

Appendix 2.

A coding guide for calculation formulas of phase component proportions and site fractions in the *a-x* files.

a-x ファイルに記述されている相成分の構成割合・サイトのモル分率の計算式を表すコードは、次の一般式に基づいている (Powell and Holland, 2006) :

$$\theta = \sum_{i=1}^n \prod_{j=1}^{m_i} \left(c_{ij} + \sum_{k=1}^{t_{ij}} m_{ijk} v_{ijk} \right). \quad (A1)$$

ここで、 n は項の数、 m_i は第 i 項の因数の数、 c_{ij} および m_{ijk} は整数または有理数、 t_{ij} は第 i 項の j 番目の因数に含まれる変数の数、 v_{ijk} は変数。*a-x* ファイルにはこれらのパラメーターが以下の順に並べてある :

$$\begin{matrix} n & m_1 & c_{11} & t_{11} & m_{111} & v_{111} & \cdots & m_{11t_{11}} & v_{11t_{11}} & \cdots \cdots \cdots & c_{1m_1} & t_{1m_1} & m_{1m_11} & v_{1m_11} & \cdots & m_{1m_1t_{1m_1}} & v_{1m_1t_{1m_1}} \\ & m_2 & c_{21} & t_{21} & m_{211} & v_{211} & \cdots & m_{21t_{21}} & v_{21t_{21}} & \cdots \cdots \cdots & c_{2m_2} & t_{2m_2} & m_{2m_21} & v_{2m_21} & \cdots & m_{2m_2t_{2m_2}} & v_{2m_2t_{2m_2}} \\ & & & & & & & & & & & & & & & & \\ & & & & & & & & & & & & & & & & \\ & & & & & & & & & & & & & & & & \\ & m_n & c_{n1} & t_{n1} & m_{n11} & v_{n11} & \cdots & m_{n1t_{n1}} & v_{n1t_{n1}} & \cdots \cdots \cdots & c_{nm_n} & t_{nm_n} & m_{nm_n1} & v_{nm_n1} & \cdots & m_{nm_nt_{nm_n}} & v_{nm_nt_{nm_n}}. \end{matrix} \quad (A2)$$

KFMASH 系の黒雲母の相成分 *phl* の構成割合は Powell and Holland (2006) に基づくと次式で表される :

$$p_{\text{phl}} = (1 - x)(1 - y) - \frac{2}{3}Q. \quad (A3)$$

したがって、項の数は 2 ($n = 2$)、第 1 項の因数の数は 2 ($m_1 = 2$)、第 2 項の因数の数は 1 ($m_2 = 1$)。変数は第 1 項の 1 番目の因数に 1 つ ($t_{11} = 1, v_{111} = x$)、2 番目の因数に 1 つ ($t_{12} = 1, v_{121} = y$)、第 2 項に 1 つ ($t_{21} = 1, v_{211} = Q$) である。これらを (A2) 式に当てはめるとコードは以下のように表される :

$$\begin{matrix} \text{p(phl)} & 2 & 2 & 1 & 1 & -1 & x & 1 & 1 & -1 & y \\ & & & 1 & 0 & 1 & -2/3 & Q & & & \end{matrix}$$