

结晶岩中造岩矿物含量的定量计算方法

陈岳龙

(中国地质大学地质矿产系 北京 100083)

提要 通过显微镜下观察到的结晶岩造岩矿物组合,利用已有同类岩石中这些矿物的化学组成及岩石的化学全分析的结果,根据质量平衡原理,进行线性约束条件下的非线性最优化拟合,求得这些矿物实际含量的定量计算方法。并将其应用于新疆东天山花岗岩类的造岩矿物含量计算,效果良好。

关键词 非线性最优化 质量平衡 简约梯度 结晶岩 造岩矿物

目前,对结晶岩系中的造岩矿物实际含量仍以显微镜下的统计学方法为主,在微型计算机不普及的过去,这种方法对岩石学的发展起了巨大的推动作用,奠定了依据矿物含量对岩石分类命名的基础,如中、酸性侵入岩的Q-A-P三组分国际分类命名方案(武汉地质学院岩石教研室1980)。随着岩石学深入研究和微型计算机普及应用及统计方法的实践,我们已经认识到,大量岩石化学资料已经积累,但缺少与之配套的实际矿物含量资料;统计方法实在费时、工作烦琐,尤其对斑状结构的岩石统计时误差较大等缺点。许多的岩石化学计算方法均以一定的假想为前提,计算出的矿物含量只能作为岩石类比的参数,不反映实际矿物含量;Le Maitre(1982)提出了解决上述问题的多元线性回归方法,但正如他自己所指出的,当这些变量包含有类似成分的两个或更多的点时,这时经常出现大的正负系数(在我们计算中的含量)。为此,作者提出根据结晶岩的岩石化学、显微镜下观察到的矿物组合及相类似岩石中这些矿物的化学成分或岩石中这些矿物的电子探针分析结果,在线性条件约束下定量计算造岩矿物实际含量的非线性最优化方法。

1 原理

结晶岩的化学成分是岩石中各矿物化学成分的总体表现,在数学关系上表现为:

$$T_i = \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \quad (1)$$

• 本文1991年4月收到,1991年12月20日改回。

本文为七·五国家305项目V₁₁课题的成果。

作者简介:陈岳龙 男 29岁 博士后 地球化学专业

这里 a_{ij} 是矿物 j 中化学成分 i 的重量百分含量, x_j 是矿物 j 在岩石中的重量分数, T_i 是全岩化学成分 i 的理论重量百分含量。对于 m 个矿物组合的岩石, 有 $\sum_{j=1}^m x_j = 1$, 因此其中 $m-1$ 个矿物是独立变量, 令第 m 个矿物是前面 $m-1$ 个矿物所表示, 即 $x_m = 1 - \sum_{j=1}^{m-1} x_j$, 因此 T_i 变成下式:

$$T_i = \sum_{j=1}^{m-1} (a_{ij} - a_{im})x_j + a_{im} \quad (2)$$

当我们获得岩石化学结果后, 总是希望理论值 T_i 与化学分析值 R_i 一致, 即:

$$R_i - T_i = 0 \quad (3)$$

对于多种化学成分便是:

$$\sum_{i=1}^k (R_i - T_i) = 0 \quad (4)$$

实际上, (3)、(4) 由于分析误差存在, 永远不可能成立, 且由于理论值与实际值之差可正也可负, 因此平方和取最小值, 即:

$$\min \left\{ \sum_{i=1}^k \left[R_i - a_{im} - \sum_{j=1}^{m-1} (a_{ij} - a_{im})x_j \right]^2 \right\} \quad (5)$$

一般对式(5)的解用最小二乘法(徐萃薇 1985; Le Maitre 1982)可以求得。但是, 这种解法所得解不能避免 $1 < x_j$ 或 $x_j < 0$, 为此, 加入约束条件:

$$x_1 + x_2 + \dots + x_{m-1} \leq 1 \quad (6)$$

$$0 \leq x_i (i = 1, \dots, m-1) \quad (7)$$

在 Le Maitre(1982)的最小二乘解法中, 将等式约束条件代入了目标函数(5)中, 然后用最小二乘法求解, 但是他也指出当这 $m-1$ 维平面中包含两个或更多的类似成分点时, 常伴随着大的正的和负的系数, 但 $\sum_{i=1}^m x_i$ 仍然等于 1, 对于矿物含量便失去了其物理意义, 这是由于在他的解法中不可能加入 x_i 非负条件的约束, 我们加入约束条件(7)便能有效地避免出现 $x_i > 1$ 或 $0 < x_i$ 的无意义解。

2 计算方法

对于(6)、(7)约束条件下, 非线性目标函数(5)的最优化求解, 比较成熟和实用的方法是简约梯度法(席少霖, 赵风治 1983), 在约束条件(6)中加入松弛变量 x_m , 使等式成立。由于约束条件(6)中各变量的系数均为 1, 因此计算过程可作如下简化:

目标函数(5)的梯度为:

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} -2 \sum_{i=1}^k (R_i - a_{im} - \sum_{j=1}^{m-1} (a_{ij} - a_{im}) x_j) (a_{i1} - a_{im}) \\ \cdot \\ \cdot \\ -2 \sum_{i=1}^k (R_i - a_{im} - \sum_{j=1}^{m-1} (a_{ij} - a_{im}) x_j) (a_{i(m-1)} - a_{im}) \\ 0 \end{pmatrix}$$

从而得到简约梯度 $\gamma(x^{m-1})$ 为:

$$\gamma(x^{m-1}) = \begin{pmatrix} -2 \sum_{i=1}^k (R_i - a_{im} - \sum_{j=1}^{m-1} (a_{ij} - a_{im}) x_j) (a_{i2} - a_{i1}) \\ \cdot \\ \cdot \\ -2 \sum_{i=1}^k (R_i - a_{im} - \sum_{j=1}^{m-1} (a_{ij} - a_{im}) x_j) (a_{i(m-1)} - a_{i1}) \\ 2 \sum_{i=1}^k (R_i - a_{im} - \sum_{j=1}^{m-1} (a_{ij} - a_{im}) x_j) (a_{i1} - a_{im}) \end{pmatrix}$$

有了简约梯度, 便可沿 $P^{m-1,k}$ 方向进行搜索

$$P_i^{m-1,k} = \begin{cases} 0 & x_j^{m-1,k} = 0, \text{ 且 } \gamma_j(x^{m-1,k}) > 0 \\ -\gamma_j(x^{m-1,k}) & \text{其余情形} \end{cases}$$

于是:

$$x^{m-1,k+1} = x^{m-1,k} + \lambda \cdot P^{m-1,k}; P^{1,k} = -\sum_{j=1}^{m-1} P_j^{m-1,k}$$

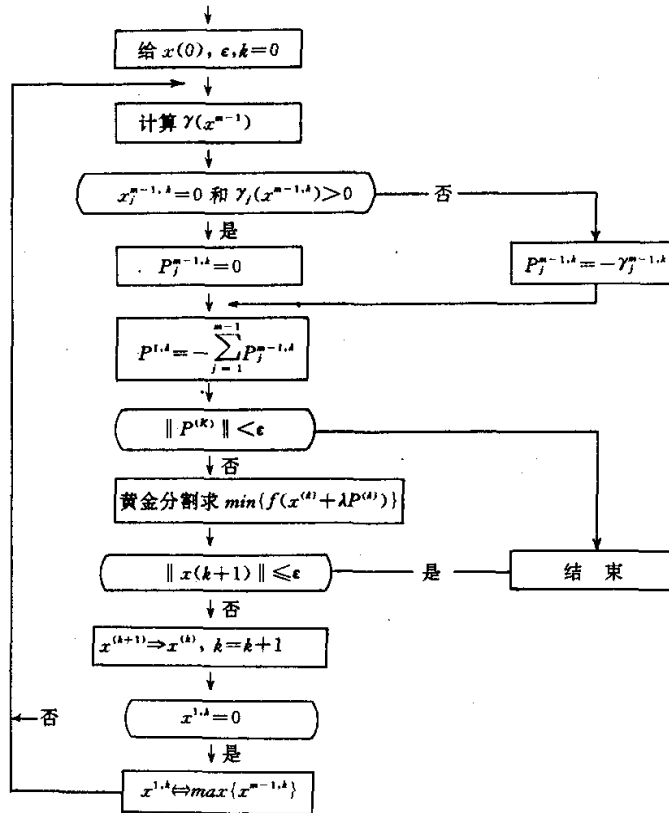
总方向为:

$$P^{(k)} = \begin{pmatrix} P^{1,k} \\ P^{m-1,k} \end{pmatrix}; x^{k+1} = x^{(k)} + \lambda P^{(k)}$$

为了保证 $x^{(k+1)} \geq 0$, 也就是 $x_j^{k+1} = x_j^k + \lambda P_j^k \geq 0$, 需要确定 λ 的取值范围。当 $P_j^k \geq 0$ 时, 上式恒成立; 而当 $P_j^k < 0$ 时, 应有 $\lambda \leq -x_j^k / P_j^k$, 因此, 令

$$\lambda_{\max} = \min \left\{ -\frac{x_j^*}{P_j^*} \mid P_j^* < 0 \right\}$$

并在区间 $0 \leq \lambda \leq \lambda_{\max}$ 上求 $f(x^{(k)} + \lambda P^{(k)})$ 的极小值，这样便转化为一维最优化的问题，对此问题，我们使用黄金分割法(张巨洪等 1983)求 λ 的最优解，计算框图：



根据框图，作者用 BASIC 语言编制了计算程序。

3 应用

应用所编程序，对东天山花岗岩类的矿物组成进行了计算，计算步骤如下：

- (1) 显微镜下观察岩石薄片中的矿物组合。
- (2) 获得这些矿物的化学成分，由典型薄片中所观察到的矿物电子探针分析直接得到，或者由已有的相同岩石类型中这些矿物的化学组成代替。

我们获得的东天山花岗岩类各有关矿物的平均化学组成如表 1 所示。

(3) 获得被观察的东天山花岗岩类的化学成分如表 2。

电子探针分析的矿物其全铁量 FeO 需换算成 FeO 和 Fe₂O₃ 两部分 (郑巧荣 1983)。

(4) 输入矿物数、各矿物化学成分和岩石化学成分进行计算。东天山花岗岩类矿物含量的计算结果如表 3 所示, 同时列出换算得到的 Q、A、P 三组体积百分含量决定的名称。

表 3 所列矿物含量及依其所划分的岩石种属与实际观察结果是非常吻合的。对 DX-27 及 XW-14 两个岩体中斜长石含量与实测值相差较大。而前面一个岩体是天河石花岗岩。具明

表 1 东天山花岗岩类造岩矿物及部分副矿物的平均化学组成 (wt%)

Table 1 The average chemical compositions of rock-forming and some accessory minerals in granitoids of eastern Tianshan Mountains, Xinjiang

矿物	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	FeO	MgO	CaO	Na ₂ O	K ₂ O
斜长石	65.50	21.23	—	—	0.20	0.18	12.03	0.06
	62.26	23.44	—	—	0.28	3.45	9.97	0.20
钾长石	63.36	19.44	—	—	0.25	—	1.24	15.21
黑云母	32.18	14.23	15.58	17.05	8.44	—	0.39	7.94
白云母	45.20	33.50	1.40	0.40	0.60	—	—	11.80
角闪石	39.51	8.39	17.82	11.40	8.18	10.10	1.90	0.80
磁铁矿	—	—	68.96	31.03	—	—	—	—
石榴石	36.07	14.86	11.93	0.27	0.61	32.14	0.10	0.10
磷石	30.60	—	—	—	—	28.60	—	—

表 2 东天山花岗岩类的化学组成 (%)

Table 2 The bulk compositions of granitoids in eastern Tianshan Mountains, Xinjiang, China

地点	样号	SiO ₂	TiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	FeO	MnO	MgO	CaO	Na ₂ O	K ₂ O	P ₂ O ₅	H ₂ O ⁺	Total
琼格克	86-XHJ-6	74.60	0.20	13.42	1.02	0.80	0.07	0.49	0.65	4.10	4.05	0.16	0.29	99.85
红尖兵山	HW-6	75.46	0.05	13.60	0.26	1.01	0.39	0.10	0.20	3.33	3.62	0.03	1.02	99.07
黄山北	HG-6	76.28	0.11	13.09	0.04	0.40	0.06	0.10	0.50	4.01	3.95	0.02	0.58	99.14
雅满苏	XHY-8801	76.23	0.16	11.93	0.31	0.77	0.06	0.20	0.80	2.95	5.14	0.03	0.47	99.05
白干湖	BX-13	76.47	0.16	13.04	0.24	0.58	0.05	0.10	0.50	3.74	4.55	0.02	0.19	99.64
大白石头	DX-27	75.66	0.05	13.67	0.32	0.42	0.09	0.01	0.40	4.84	4.03	0.02	0.13	99.64
大白石头东北	DX-5	66.09	0.37	17.43	0.58	1.70	0.10	1.30	2.30	4.82	3.14	0.07	1.09	98.99
红柳井	HN-21	72.35	0.25	13.95	0.50	1.18	0.06	0.20	1.00	3.47	5.17	0.09	0.88	99.10
绿洲泉	LH-16	72.05	0.36	14.00	0.87	1.24	0.08	0.50	1.60	3.35	4.15	0.07	0.82	99.09
小白石头	XW-14	71.79	0.31	15.36	0.40	1.28	0.07	0.70	1.60	3.44	4.10	0.07	0.11	99.23
星星峡西	XG-1(1)	63.24	0.92	15.82	1.22	3.07	0.09	2.20	4.40	4.19	2.49	0.23	1.31	99.18
星星峡西	XG-1(2)	71.05	0.37	15.05	0.55	1.44	0.07	0.90	1.90	3.48	4.14	0.09	0.10	99.14
金窝子	XHJ-8801	64.77	1.03	15.36	0.79	4.51	0.12	2.10	3.10	2.88	3.14	0.31	0.48	98.59
金窝子	XHJ-8802	64.97	0.94	16.05	0.65	4.27	0.11	2.00	2.40	2.66	3.61	0.32	1.06	99.04

显的钠长石化现象, 岩石具明显的似斑状结构, 早期斜长石 (颗粒较大) 与晚期细粒的相差悬殊, 很容易造成统计误差; 后一个岩体是夕卡岩型白钨矿的围岩, 取样位置不同, 其钠长石化的程度也有所差别; 由于实测资料和理论计算结果是各自独立完成的, 因此, 这种吻合程度说明了此方法的可用性。需要说明的是: 对于 CaO 含量小于 0.5%, 且 TiO₂ 含量也很低 (一般 ≤ 0.2%) 的岩石, 我们依据斜长石牌号 (电子探针测定) 与全岩 CaO 含量之间存在关系: $An = 6.2051 + 5.1904 \times CaO$ ($\gamma = 0.7559 > 0.707, n - 2 = 6, \alpha = 5\%$), 计算表明这些岩石中的斜长石均为 $An \leq 10$ 的钠长石。此时, 钠长石归入碱性长石与钾长石一起作为 A 端元参与命名; 而不以

An<5 为标准来决定是否归入碱长石。

表 3 非线性最优化拟合得到的东天山花岗岩类中的矿物含量(%)及岩石名称
Table 3 The modes fit by nonlinear programming in the granitoids from eastern Tianshan Mountains, Xinjiang, China and the names of the rocks according to the recalculated volume contents of Pl, Q and Mu

样号	Pl	Kf	Q	Bi	Mu	Hb	Mt	Sp	岩石名称
86-XHJ-6	36.04	26.16	34.12	2.46			0.92		黑云母二长花岗岩
实测*	30~45	25~50	25~30	2~6					
HW-6	33.42	24.07	36.18		4.97		0.88		碱长花岗岩
HG-1	35.11	20.93	39.68		3.66		0.33		碱长花岗岩
XHY8801	23.97	30.93	40.73	3.64			0.23		黑云母二长花岗岩
BX-13	33.84	27.67	35.81	2.62			0.04		碱长花岗岩
DX-27	35.54	18.62	37.13		7.99		0.39		碱长花岗岩
实测*	40~50	10~15	30~50		8~12				
DX-5	48.73	9.47	22.98	8.42	9.31		0.17		花岗闪长岩
HN-21	31.78	31.55	30.62	4.98			0.46		黑云母二长花岗岩
实测*	25~40	30~45	25~30	5~7					
LH-16	34.74	26.26	32.16	5.14			0.67		黑云母二长花岗岩
XW-14	38.03	27.05	27.26	6.06			0.02	0.67	黑云母二长花岗岩
实测*	30	30~35	25~30	5~10					
XG-1(1)	45.60	14.10	20.72	7.53		8.52	0.05	2.17	花岗闪长岩
XG-1(2)	36.80	26.59	29.33	6.42					黑云母二长花岗岩
XHJ8801	39.00	12.63	28.25	17.49					花岗闪长岩
XHJ8802	38.18	17.75	26.23	16.29					花岗闪长岩

*引自新疆维吾尔自治区地质矿产局区域地质调查大队(1985)对同一岩体或岩带的的数据; Pl: 斜长石, Kf: 钾长石, Q: 石英, Bi: 黑云母, Mu: 云母, Hb: 角闪石, Mt: 磁铁矿, Sp: 榍石

4 存在的问题

在定量计算岩石中矿物实际含量时,目标函数中对每个元素理论值与实测值之差的最小拟合是作为等权重处理的。实际上,由于各元素分析误差及含量的不同,分析误差大的元素,拟合差对目标函数的贡献应较小,这样很明显,当每个元素的分析误差已知时,可以误差平方的倒数作为权重,即将目标函数变为:

$$\min \sum_{i=1}^k \left[\frac{(R_i - a_{im} - \sum_{j=1}^{m-1} (a_{ij} - a_{im}) x_j)^2}{\delta_i^2} \right]$$

但是,目前化学分析结果不能对每个样品中每项元素给出误差,因此,上述处理方法难以实现。实际上,元素的分析误差与其含量之间存在着一定关系即含量较高的元素,其分析误差较小(印永嘉 1985),因此,可以考虑对各项元素的拟合差以含量作为权重,即目标函数为:

$$\min[\sum_{i=1}^k q R_i (R_i - a_{im} - \sum_{j=1}^{m-1} (a_{ij} - a_{im}) x_j)^2]$$

其中 q 为常数。

5 结语

目前结晶岩石学的研究已积累了大量的岩石化学分析结果,而与之相配套的矿物含量非常有限,从而严重制约着岩石的广泛对比和分类命名。本文提出的矿物实际含量计算方法,能充分利用已有的岩石化学分析结果,除了解决上述问题外,还能有效地克服由于岩石斑状等不均匀结构或矿物粒度极细统计上的大误差和统计困难等问题。

致谢 本工作完成过程中得到了中国科学院地球化学研究所王三学高级工程师的支持与帮助;所研究的样品及野外工作由七.五国家 305 项目 V14 课题提供经费;李荪蓉高级工程师完成化学全分析,作者谨致谢忱。

参 考 文 献

- 徐萃薇. 1985. 计算方法引论. 北京: 高等教育出版社, 54~62
- 席少霖. 赵风治. 1983. 最优化计算方法. 上海: 上海科学技术出版社, 324~328
- 张巨洪等. 1983. BASIC 语言程序库. 北京: 清华大学出版社, 285~288
- 武汉地质学院岩石教研室. 1980. 岩浆岩岩石学(上册). 北京: 地质出版社, 148
- 新疆维吾尔自治区地质矿产局区域地质调查大队. 1985. 天山花岗岩地质. 北京: 地质出版社, 51~198
- 郑巧来. 1983. 由电子探针分析值计算 Fe^{3+} 和 Fe^{2+} . 矿物学报, (1): 55~62
- 印永嘉. 1985. 大学化学手册. 济南: 山东科学技术出版社, 377
- Le Maitre R W. 1982. Numerical Petrology. Elsevier Sci. Pub. Co. Amsterdam, 80~105

A QUANTITATIVE METHOD FOR CALCULATING MODES OF ROCK-FORMING MINERALS IN CRYSTALLINE ROCKS

Chen Yuelong

(China University of Geosciences, Beijing, 100083)

Key words: Nonlinear programming; Modes; Rock-forming minerals; Over-simplifying gradient

Abstract

The author proposes a quantitative method for calculating modes of rock-forming minerals in crystalline rocks according to mineral assemblages observed under microscope in thin sections, analysed chemical compositions of these minerals from the same rocks or similar rocks to those determined directly on microprobe, and bulk compositions of the rocks, using nonlinear programming by over-simplifying gradient under linear constraints in this paper. The method has been used to study the granitoids in eastern Tianshan Mountains, Xinjiang, and the result shows that it is excellently efficient and valuable for extensive application.

· 新书介绍 ·

ISBN 7-5027-2578-4/P·224 《Advances in Geoscience (2)》1992年8月第1版,海洋出版社出版。

《Advances in Geoscience》是中国科学院地质研究所不定期英文集刊。本书由王思敬和周云生主编,是为1992年8月24日~9月3日在日本京都召开的29届国际地质大会而编辑的论文集。全书收集中国科学院最近研究的成果共39篇论文,包括大地构造、火成和变质岩石学、同位素地质和年代学、沉积学和沉积矿床、地热学、黄土地质学和自然灾害等7个部分,每篇论文都有明确的观点,充足的资料或数据,可供上述七方面学科的研究人员参考。

全书全英文,共424页,尚有存书,欲得本书者可与《岩石学报》编辑部联系,仅收取成本费,并适当优惠。地址:北京德外634信箱《岩石学报》编辑部,邮政编码100029。