

# A KÖZETÁTSZÁMÍTÁS ALKALMAZÁSÁNAK LEHETŐSÉGEI ÉS KORLÁTAI

VICZIÁN ISTVÁN\*

**Összefoglalás:** A cikk felhívja a figyelmet arra, hogy sok közetjellemző egyidejű figyelembevételére alkalmasak a lineáris vektoralgebra módszerei. Ezek segítségével a rendszerezési kérdések és az átszámítási feladatok egyszerűen tárgyalhatók.

A közetátszámítás tárgyalása során kimutatható, hogy nincs minden ásványos összetétel esetén egyértelmű összefüggés a kémiai és ásványtani összetétel között. Érdekes analógia mutatkozik a közetátszámítás elvégzésének feltételei és az ásványtani fázisszabály érvényességének feltételei között. Mivel az átszámítás klasszikus petrográfiai értelemben csak a közetek kis részénél végezhető el, szerző nem ajánlja alkalmazását a közettanban.

A kémiai és ásványos összetétel közötti mátrixösszefüggés jól használható viszont egy közet különböző analitikai módszerekkel kapott számszerű jellemzőinek összehasonlítására, az elemzések pontosságának ellenőrzésére. Ezért a cikk végül a bevezetett mátrix-transzformáció hibaszámításával foglalkozik.

## I. Bevezetés

Egy közet mennyiségi jellemzését több, adatsorokba rendezett számszerű értékkel szoktuk megadni. Ilyen adatsorok pl. a kémiai elemzés, a nyomelemzés, vagy az ásványtani kimérés eredményei.

Ennek a nagyszámú jellemzőnek egyidejű figyelembevétele a közettani gondolkodás egyik legnagyobb módszertani problémája\*\*. Ezért már a közettan kezdete óta különböző olyan eljárásokat igyekeztek kidolgozni, amelyek lehetővé teszik a sokféle adat lehetőleg minél teljesebb figyelembevételét a közetek rendszerezésekor, ill. jellemzésekor. Ilyenek a különböző közetátszámítási eljárások.

A különböző közettani átszámítási eljárásoknak két alapvető célja van:

- a) összefüggéseket kimutatni az egyes adatok között (elsősorban a kémiai és ásványos összetétel között) és
- b) ezek segítségével néhány jellemző mutatószámra redukálni a közetjellemzők számát, amelyeket azután már könnyebben át lehet tekinteni, és különösen grafikusán szemléletessé lehet tenni.

Dolgozatomban a lineáris algebra néhány egyszerűbb tételének felhasználásával egyrészt olyan matematikai módszert kívánok alkalmazni, amely a fenti célok elérésére jól áttekinthető segédeszközt nyújt, másrészt viszont rá szeretnék mutatni e célok elérhetőségének korlátaira is.

\* Előadva a Magyarhoni Földtani Társulat Ásványtan-Geokémiai Szakcsoport 1966. IV. 25.-i előadóülésén.

\*\* Hasonló nehézségek természetesen a földtan más területén is fellépnek, az itt tárgyalt összefüggések sok esetben alkalmazhatók lehetnek más területen, pl. a biosztratifráfiában is.

## 2. Az elemzés-vektorok fogalma

A különböző elemzések eredményeit megadó adatsorok ún. rendezett szám-n-eseknek tekinthetők. Ezekben bizonyos számszerű adatok meghatározott sorrendben vannak elrendezve. Ilyen szám-n-es pl. a következő kémiai elemzési eredmény:

(SiO <sub>2</sub> =)	0,7212	= g
(TiO <sub>2</sub> =)	0,0024	
(Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> =)	0,1427	
(Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> =)	0,0041	
(FeO =)	0,0203	
(MnO =)	0,0006	
(MgO =)	0,0042	
(CaO =)	0,0189	
(Na <sub>2</sub> O =)	0,0321	
(K <sub>2</sub> O =)	0,0442	
+ H <sub>2</sub> O =)	0,0084	
(-H <sub>2</sub> O =)	0,0008	
(P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> =)	0,0006	
(CO <sub>2</sub> =)	0,0016	

(Gránit, Cs a j á g h y G . 1959) vagy pl. egy kőzet mennyiségi ásványos összetételét megadó következő adatsor:

$$\mathbf{m} = (0,25 \quad 0,48 \quad 0,07 \quad 0,20).$$

(kvarc =)                      (kalcit =)                      (K-földpát =)                      (kaolinit =)

(A százalékokat századok formájában használjuk ebben a dolgozatban, 100% = 1,00; minden adat mellé zárójelben odaírtuk, hogy milyen jellemzőt fejez ki, ennek csak az elrendezés szempontjából van jelentősége, a számolást nem befolyásolja; g és m önkényes betűjelzések.)

Egy ilyen szám-n-es általános alakja tehát

$$\mathbf{x} = (x_1 \ x_2 \ \dots \ x_n). \quad (2.1)$$

Bizonyítható\*, hogy az általunk használt rendezett szám-n-esek lineáris teret alkotnak, vagyis vektorok. Így tehát a kémiai stb. elemzések eredményeit mint egy-egy vektort foghatjuk fel, azt mondhatjuk, hogy az előző példában szereplő gránit kémiai összetételét a g vektor fejezi ki, vagy a másik példa ásványos összetételét az m elemzés-vektor.

Az x elemzés-vektornak szemléletes képet is adhatunk. Minden ilyen szám-n-essel megadott vektorhoz megadhatunk az n-dimenziós térben egy olyan irányított egyenes-szakaszt, amely az origóból indul ki, és x<sub>1</sub>, x<sub>2</sub>, ... x<sub>n</sub> komponensei ezen egyenesszakasz végpontjának koordinátái az

$$\mathbf{e}_1 = (1 \ 0 \ \dots \ 0),$$

$$\mathbf{e}_2 = (0 \ 1 \ \dots \ 0),$$

...

$$\mathbf{e}_n = (0 \ 0 \ \dots \ 1)$$

ortogonális bázisra (= n-dimenziós derékszögű koordinátarendszerre) vonatkoztatva. Ezt persze papíron nem tudjuk ábrázolni, de felrajzolhatjuk könnyen bármely két egység-

\* a) Értelmezve van közöttük az összeadás és a skalárral való szorzás oly módon, hogy a művelet eredménye is a rendezett szám-n-esek halmazának eleme maradjon;

b) az említett két műveletre érvényes a kommutativitás, az asszociativitás és a disztributivitás törvénye;

c) van olyan null-elem, amelyet a halmaz bármely eleméhez adva, azt változtatlanul hagyja.

vektor által meghatározott síkra való vetületét. (Pl. a gránit elemzésvektorának vetülete az  $e_1 (=SiO_2)$  és  $e_4 (=Fe_2O_3)$  által meghatározott síkra az  $x^{(1;4)} = (0,7212 \ 0,0041)$  vektor.)

Ilyen elemzés-vektorral formailag teljesen azonos módon írhatjuk le nemcsak egy kőzet súlysúlyszázalékos kémiai összetételét, hanem bármely ásványt is. Arra, hogy a kőzetátszámításkor teljesen elég a kőzet ásványainak súlysúlyszázalékos összetételéből kiindulni, Sz á d e c k y - K a r d o s s E. (1966) is rámutatott.

### 3. Műveletek az elemzés-vektorokkal

Itt csak röviden jegyezzük meg, hogy földtani — kőzettani szempontból érdekes lehet néhány elemzés-vektorokkal végzett művelet eredménye. Így például két kőzet (vagy ásvány) összetételének különbségét jól jellemezheti a két elemzés-vektor különbségvektorának a hossza:

$$| \mathbf{a} - \mathbf{b} |,$$

vagy hajlásszögének koszinusza:

$$\cos\varphi = \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}}{|\mathbf{a}| \cdot |\mathbf{b}|},$$

ahol  $\mathbf{a}$  és  $\mathbf{b}$  a két vektor,

$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$  a két vektor skaláris szorzata és

$|\mathbf{a}|$ ,  $|\mathbf{b}|$ , ill.  $|\mathbf{a} - \mathbf{b}|$  a megfelelő vektorok hossza.

A távolság-vektorok hosszát használtuk fel pl. egy kérdéses korú dél-dunántúli analcim-bazalt kőzetkémiai rokonsági viszonyainak kiderítésére (Bár, Viczián I., 1965). Azt találtuk, hogy a vizsgált kőzet és a rokonsági szempontból számbajöhető kőzetcsoportok elemzéseinek átlagos vektoriális távolsága a pannoniai bazaltok esetében a legkisebb (I. táblázat).

A bárri analcim-bazalt és néhány magyarországi (ill. jugoszláviai) bázisos kőzet típus elemzés-vektorainak átlagos távolsága

I. táblázat

Kőzet	Vektor távolság
Magyarországi pannoniai bazaltok . . . . .	0,061
Báni-hegység, andezito-bazalt (miocén?)	0,088
Mecsek, alkáli diabáz telérek (alsókréta)	0,089
Duna—Tisza köze, bázisos kréta magma titók . . . . .	0,093
Villányi-hegység, diabáz (alsókréta) . . . .	0,106

### 4. Néhány megjegyzés a kőzetek kémiai alapú rendszerezésével kapcsolatban

Az eddig elmondottak alapján is látható, hogy a kőzetek rendszerezésére alapvetően két egyszerű módszer kínálkozik. A ma használatos rendszerezések is általában e két elvi típus egyikére vezethetők vissza:

1. Közismert, hogy a természetben nem találunk mindenféle kőzetösszetételt egyenlő gyakorisággal, hanem bizonyos típusok igen gyakoriak, a közöttük való átmenetek sokkal ritkábbak. Ezért statisztikai módszerekkel többé-kevésbé egyértelműen meg lehet határozni néhány jellemző alaptípus közepes

összetételét, és minden ilyen, közepes összetételt kifejező elemzés-vektorhoz meg lehet adni egy olyan vektoriális határtávolságot, amelyen belül a kérdéses elemzés-vektor még az illető alaptípusoz tartozik. Így pl. ha az egyik alaptípust az  $y_0$  vektorral adtuk meg, egy bizonyos  $y_1$  közelelemzés-vektor akkor tartozik az illető típusoz, ha a kettő vektoriális távolsága az illető típusra jellemző határtávolságon belül van, vagyis ha

$$|y_0 - y_1| = \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_{0i} - y_{1i})^2} \leq d_0$$

( $d_0$ : a vektoriális határtávolság).

Mint az az egyenlőtlenségből is látható, a fenti kritériumot úgy is megfogalmazhatjuk, hogy egy közele összetételét akkor sorolhatjuk az illető típusba, ha elemzés-vektora egy olyan  $n$ -dimenziós (hiper-) gömb belsejébe mutat, amelynek középpontját az  $y_0$  típusvektor, sugarát pedig a  $d_0$  határtávolság adja meg.

E módszer hátránya az lehet, hogy esetleg az alaptípusok nagy száma a rendszer áttekinthetőségét nagyon lecsökkentheti, előnye viszont, hogy jól alkalmazkodik a természetes viszonyokhoz. Lényegében ezt az elvet használjuk, amikor már hagyományossá vált jelentős közele fogalmakkal hasonlítjuk össze a közeletünket (pl. bazalt), vagy amikor a (már pontosabban definiált) magmatípusokhoz való hozzátartozását döntjük el a közeletnek egyszerű összehasonlítás révén.

2. Az előzőekben ismertetett  $n$ -dimenziós hiper-gömbök nem töltik ki a teret hézagmentesen, így előfordulhat, hogy egy-egy ritkább közeletípust egyik csoportba sem tudunk besorolni, csak azt mondhatjuk meg, hogy melyekhez áll legközelebb. Ez, bár szintén előnyös a természetes viszonyok érzékeltetése szempontjából, mégis az egyértelműség rovására mehet. Ezt a hibát kiűszöbölhetjük ki azzal, hogy az  $n$ -dimenziós teret — természetesen itt is lehetőleg a természetes viszonyok minél teljesebb figyelembevételével — hézagmentesen illeszkedő  $n$ -dimenziós „(hiper-)téglalattestekkel” töltjük ki. Ezek olyan részletei a térnek, amelyeket  $n$  (darab)  $(n-1)$ -dimenziós alter határol, ezek közül  $2-2$  egybevágó és párhuzamos, a többire pedig merőleges.

Célszerű ezeknek a „(hiper-)téglalattesteknek” az oldalait alkotó altereket úgy felvenni, hogy mindegyik oldal-alter a bázisnak csak egy tengelyét metssze, a többivel viszont párhuzamos legyen, vagyis minden ilyen oldal-alteret (= „hiper-síkot”) csak egy számmal, az illető bázissal alkotott metszéspontjának koordinátájával lehessen jellemezni. Minden bázist ily módon két hipersíkkal metszünk, és akkor tartjuk a kérdéses elemzés-vektort az adott alaptípusoz tartozónak, ha a megfelelő bázisa vonatkoztatott koordinátái az illető metszéspontok közé esnek. Így az egyes rendszertani kategóriákat egyszerűen úgy adhatjuk meg, hogy feltüntetjük azt az intervallumot, amelyen belül az egyes komponensek nagysága változhat (pl.  $0,45 \leq y_{SiO_2} \leq 0,60$ , vagyis  $SiO_2 = 45-60\%$ ).

Ez a rendszer mechanikusabb, de előnye, hogy egyértelmű, könnyen áttekinthető és szinte semmi számolást nem igényel.

Megjegyezzhetjük, hogy formailag teljesen hasonló módon építhető fel ásványtani alapú rendszer is a közelet ásványos összetételét kifejező elemzés-vektorokból.

## 5. A kémiai és ásványos összetétel közötti összefüggés mint lineáris transzformáció

A csak kémiai ill. csak ásványtani közeletrendszerek legnagyobb hibája éppen elszigeteltségükben van, abban, hogy nem érzékeltetik a kapcsolatot e két igen fontos leírás mód között. Ennek a hiányosságnak a leküzdésére alakultak ki a különböző átszámítási módszerek. Ezekről viszont bebizonyosodott, hogy e két jellemző-csoport egymásba való átszámítását csak bizonyos korlátok között és csak bizonyos korlátozott eredményességgel (valóságos — modális — ásványtani összetétel helyett normatív összetétel) lehet elvégezni. Ennek okaira mutatnak rá a következő algebrai összefüggések.

Algebrailag az ásványtani és kémiai elemzés-vektorok összefüggését több egymással egyenértékű módon is leírhatjuk.

1. Először is kifejezzhetjük a kémiai elemzés-vektort mint az egyes ásványtani elemzés-vektorok lineáris kombinációját:

$$y = a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_n x_n, \quad (5.1)$$

ahol  $y$  a kémiai elemzés-vektor;  $a_1, a_2, \dots, a_n$  a közelet alkotó egyes ásványok kémiai összetételét kifejező elemzés-vektorok;  $x_1, x_2, \dots, x_n$  az egyes ásványok (súly-)százalékos mennyisége a közeletben és  $n$  az ásványok száma.

2. A fenti vektorokat részletesebben kiírva és a szorzásokat elvégezve a fenti összefüggést mint  $n$ -ismeretlenes, lineáris, inhomogén egyenletrendszerként kapjuk meg:

$$\begin{aligned} y_1 &= a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n \\ y_2 &= a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n \\ &\dots \dots \dots \\ y_m &= a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n \end{aligned} \quad (5.2)$$

amelyben ismerve  $a_{ik}$  és  $x_k$  értékeit  $y_i$  értékeit könnyen megkaphatjuk.

3. A mátrixokra vonatkozó szorzási szabályok ismeretében végül az összefüggést a következő mátrix-alakban is kifejezhetjük:

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad (5.3)$$

vagy röviden, az  $a_{ik}$  elemekből álló mátrixot  $\mathbf{A}$ -val jelölve:

$$\mathbf{y} = \mathbf{Ax}. \quad (5.4)$$

Ez a mátrixegyenlet egy lineáris transzformációt fejez ki. Ez a transzformáció az ásványtani összetétel vektorát az  $\mathbf{A}$  mátrix segítségével a kémiai elemzés-vektorba „képezi le”.

Belátható, hogy ez a művelet minden esetben elvégezhető, ha ismerjük az  $x_k$ ,  $a_{ik}$  mennyiségeket,  $m$  és  $n$  nagyságára semmiféle előzetes kikötést nem kell tennünk, csak természetesen azt, hogy minden szereplő ásványnak meg kell adnunk a kémiai összetételét.

Példaképpen számítsuk ki a 2. pontban szereplő, ásványtani elemzés-vektorával megadott kőzet kémiai összetételét:

$$\begin{aligned} & \begin{matrix} (q =) & (c =) & (or =) & (k =) \end{matrix} \\ \begin{matrix} (\text{SiO}_2 =) \\ (\text{Al}_2\text{O}_3 =) \\ (\text{CaO} =) \\ (\text{K}_2\text{O} =) \\ (\text{H}_2\text{O} =) \\ (\text{CO}_2 =) \end{matrix} & \begin{bmatrix} 1,00 & 0 & 0,65 & 0,46 \\ 0 & 0 & 0,18 & 0,40 \\ 0 & 0,56 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,17 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,14 \\ 0 & 0,44 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0,25 \\ 0,48 \\ 0,07 \\ 0,20 \end{bmatrix} \begin{matrix} (= q) \\ (= c) \\ (= or) \\ (= k) \end{matrix} = \\ & \underbrace{\hspace{10em}}_{\mathbf{A}} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\mathbf{x}} \\ = & \begin{bmatrix} 1,00 \cdot 0,25 + 0 \cdot 0,48 + 0,65 \cdot 0,07 + 0,46 \cdot 0,20 \\ 0 \cdot 0,25 + 0 \cdot 0,48 + 0,18 \cdot 0,07 + 0,40 \cdot 0,20 \\ 0 \cdot 0,25 + 0,56 \cdot 0,48 + 0 \cdot 0,07 + 0 \cdot 0,20 \\ 0 \cdot 0,25 + 0 \cdot 0,48 + 0,17 \cdot 0,07 + 0 \cdot 0,20 \\ 0 \cdot 0,25 + 0 \cdot 0,48 + 0 \cdot 0,07 + 0,14 \cdot 0,20 \\ 0 \cdot 0,25 + 0,44 \cdot 0,48 + 0 \cdot 0,07 + 0 \cdot 0,20 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,39 \\ 0,09 \\ 0,27 \\ 0,01 \\ 0,03 \\ 0,21 \end{bmatrix} \begin{matrix} (\text{SiO}_2 = 39\%) \\ (\text{Al}_2\text{O}_3 = 9\%) \\ (\text{CaO} = 27\%) \\ (\text{K}_2\text{O} = 1\%) \\ (\text{H}_2\text{O} = 3\%) \\ (\text{CO}_2 = 21\%) \end{matrix} \\ & \underbrace{\hspace{10em}}_{\mathbf{y}} \end{aligned}$$

(ásványok rövidítései: q = kvarc, c = kalcit, or = K-földpát és k = kaolinit).

## 6. Az ásványtani összetétel számítása a kémiai összetétel alapján (inverz transzformáció)

Az előző pontban megmutattuk, hogy az ásványtani ( $x$ ) és a kémiai összetétel-vektor ( $y$ ) között a következő mátrix-összefüggés áll fenn:

$$y = Ax. \quad (5.4)$$

Ha ennek az egyenletnek mindkét oldalát balról szorozzuk az  $A$  mátrix  $A^{-1}$  inverzével, az  $x$  vektor a következőképpen fejezhető ki:

$$x = A^{-1}Ax = A^{-1}y. \quad (6.1)$$

Az  $A^{-1}$  mátrix az  $A$  mátrixnak megfelelő lineáris transzformáció inverz transzformációját fejezi ki, szemléletesen azt a transzformációt, amellyel ismét megkeressük azt az eredeti  $x$  vektort, amelyet az  $A$  transzformáció  $y$ -ba vitt át.

$A^{-1}$  a következőképpen fejezhető ki az  $A$  mátrix elemeinek segítségével:

$$A^{-1} = \frac{1}{\det(A)} \begin{bmatrix} A_{11} & A_{21} & \dots & A_{n1} \\ A_{12} & A_{22} & \dots & A_{n2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{1n} & A_{2n} & \dots & A_{nn} \end{bmatrix}, \quad (6.2)$$

ahol

$\det(A)$  az  $A$  mátrix elemeiből képezett determináns értékét jelenti,

$A_{ki}$  értékei pedig az  $A$  mátrix  $a_{ki}$  elemeihez tartozó aldeteminánsok értékét (szorozva  $(-1)^{k+i}$ -nel).

Ezt felhasználva a mátrixegyenlet egy sorát (az  $i$ -edik ásványra vonatkozó megoldóképletet) a következőképpen fejezhetjük ki:

$$x_1 = \sum_{k=1}^n \frac{A_{ki}}{\det(A)} y_k$$

A fenti kifejezésből is látható, hogy az inverz transzformáció, vagyis az  $A$  mátrix invertálása nem végezhető el bármely ásványtani elemzésekből mint oszlopvektorokból felépülő mátrix esetében.

A mátrixnak az alábbi követelményeknek kell eleget tennie:

1. A mátrix csak négyzetes mátrix lehet, vagyis a figyelembe vett kémiai alkotórészeknek és ásványos elegyrészeknek a száma meg kell, hogy egyezzen ( $m = n$ ). Ez abból következik, hogy csak négyzetes mátrixhoz rendelhetünk hozzá determinánst.

Ez a követelmény önmagában lehetetlenné teszi egy teljesen általános átszámítási rendszert kidolgozását. Mivel a kőzetkémiai szerepet játszó komponensek száma nagyságrendekkel alatta van a kőzetalkotó ásványok számának, egy olyan mátrix, amelyik minden kőzetalkotó ásvány vektorát tartalmazná, biztosan nem volna invertálható.

Ezért ilyen esetekben a mátrixot megfelelő sorok (ill. oszlopok) elhagyásával négyzetes mátrixszá kell alakítani. Sorok elhagyásával a felesleges összefüggések számát, oszlopok elhagyásával a meghatározandó ismeretlenek számát csökkenthetjük. Ezt a csökkentést addig végezhetjük, amíg ki nem választható a mátrix soraiból és oszlopai-ból egy olyan  $n$ -ed rendű determináns, amely már nem egyenlő nullával, de ugyanakkor a mátrix elemeiből képezett minden  $(n+1)$ -edrendű determináns értéke még nullával egyenlő ( $n$ -ed rangú mátrix).

2. Az így kiválasztott négyzetes mátrix és az  $\mathbf{y}$  kémiai elemzés-vektor nem tartalmazhat egymásnak ellentmondó adatokat. Ezt a következőképpen fejezhetjük ki:

$$r(\mathbf{A}) = r(\mathbf{A}, \mathbf{y}),$$

vagyis a mátrix rangjának ( $r(\mathbf{A})$ ) és az  $\mathbf{y}$  oszlopvektorral kibővített ( $\mathbf{A}, \mathbf{y}$ ) mátrix rangjának ( $r(\mathbf{A}, \mathbf{y})$ ) egyenlőnek kell lenni ahhoz, hogy az inverz transzformáció egyértelmű megoldást adjon.

Ellenkező eset áll fenn pl. akkor, ha olyan kémiai elemek szerepelnek  $\mathbf{y}$ -ban (pl.  $\text{CO}_2$ ), amelyeknek nem adtuk meg az  $\mathbf{A}$  mátrixban egyetlen hordozóásványát sem (pl. nincs karbonát).

Sokszor ez az ellentmondás egyszerűen a kémiai összetétel meghatározásának hibájából vagy hiányos ismeretéből ered. Ezzel az esettel később foglalkozunk.

Lényegében az 1. és 2. feltételek az átszámításban figyelembe vett ásványok minimális és maximális számát határozzák meg; 2. szerint legalább annyi ásványfajt figyelembe kell venni, mint amennyi ahhoz kell, hogy minden kémiai alkotórésznek legyen megfelelő ásványa, 1. szerint viszont ezek mennyisége nem haladhatja meg a négyzetes mátrix rangját, esetünkben  $n$ -et.

Mind az 1., mind a 2. feltétel kizárja azt az esetet, amikor

$$\det(\mathbf{A}) = 0, \quad (6.4)$$

(ekkor  $\frac{1}{\det(\mathbf{A})}$ -nak nem is volna értelme).

Egy  $|\mathbf{A}|$  determináns a következő esetekben lehet egyenlő nullával:

1. Ha egy sora (oszlopa) csupa nullából áll. Ezért nem egészíthettük ki téglalapmátrixunkat úgy négyzetes mátrixszá, hogy csupa nullából álló sorokat (oszlopokat) teszünk hozzá.

2. Ha két sora (oszlopa) egymással minden tagjában megegyezik:

$$\mathbf{a}_{i_1} = \mathbf{a}_{i_2} \quad (\text{vagy} \quad \mathbf{a}_{k_1} = \mathbf{a}_{k_2}). \quad (6.5)$$

3. Ha egy sora (oszlopa) előállítható a többi sor (oszlop) lineáris kombinációjaként:

$$\mathbf{a}_{i_1} = \sum_{j=2}^n c_j \mathbf{a}_{i_j} \quad \left( \text{vagy} \quad \mathbf{a}_{k_1} = \sum_{j=2}^n c'_j \mathbf{a}_{k_j} \right). \quad (6.6)$$

### 7. Az inverz transzformáció feltételeinek összefüggése az ásványtani fázisszabállyal

Az előző pontban tárgyalt utolsó két feltételt (2. és 3. feltétel) összefüggésbe hozhatjuk a Goldschmidt-féle ásványtani fázisszabállyal. Ennek érdekében nézzük meg, mit jelent ez a két feltétel az ásványok fizikai-kémiai viszonyai szempontjából:

ad 2: Ha az ásványok kémiai összetételét kifejező oszlopvektorok közül kettő megegyezik, akkor az ásványok polimorf módosulatai egymásnak (pl. kvarc és krisztobalit). Ezeket nem vehetjük külön figyelembe az átszámításakor.

ad 3: Ha egy ásvány összetétel-vektora előállítható úgy, mint kettő vagy több másik ásvány összetétel-vektorának lineáris kombinációja, akkor az ásvány kifejezhető

úgy, mint ezeknek az összetevőknek a reakcióterméke (a kémiai reakciók közé számítva a szilárd oldás, vagyis az izomorfia jelenségét is). Így pl. az ásványok (összetevők) vektoraival kifejezhetők a következő jól ismert kémiai összefüggések:

$$a_{(\text{wollastonit})} = a_{(\text{kvarc})} + a_{(\text{kalcit})} - a_{\text{CO}_2}$$

(mivel

$$a_{(\text{kvarc})} + a_{(\text{kalcit})} = a_{(\text{wollastonit})} + a_{\text{CO}_2}$$

a q + c  $\rightleftharpoons$  woll + CO<sub>2</sub> ismert kémiai reakció alapján), vagy

$$a_{(\text{oligoklász})} = 0,2 a_{(\text{anortit})} + 0,8 a_{(\text{albit})}.$$

Nyilvánvaló tehát, hogy csak lineárisan független összetevőket vehetünk egyidejűleg figyelembe az átszámításnál. Ha N-nel jelöljük az összes, a rendszerben meglevő összetevő számát, és ezek között R-féle különböző kémiai reakció játszódhat le, akkor nyilván ez azt jelenti, hogy az összetevők közül R nem tekinthető függetlennek, mivel kifejezhető mint a reakcióban részt vevő többi összetevő lineáris kombinációja. Az A átszámítási mátrix tehát csak N—R = C darab lineárisan független összetevőt tartalmazhat, vagy annál kevesebbet. A figyelembe vehető ásvány-fázisok száma (n) tehát a következőképpen fejezhető ki (az előzők értelmében a polimorf módosulatokat egy fázisnak számítva):

$$n \leq C, \quad (7.1)$$

ami pedig éppen a Goldschmidt-féle ásványtani fázisszabály. Eszerint az átszámításnál figyelembe vehető ásványok számát a fázisszabály segítségével a következőképpen fejezhetjük ki: Ismert kémiai összetétel mellett egy kőzet ásványos összetételét csakis akkor számíthatjuk ki egyértelműen, ha ez a kőzet kémiaiilag egyensúlyi állapotban van, és az egyensúly a P és T állapotjelzők megváltozására nem érzékeny. Ilyen kőzetek pl. a széles P, T tartományokban stabil ortomagmás kőzetek stb. Ezeknél kőzetani megfontolások alapján kijelölhetjük valamennyi független összetevő ásvány vektorából azt a mátrixot, amelynek invertálásával az átszámítás elvégezhető.

Ha a kőzet nem felel meg a fenti követelményeknek, pl. nincs kémiai szempontból egyensúlyi állapotban, akkor az átszámítás nem végezhető el egyértelműen, csak bizonyos kiegészítő feltételezések ill. összefüggések segítségével.

Nem vettük eddig figyelembe az ásványtani fázisszabály Korszinszkij által módosított alakját, ekkor a fenti összefüggésbe C helyett C'-t kell írunk, ahol C' az inert összetevők száma.

### 8. Az átszámítás pontossága

Az eddigiekben feltételeztük, hogy az átszámításhoz szükséges mennyiségek mind pontosan ismertek. Közismert viszont, hogy akár az ásványtani kimérés vagy egyéb mennyiségi meghatározás, akár a kémiai elemzés eredményeit vesszük alapul, mindegyik bizonyos többé-kevésbé ismert hibával rendelkezik. Általában legpontosabban a kőzet kémiai összetétele adható meg. Kevésbé pontos sokszor az A mátrix összetételéről való képünk, mivel a kőzetalkotó ásványok gyakran jelentősen különböznek az ideális



képlet szerinti összetételétől. Ezért a hibák figyelembevételével a transzformáció egyenlete a következőképpen módosul:

$$(\mathbf{y} \pm \Delta \mathbf{y}) = (\mathbf{A} \pm \Delta \mathbf{A}) \cdot (\mathbf{x} \pm \Delta \mathbf{x}). \quad (8.1)$$

Az  $(\mathbf{y} \pm \Delta \mathbf{y})$  vektor egy eleme a következőképpen fejezhető ki:

$$y_i \pm \Delta y_i = y_i (1 \pm m_i) = y_i \mu_i,$$

ahol

$\Delta y_i$  az  $y_i$  mennyiség meghatározásának abszolút hibája,

$$m_i = \frac{\Delta y_i}{y_i} \text{ pedig a megfelelő relatív hiba.}$$

A  $\mu_i$  elemekből alkotott  $\mathbf{M}$  diagonális mátrix segítségével az  $\mathbf{y} \pm \Delta \mathbf{y}$  vektor szorzat alakjában is kifejezhető:

$$\mathbf{y} \pm \Delta \mathbf{y} = \mathbf{M} \mathbf{y}.$$

Teljesen hasonlóan  $\mathbf{x} \pm \Delta \mathbf{x}$  egy eleme is kifejezhető az  $x_k \pm \Delta x_k = x_k(1 \pm q_k) = x_k \kappa_k$  alakban, ill. a  $\kappa_k$  elemekből képezett  $\mathbf{Q}$  diagonális mátrix segítségével

$$\mathbf{x} \pm \Delta \mathbf{x} = \mathbf{Q} \mathbf{x}$$

szorzat alakban.

$\mathbf{A}$ -ról az egyszerűség kedvéért tételezzük fel, hogy sorait egyforma pontossággal ismerjük:

$$\mathbf{A} \pm \Delta \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \dots & & \\ \mathbf{a}_i \pm \Delta \mathbf{a}_i & & \\ \dots & & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dots & & \\ \mathbf{a}_i(1 \pm p_i) & & \\ \dots & & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dots & & \\ \mathbf{a}_i \pi_i & & \\ \dots & & \end{bmatrix},$$

innen a  $\pi_i$  elemekből álló  $\mathbf{P}$  diagonális mátrix felhasználásával:

$$\mathbf{A} \pm \Delta \mathbf{A} = \mathbf{P} \mathbf{A}.$$

1. Ha ismert egy kőzet ásványtani összetétele és ásványainak kémiai összetétele  $q_k$  ill.  $p_i$  relatív hibával, számított kémiai összetétele egyes komponenseinek  $m_i$  relatív hibáját az

$$\mathbf{M} \mathbf{y} = \mathbf{P} \mathbf{A} \mathbf{Q} \mathbf{x} \quad (8.2)$$

mátrixegyenletből kaphatjuk meg. Ennek egy sora a szorzási szabályok figyelembevételével:

$$\mu_i y_i = \sum_{k=1}^n \pi_i a_{ik} \kappa_k x_k,$$

behelyettesítve és  $y_i$ -vel osztva:

$$(1 \pm m_i) = \frac{1}{y_i} \sum_{k=1}^n a_{ik} x_k (1 \pm p_i \pm q_k \pm p_i q_k).$$

Felhasználva, hogy  $p_i$  kiemelhető a szumma-jel elé, hogy mivel  $p_i$  és  $q_k$  is kis számok,  $p_i q_k \approx 0$  és hogy

$$y_i = \sum_{k=1}^n a_{ik} x_k, \quad (5.2)$$

az  $m_i$  relatív hibára a következő kifejezést kapjuk:

$$m_i \approx p_i + \frac{1}{y_i} \sum_{k=1}^n a_{ik} x_k q_k. \quad (8.3)$$

Ha pl. a már kiszámított példában az egyes ásványok mennyiségi meghatározásának hibája rendre:

$$q_{1(=kvarc)} = 2\%,$$

$$q_{2(=kalcit)} = 2\%,$$

$$q_{3(=K-földpát)} = 3\% \text{ és}$$

$$q_{4(=kaolinit)} = 10\%,$$

és pl. az  $\text{SiO}_2$  mennyiségét a számításnál figyelembe vett ásványok esetében  $p_1 = 1\%$ -os pontossággal ismertnek tételezzük fel, a számított  $\text{SiO}_2$ -tartalom relatív hibája a következőképpen adható meg:

$$m_1 \approx 1 + \frac{1}{0,39} (1,00 \cdot 0,25 \cdot 2 + 0 + 0,65 \cdot 0,07 \cdot 3 + 0,46 \cdot 0,20 \cdot 10) \approx 8\%,$$

vagyis az  $\text{SiO}_2$ -tartalom az

$$y_1 \pm \Delta y_1 = y_1 (1 \pm m_1) = 0,39 \pm 0,04$$

pontossággal adható meg.

2. Ha az inverz transzformáció segítségével a kémiai összetétel és az egyes ásványok kémiai összetételének relatív hibája ismeretében a számított ásványos összetétel relatív hibáját akarjuk megtudni, az előbbi, hibamátrixokkal kifejezett összefüggést a következőképpen módosítjuk:

$$\mathbf{Qx} = (\mathbf{PA})^{-1} \mathbf{My} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{P}^{-1} \mathbf{My} \approx \mathbf{A}^{-1} \mathbf{P} \mathbf{My} \quad (8.4)$$

(itt felhasználtuk azt, hogy  $\mathbf{P}$  diagonális mátrix, tehát inverzének elemei egyenlők az eredeti elemek reciprok értékével és

$$\frac{1}{\pi_k} = \frac{1}{(1 \pm p_k)} \approx 1 \pm p_k = \pi_k,$$

mert  $p_k$  elég kis mennyiség, és ezért  $\mathbf{P} \approx \mathbf{P}^{-1}$ ).

Az így kapott mátrix-összefüggés egy sorát kifejtve:

$$x_i x_i = \frac{1}{D} \sum_{k=1}^n A_{ki} \pi_k \mu_k y_k,$$

ahol  $D = \det(\mathbf{A})$  és  $A_{ki}$  az inverz mátrix tárgyalásából ismert mennyiségek (6. pont).

Innen behelyettesítve és  $x_i$ -vel osztva:

$$1 \pm q_i \approx \frac{1}{D x_i} \sum_{k=1}^n A_{ki} y_k (1 \pm p_k \pm m_k \pm p_k m_k).$$

Felhasználva, hogy  $p_k m_k \approx 0$ , mivel  $p_k$  és  $m_k$  kis számok, és hogy

$$x_i = \sum_{k=1}^n \frac{A_{ki}}{D} y_k, \quad (6.3)$$

a  $q_i$  relatív hibára a következő kifejezést kapjuk:

$$q_i = \frac{1}{D x_i} \sum_{k=1}^n A_{ki} y_k (p_k + m_k). \quad (8.5)$$

Az ismert példa adatait felhasználva legyen:

$$p_1 (= \text{SiO}_2) = 1\% \quad m_1 = 0,1\% \quad p_1 + m_1 = 1,1\% \quad y_1 = 0,39$$

$$p_2 (= \text{Al}_2\text{O}_3) = 2\% \quad m_2 = 0,5\% \quad p_2 + m_2 = 2,5\% \quad y_2 = 0,09$$

$$p_4 (= \text{K}_2\text{O}) = 1\% \quad m_4 = 0,1\% \quad p_4 + m_4 = 1,1\% \quad y_4 = 0,01,$$

és keressük a K-földpát meghatározásának relatív hibáját a kőzetben ( $x_3 = 0,07$ ).

Felhasználva a következő adatokat (A utolsó két sorát elhagyva):

$$D = -0,038; \quad A_{23} = 0; \quad A_{13} = 0; \quad A_{43} = -0,224$$

$$q_3 \approx \frac{0 + 0 + (-0,224) \cdot 0,01 \cdot 1,1}{-0,038 \cdot 0,07} \approx 0,9\%.$$

(Az  $x_i$  adatok számítását lásd a következő 9. pontban.)

Gyakorlati célra sokszor elegendő lehet az átszámítás pontosságának közelítő ismerete. E célból tételezzük fel, hogy a kémiai ( $\mathbf{y}$ ) és ásványtani ( $\mathbf{x}$ ) elemzés-vektorokat, ill. az  $\mathbf{A}$  átszámítási mátrixot bizonyos átlagos  $m$ ,  $q$ , ill.  $p$  relatív pontossággal ismerjük. Ekkor a hibára kapott kifejezéseink a következő egyszerű alakot nyerik:

$$m \approx p + q \quad (8.6)$$

(vagy ha csak a kémiai elemzés-vektorok relatív hibáit tekintjük átlagosnak:

$$m_i \approx p_i + q), \quad (8.7)$$

ill.

$$q \approx p + m. \quad (8.8)$$

### 9. Az átszámítás gyakorlati menete

Mátrixtranszformációt alkalmazni kézi úton való számításokhoz általában túl bonyolult lenne. Erre elsősorban a kérdés áttekinthető elméleti tárgyalása miatt volt szükség. Hasznos lehet a mátrixos számítási mód a kémiai összetételnek ásványtani összetételből való számításakor áttekinthetősége miatt (mint az példánkból is látszott), illetve mindkét irányban végzett gépi számítások, mivel a mátrixinverzióra és szorzásra általában kész szubrutinok állnak rendelkezésre.

Az ásványos összetételt — amennyiben a fent tárgyaltak alapján egyáltalán lehet — legegyszerűbben úgy számolhatjuk, hogy a 6. pont 2. alpontjában felírt  $n$ -ismeretlenes

inhomogén lineáris egyenletrendszert megoldjuk  $x_1, x_2, \dots, x_n$  ismeretlenekre. Így pl. számítsuk ki most visszafelé kémiai komponensekre kiszámított példánkat:

Az

$$\begin{array}{rccccrcr} 1,00x_1 & + & 0 & + & 0,65x_3 & + & 0,46x_4 & = & 0,39 \\ 0 & + & 0 & + & 0,18x_3 & + & 0,40x_4 & = & 0,09 \\ 0 & + & 0,56x_2 & + & 0 & + & 0 & = & 0,27 \\ 0 & + & 0 & + & 0,17x_3 & + & 0 & = & 0,01 \\ 0 & + & 0 & + & 0 & + & 0,14x_4 & = & 0,03 \\ 0 & + & 0,44x_2 & + & 0 & + & 0 & = & 0,21 \end{array}$$

egyenletrendszert kell csak megoldanunk, és (a számítási pontatlanság határain belül) visszakapjuk az eredeti összetételt:

$$(q =) x_1 = 0,25$$

$$(c =) x_2 = 0,48$$

$$(or =) x_3 = 0,06$$

$$(k =) x_4 = 0,21$$

---


$$(össz. =) 1,00,$$

vagy vektoros alakban:

$$\mathbf{x} = (x_1 \ x_2 \ x_3 \ x_4) = (0,25 \ 0,48 \ 0,06 \ 0,21) = \mathbf{m}.$$

Lényegében minden átszámítási eljárás fölfogható úgy, mint egy-egy algoritmus — műveleti utasítás — egy-egy ilyen egyenletrendszer együtthatóinak, ismeretlenek és megoldásának megválasztására.

#### IRODALOM — LITERATUR

- Alexits Gy., Fenyő I. (1960): Matematika vegyészek számára. (3., átdolgozott kiadás) Tankönyvkiadó, Budapest—Csajághy G. (1959): Szilikátelemléseink megbízhatósága. MÁFI Évi Jel. 1955-56-ról, p. 21-28. — Dietrich, G., Stahl, H. (1965): Grundzüge der Matrizenrechnung. VEB Fachbuchverl., Leipzig—Fazekas F., Körmenyi I., Tasnády I. (1964): Vektoralgebra. Lineáris egyenletrendszerek. (3., bővített kiadás) (Műsz. Mat. Gyak. A. IX.) Tankönyvkiadó, Budapest — Gelfand, I. M. (1955): Előadások a lineáris algebráról. Akad. Kiad. Budapest — Kern, R., Weisbrod, A. (1964): Thermodynamique de base pour minéralogistes, pétrographes et géologues. Masson et Cie., Paris — Kern, R., Vajsbrod, A., 1966: Osznovi termodinamiki dlja mineralogov, petrografovi geologov. Mir, Moszkva) — Lovass-Nagy V. (1964): Mátrixszámítás. (Műsz. Mat. Gyak. C. IV.) Budapest — Szádeczky-Kardoss, E. (1966): Die Berechnung der mineralischen Zusammensetzung magmatischer und nichtmagmatischer Gesteine aus der chemischen Analyse. Acta Geol. Hung. 10. kötet, p. 69-103. — Viczián I. (1965): A baranyai bazalt. Földt. Közl. 95. kötet, p. 448-452. — Viczián I. (1965): A lineáris algebra néhány földtani alkalmazása. Kézirat, MÁFI Adattár

#### Möglichkeiten und Grenzen der Anwendung von Gesteinsumrechnungsmethoden

ISTVÁN VICZIÁN

Zur quantitativen Charakterisierung eines Gesteins werden gewöhnlich in Datenreihen geordnete numerische Werte verwendet. Solche Datenreihen sind z.B. die Ergebnisse der chemischen Analyse, der Spurenanalyse, oder die modale Zusammensetzung eines Gesteins. Die gleichzeitige Berücksichtigung aller dieser zahlreichen Kennwerte stellt eines der größten methodologischen Probleme der Petrographie dar. Es herrschte in der Petrographie lange die Meinung, diese Aufgabe könne hauptsächlich mit Hilfe verschiedener Gesteinsumrechnungsmethoden gelöst werden.

Verfasser der vorliegenden Arbeit weist darauf hin, dass die Datenreihen, durch die die chemische und mineralogische Zusammensetzung eines Gesteins angegeben wird, als die  $m$ - bzw.  $n$ -dimensionalen Vektoren  $\mathbf{y} = (y_1 y_2 \dots y_m)$  bzw.  $\mathbf{x} = (x_1 x_2 \dots x_n)$  aufgefasst werden können, und der zwischen diesen Vektoren bestehende Zusammenhang durch die Matrixgleichung

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}$$

ausgedrückt werden kann (Formeln 5.1—5.4). In dieser Formel repräsentiert  $\mathbf{A}$  die Matrix, deren Spaltenvektoren  $\mathbf{a}_k$  die chemischen Zusammensetzungen der gesteinsbildenden Mineralien zum Ausdruck bringen, natürlich in einer Reihenfolge, die durch den Vektoren  $\mathbf{x}$  und  $\mathbf{y}$  gegeben wird.

Der obige Zusammenhang gibt direkt die Ausrechnungsmethode der chemischen Zusammensetzung im Falle an, wenn  $\mathbf{A}$  und  $\mathbf{x}$  bekannt sind. In solchen Fällen kann die Operation immer durchgeführt werden. (Für praktische Beispiele siehe: Punkt 5.)

Die Lage ändert sich, wenn wir die mineralogische Zusammensetzung  $\mathbf{x}$  aus der chemischen Zusammensetzung  $\mathbf{y}$  des Gesteins mit Hilfe von Umrechnung bestimmen wollen. Die Bestimmung dieser sogenannten normativen mineralogischen Zusammensetzung ist das Hauptziel der meisten Umrechnungsmethoden.

Diese Operation kann aber nur im Falle eindeutig durchgeführt werden, — als das aus den Formeln 6.1 und 6.2 ersichtlich ist —, wenn die Kehrmatrix  $\mathbf{A}^{-1}$  bildbar ist. Dazu soll die Matrix  $\mathbf{A}$  die folgenden Anforderungen befriedigen:

1. Die Matrix kann nur eine quadratische Matrix sein ( $m = n$ ).  
2.  $r(\mathbf{A}) = r(\mathbf{A}, \mathbf{y})$ , d. h. der Rang der Matrix und der Rang der durch die Zugabe des Spaltenvektors  $\mathbf{y}$  erhaltenen Matrix sollen gleich sein.

3. Die Formel 6.4 darf nicht gültig sein, d. h.:

3.1. Die Matrix darf nicht Zeilen und Spalten enthalten, die nur aus Nullen bestehen;  
3.2. Je zwei Zeilen (oder Spalten) der Matrix dürfen nicht untereinander gleich sein (Formel 6.5) und

3.3. Eine von den Zeilen (Spalten) der Matrix darf nicht als eine lineare Kombination anderer Zeilen (Spalten) hergestellt werden können (Formel 6.6).

Diese Voraussetzungen können auch mineralogisch formuliert werden:

1. Die Zahl der berücksichtigten chemischen Komponenten und die Zahl der mineralischen Bestandteile sollen gleich sein. Diese Anforderung allein macht die Ausarbeitung eines ganz allgemeinen Umrechnungssystems unmöglich, weil die Zahl der im Gesteinschemismus wesentlichen chemischen Komponenten um einige Grössenordnungen kleiner als die Zahl der gesteinsbildenden Mineralien ist.

2. Die ausgewählte quadratische Matrix und der Vektor  $\mathbf{y}$  der chemischen Analyse dürfen keine einander widersprechende Angaben enthalten, z. B. es dürfen nicht unter den chemischen Komponenten solche erwähnt werden, für die in der Matrix  $\mathbf{A}$  keine entsprechenden Mineralien zu finden sind. Häufig ist der Fall, dass der Widerspruch gerade aus dem Fehler der chemischen oder mineralogischen Analyse stammt.

3.1. Chemische Komponenten oder Mineralien, die im Gestein nicht zu finden sind, können nicht berücksichtigt werden.

3.2. Bei der Umrechnung können polymorphe Modifikationen von gleicher chemischen Zusammensetzung nicht unterschieden werden.

3.3. Mineralien, die als Reaktionsprodukte anderer berücksichtigten Mineralien ausgedrückt werden können (als chemische Reaktion wird hier auch die Lösung in fester Phase, d. h. auch die Isomorphie betrachtet), sind bei der Rechnung ebenfalls nicht anwendbar.

Alle diese Voraussetzungen können mit der mineralogischen Phasenregel von Goldschmidt interessant parallelisiert werden (Formel 7.1, wo  $C$  die Zahl der linear unabhängigen Komponenten und  $n$  die Zahl der Phasen ist). Das bedeutet, dass die mineralogische Zusammensetzung eines Gesteines bei bekannter chemischer Zusammensetzung nur dann eindeutig gerechnet werden kann, wenn dieses Gestein sich in einem, der mineralogischen Phasenregel entsprechendem Zustande befindet, d. h., es ein chemisches Gleichgewichtssystem bildet, und dieses Gleichgewicht für die Veränderungen der Zustandsgrößen  $P$  und  $T$  nicht empfindlich ist. Solche Gesteine sind — auch bei bestimmten idealen Voraussetzungen — selten.

Hat also das Gestein die erwähnten Eigenschaften, kann man auf Grund petrographischer Erwägungen aus aller unabhängigen gesteinsbildenden Mineralien die Matrix

A bestimmen, mit deren Invertieren die Umrechnung durchgeführt werden kann. (Das praktische Beispiel siehe: Punkt 9.)

Entspricht aber das Gestein den durch die mineralogische Phasenregel gegebenen Voraussetzungen nicht, d. h. es sich z. B. in keinem chemischen Gleichgewicht befindet, kann die Umrechnung nicht eindeutig — und nur mit Hilfe bestimmter zusätzlicher Voraussetzungen — durchgeführt werden.

Darum ist die Umrechnung — nach der Meinung des Verfassers — für die Lösung der aus der klassischen Petrographie genommenen Gesteins-Charakterisierungs- und Systematisierungs-Aufgaben nicht geeignet. Es soll erwähnt werden, dass der Verfasser zur Systematisierung der Gesteine im Sinne der Vektortheorie einige geeignete und einfach ausrechenbare Aufteilungen des  $n$ -dimensionalen Raumes für zweckmässig hält.

Die eingeführte Matrixtransformation kann aber eine wichtige Rolle z. B. bei der Vergleichung verschiedener Materialprüfungsmethoden spielen. Im Zusammenhang damit ist die Berücksichtigung der Messfehler von grosser Bedeutung. Darum versuchte der Verfasser am Ende der Abhandlung die im Laufe der Rechnung der chemischen und mineralogischen Zusammensetzung auftretenden Fehler, im Falle, wenn die Fehler der Ausgangsangaben bekannt sind, zu schätzen (Formeln 8.3 bzw. 8.5). Für Näherungsrechnungen sind auch die einfachen Zusammenhänge 8.6 und 8.8 genügend.