

会 話 型 デ ー タ 処 理 — その 4 —

岩 石 化 学 デ ー タ 処 理 シ ス テ ム の あ ら ま し

吉 井 守 正 ・ 佐 藤 岱 生 (鉱 床 部)
Morimasa YOSHI Taisei SATO

1. は じ め に

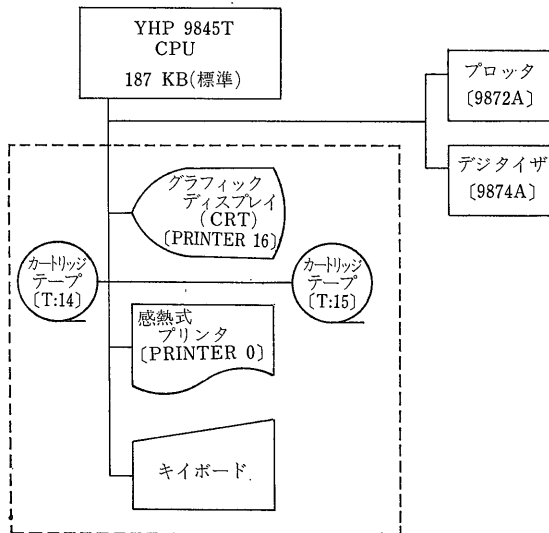
これまでの3回で YHP-9845T (横河ヒューレットパッカ
ード社製会話型電子計算機)用に作った岩石用化学分析
データ処理プログラムの 技術的な点を断片的に述べた。
作成した一連のプログラムを 今後は“岩石化学データ
処理システム”と呼ぶことにする。 このシステムのあ
らましをこれから紹介しよう。

このシステムは 岩石とくに珪酸塩の化学分析値を取
り扱うのに適するように設計しており 火成岩や変成岩
をはじめ堆積岩の 主成分および微量成分が同時に処理
できる。 そして処理の結果をさまざまに図に表現でき
るように 種々の図示用プログラムを備えているのが特
徴である。 火成岩の場合は ノルム計算を経てノルム
値や D. I. 値などを用いての図示までが一貫した行程の
中で行えるので きわめて能率がよい。

このシステムは 岩石用に限らず 一般の化学分析
データ さらには二次元配列をもつデータであれば 処
理が可能という 汎用性にも富んでいる。

2. シ ス テ ム の 概 要

最初に 現在使用している 9845T の機器編成を第1図



第1図 YHP 9845T の構成

本体は 正面から見た時 点線内のような配置に
なっている。 [] 内はプログラムなどで使用する
機器の名称。

に示す。 計算機の本体には グラフィックディスプレ
イ カートリッジテープ装置 (2台) 感熱式プリンタお
よびキーボードが CPUと一体に組み込まれている。
外部機器としては プロッタとディジタイザがあり 此
れらは HP-IB と呼ばれるインターフェースバスに接続
されている。 ディジタイザについては今回の説明には
ないが 今後システムに加わる。

プログラムは ヒューレットパッカード社による“拡
張BASIC”を言語として書かれている。 プログラムシ
ステムは 機能別につぎの4群に分けられる。 此
れらを第2図に示す。

第1群のプログラムは データをキーボードから入力
し データテープを作るためのものである。 このシ
ステムでは 多量のデータを種々の目的で繰り返し処理す
ることを前提としている。 だからデータ入力プログラ
ムは処理プログラム (第2群)とは通常は別になっている。
入力プログラムとして 一般用にEDATA ノルム計算
用に ENORM がある。 これらの詳細については シ
リーズの第2回目に述べたので ここでは省略する。

第2群のプログラムは テープからデータを読み取
って処理を行なうもので 一般用としては データ印刷用
DPA 平均値・標準偏差値用MEAN 相関係数用CORE
2成分図用PXY 三角図・四面体図用TRID ヒストグ
ラム用HISTなどがある。

ノルム計算用としては 化学分析値・ノルム値・D. I.
値などの印刷用PNORM 2成分図用PXNMM・PXN
AN 三角図・四面体図用TRNMM・TRNAN 成分変
化図 (ハーカー図) 用HRKがある。 これらにはノルム
計算の行程がサブルーチンとして付属しており 選択さ
れた試料について ノルム計算とその結果の図示ができ
る。 PXNAN と TRNAN には 多数の作業を自動的
に連続処理する機能が付いている。

第3群は データテープを作らず キーボードからの
入力データをただちに計算処理して 結果を印刷または
ディスプレイするプログラムで 目下のところ ノルム
計算用のEPNORがある。 数十個程度の試料について

ノルム値・D.I.値などを求めるだけなら 即決で答が出るので便利である。

第4群は その他のプログラムで 今のところ ECO DP と SBCD が 用意されている。ECODP は多数の作業を自動的に連続処理(以下 自動連続処理と呼ぶ)するプログラム PXNAN と TRNAN を使用するために コード番号の組を あらかじめテープにレコードしておくためのプログラムである。SBCD は データファイル中のコード番号をサブコードに分解して 指定したサブコードを ASCII コード順にならべかえて印刷するプログラムである。これは 著者名用サブコードから 著者名をアルファベット順にならべたり 地域名用サブコードから地域名一覧表を作るときなどに便利である(コードの設計については本シリーズ その1 本誌315号参照)。

3. 作業の流れ

ではつぎに おもな作業の流れについて 説明しよう。

データのコード付け

このシステムは 多数のデータを分類別に選択して処理する方式なので まず最初に各試料に分類用のコードを付ける作業が必要である。コードの付け方についてはこのシリーズの第1回で述べたが コードの設計の良し悪しがデータ検索能率なども左右するので 十分時間をかけて 最適の分類コードを作っていたきたい。

データの入力

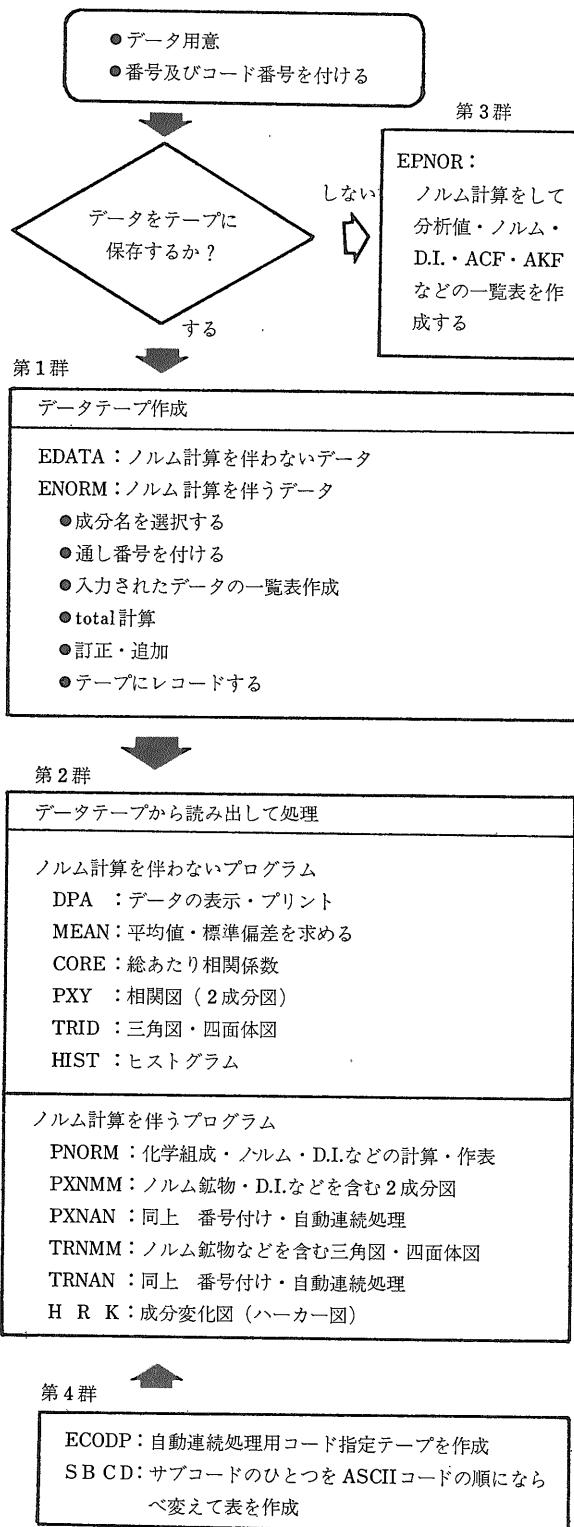
つぎにデータをキイボードから入力してデータテープを作る。これにはさきほどの第1群にあった EDATA または ENORM をプログラムとして使う。ノルム計算をする場合には ENORM を使うのを原則とする。

このときに 微量成分などノルム計算に関係しない成分を最大 15 (Cr₂O₃, NiO 付では 13) まで追加することができる。

EDATA を使ってデータを入力した場合も 入力成分にシリーズ第2回で述べた“標準化学成分”(SiO₂, TiO₂, Al₂O₃, Fe₂O₃, FeO, MnO, MgO, CaO, Na₂O, K₂O, P₂O₅, H₂O+, H₂O-, Others, Total の15成分。なおノルム用 (ENORM) では Cr₂O₃ と NiO を追加できる。) を選択したときには そのデータでノルム計算が可能である。

なお 入力が終了したら そのデータを印刷して入念に校正をして欲しい。とくにコードの間違ひは致命的である。分析値の誤りは計算機が行なう合計計算の結果と原データの“Total”を比較すると発見しやすい。

このプログラムは データの訂正や追加が重要な作業で



第2図 岩石化学データ処理システム
プログラム名とその機能を簡単に示す。プログラムは必要に応じて改良・増設が行なわれる。

あるという思想の下に設計されているので 誤りの訂正はいつでも簡単にできる (詳しくはシリーズ第2回参照)。

データの処理

データテープができたらいよいよ処理に移る。会話型計算機の場合は 計算機が使用者の指示を仰ぐための質問や 逆に使用者に対する指図を CRTの表示で出してくるので 使用者はキーボードを通じて それに回答してやればよい。操作はとても簡単である。プログラム製作者としては それらの順序や 質問文の良し悪しが 使い勝手に影響するので苦心する点でもある。

データ処理の大体の手順をつぎに示す。

1. 図示の場合の出力機器 (グラフィックディスプレイまたはプロッタ) の指定。
2. 作図条件 (X軸Y軸の数値範囲とその目盛) の指定。
3. 処理すべき化学成分名またはノルム鉱物名の指定。

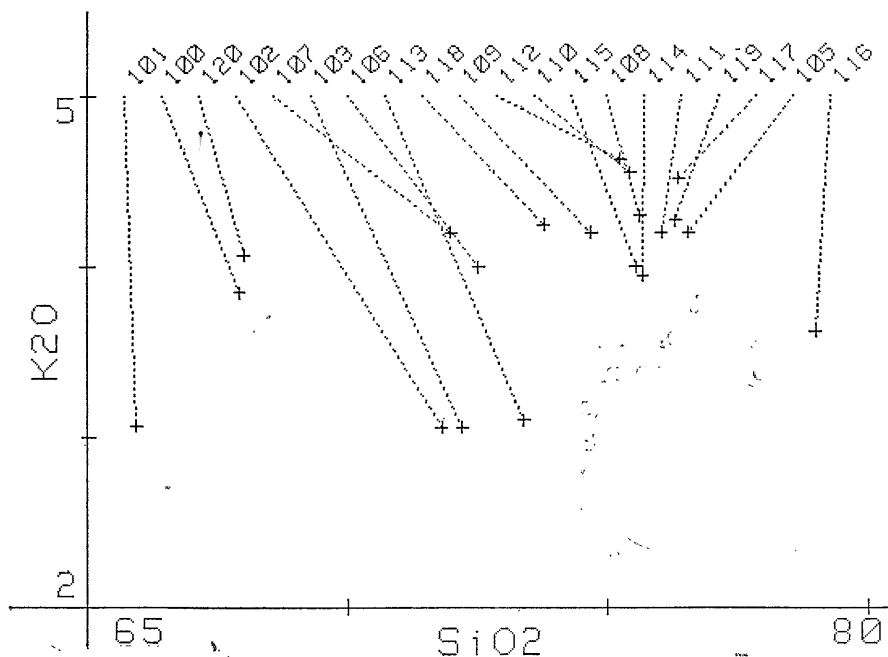
4. コードの指定 (4つのサブコードを最大9組)。

プログラムによって指定事項は さらにふえたり減ったりするのは当然である。使用者の指示に従った処理が行なわれて 結果が出力される。このあと次の実行では 上記1~4の中のどの行程から再出発するか 計算機がたずねてくる。行程には終りがないので 条件を変えながら 繰り返し実行できる。

火成岩試料の場合は まずノルム値などを求めておこう。PNORMによると 化学分析値・ノルム値・D.I. 値・AKF・ACF・Q-or-ab-an比が印刷され一覧できる。6試料までが1ページに収められ ページ数が打たれるので 順にとじて新しい原簿とする。

この原簿を見ながら 種々のデータ処理を試みる。手始めに コード別に各値の平均値・標準偏差値を求めたり (MEAN) 各成分総当たりで相関係数を算出したりする (CORE) と 案外な発見があるものだ。ただし化

```
File= COGRE          Date= 1980 NOV 15          Job= COMP GR OzSWJ-HDK
Samples= 540  Columns= 15
C 4      TAKAKUMA-YAMA
Sub-Code: 1          2          3          4
Pair 1  FRM TO      FRM TO      FRM TO      FRM TO
        S   S       G.. H..     ... F..     ... ***
Ratios: (wt)
Plot= 20  TOTAL: Plot= 20
```



第3図
“PXNAN”で作成したグラフィックディスプレイのハードコピー
SiO₂-K₂O 2成分図による番号付けの例。

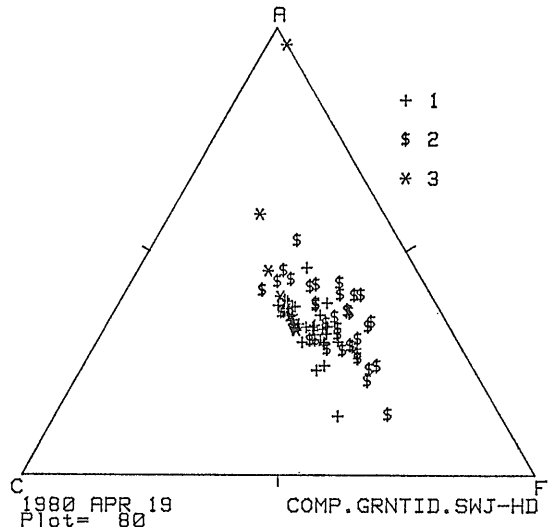
学成分同士の相関係数の値が良くても その2成分が本当に相関しているとは限らない (本誌282号). そこで2成分相関図で その状況を確認する必要がある.

2成分図の例を第3図に示す.

3成分系の組成比を見るには三角図を用いる. その例を第4図に示す.

4成分系で たとえば Q-ab-or-an 系の表現では 四面体図が使われる (ARAMAKI *et al.*, 1972). この図では まず Q-or-ab 比が 四面体の底面正三角形内の1点として 三角図の手法で表わされる. つぎに an の4成分全体に対する比が その底面の1点から 第4の頂点までの高さで表現される. こうして得られた四面体内の点を 1つの錐面に対して その錐面と底面とのなす辺に垂直で 底面に平行な方向に投影する. 投影された錐面を 底面と同じ平面に展開したものが 四面体図である. これを第5図に示す.

火成岩の成分変化図 (ハーカ-図) は HRK による. 横軸には通常 SiO₂ や D. I. がとられるが プログラムでは すべての化学成分とノルム鉱物名を 横軸の成分に指定する事ができる. 成分変化図の例を第6図に示す.



第4図 “TRNMM” で描いた ACF 図

- 1 : 日高帯の花崗岩類
- 2 : 日高帯のミグマタイト
- 3 : 日本の花崗岩類の平均 (ARAMAKI *et al.*, 1972)

なる.

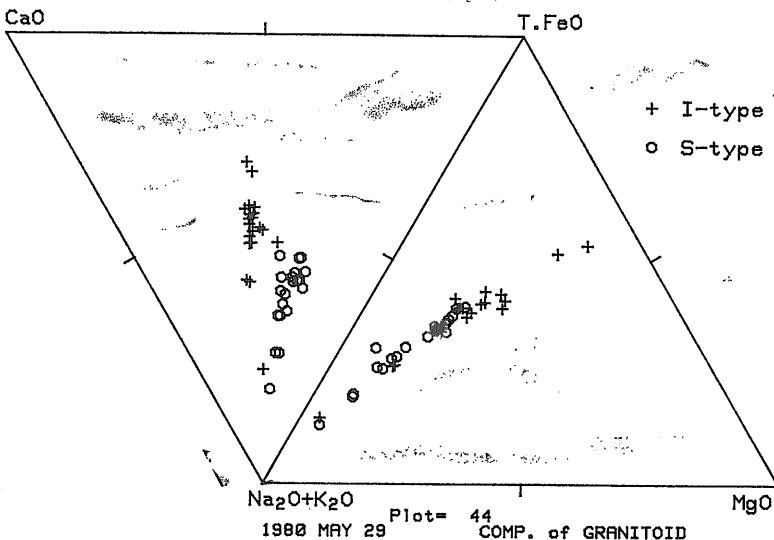
なお自動連続処理できるプログラムは目下のところ上記の2種だけだが このような作業を “予約” する方式は便利なので 今後ほかのプログラムでも順次実施したい. この詳細については稿をあらためて述べよう.

自動連続処理

データを種々のコードの組み合わせで試行錯誤的に処理する場合などは 同じプログラムを繰り返し実行する事になり その作業数は大変多くなる. このような多数の作業を計算機に付ききりで行なうのは 時間と労力のむだになる. そこで ECODP を使って自動連続処理の段取りを作る. その上で PXNAN TRNAN などを実行する. このやり方で 計算機の終夜運転も可能と

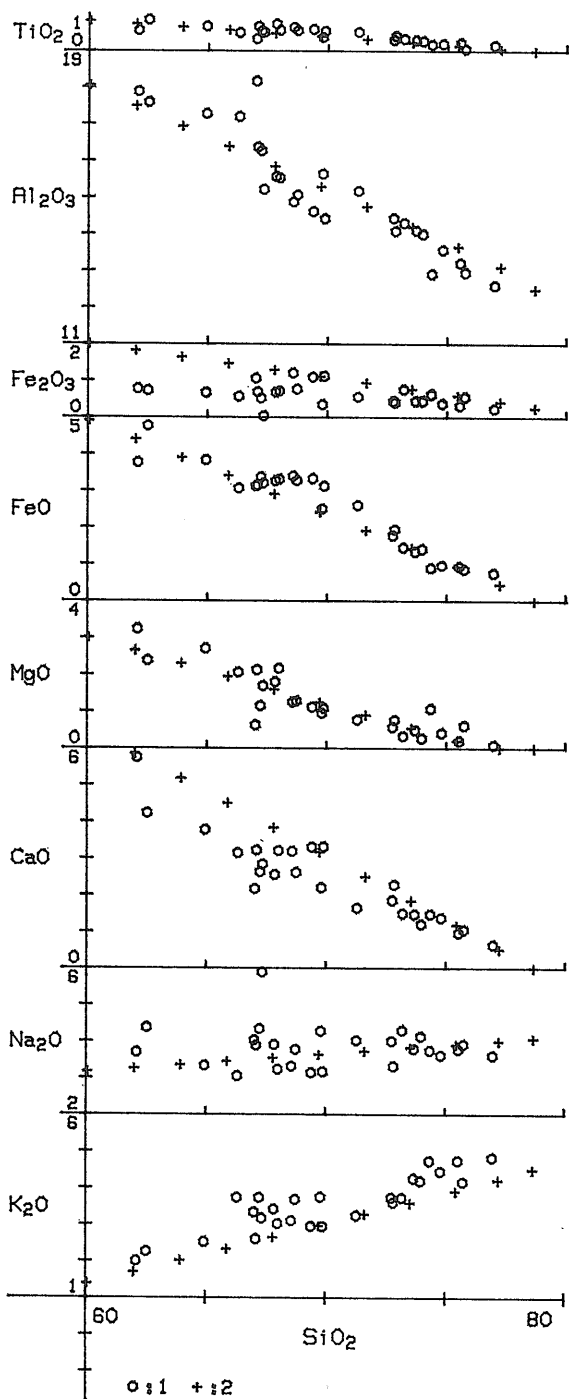
4. システムの中での工夫

このシステムを作る際に いろいろ工夫した点については これまでの3回のシリーズの中でも述べて来た.



第5図

MgO—T. FeO—Na₂O+K₂O—CaO 図 “TRNMM” で作成. データはオーストラリア Kosciusko パソリスの花崗岩類 (HINE *et al.*, 1978) 従来の MgO—T. FeO—Na₂O+K₂O 図では区分できない I タイプ花崗岩と S タイプ花崗岩も CaO を加えた四面体図に投影すると 明瞭に区分できる例.



第6図 “HRK” で作成したハーカ図
 1 : 北海道中軸部日高帯の花崗岩類 2 : 日本の花崗岩類の平均 (ARAMAKI *et al.*, 1972)
 SiO₂及び縦軸の各成分の表示範囲は 任意に変更できる。成分名に小文字と下付文字を使用し数字のゼロもコンピュータ数字のφではなく大文字のオーを使用して 投稿用原図としてそのまま使えるように工夫した。

今回は グラフィックディスプレイやプロッタで描いた図の表現上の工夫と 化学成分名およびノルム鉱物名の指定を受け付ける際の工夫について とくに述べよう。

図の表現上の工夫

読者の中には第3図から第6図までを見て すでにお気づきの方も多いかと思う。

まず 第3図であるが この2成分図では 各プロットに引出し線が付いており その先端には 試料の通し番号が打たれている。この引出し線は なるべく互いに交差しないように引かれており そのため 通し番号は順不同となっている。この図はPXNANによって描かれたものだが このプログラムやTRNANには 以上のような工夫がこらしてある。

第4図は ACF図である。ここではプロットに3種の記号が使われている。これらの記号は使用者が任意に指定できるもので これによってコード別に何種かのデータを 同一の図面に描く事ができる。とくに論文の原図など 多色刷ができない場合に この表現機能は重要である。

第5図は 四面体図であるが ここで気の付く事は まず Na₂O K₂O の添数字が 従来のコンピュータのような NA2O K2O 式の表現でなく いわゆる下ツキ文字である点だ。また FORTRAN では a のような小文字を使用するのはめんどうであるが ここで用いられている言語が BASIC であるために Na₂O のように書くことも簡単である。このため コンピュータ臭さが抜けて 印刷原図として十分使用に耐えるのである。これらの技術的な点については 次回以降で説明しよう。

成分の加算などの取扱い

第5図で気付くもうひとつは T. FeO や Na₂O + K₂O という成分名指定が許される事である。ノルム計算用データでは ab+an というようなノルム鉱物の和も指定できる。さらには岩石用標準化学成分とノルム用の化学成分 (41頁下から10行目を参照) では 酸化物の酸素を除いた形たとえば K₂O に対して K の指定ができる。このとき分析値は K/K₂O の比率で換算され この値をもとに処理が行なわれる。

化学成分名のリストに たとえば Fe₂O₃ FeO Na₂O K₂O などがあれば これをもとに T. Fe₂O₃ (Total Fe₂O₃) T. FeO T. Fe また Na₂O + K₂O さらに Na Na+K などの指定が任意に行なえるのがこの方式のミソである。

これにより このシステムの応用範囲も一段と広まった事になる。

また どの頂点にどの成分を指定するか ということもまったく任意なので これまで用いられていなかった図でも簡単に作成して試みる事ができる。第5図はその例で 従来の MgO-T. FeO-Na₂O+K₂O図では 同じトレンドに乗っていて区別できない I タイプ花崗岩と S タイプ花崗岩も もうひとつの成分に CaO をとって四面体図としてみると明瞭に区別できる場合があることを示している。

つぎに成分の加算の仕組みを述べよう。

コードによって選択されたデータの値を変数 Px に入れるとしよう。このとき Px についてつぎの関係式を作る。

$$Px = D(I, Jx1) * Rx1 + D(I, Jx2) * Rx2$$

ここに D(I, Jx1) と D(I, Jx2) は 指定された2つの化学成分またはノルム鉱物の値で その要素 I は 選択された試料の通し番号 Jx1 と Jx2 は 化学成分(とノルム鉱物)名が入っているリストの列番号である。Rx1 と Rx2 は分析値を換算するための係数である。

これらの変数に適当な値を与えると 上に述べた機能が發揮できる。初期設定はつぎのようにしておく。

$$Jx1 = Jx2 = Rx1 = Rx2 = 1$$

では具体例として Na₂O+K₂O が指定されたとしよう。そこで BASIC の副文字列に対する機能を使い 入力された字数を つぎのように算出し これを K2 に入れる。

$$K2 = LEN(Z0\$) \quad (\text{ここで } Z0\$ = \text{"Na}_2\text{O} + \text{K}_2\text{O} \text{"})$$

つぎに文字の中から+の記号を探す。ただし両端の字は対象外とするので つぎのようになる。

```
FOR K3=2 TO K2-1
IF Z0$[K3, K3]="+" THEN (脱出)
NEXT K3
```

このステップは ループを逆回しにして FOR K2-1 TO 2 STEP-1 とすべきであった。なぜならば H₂O++H₂O- や Fe₂++Mn などの場合に H₂O +H₂O- + Mn など 存在しない成分が生じるため エラーが発生する。執筆中に気付いたので 今後改良したい。

もし指定が1成分のため+記号が見付からなければ

$$Rx2 = 0$$

とする。+記号があれば その位置が K3 で求まるのでこれを境に2成分に分けて 別々に収容する。

$$Z01\$ = Z0\$ [1, K3-1] \\ Z02\$ = Z0\$ [K3+1, K2]$$

Z01\$ と Z02\$ の内容を成分名リストの中から探し出し その列番号をそれぞれ Jx1 と Jx2 に与える。(Rx2=0 の場合は Z02\$ の検索は省略)。以上は 成分が加算されたときの取扱いである。

ではつぎに K が指定された場合について述べよう。K は当然 成分名リストの中には含まれていない。リスト中に見当たらないときは金属元素 (Si Ti Al...) が列挙されている別のリストの中を探す。その中には K が記されている。K の欄には K/K₂O の換算比率も記入されているので これを Rx1 に入れる。K の場合は

$$Rx1 = 0.830146 \quad (\text{K単独なので } Rx2 = 0)$$

である。ここであらためて Z01\$ に K₂O の文字を与えて 成分名リストの中を探し K₂O に対する列番号を求めて Jx1 に入れる。

T. Fe₂O₃, T. FeO T. Fe が指定された場合は この名称が 上の金属元素のリスト中に記されており 換算比率は それぞれつぎのようになる。

$$\begin{aligned} \text{T. Fe}_2\text{O}_3 \text{ では } Rx1 &= 1, & Rx2 &= 1.11134 \\ \text{T. FeO} \text{ では } Rx1 &= 0.899811, & Rx2 &= 1 \\ \text{T. Fe} \text{ では } Rx1 &= 0.699433, & Rx2 &= 0.77731 \end{aligned}$$

そして Jx1 には Fe₂O₃ Jx2 には FeO のそれぞれ列番号が入れられる。これで全鉄の取扱いができる。

以上の行程は 実際には適当な引き数を用いてサブルーチンで行なわれる。たとえば2成分図の場合には つぎの2種の値の組が 最終的に求められる。

$$Px = D(I, Jx1) * Rx1 + D(I, Jx2) * Rx2 \\ Py = D(I, Jy1) * Ry1 + D(I, Jy2) * Ry2.$$

文 献

ARAMAKI, S., HIRAYAMA, K. and NOZAWA, T. (1972) : Chemical composition of Japanese granites, Part 2. Variation trends and average composition of 1200 analyses. Jour. Geol. Soc. Japan, vol. 78, P. 39—49.

HINE, R., WILLIAMS, I. S., CHAPPELL, B. W. and WHITE, A. J. R. (1978) : Contrasts between I- and S-type granitoids of the Kosciusko Batholith. Jour. Geol. Soc. Australia, vol. 25, p. 219—234.

吉井守正 (1978) : 相関係数の計算と統計図のプログラム。電卓シリーズ(4), 地質ニュース No. 282, p. 22—32.

吉井守正 (1980) : 文字列を使ったコードによるデータの選択。会話型データ処理 その1。地質ニュース No. 315, p. 13—17.

吉井守正 (1981) : 岩石用化学分析データの入力プログラム。会話型データ処理 その2。地質ニュース No. 317, p. 51—58.