

На правах рукописи



Иванов Станислав Дмитриевич

**ПРИМЕНЕНИЕ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ
В ГЕОБАРОТЕРМОМЕТРИИ И СМЕЖНЫХ ЗАДАЧАХ**

Специальность:

25.00.10 — «Геофизика, геофизические методы поисков
полезных ископаемых»

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Москва — 2017

Работа выполнена в лаборатории геоинформатики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики Земли им. О.Ю. Шмидта РАН, г. Москва

Научный руководитель: **Алешин Игорь Михайлович**
кандидат физико-математических наук,
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики Земли им. О.Ю. Шмидта Российской академии наук (ИФЗ РАН), заведующий лабораторией геоинформатики

Официальные оппоненты: **Веселовский Александр Владимирович**
доктор технических наук,
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии Российской академии наук (ИГЕМ РАН), главный научный сотрудник лаборатории геоинформатики

Балтыбаев Шаукет Каимович
доктор геолого-минералогических наук,
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт геологии и геохронологии докембрия Российской академии наук (ИГГД РАН), заместитель директора по научной работе

Ведущая организация: **Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт экспериментальной минералогии Российской академии наук (ИЭМ РАН)**

Защита состоится «27» апреля 2017 г. в 14:00 на заседании диссертационного совета Д 002.001.01, при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте физики Земли им. О.Ю. Шмидта Российской академии наук (ИФЗ РАН) по адресу: 123242, г. Москва, ул. Большая Грузинская, д. 10, стр. 1, конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИФЗ РАН и на сайте института <http://www.ifz.ru/>. Автореферат размещен на официальном сайте Высшей аттестационной комиссии при министерстве образования и науки Российской Федерации <http://vak.ed.gov.ru/> и на сайте ИФЗ РАН.

Отзывы на автореферат, заверенные печатью, в 2-х экземплярах просьба направлять по адресу: 123242, г. Москва, ул. Большая Грузинская, д. 10, стр. 1, ИФЗ РАН, ученому секретарю диссертационного совета Владимиру Анатольевичу Камзолкину.

Автореферат разослан «_____» _____ 2017 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета, к.г.-м.н.



В.А. Камзолкин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования

Петролого-геохимические данные, в частности, валовые составы горных пород и составы слагающих их минералов являются важным источником данных для исследования эволюции горных пород. На сегодняшний день предложено множество методов их обработки и интерпретации. Среди них можно выделить методы предварительной обработкой данных (геохимические и минералогические пересчеты, расчет характеристических коэффициентов), их качественной обработки (дискриминационные диаграммы и т.п.) и методы получения конечных численных оценок, таких как давление и температура, на различных этапах эволюции горной породы (геотермометры и геобарометры). Эти методы широко применяются в геологических исследованиях.

Методы обработки петролого-геохимических данных являются хорошо алгоритмируемыми, а программное обеспечение, которое их реализует, представлено широким спектром решений от интегрированных программных пакетов до электронных таблиц. Можно выделить несколько классов таких программ. Это настольные приложения и электронные таблицы для расчетов, связанных с валовым составом горных пород, минералогическими пересчетами, идентификацией минералов и решения задач геобаротермометрии.

Несмотря на разнообразие существующих программ для обработки петролого-геохимических данных, можно выделить некоторые проблемы, присущие в большей или меньшей степени всем им. В первую очередь, это недостаток справочной информации о методах, которая предоставляется пользователю. Эта информация в приложениях, реализующих многие десятки методов, например PET или TPF, ограничена литературной ссылкой, которой недостаточно для обоснованного выбора пользователем того или иного метода.

Другими проблемами является закрытость исходных кодов реализаций методов и зависимость большинства программ от платформы. Они затрудняют воспроизведение результатов и ограничивают возможности пользователей обмениваться промежуточными результатами. Среди открытых программ — коллекций методов обработки петролого-геохимических данных следует отметить GCDKit, однако и этот продукт является платформозависимым.

Еще одна проблема состоит в невозможности пополнения коллекций методов пользователями. Попытка ее решения была предпринята в

программе TRF, однако широкого распространения этот подход не получил. С появлением новых методов и выходом публикаций об уже существующих, встает вопрос об обновлении программ для актуализации информации.

Кроме того, при решении прикладных задач обработки петролого-геохимических данных встает проблема определения минерала по его химическому составу, которая на сегодняшний день недостаточно разработана.

Таким образом, **актуальным** является создание компьютерного инструмента, который позволил бы не только организовать и использовать существующее множество методов обработки петролого-геохимических данных, но и помог бы специалисту-геологу с выбором конкретного метода.

Целью работы является создание программного пакета, объединяющего в себе справочную информацию о методах обработки петролого-геохимических данных, их алгоритмы и инструменты выполнения расчетов.

Для достижения этой цели были поставлены следующие **задачи**:

1. Анализ существующих решений в области обработки петролого-геохимических данных.
2. Выбор архитектуры и платформы для реализации программного пакета, его разработка.
3. Реализация на его основе вспомогательных инструментов обработки петролого-геохимических данных.
4. Разработка системы идентификации минералов и ее интеграция с приложением.
5. Реализация инструмента выполнения расчетов в области геобарометрии.
6. Использование созданного пакета для решения прикладных задач.

Научная новизна данной работы состоит в использовании нового подхода к организации методов обработки петролого-геохимических данных и справочной информации о них в рамках единой информационной системы — веб-приложения, получившего название интерактивного реестра. Этот подход позволяет повысить информационную обеспеченность петролого-геохимических исследований, обеспечить прозрачность реализации методов, а также использовать преимущества коллективной разработки.

Методология и методы исследования. Для реализации программного пакета применялись методы объектного, структурного и событийно-ориентированного программирования с использованием языков PHP, Python и R. При организации системы использовались методы системного анализа. При создании отдельных инструментов использовались методы нечеткой логики и теории формальных языков.

Основные защищаемые положения

1. Концепция интерактивного реестра методов обработки петролого-геохимических данных позволяет организовывать и систематизировать разнородную информацию о самих данных, а также о методах и алгоритмах их обработки в рамках единой иерархической информационной системы.
2. Веб-приложение, которое объединяет в себе справочный материал, алгоритмы методов и инструменты для выполнения расчетов в геобаротермометрии и смежных задачах, реализует предложенную концепцию интерактивного реестра.
3. Проблемно-ориентированная система идентификации минералов на основе нечеткой логики, реализованная на базе интерактивного реестра, которая решает задачу определения минералов по результатам химического анализа в рамках имеющегося набора правил.

Научная значимость данной работы состоит в применении нового подхода к организации методов расчета, в рамках которого не происходит разделение описания и алгоритма метода. Кроме того, показана возможность использования методов нечеткой логики для решения задачи идентификации минералов по химическому составу.

Практическая значимость работы состоит в создании инструмента — научного веб-приложения для решения задач обработки петролого-геохимических данных. В частности, использование созданного инструмента позволило получить ценные научные результаты в работе по исследованию блыбского метаморфического комплекса Передового хребта Северного Кавказа.

Достоверность полученных результатов определяется использованием представленных в научной литературе теоретически и практически обоснованных методов обработки петролого-геохимических данных; корректность реализации методов обеспечивается тестированием.

Личный вклад автора. Основные результаты, полученные лично диссертантом в ходе выполнения работы, включают: создание концепции интерактивного реестра; разработка, реализация и отладка программного продукта, реализующего данную концепцию; наполнение реестра вручную и с помощью разработанных автором инструментов; выполнение ряда расчетов с использованием созданного приложения, в частности оценка давления пикового метаморфизма для блыбского комплекса Передового хребта Большого Кавказа.

Апробация результатов и публикации. Результаты работы были представлены в виде докладов на: Международной научной конференции Физико-химические и петрофизические исследования в науках о Земле (Москва, 2013, 2014); European Geosciences Union General Assembly (Austria, Viene, 2014); Всероссийской молодежной научно-практической школе-конференции (Шира, 2015); Конференции молодых ученых ИФЗ РАН (Москва, 2014, 2015, 2016). Всего по теме диссертации у соискателя имеется 11 публикаций, из которых 3 статьи в журналах включенных в перечень российских рецензируемых научных журналов и изданий для опубликования основных научных результатов диссертации, а также получено одно авторское свидетельство на компьютерную программу.

Исходным материалом для данной работы послужили результаты геохимических анализов, предоставленные А. Н. Кониловым (ГИН РАН), В. А. Камзолкиным (ИФЗ РАН), А. Л. Кулаковским (ИФЗ РАН), И. Д. Соболевым (ГИН РАН), И. В. Викентьевым (ГИН РАН); материалы, полученные в ходе экспедиционных работ по гранту РФФИ 16–35–00571 мол_а «Палеозойский гранитоидный магматизм Передового хребта Большого Кавказа и его связь со становлением покровной структуры блыбского комплекса»; литературные данные, а также материалы из открытых источников в сети Интернет.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и одного приложения. Объем работы составляет 113 страниц, включая 22 рисунка, 4 таблицы и 7 листингов. Список литературы содержит 131 источник, из них 106 – иностранных.

Благодарности. Автор выражает благодарность своему научному руководителю, к.ф.-м.н. И. М. Алешину (ИФЗ РАН) за терпение и поддержку на всех этапах проведения работы; А. Н. Конилову (ГИН РАН) за идею работы, предоставленные материалы, в том числе исходные коды программы TRF; к.г.-м.н. В. А. Камзолкину (ИФЗ РАН) за предоставленные материалы и ценные указания; чл.-корр. РАН Ю. А. Морозову (ИФЗ РАН) за всестороннюю помощь при подготовке работы; к.г.-м.н. А. Л. Кулаковскому (ИФЗ РАН) за предоставленные материалы и конструктивные замечания; д.ф.-м.н. А. Д. Завьялову (ИФЗ РАН) за ценные замечания на завершающих этапах работы; к.г.н. И. В. Железновой (МГУ) за творческое обсуждение работы и моральную поддержку.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обосновывается актуальность диссертационного исследования, формулируется цель и задачи работы, научная новизна, практическая и теоретическая значимость, а также формулируются положения, выносимые на защиту.

Глава 1. Компьютерные системы для обработки петролого-геохимических данных

Первая глава посвящена обзору существующих систем обработки петролого-геохимических данных. В **разделе 1.1** рассматриваются данные по валовым составам образцов и составам отдельных минералов, полученные в ходе микронзондового анализа. Эти данные представлены в виде весовых процентов оксидов, атомных весовых процентов (ppm, ppb), атомных процентов или коэффициентов формул. Рассматриваются два подхода к их обработке: качественный, который состоит в получении некоторого визуального представления данных, удобного для дальнейшей интерпретации (классификационные или дискриминационные диаграммы, спайдерграммы и т.п.) и количественный, который подразумевает получение конкретных численных оценок, в частности, методы геобаротермометрии для численной оценки давления, температуры и других условий формирования горных пород.

В следующих **разделах 1.2–1.5** рассматриваются системы для управления геохимическими данными и их качественного анализа, идентификации минералов, определения слагающих породу минералов по результатам валового анализа, системы геобаротермометрии, а также базы геохимических данных в сети Интернет. В частности, обсуждаются системы управления геохимическими данными: PetroGraph, PetroPlot, PET, а также открытая разработка GCDKit и отечественный продукт PetroExplorer. Приводится обзор и сравнение основных возможностей этих приложений. Рассматриваются системы идентификации минералов, реализованные в программах MinIdent, GemIdent и MINCALC. Указывается на ограниченность подхода к идентификации минералов, основанного на сравнении с эталонным составом. **Раздел 1.4** посвящен системам для определения слагающих породу минералов: SEDNORM, LPNORM, MODAN, и другие, а также системам, реализующие нормативные пересчеты.

В следующем разделе рассматриваются программы для решения задач геобаротермометрии, выполненные как в виде инструментов, реализующих отдельные термометры и барометры, так и в виде коллекций методов, в частности, TPF. В **разделе 1.6** обсуждаются базы петролого-геохимических данных: PetDB, NAVDAT, проект EarthChem и другие.

Выводы к главе 1 (раздел 1.7):

1. Недостатками, присущими в большей или меньшей степени всем существующим приложениям для обработки петролого-геохимических данных, являются: недостаточный объем справочной информации о методах, доступной в приложениях; закрытость их исходных кодов; зависимость от платформы; невозможность пополнения коллекций методов и развития документации; отсутствие возможности для пользователей делиться своими собственными наработками и рекомендациями по использованию методов, доступных в программах.

2. Устранение этих недостатков возможно путём разработки нового программного продукта на основе новых принципов, отличных от использующихся в рассмотренных приложениях.

Глава 2. Интерактивный реестр методов обработки петролого-геохимических данных на основе технологии вики

Вторая глава работы посвящена формулировке концепции, разработке и реализации нового программного продукта — интерактивного реестра методов обработки петролого-геохимических данных. В **разделе 2.1** формулируется и обосновывается концепция интерактивного реестра, включающая следующие тезисы:

- Информация о методах и их алгоритмы организованы в рамках единой информационной системы.
- Описание алгоритма дается на языке программирования и непосредственно используется для вычислений.
- Использование алгоритмов возможно вне реестра.
- Реестр доступен для внесения изменений пользователями.

Раздел 2.2 посвящен выбору архитектуры для создания реестра и его реализации. Сравнивается традиционный подход к созданию и документированию библиотек алгоритмов, более современный подход на основе генераторов документации в сочетании с системами управления версиями и использование технологии вики для совместной работы над

материалами. Результатом сравнения различных подходов к построению реестра стал выбор технологии вики (от гав. *wiki* — «быстрый», предложенная в 2001 году Уордом Каннингемом и Бо Леуфом технология, позволяющая пользователям веб-сайта самостоятельно редактировать его содержание инструментами, предоставляемыми самим сайтом).

Особенности технологии вики рассмотрены в **подразделе 2.2.1**. Вики являются специальным типом систем управления содержанием (CMS) веб-сайтов, которые, в отличие от традиционных CMS, имеют общий интерфейс для пользователей и редакторов и ориентированы на привлечение пользователей к созданию материалов сайта (см. рис. 1).

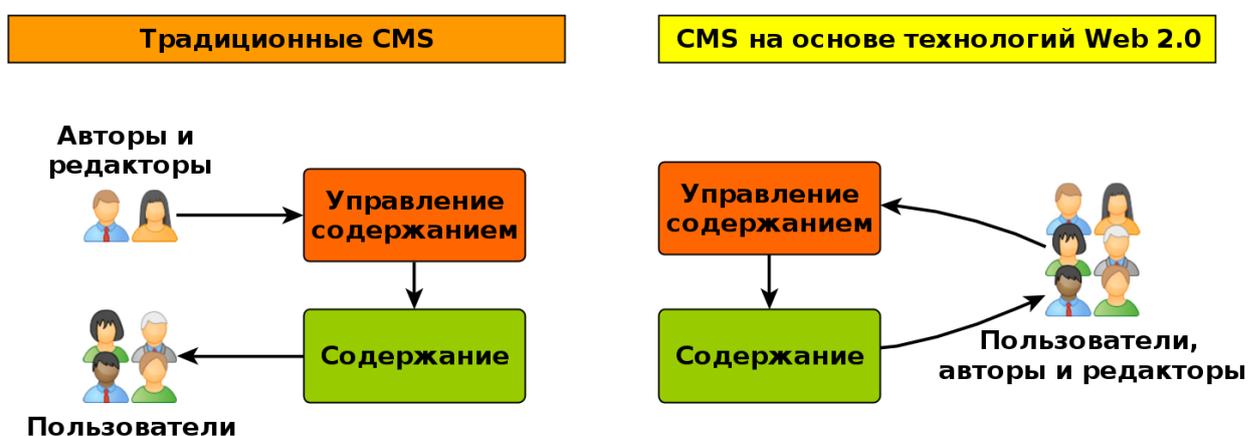


Рис. 1. Два различных подхода к организации систем управления содержанием (CMS) веб-сайтов. Слева представлены традиционные CMS, справа — CMS на основе технологий Web 2.0 и в частности вики

- Чертами вики-систем, интересными в рамках данной работы, являются:
- Возможность многократно редактировать материалы сайта с помощью встроенных в него инструментов без применения стороннего программного обеспечения. Проявление изменений сразу после их внесения.
 - Контроль версий материалов: возможность сравнения редакций, просмотра и восстановления ранних версий.
 - Специальный язык разметки — так называемая «вики-разметка», позволяющая сравнительно легко оформлять отдельные структурные элементы материала.
 - Пространства имен — механизм иерархической организации содержимого вики.

Эти черты позволяют использовать систему на основе вики для хранения и организации всей информации о методах в рамках реестра.

В **подразделе 2.2.2** определяются функции, которые планируется передать вики, в частности:

- хранение описаний и алгоритмов методов;
- их редактирование и управление версиями;
- навигация и поиск по материалам;
- авторизация и управление пользователями.

Рассматриваются существующие вики-системы в контексте платформы для построения реестра. Формулируются следующие требования к платформе: она должна являться свободным программным обеспечением; не должна быть частью более крупного продукта, возможности которого не будут задействованы в реестре; должна иметь интерфейс для подключения модулей расширения (плагинов) и поддерживаться активным сообществом разработчиков. Заданным требованиям соответствуют системы MediaWiki и DokuWiki, однако ввиду более простой архитектуры выбор делается в пользу системы DokuWiki.

Подраздел 2.2.3 посвящен реализации различных механизмов реестра на базе выбранной вики-системы. Описывается организация методов обработки петролого-геохимических данных с помощью механизма пространств имен, шаблон страницы метода, а также соглашение по именованию страниц. Шаблон выполнен с использованием вики-разметки и включает название метода, его краткое описание, формальные поля, развернутое описание метода и его исходный код (листинг 1). Таким образом, на одной странице размещается вся необходимая справочная информация о методе и его алгоритм.

В следующем **подразделе 2.2.4** описывается механизм работы с библиографией. Для организации библиографии в реестре используется выделенное пространство имен. Приводится шаблон страницы библиографической записи. Специально разработанный плагин к системе DokuWiki, обеспечивает обработку библиографических записей в формате BibTex.

В **разделе 2.3** рассматривается реализация функций, отсутствующих в вики, но необходимых для работы реестра: возможность пользователей управлять собственными данными и использовать имеющиеся в реестре методы для выполнения расчетов. Для обеспечения этих возможностей был

```

1  ===== [Заголовок страницы] =====
2
3  [Краткое описание метода]
4
5  === [Подробнее] ===
6
7  ^ [Ссылка] | [Библиографическая ссылка] |
8  ^ [Поле] | [Значение] |
9  ^ [Поле] | [Значение] |
10
11 [Ссылки для использования данного метода]
12
13 [Подробное описание метода]
14
15 [Информация о состоянии страницы]
16
17 [Дополнительная информация о методе]
18
19 === [Исходный код] ===
20
21 <Code>
22 sensors.t.[Имя сенсора] ← function([Список минералов],
23                                     [Список параметров], ...){
24     [Исходный код метода]
25     return([Возвращаемое значение]);
26 }
27
28 sensors.t.[Имя сенсора].args ← function(){
29     ars ← list();
30     ars$minerals ← [Список минералов];
31     ars$ranges ← [Список параметров];
32     return(ars);
33 }
34
35 sensors.t.[Имя сенсора].test ← function(){
36     result ← sensors.t.[Имя сенсора]([Тестовые данные]);
37     expect_equal(result, [Эталонный результат]);
38 }
39 </Code>

```

Лист 1. Шаблон страницы метода геобаротермометрии в интерактивном реестре. Текст в квадратных скобках означает подстановку соответствующего значения в данное поле

разработан специальный промежуточный REST сервер. Для его интеграции с DokuWiki создан специальный плагин. Общая архитектура разработанной системы представлена на рисунке 2. Обсуждается интерфейс сервера и возлагаемые на него дополнительные функции: управление доступом к вычислениям с использованием реестра и получение актуального исходного кода методов со страниц вики. Сервер сделан модульным для обеспечения легкого расширения его возможностей. Рассматривается инфраструктура, необходимая для запуска связки из DokuWiki и промежуточного сервера, которая включает актуальную версию операционной системы GNU/Linux, актуальные версии HTTP сервера Apache2 и интерпретаторов PHP, Python3.

Учитывая разнородность пользовательских данных, для работы с ними предлагается использовать интерфейс файлового менеджера. При этом каждому пользователю выделяется свой каталог для хранения исходных данных и получаемых результатов. **Подраздел 2.3.1** посвящен разработанному для этого плагину к DokuWiki, который обеспечивает бесшовную интеграцию со свободным файловым менеджером elFinder. Также в этом подразделе рассматривается преобразование форматов табличных файлов, которое выполняется специальным модулем промежуточного сервера по запросу из файлового менеджера.

В **подразделе 2.3.2** обсуждается выбор языка программирования для описания методов. Для этого формулируются ряд критериев: открытость, переносимость, распространенность, наличие хорошей документации и активного сообщества разработчиков, а также относительно простой синтаксис и возможность встраивания в сторонние приложения для эффективной интеграции с реестром. Кроме того, язык должен обеспечивать удобство работы с табличными данными.

Среди наиболее популярных языков программирования лучше всего указанным требованиям соответствуют языки R и Python. В результате их сравнения делается выбор в пользу языка программирования R. В качестве механизма встраивания предлагается использовать специализированный сервер для выполнения расчетов на языке R — RServe.

В следующем **подразделе 2.3.3** описывается организация программного интерфейса методов, позволяющая обеспечить их взаимодействие с реестром. Обсуждается соглашение по именованию методов. Отмечается, что различные модули реестра могут предъявлять специфические требования

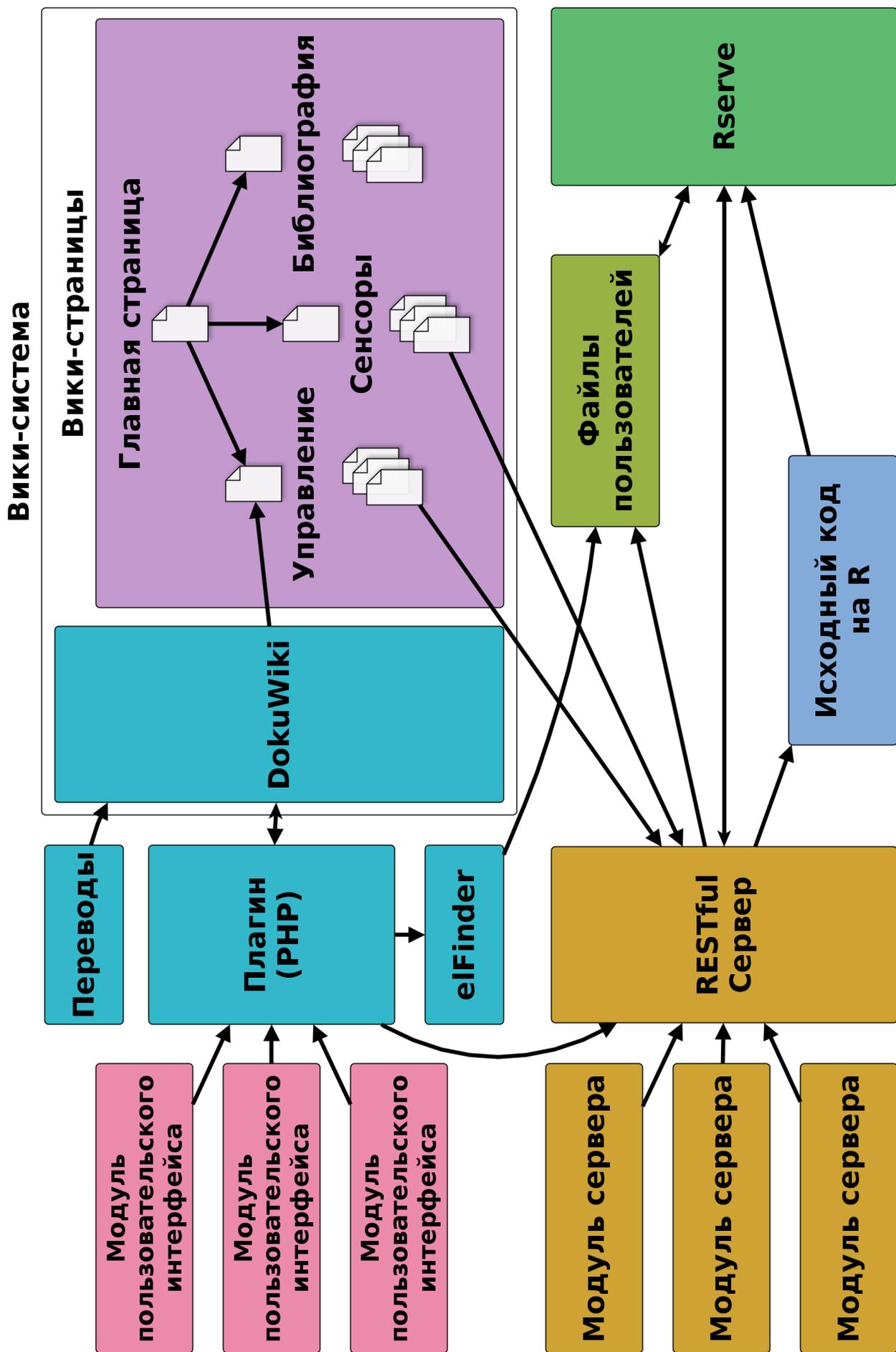


Рис. 2. Общая архитектура интерактивного реестра

к способам передачи аргументов и возвращаемому значению. Приводится пример оформления исходного кода метода геобаротермометрии. Обсуждаются правила именования столбцов табличных данных, применяемые в реестре, вводимые для однозначной интерпретации исходных данных (**подраздел 2.3.4**).

Подраздел 2.3.5 посвящен управлению методами с помощью создания и редактирования страниц вики, а также механизм управления правами на правку страниц на основе списков контроля доступа (ACL). Далее в **подразделе 2.3.6** обсуждается обеспечение безопасности интерактивного реестра в связи с возможностью выполнения произвольного кода. Предлагаются следующие меры безопасности: исполнение пользовательского кода производится только на сервере Rserve, запущенном в изолированном окружении с помощью механизма AppArmor. Кроме того, для каждого запроса на расчет Rserve создает выделенный контекст исполнения который, уничтожается после его завершения.

Пользовательскому интерфейсу выполнения расчетов в реестре посвящен **подраздел 2.3.7**. Специально разработанные модули пользовательского интерфейса встраиваются в выбранные страницы вики (например, рис. 3), обеспечивая выбор метода расчета, исходных данных, запуск вычислений и сохранение результатов в каталоге пользователя. Поддержке локализации посвящен следующий **подраздел 2.3.8**. Учитывая сложность поддержки вики на нескольких языках, было принято следующие решение: информация о методах в системе размещается на языке оригинала статьи или на английском, в то время, как язык интерфейса самой системы и модулей может переключаться. На данный момент реестром поддерживаются русский и английский языки.

Раздел 2.4 посвящен вспомогательным инструментам, используемым при обработке петролого-геохимических данных и их реализации в реестре. Хотя замена специализированных приложений для создания научной графики не входит в число задач интерактивного реестра, возможность быстро выполнить визуализацию данных является полезной для пользователя. В **подразделе 2.4.1** рассматриваются базовые средства для построения диаграмм, гистограмм и тригонограмм. Для анализа многопараметрических данных о составе горных пород и минералов, была добавлена возможность построения диаграмм Эндрюса.

Специализированные инструменты, предназначенные для визуализации петролого-геохимических данных, обсуждаются в **подразделе 2.4.2**. К ним относятся дискриминационные диаграммы и спайдерграммы. Интеграция этих средств с реестром рассматривается в **подразделе 2.4.3**. Для их реализации на базе реестра были созданы соответствующие модули пользовательского интерфейса и сервера. Ввиду разнообразия специальных методов визуализации данных и в соответствии с концепцией интерактивного реестра, исходные коды методов были размещены на страницах вики в выделенном пространстве имен. Рассматривается программный интерфейс таких методов. Для построения графиков модули используют библиотеку R ggplot2.

Раздел 2.5 посвящен возможности использования методов, входящих в реестр, в виде отдельной библиотеки. Одним из направлений критики веб-приложений является высокая зависимость пользователей от доступности серверов разработчиков и наличия подключения к сети Интернет. Предусмотренная в реестре возможность использования методов, входящих

Минералогические пересчеты

Метод пересчета: Grt: Пересчет для гранатов по Тиндле [Подробнее](#)

Описание:
Метод расчета на 12 атомов кислорода для гранатов.

Набор данных: old/224-5-Grt All

Норма элемента (если требуется): 12

Результаты

	Name	Si_pfu	Ti_pfu	Al_pfu	Cr_pfu	Fe_p3_pfu	Fe_p2_pfu	Mn_pfu	Mg_pfu	Ni_pfu	Zn_pfu	Ca_pfu	Fe_pfu
1	Grt1a	2.995	0.000	1.957	0.000	0.040	1.906	0.070	0.455	0.000	0.000	0.584	1.946
2	Grt1b	2.991	0.000	1.960	0.000	0.041	1.856	0.075	0.547	0.000	0.000	0.539	1.897
3	Grt5a	2.976	0.000	1.964	0.000	0.050	1.911	0.070	0.478	0.000	0.000	0.568	1.961
4	Grt7a	2.995	0.000	1.959	0.000	0.037	1.940	0.074	0.432	0.000	0.000	0.568	1.977
5	Grt7b	3.017	0.000	1.950	0.000	0.028	1.888	0.072	0.498	0.000	0.000	0.542	1.916

Рис. 3. Пользовательский интерфейс модуля минералогических пересчетов — одного из модулей интерактивного реестра

в него, в виде самостоятельной библиотеки позволяет частично снять эту проблему.

Выводы к главе 2 (раздел 2.6):

1. Предложена и обоснована концепция интерактивного реестра — нового формата научного веб-приложения, позволяющего организовать большое количество однотипных методов обработки петролого-геохимических данных и справочную информацию о них в рамках единой информационной системы.

2. Показана возможность реализации интерактивного реестра с использованием технологии вики. Ее использование позволяет привлечь пользователей к участию в развитии реестра.

3. Разработаны необходимые вспомогательные компоненты, обеспечивающие выполнение расчетов с использованием имеющихся в реестре методов. Используемая модульная архитектура позволяет при необходимости легко добавлять новые категории методов.

4. Применение предложенной концепции возможно не только в области обработки петролого-геохимических данных, но и в других предметных областях, которые характеризуются большим количеством однородных с точки зрения входных данных методов и необходимостью обеспечения пользователя информационной поддержкой при их выборе и использовании.

Глава 3. Интерактивный реестр методов геобаротермометрии

Третья глава посвящена реализации методов геотермобарометрии или геосенсоров (геотермометров, геобарометров, фугометров и т.д.) в интерактивном реестре. Приводится формальное описание геосенсора (**раздел 3.1**). Выделяются три этапа расчета: переход к коэффициентам формул, расчет дополнительных величин, таких как щелочность или магнизиальность, и получение искомого значения. В связи с этим предлагается разделение расчета на три этапа и определяется программный интерфейс для реализующих их функций.

Размещению методов в реестре посвящен **раздел 3.2**. В соответствии с концепцией интерактивного реестра, для хранения информации о геосенсорах было выделено несколько пространств имен, а для каждого метода в соответствующем пространстве имен создается отдельная страница. Рассматриваются требования к дополнительной информации о сенсоре, необходимой пользователю при его выборе: библиографическая ссылка;

информация о минеральной ассоциации; точность метода; пределы входных и выходных значений; информация о наборе данных, на которых выполнялась калибровка; особые указания по использованию сенсора. Для выполнения расчетов и использования геосенсоров были разработаны соответствующие модули пользовательского интерфейса и сервера.

В следующем **разделе 3.3** рассматриваются рекомендации по наполнению реестра методами, в частности, предлагается использование парадигмы разработки через тестирование (TDD) для снижения вероятности возникновения ошибок при реализации методов. Также указывается на то, что информация, представленная в первоисточнике метода, может быть не полна, поэтому для создания полноценной страницы сенсора может потребоваться дополнительное ознакомление с литературой и получение консультации специалиста.

Подраздел 3.3.1 посвящен импорту базы сенсоров программы TPF. Описывается формальный язык который используется в ней для записи сенсоров. Чтобы импортировать в реестр доступные в программе TPF методы, была создана специальная программа, выполняющая трансляцию формального языка TPF на язык R. Результатом ее работы стал набор страниц описания сенсоров, включающих, помимо кода сенсора, необходимые структурные элементы и подготовленные поля для вставки дополнительных сведений о сенсоре. Созданные страницы были добавлены в интерактивный реестр. Методы минералогических пересчетов, используемые в TPF, были включены в реестр в виде набора функций. Таким образом, геосенсоры, представленные в этой программе, стали непосредственно доступны в интерактивном реестре.

В **разделе 3.4** приводится пример использования данной системы для оценки пикового давления метаморфизма блыбского комплекса Передового хребта Большого Кавказа методами фенгитовой мономинеральной барометрии. Для глубокометаморфизованных комплексов может фиксироваться неоднократное проявление метаморфических процессов, что затрудняет выделение равновесных минеральных ассоциаций в породе. В частности, эта проблема существует для гнейсов блыбского метаморфического комплекса, что не позволяет использовать распространенные геобарометры. Поэтому целесообразным представляется использование мономинеральной барометрии.

Область применимости существующих мономинеральных фенгитовых сенсоров ограничена сверху величиной давления в 5-7 Кбар. С использованием интерактивного реестра была выполнена оценка применимости существующих барометров для давления более 12 Кбар с использованием обширного набора литературных источников.

Калибровка нового фенгитового барометра, его добавление в реестр и дальнейшее использование позволило получить минимальную оценку пикового давления (18 Кбар), которая является дополнительным аргументом в пользу метаморфической когерентности данного комплекса.

Выводы к главе 3 (раздел 3.5):

1. Формализация геосенсора в виде функций от определенного набора аргументов делает возможным добавление методов геобаротермометрии в интерактивный реестр.

2. Реестр может быть использован в качестве технической базы для сравнения и обсуждения различных методов обработки петролого-геохимических данных, а также их взаимной верификации и составления коллекций методов.

3. Наполнение реестра связано с рядом сложностей. Так, не все статьи, посвященные тем или иным методам геобаротермометрии, содержат весь объем информации, необходимой для воспроизведения метода в виде исходного кода. Тем не менее, в ходе работы с дополнительными литературными источниками, возможно точное воссоздание алгоритма метода и получение необходимых тестовых данных.

4. Реестр был успешно использован для сравнения нескольких мономинеральных фенгитовых барометров и получения новых оценок давления для гнейсов и сланцев блыбского метаморфического комплекса Передового хребта Большого Кавказа.

Глава 4. Система идентификации минералов по результатам химического анализа

Еще одной задачей, связанной с обработкой петролого-геохимических данных, реализованной на базе интерактивного реестра, стала идентификация минералов по результатам химического анализа. К информации о минеральном составе образцов предъявляются высокие требования в задачах геобаротермометрии, кроме того, некоторые геосенсоры накладывают дополнительные ограничения на химический состав минералов.

Поэтому возможность идентификации и контроля минерального состава образцов после проведения микронзондового анализа является полезной. Для идентификации минералов в данной работе предлагается подход, основанный на задании ограничений на состав минерала и использовании нечеткой логики для оценки соответствия между данным составом и заданными наборами ограничений.

Раздел 4.1 посвящен формализации задачи в рамках терминов нечеткой логики. Вводится три типа ограничений: на содержание отдельных элементов и групп, на содержание примесей и на порядок в группах замещения. Для каждого из типов ограничений приводятся соответствующие функции принадлежности. Для оценки степени соответствия между набором ограничений, описывающих минерал, и данным химическим составом вводится результирующая функция. Она имеет вид логического умножения всех функций принадлежности, полученных из набора ограничений для данного минерала. Ограничения записываются на специально созданном формальном языке (листинг 2). Такой способ записи понятен пользователю и в то же время может быть непосредственно использован программой.

В **разделе 4.1.1** рассматривается выбор параметров для системы идентификации: пороговое значение результирующей функции, параметр β (коэффициент наклона сторон трапеции в ограничениях на содержание элементов) и параметр τ определяющий вес ограничений на порядок следования. Для этого из используемого набора геохимических данных были выделены минералы, наиболее широко представленные в нем (гранат, плагиоклаз и биотит). Для этих минералов были составлены вручную

```
1 | mineral: Bt
2 | name: Biotite
3 | id: Dana,71.02.02b
4 | formula: K(Mg,Fe,Mn,Al,Ti)3 Al (AlSi) OSi211 + (H2O,F)
5 | norm: 0,12
6 | rule: K=1
7 | rule: Mg,Fe,Mn,Al,Ti = 3~7
8 | rule: Al = 1~5
9 | rule: Fe,Mg,Mn,Ti = 0~3
10 | rule: Si = 2~4
11 | elements: O,K,Mg,Mn,Fe,Ti,Al,Si
```

Лист. 2. *Пример набора ограничения для состава биотита*

наборы ограничений, после чего разработанная система была применена к ним с различными параметрами для обоснованного выбора из значений. Наименования минералов, полученные системой, сопоставлялись с экспертными определениями. При этом оценивалась доля ложноположительных и ложноотрицательных результатов. Итогом подбора параметров является выбор значения 0,88 в качестве порогового для результирующей функции, а параметр β был выбран равным 0,5. Так как порядок следования элементов является наименее существенным из всех типов ограничений, значение τ было выбрано равным 0,1.

Программная реализация системы идентификации минералов обсуждается в **разделе 4.2**. Построчный разбор файлов, содержащих ограничения, недостаточно эффективен при обработке большого числа определяемых минералов (тысячи и десятки тысяч). Для решения этой проблемы был использован механизм трансляции с языка ограничений в исходный код на языке C++. Полученный исходный код собирается компилятором в исполняемый модуль, получающий данные на стандартный ввод и выдающий на стандартный вывод полученные результаты и дополнительную информацию, которая может быть использована для отладки наборов ограничений.

Ручное составление правил является трудоемкой задачей, поэтому актуальным становится создание инструмента для автоматической генерации правил на основе кристаллохимических формул минералов, представленных в литературе, чему посвящен **раздел 4.3**. Для решения этой задачи была разработана программа, принимающая кристаллохимические формулы минералов и генерирующая ограничения для них. Однозначное преобразование формулы в набор ограничений как правило возможно, однако способ записи формулы в справочниках может быть недостаточно формальным. Кроме того, проблемой является правильный подсчет числа количества атомов кислорода в формуле, содержащей несколько групп анионов. Еще одна проблема состоит в том, что справочники, как правило, содержат формулы конечных членов непрерывных изоморфных рядов. Несмотря на успешную обработку большого количества формул (получен в общей сложности 1791 набор ограничений), для многих пороодообразующих минералов наборы ограничений пока могут создаваться только вручную.

В разделе 4.4 рассматривается интеграция системы идентификации с интерактивным реестром. Для этого были разработаны соответствующие модули сервера и пользовательского интерфейса. В соответствии с принципами построения реестра наборы ограничений объединяются в коллекции. Для каждой коллекции выделяется отдельная страница в реестре. Подобный подход позволяет создавать как универсальные коллекции, так и специальные, предназначенные для решения конкретных задач, таких как, например, отбор составов для дальнейшего использования в геобаротермометрии.

В разделе 4.5 приводятся примеры использования системы идентификации минералов. Для апробации системы она была применена ко всему используемому набору геохимических данных. Для всех минералов и твердых растворов, представленных в наборе (более 30), были вручную заданы соответствующие ограничения. Количество успешных определений при этом составило 91%.

Кроме того, система была применена для отбора исходных данных в работе, посвященной фенгитовой барометрии. Был создан набор ограничений для выделения фенгита из непрерывного мусковит-селадонитового ряда. С его помощью был выполнен отбор проб для использования при оценке давления пикового метаморфизма блыбского комплекса.

Выводы к главе 4 (раздел 4.6):

1. Разработана система идентификации минералов по химическому составу на основе нечеткой логики. На созданное приложение получено авторское свидетельство.

2. Применение системы к используемому набору геохимических данных позволило добиться высокого процента успешных определений, что свидетельствует об эффективности данного подхода.

3. Предпринятая попытка автоматической генерации правил по кристаллохимическим формулам, представленным в литературе, позволила получить большое количество наборов ограничений. Однако форма записи этих формул в справочной литературе затрудняет формирование этих наборов для многих порообразующих минералов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе данной работы было создано веб-приложение — реестр методов обработки петролого-геохимических данных. Его основными отличиями от существующих на сегодняшний день являются: формат веб-приложения, сравнительно новый для научных приложений; использование вики-системы в качестве платформы для построения реестра; открытость исходного кода методов и возможность для пользователей не только использовать имеющиеся методы, но и непосредственно участвовать в развитии реестра, добавляя методы и улучшая документацию к существующим.

В результате анализа существующих решений в области обработки петролого-геохимических данных был составлен обзор доступных инструментов. В него вошли приложения для организации и управления данными, построения геохимических диаграмм, идентификации минералов, геобаротермометрии и др. Были выявлены недостатки, присущие существующим инструментам.

Сформулированы основные принципы, которые легли в основу построения будущего интерактивного реестра. В качестве платформы для построения реестра была выбрана система на основе технологии вики. Ключевой технической задачей в рамках данной работы стала реализация механизма, непосредственно использующего алгоритм, находящийся на странице вики, для обработки данных. Для этого был создан промежуточный сервер, взявший на себя управление вычислениями и импорт кода из вики-системы.

На базе интерактивного реестра создано несколько модулей для решения прикладных задач. Модули минералогических пересчетов и интерпретации составов минералов предназначены для упрощения рутинных задач обработки петролого-геохимическими данными. Модуль геобаротермометрии позволяет выполнять оценки давления и температуры с использованием геосенсоров, имеющихся в реестре. Созданы модули для решения ряда задач связанных визуализации геохимических данных. Кроме того, разработана система идентификации, позволяющая выполнять определение наименований минералов по их химическому составу с помощью имеющихся в реестре наборов правил.

Использование реестра позволило получить новые научные данные в исследованиях истории метаморфической эволюции Блыбского комплекса Передового хребта Большого Кавказа.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Публикации в журналах, включенных в перечень российских рецензируемых научных журналов и изданий для опубликования основных научных результатов диссертации

1. Камзолкин В.А., **Иванов С.Д.**, Конилов А.Н. Эмпирический фенгитовый геобарометр: Обоснование, калибровка и применение // Записки Российского Минералогического Общества, 2015. Т. 144. № 5. С. 1–14.
2. **Иванов С.Д.** Интерактивный реестр геосенсоров на основе веб-приложения // Компьютерные исследования и моделирование, 2016. Т. 8. № 5. С. 621–632.
3. **Иванов С.Д.** Метод идентификации минералов по химическому составу на основе нечеткой логики // Геофизические исследования, 2016. Т. 17, № 4. С. 47–56.

Авторские свидетельства

4. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016616340 Российская Федерация. Программа для идентификации минералов по химическому составу на основе нечеткой логики / **С.Д. Иванов**; заявитель и правообладатель ИФЗ РАН. — № 2016613557; заявл. 13.04.2016; опубл. 09.05.2016.

Публикации в сборниках и материалах конференций

5. Камзолкин В.А., **Иванов С.Д.**, Конилов А.Н. Некоторые результаты анализа зависимости состава белых слюд (фенгита) от РТ-условий их формирования // Физико-химические и петрофизические исследования в науках о Земле. Материалы XIV международной конференции. М.: ГЕОХИ РАН, 2013. С. 123–126.
6. **Иванов С.Д.** Экспертная система определения минералов по результатам микрозондовых анализов // Конференция молодых ученых ИФЗ РАН. М.: ИФЗ РАН, 2014.
7. **Иванов С.Д.** Современная платформа для обработки результатов геохимических анализов // Физико-химические и петрофизические исследования в науках о Земле. М.: ГЕОХИ РАН, 2014. С. 92–94.
8. **Иванов С.Д.** Интерактивная база методов петрохимической обработки данных на основе технологии вики на примере системы идентификации минералов // Конференция молодых ученых ИФЗ РАН. М.: ИФЗ, 2015.
9. **Иванов С.Д.** Некоторые требования к интерактивной базе методов обработки геохимических данных // Науки о Земле. Современное состояние. Материалы третьей всероссийской молодежной научно-практической школы-конференции. Шира: НГУ, 2015.
10. **Иванов С.Д.** Интерактивный реестр методов обработки петролого-геохимических данных // Конференция молодых ученых ИФЗ РАН. М.: ИФЗ РАН, 2016.
11. **Ivanov S.D.**, Kamzolkin V.A., Konilov A.N., Aleshin I.M. Chemical and mineralogical data and processing methods management system prototype with application to study of the North Caucasus Blybsky Metamorphic Complexes metamorphism PT-condition // EGU General Assembly. Viene, 2014. Vol. 16, P. 845.

Подписано в печать 20.02.2017

Объем: 1,0 усл.п.л.

Тираж 150 экз. Заказ № 1902

Отпечатано в типографии «Реглет»

125315, г. Москва, Ленинградский проспект д. 74, корп. 1

+7(495) 790-47-77 www.reglet.ru