

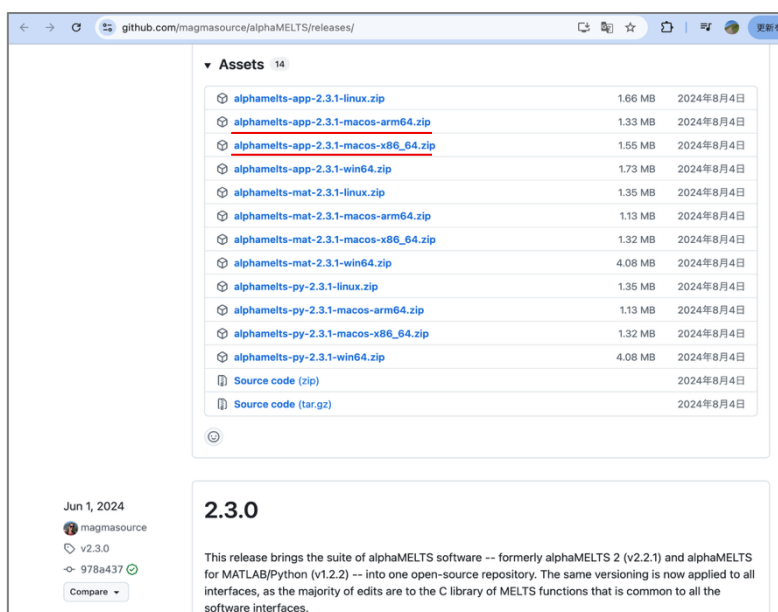
AlphaMELTS による Find Liquidus の計算

2025 年 12 月 7 日 菅原 透

alphaMELTS は Caltech の Paula Antoshechkina と Paul Asimow が開発した、テキストベース インターフェースの MELTS プログラムです。
alphaMELTS で複数の計算条件におけるマグマのリキダス温度を一括計算する Python コードを作成しました。
Python をインストールしていれば、Mac と Windows のどちらでも動作します。

1. AlphaMELTS のダウンロード

Github から alphamelts をダウンロードする。
<https://github.com/magmasource/alphaMELTS/releases/>



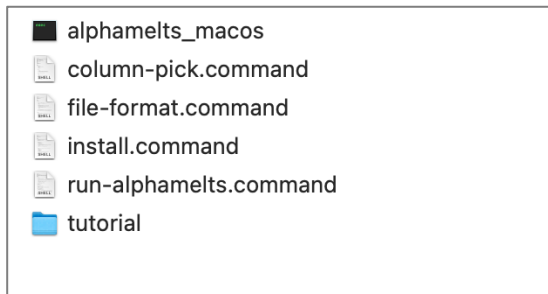
AppleSilicon 系の Mac :
alphamelts-app-2.3.1-macos-arm64.zip

Intel 系の Mac :
alphamelts-app-2.3.1-macos-arm64.zip

Windows :
alphamelts-app-2.3.1-win64.zip

2. ファイルの配置

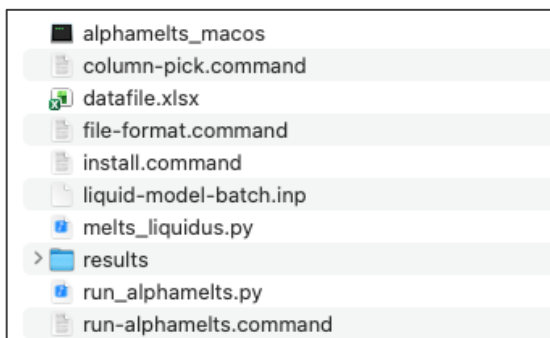
「alphamelts」フォルダーを作成し、そこに zip を解凍したファイルをすべて置く。



3. Python コードの準備

run_alphamelts.py
melts_liquidus.py
datafile.xlsx

を置き、「results」フォルダーを作成する。



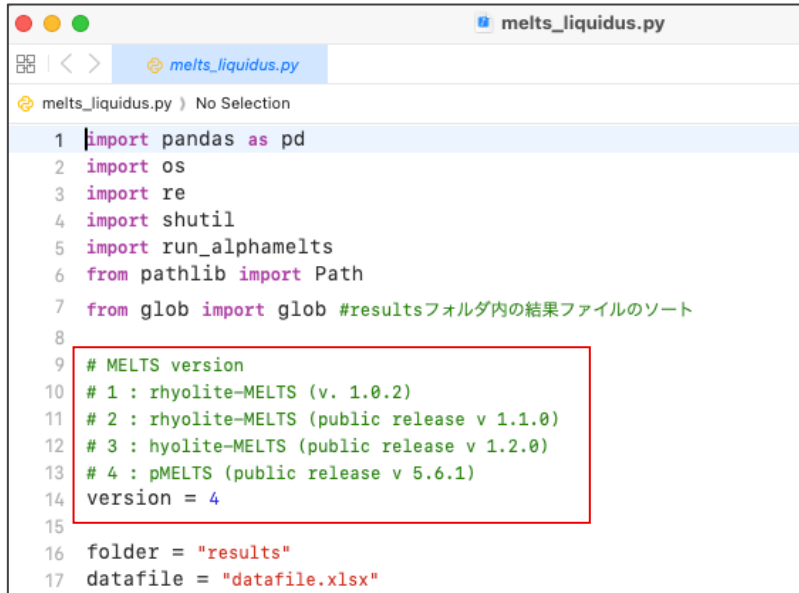
4. 計算をするデータファイルの作成

datafile.xlsx を EXCEL で開き、計算をする組成、圧力、酸素分圧条件に書き換えて保存する。このとき log fO₂ path を設定すれば、指定の酸素分圧で平衡になるように Fe₂O₃ と FeO が分配される。Fe₂O₃ と FeO の分析値がある時は log fO₂ path は None とする。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T	U	V
	Title	SiO ₂	TiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	Cr ₂ O ₃	FeO	MgO	CaO	Na ₂ O	K ₂ O	P ₂ O ₅	H ₂ O	Initial T	Final T	Increment	Initial P	Final P	Increment	dp/dt	log fO ₂ path	Mode
1	Allan et al. 15	48.68	1.01	17.64	0.89	0.03	7.59	9.1	12.45	2.65	0.03	0.08	0.2	1400	1000	3	750	750	0	0	None	Fractionate Solids
2	Allan et al. 15	48.68	1.01	17.64	0.89	0.03	7.59	9.1	12.45	2.65	0.03	0.08	0.2	1400	1000	3	1000	1000	0	0	None	Fractionate Solids
3	Allan et al. 15	48.68	1.01	17.64	0.89	0.03	7.59	9.1	12.45	2.65	0.03	0.08	0.2	1400	1000	3	2000	2000	0	0	None	Fractionate Solids
4	Allan et al. 15	48.68	1.01	17.64	0.89	0.03	7.59	9.1	12.45	2.65	0.03	0.08	0.2	1400	1000	3	5000	5000	0	0	None	Fractionate Solids
5	Allan et al. 15	48.68	1.01	17.64	0.89	0.03	7.59	9.1	12.45	2.65	0.03	0.08	0.2	1400	1000	3	10000	10000	0	0	None	Fractionate Solids
6	Allan et al. 15	48.68	1.01	17.64	0.89	0.03	7.59	9.1	12.45	2.65	0.03	0.08	0.2	1400	1000	3	12000	12000	0	0	None	Fractionate Solids
7	Allan et al. 15	48.68	1.01	17.64	0.89	0.03	7.59	9.1	12.45	2.65	0.03	0.08	0.2	1400	1000	3	15000	15000	0	0	None	Fractionate Solids

5. MELTS のバージョン選択

melts_liquidus.py を開いて、計算をする MELTS のバージョンを選択したのち保存する。



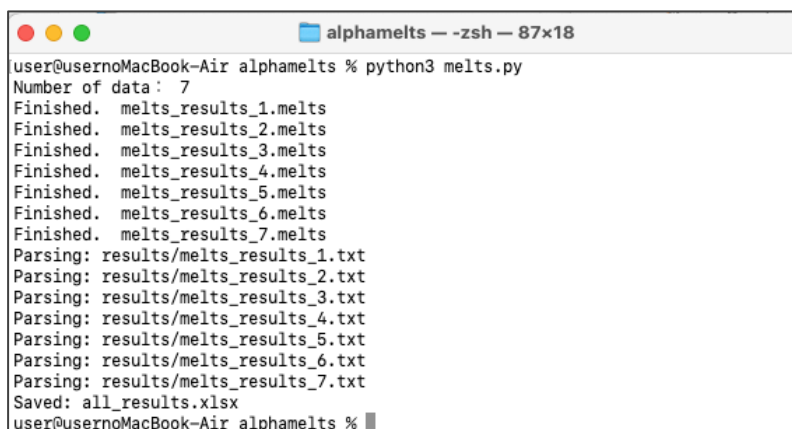
```
melts_liquidus.py
melts_liquidus.py } No Selection
1 import pandas as pd
2 import os
3 import re
4 import shutil
5 import run_alphamelts
6 from pathlib import Path
7 from glob import glob #resultsフォルダ内の結果ファイルのソート
8
9 # MELTS version
10 # 1 : rhyolite-MELTS (v. 1.0.2)
11 # 2 : rhyolite-MELTS (public release v 1.1.0)
12 # 3 : hyolite-MELTS (public release v 1.2.0)
13 # 4 : pMELTS (public release v 5.6.1)
14 version = 4
15
16 folder = "results"
17 datafile = "datafile.xlsx"
```

なお、windows 版の alphaMELTS を使用するときは、run_alphamelts.py の下記の 53 行目の「alphamelts_macos」を書き換える。
child = pexpect.spawn("./alphamelts_macos", encoding="utf-8", timeout=300)

6. 計算の実行

ターミナルを開いて python3 melts_liquidus.py

「datafile.xlsx」に入力した計算条件を順番に読み込み、リキダス温度を計算したのち計算結果を「all_results.xlsx」というファイルにまとめて出力します。



```
alphamelts - zsh - 87x18
user@usernoMacBook-Air alphamelts % python3 melts.py
Number of data: 7
Finished. melts_results_1.melts
Finished. melts_results_2.melts
Finished. melts_results_3.melts
Finished. melts_results_4.melts
Finished. melts_results_5.melts
Finished. melts_results_6.melts
Finished. melts_results_7.melts
Parsing: results/melts_results_1.txt
Parsing: results/melts_results_2.txt
Parsing: results/melts_results_3.txt
Parsing: results/melts_results_4.txt
Parsing: results/melts_results_5.txt
Parsing: results/melts_results_6.txt
Parsing: results/melts_results_7.txt
Saved: all_results.xlsx
user@usernoMacBook-Air alphamelts %
```

7. 計算結果の確認

「all_results.xlsx」を EXCEL で開いて計算結果を確認する。

[illegible]