

NORMAN: PROGRAM PRO PETROCHEMICKÉ A NORMATIVNÍ PŘEPOČTY ANALÝZ HLAVNÍCH PRVKŮ NA IBM PC

NORMAN: IBM-PC PROGRAMME FOR PETROCHEMICAL AND NORMATIVE RE-CALCULATIONS OF WHOLE ROCK MAJOR-ELEMENT DATA

Vojtěch Janoušek

Norms, Recalculation, Petrology, Whole-rock geochemistry, Software, BASIC, IBM PC

Pro kalkulaci v petrologii často používaných petrochemických a normativních přepočtů analýz hlavních prvků se běžně používá speciálního softwaru. Velkou nevýhodou bývá, že pro uživatele bez dobré znalosti programování je obvykle obtížné přesně vysledovat, jaký výpočetní algoritmus byl užít, a ještě těžší či zcela nemožné tyto algoritmy jakýmkoli způsobem upravovat či doplňovat. Navíc příslušné zdrojové texty programů jsou k dispozici jen zřídka.

Vývoj nového rekalkulačního softwaru tedy vedla snaha vytvořit programový balík, ve kterém by byly použité algoritmy snadno dostupné, pochopitelné a případně i modifikovatelné průměrným uživatelem. Vzniklý produkt, nazvaný NORMAN, představuje soubor několika základních modulů pro import, editaci a ukládání analýz hlavních prvků, výběr výpočetního postupu, zobrazení, prohledávání, tisk a ukládání vypočtených parametrů. Podporované vstupní a výstupní formáty zahrnují dBASE III (*.DBF), několik variant textových souborů (ASCII, včetně *.CSV) a formát používaný u nás rozšířeným sharewareovým programem NewPet (autor Daryl Clarke z Memorial University, Newfoundland, *.ROC). NORMAN sám sice negeneruje grafický výstup, ale exportuje výsledky do formátu používaného NewPetem pro obecné binární a ternární diagramy („Generic plots“). Druhou možností je import NORMANem spočtených parametrů do profesionálního grafického programu (např. Grapher, CorelGraph! aj.).

K jádru systému obstarávajícího editaci a výstup dat přistupuje celá řada výpočetních modulů, jež jsou dvojího typu: (1) standardní moduly, neboli nezávislé BASICové programy, přejímající z jádra systému pouze vstupní data (analýzy hlavních prvků) a vracející hotové parametry, a (2) uživatelské funkce, tedy textové předpisy, vyjadřující běžné matematické operace (+ - / * ^) s konstantami (např. molekulové a atomové hmotnosti) a proměnnými (vypočtenými jinými moduly). Například vzorec pro výpočet součtu X koncentrace SiO₂ (v hmotnostních % z analýzy hlavních prvků), normativního albitu a anortitu (z CIPW normy) by v uživatelské funkci vypadal následovně:

$$X = \%SiO_2 + Ab [CPW] + An [CPW].$$

Ikdyž uživatelské funkce lze připravit v jakémkoli textovém editoru, instalační modul (INSTALL.EXE) zahrnuje i příslušný editor s možností vstupu konstant a proměnných z přehledných menu.

V současné době jsou k dispozici moduly pro výpočet CIPW normy (včetně modifikace s amfibolem a biotitem, Hutchison 1975), Niggliho molekulární normy, vylepšené mezonormy pro granitoidy (Mielke - Winkler 1979), Niggliho hodnot (Hejtman 1956), parametrů Köhlera - Raaze (1951), multikationických parametrů francouzských autorů (Debon - Le Fort 1983, 1988; De la Roche et al. 1980), chemické aproximace k modálnímu klasifikačnímu systému QAPF pro vyvřelé horniny (Q'-ANOR, Streckeis - Le Maitre 1979) a další. Avšak zvolená filozofie by teoreticky měla vést k tomu, že uživatelé sami budou moci systém dále rozšiřovat podle svých potřeb.

NORMAN byl napsán v Microsoft QuickBasicu 4.5 a vyžaduje IBM PC kompatibilní počítač s grafickou kartou EGA, VGA nebo Hercules a c. 1 MB volným na pevném disku. Anglická verze programu spolu se zdrojovými texty standardních modulů a anglickým manuálem je k dispozici jako freeware po zaslání naformátované 3 1/2 palcové diskety (HD, tedy 1.44MB) na adresu uvedenou níže.

Literatura

- Debon, F. - Le Fort, P. (1983): A chemical-mineralogical classification of common plutonic rocks and associations. – Trans. Roy. Soc. Edinb. Earth Sci., 73, 135–149.
- (1988): A cationic classification of common plutonic rocks and their magmatic associations: principles, method, applications. – Bull. Minéral., 111, 493–510.
- De La Roche, H. - Leterrier, J. - Grand Claude, P. - Marchal, M. (1980): A classification of volcanic and plutonic rocks using R1–R2 diagrams and major element analyses – its relationships with current nomenclature. – Chem. Geol., 29, 183–210.
- Hejtman, B. (1956): Všeobecná petrografie vyvřelých hornin. – Academia. Praha.
- Hutchison, C. S. (1975): The norm, its variations, their calculation and relationships. – Schweiz. mineral. petrogr. Mitt., 55, 243–256.
- Köhler, A. - Raaz, F. (1951): Über eine neue Berechnung und graphische Darstellung von Gesteinsanalysen. – Neu. Jb. Mineral., Mh., 247–263.