

Př. 1: Prepočet chemické analýzy na normativní minerály

v tomto příkladu ve výpočtu zanedbáme analyzovanou vodu, abychom měli čtverco

- 1) vypočtete počet molů oxidů ve 100g horniny (Q; využijte molekulové hm. M)
- 2) ze složení normativních minerálů vytvořte matici zastoupení oxidů v normativních minerálech
- 3) k výsledné matici vytvořte inverzní matici
- 4) inverzní matici vynásobte vektorem oxidů (vektor y) zprava => zastoupení normativních minerálů
 - a) v molech na 100g horniny
 - b) v molárních % (tj. podíl z celku; suma musí vyjít 100%)
 - c) v hmotnostních % (využijte mol. hmotnosti minerálů MW)

	wt %	M	Q[mol/100g]
SiO ₂	55.7	60.080	
Al ₂ O ₂	22.4	101.960	
Fe ₂ O ₃	4.3	159.690	
CaO	5.3	56.080	
CO ₂	4.1	44.010	
H ₂ O	8.2	18.015	
sum	100		y

SiO ₂	Q
Al ₂ Si ₂ O ₅ (OH) ₄	K
FeO(OH)	G
CaCO ₃	C
Ca _{0,165} Al _{2,33} Si _{3,67} O ₁₀ (OH) ₂	S

$$\begin{aligned}
 \text{SiO}_2 &= 1Q + 2K + 0G + 0C + 3,67S \\
 \text{Al}_2\text{O}_2 &= 0Q + 1K + 0G + 0C + 2,33/2 S \\
 \text{Fe}_2\text{O}_3 &= 0Q + 0K + 1/2G + 0C + 0 S \\
 \text{CaO} &= 0Q + 0K + 0G + 1C + 0,165 S \\
 \text{CO}_2 &= 0Q + 0K + 0G + 1C + 0S
 \end{aligned}$$

Matrice 5x5

$$\begin{matrix}
 \begin{matrix} \text{SiO}_2 \\ \text{Al}_2\text{O}_2 \\ \text{Fe}_2\text{O}_3 \\ \text{CaO} \\ \text{CO}_2 \end{matrix} & = & \boxed{} & \begin{matrix} Q \\ K \\ G \\ C \\ S \end{matrix} \\
 \mathbf{y} & & \mathbf{A} & \mathbf{x}
 \end{matrix}$$

$$\boxed{} \\
 \mathbf{A}^{-1}$$

$$\begin{matrix}
 \begin{matrix} Q \\ K \\ G \\ C \\ S \end{matrix} & = & \begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix} & \begin{matrix} \\ \\ \\ \\ \end{matrix} \\
 \mathbf{x} & & \mathbf{A}^{-1} & \mathbf{y}
 \end{matrix}$$

$$\begin{matrix}
 \text{MW} & & \text{Q [mol/100g]} & & \text{mol \%} & & \text{wt \%} \\
 \boxed{60.08} & & \boxed{Q} & = & \boxed{} & = & \boxed{}
 \end{matrix}$$

258.15
88.85
100.09
366.58

K
G
C
S

=
=
=
=
[Orange box]

=
=
=
=
[Yellow box]

=
=
=
=
[Yellow box]

X suma=

[Green box]

suma=

[Yellow box]

suma=

[Yellow box]

- zjednodušené řešení

novou matici, na níž lze přímo provést inverzi

žlech (viz soustava lin. rovnic). Do matice nevynášejte řádek pro H_2O => matice 5x5

minerálů v hornině:

Př. 2: Přepočítání chemické analýzy horniny na normativní minerály - projekt

v tomto příkladu zahrneme do výpočtu i vodu. Protože získáme matici 6x5, musíme při výpočtu

- 1) vypočítáme počet molů oxidů ve 100g horniny (z hmotnostních procent a **molekulových hmotností**) => ve
 - 2) doplníme prvky **matice A** podle zastoupení jednotlivých oxidů v daných normativních minerálech
 - 3)-6) dle instrukcí provedeme projekci do podprostoru, vypočítáme inverzní matici a projektujeme zpět do původ
 - 7) působením **vektoru y** na výslednou matici zprava vypočítáme zastoupení jednotlivých minerálů v hornině
 - a) jako **počet molů** minerálu **ve 100g** horniny (tj. prostý výsledek součinu matice a vektoru)
 - b) v **molárních %** (tj. podíl z celku; suma musí být 100%)
 - c) v **hmotnostních procentech** (využijte **mol. hmotnosti** minerálů; suma by měla vyjít cca 10
- tip: nezapomeňte, že při operacích s maticemi je třeba po zadání polí potvrdit Ctrl+Shift+Enter, resp. Ctrl+

	M		wt%	mol ox. na 100g				
1)	60.08	SiO ₂	65.98		Q	Q	křemen	SiO ₂
	101.96	Al ₂ O ₃	20.22		Al ₂ Si ₂ O ₅ (OH) ₄	K	kaolinit	Al ₂ O ₃ +
	159.69	Fe ₂ O ₃	3.01		FeO(OH)	G	göthit	0,5Fe ₂ O ₃
	56.08	CaO	4.26		CaCO ₃	C	kalcit	CaO +
	44.01	CO ₂	2.03					
	18.2	H ₂ O	4.67		Ca _{0,33} Al _{2,66} Si _{3,34} O ₁₀ (OH) ₂	S	smektit	0,33Ca

y

2)

SiO ₂	=	
Al ₂ O ₃		
Fe ₂ O ₃		
CaO		
CO ₂		
H ₂ O		
y	=	A

3) transpozice
(minerály v řádcích)

A^T

4) vytvoření čtvercové matice
(abychom mohli provést inverzi)
=projekce do podprostoru 5x5

A^TA

5) inverzní matice

(A^TA)⁻¹

6) projekce zpět do prostoru 5x6

--

$$(A^T A)^{-1} A^T$$

7) konečný výpočet zastoupení normativních minerálů

Q	=	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
K		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
G		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
S		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

x = $(A^T A)^{-1} A^T$

Projekce do podprostoru

Pro využití projekce do podprostoru (násobení transponovanou maticí A^T)

ktor y

lního prostoru

, a to:

0 +/- 1) => **výsledek úlohy**

†Shift+click-on-button

	Q	K	G	C	S
SiO ₂	1	2	0	0	3.34
Al ₂ O ₃	0	1	0	0	1.33
Fe ₂ O ₃	0	0	0.5	0	0
CaO	0	0	0	1	0.33
CO ₂	0	0	0	1	0
H ₂ O	0	2	0.5	0	1

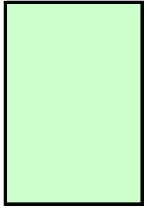
2SiO₂+2H₂O
D₃+0,5H₂O
CO₂
O+1,33Al₂O₃+3,34SiO₂+H₂O

Q
K
G
C
S

x

molární hmotnost minerálu:

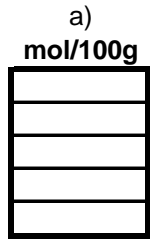
MW



y

=

SUMA=



=

SUMA=



=

SUMA=



Q
K
G
C
S

60.08
258.15
88.85
100.09
366.58