

Любое геологическое тематическое исследование, либо площадное, либо объектно-ориентированное, редко обходится без формирования объемных информационных массивов. Как правило, эти массивы состоят из весьма разнородных данных, важную часть которых составляет аналитическая информация, в частности сведения о вещественном составе горных пород и слагающих их минералах. Грамотно построенный, правильно систематизированный и постоянно пополняемый информационно-аналитический массив часто является залогом успешных многолетних исследований.

Базовым элементом любых геохимических информационно-аналитических массивов являются химические анализы горных пород и минералов, слагающих эти породы. Эта первичная информация, получаемая с помощью различных аналитических методов, увязывается с данными о местонахождении источников аналитических проб, их геологическими и петрографическими описаниями, временными характеристиками и т.п. Именно такие связи формируют из простого набора химических анализов структурированный и логически обоснованный информационный массив, в котором можно производить поиск по заданным параметрам, создавать типологические выборки и строить объектно-ориентированные модели.

При больших количествах аналитического материала структурировать и систематизировать его вручную является весьма трудоемким занятием. Наиболее логичным выходом из подобной ситуации является создание и ведение компьютерных баз данных анализов, обеспечивающих быстрый поиск, сортировку и создание выборок. Однако простыми однотабличными базами данных тут не обойтись. При создании объектно-ориентированных иерархических геоинформационно-аналитических массивов неизбежно потребуется конструирование многотабличных баз данных с перекрестными ссылками, подстановками и развитым механизмом

SQL-запросов для оперативного поиска данных и создания выборок. В дополнение к этому добавляется потребность подвергать исходные данные математической обработке, вычислять массу производных параметров и представлять полученные результаты в графической форме – в виде различных диаграмм, графиков и т.п. Все это приводит к необходимости писать программные модули и макросы к создаваемым базам данных, создавать и настраивать отдельные формы графических представлений, разрабатывать и внедрять алгоритмы математической обработки данных. В совокупности эти задачи могут оказаться слишком сложными для рядового пользователя и далеко не всем по силам.

Именно поэтому разработка специализированного программного обеспечения для создания подобного рода информационных массивов на сегодняшний день является актуальной задачей. Коммерческие ГИС-пакеты типа GeoMine, использующиеся в горнодобывающей промышленности, слишком дороги, громоздки и явно избыточны для научных академических исследований, а список доступного программного обеспечения, подходящего для решения подобного рода задач, весьма невелик. Наиболее часто используются коммерческие программы NewPet, IgPet, MinPet и WinRock. Также известную популярность получили бесплатные пакеты GCDkit и Petrograph [2]. Однако часть из них уже устарела и более не поддерживается разработчиками, часть ограничена только аналитикой горных пород, чаще всего вулканических и интрузивных, и практически все они создают в качестве выходных файлов в лучшем случае однотабличные базы данных, а обычно – структурированные текстовые файлы, чего явно недостаточно для создания иерархических объектно-ориентированных информационных массивов.

Исходя из вышеизложенных соображений, автором была предпринята попытка создания специализированного программного обеспечения для создания и пополнения геохимических

информационных массивов в процессе тематических исследований. Эта программа получила название PetroExplorer [1].

История развития PetroExplorer

Эта программа создавалась для собственных нужд и изначально была реализована в виде Excel-таблицы, которая была способна рассчитывать формульные коэффициенты минералов основных породобразующих групп (гранаты, амфиболы, пироксены, полевые шпаты и слюды) по результатам микрозондовых анализов. Следует заметить, что платформа MS Excel весьма востребована для подобного рода расчетов, вдобавок она обладает эффективным графическим пакетом для построения различных диаграмм. Именно поэтому данная платформа послужила основой для таких популярных разработок, как программа PetroPlot и ее клоны – GeoPlot и GCDPlot, а также программ FORMULA, PX-NOM, CalcMin и т.п. [2]. Однако для создания объемных иерархических информационных массивов, состоящих из аналитических данных разного типа, таблицы MS Excel не очень удобны, поэтому для последующей разработки в качестве контейнера для аналитических данных была выбрана система баз данных MS Access.

Дальнейшая разработка велась в среде MS Visual Studio на языке программирования Visual Basic.NET различных редакций. Тем самым была достигнута полная совместимость программы с различными версиями NT-операционных систем Microsoft Windows (Windows XP, Windows 7-8), а также получена возможность использовать функции программной платформы MS NET Framework v.2.0 и выше. По существу, программа является управляющим модулем для пользовательских многотабличных баз данных MS Access определенной структуры, являющихся хранилищами аналитических и геоинформационных данных различных объектов.

Таким образом, программа PetroExplorer является эффективным инструментом для создания и хранения информационно-аналитических массивов геохимических данных. С ее использованием решаются задачи удобного хранения разнородной информации, а также ее систематизации и классификации в процессе выполнения конкретных тематических исследований. Программа не обладает диагностическими функциями, с ее помощью нельзя определить неизвестный минерал или горную породу. Однако с помощью PetroExplorer можно более точно и детальнее классифицировать геохимическую принадлежность минералов и пород, рассчитать их систематизирующие параметры и на основе

полученных данных определить условия и модель их происхождения.

Структура программы

Главными задачами, решаемыми с помощью PetroExplorer, являются:

- Сбор, хранение, систематизация и оптимизация аналитического материала в виде электронных баз данных.
- Использование массивов аналитической информации для расчетов геохимических и петрогенетических параметров исследуемых геологических объектов с помощью апробированных и общепринятых математических алгоритмов.
- Подготовка аналитических и расчетных данных для публикации и составления отчетных материалов.

Основными функциями программы являются возможность хранить в базе данных и рассчитывать химические анализы минералов пяти породобразующих минеральных групп – гранатов, амфиболов, пироксенов, полевых шпатов и слюд, химические анализы горных пород, а также анализы других минералов, которые можно рассчитывать на заданное количество атомов кислорода или катионов. На основе химических анализов минералов рассчитываются их кристаллохимические формулы и производится химическая классификация. Химические анализы пород рассчитываются на нормативные минералы по методу CIPW и, кроме того, одновременно вычисляются различные литохимические модули. Результаты расчетов каждого анализа также сохраняются в базе данных. Основным интегрирующим объектом является образец горной породы, который отбирается в процессе полевых исследований и который служит источником аналитических проб, взятых на различные виды анализов. Таким образом, из одного образца могут быть получены десятки и даже сотни наборов аналитических данных под различными кодовыми номерами. Привязка всех этих наборов данных к одному образцу, из которого они были получены, делает процесс систематизации данных более осмысленным и логичным. Химические составы пород и минералов, а также рассчитанные на основе результатов химических анализов минералы и параметры могут выноситься на различные треугольные и двумерные диаграммы, как стандартные, так и определяемые самим пользователем. Кроме того, программа позволяет рассчитывать термодинамические параметры (температуру и давление условий образования) различных минеральных парагенезисов.

Являясь программным модулем создания и управления специализированными базами данных,

PetroExplorer имеет несколько уровней структурирования и обработки данных, которые схематично изображены на рис. 1.

Уровень объектов определяется создаваемыми программой базами данных. Объектами могут являться либо природные геологические объекты, для которых создается информационно-аналитический массив (структурные зоны, складчатые пояса, литолого-стратиграфические подразделения, интрузивные массивы и т.п.), либо определенная площадь, на которой производилось опробование (площадь съемки, месторождение, геохимическая провинция и т.п.), либо тематическая подборка аналитических данных, собранная из различных источников, в т.ч. и из литературных. На этом уровне возможно перемещение структурированных до уровня образцов аналитических данных из одной базы в другую, а также объединение их в новой базе данных.

Более низкий уровень структурированных данных в пределах одной базы данных называется

уровнем образцов. Что такое образец? На практике в процессе полевых работ отбираются фрагменты горных пород – образцы, которые в дальнейшем служат материалом для различных видов анализов, в том числе геохимических. Это могут быть анализы химического состава горных пород, из которых состоят эти образцы, а также химические составы минералов, слагающих те или иные породы. Таким образом, образец характеризуется совокупностью анализов горных пород и минералов, объединенных общим источником происхождения. Кроме набора анализов, образец характеризуется еще географической привязкой его места отбора, в т.ч. с помощью GPS-координат, а также общим описанием. Однако эти характеристики по желанию пользователя позволяют объединять в качестве образца любые тематические подборки анализов. Например, анализы пород и минералов из одной точки наблюдения, анализы однотипных пород, либо анализы минералов из пород определенного типа и т.д. Географическая привязка

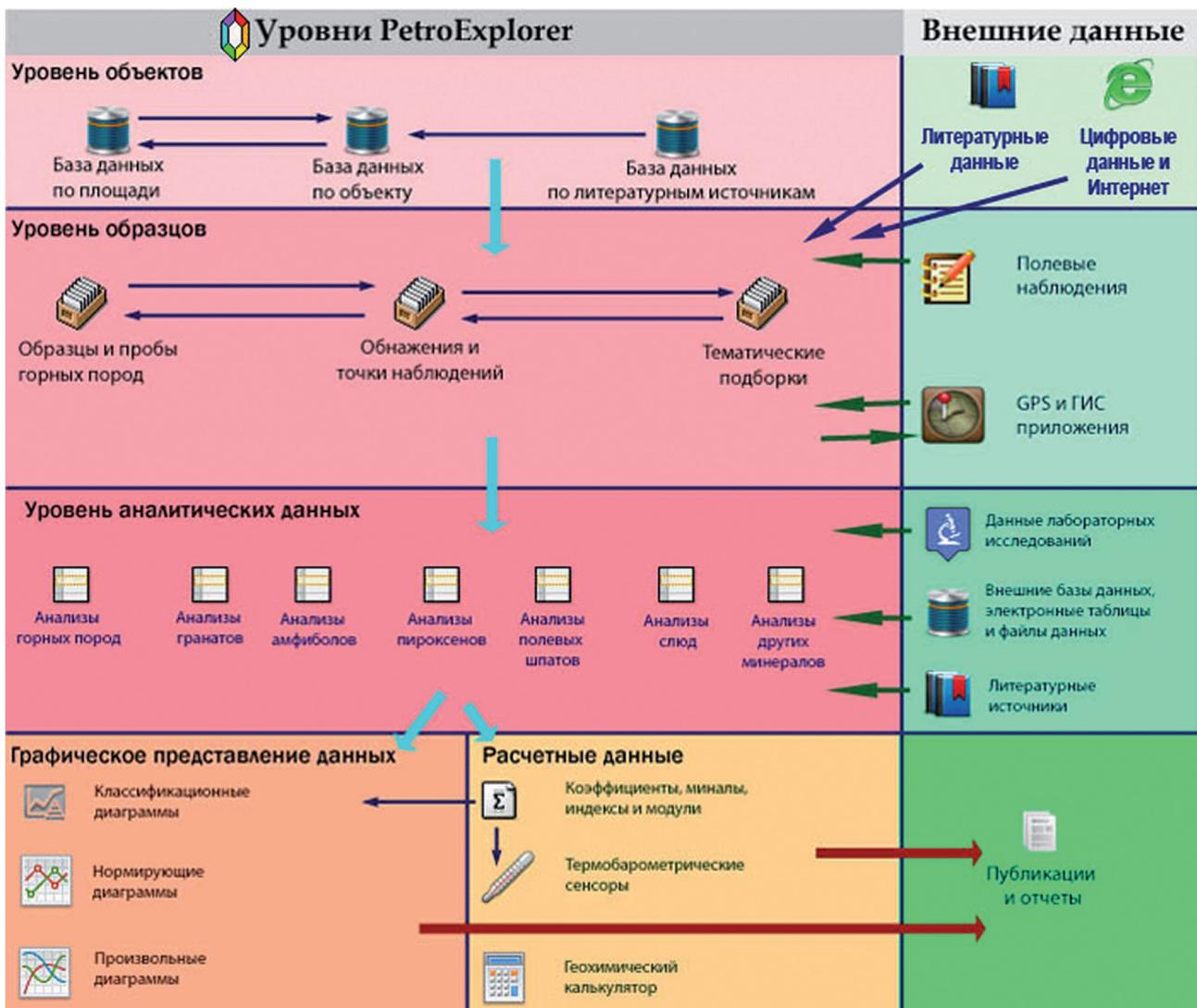


Рис. 1. Схема уровней доступа к данным программы PetroExplorer

образцов не является необходимым условием для их выделения, таким образом пользователь может в качестве образцов создавать любые тематические выборки аналитических данных.

На уровне образцов анализа пород и минералов можно перемещать и копировать из одного образца в другой. Также на уровне образцов можно определять минеральные парагенезисы для дальнейших термодинамических расчетов при помощи термо-барометрических сенсоров. В случае реального единого источника аналитических данных образца выделение таких парагенезисов будет, естественно, корректным. В случае разнородных тематических выборок анализов корректность выделения таких парагенезисов определяется пользователем.

GPS-координаты географической привязки образцов могут быть экспортированы в wpt-файлы для использования ГИС-приложениями.

Базовым уровнем аналитических данных в PetroExplorer является **уровень химических анализов**. Именно на этом уровне происходит заполнение базы данных первичной информацией, поступающей из различных источников. Это могут быть данные лабораторных исследований вещественного состава горных пород и минералов, другие базы данных, в которых содержится конкретная аналитическая информация, а также опубликованные в литературных источниках химические анализы горных пород и минералов. Эти первичные данные являются исходными для большинства расчетов, производимых программой, а также графических представлений, получаемых с ее помощью.

В общем, аналитические данные подразделяются на два типа: химические анализы горных пород и химические анализы минералов. В свою очередь химические анализы минералов подразделяются еще на несколько групп: химические анализы главных породообразующих минералов – гранатов, пироксенов, амфиболов, полевых шпатов и слюд. Кроме того, существует универсальная группа произвольных минералов, к которым относятся анализы минералов не входящих в группы породообразующих. Для каждого типа и группы анализов предназначен свой расчетный модуль и свои алгоритмы расчета различных параметров.

В соответствии с описанной выше схемой, структура пользовательских баз данных, создаваемых и использующихся программой PetroExplorer, является двутабличной. Данные (как первичные, так и вычисляемые) хранятся в виде двух связанных друг с другом таблиц – таблицы Samples (Образцы) и таблицы Composition (Анализы). Таблица Samples содержит 10 полей, таблица Composition – 167 полей.

Результаты графических представлений можно сохранять в виде графических файлов. Кроме того, в состав программы включена сервисная база данных Service.mdb, которая устанавливается в директорию программы вместе с другими компонентами. В этой базе данных хранятся параметры шаблонов диаграмм и расчетных скриптов. Эта база данных является компонентом программы и может изменяться и дополняться пользователем посредством интерфейса программы.

Многоуровневые связи и зависимости и двутабличная база для хранения данных обеспечивает минимальную иерархическую структуру формируемых информационно-аналитических массивов, что является основой для систематизации данных, поскольку иерархичность, ранжирование является базовым признаком большинства систем. В дальнейшем планируется перейти к более развитой иерархии типа: Объект → Точка наблюдения → Образец → Порода → Минерал, которая более адекватно будет отображать реальный механизм отбора аналитических проб.

Интерфейс и функциональные особенности программы

Программа обладает привычным многооконным интерфейсом и системой меню, которые легко осваиваются эмпирически, но для более ясного понимания, что и как делает программа, она снабжена встроенным справочным руководством (рис. 2).

Основными элементами интерфейса PetroExplorer являются:

- Главное окно программы,
- Окно Каталога образцов,
- Окна Расчетных модулей,
- Окна Сенсоров,
- Окно Выборки,
- Окна экспорта и импорта данных,
- Окно Конструктора диаграмм,
- Окно Классификационной Диаграммы,
- Окна шаблонов,
- Главное меню программы,
- Инструментальная панель программы.

При математической обработке аналитических данных пород и минералов применяются апробированные алгоритмы и методы. Так, для расчета формульных коэффициентов и классификации минералов в программе используются алгоритмы, одобренные Комиссией по новым минералам и названиям минералов Международной минералогической ассоциации (КНМНМ ММА). Для пересчетов химических анализов пород на нормативные минералы используется классический метод В. Кросса, Дж. Иддингса, А. Пирсона и Х. Вашингтона

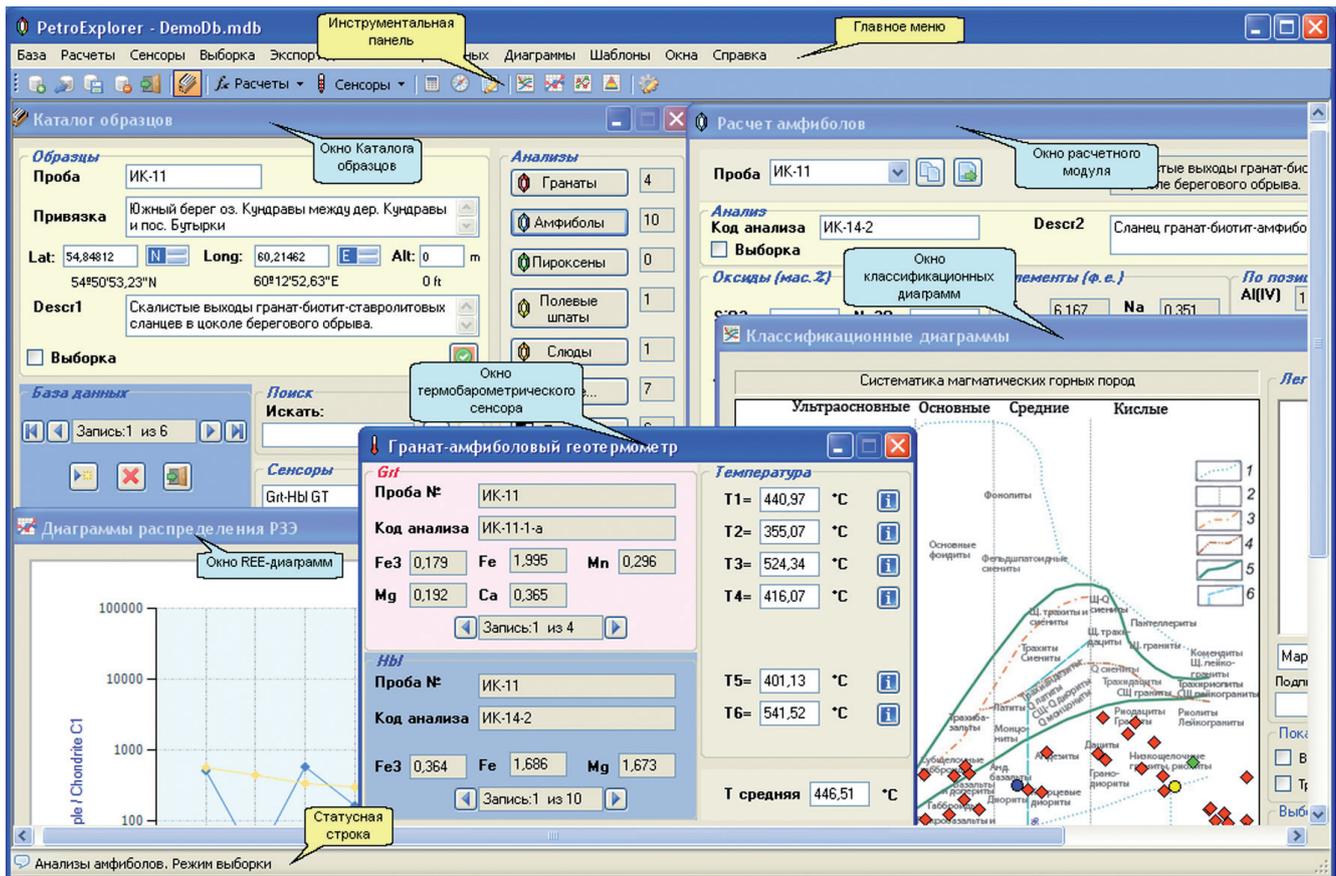


Рис. 2. Основные модули программы PetroExplorer

(CIPW). Для расчета термодинамических параметров использованы алгоритмы, применяющиеся в термодинамических программах TPF и GeoPath Института экспериментальной минералогии РАН, а также опубликованные за последние годы в различных литературных источниках.

Отличительной особенностью программы PetroExplorer является возможность для пользователей создавать и использовать собственные алгоритмы обработки данных. Пока что эти возможности реализованы при подготовке различных диаграмм с помощью механизма шаблонов. Шаблоны служат для определения параметров различных диаграмм и расчетных скриптов. С помощью соответствующих пунктов Главного меню программы могут быть вызваны редакторы этих шаблонов, посредством которых шаблоны могут редактироваться, добавляться или удаляться. Тем самым пользователям предоставлена возможность самим наращивать функциональность и специализацию программы, в зависимости от их требований. Кроме того, в состав программы включен компонент математического парсер-интерпретатора текстовой строки, который позволяет производить вычисления по введенному выражению. Все пользовательские шаблоны и скрипты

сохраняются в служебной базе данных Service.mdb, которая, являясь составным компонентом программы, никаким образом не привязана к пользовательским базам данных, а потому создаваемые шаблоны способны работать с любыми пользовательскими базами данных. Программа поставляется уже с готовыми шаблонами, но пользователь может редактировать их, удалять и добавлять собственные. На работоспособности программы это не отразится.

С помощью модуля Конструктора диаграмм пользователи имеют возможность самостоятельно строить произвольные двумерные и треугольные диаграммы с использованием собственных математических алгоритмов и выборок данных как из базы данных, так и из внешних источников.

В процессе ввода аналитических данных пользователь может выбрать графический маркер для любого анализа горной породы или минерала из встроенной коллекции маркеров. С помощью этих маркеров фигуративные точки анализов отображаются на различных диаграммах.

При построении произвольных диаграмм и в процессе создания шаблонов классификационных диаграмм можно определить фон – графическую подложку диаграммы, на которой обозначены

классификационные поля и границы этой диаграммы, а также размещены графические условные обозначения. Эти графические подложки в виде файлов формата bmp можно редактировать в любом графическом редакторе либо создавать собственные подложки по определенной методике.

Построенные диаграммы с нанесенными на них фигуративными точками анализов при необходимости можно сохранять в виде графических файлов формата jpg и в дальнейшем использовать их при подготовке публикаций и отчетных материалов.

Все это способствует гибкой функциональной настройке программы, исходя из нужд и предпочтений пользователей.

Актуальность программы и перспективы дальнейшего развития

Таким образом, программа PetroExplorer может быть актуальна для специалистов в области наук о Земле самого различного профиля. Эта программа может оказаться полезной на всех этапах обработки аналитических данных – от этапа составления кадастра образцов по данным дневниковых записей или по журналу образцов до этапа подготовки аналитических данных к публикации. Подготовленные с помощью программы массивы геохимических данных могут быть использованы для создания различного рода геоинформационных систем.

Программа разрабатывается в Институте минералогии УрО РАН как методологическое и инструментальное дополнение к многолетним исследованиям автора геологии и вещественного состава Ильменогорского метаморфического комплекса и распространяется свободно и бесплатно на принципах FreeWare лицензии.

Для поддержки и распространения программы автором был создан сайт поддержки <http://evkor.net.ru>, на котором можно загрузить новейшие версии программы, получить дополнительную информацию о ней и просмотреть серию видеоуроков по использованию этой программы.

Новейшая версия программы на момент публикации этой статьи имеет номер 3.2 и обладает русским и английским интерфейсом, включая справочное руководство.

Системные требования:

Платформа MS Windows XP, MS Windows 7-8 (32-битная и 64-битная версии). Для установки и работы программе требуются MS NET Framework v.2.0 или выше.

В дальнейшие планы разработчика входит создание Pro-версии PetroExplorer, в которой будут усилены адаптивность программы к нуждам пользователя, применена новая иерархическая модель базы данных, расширен функционал программы. Появится возможность создавать собственные наборы маркеров, создавать собственные алгоритмы расчета различных параметров, сохранять выборки в базе данных и оперативно их загружать. Увеличится количество новых диаграмм и сенсоров. Также будут модернизированы ГИС-функции программы – появится возможность наносить точки наблюдений на онлайн-карты проекта OpenStreetMap непосредственно в самой программе. Также планируется создание специального мобильного приложения на базе Android для подготовки данных для PetroExplorer уже в полевых условиях. Правда, в настоящее время распространение нового приложения не планируется, и оно разрабатывается исключительно ради собственных нужд. Как будет дальше – время покажет...

Судя по динамике загрузок дистрибутива PetroExplorer на сайте поддержки и появившимся ссылкам в публикациях, эта программа востребована среди исследователей в области наук о Земле, что не может не радовать разработчика. Однако всегда следует помнить, что никакой, даже самый совершенный и высокотехнологичный инструментарий не подменяет собой необходимость творческого осмысления полученных данных и формулирование итоговых выводов. Эта функция, как и во все времена, остается исключительной прерогативой самого исследователя.

Ключевые слова: PetroExplorer, геохимия, петрология, базы данных, информационно-аналитические массивы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кориневский Е.В. PetroExplorer – новая компьютерная программа для хранения и расчета химических анализов минералов и горных пород // VI Международная школа по наукам о Земле им. Л.Л. Перчука ISES-2010 (Одесса, 2-9 сентября 2012 г.) : тезисы докладов. – Одесса, 2010. – С. 63-66.
2. Кориневский Е.В. Компьютерный инструментарий геолога. Петрохимические программы // Минералогия Урала-2011 : сб. науч. статей : мат-лы VI Всероссийского совещания (Миасс, 22-26 августа 2011 г.). – Миасс-Екатеринбург : УрО РАН, 2011. – С. 215-220.