

ノルム計算プログラム用テストデータの考案

吉井 守正* 平野 英雄*

Test Data for the Normative Calculation Programs

Morimasa YOSHII and Hideo HIRANO

Abstract

Test data for the C.I.P.W. normative calculation programs were designed.

The input data were obtained by calculating back from the molecular numbers (0.1 moles in most cases) of previously arranged assemblage of the normative minerals. The molecular numbers of the chemical components of the minerals were summed up for every component and divided by the molecular weights to obtain the weight percentage for the input data. In this manner the test data can be prepared easily for checking any parts of the processes in the programs.

The data nos. 1 to 4 (Table 3) are available for checking the part 1 of the programs ending in case of sufficiency of silica (Fig. 1). Flows of the calculations by these data are shown in Table 6. The data no. 1 is valid to check the flows of the calculations for Al_2O_3 , FeO^* (total of MnO , FeO and NiO) and MgO components; no. 2 is for those of K_2O , Fe_2O_3 and FeO ; no. 3 is for those of TiO_2 , Na_2O and P_2O_5 ; and no. 4 is for those of CaO . The data no. 11 (Table 4) is used instead of no. 1 when the program has input of Cr_2O_3 and NiO .

The data nos. 41 to 46 (Table 5) are used for the part 2 of the programs composed of the processes in case of deficiency in silica (Fig. 2).

As to the processes of output of the result, calculations for dividing hypersthene into enstatite and ferrosilite molecules, and for olivine into forsterite and fayalite molecules are checked by the data nos. 1 and 11. The calculation for dividing diopside into wollastonite, enstatite and ferrosilite molecules is checked by the data no. 21 (Table 4).

As the normative calculation is based on molecular numbers of the chemical components, the programs should also be checked with the aid of the molecular numbers of the chemical components in the input data and the normative minerals in the output data in Tables 3, 4 and 5. Therefore, it is desirable to add the process of printing the molecular numbers at least during testing. As a character of the test data, values of weight percentages of the input data and the output data show several times (0.1 time in most cases) as much as the molecular weight of themselves. The molecular numbers of the data can be checked in this way when they are not printed out.

For the convenience of debugging, molecular weight of FeO^* and apatite are desirable to be calculated as follows: The chemical formula of apatite should be written as $10/3 CaO \cdot P_2O_5$ in case of the programs having no reading of F_2 . For FeO^* ($=MnO+FeO+NiO$) the average value of the molecular weight (C_2^*) should be adopted. C_2^* is given as

$$C_2^* = C_1P_1 + C_2P_2 + C_3P_3,$$

where C_1, C_2 and C_3 are molecular weights of MnO , FeO and NiO ; P_1, P_2 and P_3 are the ratios of the MnO , FeO and NiO against FeO^* (process no. 01 in Fig. 1).

When the average molecular weight is adopted for FeO^* , the result agrees with (A) in data nos. 1 and 11; and if not it agrees with (B). By these processes

* 鉱床部

total of the weight percentages of the output data can always agree with those of the input data: In other words, when the totals have a difference, the program is assumed to have some error in calculation or process.

1. まえがき

C.I.P.W. ノルム計算は, CROSS *et al.* (1902; 1903; 1912) によって提案および修正され, 火成岩の分類を化学組成をもとに定量的に行う方法として, 現在でも広く行われている. 計算法については上記のほか WASHINGTON (1917) およびとくに JOHANNSEN (1931) などに詳しく示されている. わが国での最近の著書では, 平凡社 (1970), 都城・久城 (1975) および大久保・黒田 (1968) などに計算法が記されている. 数表によるものとしては, 大森 (1975) によるものが便利で, 精度も高い.

ノルム計算は, 筆算で行うとかなり複雑で, 従来の文献の中にも計算違いが結構見出される. 電子計算機によるプログラム計算では, 迅速で正確な計算が可能であるが, その大前提としては, いうまでもなくプログラムが完全でなければならない. そこで, プログラムのテストランをどのような方法で厳密に行うかが問題となる.

ノルム計算では, 計算処理行程に多数の分岐があり, それら各計算処理行程に対する厳密なチェックは, 一般に容易でない. たとえば, ノルム値がほかの方法ですでに知られている岩石の分析値を数種計算して, 結果が一致したからといって, そのプログラムが完全であると速断はできない. 従来の分析値を使って, プログラムのすべての計算行程をチェックするには, 相当多数の“珍しい組成をした”岩石の分析データを集めねばならず, これは無理な注文である.

現に筆者らが, 公表されている電子計算機によるノルム計算の結果を種々検討したところ, 明らかにプログラムミスに原因すると思われる数値のずれが, 数件認められた. この事実から, すでに使用されているノルム計算プログラムのチェックが, はたしてどの程度厳密に行われているか疑問である.

そこで筆者らは, この計算プログラムの厳密でしかも容易なテストラン法の必要性を認め, 以下に述べるテストデータを考案した.

テストデータの基本的な考えは, ノルム計算が化学成分のモル数をもとに行われる点に着目し, 算出すべき鉱物の組み合わせとモル数をあらかじめ設定することである. これらの鉱物を化学成分 (酸化物) に分解し, 各成分ごとのモル数の合計に分子量を掛けて重量比に換算し, これをテストデータとする.

この方法によれば, ノルム計算の規約に従った鉱物の

共存関係の範囲で, ノルム鉱物の組み合わせを任意に定めることができる. したがって, 鉱物組み合わせを工夫すれば, 必要最小限のデータ数で, ノルム計算のすべての計算処理行程の厳密なチェックを, 容易にしかも能率よく行うことができる.

以下, このテストデータの使用方法を述べ, あわせてノルム計算のプログラミングの要点についても触れる.

2. ノルム計算プログラムの要点

テストデータの説明にさき立ち, ノルム計算プログラムの主要な部分について, 筆者らが組んだプログラムを例に述べる. ここでは, テストランと関係する事項に限って記すことにし, ノルム計算法の詳細は, まえに掲げた文献にゆずる.

2.1 ノルム計算主要部

筆者らが組んだプログラムは, 筆算による手順に近いものにしてある. 算出する鉱物名とそれらの略号・化学式および分子量, そしてそれらを構成する酸化物の分子量を第 1 表に示す.

計算の流れを第 1 図および第 2 図に示す. 計算行程を図中の番号で示す. 便宜上, 第 1 図に示される範囲をプログラム前半部, 第 2 図に示されるものを同後半部とよぶ.

プログラム前半部では, 化学分析値を入力しこの値 (以下, 入力重量比という) を成分の分子量で割り, モル数 (以下, 入力モル数という) に変えて, ノルム計算の行程に入る. 計算の要点を第 1 図および第 2 図に示す流れ図に従って述べる¹⁾.

まず, MnO と NiO を FeO に加える. この混合物を以下, FeO* と表わす. FeO* に対する MnO, FeO および NiO の比率 P_1 , P_2 および P_3 を計算しておく (行程 01 または 02). これらは出力行程で使う.

プログラム前半部は, 2 種の化学成分の量の比較と, その結果分岐する 2 通りの計算を 1 組としてサブルーチンにすると, プログラムが簡素化される. 第 1 図で*印をつけた行程がこれに当たる.

以下, 算出されるノルム鉱物を第 1 表に示した略号で記す.

1) 流れ図で, $Al_2O_3-an \rightarrow C$ とあるのは, Al_2O_3 と an の各メモリー内容の差を計算し, その結果を C のメモリーに入れることを意味する.

0 \rightarrow TiO_2 は, TiO_2 のメモリーを 0 にすることを意味する.

第1表 テストデータで扱う化学成分とノルム鉱物の分子量

Molecular weights of chemical components and normative minerals for the test data.

Oxide	Molecular weight				
Fe ₂ O ₃	159.692	CaO	56.079		
SiO ₂	60.085	FeO	71.846	Na ₂ O	61.979
TiO ₂	79.899	MnO	70.937	K ₂ O	94.195
Al ₂ O ₃	101.961	MgO	40.304	P ₂ O ₅	141.945
Cr ₂ O ₃	151.990	NiO	74.699		

Normative mineral.		Formula	Molecular weight
Quartz	Q	SiO ₂	60.085
Corundum	C	Al ₂ O ₃	101.961
Orthoclase	or	K ₂ O·Al ₂ O ₃ ·6SiO ₂	556.666
Albite	ab	Na ₂ O·Al ₂ O ₃ ·6SiO ₂	524.450
Anorthite	an	CaO·Al ₂ O ₃ ·2SiO ₂	278.210
Leucite	lc	K ₂ O·Al ₂ O ₃ ·4SiO ₂	436.496
Nepheline	ne	Na ₂ O·Al ₂ O ₃ ·2SiO ₂	284.110
Kaliophyllite	kp	K ₂ O·Al ₂ O ₃ ·2SiO ₂	316.326
Acmite	ac	Na ₂ O·Fe ₂ O ₃ ·4SiO ₂	462.011
Sodium metasilicate	ns	Na ₂ O·SiO ₂	122.064
Potassium metasilicate	ks	K ₂ O·SiO ₂	154.280
Wollastonite	wo	CaO·SiO ₂	116.164
Diopside (di)	Enstatite	en	MgO·SiO ₂
Hypersthene (hy)		fs	FeO·SiO ₂
Olivine (ol)	Forsterite	fo	2MgO·SiO ₂
	Fayalite	fa	2FeO·SiO ₂
Calcium orthosilicate	cs	2CaO·SiO ₂	172.243
Magnetite	mt	FeO·Fe ₂ O ₃	231.538*
Chromite	cm	FeO·Cr ₂ O ₃	223.836*
Hematite	hm	Fe ₂ O ₃	159.692
Ilmenite	il	FeO·TiO ₂	151.745*
Titanite	tn	CaO·TiO ₂ ·SiO ₂	196.063
Perovskite	pf	CaO·TiO ₂	135.978
Rutile	ru	TiO ₂	79.899
Apatite	ap	$\frac{10}{3}$ CaO·P ₂ O ₅ **	328.875

* FeO* の平均分子量 C₂* を使う場合は、これらの値を用いない。

This molecular weight is not used when average molecular weight C₂* is used for FeO* (=MnO+FeO+NiO).

** 本報告では、3CaO·P₂O₅·1/3 CaF₂ (分子量 336.208) を使わない。

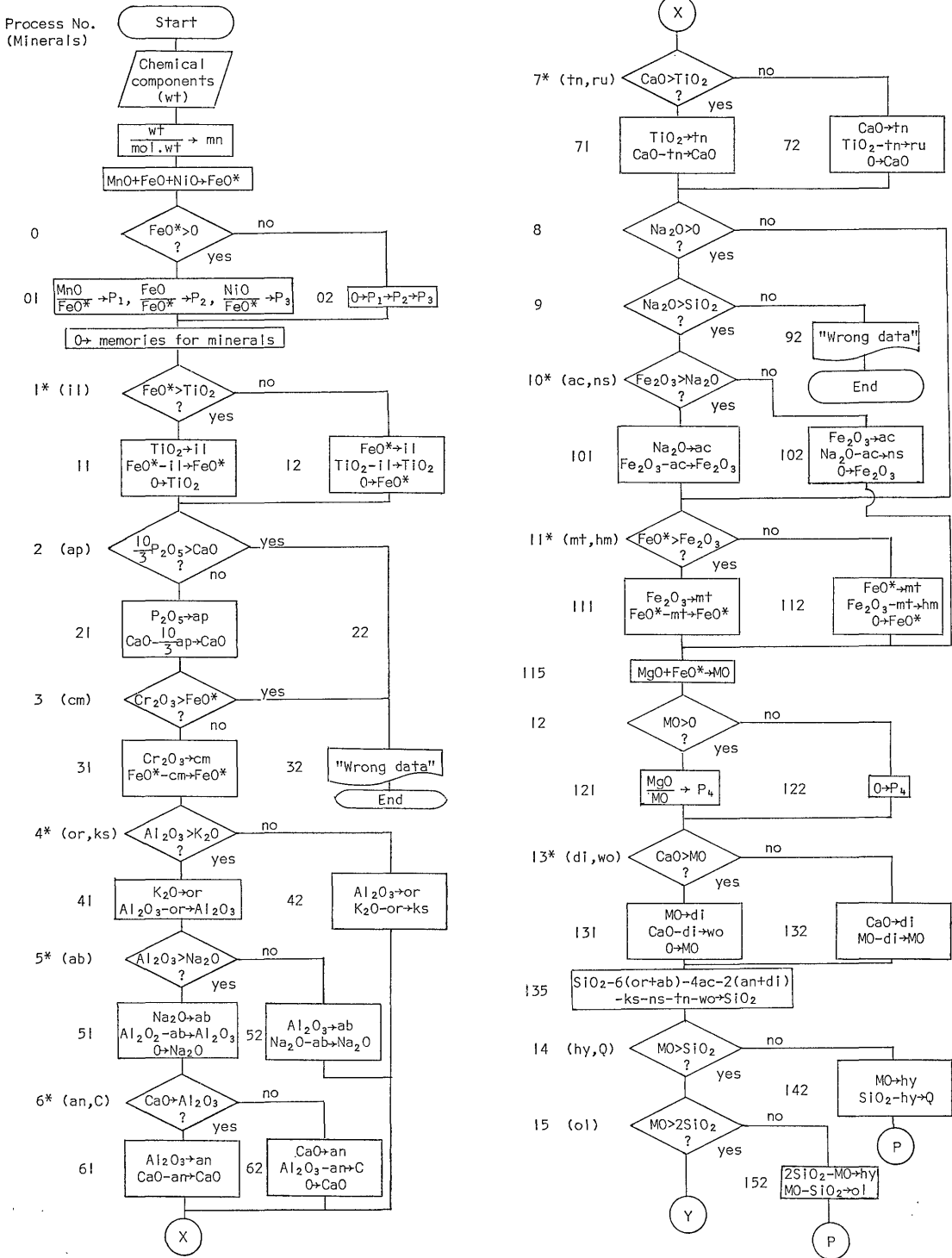
In this paper, this formula is used instead of 3CaO·P₂O₅·1/3 CaF₂ (molecular weight, 336.208).

mt を算出したあと、FeO* の残量と MgO を加えて、これを MO と表わす (行程 115)。MgO の MO に対する割合 P₄ を求める (行程 121 または 122)。これらは出力の際に用いる。

wo および di を算出したあとで、それまでに算出された鉱物に必要な量の SiO₂ をまとめて差し引く (行程 135)。その結果 MO と SiO₂ のそれぞれの残量が MO ≤ 2SiO₂ の関係にあれば、計算は前半部で終了する。

後半部は、前半部で算出された鉱物に見合う量の SiO₂ がない場合、すなわち MO > 2SiO₂ (行程 15) となるときの処理である。ここではすでに算出された鉱物を、もっと SiO₂ の少ない鉱物に変えて、その際に放出される SiO₂ をもとに ol を作り、過剰の MO を吸収する。

後半部では、分解される鉱物・新しく作られる鉱物・追加される ol および ol に使われる MO の各量的関係に注意を要する。関係する鉱物置換の式と量的関係を示



* サブルーチン化の可能な行程
Possible to make up a subroutine.

第 1 図 ノルム計算の流れ (プログラム前半部)
Flowchart of the normative calculation program (Part 1).

第 2 表 プログラム後半部に関係する方程式

Equations concerning to Part 2 of the normative calculation program.

151	$hy+M0=ol$	152	$\begin{cases} hy+ol=S \\ hy+2ol=M \end{cases}$ $hy=2S-M, ol=M-S.$
161	$tn+2M0=pf+ol$		
171	$ab+8M0=ne+4ol$	172	$\begin{cases} 2ne+6ab=S \\ ne+ab=N \end{cases}$ $ab=\frac{S-2N}{4}, ne=N-ab.$
181	$or+4M0=lc+2ol$	182	$\begin{cases} 4lc+6or=S \\ lc+or=K \end{cases}$ $or=\frac{S-4K}{2}, lc=K-or.$
191	$2wo+2M0=cs+ol$	1922	$\begin{cases} ol+2di+cs=S \\ di+2cs=C \\ 2ol+di=M \end{cases}$ $di=\frac{2S-C-M}{2}, cs=\frac{C-di}{2}, ol=\frac{M-di}{2}.$
	$2di+4M0=cs+3ol$		
201	$lc+4M0=kp+2ol$	202	$\begin{cases} 4lc+2kp=S \\ lc+kp=K \end{cases}$ $lc=\frac{S-2K}{2}, kp=\frac{4K-S}{2}.$

行程番号は第 2 図に同じ。

For process number, see Fig. 2.

計算に關与する成分 C: CaO, K: K₂O, M: MO, N: Na₂O, S: SiO₂.

す連立方程式を行程別にまとめて、第 2 表に示す。

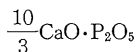
後半部の行程のうち、161, 171 および 181 は、上に述べた量的関係に注意して、適当な引き数を定めると、サブルーチンにすることができる。第 2 図の中で * 印をつけたものが、それに当たる。

2.2 データの出力

計算の結果得られたノルム鉱物のモル数 (以下、出力モル数という) に分子量を掛けて重量比 (以下、出力重量比という) に変えてデータの出力 (印刷) をする。

プログラムの点検を容易にするために、入力重量比の合計と出力重量比の合計がデータによらず一致するように、つぎの 2 つの処置をしておくことが望ましい。

1) ap の分子式は、フッ素成分の入力をしない場合には、第 1 表のように



として扱う。これにより、ap の出力重量比のずれが解消できる。

2) FeO* の分子量に FeO の分子量をそのまま使うと、MnO および NiO の分子量と FeO の分子量の差の分だけ、出力重量比がずれる。これを解消するために、行程 01 または 02 で求めた比率 P₁, P₂ および P₃ を用いて、つぎの式で FeO* の分子量 C₂* を求める。

$$C_2^* = C_1P_1 + C_2P_2 + C_3P_3.$$

ここに、C₁, C₂, および C₃ は、それぞれ MnO, FeO および NiO の分子量である。FeO* を含む鉱物の出力重量比の算出には、FeO の分子量のかわりに C₂* を使う。これらの効用については、3.2.2 項で述べる。

3. テストデータ

3.1 仕組みと機能

テストデータは、算出すべきノルム鉱物の組み合わせをノルム計算の規約に従った鉱物共存関係を考慮して設定し、各鉱物のモル数は大半のものについて 0.1 モルと定めてある。各鉱物を化学成分に分解し、成分ごとに合計したものに分子量を掛けて、入力値としてある。

テストデータに使われた原子量は、国際純正・応用化学連合 (IUPAC) が 1973 年に作成した値を採用した (東京天文台, 1976). 取り扱う化学成分 (酸化物) の分子量は、四捨五入により小数以下 3 けたに丸め、これをもと

にノルム鉱物の分子量を定めた (第 1 表).

公表される原子量は、年代によって少しずつ異なるが、テストデータで用いられている原子量と違う値を採用したプログラムを実行した場合、どの程度結果にずれを生

第 3 表 テストデータ (その 1)

Test data (1).

No.	1.		2.		3.		4.			
Input data										
	wt	mn	wt	wt	mn	wt	mn	wt	mn	
SiO ₂	96.14	1.600		90.13	1.500	78.11	1.300	77.51	1.290	SiO ₂
TiO ₂	7.99	.100				23.97	.300	4.79	.060	TiO ₂
Al ₂ O ₃	40.78	.400		10.20	.100	10.20	.100	18.35	.180	Al ₂ O ₃
Fe ₂ O ₃	15.97	.100		47.91	.300	15.97	.100			Fe ₂ O ₃
FeO	14.37	.200		7.18	.100	7.18	.100			FeO
MnO	14.19	.200								MnO
MgO	4.03	.100		8.06	.200			4.84	.120	MgO
CaO	5.61	.100		5.61	.100	24.30	.433	20.19	.360	CaO
Na ₂ O	6.20	.100		6.20	.100	18.59	.300	3.72	.060	Na ₂ O
K ₂ O	9.42	.100		18.84	.200			5.65	.060	K ₂ O
P ₂ O ₅						14.19	.100			P ₂ O ₅
Total	214.70			194.13		192.51		135.05		Total
Output data										
	(A)		(B)							
Q				5.99	.100	5.99	.100	1.80	.030	Q
C	10.18	.100	10.18							C
or	55.67	.100	55.67	55.69	.100			33.39	.060	or
ab	52.46	.100	52.46			52.46	.100	31.48	.060	ab
an	27.83	.100	27.83					16.68	.060	an
ac				46.22	.100	46.20	.100			ac
ns						12.19	.100			ns
ks				15.42	.100					ks
wo								13.94	.120	wo
wo				11.62	.100			13.95	.120	wo
en				10.04	.100			12.06	.120	en
fs				.00	.000			.00	.000	fs
en	3.33	.033	3.33	10.03	.100					en
fs	8.72	.066	8.75							fs
fo	4.70	.033	4.70							fo
fa	13.56	.067	13.62							fa
mt	23.11	.100	23.15	23.14	.100					mt
hm				15.98	.100					hm
il	15.13	.100	15.17			15.16	.100			il
tn						19.62	.100	11.75	.060	tn
ru						7.99	.100			ru
ap						32.88*	.100			ap
Total	214.70		214.88	194.13		192.51**		135.05		Total
Molecular ratios										
MgO		.200			.667		.000		1.000	MgO
MnO		.400			.000		.000		.000	MnO
FeO		.400			.333		1.000		.000	FeO
or		.400			1.000		.000		.400	or
ab		.400			.000		1.000		.400	ab
an		.200			.000		.000		.200	an

wt: percentage weight; mn: molecular number.

No. 1 では、FeO* の分子量に平均分子量 C₂* を採用した場合は (A)、そうでない場合は (B) の結果を得る。

In no. 1, output data will be as same as (A) if the average molecular weight (C₂*) is used for FeO*, and (B) when it is not used.

ap の分子式に 3CaO·P₂O₅·1/3 CaF₂ を採用した場合は、それぞれ * の値が 33.62, ** の値が 193.25 となる。

When 3CaO·P₂O₅·1/3 CaF₂ is given for the formula of ap, values of ap (*) and total (**) will be 33.62 and 193.25, respectively.

第 4 表 テストデータ (その 2)
Test data (2).

No.	11.		21.	
Input data				
	wt	mn	wt	mn
SiO ₂	96.14	1.600	90.13	1.500
TiO ₂	7.99	.100		
Al ₂ O ₃	40.78	.400	10.20	.100
Cr ₂ O ₃	15.20	.100		
Fe ₂ O ₃				
FeO	10.78	.150	7.18	.100
MnO	10.64	.150		
MgO	4.03	.100	8.06	.200
NiO	7.47	.100		
CaO	5.61	.100	5.61	.100
Na ₂ O	6.20	.100		
K ₂ O	9.42	.100	18.84	.200
P ₂ O ₅				
Total	214.26		140.02	
Output data				
	(A)		(B)	
Q			24.03	.400
C	10.18	.100	10.18	
or	55.67	.100	55.67	.100
ab	52.46	.100	52.46	
an	27.83	.100	27.83	
ks			15.42	.100
wo			11.62	.100
en			6.70	.067
fs			4.40	.033
en	3.33	.033	3.33	.133
fs	8.78	.066	8.75	.067
fo	4.70	.033	4.70	
fa	13.67	.067	13.62	
cm	22.42	.100	22.39	
il	15.21	.100	15.17	
Total	214.26		214.11	140.02
Molecular ratios				
MgO		.200		.667
MnO		.300		.000
FeO		.300		.333
NiO		.200		.000
or		.400		1.000
ab		.400		.000
an		.200		.000

No. 11 の結果 (A) および (B) については第 3 表の No. 1 と同じ。
(A) and (B) in no. 11 is same to no. 1 in Table 3.

じるかを検討した。その結果、1951 年頃の比較的有効けた数の少ない (ほとんどが小数以下 2 けたどまり) 原子量を採用しても、テストデータとの値のずれは、平均で出力モル数 0.0003 および出力重量比 0.003 程度であった。したがって、採用原子量の違いは無視できる。

テストデータは、第 3 表に示す No. 1 から No. 4 を基本とする。第 4 表に示す No. 11 および No. 21 はそれぞれ No. 1 および No. 2 を変形したものである。これらによって、プログラム前半部のテストランを行う。第 5 表に示す No. 41 から No. 46 は、No. 4 の SiO₂

の値だけを変化させたもので、プログラム後半部の点検に使う。

つぎに、計算が正しく実行された場合の、各データによる計算の流れを、第 1 図および第 2 図に示す計算行程番号で述べる。プログラム前半部の計算経路を第 6 表に示す。

No. 1 による計算は、行程 11→41→51→62→72→111→132→152 の順に進み、il, or, ab, an, C, mt, hy および ol が、各 0.1 モル算出される。このデータは、Al₂O₃ に関する計算処理行程 (以下、これらを Al₂O₃ の流れ、などという) のほか、FeO* および MgO の流れの点検をする機能をもつ。出力行程での FeO* の分子量の取扱い、hy と ol を端成分鉱物に分解する処理についての点検もできる。

No. 11 は、Cr₂O₃ および NiO の入力をする場合のデータで、No. 1 の代りに使う。cm 0.1 モルの出力が追加されたほかは、No. 1 と同じ機能をもつ。

No. 2 による計算は、行程 11→42→71→101→112→132→142 と進む。その結果 or, ks, ac, mt, hm, di, hy および Q が、各 0.1 モル算出される。このデータはおもに K₂O, Fe₂O₃ および FeO* (No. 2 では、内容的に FeO と同じ) の流れを点検する。

No. 21 は、No. 2 の入力成分から Fe₂O₃ と Na₂O を取り去ったものである。このデータは、出力行程で di を wo, en および fs に、また hy を en および fs にそれぞれ分解する処理の点検に使う。

No. 3 による計算は、行程 12→21→41→52→72→102→132→142 と進む。その結果 il, ap, ab, tn, ru, ac および Q が各 0.1 モル算出される。このデータは、TiO₂, Na₂O および P₂O₅ の流れの点検と、出力行程での ap の分子量の取扱いの点検をする機能をもつ。

No. 4 による計算は、行程 12→41→51→61→71→131→142 と進む。その結果、or, ab, an, tn が各 0.06 モル、wo および di が各 0.12 モル、Q が 0.03 モル算出される。このデータはおもに CaO の流れを点検する機能をもつ。

No. 41 から No. 46 のデータは、SiO₂ 以外の成分は No. 4 と同じ値を使う。第 6 表では、SiO₂ 以外の値を省略した。これらのデータによってプログラム後半部のすべての分岐を、順に点検できる。

No. 41 による計算は、行程 15 までは No. 4 と同じで、以後 151→16→162 と進む。計算結果を No. 4 と比べると、Q が消失し、tn が 0.03 モルに半減し、代って pf が 0.03 モル算出される。

第5表 テストデータ (その3)

Test data (3).

No.	41.		42.		43.		44.		45.		46.		
Input data													
SiO ₂ *	wt	mn	wt	mn	wt	mn	wt	mn	wt	mn	wt	mn	SiO ₂
Total	73.90	1.230	64.89	1.080	54.08	.900	48.67	.810	43.26	.720	36.05	.600	Total
Output data													
or	33.39	.060	33.39	.060	16.69	.030							or
ab	31.48	.060	15.72	.030									ab
an	16.68	.060	16.68	.060	16.68	.060	16.68	.060	16.68	.060	16.68	.060	an
lc					13.09	.030	26.18	.060	26.18	.060	13.08	.030	lc
ne			8.54	.030	17.05	.060	17.05	.060	17.05	.060	17.05	.060	ne
kp											9.49	.030	kp
wo	13.94	.120	13.94	.120	13.94	.120	6.95	.060					wo
wo	13.95	.120	13.95	.120	13.95	.120	13.95	.120	6.97	.060			wo
en)di	12.06	.120	12.06	.120	12.06	.120	12.06	.120	6.02	.060			en)di
fs)	.00	.000	.00	.000	.00	.000	.00	.000	.00	.000			fs)
fa)ol									4.23	.030	8.45	.060	fa)ol
cs									.00	.000	.00	.000	cs
tn	5.84	.030					5.18	.030	15.51	.090	20.68	.120	tn
pf	4.10	.030	8.15	.060	8.15	.060	8.15	.060	8.15	.060	8.15	.060	pf
Total	131.44		122.43		111.62		106.21		100.80		93.59		Total
Molecular ratio													
or		.400		.500		.500		.000		.000		.000	or
ab		.400		.250		.000		.000		.000		.000	ab
an		.200		.250		.500		1.000		1.000		1.000	an

* SiO₂ 以外の入力値は第3表の No. 4 に同じ。

Input data for other components are same in no. 4 of Table 3.

No. 42 による計算は、行程 16→161→17→172 と進む。結果を前段と比べると、tn が消失し、pf は 0.06 モルに倍増する。ab が 0.03 モルに半減し、代って ne が 0.03 モル算出される。

No. 43 による計算は、行程 17→171→18→182 と進む。結果を前段と比べると、ab が消失し、ne は 0.06 モルに倍増する。or は 0.03 モルに半減し、代って lc が 0.03 モル算出される。

No. 44 による計算は、行程 18→181→19→192→1921 と進む。結果を前段と比べると、or は消失し、lc が 0.06 モルに倍増する。wo が 0.06 モルに半減し、代って cs が 0.03 モル算出される²⁾。

No. 45 による計算は、行程 19→192→1922 と進む。結果を前段と比べると、wo は消失し、di が 0.06 モルに半減する。新しく ol が 0.03 モル算出され、cs は 0.09 モルに増加する。

No. 46 による計算は、行程 19→191→20→202 と進む。結果を前段と比べると di は消失し、lc が 0.03 モルに半減する。ol は 0.06 モルに、cs は 0.12 モルにそれぞれ増加し、新しく kp が 0.03 モル算出される。

3.2 テストランの実際

ノルム計算は、モル数の計算であるから、プログラムの点検も、モル数の関係に着目して行えば能率がよい。

2) cs の代りに akermanite を作る方法もある (Cross *et al.*, 1912; 大久保・黒田, 1968)。ここでは、WASHINGTON (1917), JOHANNSEN (1931) の方法に従った。

テストデータにも、入力モル数と出力モル数が表示してあるので、テストランに際しては、これらの値が印刷されるように、プログラムに手を加えておくことが望ましい。

プログラムの点検は、ノルム計算部分 (入力行程を含む) と出力行程に分けて行う。

3.2.1 ノルム計算部分の点検

最初に、プログラム前半部について、データ No. 1 (Cr₂O₃ および NiO の入力をもつプログラムでは No. 11), No. 2, No. 21, No.3 および No. 4 を使って点検を行う。後半部については、前半部の“虫とり”が完了してから行う。後半部の点検は、No. 41 から No. 46 までをこの順序に入力して行い、各データごとに“虫とり”を完了してからつぎへ進むようにする。

結果については、つぎの手順で調べる。

1) 入力重量比に誤りがないかをまず確かめ、つぎに、入力モル数をテストデータと比べる。

入力モル数が違うのは、化学成分 (酸化物) の分子量が違っているためである。分子量とその取り扱いの行程を調べる。

2) 出力値でマイナスを示すものがないか調べる。

出力値がマイナスになるのは、大小判断の誤りによる誤った分岐、とくに ol がマイナスになるのは、プログラム後半部での ol の足し込みを忘れた場合などが原因である。

3) 出力された鉱物の組み合わせが、テストデータと

第 6 表 テストデータによるプログラム前半部の計算の流れと算出ノルム鉱物

Flows of calculation by the test data and formed normative minerals in Part 1 of the program.

Data No.	1.	2.	3.	4.	11.	21.
Process No.						
1	11	↓				↓
	12			11	↓	
2	21	↓	↓	ap	↓	↓
3	31	↓	↓	↓	↓	cm
4	41	or		↓	or	or
	42		or+ks			
						or+ks
5	51	ab			ab	ab
	52			ab		
6	61				an	
	62	C+an				C+an
7	71		↓		tn	
	72	↓		tn+ru		↓
10	101		ac			
	102			ac+ns		
11	111	mt				mt
	112		mt+hm	↓	↓	
13	131				wo+di	
	132	↓	di	↓		↓
14	142		Q+hy	Q	Q	
						Q+hy
15	152	hy+ol				hy+ol

↓ この行程を通るが、鉱物は算出されない。

This process is executed, but no minerals are formed.

| この行程は通らない。

This process is not executed.

行程番号については第 1 図参照。

As to process numbers, see Fig. 1.

一致しているか調べる。

鉱物組み合わせが違って、出力重量比の合計も違う場合は、計算処理に誤りがある。出力重量比の合計が一致していれば、個々の算式の問題ではなく、一連の計算処理行程が脱落（または短絡）しているか、ノルム計算規約に違反した計算法の結果と考えられる。

4) 以上について異常がなければ、出力モル数をテストデータと比べる。これらが各鉱物について一致していれば、計算部分は正しいことになる。出力モル数を印刷させないで行う場合は、出力重量比をテストデータと比べる。No. 1 および No. 11 では、FeO* の分子量に C₂* を採用していれば結果は第 3 表の (A) に、そうでな

れば(B)と一致するはずである。もし一致しなければ、3)と同様に出力重量比合計をテストデータと比べる。合計が違っていけば、計算部分の誤り、合計が一致していたら、規約違反の計算が考えられる。

3.2.2 ノルム計算部分の誤り発見法

ノルム計算行程のどこに誤りがあるかを早く見出すコツを述べる。

テストデータと計算結果が違う鉱物を列挙し、値の増減と、それらの共通成分を調べる。これには、モル数の関係で比べるのが早道である。

1 箇所の誤りによって値のずれが、プログラムの後方に伝播することを念頭において、3.1節で述べた“成分の流れ”という考えに立て、データごとに調べる。どのデータで値の違いが認められるか(または大きいか)を調べ、その中の共通成分を考えて、調査範囲をせばめてゆく。プログラムを後方からさかのぼり、正しい値の出ている行程まで点検する。

出力モル数を印刷しないで点検を行う場合は、各鉱物の出力重量比やそれらの合計の値と、それらに対応するテストデータの値のずれを手がかりにする。テストデータの性質上化学成分または鉱物の0.1モルは、それらの分子量の0.1倍として重量比に表われる。誤りが1箇所ならば、出力重量比の合計のずれが、関係する成分または鉱物の分子数の0.1倍などを示すことも少なくない。

以上の点から、2.2節で述べたように入力重量比と出力重量比のそれぞれ合計をデータによらず一致させると、点検の際の判断が容易になる。この処置は、ノルム計算に本質的な問題ではないけれども、純粹にプログラミング技術上からは有効でしかも必要と考えられる。

3.2.3 出力行程の点検

ノルム計算部分に誤りがないことを確かめたのちに、つぎのような点検をする。

1) 出力重量比を各鉱物についてテストデータと比べる。No. 1 および No. 11 については、結果(A)または(B)のどちらかと一致していればよい。一致していれば、出力行程に異常はなく、点検は完了する。一致していないものがあれば、鉱物の分子量が違っている。

2) No. 1 または No. 11 で、hy を en および fs に分解して表示する処理の点検をする。これらのデータによると en 0.033 モル、fs 0.066 モルおよび fo 0.033 モル、fa 0.067 モルが算出される。

3) No. 21 で di を wo、en および fs に分解する処理の点検をする。wo 0.1 モル、en 0.067 モルおよび fs 0.033 モルが算出される。

各テストデータには、MgO : MnO : FeO : NiO のモ

ル数比および or : ab : an のモル数比を表示した。ノルム or および ab の分子量は、通常使われている分子量の2倍になっているので、真のモル比はノルムのモル数比で表わすと、2or : 2ab : an となるので注意を要する。

4. ま と め

C.I.P.W. ノルム計算プログラムのために考案したテストデータは、計算の結果算出されるべきノルム鉱物の組み合わせとモル数を先に決めて、それをもとに入力値を逆算して求める点に特徴がある。この方法によれば、計算行程の任意の箇所についてのもっとも適当なテストデータを作ることができる。今回扱われなかったCO₂ほかの成分が入力できるプログラムに対しても、上に述べたやり方で、テストデータを作ることができる。鉱物組み合わせをうまく考え、なるべく少ないデータで、計算処理行程のすべてを検査できるように、筆者らは工夫を重ねた。

これらのテストデータでテストできるのは、C.I.P.W. ノルム計算の規約に従って組まれた計算プログラムであれば、どのようなものでもよく、プログラムの様式や、使用する計算機の種類には関係がない。プログラムで採用している原子量の違いも無視できる。

テストデータの有効性は、今後新しく作られるプログラムに対して、もっとも直接的であろう。しかし従来から使われているプログラムも、もし以上に述べた程度のテストランが行われていないものについては、このテストデータによる検査をおすすめする。公開されているノルム計算プログラムのいくつかは“虫とり”を要することが、既発表のデータを通じてうかがえる。

テストデータの効用のもう一つは、プログラムが正しいという前提に立てば、そのプログラムの実行に関係するプログラムステップ用およびデータ用のレジスタが正しく作動しているかを点検することもできる。これは、卓上型計算機の場合などには、とくに必要である。

最後に、テストデータと流れ図(第1図、2図)の利用によって、ノルム計算プログラムが容易に組めるようになったという前提で、とくに卓上型計算機でのプログラミングについて述べる。

卓上型計算機は、最近研究室にかなり普及している。筆者らも卓上機³⁾を使ってノルム計算プログラムとテストデータを作成した。筆者らのプログラムは、約2.5キロワードの長さになったが、対話式としたために文字を多数使ったから、正味はもっと短い。

3) 横河ビューレットバックカード社製 20 型計算機 (レジスタ数 1453) を使った。

卓上機は、ノルム計算に対して容量が小さすぎる場合も少なくない。しかし計算は、適当な箇所で行くつかに切ることができる(第1図, 2図)ので、計算機の容量とにらみ合わせて、いくつかに区切って計算することもできる。計算の頻度が少ない行程は省略してもよい。小野(1962)によれば、日本産火山岩約1,000個の化学分析値のうち、ノルム計算の結果 *tn* が算出されたもの8例、*ns* が算出されたものおよび *cs* が算出されたもの各5例という程度である。以上の工夫をすれば、卓上機でもノルム計算のプログラミングが可能となる。

この研究に際して、当所地質部小野晃司技官に有意義な示唆を得た。

引用文献

- CROSS, W., IDDINGS, J. P., PIRSSON, L. V. and WASHINGTON, H. S. (1902) A quantitative chemo-mineralogical classification and nomenclature of igneous rocks. *Jour. Geol.*, vol. 10, p. 555-690.
- , ———, ——— and ——— (1903) *The quantitative classification of igneous rocks*. Chicago, p. 186-203, 236-259.
- , ———, ——— and ——— (1912)

Modifications of the quantitative system of classification of igneous rocks. *Jour. Geol.*, vol. 20, p. 550-561.

- 平凡社(1970) 地学事典. p. 1242-1243.
- JOHANNSEN, A. (1931) *A descriptive petrography of the igneous rocks*. vol. 1, Univ. of Chicago, p. 83-99.
- 都城秋穂・久城育夫(1975) 岩石学 II. 共立出版, p. 162-170.
- 大久保雅弘・黒田吉益(1968) 実験地学ハンドブック. 築地書店, p. 170-174.
- 大森貞子(1975) ノルム計算の簡略法. 地質調査所化学分析法, no. 49, 81 p., 地質調査所.
- 小野晃司(1962) 日本産火山岩の化学成分. 441 p., 地質調査所.
- 東京天文台(1976) 理科年表. no. 49, 丸善, p. 物 13-14.
- WASHINGTON, H. S. (1917) Chemical analysis of igneous rocks. *U.S.G.S. Prof. Pap.*, no. 99, p. 1162-1165.
- (受付: 1976年8月5日; 受理: 1976年11月4日)