

GENMIXプログラム（岩石モデル解析）の再開発

亀谷 敦・早坂 康隆・今岡 照喜

Rewriting GENMIX program

(GENMIX=Generalized Petrological Mixing Model Program)

Atsushi KAMEYA, Yasutaka HAYASAKA and Teruyoshi IMAOKA

山口県立山口博物館研究報告
第27号（2001年3月）別刷

Reprinted from
BULLETIN OF THE YAMAGUCHI MUSEUM
No.27 (March 2001)

GENMIXプログラム(岩石モデル解析)の再開発

亀谷 敦¹⁾・早坂 康隆²⁾・今岡 照喜³⁾

Rewriting GENMIX program

(GENMIX=Generalized Petrological Mixing Model Program)

Atsushi KAMEYA, Yasutaka HAYASAKA and Teruyoshi IMAOKA

Abstract

GENMIX is a FORTRAN program composed by Le Maitre (1979, 1981). It has been widely used to assess the generalized petrological mixing model such as,

biotite + sillimanite + quartz = garnet + K-feldspar + water,
as well as simple mixing model such as,

basalt = andesite + olivine + pyroxene + plagioclase.

We rewrote this program to run on Power Macintosh and open as a free-wear through the internet (<http://isweb18.infoseek.co.jp/computer/genmix/>).

Key words: GENMIX, mixing model, Macintosh

1 はじめに

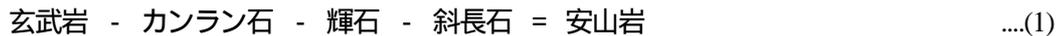
GENMIX は, Le Maitre (1979) によって Generalized Mixing Model の略称として, 岩石化学や地球化学における岩石学的モデルに基づくマスバランスの解析法に対して名付けられたものである。FORTRAN で書かれたそのプログラムのソースは Le Maitre (1981) によって公開され, 広く研究者に活用されてきた。現在, コンピューターはパソコンと名前がつくほど個人的に使用できるまでに普及した。それに伴い OS も大きく進化し, かつてのプログラムも手直しを迫られている。今回, 筆者らは, Le Maitre (1981) の記述した FORTRAN 言語による GENMIX プログラムを, BASIC 言語を用いて Macintosh 上で動くプログラムにリニューアルした。この小論では, その報告と GENMIX の原理から地球科学一般への応用例までを紹介する。このプログラムは, 従来の GENMIX 以上に地球科学の分野で広く活用されるようフリーウェアとして GENMIX 用のホームページを設置し, 読者が自由にダウンロードできるようにした。

1) 山口県立山口博物館(地学) 2) 広島大学大学院理学研究科 3) 山口大学理学部

2 GENMIXの原理

2.1 GENMIX と岩石学的モデル

火成岩岩石学においては，長年，特定の地域の多様な火成岩の成因が何に起因しているかについて検討されてきた．多様性が元々のマグマの多様性によって起こる，つまり本源マグマにはいろいろあるとする考えから，マグマの種類は1つで地殻に出現するまでの分化によって多様な岩石ができるとする考えなどがあり得る．例えば以下のようなモデルがある．



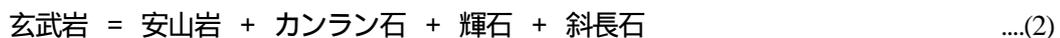
これは，玄武岩マグマからカンラン石，輝石，斜長石が取り除かれることによって安山岩マグマができたとする結晶分化作用に基づくモデルである．

今回，報告する GENMIX は，このような岩石学で用いられてきたモデルを実際の分析値から検証するプログラムである．つまり，モデルの式の両辺にあるすべての成分（酸化物）について過不足を生じないような各鉱物や岩石の量比が，具体的な岩石や鉱物の組み合わせで本当に存在するかどうかを多変量の最小二乗法を使って確かめるプログラムである．

以下に Le Maitre (1979) の説明をもとに，GENMIX 以前の岩石学的モデルを解く試みから GENMIX が登場するまでの歴史を振り返る．

2.2 岩石学的モデルを解く Bryan (1969) の試み

(1) 式は，次のように書き直すことができる．



(2) のような形の式において関係する成分（SiO₂などの酸化物の数）が n 個で左辺においてそれぞれ X₁ ~ X_n の値を持ち，右辺の相（鉱物・岩石など）が p 個のとき，以下のように書くことができる．

$$\begin{aligned} \text{SiO}_2 & : X_1 = a_1x_{11} + a_2x_{21} + \dots + a_ix_{i1} + \dots + a_px_{p1} \\ \text{TiO}_2 & : X_2 = a_1x_{12} + a_2x_{22} + \dots + a_ix_{i2} + \dots + a_px_{p2} \\ & \quad \cdot \\ \text{酸化物 } j & : X_j = a_1x_{1j} + a_2x_{2j} + \dots + a_ix_{ij} + \dots + a_px_{pj} \\ & \quad \cdot \\ \text{酸化物 } n & : X_n = a_1x_{1n} + a_2x_{2n} + \dots + a_ix_{in} + \dots + a_px_{pn} \end{aligned} \quad \dots(3)$$

ここで，x_{ij} は i 番目の相に含まれる j 番目の成分の量，a₁ ~ a_p は各相の比率である．

(3) 式は n 次元の組成ベクトル x₁ ~ x_p を用いると

$$X = a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_ix_i + \dots + a_px_p \quad \dots(4)$$

次に，最小二乗法より，ある成分についての値 X と，(3) 式の右辺において計算されたその成分の値との差の二乗をすべての成分について求め，それらの総和が最小になるようにそれぞれの相の比率を決めれば良い．すなわち，

$$S = \sum_{j=1}^n (X_j - a_1 X_{1j} - a_2 X_{2j} - \dots - a_i X_{ij} - \dots - a_p X_{pj})^2 \quad \dots(5)$$

のときSが最小となるような $a_1 \sim a_p$ を求める。これは極値の問題であるから1階微分を0として解けば良い。

a_1 について:

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial a_1} &= 2(-x_{11})(X_1 - a_1 X_{11} - a_2 X_{21} - \dots - a_i X_{i1} - \dots - a_p X_{p1}) + \dots \\ &\quad + 2(-x_{1n})(X_n - a_1 X_{1n} - a_2 X_{2n} - \dots - a_i X_{in} - \dots - a_p X_{pn}) = 0 \end{aligned}$$

同様に a_i について

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial a_i} &= 2(-x_{i1})(X_1 - a_1 X_{11} - a_2 X_{21} - \dots - a_i X_{i1} - \dots - a_p X_{p1}) + \dots \\ &\quad + 2(-x_{in})(X_n - a_1 X_{1n} - a_2 X_{2n} - \dots - a_i X_{in} - \dots - a_p X_{pn}) = 0 \end{aligned}$$

結局 p 個の1次式からなる連立多元方程式となり、解を求めることができる。これは、 $a_1 \sim a_p$ の比率を求めることができ、モデルの各鉱物・岩石の量比の決定ができることを意味する。

しかし、このままでは、比率の総和 ($a_1 + a_2 + \dots + a_p$) が1にならない。すなわち仮定された相の合計が100%にならないのである。これは、閉鎖系であることを前提とするモデルの検証にとっては不完全といえる。

2.3 岩石学的モデルを解く Stormer and Nicholls(1978)の試み

上記をふまえ、相の合計が100%になるように、つまり比率の総和 ($a_1 + a_2 + \dots + a_p$) を1に拘束して、計算が試みられた。すなわち、

$\sum_{j=1}^p = 1$ と置くのである。すると(4)式は、以下のように書きかえられる。

$$X = a_1 x_1 + a_r x_r + (1 - a_1 \dots - a_r) x_p \quad \dots(6)$$

ここで $r = p - 1$

上記2.2節と同様に最小二乗法により、以下のように書きかえられる

$$\begin{aligned} S &= \sum_{j=1}^n (X_j - a_1 X_{1j} - \dots - a_r X_{rj} - (1 - a_1 \dots - a_r) X_{pj})^2 \\ &= \sum_{j=1}^n (Z_j - a_1 X_{1j} - \dots - a_r X_{rj})^2 \quad \dots(7) \end{aligned}$$

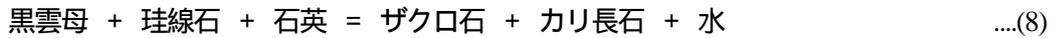
ここで $Z_j = X_j - X_{pj}$, $Z_{ij} = X_{ij} - X_{pj}$

したがって、(7)式と(5)式は同等で1次式の連立多元方程式として、解を求めることができる。すなわち、 $a_1 \sim a_p$ の比率を求めることができ、モデルの各鉱物・岩石の量比の決定ができる。さらにここでは相の合計が100%になり、閉鎖系という前提が成り立っている。

2.4 岩石学的モデルを解く Le Maitre(1979) の試み

岩石学的モデルは、(2) 式のような単純なモデルばかりではない。

下記のように、両辺ともに複数の相を仮定するような複雑なモデルが一般的である。



これは、変成反応の一例である。このモデルの検証は、今まで述べてきた方法では解決できない。

(8) 式は、以下のように表すことができる。

$$a_1x_1 + \dots + a_px_p = b_1w_1 + \dots + b_qw_q \quad \dots(9)$$

ここで、 $x_1 \dots x_p$ 、 $w_1 \dots w_q$ は組成で、

$a_1 \dots a_p$ 、 $b_1 \dots b_q$ はその比である。

上記2.2節と同様に最小二乗法により、

$$S = \sum_{j=1}^n (a_1x_{1j} + \dots + a_px_{pj} - b_1w_{1j} - \dots - b_qw_{qj})^2 \quad \dots(10)$$

ここでSの値が最小になるように $a_1 \dots b_1 \dots$ を求めると $a_1=0$ 、 $a_2=0$ 、... $b_1=0$ 、 $b_2=0$ 、すなわち $S=0$ と解かれてしまう。

これでは解が得られないので、左辺、右辺の比率の合計をそれぞれ1と拘束してやる。

すなわち、

$$\sum_{j=1}^p a_j = 1, \quad \sum_{j=1}^q b_j = 1 \quad \text{と置く。すると(10) 式は、以下のように書きかえられる。}$$

$$S = \sum_{j=1}^n (Z_j - a_1z_{1j} - a_rz_{rj} - b_1v_{1j} - \dots - b_s v_{sj})^2 \quad \dots(11)$$

ここで $r=p-1$ 、 $s=q-1$ 、 $Z_j = x_{pj} - w_{qj}$ 、

$z_{ij} = x_{pj} - x_{ij}$ 、 $v_{ij} = w_{ij} - w_{qj}$

したがって (11) 式と (5) 式は同等で1次の連立多元方程式として、解を求めることができる。すなわち、 $a_1 \sim a_p$ の並びに $b_1 \sim b_q$ の比率を求めることができ、モデルの各鉱物・岩石の量比の決定ができる。こうして、複雑でもごく一般的に使われる岩石学的モデルを検証することができるようになった。(2) 式のような単純なモデルだけでなく、(8) 式のような一般的なモデルに適用可能であることが重要である。このことが、GENMIX は、generalized petrological mixing model programming の略称であるが、この general を強調している所以である。Le Maitre (1979, 1981) は、上記の理論に基づいたアルゴリズムをデータの入力と計算結果の出力も併せ、FORTRAN 言語で実現し、コンピュータを利用し易いように編集したのである。

3 今回作成した GENMIXプログラムについて

3.1 プログラムの仕様

(1) プログラムの作成並びに動作確認を行った機種・OS等

機種 PowerMac G4/400(PCImodel) 10GbHD/192Mb メモリ
OS MacOS9.04
ソフト REALbasic2.1.2J

(2) 対応機種・OS

対応機種 Power Macintosh
対応OS MacOS 9 以上
対応モニタ 17 インチ以上

(3) インストールの方法

GENMIX フォルダごとハードディスクにコピー

(4) ソフトウェアの保存先および入手先

<http://isweb18.infoseek.co.jp/computer/genmix/>

ソフトはフリーウェアであるが、すべてを自由にしているわけではないので、ホームページ上の注意書きに同意の上、利用をお願いしたい。

3.2 計算結果の評価

Le Maitre (1979) の作成した FORTRUN プログラムの内、本体である最小二乗近似計算の部分を完全に移植できたのかどうか検討が必要であろう。幸運なことに、報告書には、テストデータが掲載されており、両者の計算結果を比較することができる。今回チェックしたモデルは以下のとおりである。

$$\text{黒雲母} + \text{珪線石} + \text{石英} = \text{ガーネット} + \text{カリ長石} + \text{水}$$

計算結果を表1と表2に示す。どちらの値も同じであることがわかる。

Le Maitre (1979) にはもう一つの例が掲げてある。以下のモデルである。

$$\text{黒雲母} + \text{珪線石} + \text{石英} + \text{斜長石} + \text{磁鉄鉱} = \text{ガーネット} + \text{カリ長石} + \text{水} + \text{イルメナイト}$$

この例については計算結果の詳細が示されていないが、残差の合計が 0.57 と明記されている。同じデータを計算した結果、本プログラムも 0.5708 となった。

主として“まるめ処理”からくる誤差により、両者の計算結果に多少の影響があるのではないかと危惧したが、全く同じ値となった。

なお、Le Maitre (1979)では、各サンプルの成分値は各成分の合計が 100% になるように再計算した値を計算に使用している。表1もそれに従った計算を行った(詳しくは、補正值の説明を参考のこと)。Le Maitre (1981) は、同じデータを使って再計算を行わない計算の結果も提示している。これについても同じ結果を得ている(計算結果は図4を参照のこと)。

表1 今回作成した GENMIX によるテストデータの計算結果

	黒雲母	珪線石	石英	ザクロ石	カリ長石	反応物	生成物	組成差	
SiO2	37.20	36.70	100.00	37.70	64.08	0.00	53.828	53.63	
TiO2	4.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	2.376	0.00
Al2O3	16.90	62.73	0.00	21.70	18.25	0.30	19.236	19.43	
FeO*	14.30	0.57	0.00	29.50	0.00	1.00	2.853	8.337	11.19
MnO	0.06	0.00	0.00	0.96	0.00	0.00	0.030	0.035	0.3
MgO	14.30	0.00	0.00	7.51	0.00	9.00	5.398	8.247	2.84
CaO	0.00	0.00	0.00	2.07	0.11	3.00	0.853	0.000	0.8
Na2O	0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	1.12	0.612	0.075	0.66
K2O	10.10	0.00	0.00	0.00	0.00	14.98	0.369	5.825	9.19
H2O	2.60	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.300	1.499	1.79
構成比	57.50	15.90	26.60	37.72	60.48	1.80			
残差	差:55.72475 残差の平方根:7.4649								

表2 Le Maitre (1969) に掲載されたテストデータの計算結果 (表記は原書に従った)

	反応物	生成物		
反応物の比率		SiO2	53.89	53.63
黒雲母	0.5750	TiO2	2.38	0.00
珪線石	0.1590	Al2O3	19.72	19.43
石英	0.2660	FeO*	8.34	11.19
生成物の比率		MnO	0.03	0.36
ザクロ石	0.3772	MgO	8.25	2.85
カリ長石	0.6048	CaO	0.00	0.85
水	0.0180	Na2O	0.07	0.69
残差:	55.72	K2O	5.82	9.19
残差の平方根:	7.46	H2O	1.50	1.80



図1 スタート画面



図2 設定画面

3.3 使用方法

(1) スタート

図1で、新規入力の場合は新規入力のラジオボタンにチェックを、既存のファイルを読み込む場合はファイル読み込みのラジオボタンにチェックをいれて、OKボタンを押す。

(2) 設定

図1の[スタート画面]で、新規を選択した場合に現れる画面(図2)で、入力するデータの行数(成分数)と列数(サンプル数)を入力する。ただし、上記の[スタート画面]で、既存のファイルを読み込むを選択した場合はこの画面は現れない。

(3) データの入力

図1の[スタート画面]で、新規の場合はデータ部分が空欄の一覧表が、ファイルを開くを選択した場合はデータが書き込まれた一覧表が、それぞれ表示される(図3)。どちらの場合も、書き込みができるので、データを入力または訂正を行う。

SiO₂等の成分の名称は、表の上にある▶印を押すと現れる一覧表からマウス選択できる。

(4) 計算の実行

横のスライダーを動かすと黄色と青色に色が塗り分けられ領域が2つに分かれるので、これを使って左側の組と右側の組に分ける。同じく縦のスライダーを動かすと上側は変化はなく下側が白色に変わる。計算されるのは色のついた領域で、下側の白い領域は無視され計算されない。2つのスライダーを使って、計算領域の設定を終えたら、計算実行ボタンを押す。計算を終えると図4の画面となる。

どのような場面で縦のスライダーを使うのか説明する。それは、仮定した反応前の物質のある成分(例えばP₂O₅)が仮定した反応後の物質にはその成分がない場合である(当然その逆もある)。こういう場合、あらかじめP₂O₅成分を下側に入力しておき、縦のスライダーを使って、P₂O₅の部分を白い領域にして、P₂O₅を無視して計算するのである。

計算実行ボタンを押すと、構成比が合計の下側に表示される。また、その構成比から計算される反応物と生成物の化学成分、また反応物と生成物の組成差が表示される。一覧表の下にはRSSとSQR(RSS)が表示されるが、RSSとはresidual sum of squaresの略称で、各成分の組成差を二乗した値の合計値をさす。SQR(RSS)とはRSSの平方根である。この



図3 入力画面



図4 計算画面

SQR (RSS)は、概算された反応物と生成物の値の差を示し、この計算が現実的かどうかの指標数として用いる。この値が小さいほどモデルは適合度（妥当性）が高いことになるが、妥当な値がいくつ以下であるかは個々のモデルによって異なり、それぞれに検討が必要である。

(5) 印刷と終了

[計算画面] で印刷ボタンを押すと, [印刷画面] に切り替わる (図 5). [印刷画面] は, 計算実行の結果に表示された一覧表を印刷するための画面である. 画面中央の四角枠がエディタ領域で, 印刷ボタンを押すとこの領域内のデータが印刷される. エディタ領域の中を記述することも可能で, 分析者の名前や分析日等必要であれば記述できる. また, マウスでドラッグ選択した範囲は, 「コマンド + C」操作でクリップボードにコピーして他のワープロソフトにデータをペースト (コマンド + V) することができる. 印刷データの確認・追加, 用紙設定を終えた後, 印刷ボタンを押す.

以上で一通りの作業を行ったことになる. 終わる場合は終了ボタンを, まだ続ける場合は戻るボタンを押す.

(6) その他

(6-1) 表計算ソフトの利用

手持ちの表計算ソフトでもデータを入力することができる. サンプルのデータを表計算で読み込みデータの並び方を確認すること. 特に, 1 行目にデータの行数 (成分数 + 1) と列数 (サンプル数 + 1) が入力されている点に注意が必要である. この形式に従って新しいデータの入力を行い, CSV 形式 (カンマ区切り形式) で保存すればよい. また, テキスト形式なので SimpleText などのエディタでも入力が可能である.

(6-2) 既存のデータファイル利用

データ入力に, 蓄積してきた保存ファイルを利用することができる. [入力画面] で特別・ファイル参照のメニューを選択すると, ファイル参照用の新しいウィンドウが現れる (図 6). そのウィンドウにデスクトップなどにおいた既存の GENMIX のファイル (必要な数のファイルを一度に指定すること) をドラッグ & ドロップすると, ファイルリストにファイル名が一覧表示される. ファイル名をマウスでクリックするとデータを表示する. 必要な

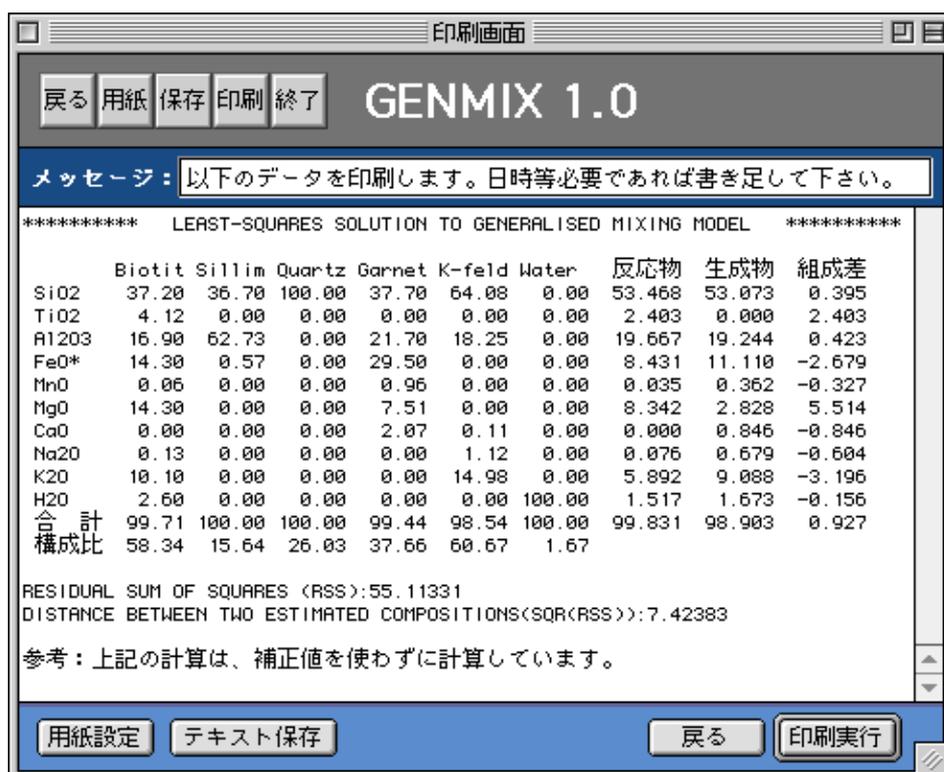


図5 : 印刷画面

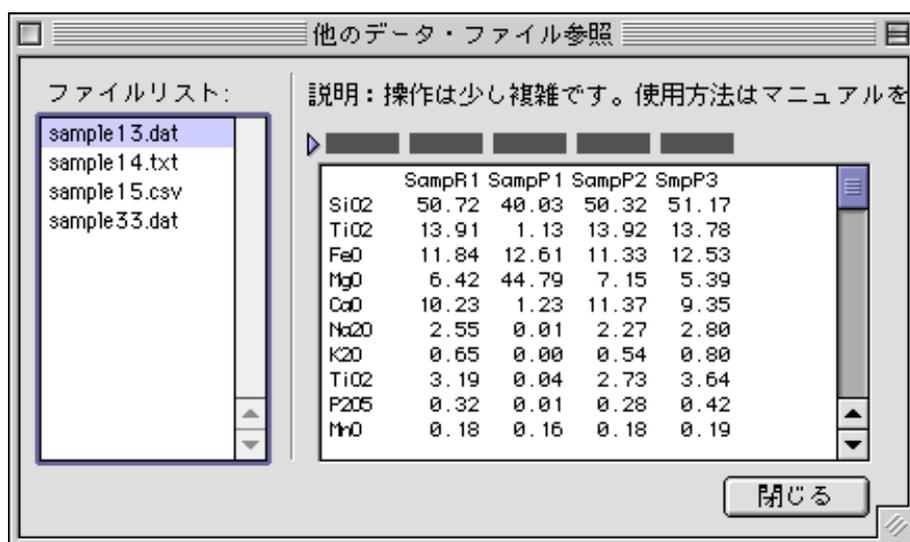


図6 ファイル参照画面

サンプルを見つけたら、灰色の枠をマウスでつまみ（ドラッグ）,[入力画面]のウィンドウの青枠に落とすと（ドロップ）,必要なサンプルのデータが一度にコピーできる。
 (6-3) 補正值について

一般に入力されるデータの値は具体的な測定によって求められた値なので、合計は 100% になっていない。よって、計算する仮定で合計が 100% になるように各成分の値を再計算した値（ここでは補正值と呼ぶ）を利用して処理している。補正值を知りたい場合は、メニューの特別・補正值表示を選択すると見ることができる。

測定値を未補正のまま用いたい場合、補正值利用のチェックをはずせば入力されたデータの値で計算を行うことができる。

の岩石学への応用 4 GENMIX

GENMIX をどのような場面に使用できるかを具体的な例で説明する。

4.1 結晶分化作用の検証

Wood(1978) は、アイスランドの単成火山で行った岩石学的調査の結果、以下の結晶分化作用のモデルを示唆した。

未分化な玄武岩 = 分化した玄武岩 + カンラン石 + 斜長石 + 輝石 + チタン磁鉄鉱
 (表では、略記号で $L11 = C64 + Ol + Pl + Aug + Mag$ とする)

GENMIX にデータを入力、計算を行った(表3)。その結果構成比は、

$$100.00 = 51.80 + 3.93 + 25.49 + 15.56 + 3.22$$

となり、それから計算される反応物と生成物の各成分の組成差はほとんどない。RSS も 0.0556 と大変小さい。つまり、モデルの式の両辺にあるすべての成分（酸化物）について過不足が生じていないことになり、このモデルに示された現象が実際に起こった可能性が高いことを意味している。逆に、もし RSS が大きければ、モデルに何らかの不備があることを示唆し、更な

表3 結晶分化作用の検証

***** LEAST-SQUARES SOLUTION TO GENERALISED MIXING MODEL*****

	L11	C64	OI	反応物	生成物	組成	g
SiO2	48.61	49.01	37.00	53.51	52.54	-0.80	48.66
TiO2	2.78	4.03	0.00	0.00	1.31	4.19	2.780 2.90
Al2O3	14.59	13.52	0.00	28.38	2.31	16.21	-0.14 14.63
FeO*	13.06	15.04	29.44	0.77	9.07	78.04	-0.10 13.06
MnO	0.20	0.25	0.34	0.00	0.00	3	0.61 0.037 0.200 0.16
MgO	6.30	4.57	38.85	0.00	15.44	6	0.90 0.026 6.300 6.32
CaO	10.88	9.17	0.37	12.12	19.33	50.11	0.01 10.880 10.86
Na2O	2.83	3.12	0.00	4.06	0.00	1	0.00 0.179 2.830 2.65
K2O	0.46	0.75	0.00	0.16	0.00	9	0.00 0.031 0.460 0.42
P2O5	0.31	0.56	0.00	0.00	0.00	0	0.00 0.020 0.310 0.29
合計	100.02	100.02	106.00	99.00	100.00	100.01	100.020 0.92 89.92
構成比	100.00	51.80	3.93	25.49	15.56	3.22	

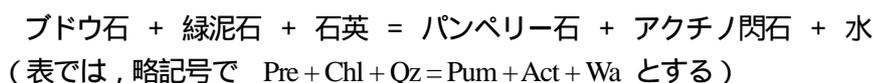
RESIDUAL SUM OF SQUARES (RSS):0.05559
 DISTANCE BETWEEN TWO ESTIMATED COMPOSITIONS(SQR(RSS)):0.23578

記号 L11:未分化な玄武岩, C64:分化した玄武岩
 OI:カンラン石, PI:斜長石, Mag:チタン磁鉄鉱
 計算式 L11 = C64 + OI + PI + Aug + Mag
 補正 補正値を使わずに計算

る検討の契機ともなり得る。

4.2 変成反応の検証

一般に変成岩岩石学においては、変成反応の式を化学組成で表現する場合には各鉱物の理想式を用いる。しかしながら、複雑な固溶体鉱物からなる野外の岩石において、仮定された反応が実際に起こったかどうかを調べるためには、鉱物の具体的な分析値に基づく GENMIX を用いた検証が有効であろう。



の変成反応を仮定し、実際に野外で採集した岩石中の変成鉱物の EPMA 分析値を用いて GENMIX で検証するとしよう。化学反応式のように鉱物の理想式を使わずに、GENMIX にその鉱物の EPMA 分析から得られた酸化物の重量%のデータを入力し、計算を行った(表4)。その結果、構成比は

$$83.91 + 18.86 - 2.76 = 96.37 + 6.38 - 2.75$$

となった。ここで石英と水の構成比がマイナスとなっているが、このようなことは自然界ではありえないのでモデルは棄却されることになる。しかし、良く見るとマイナスとなった石英と水の構成比が共にほぼ同じ絶対値を示していることに気づく。この場合、モデルの式において石英と水を逆の辺に入れ替えて計算すると、両者の構成比は共にプラスに転じ、RSS は 0.94 となる。このような場合、野外において実際におこっている変成反応は



であったか、または、分析された鉱物が実際に仮定された反応とは無関係に存在していた可能

表4 変成反応の検証

***** LEAST-SQUARES SOLUTION TO GENERALISED MIXING MODEL*****

	Pre	Chl	Qz	反応物	生成物	組成差			
SiO2	42.86	30.31	100.00	36.80	54.84	0.00	38.96		
TiO2	0.01	0.50	0.00	0.00	0.01	0.02	1	0.00	0.092 0.103 0.01
Al2O3	24.41	17.61	0.00	24.74	0.41	0.00	-0.236	0.2	23.86
FeO*	0.75	16.09	0.00	3.27	14.11	10.00	-0.388	3.663	4.05
MnO	0.06	0.40	0.00	0.28	0.20	3	0.00	0.157	0.126 0.28
MgO	0.03	21.65	0.00	3.05	14.98	5	0.00	0.213	4.108 3.89
CaO	26.89	0.17	0.00	22.70	11.68	20.00	-0.022	5.95	22.62
Na2O	0.32	0.00	0.00	0.00	1.43	1	0.00	0.177	0.269 0.09
K2O	0.01	0.00	0.00	0.00	0.06	4	0.00	0.005	0.008 0.00
H2O	4.45	12.00	0.00	9.00	2.00	100.00	-0.052	5.997	6.04
合計	99.79	98.73	100.00	99.85	99.73	100.00	99.68	254	99.838
構成比	83.91	18.86	-2.76	96.37	6.38	-2.75			

RESIDUAL SUM OF SQUARES (RSS):0.27068
 DISTANCE BETWEEN TWO ESTIMATED COMPOSITIONS(SQR(RSS)):0.52027

記号 Pre:ブドウ石, Chl:緑泥石, Qz:石英, Pum:パンペリー石, Act:アクチノ閃石,
 Wa:水
 計算式 Pre + Chl + Qz = Pum + Act + Wa
 補正 補正值を使わずに計算

性が示唆される。この場合はおそらく後者が関係していると予想され、仮定された反応と鏡下に見られる組織との対応をつきつめ、共生関係を探る上での手助けとなる。

4.3 黒雲母の端成分の計算

GENMIX は本来、連立一次方程式において独立変数の数より式の数が多すぎて解が求まらないような問題を、全ての式の誤差（両辺の値の差）の平方和が最小になるように解く統計学的計算方法である。当然ながら、通常の計算によりユニークな解が求まるような連立一次方程式であっても、それを解くことができる。次に示す例は、黒雲母の組成値から端成分の割合を求める計算に応用したものである。計算結果を表5に示す。

この例では、EPMA などによる分析値から黒雲母のストイキオメトリーにより、予め黒雲母の一般の構造式に合うようにカチオン数を計算しておく。これを左辺に取り、右辺にはチタン黒雲母 (Ti-Bt)、金雲母 (Phl)、イーストナイト (Etn)、白雲母 (Ms)、滑石 (Tlc) の5つの端成分のカチオン数を配置する。GENMIX の計算により各端成分の割合が構成比として算出される。この例のように、本来解析的にも解ける計算では当然ながら RSS はゼロとならなければならないが、一般には計算途中での“まるめ誤差”から、RSS がゼロとならない場合が生ずる。しかし、その誤差は無視できる程度であり、単に複雑な連立一次方程式を解く問題にも応用できることがわかる。

4.4 その他の利用法

GENMIX は、閉鎖系が保たれているという条件でのモデル検証のために作られたプログラムであるが、この条件に合致する限りにおいて、一般の重回帰分析のあらゆる局面で利用できる。著者らは、例えば以下のような使用を実践している。

- (1) 部分溶融プロセスに混成作用と結晶分化作用を組み込んだモデリング

表5 黒雲母の端成分の計算結果

***** LEAST-SQUARES SOLUTION TO GENERALISED MIXING MODEL*****

	Bt-1	Ti-Bt	Phl	Etn	反応物	Ms	生成物	組成差		
Si	5.4841	4.00	6.00	4.00	4.00	6.00	84	8.000.000	5.484	5.4
Al(IV)	2.5159	4.00	2.00	4.00	2.00	0.00	0.00	0.000.000	2.516	2.5
Al(VI)	0.9372	0.00	0.00	2.00	4.00	0.00	0.00	0.000.000	0.937	0.9
Vcnt	0.3975	1.00	0.00	0.00	2.00	0.00	98	0.000.000	0.398	0.3
Ti	0.2905	2.00	0.00	0.00	0.00	0.00	90	0.000.000	0.291	0.2
R2	4.3748	3.00	6.00	4.00	0.00	0.00	75	6.000.000	4.375	4.3
K	1.7929	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00	93	0.000.000	1.793	1.7
合計	15.7929	16.00	16.00	16.00	14.00	15.793	0.000.000	15.793		
構成比	100.00	14.52	40.88	21.63	12.62	10.36				

RESIDUAL SUM OF SQUARES (RSS):0
 DISTANCE BETWEEN TWO ESTIMATED COMPOSITIONS(SQR(RSS)):0.00006

記号 Ti-Bt:チタン黒雲母, Phl:金雲母, Etn:イーストナイト, Ms:白雲母, Tlc:滑石
 計算式 Bt-1 = Ti-Bt + Phl + Etn + Ms + Tlc
 補正 補正值を使わずに計算
 その他 Vcnt:6配位席における空席数,
 $R2 = Fe + Mg + Mn, K = k + Na + Ca,$
 $Si + Al(IV) = 8, Al(IV) + Vcnt + Ti + R2 = 6$
 チタン黒雲母の組成と計算例に用いた黒雲母の組成は、池田(1990)による

単純な部分溶融プロセスとしては、

$$\text{原岩} = \text{レスタイト} + \text{メルト}$$

と仮定されるが、実際には

$$\text{原岩} + \text{熱源となったメルト} = \text{レスタイト} + \text{分別された鉱物1} + \text{分別された鉱物2} + \text{分化したメルト}$$

といった複雑な現象が予想される。GENMIXは、正にこのような複雑なモデルを検証するためにこそ開発されたのである。

(2) 全岩分析値と構成鉱物のEPMA分析値から各鉱物のモード組成を算出

この場合、全ての鉱物種について分析する必要はなく、斜長石のように広い組成範囲を持つ固溶体鉱物が含まれている場合には、分析された多数の斜長石の平均値を使用する代わりに、単にその端成分の組成を用いて、

$$\text{全岩} = \text{単斜輝石} + \text{ホルンブレンド} + \text{灰長石} + \text{曽長石}$$

という式で計算する。そうすると斜長石の固溶体組成まで一緒に算出され、この方が正確な平均値が得られる。ただし、この計算では各鉱物のモードは重量%であることに注意しなければならない。

(3) 蛍光X線分析において、相互に複雑に干渉し合う特性X線強度から定量値を算出

蛍光X線によるREEの定量分析において起こるように、固有X線の干渉が、元素aが元素bとcに干渉し、元素bが元素cとaに干渉、さらに元素cが元素aとbに干渉するといった場合には干渉補正係数が分かっても解析的な補正計算が不可能である。このような場合には感度を犠牲にして高分解能の分光スリットを用いることになるが、GENMIXを用

いと複雑に絡まり合う干渉線の測定から以下のような計算式（簡略化した行列式）で定量が可能となる。

$$[X_i] = [a_{ij}] \times [W_j] + [b_i]$$

ここで

i : 1 ~ n , n は全測定ライン数

j : 1 ~ m , m は全測定元素数

X_i : i 番目の測定ラインの X 線強度 (cps)

a_{ij} : i 番目の測定ラインで検出される j 番目の元素の X 線感度 (cps/ppm)

W_j : j 番目の元素の濃度 (ppm)

b_i : i 番目の測定ラインにおけるバックグラウンド強度 (cps)

この時、測定元素の幾つかについて L_i と L_j の複数のラインを測定すると $n > m$ となり GENMIX が適用可能となる。このことにより通常スリットが使用可能となり、高感度・高精度で、全体の X 線強度分布に矛盾のない、調和の取れた REE 濃度が得られる。

以上に示したのは、GENMIX の利用法のほんの一部に過ぎない。この度の Macintosh 版の公開により、多くの方々に GENMIX の利用が広がることを期待するものである。

謝 辞

このプログラムの元となった N88-BASIC 版の作成にあたっては、田中 忍博士に助言を頂いた。本報告書を作成するにあたり、GENMIX の原理または計算方法について松尾 厚氏（県立山口博物館）に助言を頂いた。また、GENMIX Macintosh 版の作成にあたり、原作者の Roger W. Le Maitre 氏（元オーストラリア・メルボルン大学教授）にプログラム再記述のお願いをしたところ、快くご了解をいただいた。ここに記して、以上の方々にお礼を申し上げる。

引用文献

- Bryan, W.B., 1969, Materials balance in igneous rock suites. *Carnegie Inst. Washington Yearb.* 67, 241-243.
- Le Maitre, R.W., 1979, A new generalized petrological mixing model. *Contrib. Mineral. Petrol.*, 71, 133-137.
- Le Maitre, R.W., 1981, GENMIX - A generalized petrological mixing model program. *Comput. Geosci.*, 7, 229-247.
- 池田 剛, 1990, 黒雲母の Ti 端成分組成-柳井地方領家変成岩中の黒雲母の Ti 置換-. *岩鉱*, 85, 357-363.
- Stormer, J.C. and Nicholls, J., 1978, XLFRAC: a program for the interactive testing of magmatic differentiation models. *Comput. Geosci.*, 4, 143-159.
- Wood, D.A., 1978, Major and Trace element variation in the Tertiary lavas of eastern Iceland and their significance with respect to the Iceland geochemical anomaly. *Jour. Petrology*, 19, 393-436.