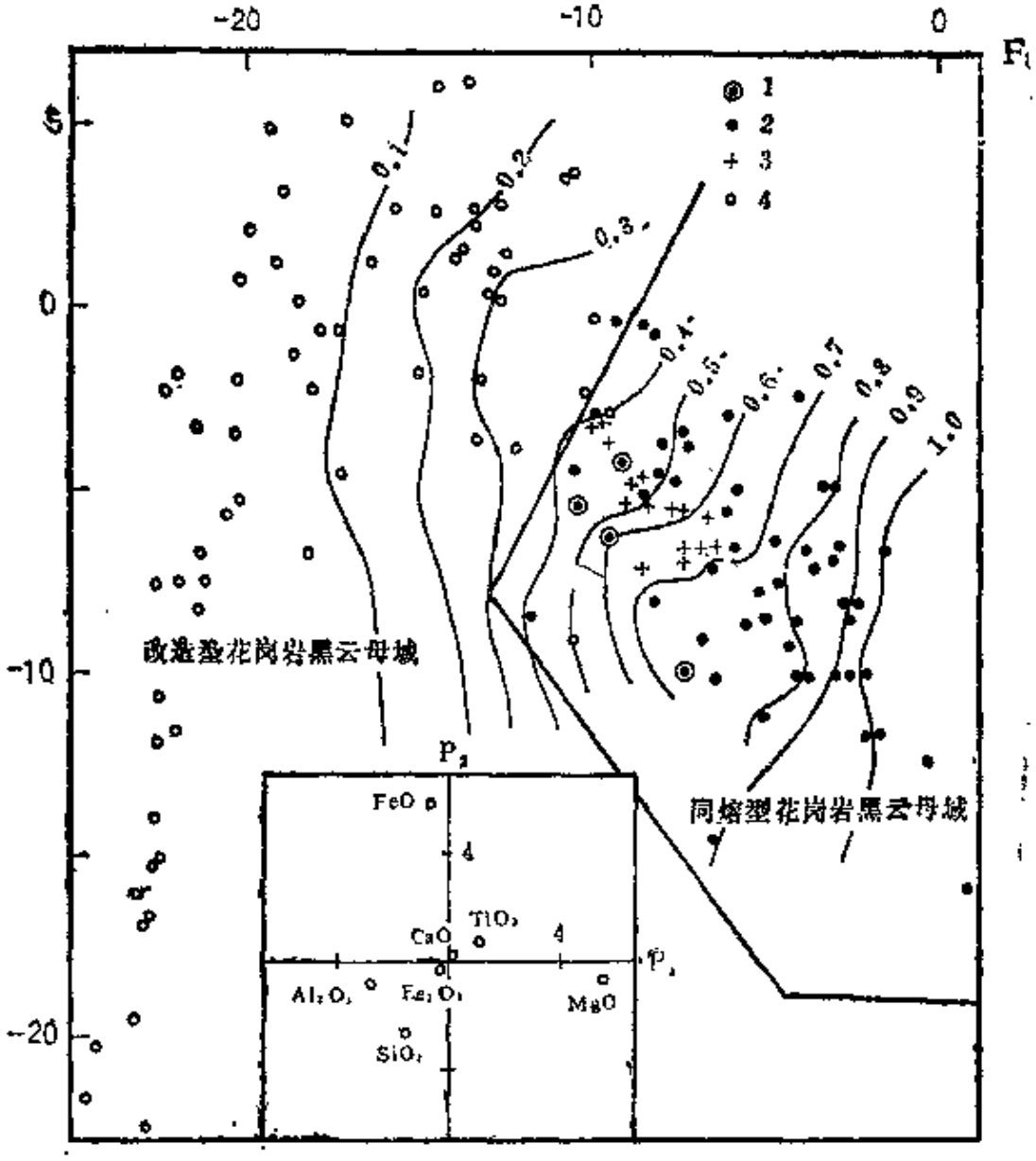


图 2-6-2　两类花岗岩黑云母主分量散点图

1—幔源型花岗岩中黑云母；2—同熔型花岗岩中黑云母；3—美国内华达花岗岩黑云母；4—改造型花岗岩黑云母；曲线上数字为Mg/ΣFe比值

因此，图2-6-2和表2-6-4可作为以黑云母成分直观判别花岗岩成因类型的工具。只要将黑云母分析数据乘以表 2-6-4 中相应系数，求得F_1、F_2坐标后在图2-6-2中投影，视点所在区域便可判断产出黑云母的花岗岩成因类型。经近年的验证效果是比较好的。

（3） 对应分析结果　根据对应因子平面图上变量和标本的

相关关系，由图2-6-3上清楚看出：同熔型花岗岩黑云母标本点聚集在TiO_2、MgO区内，表明它们富镁和钛，改造型花岗岩黑云母标本点大部分投影到FeO、Al_2O_3、Fe_2O_3的分布区，这些是铁质黑云母、铁叶云母，其八面体片内富含Fe、Fe^{3+}或$^{\text{VI}}Al^{3+}$。其中有一部分含稀有、铌钽的改造型花岗岩的黑云母集聚于F_1—F_2因子平面图的右上方，以富SiO_2为特征，这部分是黑鳞云母、铁锂云母的锂铁系列云母分布区。尽管我们未曾把Li_2O的含量参与

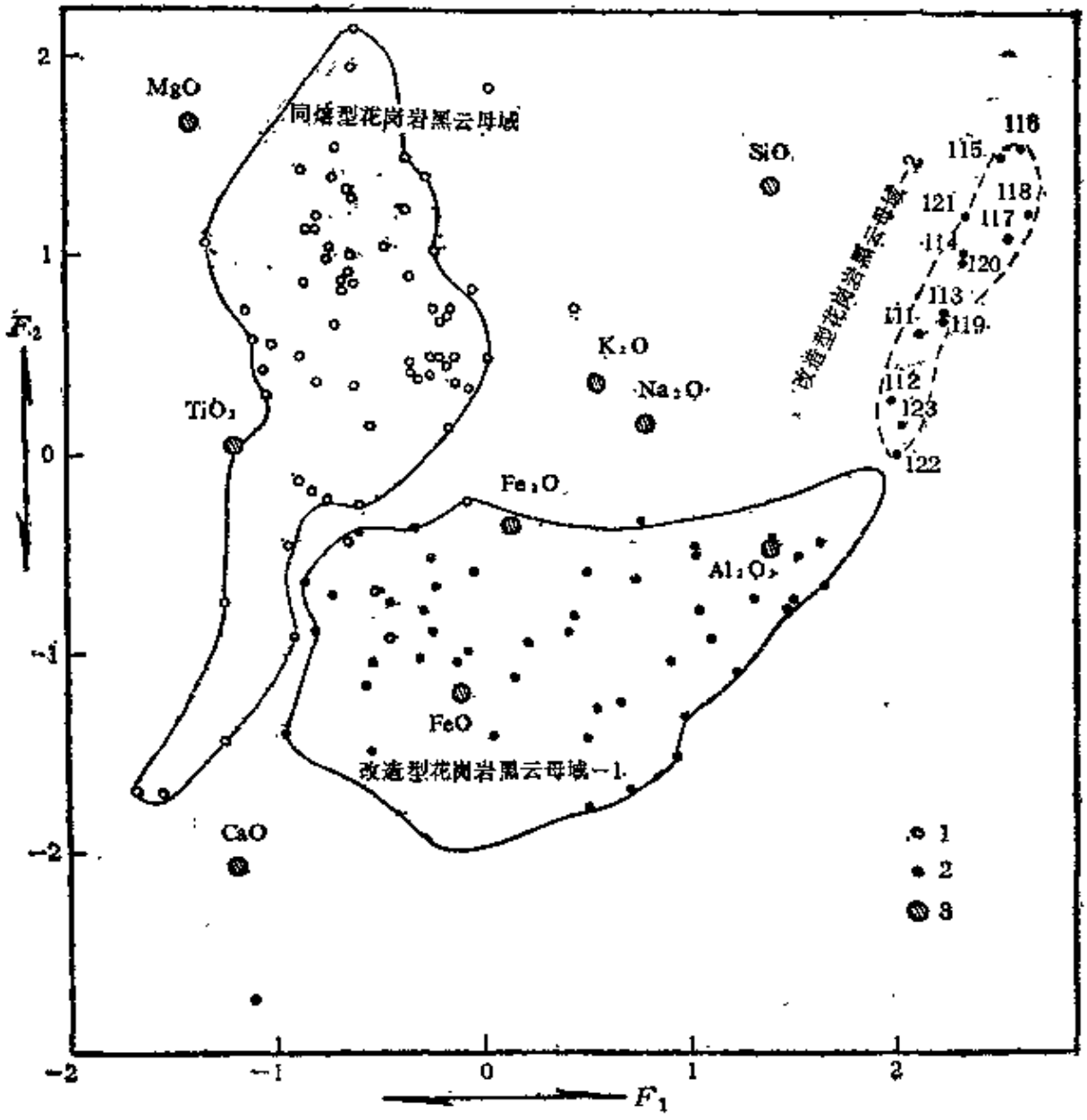


图 2-6-3 黑云母化学成分对应因子载荷点聚图

1—同熔型花岗岩黑云母；2—改造型花岗岩黑云母；3—变量点

计算，但这部分云母的四面体片中高的 $^{\text{Ⅳ}}Si^{4+}$（一般>6）、能间地接反映八面体片中的$^{\text{Ⅵ}}Li$，因为当八面体片中 Li^{+}替换Fe^{2+} 或 Mg^{2+}时，引起电价不平衡，通常由四面体中 $^{\text{Ⅳ}}Si^{4+}$替换$^{\text{Ⅳ}}Al^{3+}$来补偿，所以锂铁系列云母在SiO_2变量区集中就不奇怪了。

对应分析把标本和变量联系起来，比主分量分析更能反映不同成因花岗岩黑云母化学成分的特点。

(4) 因子分析结果 为了研究两类花岗岩黑云母形成过程，认识各氧化物间的成因联系，对黑云母化学成分进行了R型因子分析。

R型因子分析从各变量的相关矩阵出发，进行特征值分析，求出主因子载荷矩阵，$A=[a_{ij}]$。为达到最简洁结构，对因子载荷矩阵A进行方差极大旋转及 PROMAX 斜旋转，得出方差极大主因子解和斜主因子解，以便使各主因子解释得到最大效果。132件黑云母化学成分因子分析结果如下：

①求出 132 件原始数据中 9 个变量的两两相关系数矩阵$R_{9\times9}$（表2-6-2）。对R阵进行方差分析。由此得出黑云母氧化物主因子矩阵，各主因子的方差及累计方差百分比列于表 2-6-5。其中前四个主因子的累计方差贡献达 80.50%，表明前四个主因子已经能

表 2-6-5 黑云母氧化物主因子矩阵

	F_1	F_2	F_3	F_4	F_5	F_6	公因子方差
SiO_2	0.84	0.40	0.09	−0.07	0.10	0.09	0.90
TiO_2	−0.89	0.17	0.03	−0.06	−0.18	0.06	0.86
Al_2O_3	0.80	−0.33	0.08	0.03	0.28	−0.28	0.91
Fe_2O_3	−0.04	−0.08	−0.88	0.44	0.08	0.13	0.99
FeO	−0.37	−0.83	0.06	−0.20	−0.31	0.10	0.98
MgO	−0.70	0.65	0.06	0.03	−0.07	−0.13	0.94
CaO	−0.57	−0.13	0.34	0.17	0.61	0.38	0.99
Na_2O	0.28	−0.05	0.43	0.78	−0.35	0.04	0.99
K_2O	0.74	0.21	−0.03	−0.23	−0.26	0.46	0.94
方差	3.74	1.48	1.10	0.93	0.80	0.49	
方差/总方差%	41.58	57.97	70.20	80.58	89.42	94.89	

够提取原始数据变化的80%以上．为了醒目，这里以符号形式表达因子与变量间的关系．凡因子载荷大于 0.80 的正值用4个＋号表示，负值用4个O表示，则各变量在前四个主因子上的载荷见表2-6-6．

表 2-6-6　主因子载荷表

	F_1	F_2	F_3	F_4
SiO_2	＋＋＋＋			
Al_2O_3	＋＋＋＋			
K_2O	＋＋＋			
TiO_2	○○○○			
MgO	○○○	○○○		
FeO		○○○○		
Fe_2O_3			○○○○	
CaO				
Na_2O				＋＋＋

现在对它们进行地质解释．

第一主因子F_1反映产出黑云母的花岗岩母岩的化学成分特点，是一个重要的成因轴，其负端高载荷变量是TiO_2(－0.89)、MgO(－0.70)、FeO(－0.37)，重要的是，MgO、FeO 是同符号正相关，未开始分离，反映同熔型花岗岩岩浆富铁镁质，从而晶出的黑云母以镁铁质黑云母为主．同熔型花岗岩黑云母样品点应集中在F_1的负端．F_1的正端高载荷变量为 SiO_2(0.84)、Al_2O_3(0.80)、K_2O(0.74)，它突出反映改造型花岗岩岩浆的特点，富硅铝质，由此

结晶出的黑云母，其八面体片内的$^{\text{VI}}Al^{3+}$含量高，主要为铁叶云母或铁质黑云母，或者四面体片内的$^{\text{IV}}Si^{4+}$含量大于理论值6，形成铁锂云母系列，所以改造型花岗岩的黑云母样品应集中在F_1的正端。

第二主因子F_2反映黑云母内类质同象替换关系，其正端高载荷变量是MgO(0.65)，负端高载荷变量是FeO(−0.83)和Al_2O_3(−0.33)，值得注意的是，F_2因子轴上FeO和Al_2O_3是同符号，正相关，而MgO和FeO是异号，负相关。这表明在黑云母演化中有两组重要的离子替换。$^{\text{VI}}Fe^{2+}\rightleftharpoons Mg^{2+}$（形成镁铁云母系列）和$^{\text{VI}}Al^{3+}\rightleftharpoons Mg^{2+}$(形成铁叶云母)。前已述及，由于$Fe^{2+}$和$Mg^{2+}$的离子半径差为0.08 Å，极为靠近，易于替换，在自然界可形成完全类重同象系列，而$^{\text{VI}}Al^{3+}$与Mg的离子半径差较大，为0.15 Å，只形成部分类质同象替换。这可由F_2因子中FeO载荷比Al_2O_3载荷大得多得到说明。同熔型花岗岩以镁质黑云母为主，样品点应集中在F_2轴正端。随着演化向富铁方向迁移，面改造型花岗岩黑云母以铁质黑云母为主，样品应集中于F_2轴负端，并随着它的演化向富铝的铁叶云母或多硅白云母迁移。

第三主因子F_3的负端高载荷变量Fe_2O_3(−0.88)，并且Fe_2O_3，FeO在F_3中符号相异，呈反消长，显然F_3代表黑云母结晶时氧化还原环境。同熔型花岗岩在高氧逸度条件下形成，反映在黑云母中羟铁云母的摩尔数较低。在Fe^{3+}—Fe^{2+}—Mg图解中位于NiO—Ni缓冲线的上方，在我们的因子载荷图上应位于F_3因子轴的负端。相反，改造型花岗岩在较低氧逸度条件下形成，其羟铁云母摩尔数较高，应位子F_3因子轴的正端。

第四主因子F_4和第五主因子F_5的高象荷变量为Na_2O和CaO。Na和Ca替换层间阳离子K，其相对量均较小，对黑云母种属的形成无太大影响，其地质解释从略。

②按"最简洁原则"，经方差极大旋转得出方差极大主因子解（表2-6-7）。旋转之后，第一主因子F_1中压缩了SiO_2的作用而突出了TiO_2(−0.83)、MgO(−0.86)及Al_2O_3(0.92)。与第一

主因子F_1相比，第二主因子F_2中FeO(−0.98)载荷最高，MgO(0.31)次之，二者符号相反。第三主因子F_3，几乎全部说明Fe_2O_3(−0.99)的作用。这三个因子轴分别代表产出黑云母花岗岩的成分。黑云母的演化及其氧化还原条件。

表 2-6-7　黑云母化学成分方差极主因子解

	F_1	F_2	F_3	F_4	F_5
SiO_2	0.45	0.60	0.15	0.06	−0.18
TiO_2	−0.83	−0.23	0.03	−0.10	0.16
Al_2O_3	0.92	0.15	0.09	0.07	−0.13
Fe_2O_3	0.00	0.02	−0.99	−0.03	−0.05
FeO	0.00	−0.98	0.05	−0.04	0.05
MgO	−0.86	0.31	0.10	−0.06	0.04
CaO	−0.19	−0.08	0.05	−0.02	0.95
Na_2O	0.12	0.05	0.03	0.99	−0.24
K_2O	0.26	0.17	0.05	0.04	−0.24
方　差	2.61	1.53	1.04	1.00	1.00
累计方差贡献	29.00%	46.09%	57.63%	68.82%	80.38%

从数学模型可知，如把变量看成因子的线性组合，其中每个变量的方差极大主因子模型可表达如下：

$$SiO_2 = 0.45F_1 + 0.60F_2 + 0.15F_3 + 0.06F_4 - 0.18F_5$$
$$TiO_2 = -0.83F_1 - 0.23F_2 + 0.03F_3 - 0.10F_4 + 0.16F_5$$
$$Al_2O_3 = 0.92F_1 + 0.15F_2 + 0.09F_3 + 0.07F_4 - 0.13F_5$$
$$Fe_2O_3 = 0.00F_1 + 0.02F_2 - 0.99F_3 - 0.03F_4 - 0.05F_5$$
$$FeO = 0.00F_1 - 0.98F_2 + 0.05F_3 - 0.04F_4 + 0.05F_5$$
$$MgO = -0.86F_1 + 0.31F_2 + 0.10F_3 - 0.06F_4 + 0.04F_5$$
$$CaO = -0.19F_1 - 0.08F_2 + 0.05F_3 - 0.02F_4 + 0.95F_5$$
$$Na_2O = 0.12F_1 + 0.05F_2 + 0.03F_3 + 0.99F_4 - 0.02F_5$$
$$K_2O = 0.26F_1 + 0.17F_2 + 0.05F_3 + 0.04F_4 - 0.24F_5$$

由此可见，MgO由第一主因子提供，FeO由第二主因子提供，SiO_2由前二个主因子提供，Al_2O_3和TiO_2由第一主因子提供，Na_2O和CaO则分别由第四、五主因子提供。这样，因子的地质意义如前所述，经过方差极大旋转之后更简洁更切合地质实质。

③经 PROMAX 斜旋转之后，致使某些不重要的变量载荷减少到零，从而更突出另一些变量的因子载荷。经斜旋转后的主因子解与方差极大主因子解类似，只是因子与变量关系更明了。

经PROMAX 斜旋转之后，我们已把原先假定的各公共因子之间互不相关的关系转化为相互间相关。斜旋转后所得的各共公因子之间的相关系数矩阵列于表 2-6-8.由表可见,因子间的相关性甚小，每个因子都代表着一种独立的地质作用。

表 2-6-8 黑云母斜主因子相关系数矩阵

	F_1	F_2	F_3	F_4	F_5
F_1	1.00	0.22	0.03	0.21	−0.34
F_2		1.00	0.15	0.10	−0.20
F_3			1.00	0.08	0.03
F_4				1.00	−0.07
F_5					1.00

④因子分析的数学模型是将变量（或样品）表示为共公因子的线性组合。

$$x_i = \alpha_{i1}F_1 + \cdots + \alpha_{im}F_p \quad (i = 1, 2, \cdots, p)$$

当然也可以反过来将公共因子表示为变量（或样品）的线性组合

$$F_j = \beta_{j1}x_1 + \beta_{j2}x_2 + \cdots + \beta_{jp}x_p \quad j = 1, 2, \cdots, m$$

计算各样品的公共因子得分。F_j称因子得分函数。

为了对黑云母样品进行分类和进一步解释，将各主因子上样品得分作成散点图。图 2-6-4 是由斜主因子计算的样品得分直方图，从中看出：主因子F_1上，同熔型花岗岩黑云母绝大部分富镁和钛，改造型花岗岩黑云母以富铁铝为特征。在主因子F_2上，同熔型花岗岩黑云母绝大部分分布在$F_2 > 0$的一侧，贫铁，改造型花岗岩中有一类富铁(铁质黑云母、铁叶黑云母)，它们分布在F_2轴负端。另一类贫铁(黑鳞云母、铁锂云母)，但富 SiO_2 和LiO_2，

它们分布在F_2轴正端，这是一些含稀有元素和铌钽矿化的花岗岩．主因子F_3代表 Fe_2O_3，反映氧逸度变化．总的趋势是同熔型花岗岩黑云母氧逸度比较稳定．而改造型花岗岩黑云母氧逸度变化范围较宽，既有氧逸度高的（侵位高或次生氧化），也有低的．主因子F_4(Na_2O)中两类花岗岩黑云母样品点交叉，表明层间离子的差异对区分两类花岗岩黑云母已无实际意义．在斜主因子F_1对F_2因子得分平面图上，两类花岗岩黑云母各自组成一定分布区．同熔型花岗岩黑云母以富镁、贫铁为特征，改造型花岗岩黑云母则以富铁贫镁为特征．改造型花岗岩黑云母沿F_2轴拖曳分布，说明其FeO和 Al_2O_3 含量变化较宽．上述结果，从另一方面证明，根据

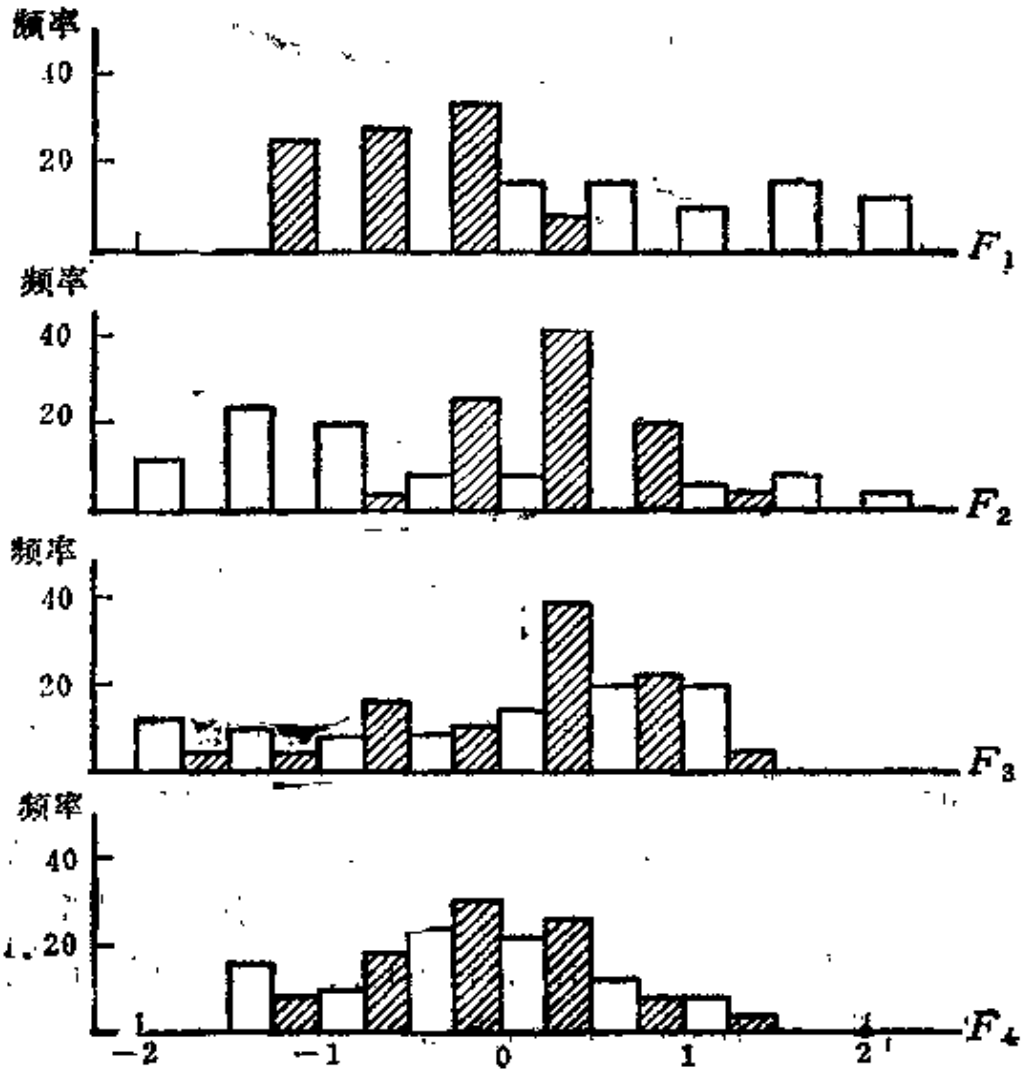


图 2-6-4　两类花岗岩黑云母样品因子得分柱状图
斜线部分表示同熔型花岗岩黑云母；空心部分表示改造型花岗岩黑云母

主因子载荷所解释的两类花岗岩黑云母成因和演化的合理性。

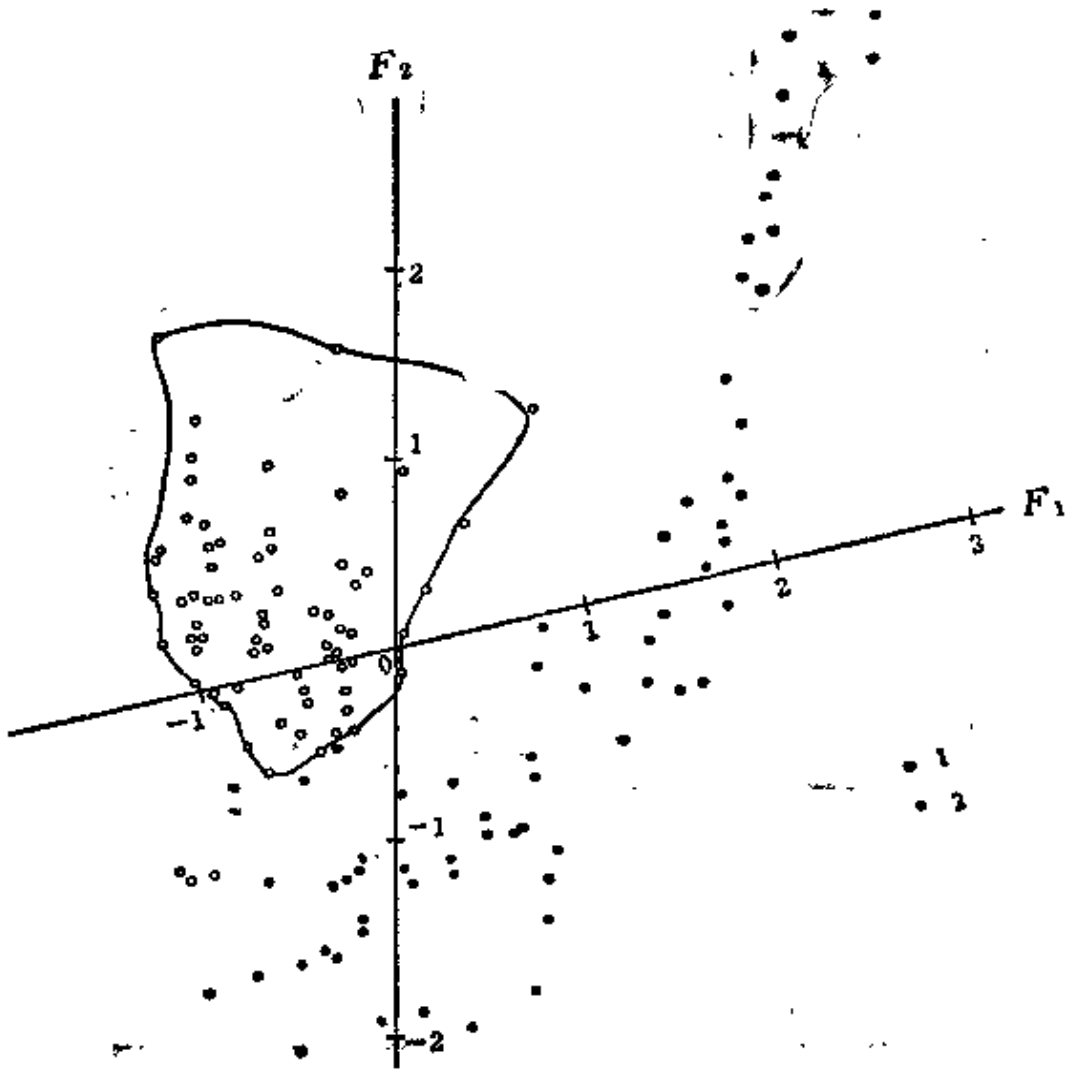


图 2-6-5　两类花岗岩黑云母样品斜主因子得分散点图

1—同熔型花岗岩黑云母；2—改造型花闪岩黑云母

(5) 黑云母化学成分判别分析结果　根据Q型聚类分析、对应分析的初始分类结果，发现有27件样品与按地质特征分类结果稍有出入。其中同熔型1件，改造型26件。现以统计分析结果与地质证据一致的样品为历史样本（计同熔型68件，改造型37件，共计105件）归类不定的27件为待判样本作判别分析。使用贝叶斯准则下逐步判别程序，所得结果如下：

①引入检验值$F_1=3.5$，剔除检验值$F_2=3.0$时，经逐步判别对可供选样的10个变量进行筛选，逐过计算在判别式中依次引入

表 2-6-9　判 别 统 计 量 一 览 表

步骤	引入变量	代号	F	μ	x^2	D^2	自由度	错判样本数	判别式中变量数	待判样品归类			
										第一组	百分数	第二组	百分数
1	MgO	x_5	864.01	0.107	229.55								
2	Fe_2O_3	x_4	8.78	0.098	236.85	45.41	3,101	0	3	19	70%	8	30%
3	FeO	x_6	13.55	0.082	248.47								
4	TiO_2	x_2	3.03	0.084	250.25	46.96	4,100	0	4	19		8	
5	Na_2O	x_8	2.49	0.082	251.51				5				
6	Al_2O_3	x_3	2.70	0.080	252.98				6				
7	CaO	x_7	3.61	0.077	255.35	53.43	8,96	0	7	19		8	
8	剔除TiO_2	x_2	0.95	0.078	255.66				6				
9	K_2O	x_9	2.21	0.076	256.62				7				
10	TiO_2	x_2	1.79	0.074	257.16				8				
11	SiO_2	x_1	0.51	0.074	256.39	53.74	9,95	0	9	19		8	

$x_6(MgO)$、$x_4(Fe_2O_3)$和$x_5(FeO)$三个变量，求得的各统计量值见表2-6-9。得出贝叶斯准则下的第一组(同熔型)判别系数为$b_{10}=-36.54$，$b_{14}=-0.60$，$b_{15}=1.43$，$b_{16}=4.32$；第二组(改造型)的判别系数分别为$b_{20}=-8.19$，$b_{24}=0.73$，$b_{25}=0.81$，$b_{26}=0.57$。则两类花岗岩黑云母的二组线性判别函数

$$Y_1(\text{同熔型})=-36.54-0.60Fe_2O_3+1.43FeO+4.32MgO$$

$$Y_2(\text{改造型})=-8.19-0.73Fe_2O_3+0.81FeO+0.57MgO$$

由公式

$$P=\frac{e^{\max\limits_{(f_i-1\leqslant k\leqslant g_ik)}}}{\sum\limits_{p=1}^{g} e^{\max\limits_{(f_p-1\leqslant k\leqslant k_gk_f)}}}$$

分别求得标本归入Y_1，Y_2的概率，进行判别分类，并建立N块标本的分类表，其归类结果如表2-6-10。

表 2-6-10　判别归类结果

类　别	样　本 个　数	归　类		判　错　数
		第　一　组	第　二　组	
第一组(I)	68	68	0	0
第二组(S)	37	0	37	0
待　判	27	19	8	18

②从未选入的变量中引入$x_2(TiO_2)$，这时判别式中引入4个变量，求得的各统计量见表2-6-9。当用$F_1=2.5$，$F_2=2.0$对上述4个变量进行F检验，得知上述变量的判别能力显著，建立贝叶斯准则下的二组判别函数

$$Y_1(\text{同熔型})=-36.54-0.08TiO_2-0.59Fe_2O_3+1.44FeO+4.33MgO$$

$$Y_2(\text{改造型})=-9.01-1.80TiO_2+0.95Fe_2O_3$$

$$+0.95FeO+0.81MgO$$

在变量为TiO_2、Fe_2O_3、FeO、MgO条件下，样品归类仍如表2-6-10.

③从未选入的变量中引入$x_8(Na_2O)$、$x_3(Al_2O_3)$、$x_7(CaO)$、$x_9(K_2O)$和$x_2(TiO_2)$，这时的判别函数具有8个变量，在$F_1=1.5$，$F_2=1.0$条件下，对上述8个变量进行F检验，表明上述变量的判别能力显著，建立二组判别函数如下：

$$Y_1(\text{同熔型})=-311.96+10.58TiO_2+14.89Al_2O_3$$
$$+2.39Fe_2O_3+5.38FeO+11.92MgO$$
$$+9.98CaO+45.57Na_2O+14.45K_2O$$

$$Y_2(\text{改造型})=-289.37+9.06TiO_2+15.60Al_2O_3$$
$$+4.30Fe_2O_3+4.87FeO+8.28MgO$$
$$+6.20CaO+55.96Na_2O+13.32K_2O$$

④为了进行比较，在$F_1=0.5$的条件下选入变量$x_1(SiO_2)$，此时判别函数中有9个变量，也求得两组判别函数，此时标本的归类仍旧不变.

比较上述四次分析结果，按F值由大至小依次以MgO、FeO、Fe_2O_3等三个变量最显著，它们的含量决定了两类花岗岩黑云母成分上的差异，用MgO、FeO、Fe_2O_3进行判别分析，能够达到用4个变量（加TiO_2），8个变量（加Na_2O、Al_2O_3、CaO、K_2O）以及9个变量(加SiO_2)同样的效果，虽然增加了变量数，但判别效果没有改善. 在$F_1>3.5$时用前3个变量与$F_1>1.5$时用8个变量所求的两类之间的马氏距离D^2变化不大，故用MgO、FeO、Fe_2O_3建立判别函数即可. 132件黑云母经判别归类后的后验概率见表2-6-11. 27件待判样品中，原属于同熔型的32号样，判别后仍归为同熔型，后验概率0.99. 其余地质证据认为是改造型的26件，判别后有7件归入改造型，其后验概率大于0.9，另外19件判归同熔型. 除样品号82，91，96三件后验概率较低外，其余后验概率都较高.

表 2-6-11

样品序号	原类	判别归类	后验概率	样品序号	原类	判别归类	后验概率	样品序号	原类	判别归类	后验概率
1	1	1	1.0	45	1	1	1.0	89	2	2	1.0
2	1	1	1.0	46	1	1	1.0	90	2	2	1.0
3	1	1	1.0	47	1	1	1.0	91	2	1	0.87
4	1	1	1.0	48	1	1	1.0	92	2	1	0.99
5	1	1	1.0	49	1	1	1.0	93	2	1	1.0
6	1	1	1.0	50	1	1	1.0	94	2	1	0.96
7	1	1	1.0	51	1	1	1.0	95	2	2	0.90
8	1	1	1.0	52	1	1	1.0	96	2	1	0.73
9	1	1	1.0	53	1	1	1.0	97	2	2	0.99
10	1	1	1.0	54	1	1	1.0	98	2	2	0.99
11	1	1	1.0	55	1	1	1.0	99	2	2	0.99
12	1	1	1.0	56	1	1	1.0	100	2	1	1.0
13	1	1	1.0	57	1	1	1.0	101	2	1	1.0
14	1	1	1.0	58	1	1	1.0	102	2	2	1.0
15	1	1	1.0	59	1	1	1.0	103	2	1	1.0
16	1	1	1.0	60	1	1	1.0	104	2	1	1.0
17	1	1	1.0	61	1	1	1.0	105	2	1	1.0
18	1	1	1.0	62	1	1	1.0	106	2	1	0.94
19	1	1	1.0	63	1	1	1.0	107	2	1	1.0
20	1	1	1.0	64	1	1	1.0	108	2	1	0.99
21	1	1	1.0	65	1	1	1.0	109	2	1	1.0
22	1	1	1.0	66	1	1	1.0	110	2	1	0.99
23	1	1	1.0	67	1	1	1.0	111	2	2	1.0
24	1	1	1.0	68	1	1	1.0	112	2	2	1.0
25	1	1	1.0	69	1	1	1.0	113	2	2	1.0
26	1	1	1.0	70	2	2	1.0	114	2	2	1.0
27	1	1	1.0	71	2	2	1.0	115	2	2	1.0
28	1	1	1.0	72	2	2	1.0	116	2	2	1.0
29	1	1	1.0	73	2	2	1.0	117	2	2	1.0
30	1	1	1.0	74	2	2	1.0	118	2	2	1.0
31	1	1	1.0	75	2	2	1.0	119	2	2	1.0
32	1	1	0.99	76	2	2	1.0	120	2	2	1.0
33	1	1	1.0	77	2	2	1.0	121	2	2	1.0
34	1	1	1.0	78	2	2	1.0	122	2	2	1.0
35	1	1	1.0	79	2	2	1.0	123	2	1	0.91
36	1	1	1.0	80	2	2	0.99	124	2	2	1.0
37	1	1	1.0	81	2	2	1.0	125	2	2	1.0
38	1	1	1.0	82	2	2	0.67	126	2	2	1.0
39	1	1	1.0	83	2	2	1.0	127	2	2	1.0
40	1	1	1.0	84	2	2	1.0	128	2	2	1.0
41	1	1	1.0	85	2	2	1.0	129	2	2	1.0
42	1	1	1.0	86	2	2	1.0	130	2	2	1.0
43	1	1	1.0	87	2	2	1.0	131	2	1	0.80
44	1	1	1.0	88	2	2	1.0	132	2	1	0.90

二、花岗岩成因的稀土证据

1. 概述

稀土元素指周期表中第三族的镧(La)、铈(Ce)、镨(Pr)、钕(Nd)、钐(Sm)、铕(Eu)、钆(Gd)、铽(Tb)、镝(Dy)、钬(Ho)、铒(Er)、铥(Tm)、镱(Yb)、镥(Lu)和钇(Y)共十五个元素。它们的地球化学性质十分相似，因而在自然界中常密切共生，在地质作用过程中经常作为一个整体进行活动。但由于稀土元素的离子半径有规律的变化，随着原子序数增大，它们的负电性、电离电位和碱性减小，而电离势增加，这就使稀土元素在化学性质、矿物化学性质上发生规律的变化，使各成员间产生了地球化学特征上的微小差异。因此，它们在不同的地质作用过程中分布状况和配分模式有着不同的特征，可用以解释某些地质过程。

十五种稀土元素中，前六种元素称轻稀土，其总量以$\Sigma LREE$表示；后九种元素称重稀土，其总量以$\Sigma HREE$表示。由于偶数稀土元素与奇数稀土元素，其丰度差别较大。为对比方便，通常将岩石样品中稀土元素丰度除以平均球粒陨石稀土丰度，得到各元素的标定值，使其含量变化平滑。下面的计算都以标定值作为原始数据输入。

铕(Eu)元素有两种价态，在还原环境中形成二价 Eu^{2+}，并以 Eu^{2+}(Eu^{2+} 1.27 Å)的形式取代离子半径相近的锶(Sr^{2+} 1.12 Å)和钙(Ca^{2+} 0.99 Å)进入斜长石晶格，从而与其他三价稀土元素分离(分馏)，称铕异常。如$(Eu/Eu^*)>1$，称正异常(，$Eu/Eu^*)<1$，为负异常。氧逸度增高，Eu^{2+}氧化为 Eu^{3+}，则不与其他稀土元素分离。

稀土元素的离子半径较大，在花岗岩中它们选择性的取代半径比较大的离子，如 Na^{1+}、Ca^{2+}、Sr^{2+}、Mn^{2+}、U^{4+}、Zr^{4+} 等，并占据不同的配位多面体的位置，从而主要分散在各种副矿物和造岩矿物中。不同矿物中稀土元素的丰度和类别有显著差别。例

如，一些副矿物的稀土含量就很高，石榴石和锆英石选择性富集重稀土，褐帘石选择吸收轻稀土．造岩矿物中，角闪石的分配系数通常大于1，黑云母的分配系数通常小于1，都相对的富重稀土而铕亏损，造成铕的负异常．斜长石和钾长石中稀土含量很低，分配系数远小于1，但其中铕的含量接近或超过全岩中的铕含量，造成铕的正异常。因此，花岗岩中稀土元素的含量和配分特征，主要与这些造岩矿物和副矿物的相对含量及其中所含稀土的特征有关。花岗岩中稀土元素的分布情况可以指示花岗岩源区性质和演化程度。

2。 资料来源

参与统计的稀土资料除2件引用西德黑森林地区的标本外，其余皆取自我国华南。它们的产地、岩性见表2-6-12。其中同熔型花岗岩30件，改造型花岗岩26件。

表 2-6-12 华南两类花岗岩稀土分析样品表

成因类型	样品号	岩体及岩石名称
同熔型	1	浙江五步石英二长岩
	2	浙江五步玄武岩
	3	浙江五步霏细斑岩
	4，5	福建晋江黑云二长混合片麻岩
	6	福建晋江变英云闪长岩
	7	福建晋江细粒混合片麻岩
	8，9	福建晋江二长花岗岩
	10	安徽太平花岗闪长岩
	11	浙江桐庐流纹质凝灰岩
	12	浙江桐庐自碎二长花岗岩
	13	浙江桐庐自碎二长闪长岩
	14	宁芜地区花岗闪长岩
	15	宁芜地区花岗岩
	16	广东莲花山石英斑岩
	17	广东莲花山流纹岩
	18	广东莲花山石英闪长斑岩
	19	福建风迹花岗闪长岩

续表

成因类型	样品号	岩体及岩石名称
	20	福建鼓山黑云母花岗岩
	21，22，24，25，55	福建魁岐碱性长石花岗岩
	23	福建南园组火山岩
	26	江西德兴银山英安粉岩
	27	江西铜厂花岗闪长斑岩
	28，29	福建康美二长花岗岩
	51	西德黑森林黑云母花岗岩
改造一型	30，31	湖南瑶岗仙花岗岩
	32，33	江西414花岗岩
	34，35	江西德兴大茅山花岗岩
	36，37	安徽黄山粗粒花岗岩
	38	安徽黄山狮子岭花岗岩
	39	广西摩天岭花岗岩
	40，41，42	江西上犹花岗岩
	43，44	湖南邓埠仙花岗岩
	45	广东罗定石英云母片岩
	46，47	广东罗定混合花岗岩
	48，49，50	福建桂洋片麻状花岗岩
	52，53，54	西德黑森林二云母花岗岩
	56	福建莒丹花岗岩
	57	福建桂溪花岗岩

3．花岗岩稀土元素相关性

表2-6-13给出57件花岗岩稀土元素的平均含量和均方差，从中可以看出花岗岩中稀土元素含量变化幅度很大，重稀土尤甚。从轻稀土到重稀土离散性向后越大。花岗岩中稀土元素含量变化范围宽，意味着它们的不同物质来源及其演化是比较复杂的。

十五种稀土元素两两之间的相关系数矩阵见表2-6-14，按相关系数，十五种稀土元素显然分成三组：La、Ce、Pr、Nd、Sm五种轻稀土元素为一组，两两之间的相关系数除La、Ce与Sm的相关系数分别为0.57、0.61外，其他都超过0.75．另一组是Gd、Tb、Dy、Ho、Er、Tm、Yb、Lu、Y九种重稀土元素．其两两之间的相关

表 2-6-13 两类花岗岩稀土元素均值及标准差

	$\bar{x}$	±λ	s	Cv
La	108.62	15.77	57.48	50.92
Ce	76.39	10.22	37.27	48.79
Pr	66.34	8.08	29.44	44.38
Nd	44.71	5.76	20.98	46.92
Sm	29.22	3.41	12.42	42.51
Eu	10.76	1.73	6.30	58.55
Gd	15.59	2.38	8.68	55.67
Tb	18.09	3.51	12.80	70.75
Dy	16.36	3.70	13.48	82.39
Ho	15.01	3.93	14.33	95.45
Er	14.42	3.72	13.54	93.90
Tm	16.69	4.66	16.99	101.79
Yb	17.83	5.11	18.61	104.39
Lu	17.07	4.57	16.64	97.48
Y	15.41	3.93	14.34	93.06

系数，除与Gd有关的以外都在0.85以上。Eu与轻、重稀土均没有强相关，自成一组，反映了Eu的分离。稀土元素间的这种关系是由其离子半径决定的。配位数为6时，轻稀土由La至Sm的离子半径依次为：1.13—1.09—1.08—1.06—1.04—1.04，而重稀土从Gd到Lu依次为：1.02—1.00—0.99—0.98—0.97—0.96—0.94，离子半径递减。6次配位时二价铕的离子半径为1.03，它与轻稀土呈弱正相关。与重稀土呈负相关，随原子序数增大负相关增强。因此，岩浆演化过程中，铕经分馏作用与其他稀土元素分离，形成铕异常。

4. 花岗岩演化过程中稀土元素行为——R型因子分析结果

对相关矩阵R进行特征值分析，为达到最"简洁结构"，经方差极大旋转和PROMAX斜旋转，得到方差极大主因子解（表2-6-15）和斜主因子解。现就方差极大主因子解作地质解释。其前三个特征值(方差)累计百分数达95.45%，故取前三个主因子即足以说明其变化。

表 2-6-14　花岗岩中稀土元素之间相关系数

	La	Ce	Pr	Nd	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	Y
La	1.00	0.93	0.83	0.90	0.57	0.45	0.39	0.19	0.10	0.04	0.02	0.01	−0.04	−0.04	−0.002
Ce		1.00	0.90	0.93	0.61	0.48	0.44	0.21	0.16	0.09	0.06	0.07	0.01	0.02	0.07
Pr			1.00	0.93	0.81	0.43	0.60	0.42	0.35	0.29	0.27	0.27	0.22	0.22	0.26
Nd				1.00	0.75	0.47	0.59	0.37	0.31	0.24	0.20	0.20	0.14	0.15	0.19
Sm					1.00	0.20	0.91	0.83	0.79	0.73	0.69	0.69	0.61	0.62	0.67
Eu						1.00	0.01	−0.23	−0.26	−0.31	−0.35	−0.34	−0.38	−0.33	−0.37
Gd							1.00	0.91	0.92	0.85	0.80	0.80	0.72	0.75	0.83
Tb								1.00	0.96	0.95	0.92	0.91	0.87	0.86	0.91
Dy									1.00	0.97	0.95	0.94	0.90	0.90	0.96
Ho										1.00	0.99	0.99	0.96	0.95	0.98
Er											1.00	0.99	0.98	0.97	0.98
Tm												1.00	0.98	0.98	0.97
Yb													1.00	0.98	0.96
Lu														1.00	0.96
Y															1.00

表 2-6-15 稀土元素方差极大主因子解

	F_1	F_2	F_3	F_4	共公因子方差
La	−0.0438	−0.9686	0.0507	−0.0123	0.9429
Ce	0.0070	−0.9801	0.0407	−0.0189	0.9626
Pr	0.2314	−0.9276	0.1594	0.0420	0.9412
Nd	0.1599	−0.9463	0.1569	0.1069	0.9572
Sm	0.6716	−0.6284	0.1720	0.2960	0.9630
Eu	−0.2936	−0.3978	0.8668	0.0107	0.9959
Gd	0.7962	−0.4336	0.0690	0.3839	0.9741
Tb	0.9089	−0.2233	−0.0612	0.2921	0.9650
Dy	0.9458	−0.1524	−0.0615	0.2547	0.9864
Ho	0.9859	−0.0868	−0.0651	0.0914	0.9921
Er	0.9894	−0.0610	0.0950	−0.0040	0.9916
Tm	0.9893	−0.0611	−0.0786	−0.0224	0.9891
Yb	0.9810	−0.0089	−0.1122	−0.1230	0.9902
Lu	0.9821	−0.0124	−0.0548	−0.1239	0.9831
Y	0.9767	−0.0545	−0.1224	0.0548	0.9749
方差贡献	8.7831	4.4873	0.8974	0.4414	
累计方差贡献(%)	58.55	88.46	94.45	97.39	

第一主因子F_1上，具最高载荷的元素全部是重稀土元素。它们的因子载荷由0.80至0.98，除 Sm 外，其它轻稀土元素因子载荷甚微。因此，主因子F_1代表重稀土元素．相反，第二主因子F_2上，轻稀土元素因子载荷最大，除 Sm 外，其余 4 个元素的因子载荷均大于0.93，而重稀土甚微。故主因子F_2代表轻稀土元素。除Eu外，在F_1和F_2上几乎所有稀土元素的载荷都是同符号，表示稀土作为一组元素在地质作用中具有几乎相似的地球化学行为。第三主因子F_3上，铕的因子载荷最大（0.8668），其它元素所占载荷极小。主因子F_3代表氧化还原环境，反映铕与其它稀土元素的分离。

用公因子F_1为横坐标，F_2为纵坐标，在方差极大主因子载荷图上（图 2-6-6），轻稀土元素位子 F_2 轴下方，类聚一起，重

稀土元素位于F_1轴右方，也密集地类聚一起，铕则孤立地位于F_1轴的左侧。这幅图具体而客观地反映出花岗岩中轻重稀土元素的分离及铕的分馏作用，表明花岗岩的稀土模式是分馏型.R 型因子载荷图上，稀土元素这样有规律分布，与地球化学家提出的稀土元素地球化学性质的划分如此契合，使人想到统计方法在元素地球化学分类中也不失是一个好方法。

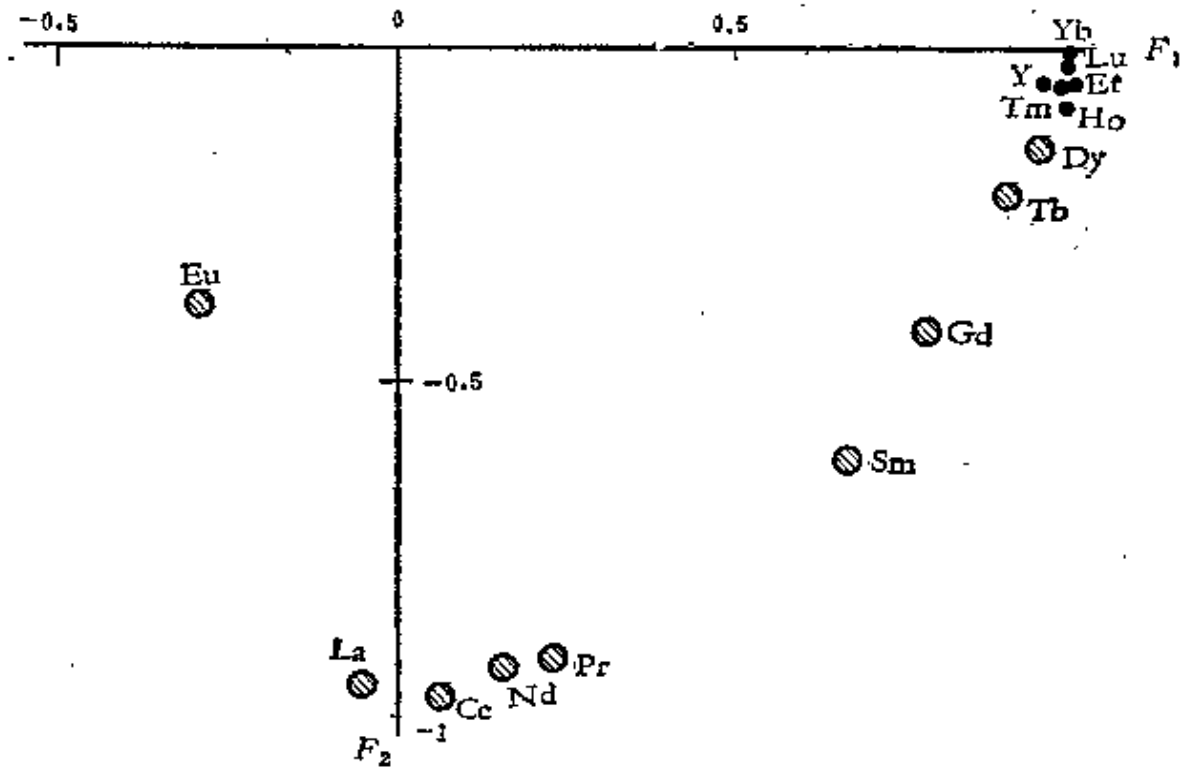


图 2-6-6 稀土元素方差极大主因子载荷图(F_1对F_2)

为了研究因子间的相关关系，在正交因子解基础上作斜旋转，获得斜参因子解（表2-6-16).经过旋转变换之后，轻重稀土的两极分化更突出。斜主因子F_1上，重稀土元素的载荷增高，轻稀土载荷转化为负号，轻重稀土呈反消长关系.斜主因子F_2加大了轻稀土载荷，重稀土则压缩到近于零，更显示出轻、重稀土的分离作用。主因子F_3上Eu载荷增大，其它元素的载荷明显减少，更突出了Eu的作用。与方差极大主因子解明显不同的是在F_4上突出了中稀土组作用。Gd(0.65)，Tb(0.51)和Dy(0.45)是轻重稀土之间的中稀土组(MREE)，所以主因子F_4代表中稀土。用

斜主因子F_1对F_3作图（图 2-6-7），沿F_1轴从左至右按原子序数增大依次出现轻稀土、中稀土，到重稀土。铕则远远离开正常位置，反映铕的分馏作用。

表 2-6-16　花岗岩稀土元素斜主因子模型

	F_1	F_2	F_3	F_4
La	−0.1328	−1.0464	−0.0749	−0.0515
Ce	−0.0789	−1.0633	−0.0811	−0.0614
Pr	0.1362	−0.8665	0.0814	0.0526
Nd	−0.0002	−0.8478	0.0513	0.1571
Sm	0.3887	−0.2873	0.1219	0.4987
Eu	−0.0908	0.0245	0.9768	0.0234
Gd	0.4255	−0.0507	0.0134	0.6515
Tb	0.6112	0.0503	0.0817	0.5055
Dy	0.6921	0.1040	−0.0585	0.4471
Ho	0.8920	0.0551	−0.0075	0.1796
Er	0.9784	−0.0063	−0.0159	0.0213
Tm	1.0005	−0.0101	−0.0089	−0.0087
Yb	1.0816	−0.0489	−0.0003	−0.1752
Lu	1.1009	−0.0211	0.0702	−0.1749
Y	0.9029	0.0294	−0.0653	0.1177

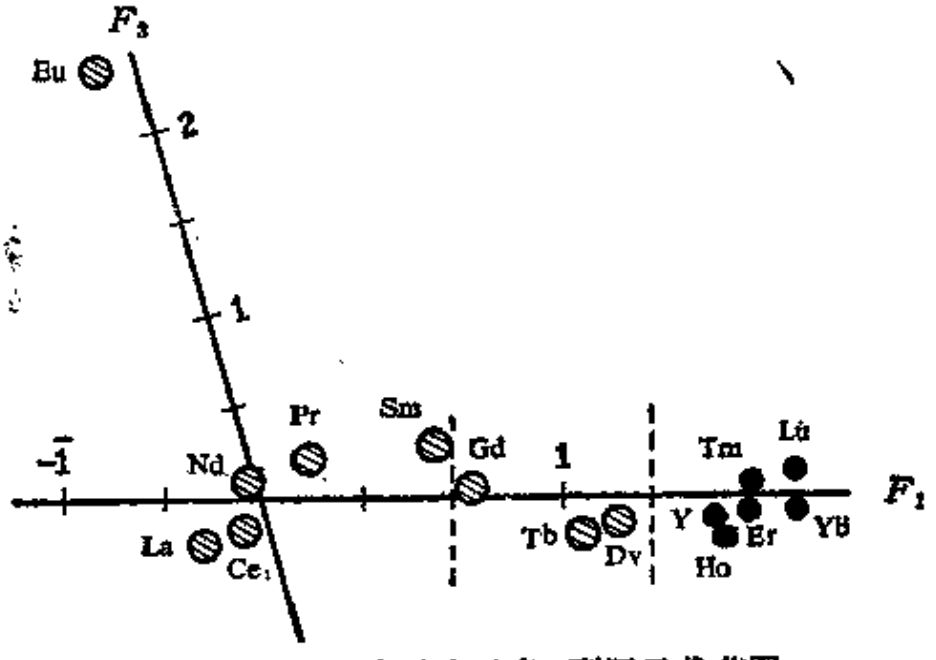


图 2-6-7　花岗岩稀土元素R型因子载荷图

如上所述，斜主因子F_1和F_2分别代表重稀土与轻稀土，斜主因子F_3和F_4分别代表铕和中稀土，每一个主因子代表一种独立的地质意义。经PROMAX斜旋转后，上述各因子间已变成相关因子，其相关系数矩阵见表2-6-17。从中看到，F_1（重稀土轴）与F_4(中稀土轴)有较大正相关，($R_{F_1-F_4}=0.57$)，F_2(轻稀土轴)与F_4有较大负相关，($R_{F_2-F_4}=-0.62$)，F_1、F_2轴都与代表铕的F_3轴呈负相关。F_1与F_2之间呈微弱负相关。

表 2-6-17 因子相关系数矩阵

	F_1	F_2	F_3	F_4
F_1	1.00	-0.14	-0.27	0.57
F_2		1.00	-0.49	-0.62
F_3			1.00	0.22
F_4				1.00

5．华南两类花岗岩稀土元素分布规律

前已述及，斜主因子F_1的正端代表重稀土，F_1的负端代表轻稀土；F_3的正端代表铕正异常，F_3的负端代表铕负异常。因此，用F_1、F_3作标本因子得分图(图2-6-8)，最能反映不同成因类型花岗岩稀土分布的特点及其演化。

（1） 同熔型花岗岩基本上分布于$F_1<0$、$F_3>0$的区域内，包括浙江五步火山侵入杂岩（No1,2），浙江桐庐火山侵入杂岩(No12，13)，福建晋江由火山岩经混合岩化形成的混合花岗岩(No4—9)，安徽太平花岗闪长岩(No10)，广东莲花山火山侵入杂岩(No16—18)，德兴铜厂、银山火山-侵入杂岩(No26，27)等。这一类型的稀土配分模式特点是相对富含轻稀土，其LREE/HREE=3—18，铕有弱的正异常（如五步的火山侵入杂岩）至弱的负异常，Eu/Eu*变化区间为0.5—1.22。应该指出，铕负异常的强弱与全岩的化学成分有关。如宁芜地区花岗闪长岩(No14)，

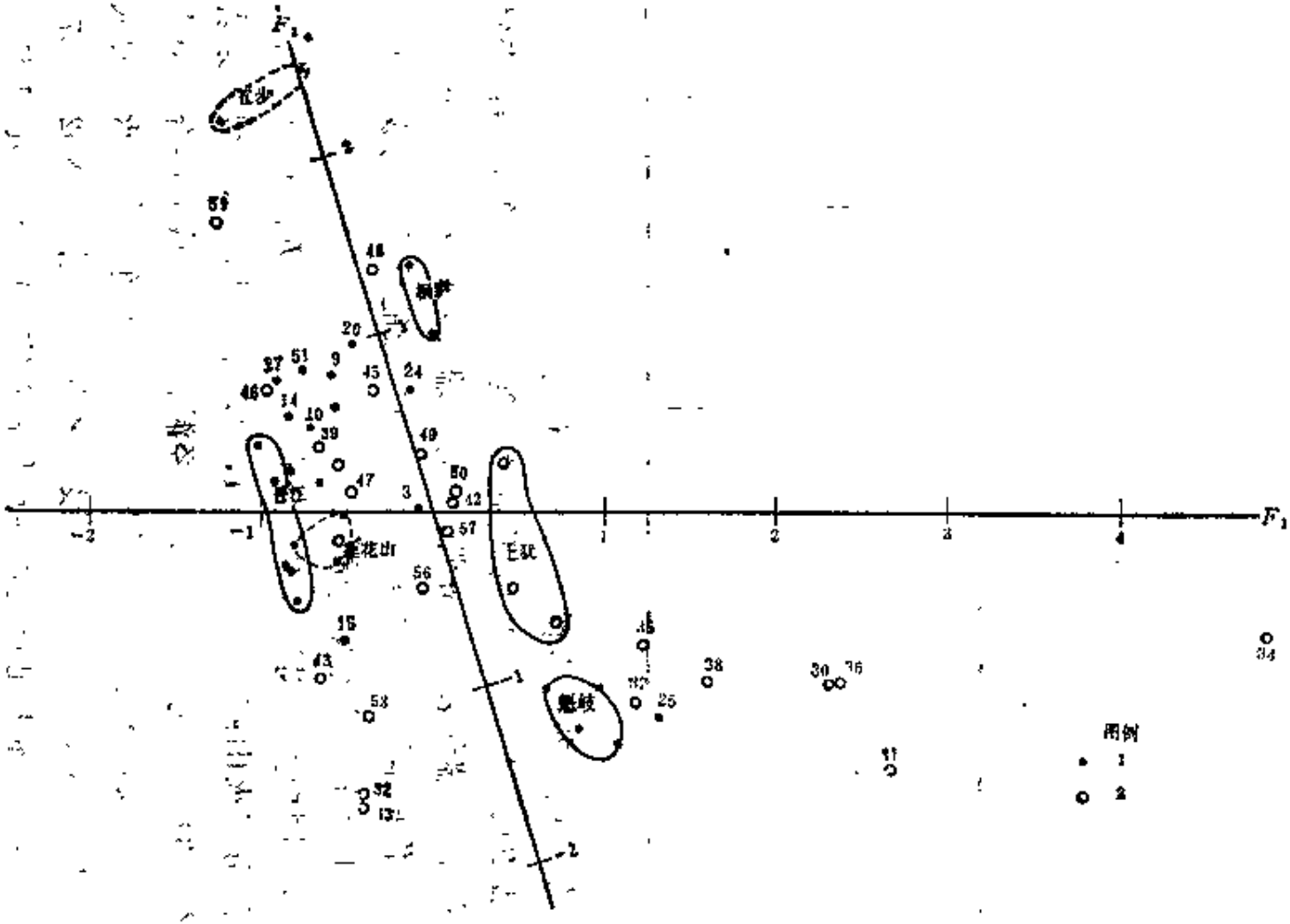


图 2-6-8　华南不同成因花岗岩稀土元素因子得分平面图

1—同熔型和A型（鹿峙）花岗岩；2—改造型花岗岩 .点旁号码为样品号

Eu/Eu*=0.87，但其分异产物的花岗岩(No15)，Eu/Eu*=0.50．这类同熔型花岗岩的典型代表可举太平花岗闪长岩(No 10)，它据于分布区的中间位置，其主要的稀土配分参数为：

$$\Sigma REE=151.46ppm,\ LREE/HREE=4.90,$$

$$Eu/Eu^*=0.72$$

这些参数与模拟计算的下部地壳60%的部分熔融的稀土模式的参数相当（刘昌实等）。

（2） 原地、半原地混合岩化花岗岩(改造型的一种)的分布点与同熔型花岗岩互有交叉，二者的稀土配分模式有许多相似之处.如广东罗定的混合花岗岩(No45—47)，福建桂洋片麻状花岗岩(No48—50)等。桂洋片麻状花岗岩有代表性，其稀土配分参数为

$\Sigma RKK=174.6ppm$，$LREE/HRKK=7.73$，$Eu/Eu^*=0.52$，与同熔型的太平花岗闪长岩的参数接近。这表明沉积作用只是把由洋壳俯冲而增生的陆壳物质中稀土元素地理分布均匀化，并未造成稀土的分离.由交代作用形成的改造型花岗岩稀土配分模式接近于同熔型花岗岩，也接近于粘土岩的平均值(Taylor，1979)。

(3)上部陆壳重熔形成的改造型花岗岩，其稀土配分模式与前三者有明显差别，分布于$F_3<0$，$F_1>-1$的区间内。如江西上犹花岗岩 (No 40—42)，德兴大茅山花岗岩 (No 34—35)，安徽黄山花岗岩(No 36—38)，湖南瑶岗仙花岗岩 (No. 43，44)等。其突出的一个特点是铕呈显著负的异常，$Eu/Eu^*=0.44—0.08$，一般为0.2—0.3之间.其次是重稀土明显增益，LRKK/HRKK=3—0.5，之间。如果在花岗岩形成过程中，晚期晚阶段有强烈的碱质交代，则重稀土活化更加明显，甚至出现HRKK>LRKK，其投影点分布在图2-6-8右下方。稀土配分曲线呈V形。这种模式的成因解释有：①上部地壳部分熔融时，熔体内富含碱质(Na，K)。在碱性介质中重稀土络合物 ($NaHRKKK_4$)较轻稀土络合物稳定，因而重稀土活化转移到熔体中。②如果部分熔融发生在温度较低，氧逸度较低条件下，富钙斜长石作为难熔相出现，它吸

收大量Eu而使熔体内 Eu 亏损。③改造型岩浆形成后，富钙斜长石的结晶分离，导致残余的熔体内 Eu 贫化。以上三种地质作用使重熔的改造型花岗岩稀土元素分馏作用进一步强化，其配分模式明显不同于同熔型。

这类花岗岩的稀土配分模式可以江西大茅山花岗岩为代表(No35)，其参数为

$$\Sigma REE = 325.37 \text{ ppm}, \quad LREE/HREE = 2.68,$$
$$Eu/Eu^* = 0.13$$

（4） A型花岗岩，如福建魁岐花岗岩 (No21—23,25,55)，集中分布在图2-6-8右下部，与重熔改造型花岗岩分配模式比较接近；按怀特的成因分类，后造山A型花岗岩是在缺水但有 NaF大量加入条件下重熔形成。因而造成重稀土活化。在熔体内，钠长石组分剧增和钙长石组份贫化，是造成铕亏损的重要原因。这类稀土模式可以魁岐碱性长石花岗岩(No 23)为代表，其参数为 $\Sigma REE = 166.8$ppm，$LREE/HREE = 1.74$，$Eu/Eu^* = 0.21$

通过华南两种成因花岗岩类的稀土元素多元统计分析使我们认识到：

①多元统计的R 型因子分析，是研究元素地球化学行为、元素的地球化学分类的一个可行方法。在稀土元素R 型因子载荷图上，钇族稀土、铈族稀土和铕总是各自有其分布域，与地球化学家所作的元素分类极为吻合。显示稀土元素间既有相似，又有差异。

②因子载荷图上，铕元素总是与钇族、铈族元素分离，表明花岗岩类岩石稀土模式是分馏型的。随着洋壳俯冲，陆壳增生，反复多次地发生部分熔融，稀土元素之间的分馏作用越益增强。

③沉积作用只会使稀土元素地理分布均匀化，不会导致稀土元素强烈分馏。因而原地改造型花岗岩在稀土模式上很相似于同熔型花岗岩。

④重熔改造型花岗岩，由于富碱质，导致重稀土增益，铕亏损，其稀土配分模式明显不同于同熔型花岗岩。

小　结

统计学方法引进岩石化学研究领域，使我们的眼界为之开阔。本书第二篇试以常见的几种多元统计方法，研究华南不同时代、不同成因花岗岩的时空分布、分类、成因及演化规律。实践证明，用统计方法研究大区域岩石化学演化规律是行之有效的，可以弥补经典岩石学研究方法之不足，使岩石化学研究方法趋于完善，地质解释趋于深化。但是这一切都是在可靠的地质基础上进行的。质言之，欲想统计学方法得到合乎实际的地质解释，输入的数据必须是确有地质意义的，然后根据研究对象选择合适方法，并注意下述几个方面：

1．原始资料审定　在着手综合整理资料之前，必须严格审查野外和室内获得的原始资料，尤其是引用文献资料的可靠程度和精度，摒弃不可靠的资料，修订不符合原设计要求的资料。初审后的资料可使用聚类分析的初始分类结果核证，如发现与地质事实明显不符合的数据，应找出异常的原因．当使用这种资料时，应予说明，以免得出错误结果。

2．变量选择　变量选择是否得当，对分析结果的影响较大。岩石化学统计分析使用的原始变量是各种氧化物，以重量百分数表示。当对单个标本的成分求和时，它等于常数，形成系统的封闭性。原始数据中各氧化物之数量级最大相差$10\times n$倍，但MnO和P_2O_5除外，MnO和P_2O_5在岩石中的含量较低，由于以往分析中常缺该项分析，计算时将其当零输入，引起方差增大，人为的增大了它的作用。其实在火成岩的化学成分中MnO和P_2O_5的含量甚微，其变化也不大，不足以反映地质作用过程，反而导致分析结果歪曲失真，应该剔除掉。

用具有一定地质意义的转化数据，例如标准矿物和各种组合参数代替造岩氧化物，可大大改善分类效果，易于地质解释。我们在作两类花岗岩统计分析时，引入表征花岗岩Al_2O_3分配特点的

组合变量$A1'$后，分类效果大为改善。但为其他目的统计分析时，转化组合数据不宜完全代替原始化学分析数据，只能作为一种辅助手段。

3．类聚的标准和解释　聚类分析给出按标本（或变量）两两之间的相关系数或距离系数，并按它们之间最接近原则聚类。这种按相似性度量所划分的集合，并不完全是岩石类型的天然集合，它只是给出标本（或变量）之间的亲疏关系，必须人工选择分类标准（相似性度量），赋与每个类或群以某种地质解释。就岩石分类目的，可预先选择一些与研究对象有关的标准岩石作为对照标本参与统计。标准岩石所在的集合的其他岩石，在成分上必定与标准岩石相似。

聚类分析结果所构成的谱系图或其他图件，直观地反映了标本的分类结果。缺点是不能直接提供或反映"类"或"群"的成分特点。对应分析可以弥补它的不足。对应分析可以把标本的因子得分和变量的因子载荷投影到同一平面上。在对应因子平面图上，相邻的标本点成分相似，其成分特点可由邻近的变量表征。

4．岩石的成因和演化　因子分析、对应分析、相关分析及回归分析对子探讨火成岩和变质岩的成因和演化是个得力工具。尤以因子分析应用最广泛。每一个主因子代表着一种地质过程，或自然元素的共生组合。解释这些主因子间的相互关系，以揭示岩石的形成过程。

因子分析和对应分析的缺点，在于起最主要作用的前两个因子往往只反映标本的最本质的特征，不能反映标本变化的全部特征。补救的办法是多作几幅图以供对比分析。

电子计算技术和统计学方法的迅速推广，经典岩石化学研究方法与统计学研究方法有机结合，相互渗透，是近代岩石化学研究方法的一个特色。它将使岩石化学数据的统一收录、贮存、运算、自动成图、地质解释成为可能，大大提高岩石化学的综合信息和利用效果。

第二篇　参考文献

〔1〕 中国科学院数学研究所统计组，1974，常用数理统计方法．科学出版社．

〔2〕 中国科学院地质研究所编著，1979，数学地质引论、地质出版社．

〔3〕 小乔冶·S·科克、理查德·F·林克著，王仁铎、刘绂堂译，1978，地质数据统计分析．科学出版社．

〔4〕 王宗皓、李麦村，1974，天气预报中的概率统计方法．科学出版社．

〔5〕 王学仁，1979，Fisher意义下多级逐步判别分析及其特征．云南大学学报(自然科学版)，2．

〔6〕 王学仁，1980，典型回归及其在趋势分析中的 应用．云南大学学报(自然科学版)，1．

〔7〕 王联魁等，1976，关于南岭花岗岩时代和 分期讨论的倡仪．地球化学，1．

〔8〕 王德滋等，1982，华南前寒武纪 幔源型花岗岩类的 基本特征．桂林冶金地质学院学报，4．

〔9〕 方开泰，1979，聚类分析．数学的实践与认识，2．

〔10〕 方开泰，1981，多变量作图法．数学实践与认识，2．

〔11〕 方开泰、潘恩沛著，1982，聚类分析．地质出版社．

〔12〕 刘承祚、张彦波，1976，河北省一个 铁矿钠质交代岩的多元统计研究．地质科学，2．

〔13〕 刘承祚、孙惠文，1980，数学地质的现状和任务．数学地质专辑(一)、地质出版社．

〔14〕 煤炭科学研究院地质勘探研究所等编著，1979，数学地质基础方法、煤炭工业出版社．

〔15〕 范继章，1979，多元统计 方法在变质岩原岩 恢复工作中的应用．长春地质学院院报．

〔16〕 吴思本，1980，钟九铁矿床某些矿物地球化学特征的趋势分析．地质学报．

〔17〕 吴思本，1980，金云母折光率的找矿意义．数学地质专辑(一)，地质出版社．

〔18〕 肖义越、徐遵一、尹集祥，1974，珠穆朗玛峰顶部结晶灰岩地质年代的判别分析．地质科学，2．

〔19〕 陈泽铭、张金章、牟惟熹，1979，逐步判别分析在海南石碌铁矿成矿物质来源研究中的应用．南京大学学报，地质专刊(一)．

〔20〕 於崇文等编著，1980，数学地质的方法与应用．冶金工业出版社．

〔21〕 刘昌实、牟惟熹、潘恩沛，1982，主分量分析与华南两类成因花岗岩

的划分.桂林冶金地质学院院报，2.

〔22〕 刘昌实等，1982，浙江桐庐火山—侵入杂岩的特征和演化．南京大学学报（自然科学版），2.

〔23〕 牟惟熹等，1980，趋势分析在华南花岗岩研究中的应用．南京大学学报(自然科学版)，3.

〔24〕 牟惟熹，刘昌实，1983，华南两类不同成因花岗岩的岩石化学判别准则．物化探电子计算技术，2.

〔25〕 华仁民、董忠泉，1982,德兴地区两个系列花岗岩的特征及成因.南京国际花岗岩地质和成矿关系讨论会论文集，江苏科技出版社.

〔26〕 孙鼐、曹佳宏、王赐银、牟惟熹，1982，中国东南沿海中生代火山岩的混合岩化、花岗岩化作用研究——以福建晋江、东山地区为例．南京国际花岗岩地质和成矿关系讨论会论文集，江苏科技出版社.

〔27〕 孙鼐、刘昌实、赵连泽、楚雪君、于镇藩、张跟娣，1982，安徽黄山地区两类不同成因系列花岗岩的复合.南京国际花岗岩地质和成矿关系讨论会论文集，江苏科技出版社.

〔28〕 朱炳泉、周新华，1976．同位素年龄频谱统计与显生代年代表．地球化学,2.

〔29〕 朱裕生、余金生，1981，应用统计分析探讨宁芜次火山岩母岩浆的演化和矿化蚀变作用.中国地质科学院院报，矿床地质研究所分刊.

〔30〕 北京林学院数学教研组，1961，数理统计学。农业出版社.

〔31〕 张尚志，1980，对应分析的原理和作用.物化探电子计算技术，2.

〔32〕 施实，1976，前寒武纪摩天岭岩体同位素地质年龄讨论.地球化学，4.

〔33〕 胡受奚等，1979，关于我国东南部不同时代花岗岩的年龄及分期问题的讨论.地球化学，3.

〔34〕 张理刚等，1976,南岭地区二叠纪、三叠纪花岗岩的时代和有关问题.地球化学,4.

〔35〕 陈好寿，1978,关于南岭地区燕山期花岗岩浆活动的分期问题．地球化学,3.

〔36〕 南京大学地质系，1981,华南不同时代花岗岩类及其成矿关系．科学出版社.

〔37〕 贵阳地球化学研究所，1979，华南花岗岩的地球化学.科学出版社.

〔38〕 闻广、吴恩本，1983，安徽铜陵凤凰山岩体若干特征及成矿关系.中国地质科学院院报，第七号.

〔39〕 姚棣荣、李麦村,1980,论离散判别分析(一)、(二).杭州大学学报，2,3.

〔40〕 洪大卫，1982，华南花岗岩的黑云母和矿物相及其矿化系列的关系.地质学报，2.

〔41〕 复旦大学数学系，1978，概率论与数理统计.上海科技出版社.

〔42〕 徐道一、孙文鹏,1979,我国南方燕山期不同矿化花岗岩判别．地质科学,1.

〔43〕 潘恩沛、李公时，1980，海南石碌铁矿两类变质岩的因子分析及地质意义．数学地质专集(一)，地质出版社.

〔44〕 Albuquerque, C. A. R. de, 1978, Rare elements in younger granites, northern Portugal; Lithos., Vol. 11, 3

〔45〕 Alderton, D. H. M., Pearce, J. A., and Potts, P. J., 1980, Rare earth element mobility during granite alteration; evidence from southwest England; Earth and Planetary Science Letters, Vol. 49, 1

〔46〕 Brotzen, O., 1975, Analysis of multivariate point distributions and chemical grouping of rocks; J. Math. Geol., Vol 7,3

〔47〕 Albuquerque C. A. R., de, 1977, Geochemistry of the tonalitic and granitic rocks of the Nove Scotia Southern plutons; Geochim. et Cosmmoch. Acta, Vol. 41,1

〔48〕 Chayes, F., 1949, On ratio correlation in petrography; Jour. Geol., Vol. 56

〔49〕 Chayes, F., 1960, On correlation between variables of constant sum; Jour. Geophys Research, Vol. 65

〔50〕 Chayes, F.,1962, Numerical correlation and Petrographic variation. Jour. Geology,Vol. 70

〔51〕 Chayes, F. and Velde, D., 1965, On distinguishing basaltic lavas of circummoceanic and oceanic-island type by means of discriminant functins, Amer. J. Sci., Vol. 263

〔52〕 Chayes, F. and Trochimczyk, L.,1978, Some properties of principal component scores. Jour. Math. Geol.,Vol. 10

〔53〕 Chayes, F., Wimble, R. H.,1976,A review of "ratio correlation." Jour. Math. Geol.,Vol. 8, 5

〔54〕 Chaeys, F. and Trochimczyk, J., 1978, An effect of clisuse on the structure of principal components. Jour. Math. Geol.,Vol. 10, 4

〔55〕 Choubert, B. and Zanone, L., 1976, On the distribution of atoms in magmatic systems; Normal geochemical law. Jour. Math. Geol., Vol. 8,2

〔56〕 Cole, A. J. and Merriam, D. F., 1971, A review of "Numerical taxonomy". Jour. Math. Geol.,Vol. 3,3

〔57〕 Colley, H. and Till, R., 1973, Thoughts on use of principal co-

mponent analysis in petrogenetic problems. Jour. Math. Geol. ,Vol. 5, 4

〔58〕 Collins, W.J., Beams, S.D. , White, A.J.R,and Chappell, B.W., 1982, Nature and origin of A- type granites with particular reference to southern Australia. Contr. mineral. and pretrol. , Vol. 80, 2

〔59〕 Cullers, R. L. and Graf, J. L. , 1984, Rare earth elements in igneous rocks—ore petrogenesis, in Aenderson P. ed. ; Rare earth element geochemistry, Elsevier

〔60〕 Davis, J. C. , 1978, Statistics and data analysis in geology; John. Wiley and Sons, New york

〔61〕 David, M. , Campiglio, C. ,and Darling, R. , 1974, Progresses in Rand Q-mode analysis; correspondence analysis and its application to the study of geological processes. Can. Jour. Earth. Sci. ,Vol. 1

〔62〕 Dodge, F. C. W. , 1969, Biotites from granitic rock of central sierra Nevada batholith, California; Jour. Petro. , Vol. 9,part 2

〔63〕 Draper, N. , and Smith, H. , 1966, Applied regression analysis; John wiley and Sons, New york

〔64〕 Dumitriu, C. , Webber R. ,and David, M. , 1979, Correspondence analysis applied to a comparison of some rhyolitic zones in the Noranda areas. Jour. Math . Geol. ,Vol. 11,3

〔65〕 Dumitriu, M. , Dumitriu, C. , and David, M. , 1980, Typological factor analysis. A new classification method applied to geology. Jour. Math. Geol. ,Vol. 12,1

〔66〕 Emmermann, R. , Baleva, L. , and Schneider, J. , 1975, etrologic significance of rare earth distribution in granies. Contr. to Mineral. and Petrol. ,Vol. 52, 4

〔67〕 Flynn, R. T. , Burnham, C. W. , 1978, An experimental determination of rare earth partition coefficient between a chloride containing vapor phase and sillicate melts,; Geochim. et Cosmoch. Acta, Vol. 42

〔68〕 Frey, F. A. , Chappell, B. W. , Roy, S. D. , 1978, Fractionation of rare- earth elements in the Tuolumne intrusive series, Sierra Nevada batholith, California; Geol. , Vol. 6,4

〔69〕 Gromet, L. P. , Silver, L. T. , 1983, Rare earth element distributions among minerals in a granodiorite and their petrogenetic implications. Geochi. et Cosmoch. Acta, Vol. 47,5

〔70〕 Gastil, G. , 1981, The distribution of mineral dates in time and space, in' Megacycles long-term episodicity in earth aad plantary history,

edited by G. E. Williams Hutchinson Ross publishing company pp 19—40

[71] Howarth, R. J., 1971, An empirical discriminant method applied to sedimentary rock classificatton, Jour. Math. Geol., Vol. 3,1

[72] Kuvoda, Y., Ruiz Furrer, C. Vistelius, A. B., Ivanov, D. N., 1970, Variations of modal composition of granitic rocks in some regions around the pacific. Jour. Math. Geol. ,Vol.2,1

[73] Hanson, G. N., 1980, Rare earth elements in petrogenetic studies of igneous systems, Anual Review of Earth and Planetary Sciences, Vol. 8

[74] Haskin, L. A., 1984, petrogenetic modelling—use of rare earth elements, in Henderson P. ed.: Rare earth element geochemistry

[75] Kulkarni,S. R. ,Chavadi,V. C.and Gokhale,N. W., 1972, Geostatistical investigations of gabbro occurrences near Savantvadi, Ratnagiri District, India,Jour. Math. Geol. ,Vol. 4,2

[76] Le Matitre, R. W., 1968, Chemical variatton within and between volcanic rock series—A statistical approach. Jour. Petrol., Vol. 9, 2

[77] Matheron, G., 1963, Principles of geostatistics: Econ. Geol. Vol. 58, 3.

[78] Paul. P. C., 1981, Distinction between permian and postpermian igneous rocks in the southern Sydeny basin, New South Wales, on the basis of major-element geochemistry. Jour. Math Geol., Vol. 13, 3

[79] Podolsky, Y. V., 1975, Variation of chemical composition of alkaline granitic rocks in central part of the Kola Peninsula, Jour. Math. Geol. ,Vol. 7, 3

[80] Saha, A. K. and Rao, S. V. L. N, 1971, Quantitative discrimination between magmatic units of the Singhbum granite. Jour. Math. Geol., Vol. 3, 2

[81] Siddique, H. N. and Mallik, T. K., 1972, Trend surface analysis of distribution of some heavy minerals in shelf sediments of Mangalore, India. Jour. Math. Geol. ,Vol. 4,4

[82] Teil, H., 1975, Correspondence factor: An outline of its method, Jour. Math. Geol. ,Vol. 7,1

[83] Teil, H. and Cheminee, L. L., 1975, Application of corresspondence factor analysis to the study of major and trace elements in the Earth Alechain, Jour. Math. Geol, Vol. 7,1

[84] Vistelius, A. B., 1972, Ideal granite and its properties, The stochastic model, Jour. Math. Geol. ,Vol. 4, 2

[85] Vistelius, A. B. ,and Harbaugh, J. W. , 1980, Granitic rocks of Yosemito valley and an ideal granite mode,Jour. Math. Geol. ,Vol. ,12, 1

[86] Valenchon, F. , 1982, The use of correspondence analysis in geochemistry: Jour. Math. Geol. ,Vol. 14, 4

[87] Whitten, E. H. , 1961, Quantitative and modal analysis of granitic complex,Geol. Soc. Amer. Bull. ,Vol. 72

后　记

本书第一篇由刘昌实执笔，第二篇由牟惟熹执笔，辛克礼参与部分程序的设计。在编写过程中得到中南地勘局二三〇研究所潘恩沛同志、胜利油田阎汉杰同志、南京农学院程极益同志热心的支持和帮助。初稿完成后地质矿产部地质科学院矿床研究所朱裕生同志详细审阅了全文并提出许多宝贵的修改意见。在此，对他们热心支持表示衷心感谢。

著　者

1985．4．29

附录Ⅰ　尼格里数值法程序

```
10 REM NIGGLI METHOD
20 INPUT"NUMBER OF SAMPLE";N
30 INPUT"NUMBER OF VARIATION";M
40 DIM A(N,M),B(M),D(16),D$(16),N$(30),E(16),Z(30)
50 DEF FN P(X,Y)=100*X/Y
60 FOR I=1 TO 16:READ D$(I):NEXT I
70 FOR I=1 TO 16: READ E(I):NEXT I
80 FOR I=1 TO 30:READ N$(I):NEXT I
90 FOR I=1 TO N:FOR J=1 TO M:READ A(I,J):NEXT J,I
100 FOR I=1 TO N
110 LPRINT SPC(60);"NO=";I
120 FOR J=1 TO M:B(J)=A(I,J):D(J)=B(J)*E(J):NEXT J
125 LPRINT SPC(11)
130 FOR J=1 TO 6:LPRINT"    ";D$(J);"=";USING
    "###.###";B(J);:NEXT J
140 LPRINT SPC(30)
150 FOR J=7 TO M:LPRINT"    ";D$(J);"=";USING
    "###.###";B(J);:NEXT J
160 LPRINT SPC(90);"NIGGLI   PARAMETER"
170 FOR  J=1 TO 30:Z(J)=0:NEXT J
180 Z(14)=(B(5)+B(4))/(B(5)+B(4)+B(7)):Z(15)=B(2)
190 Y=B(7)+B(8)+B(5)+.9*B(4)
200 Z(16)=FN P(B(7),Y):Z(17)=FN P(B(8),Y)
    :Z(18)=FN P(.9*B(4),Y)
210 Y=B(3)+B(8)+2*(B(4)+B(5))+B(7):
    Z(26)=FN P(B(3),Y)
215 Z(27)=FN P(B(8),Y):
    Z(28)=FN P(2*(B(4)+B(5))+B(7),Y)
240 Z(30)=10.44-.21*B(1)-.32*(B(4)+1.1113*B(5))
          -.98*B(7)+.55*B(8)+1.46*B(9)+.54*B(10)
242 FOR J=1 TO M
243 IF B(J)=0 THEN B(J)=1
244 NEXT J
246 Z(29)=3.0705*LOG(B(2))+.8295*LOG(B(3))
          -1.4288*LOG(B(4))+3.6828*LOG(B(5))
          +1.2899*LOG(B(6))+2.0889*LOG(B(7))
          +3.3875*LOG(B(8))+1.7024*LOG(B(11))
          -15.08
```

```
248 IF M>13 THEN Z(29)=Z(29)+.06514*LOG(B(13))
250 Z(2)=2*D(4)+D(5)+D(6)+D(7):Z(3)=D(9)+D(10)
260 Z(8)=D(7)/Z(2):Z(9)=2*D(4)/Z(2)
    :Z(10)=D(10)/Z(3)
270 Y=Z(2)+Z(3)+D(3)+D(8)
280 Z(1)=FN P(D(3),Y):Z(2)=FN P(Z(2),Y):
    Z(3)=FN P(Z(3),Y)
290 Z(4)=FN P(D(8),Y):Z(5)=FN P(D(1),Y):
    Z(6)=FN P(D(2),Y)
300 Z(7)=FN P(D(11),Y)
310 T=Z(1)-Z(3)-Z(4)
320 IF T>=0 OR (Z(1)>Z(3) AND Z(1)<Z(3)+Z(4)) THEN
       Z(11)=Z(5)-(100+4*Z(3)):GOTO 350
340 IF Z(3)>Z(1) THEN Z(11)=Z(5)-(100+3*Z(1)+Z(3))
350 Z(12)=Z(4)/Z(2)
360 IF Z(12)>9 THEN Z(13)=10:GOTO 400
370 FOR J=0 TO 8
380 IF Z(12)>10*J/(100-10*J) AND Z(12)<10*(J+1)/
       (100-10*(J+1)) THEN Z(13)=J+1:GOTO 400
390 NEXT J
400 Z(20)=2*(D(3)+D(4))+D(5)+D(2):Z(19)=D(7)+D(8)
410 Z(22)=Z(1)-Z(3)
420 Y=100*Z(8)+Z(4)+Z(22)
430 Z(23)=FN P(100*Z(8),Y):Z(24)=FN P(Z(4),Y):
    Z(25)=FN P(Z(22),Y)
440 Z(21)=Z(1)+Z(2)-Z(3)-Z(4)
450 LPRINT:FOR J=1 TO 30
460 LPRINT"   ";N$(J);"=";USING"###.##";Z(J);
470 IF J/8=INT(J/8) THEN LPRINT
480 NEXT J
485 LPRINT SPC(90);"***************":LPRINT
490 NEXT I
500 END
550 DATA "  SiO2"," TiO2","Al2O3","Fe2O3","  FeO"
       "  MnO","  MgO","  CaO"," Na2O","  K2O",
       " P2O5","  H2O","  CO2","    S","Cr2O3",
       "  NiO"
```

```
560 DATA 16.6431,12.5158,9.8076,6.2620,13.9186,
         14.0969,24.8111,17.8318,16.1345,10.6162,
         7.0450,55.5087,22.7222,15.5958,6.5794,
         13.3870
570 DATA "    al","     fm","   alk","      c",
         "    Si","     ti"
580 DATA "     p","    mg","     o","      k",
         "    Qz","   c/m","    No","MeslaX",
         "MeslaY","   OkM","   OkC","    OkF"
590 DATA " MoelX","  MoelY","CemlaY","   LekY",
         " LekMG","  LekC"
600 DATA " LekAL"," CemehA","CemehC"," CemeFM",
         "ShawF1"," ShawF2"
```

附录Ⅱ　查瓦里茨基方法程序

```
10 REM ZABALESKE METHOD
20 INPUT "NUMBERS OF SAMPLE";N
30 INPUT "NUMBERS OF VARIATION";M
40 DIM A(N,M),C(M),D(M),D$(11),N$(16),E(11),Z(16)
45 DEF FN P(X,Y)=X*100/Y
50 FOR I=1 TO 16:READ N$(I):NEXT I
60 FOR I=1 TO 11:READ D$(I):NEXT I
70 FOR I=1 TO 11:READ E(I):NEXT I
90 FOR I=1 TO N:FOR J=1 TO M:READ A(I,J):NEXT J,I
100 FOR I=1 TO N
110 LPRINT SPC(55);"NO=";I
120 FOR J=1 TO M:C(J)=A(I,J):D(J)=C(J)*E(J):NEXT J
125 LPRINT SPC(11)
130 FOR J=1 TO 6:LPRINT"   "D$(J);USING"###.###";
    C(J);:NEXT J
132 LPRINT SPC(36)
135 FOR J=7 TO M:LPRINT"   "D$(J);USING"###.###";
    C(J);:NEXT J
137 LPRINT SPC(90);"ZABALESKE  PARAMETERS"
140 FOR J=1 TO 16:Z(J)=0:NEXT J
180 Z(1)=D(1)+D(2):FE=D(4)+D(5)+D(6)
    :Z(9)=D(7):Z(15)=D(1)+D(2)
185 Z(15)=FN P(D(2),Z(15))
190 NKC=D(9)+D(10)+2*D(8)
200 IF D(3)>NKC GOTO 252
210 IF D(3)<D(9)+D(10) AND D(3)>D(9) GOTO 260
220 IF D(3)<D(9) GOTO 300
230 Z(2)=D(9)+D(10):Z(3)=.5*(D(3)-D(9)-D(10))
240 Z(8)=D(8)-Z(3):Z(5)=FE+D(7)+Z(8)
250 GOSUB 500:GOTO 330
252 Z(2)=D(9)+D(10):Z(3)=D(8)
254 Z(11)=D(3)-NKC:Z(5)=FE+Z(11)+D(7)
256 GOSUB 500:GOTO 330
260 Z(2)=D(3):NA=D(9)+D(10)-D(3)
270 Z(4)=NA:Z(10)=FE-Z(4)
280 Z(5)=Z(10)+D(7)+D(8):Z(13)=D(3)-D(10)
```

```
290 Z(8)=D(8):Z(16)=FN P(D(4)-Z(4),Z(5)):GOTO 330
300 Z(2)=D(3):Z(4)=FE:Z(12)=D(9)+D(10)-D(3)-Z(4)
310 Z(5)=D(7)+D(8)+Z(12):Z(13)=D(3)-D(10)
320 Z(8)=D(8):Z(10)=0:Z(16)=0
330 SU=Z(1)+Z(2)+Z(3)+Z(4)+Z(5)
350 FOR J=8 TO 12:Z(J)=FN P(Z(J),Z(5)):NEXT J
360 Z(13)=FN P(Z(13),Z(2))
380 FOR J=1 TO 5:Z(J)=FN P(Z(J),SU):NEXT J
382 Z(6)=Z(1)-3*Z(2)-2*Z(3)-2*Z(4)-Z(5)
400 IF Z(3)=0 THEN Z(7)=Z(2)/Z(4):GOTO 404
402 Z(7)=Z(2)/Z(3)
404 Z(14)=100-Z(13)
406 LPRINT:FOR J=1 TO 8:LPRINT "     ";N$(J);USING
          "###.##";Z(J);:NEXT J
407 LPRINT:FOR J=9 TO 16:LPRINT"     ";N$(J);USING
          "###.##";Z(J);:NEXT J
408 LPRINT SPC(65);"--------------------------"
          :LPRINT
410 NEXT I
420 END
500 Z(10)=FE:Z(13)=D(9):Z(16)=FN P(D(4),Z(5))
510 RETURN
550 DATA "  s=","  a=","  c=","-c=","  b=","  Q="
          ,"a/c=","  c'="
560 DATA " m'=","  f'=","  a'=","  n'=","  n=","  k="
          ,"  t=","Fe3="
570 DATA " SiO2=","  TiO2=","Al2O3=","Fe2O3=",
          "  FeO=","  MnO=","  MgO=","  CaO=",
          " Na2O=","  K2O=","  P2O5="
580 DATA 16.6431,12.5158,19.6153,12.5240,13.9186,
          14.0969,24.8111,17.8318,32.2690,21.2325,
          14.0900
600 DATA 70.21,0.3,14.69,1.06,1.91,0.06,0.75,1.41,
          4.35,5.55,0.13
```

附录Ⅲ　巴尔特氧离子法程序

```
10 REM BARTH METHOD
20 INPUT"NUMBER OF SAMPLE";N
30 INPUT"NUMBER OF VARIATION";M
40 DIM A(N,M),B(M),E(12),C(12)
50 FOR I=1 TO 12:READ E(I):NEXT I
60 FOR I=1 TO 12:READ C(I):NEXT I
70 FOR I=1 TO N:FOR J=1 TO M:READ A(I,J):NEXT J,I
72 LPRINT SPC(50);"BARTH  PARAMETER"
75 LPRINT" NO      Si        Ti       AL        Fe3";
76 LPRINT"      Fe2       Mn       Mg       Ca";
77 LPRINT"       Na        K        p        OH"
80 FOR I=1 TO N
90 FOR J=1 TO M:B(J)=A(I,J):B(J)=B(J)*E(J):NEXT J
100 SU=0
110 FOR J=1 TO M:SU=SU+C(J)*B(J):NEXT J
120 SU=1600/SU
130 FOR J=1 TO M:B(J)=B(J)*SU:NEXT J
140 LPRINT USING"###";I;
150 FOR J=1 TO M:LPRINT "  ";USING"####.##";B(J);
    :NEXT J
155 LPRINT
160 NEXT I
200 DATA 16.6431,12.5158,19.6153,12.5240,13.9186,
         14.0969,24.8111,17.8318,32.2690,21.2325,
         14.0900,111.0142
210 DATA 2,2,1.5,1.5,1,1,1,1,0.5,0.5,2.5,1
230 DATA 52.68,0.72,14.02,5.04,6.4,0.01,3.35,6.42,
         2.43,3.3,1.3,1.89
```

附录Ⅳ　CIPW标准矿物计算程序

```
10 REM "CIPW-1"
20 CLEAR
30 INPUT "NUMBER OF SAMPLE?";N
32 INPUT "NUMBER OF VARIABLE?";M
40 DIM A(N,M),C(16),D(16),E(16),F(28),N$(28)
     P$(29),P(29),D$(16),S(10),FF(28)
42 DEF FN P(X,Y)=100*X/Y
44 FOR I=1 TO 28:READ FF(I):NEXT I
45 FOR J=1 TO 29:READ P$(J):NEXT J
50 FOR J=1 TO 16:READ D$(J):NEXT J
80 FOR J=1 TO 16:READ E(J):NEXT J
90 FOR I=1 TO 28:READ N$(I):NEXT I:RESTORE 9000
95 FOR I=1 TO N: FOR J=1 TO M: READ A(I,J):
   :NEXT J,I:RESTORE 6500
97 INPUT"CORRECT FE3?---Y OR N";FC$
98 IF FC$="N" THEN 100
99 INPUT"MODE OF CORRECT---P OR V";FE$
100 FOR K=1 TO N
110 LPRINT SPC(55);"NO";K
115 FOR J=1 TO 28:F(J)=0:NEXT J
120 FOR J=1 TO M:C(J)=A(K,J):D(J)=C(J):NEXT J
130 GOSUB 6200
135 LPRINT:LPRINT SPC(50);"MOLECULAR NUMBERS"
140 FOR J=1 TO M:D(J)=C(J)*E(J):NEXT J
150 GOSUB 6200
152 IF FC$="N" THEN 155
153 GOSUB 2040
155 LPRINT:LPRINT SPC(48);"CIPW-NORMATIVE MINERAL"
200 D(5)=D(5)+D(6)
202 F(9)=D(15)+D(16):D(5)=D(5)-F(9)
206 F(2)=D(14):D(5)=D(5)-F(2)
210 F(6)=D(11):D(8)=D(8)-3.33*F(6)
220 F(1)=D(13):D(8)=D(8)-F(1)
240 IF D(2)<=D(5) THEN 270
250 F(5)=D(5):D(2)=D(2)-F(5)
260 F(3)=D(2):D(8)=D(8)-D(2):D(5)=0:GOTO 280
270 F(5)=D(2):D(5)=D(5)-D(2)
280 F(10)=D(10):F(18)=D(7)
```

```
290 BA=D(3)>=D(8)+D(9)+D(10)
300 BN=D(3)<D(8)+D(9)+D(10) AND D(3)>D(9)+D(10)
310 BL=D(3)<D(9)+D(10)
320 IF BL THEN 380
330 GOSUB 5000
340 GOSUB 5030
350 GOSUB 5080
360 SB=D(1)-(6*F(10)+6*F(11)+2*F(12)+F(3)+F(14)
      +F(15)+F(16)+F(17)+F(18)+F(19))
370 GOTO 490
380 F(11)=D(3)-F(10):D(9)=D(9)-F(11)
390 IF D(4)<=D(9) THEN 440
400 F(24)=D(9)
410 D(4)=D(4)-F(24)
420 GOSUB 5030
430 GOTO 460
440 F(24)=D(4): F(25)=D(9)-F(24)
450 F(19)=D(5)
460 F(14)=D(8)
470 GOSUB 5080
480 SB=D(1)-(6*F(10)+6*F(11)+F(14)+F(18)+F(19)
      +F(3)+4*F(24)+F(25)+F(15)+F(16)+F(17))
490 IF SB>=0 THEN F(20)=SB: GOTO 510
500 GOSUB 5300
510 FOR J=1 TO 28:F(J)=F(J)*FF(J):NEXT J
535 LPRINT SPC(11)
540 FOR J=1 TO 28:LPRINT "      ";N$(J);"=";USING
    "###.##";F(J);
541 IF J/6=INT(J/6) THEN LPRINT:LPRINT SPC(11)
542 NEXT J
550 S1=0:S2=0
560 FOR J=1 TO M: S1=S1+C(J): NEXT J:S1=S1-C(12)
570 FOR J=1 TO 28: S2=S2+F(J): NEXT J
580 S1=ABS(S1-S2)
590 LPRINT "      ER=";USING "##.####";S1
600 P(1)=(C(9)+C(10))^2/(C(1)-43)
610 P(2)=C(5)/(C(4)+C(5))
620 X=C(10)/C(9):Y=C(3)+C(8)
```

```
630 IF C(1)>50 AND (X<2.5 AND X>=1) THEN
    P(3)=(Y+2*C(9))/(Y-2*C(9)):GOTO 650
640 P(3)=(Y+C(9)+C(10))/(Y-C(9)-C(10))
650 SU=.9*C(4)+C(5)+C(7)+C(9)+C(10): SU=SU/100
660 P(5)=(.9*C(4)+C(5))/SU: P(6)=C(7)/SU
670 P(7)=100-P(5)-P(6)
680 P(4)=F(10)+F(11)+F(26)+F(27)+F(28)+F(20)
700 SU=F(10)+F(11)+F(12)
710 IF SU=0 THEN 760
720 P(8)=FN P(F(10),SU):P(9)=FN P(F(11),SU)
    :P(10)=FN P(F(12),SU)
730 P(11)=D(10)*78.196:P(12)=D(9)*45.9754
740 P(13)=D(8)*40.08:SU=P(11)+P(12)+P(13)
750 FOR J=11 TO 13:P(J)=FN P(P(J),SU):NEXT J
760 P(16)=F(10):P(17)=F(11)+F(12)
770 IF F(20)>0 GOTO 790
780 P(15)=F(26)+F(27)+F(28):P(14)=0:GOTO 800
790 P(14)=F(20):P(15)=0
800 SU=P(14)+P(15)+P(16)+P(17)
810 FOR J=14 TO 17:P(J)=FN P(P(J),SU):NEXT J
820 FOR J=6 TO 9:C(J)=C(J+1):NEXT J
830 W1=C(4):C(4)=.9*C(4)+C(5)
840 FOR J=18 TO 20:GOSUB 4000:NEXT J
850 C(4)=W1
860 SU=0:FOR J=1 TO 9:SU=SU+C(J):NEXT J
862 SU=100/SU
864 FOR J=1 TO 9:C(J)=SU*C(J):NEXT J
866 FOR J=21 TO 26:GOSUB 4000:NEXT J
870 RESTORE 6500
880 P(27)=F(20)+.4582*F(11)+.2992*F(18)+.2277*F(19)
890 P(28)=F(26)+.5418*F(11):
    P(29)=F(21)+F(22)+.7008*F(18)+.7723*F(19)
900 SU=P(27)+P(28)+P(29)
910 FOR J=27 TO 29:P(J)=FN P(P(J),SU):NEXT J
915 LPRINT:LPRINT SPC(50);"OTHER PARAMETERS"
916 LPRINT SPC(11)
920 FOR J=1 TO 29:LPRINT"   ";P$(J);"=";USING
    "###.##";P(J);
```

```
930 IF J/6=INT(J/6) THEN LPRINT:LPRINT SPC(11)
940 NEXT J
950 LPRINT:LPRINT SPC(50);"**********************"
    :LPRINT
2000 NEXT K
2010 END
2040 IF FE$="P" THEN 2070
2060 XF=.93-.0042*C(1)-.022*(C(9)+C(10)):GOTO 2080
2070 XF=.88-.0016*C(1)-.027*(C(9)+C(10))
2080 OX=C(5)/(C(4)+C(5)):IF XF<OX THEN 2110
2090 XF=(1-XF)*(C(5)+.9*C(4))/(.1*XF+.9)
2100 C(5)=C(5)+.9*(C(4)-XF):C(4)=XF
2105 FOR J=1 TO M:D(J)=C(J)*E(J):NEXT J
2110 RETURN
4000 SU=0
4010 FOR I=1 TO 9:READ S(I):SU=SU+C(I)*S(I):NEXT I
4020 P(J)=SU
4030 RETURN
5000 F(11)=D(9)
5005 IF BN THEN F(12)=D(3)-F(11)-F(10):
     F(14)=D(8)-F(12):GOTO 5015
5010 F(12)= D(8):F(13)=D(3)-F(10)-F(11)-F(12)
5015 RETURN
5030 IF D(4)>=D(5) THEN 5040
5035 F(7)=D(4):F(19)=D(5)-D(4):GOTO 5045
5040 F(7)=D(5):F(8)=D(4)-D(5)
5045 RETURN
5080 IF F(14)>F(18)+F(19) THEN 5095
5085 F(15)=F(14):F(14)=0:
     F(16)=F(15)*F(18)/(F(18)+F(19))
5090 F(17)=F(15)-F(16):F(18)=F(18)-F(16):
     F(19)=F(19)-F(17):GOTO 5105
5095 F(16)=F(18):F(17)=F(19):F(15)=F(16)+F(17)
5100 F(14)=F(14)-F(15):F(18)=0:F(19)=0
5105 RETURN
5300 Y=ABS(SB):Z=.5*(F(18)+F(19))
5305 G=Z+4*F(3):P=G+4*F(11)
5310 U=P+2*F(10): V=U+.5*F(14)
5315 R=V+.5*(F(15)+F(16)+F(17)): L=R+2*F(10)
```

```
330 Z(5)=2.67*CAM:CAM=0
340 IF D(2)<FE2 GOTO 370
350 Z(3)=3*(D(2)-FE2):Z(4)=FE2*2
360 CAM=CAM-(D(2)-FE2):FE2=0:GOTO 380
370 Z(4)=2*D(2):FE2=FE2-D(2):Z(3)=0
380 IF D(3)>2*CAM+ALK GOTO 430
390 IF ALK>D(3) GOTO 450
400 B1=D(4):GOSUB 1000
410 Z(9)=5*D(9):Z(10)=2.5*(D(3)-ALK)
420 Z(11)=(CAM-.5*(D(3)-ALK))*2:GOTO 510
430 B1=D(4):GOSUB 1000:Z(9)=5*D(9)
440 Z(10)=5*CAM:Z(20)=D(3)-ALK-2*CAM:GOTO 510
450 IF D(4)<=ALK-D(3) GOTO  490
460 Z(9)=(D(3)-D(10))*5:Z(16)=(ALK-D(3))*4
470 B1=D(4)-(ALK-D(3)):GOSUB 1000
480 Z(11)=2*CAM:GOTO 510
490 Z(9)=(D(3)-D(10))*5:Z(16)=4*D(4)+1.5*(ALK-
        -(D(3)+D(4)))
500 Z(11)=2*CAM:FS=(D(4)+D(5))*2
510 Z(14)=100-Z(6)-Z(1)-Z(2)-Z(5)-Z(4)-Z(3)-Z(8)
    -Z(21)-Z(9)-Z(10)-Z(11)-Z(16)-Z(20)-FS-EN-Z(7)
520 IF Z(11)=0 GOTO 580
530 IF Z(11)>EN+FS GOTO 570
540 DFS=Z(11)*FS/(FS+EN):DEN=Z(11)-DFS
    :Z(13)=(EN-DEN)+(FS-DFS)
560 Z(12)=DFS+DEN+Z(11):Z(11)=0:GOTO 590
570 Z(12)=2*(FS+EN):Z(11)=Z(11)-FS-EN:Z(13)=0
    :GOTO 590
580 Z(12)=0:Z(13)=FS+EN
590 IF Z(14)>=0 GOTO 750
600 Y=ABS(Z(14)):Z=Z(13)/4:P=Z(9)/2.5+Z
610 U=P+Z(8)/5:R=U+Z(8)/5
620 IF Y>R GOTO 720
630 IF Y<=R AND Y>U GOTO 700
640 IF Y<=U AND Y>P GOTO 680
650 IF Y<=P AND Y>Z GOTO 660
655 Z(15)=3*Y:Z(13)=Z(13)-4*Y:Z(14)=0:GOTO 750
```

```
5490 GOSUB 6005
5495 GOSUB 6010
5500 GOSUB 6020
5505 F(28)=.5*(Y-R):F(27)=F(27)-F(28)
5520 RETURN
6000 F(22)=.5*F(18):F(21)=.5*F(19):F(18)=0:F(19)=0
6001 RETURN
6005 F(4)=F(3):F(3)=0:RETURN
6010 F(26)=F(11):F(11)=0:RETURN
6020 F(27)=F(10):F(10)=0:RETURN
6200 LPRINT SPC(11)
6210 FOR J=1 TO M LPRINT"  ";D$(J);"=";USING
     "####.##";D(J);
6220 IF J/6=INT(J/6) THEN LPRINT:LPRINT SPC(11)
6230 NEXT J:LPRINT
6240 RETURN
6300 DATA 0.1001,0.11598,0.1916,0.1360,0.1517,
          0.3289,0.2315,0.1597
6310 DATA 0.2238,0.5565,0.5244,0.2782,0.1019,
          0.1162,0.1162,0.1004
6320 DATA 0.1319,0.1004,0.1319,0.0601,0.2038,
          0.1407,0.1722,0.4620
6321 DATA 0.1221,0.2841,0.4365,0.3163
6400 DATA "  SEMA","    OR","    A.R","   D.I",
          "    F%","    M%"
6410 DATA "    A%","   OR%","    AB%","   AN%",
          "    K%","    Na%"
6415 DATA "    CA","    Q%","     F%","   OR%",
          "   P1%"," PEARF1"
6416 DATA "PEARF2","PEARF3"," LEMEV1","LEMEV2",
          "LEMEV3"
6420 DATA " LEMDF1","LEMDF2","LEMDF3","     Q'",
           "   NE'","   OL'"
6450 DATA "  SiO2","  TIO2","Al2O3"," Fe2O3",
          "   FeO","   MnO","   MgO"
6451 DATA "   CaO"," Na2O","   K2O","  P2O5",
          "   H2O","   CO2","    S"," Cr2O3",
          "   NiO"
```

```
5316 IF Y<Z THEN 5325
5317 IF Y>=Z AND Y<G THEN 5330
5318 IF Y>=G AND Y<P THEN 5345
5319 IF Y>=P AND Y<U THEN 5364
5320 IF Y>=U AND Y<V THEN 5383
5322 IF Y>=V AND Y<R THEN 5400
5323 IF Y>R THEN 5480
5324 PRINT"NO"
5325 F(22)=Y*F(18)/(F(18)+F(19)):F(21)=Y-F(22)
5330 F(18)=F(18)-2*F(22):F(19)=F(19)-2*F(21):
     GOTO 5520
5330 GOSUB 6000
5340 F(4)=Y-Z:F(3)=F(3)-F(4):GOTO 5520
5345 GOSUB 6000
5350 GOSUB 6005
5355 F(26)=.25*(Y-G): F(11)=F(11)-F(26):GOTO 5520
5364 GOSUB 6000
5365 GOSUB 6005
5370 GOSUB 6010
5375 F(27)=.5*(Y-P):F(10)=F(10)-F(27):GOTO 5520
5383 GOSUB 6000
5385 GOSUB 6005
5390 GOSUB 6010
5395 GOSUB 6020
5400 F(23)=Y-U:F(14)=F(14)-2*F(23):GOTO 5520
5408 GOSUB 6000
5410 GOSUB 6005
5415 GOSUB 6010
5420 GOSUB 6020
5425 F(23)=.5*F(14): CD=.5*(Y-V): F(14)=0
5430 AD=.5*(Y-V)*F(17)/(F(16)+F(17))
5435 OD=.5*(Y-V)-AD
5445 F(22)=F(22)+OD:F(21)=F(21)+AD:F(23)=F(23)+CD
5450 F(15)=F(15)-2*CD
5455 F(16)=F(16)-2*OD:F(17)=F(17)-2*AD
5460 GOTO 5520
5480 F(22)=.5*F(18)+.5*F(16)
5485 F(21)=.5*F(19)+.5*F(17)
```

附录Ⅴ　巴尔特-尼格里标准矿物分子法计算程序

```
10 REM BARTH NOR MINERAL METHOD
20 INPUT"NUMBER OF SAMPLE";N
30 INPUT"NUMBER OF VARIATION";M
40 DIM A(N,M),D(M),D$(16),N$(24),Z(24),E(16)
50 DEF FN P(X,Y)=100*X/Y
60 FOR I=1 TO 16:READ D$(I):NEXT I
70 FOR I=1 TO 16:READ E(I):NEXT I
80 FOR I=1 TO 24:READ N$(I):NEXT I
90 FOR I=1 TO N:FOR J=1 TO M:READ A(I,J):NEXT J,I
95 INPUT"CORRECT FE3?---Y OR N";FC$
96 IF FC$="N" THEN 100
97 INPUT"MODE OF CORRECT----P OR V";FE$
100 FOR I=1 TO N
110 LPRINT SPC(55);"NO";I
115 FOR J=1 TO 21:Z(J)=0:NEXT J
120 FOR J=1 TO M:D(J)=A(I,J):NEXT J
122 LPRINT SPC(11):FOR J=1 TO M:LPRINT"  ";D$(J);
    "=";USING"###.###";D(J);
124 IF J/6=INT(J/6)  THEN LPRINT:LPRINT   SPC(11)
125 NEXT J:LPRINT:LPRINT
126 LPRINT SPC(45);"NIGLI- BARTH NORMATIVE";:
    LPRINT" MINERAL":LPRINT
140 IF FC$="N" THEN 170
160 GOSUB 1040
170 SU=0
180 FOR J=1 TO M:D(J)=D(J)*E(J):SU=SU+D(J):NEXT J
190 FOR J=1 TO M:D(J)=FN P(D(J),SU):NEXT J
200 FE2=D(5)+D(6):ALK=D(9)+D(10)
210 EN=D(7)*2:Z(8)=D(10)*5
220 ON (M-10) GOTO 300,300,290,280,270,260
260 FE2=FE2+D(16)
270 Z(21)=1.5*D(15):FE2=FE2-.5*D(15)
280 Z(2)=D(14)*1.5:FE2=FE2-.5*D(14)
290 Z(1)=D(13)*2
300 CAM=D(8)-.5*Z(1)
310 IF D(11)>=1.67*CAM GOTO 330
320 Z(5)=D(11)*2.67:CAM=CAM-1.67*D(11):GOTO  340
```

```
6470 DATA 16.6431,12.5158,9.8876,6.2620,13.9186,
          14.0969,24.8111,17.8319,16.1345,
          10.6162,7.0450,55.3087,22.7222,
          15.5958,6.5794,13.3870
6490 DATA "CC","PR","TN","PF","IL","AP","MT",
          "HM","CM","OR","AB","AN"
6491 DATA " C","WO","DW","DE","DF","EN","FS",
          " Q","FA","FO","CS","QC","NS","NE",
          "LC","KP"
6500 DATA 0.0088,-0.0774,0.0102,0.0066,0.0,
          -0.0017,-0.0143,-0.0155,-0.0007
6510 DATA -0.0130,-0.0185,-0.0129,-0.0134,0.0,
          -0.0300,-0.0204,-0.0481,0.0715
6520 DATA -0.0221,-0.0532,-0.0361,-0.0016,0.0,
          -0.031,-0.0237,-0.0614,-0.0289
6530 DATA -0.829,0.048,-0.059,0.093,0.213,0.414,
          0.264,-0.053,-0.092
6540 DATA -0.320,0.049,0.538,0.037,0.027,-0.727,
          0.244,0.129,0.021
6550 DATA  -0.231,-0.066,0.401,0.15a,-0.496,
           0.260,-0.550,0.304,0.223
6560 DATA 0.732,-0.187,0.110,-0.190,-0.431,
          -0.288,-0.160,0.236,0.177
6570 DATA 0.438,0.731,-0.113,-0.228,-0.323,
          -0.111,-0.293,-0.020,-0.082
6580 DATA 0.189,-0.761,-0.104,0.066,0.116,0.097,
          -0.281,0.203,0.476
9000  DATA 49.36,2.5,13.94,3.03,8.53,0.16,8.44,
           10.3,2.13,0.38,0.26
```

```
660 GOSUB 1500:Z(17)=1.5*(Y-Z):Z(9)=Z(9)-5/3*Z(17)
670 GOTO 750
680 GOSUB 1500:GOSUB 1510:Z(18)=4*(Y-P)
690 Z(8)=Z(8)-5*(Y-P):GOTO 750
700 GOSUB 1500:GOSUB 1510:Z(18)=.8*Z(8)
710 Z(19)=3*(Y-U):Z(18)=Z(18)-4*(Y-U):Z(8)=0
    :GOTO 750
720 GOSUB 1500:GOSUB 1510:Z(19)=.6*Z(8):Z(8)=0:
    Z(14)=R-Y
750 Z(22)=Z(14)+.4*Z(9)+.25*Z(13)
760 Z(23)=Z(17)+.6*Z(9):Z(24)=Z(15)+.75*Z(13)
770 Y=Z(22)+Z(23)+Z(24)
780 FOR J=22 TO 24:Z(J)=FN P(Z(J),Y):NEXT J
782 LPRINT SPC(11):FOR J=1 TO 24:LPRINT"   ";N$(J);
    "=";USING"###.##";Z(J);
784 IF J/7=INT(J/7) THEN LPRINT:LPRINT SPC(11)
786 NEXT J
788 LPRINT:LPRINT SPC(45);"**********************"
    :LPRINT
790 NEXT I
800 END
1000 IF B1<=FE2*2 GOTO 1020
1010 Z(6)=FE2*3:Z(7)=B1-FE2*2:FS=0:GOTO 1030
1020 Z(6)=B1*1.5:Z(7)=0:FS=(FE2-.5*B1)*2
1030 RETURN
1040 IF FE$="P" THEN 1070
1060 XF=.93-.0042*D(1)-.022*(D(9)+D(10)):GOTO 1080
1070 XF=.88-.0016*D(1)-.027*(D(9)+D(10))
1080 DX=D(5)/(D(4)+D(5)):IF XF<DX GOTO 1110
1090 XF=(1-XF)*(D(5)+.9*D(4))/(.1*XF+.9)
1100 D(5)=D(5)+.9*(D(4)-XF):D(4)=XF
1110 RETURN
1500 Z(15)=.75*Z(13):Z(13)=0:Z(14)=0:RETURN
1510 Z(17)=.6*Z(9):Z(9)=0:RETURN
1520 DATA " SiO2"," TiO2","Al2O3","Fe2O3","  FeO",
          "  MnO","  MgO","  CaO"," Na2O","  K2O",
          " P2O5","  H2O","  CO2","    S","Cr2O3",
          "  NiO"
```

```
1540 DATA 16.6431,12.5158,19.6153,12.5240,13.9186,
          14.0969,24.8111,17.8318,32.2690,21.2325,
          14.0900,55.5087,22.7222,31.1915,13.1588,
          13.3870
1550 DATA "CC","PR","TN","IL","AP","MT","HM","DR",
          "AB","AN","WC","DI","HY"," Q","QL","AC",
          "NE","LC","KP"," C","CM"
1560 DATA "Q'","NE'","QL'"
2000 DATA 49.36,2.5,13.94,3.03,8.53,0.16,8.44,
          10.3,2.13,0.38,0.26
```

附录Ⅵ　含黑云母标准矿物计算程序(DGNU)

```
5 REM "CIPW-BI"
10 INPUT"NUMBER OF SAMPLE";N
15 INPUT"NUMBER OF VARIABLE";M
20 DIM A(N,M),C(16),D(16),E(16),F(29),N$(29),P$(29
22 DIM B1(6),B2(4),B1(4,4),BB(4,4),BY(6),B$(4,6)
23 DIM FF(28),GG(11),W(10),P(29),D$(16),S(10),
       BJ(4),E$(4),DD(11)
25 DEF FN P(X,Y)=X*100/Y
27 FOR I=1 TO 4:FOR J=1 TO 4:READ BB(I,J):NEXT J,I
31 FOR J=1 TO 11:READ DD(J):NEXT J
33 FOR J=1 TO 11:READ GG(J):NEXT J
35 FOR I=1 TO 4:FOR J=1 TO 6:READ B$(I,J):NEXT J,I
40 FOR J=1 TO 4:READ E$(J):NEXT J
44 FOR I=1 TO 28:READ FF(I):NEXT I
45 FOR J=1 TO 29:READ P$(J):NEXT J
50 FOR J=1 TO 16:READ D$(J):NEXT J
80 FOR J=1 TO 16:READ E(J):NEXT J
90 FOR I=1 TO 29:READ N$(I):NEXT I:RESTORE 9000
95 FOR I=1 TO N: FOR J=1 TO M: READ A(I,J):
   NEXT J,I:RESTORE 6500
97 INPUT"CORRECT FE3?---Y OR N";FC$
   :IF FC$="N" THEN 100
98 INPUT"MODE OF CORRECT----P OR V";FE$
100 FOR K=1 TO N
110 LPRINT SPC(55);"NO";K
115 FOR J=1 TO 28:F(J)=0:NEXT J
116 S1=0
120 FOR J=1 TO M:C(J)=A(K,J):S1=S1+C(J):D(J)=C(J):
    NEXT J:S1=S1-C(12)
122 GOSUB 6100
124 LPRINT:LPRINT SPC(50);"MOLECULAR NUMBERS"
126 GOSUB 3040
128 GOSUB 6100
130 P(1)=(C(9)+C(10))^2/(C(1)-43)
132 P(2)=C(5)/(C(4)+C(5))
134 X=C(10)/C(9):Y=C(3)+C(8)
136 IF C(1)>50 AND (X<2.5 AND X>=1) THEN P(3)=
    (Y+2*C(9))/(Y-2*C(9)):GOTO 140
```

```
138 P(3)=(Y+C(9)+C(10))/(Y-C(9)-C(10))
140 SU=.9*C(4)+C(5)+C(7)+C(9)+C(10):SU=100/SU
142 P(5)=(.9*C(4)+C(5))*SU:P(6)=C(7)*SU
144 P(7)=100-P(5)-P(6)
146 P(11)=D(10)*78.196:P(12)=D(9)*45.975
148 P(13)=D(8)*40.08:SU=P(11)+P(12)+P(13)
150 FOR J=11 TO 13:P(J)=FN P(P(J),SU):NEXT J
152 FOR J=1 TO 10:W(J)=C(J):NEXT J:W(6)=0
154 W1=W(4):W(4)=.9*W(4)+W(5)
156 FOR J=18 TO 20:GOSUB 3000:NEXT J:W(4)=W1
158 SU=0:FOR J=1 TO 10:SU=SU+W(J):NEXT J
160 SU=100/SU
162 FOR J=1 TO 10:W(J)=SU*W(J):NEXT J
164 FOR J=21 TO 26:GOSUB 3000:NEXT J
168 RESTORE 6500
169 GOSUB 3060
170 IF FC$="N" THEN 177
175 GOSUB 2050
177 GOSUB 4000
179 GOSUB 3040
180 LPRINT:LPRINT SPC(48);"CIPW--NORMATIVE MINERAL"
200 D(5)=D(5)+D(6)
202 F(9)=D(15)+D(16):D(5)=D(5)-F(9)
206 F(2)=D(14):D(5)=D(5)-F(2)
210 F(6)=D(11):D(8)=D(8)-3.33*F(6)
220 F(1)=D(13):D(8)=D(8)-F(1)
240 IF D(2)<=D(5) THEN 270
250 F(5)=D(5):D(2)=D(2)-F(5)
260 F(3)=D(2):D(8)=D(8)-D(2):D(5)=0:GOTO 280
270 F(5)=D(2):D(5)=D(5)-D(2)
280 F(10)=D(10):F(18)=D(7)
290 GOSUB 3060
320 IF BL THEN 380
330 GOSUB 5000
340 GOSUB 5030
350 GOSUB 5080
360 SB=D(1)-(6*F(10)+6*F(11)+2*F(12)+F(3)+F(14)
      +F(15)+F(16)+F(17)+F(18)+F(19))
```

```
370 GOTO 490
380 F(11)=D(3)-F(10):D(9)=D(9)-F(11)
390 IF D(4)<=D(9) THEN 440
400 F(24)=D(9)
410 D(4)=D(4)-F(24)
420 GOSUB 5030
430 GOTO 460
440 F(24)=D(4): F(25)=D(9)-F(24)
450 F(19)=D(5)
460 F(14)=D(8)
470 GOSUB 5080
480 SB=D(1)-(6*F(10)+6*F(11)+F(14)+F(18)+F(19)
      +F(3)+4*F(24)+F(25)+F(15)+F(16)+F(17))
490 IF SB>=0 THEN F(20)=SB: GOTO 510
500 GOSUB 5300
510 FOR J=1 TO 28:F(J)=F(J)*FF(J):NEXT J
535 LPRINT SPC(11)
540 FOR J=1 TO 29:LPRINT "      ";N$(J);"=";USING
    "###.##";F(J);
541 IF J/6=INT(J/6) THEN LPRINT:LPRINT SPC(11)
542 NEXT J
550 S2=0
570 FOR J=1 TO 29: S2=S2+F(J): NEXT J
580 S1=ABS(S1-S2)
590 LPRINT "      ER=";USING "##.####";S1
680 P(4)=F(10)+F(11)+F(26)+F(27)+F(28)+F(20)
700 SU=F(10)+F(11)+F(12)
710 IF SU=0 THEN 760
720 P(8)=FN P(F(10),SU):P(9)=FN P(F(11),SU):
    P(10)=FN P(F(12),SU)
760 P(16)=F(10):P(17)=F(11)+F(12)
770 IF F(20)>0 GOTO 790
780 P(15)=F(26)+F(27)+F(28):P(14)=0:GOTO 800
790 P(14)=F(20):P(15)=0
800 SU=P(14)+P(15)+P(16)+P(17)
810 FOR J=14 TO 17:P(J)=FN P(P(J),SU):NEXT J
880 P(27)=F(20)+.4582*F(11)+.2992*F(18)+.2277*F(19)
```

```
890 P(28)=F(26)+.5418*F(11)
    :P(29)=F(21)+F(22)+.7008*F(18)+.7723*F(19)
900 SU=P(27)+P(28)+P(29)
910 FOR J=27 TO 29:P(J)=FN P(P(J),SU):NEXT J
915 LPRINT:LPRINT SPC(50);"OTHER PARAMETERS"
916 LPRINT SPC(11)
920 FOR J=1 TO 29:LPRINT"   ";P$(J);"=";USING
    "###.##";P(J);
930 IF J/6=INT(J/6) THEN LPRINT:LPRINT SPC(11)
940 NEXT J
945 GOSUB 4315
950 LPRINT:LPRINT SPC(50);"**********************"
    :LPRINT
2000 NEXT K
2010 END
2050 IF FE$="P" THEN 2070
2060 XF=.93-.0042*C(1)-.022*(C(9)+C(10)):GOTO 2080
2070 XF=.88-.0016*C(1)-.027*(C(9)+C(10))
2080 OX=C(5)/(C(4)+C(5)):IF XF<OX THEN 2110
2090 XF=(1-XF)*(C(5)+.9*C(4))/(.1*XF+.9)
2100 C(5)=C(5)+.9*(C(4)-XF):C(4)=XF
2110 RETURN
3000 SU=0
3010 FOR I=1 TO 10:READ S(I):SU=SU+W(I)*S(I):NEXT I
3020 P(J)=SU
3030 RETURN
3040 FOR J=1 TO M:D(J)=C(J)*E(J):NEXT J:RETURN
3060 BA=D(3)>=D(8)+D(9)+D(10)
3070 BN=D(3)<D(8)+D(9)+D(10) AND D(3)>D(9)+D(10)
3080 BL=D(3)<D(9)+D(10)
3090 RETURN
4000 IF C(1)<=52 OR BL THEN F(29)=0:GOTO 4145
4005 SU=.9*C(4)+C(5)+C(7)
4010 OX=C(5)/(C(4)+C(5))
4015 IF SU<9 THEN 4025
4020 F(29)=27.34-1.56*SU:GOTO 4035
4025 IF BA THEN F(29)=2.75*SU-.95:GOTO 4035
4030 F(29)=1.66*SU-.91
```

```
4035 IF F(29)*.13>C(10) THEN F(29)=C(10)/.13
4040 IF C(1)<65 THEN 4065
4045 IF C(1)>=65 AND C(1)<77 THEN 4055
4050 MU=.25:PY=.05:GOSUB 4200
4053 GOTO 4080
4055 MU=.0204*C(1)-1.33:PY=4.063-.052*C(1)
4060 GOSUB 4200
4063 GOTO 4080
4065 MU=0:PY=.65:GOSUB 4200
4080 BJ(1)=MU:BJ(2)=PY:BJ(3)=N2:BJ(4)=N3
4085 FOR I=1 TO 4:FOR IM=1 TO 4:
     BI(I,IM)=BB(I,IM)*BJ(I)*F(29)
4086 NEXT IM,I
4095 FOR I=1 TO 4:C(1)=C(1)-BI(I,4)
4100 C(3)=C(3)-BI(I,3)
4105 C(10)=C(10)-BI(I,1)
4110 NEXT I
4115 IF C(10)<0 THEN C(10)=0
4120 C(3)=C(3)-BI(1,2):C(4)=C(4)-BI(4,2)
4130 C(5)=C(5)-BI(3,2):C(7)=C(7)-BI(2,2)
4140 IF C(7)<0 THEN C(6)=C(6)+C(7):C(7)=0
4145 RETURN
4200 N2=DX*(1-MU-PY):N3=1-MU-PY-N2
4205 RETURN
4315 T=F(10)+F(11)+F(12)
4320 TA=F(10)*100/T:TP=F(12)*100/T
4330 IF(TP<5 AND TA<=10) OR (TP<=2) THEN TP=0:
     TA=100:GOTO 4390
4340 FOR J=1 TO 10
4345 Y1=DD(J)+GG(J)*TP
4350 Y2=DD(J+1)+GG(J+1)*TP
4355 IF J=1 AND TA<Y1 THEN TP=100:TA=0:GOTO 4390
4360 IF J=10 THEN TA=10*(J-1+((TA-Y1)/(Y2-Y1)/2)):
     TP=100-TA:GOTO 4390
4365 IF TA>Y2 THEN 4385
4370 IF TA>Y1 AND TA<Y2 THEN TA=10*(J-1+((TA-Y1)/
     (Y2-Y1))):TP=100-TA:GOTO 4390
4385 NEXT J
```

```
4390 KF=T*TA/100:PL=T*TP/100
4395 IF F(20)>0 OR (F(20)=0 AND F(26)=0)
     THEN Y1=F(20)*100/(F(20)+KF+PL):GOTO 4407
4400 Y1=F(26)+F(27)+F(28)
4405 Y1=-Y1*100/(Y1+KF+PL)
4407 LPRINT:LPRINT SPC(19);"X=";USING"###.##";TP;
4408 LPRINT SPC(8);"Y=";USING"###.##";Y1;
     :LPRINT SPC(9)
4500 B1(1)=(TP=0 AND AC>0):B1(2)=(AC=0 AND TP<=10)
4505 B1(3)=(TP>10 AND TP<=35)
4510 B1(4)=(TP>35 AND TP<=65)
     :B1(5)=(TP>65 AND TP<=90)
4515 B1(6)=TP>90
4520 B2(1)=TP<10
4525 B2(2)=(TP>=10 AND TP<=50)
     :B2(3)=(TP>50 AND TP<=90)
4528 B2(4)=TP>90
4530 BY(1)=(Y1<=60 AND Y1>20)
     :BY(2)=(Y1<=20 AND Y1>5)
4535 BY(3)=(Y1<=5 AND Y1>=0)
     :BY(4)=(Y1<0 AND Y1>=-10)
4540 BY(5)=(Y1<=-10 AND Y1>-60):BY(6)=Y1<=-60
4560 FOR J=1 TO 4:FOR I=1 TO 6
4570 NM=BY(J)*B1(I)
4575 IF NM=1 THEN LPRINT B$(J,I):GOTO 4800
4580 NEXT I,J
4590 FOR I=1 TO 4:NM=BY(5)*B2(I)
4595 IF NM=1 THEN LPRINT E$(I):GOTO 4800
4600 NEXT I
4603 IF Y1>60 THEN LPRINT"Quartz-Rich   Granite":
     GOTO 4800
4605 LPRINT"Feldspathoidite"
4800 RETURN
5000 F(11)=D(9)
5005 IF BN THEN F(12)=D(3)-F(11)-F(10)
     :F(14)=D(8)-F(12):GOTO 5015
5010 F(12)= D(8):F(13)=D(3)-F(10)-F(11)-F(12).
5015 RETURN
5030 IF D(4)>=D(5) THEN 5040
5035 F(7)=D(4):F(19)=D(5)-D(4):GOTO 5045
```

```
5040 F(7)=D(5):F(8)=D(4)-D(5)
5045 RETURN
5080 IF F(14)+F(18)+F(19)=0 THEN 5105
5081 IF F(14)>F(18)+F(19) THEN 5095
5085 F(15)=F(14):F(14)=0
     :F(16)=F(15)*F(18)/(F(18)+F(19))
5090 F(17)=F(15)-F(16):F(18)=F(18)-F(16)
     :F(19)=F(19)-F(17):GOTO 5105
5095 F(16)=F(18):F(17)=F(19):F(15)=F(16)+F(17)
5100 F(14)=F(14)-F(15):F(18)=0:F(19)=0
5105 RETURN
5300 Y=ABS(SB):Z=.5*(F(18)+F(19))
5305 G=Z+4*F(3):P=G+4*F(11)
5310 U=P+2*F(10): V=U+.5*F(14)
5315 R=V+.5*(F(15)+F(16)+F(17)):L=R+2*F(10)
5316 IF Y<Z THEN 5325
5317 IF Y>=Z AND Y<G THEN 5338
5318 IF Y>=G AND Y<P THEN 5345
5319 IF Y>=P AND Y<U THEN 5364
5320 IF Y>=U AND Y<V THEN 5383
5322 IF Y>=V AND Y<R THEN 5408
5323 IF Y>R THEN 5480
5324 PRINT"NO"
5325 F(22)=Y*F(18)/(F(18)+F(19)):F(21)=Y-F(22)
5330 F(18)=F(18)-2*F(22):F(19)=F(19)-2*F(21)
     :GOTO 5520
5338 GOSUB 6000
5340 F(4)=Y-Z:F(3)=F(3)-F(4):GOTO 5520
5345 GOSUB 6000
5350 GOSUB 6005
5355 F(26)=.25*(Y-G): F(11)=F(11)-F(26):GOTO 5520
5364 GOSUB 6000
5365 GOSUB 6005
5370 GOSUB 6010
5375 F(27)=.5*(Y-P):F(10)=F(10)-F(27):GOTO 5520
5383 GOSUB 6000
5385 GOSUB 6005
5390 GOSUB 6010
```

```
5395 GOSUB 6020
5400 F(23)=Y-U:F(14)=F(14)-2*F(23):GOTO 5520
5408 GOSUB 6000
5410 GOSUB 6005
5415 GOSUB 6010
5420 GOSUB 6020
5425 F(23)=.5*F(14): CD=.5*(Y-V): F(14)=0
5430 AD=.5*(Y-V)*F(17)/(F(16)+F(17))
5435 DD=.5*(Y-V)-AD
5445 F(22)=F(22)+DD:F(21)=F(21)+AD:F(23)=F(23)+CD
5450 F(15)=F(15)-2*CD
5455 F(16)=F(16)-2*DD:F(17)=F(17)-2*AD
5460 GOTO 5520
5480 F(22)=.5*F(18)+.5*F(16)
5485 F(21)=.5*F(19)+.5*F(17)
5490 GOSUB 6005
5495 GOSUB 6010
5500 GOSUB 6020
5505 F(28)=.5*(Y-R):F(27)=F(27)-F(28)
5520 RETURN
6000 F(22)=.5*F(18):F(21)=.5*F(19):F(18)=0:F(19)=0
6001 RETURN
6005 F(4)=F(3):F(3)=0:RETURN
6010 F(26)=F(11):F(11)=0:RETURN
6020 F(27)=F(10):F(10)=0:RETURN
6100 LPRINT SPC(11)
6110 FOR J=1 TO M:LPRINT" ";D$(J);"=";USING
     "####.###";D(J);
6120 IF J/6=INT(J/6) THEN LPRINT:LPRINT SPC(11)
6130 NEXT J:LPRINT
6140 RETURN
6200 DATA 0.124,0.268,0.134,0.474,0.118,0.303,
          0.128,0.451,0.095,0.436,0.103,0.365,
          0.108,0.365,0.116,0.411
6210 DATA 6.44,10.8125,15.4286,18.9474,22.0722,
          25.3178,28.8936,31.2231,32.2824,28.1250,
          20.0000,-0.06444,-0.00875,0.05714,
          0.17544,0.32128,0.5426,0.8511,1.3885,
          2.5588,6.1875,15
```

```
6250 DATA "Alkali Granite","Kf-Granite","Granite",
         "Monzo-Granite","Granodiorite"
6260 DATA "Tonanite","Qz-Alka.Syenite",
         "Qz.-Kf.Syenite","Qz.Syenite",
         "Qz.Monzonite"
6270 DATA "Qz.Monzo.Diorite","Qz.Diorite",
         "Alka.Syenite","Kf.Syenite","Syenite"
6280 DATA "Monzonite","Monzo.Diorite","Diorite",
         "Foid.Alka.Syenite","Foid.Kf.Syenite"
6290 DATA "Foid.Syenite","Foid.Monzo.Syenite",
         "Foid.Monzonite","Foid.Diorite"
6295 DATA "Alkali.Foid.Syenite","Foid-Syenite",
         "Foid.Monzonite","Foid.Diorite(Gabbro)"
6300 DATA 0.1001,0.11598,0.1916,0.1360,0.1517,
         0.3289,0.2315,0.1597,0.2238,0.5565,
         0.5244,0.2782,0.1019,0.1162,0.1162
6310 DATA 0.1004,0.1319,0.1004,0.1319,0.0601,
         0.2038,0.1407,0.1722,0.4620,0.1221,
         0.2841,0.4365,0.3163
6400 DATA "  SEMA","    OR","   A.R","   D.I",
         "    F%","    M%","    A%","   DR%",
         "   AB%","   AN%","    K%","   Na%"
6410 DATA "   Ca%","    Q%","    F%","   OR%",
         "   PL%","PEARF1","PEARF2","PEARF3",
         "LEMEV1","LEMEV2","LEMEV3"
6420 DATA "LEMDF1","LEMDF2","LEMDF3","    Q'",
         "    NE'","  DL'"
6450 DATA "  SiO2","  TiO2","Al2O3"," Fe2O3",
         "   FeO","   MnO","   MgO"
6460 DATA "   CaO"," Na2O","   K2O","  P2O5",
         "   H2O","  CO2","     S"," Cr2O3",
         "   NiO"
6470 DATA 16.6431,12.5158,9.8076,6.2620,13.9186,
         14.0969,24.8111,17.8319,16.1345,
         10.6162,7.0450,55.5087,22.7222,
         15.5958,6.5794,13.3870
```

```
6490 DATA "CC","PR","TN","PF","IL","AP","MT","HM",
          "CM","DR","AB","AN"," C","WO","DW","DE"
6491 DATA "DF","EN","FS"," Q","FA","FO","CS","AC",
          "NS","NE","LC","KP","BI"
6500 DATA 0.0088,-0.0774,0.0102,0.0066,0.0,0.0,
          -0.0017,-0.0143,-0.0155,-0.0007
6510 DATA -0.0130,-0.0185,-0.0129,-0.0134,0.0,
          0.0,-0.0300,-0.0204,-0.0481,0.0715
6520 DATA -0.0221,-0.0532,-0.0361,-0.0016,0.0,
          0.0,-0.031,-0.0237,-0.0614,-0.0289
6530 DATA -0.829,0.048,-0.059,0.093,0.213,0.0,
          0.414,0.264,-0.053,-0.092,-0.320,
          0.049,0.538,0.037,0.027,0.0,-0.727
6540 DATA 0.244,0.129,0.021,-0.231,-0.066,0.401,
          0.156,-0.496,0.0,0.260,-0.550,0.304,0.223
6560 DATA 0.732,-0.187,0.110,-0.190,-0.431,0.0,
          -0.288,-0.160,0.236,0.177,0.438,0.731,
          -0.113,-0.228,-0.323,0.0,-0.111,-0.293,
          -0.020,-0.082
6580 DATA 0.189,-0.761,-0.104,0.066,0.116,0.0,
          0.097,-0.281,0.203,0.476
9000 DATA 54.58,0.84,16.83,3.02,4.71,0.13,3.72,
          6.62,3.52,4.79,0.42
```

附录Ⅶ　火成岩钙碱系数计算程序

```
100 INPUT"NUMBER OF SAMPLE";NN
110 DIM X1(3,NN),SU(3),A(7,7),B(7),E(2,7),Q(7,7),
      W(2,7)
120 DEFDBL A,B,E,Q,W,L,Z,T
140 FOR I=1 TO 3: FOR J=1 TO NN
150 READ X1(I,J)
160 NEXT J,I
220 FOR I=1 TO 3
225 FOR J=1 TO NN
226 LPRINT USING"####.##";X1(I,J);
227 IF J/15=INT(J/15) THEN LPRINT
228 NEXT J
235 LPRINT
237 NEXT I
240 FOR JJ=1 TO 3
250 SU(JJ)=0
260 FOR II=1 TO NN: SU(JJ)=SU(JJ)+X1(JJ,II)
    :NEXT II
270 NEXT JJ
450 FOR KK=1 TO 7
460 C1=(KK-1)*2
470 FOR JJ=KK TO 7
480 L=0
490 FOR II=1 TO NN:Z=X1(1,II):L=L+Z^C1:NEXT II
500 C1=C1+1
510 Q(KK,JJ)=L:Q(JJ,KK)=L
520 NEXT JJ
530 NEXT KK
535 FOR I=1 TO 2
570 FOR KK=1 TO 7
580 C1=KK-1
590 W(I,KK)=0
600  FOR II=1 TO NN:L=X1(1,II):P=X1(I+1,II)
610 W(I,KK)=W(I,KK)+L^C1*P:NEXT II
620 NEXT KK
621 NEXT I
623 M=2
626 MK=1
```

```
628 FOR KM=2 TO 3
630 FOR I=1 TO M:B(I)=W(KM-1,I):NEXT I
635 FOR I=1 TO M:FOR J=1 TO M:A(I,J)=0(I,J)
    :NEXT J,I
650 GOSUB 2000
655 FOR KK=1 TO M: E(MK,KK)=B(KK): NEXT KK
668 LPRINT:LPRINT "B=";
669 FOR I=1 TO M: LPRINT USING"######.######";
    B(I);:NEXT I
690 Y2=SU(KM)/NN
695 YA=0: YB=0
710 FOR II=1 TO NN:L=X1(1,II)
720 IJ=0:Y1=0
730 FOR JJ=1 TO M: Y1=Y1+E(MK,JJ)*L^IJ
740 IJ=IJ+1
750 NEXT JJ
755 Z=X1(KM,II)
760 YA=YA+(Z-Y1)^2
770 YB=YB+(Z-Y2)^2
780 NEXT II
790 R0=1-YA/YB
800 LPRINT:LPRINT:LPRINT "R=";USING"##.###";R0
820  MK=MK+1
830 NEXT KM
840 EPS=.001:X=50
845 GOSUB 900
850 A=S
855 IF A<EPS THEN 895
860 P=0
865 W=X: X=(1+.00001)*W
870 GOSUB 900
875 XT=(S-A)/(.00001*W):X=W
880 P=P+XT*XT
885 X=X-A/P*XT
890 GOTO 845
895 LPRINT "CALC-ALKALI INDEX=";X
897 M=M+1
898 IF M<6 THEN 626
899 END
```

```
900 Y=0
910 FOR I=1 TO M:Y=Y+(E(1,I)-E(2,I))*X^(I-1)
    :NEXT I
920 M1=0
925 M1=M1+Y*Y
930 S=M1
940 RETURN
2000 FOR K=1 TO  M
2010 T=1/A(K,K)
2020 FOR J=K+1 TO M:A(K,J)=T*A(K,J):NEXT J
2030 B(K)=B(K)*T
2040 FOR I=K+1 TO M:FOR J=K+1 TO M:
     A(I,J)=A(I,J)-A(I,K)*A(K,J):NFXT J
2050 B(I)=B(I)-A(I,K)*B(K)
2060 NEXT I
2070 NEXT K
2080 FOR  I=M-1 TO 1 STEP -1
2090 FOR  J=I+1 TO M:B(I)=B(I)-A(I,J)*B(J)
2100 NEXT J,I
2110 RETURN
3000 DATA 47.26,55.09,67.81,71.74,77.39,5.04,6.22,
          7.08,8.96,8.9,9.9,6.25,0.97,1.77,0.62
```

附录Ⅷ　建立数据顺序文件的DATAR程序

```
2980 REM A SUBRUTINE USED IN CORRECT DATA
2985 INPUT"SAMPLE NUMBERS";N
2990 INPUT"VARIABLE NUMBERS";M
3000 DIM X(N,M)
3001 FOR I=1 TO  N: FOR J=1 TO M
3010 READ X(I,J): NEXT J,I
3020 GOSUB 4020
3070 HOME
3080 PRINT "ARE YOU WANT TO CORRECT,DELETE,INSERT
          A DATA?"
3090 PRINT "TO PRESS": PRINT
3100 PRINT "     1.C(ORRECT)":PRINT:
     PRINT "     2.D(ELETE) ":PRINT:
     PRINT "     3.I(NSERT) ":PRINT:
     PRINT "     4.N(O)"
3110 INPUT BB$
3120 IF BB$="C" THEN 3160
3130 IF BB$="D" THEN 3190
3140 IF BB$="I" THEN 3280
3150 IF BB$="N" THEN 3390
3160 PRINT "WHAT NUMBER TO CORRECT"
3170 INPUT "LINE?";N1: INPUT "COLUM?";M1
3180 INPUT "X(N1,M1)=?";X(N1,M1): GOTO 3070
3190 PRINT "NUMBER OF WHAT POSITION TO DELETE?"
3200  INPUT "LINE?";N1: INPUT "COLUM?";M1
3210 FOR J=M1 TO M-1: X(N1,J)=X(N1,J+1): NEXT J
3220 FOR I=N1+1 TO N
3230 X(I-1,M)=X(I,1)
3240 FOR J=1 TO M-1
3250 X(I,J)=X(I,J+1): NEXT J
3260 NEXT I
```

```
3265 INPUT "X(N,M)=?";X(N,M)
3270 GOTO 3070
3280 PRINT "NUMBER OF WHAT POSITION TO INSERT"
3290 INPUT "LINE?";N1: INPUT "COLUM?";M1
3310 FOR I=N TO N1+1 STEP-1
3320 FOR J=M-1 TO 1 STEP-1
3330 X(I,J+1)=X(I,J): NEXT J
3340 X(I,1)=X(I-1,M)
3350 NEXT I
3360 FOR J=M-1 TO M1 STEP -1:X(N1,J+1)=X(N1,J)
     :NEXT J
3370 INPUT "X(N1,M1)=?";X(N1,M1)
3375 GOTO 3070
3390 PRINT "ARE YOU WANT TO PRINT DATA AGIAN? T
          PRESS Y OR N"
3400 INPUT BC$
3410 IF BC$="Y" THEN GOSUB 4020: GOTO 3070
3420 IF BC$="N" THEN 4100
4020 FOR I=1 TO N: LPRINT USING"###";I;
4030 FOR J=1 TO M
4040 LPRINT " ";USING"####.##";X(I,J);: NEXT J
4050 LPRINT
4060 NEXT I
4070 RETURN
4100 OPEN "O",#1,"YCH-2"
4105 WRITE#1,N:WRITE#1,M
4110 FOR I=1 TO N: FOR J=1 TO M: WRITE #1,X(I,J
     :NEXT J
4120 CLOSE
4130 REM YOU WANT TO GIVE TO A NEW NAME  OF FIL
         IN LINE 4100
```

注，行号4110中NEXT J应为NEXT J，I