

«УТВЕРЖДАЮ»

Директор Института экспериментальной минералогии РАН
чл.-корр. РАН, д.г.-м.н. Ю.Б. Шаповалов



10 апреля 2017 года

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт экспериментальной минералогии Российской академии
наук (ИЭМ РАН), ул. Академика Осипьяна, д.4, г. Черноголовка,
Московская область, 142432 Тел./факс: 8(496)524-44-25,
<http://www.iem.ac.ru>

Отзыв

официальной ведущей организации Федерального государственное бюджетное учреждение науки Институт экспериментальной минералогии Российской академии наук (ИЭМ РАН) на диссертационную работу Иванов Станислав Дмитриевич «Применение информационных технологий в геобаротермометрии и смежных задачах», представленную на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 25.00.10 — «Геофизика, геофизические методы поисков полезных ископаемых».

Актуальность исследований. Объект и предмет исследований.

Объем накопленной научной информации в мире взрывообразно растет, и для его восприятия и использования требуются новые технологии. В частности, в области наук о Земле каждый год открывается 50-60 минералов (при полном числе уже открытых около 4100), в различных лабораториях мира прodelываются многие тысячи анализов минералов и пород. Диссертация С.Д. Иванова посвящена решению актуальной проблемы информатизации наук о Земле. Из огромного многообразия геофизических, геоморфологических и др. задач выбраны петролого-геохимические: идентификация минералов по результатам химических анализов и оценка интенсивных параметров геологических процессов по ним, автоматизация анализа геохимических данных.

В связи с многообразием типов геологических процессов, включающих метаморфизм различных протолитов, геотермальные, осадочные, магматические, космические (процессы на других планетах), биоминералогические и др. — невозможно быть специалистом по геосенсорам во всех этих системах. Первой поставленной задачей является создание системы геосенсоров (геобарометров, геотермометров, геооксометров,

фторометров и т.д.) которая пополняется и совершенствуется исследователями авторами геосенсоров и пользователями геологами.

Второй задачей, связанной с первой, является формализация обработки первичной информации по составу минералов с их идентификацией и проведением соответствующих кристаллохимических пересчетов, необходимых для геотермобарометрии, а также графического анализа геохимической информации с использованием различных диаграмм.

В результате решения поставленных задач разработано интернет – приложение вики типа, которое представляет несомненный интерес для исследователей в области петрологии, минералогии и геохимии, а также геофизиков, имеющих дело с оценкой РТ параметров глубинных пород.

Диссертация С.Д. Иванова общим объемом 113 страниц состоит: из введения, 4 глав, заключения и включает список литературы (131 источник), 22 иллюстрации и 4 таблицы. В работе приводятся сведения об архитектуре приложения и описания отдельных модулей и функций. Иллюстрации и таблицы вполне наглядно демонстрируют структуру, принципы работы программы и диалоги пользователя с системой, а список литературы полно отражает эрудицию автора по тематике диссертации.

В главе 1.

В 1 главе С.Д.Ивановым представлен обзор программных средств для обработки петролого-геохимических данных. Им показано, что для графического представления валового состава, пересчета валового химического состава на нормативный минеральный, идентификации минералов по составу имеется достаточно большое количество приложений. Графические программы это в основном разработки зарубежных ученых (PetroGraph, PetroPlot, PET, GCDKit) и отечественный PetroExplorer. Для идентификации минералов используются программы MinIdent, GemIdent и MINCALC. Все обсужденные автором программы обладают главным недостатком – алгоритмы, формы выдачи в них фиксированы и возможность их использования некоторых из них ограничена машинной платформой. Ставится задача разработки универсальной интерактивной платформы для решения этих проблем.

Глава 2 посвящена изложению основного достижения диссертанта – создание сложной системы интегрирующей готовые средства со свободным кодом для ввода, хранения, редактирования данных, сенсоров и проведения вычислений. Алгоритмы вычислений, необходимые для оценки интенсивных параметров минерало-образования по составу фаз

запрограммированы на языке R, ориентированном на проведение статистических вычислений и работы с большими массивами данных. Манипуляции данными и работа с пользователями проводится в среде DokuWiki. Задачей диссертанта было обеспечить связки между пользовательским интерфейсом (PHP) и средой DokuWiki. Между вики-системой и вычислительным Rserver создан Restful сервер, который выполняет функции управления данными пользователя и подготовкой к вычислениям. Программный продукт назван интерактивным реестром методов обработки петролого-геохимических данных.

Помимо оценки интенсивных параметров с использованием геосенсорами предусмотрена первичная обработка петролого-геохимической информации, сводящаяся к построению различных диаграмм (вариационных, спайдерграмм и др.). Можно признать удачным выбор языка R для анализа данных, поскольку этот язык ориентирован на статистическую обработку больших массивов векторных данных. Для этого языка также написан развитый графический пакет, который позволяет создавать графики, отвечающие требованиям ведущих научных журналов.

Также удачной представляется связь пользователя с вычислительной системой на R сервере в Интернет-браузерах через интерфейсы, написанные на универсальных языках (PSP, Python). Поэтому оно действительно не зависит от платформ (работает на Windows XP, Windows 10, Linux). В качестве замечания можно отметить, что не описаны требования к браузерам. Эмпирически установлено, что реестр не функционирует на Google Chrome, FireFox старых версий. Следует также отметить, что если использование геосенсоров организовано на самом современном уровне, то в минимальный набор обработки петролого-геохимической информации не входят методы геохимического моделирования. Современные пакеты содержат методы базового геохимического моделирования фракционной кристаллизации, контаминации магмы по микроэлементам и изотопам.

Глава 3. Описано, как ввести новый сенсор (геотермо-барометр, оксометр) в разработанную систему (интерактивный реестр). При программировании алгоритма вычисления интенсивных параметров геологических систем по составу минералов на языке R предлагается использовать тестирование на предоставленном авторами сенсора материале. Для пересчета состава минералов в кристаллохимические формулы, как правило, необходимых для геосенсоров созданы соответствующие утилиты, а также модули для пользователя.

Автором разработан транслятор с языка Maple, использованного для реализации широко известной программы TPF, на язык R. В результате чего, вся TPF база данных по

геотермобарометрам была переведена в вики страницы описания и в функции для расчета на Rserver. В главе представлены результаты разработки и включения в реестр нового мономинерального фенгитового барометра. С помощью этого барометра оценены пиковые величины давления (18 кбар) при формировании блыбского метаморфического комплекса Передового хребта Большого Кавказа.

Исследователи ИЭМ РАН ввели в интерактивный реестр сенсоров соискателя разработанный новый амфиболовый геобарометр (Симакин и Шапошникова, 2012; 2017). Для этого потребовалось, с помощью С.Д. Иванова, реализовать очень компактно на языке R нетрадиционный подход определения давления по совокупности анализов минерала, а не по каждому анализу. Также, для наглядного представления результатов геобарометра, С.Д. Ивановым была написана специальная графическая утилита для нашего геобарометра. Использование Интернет приложения значительно облегчает ввод и обработку информации. К достоинствам системы можно отнести возможность создания и хранение массивов данных на сервере ИФЗ РАН. Технически ввод данных организован в более свободном формате, чем, например, в Excel приложениях, введенные данные можно использовать для оценки интенсивных параметров различными геосенсорами.

В качестве замечания отметим, что в реестре никак не представлены магматические сенсоры, основанные на равновесии минерал расплав, предложенные Путиркой (Putirka, 2008). Также в реестре отсутствуют современные мономинеральные амфиболовые геобарометры. В перенесенной базе TRF представлены амфиболовые барометры, представляющие только исторический интерес как прототипы современных. В тоже время отсутствуют наиболее широко используемые сенсоры Ридолфи (Ridolfi, 2010; 2012).

Глава 4. В заключительной главе проблема идентификации минералов по химическому составу формулируется в терминах нечеткой логики. Под этим термином понимается набор неравенств ограничивающих содержание элементов в минералах с переменным составом с использованием кристаллохимического пересчета на фиксированное число атомов кислорода. Применение этих правил не гарантирует абсолютно правильного определения минерального вида, поэтому вводится критерий качества набора правил. Приемлемой признается доля неверных решений равная 0.12. Часть правил (для граната, биотита, плагиоклаза) была составлена вручную. Поскольку число минералов велико и перебор вариантов занимает много времени, алгоритм был программно реализован на языке C++. Набор правил для большинства минералов (1791) был составлен на основе опубликованных данных по кристаллохимии минералов. Разработанные правила были

применены для выбора фенгитов из составов слюд мусковит-селадонитового ряда из публикаций, которые были использованы для калибровки фенгитового барометра.

К программной реализации алгоритмов нет замечаний. Однако, проверка показала, что все предложенные составы кальциевых амфиболов интерпретированы как пироксены с основным набором правил и никак не опознаны по минералогическим справочникам. Ошибка 100%. Очевидный дефект алгоритма для этого минерала, который, возможно связан с тем, что летучие компоненты (CO_2 , H_2O) не определяются на микрозонде. В этом случае важным параметром становится сумма весовых концентраций окислов определяемых элементов, которая, не учитывается в алгоритме. Представляется более надежными критерии, основанные на кристаллохимических пересчетах. Обычно такие алгоритмы указывают на возможные несоответствия предложенного состава заселенностям кристаллографических позиций, сумме зарядов катионов и другим критериям. Так для амфиболов существуют основанные на номенклатуре ИМА отдельные Excel таблицы для кальциевых, магниевых, щелочных амфиболов. При попытке ввести состав кальциевого амфибола не в свою таблицу, будет показана ошибка.

Диссертантом также не проработана проблема «подсветки» - влияния окружающих минералов на кажущийся состав малых зерен или точек на границе зерен. На состав минерала могут оказать влияние микровключения других фаз, в том числе флюидные микровключения. При рассмотрении совокупности многих анализов одной фазы эти эффекты можно выделить и исключить их влияние. Для определения состава минералов с простым составом, таких как силикаты и гидросиликаты кальция, более эффективным является пересчет атомных отношений Ca/Si к наиболее близкому отношению простых чисел. Все эти приемы применяются на практике исследователями экспериментаторами при анализе продуктов опытов.

В Заключении С.Д. Иванов суммирует главные результаты и выводы работы. Они соответствуют информации, приведенной в соответствующих главах работы, и отражают защищаемые положения.

Несмотря на представленные замечания, корректность и эффективность работы интерактивного реестра, изложенного в диссертации не вызывает сомнений. Полученные результаты имеют профессиональное признание, подтверждаемое авторским свидетельством и публикациями в рецензируемых журналах (рекомендуемых ВАК РФ) и докладами на отечественных и международных конференциях. Разработанное Интернет приложение будет полезно как геологам для обработки результатов изучения полевого материала, так и разработчикам геосенсоров, поскольку созданное приложение дает возможность объективной интерактивной оценки эффективности предложенных методов.

Материалы диссертационной работы С.Д. Ивановым представляют интерес как для использования в учебных курсах геоинформатики, так и в учебном процессе студентами и преподавателями.


Диссертация С.Д. Иванова в целом хорошо отражает проделанную автором работу. Отмеченные в отзыве недостатки в основном свидетельствуют о сложности решения задачи формализации методов идентификации минералов по микрозондовым химическим анализам, а также проблем кристаллохимического пересчета для минералов переменного состава с непостоянным заполнением кристаллографических позиций. Замечания не влияют на общую оценку работы.

Диссертация С.Д. Иванова является законченной научно-технической работой, завершившейся созданием запатентованного программного продукта. Работоспособность разработанных информационных технологий продемонстрирована в процессе выбора и обработки опубликованных данных по фенгиту в результате которой был откалиброван и внесен в реестр оригинальный фенгитовый мономинеральный барометр. Уровень программистской работы и защищаемых положений заслуживают высокой оценки. Автореферат соответствует содержанию диссертации и отражает логику всей работы. Диссертация «Применение информационных технологий в геобаротермометрии и смежных задачах», соответствует квалификационным требованиям Положения ВАК о присуждении ученых степеней, а её автор Станислав Дмитриевич Иванов, заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальности 25.00.10 «геофизика, геофизические методы поисков полезных ископаемых»».

ИО заведующего лабораторией термодинамики минералов
доктор физико-математических наук

 Симакин А.Г.

Заведующий лабораторией радиоэкологии
доктор геолого-минералогических наук

 Котельников А.Р.

Отзыв заслушан и одобрен в качестве официального на заседании Ученого совета ФГБУН
Института экспериментальной минералогии РАН (ИЭМ РАН) 10 апреля 2017 года,
протокол №. 2

Председатель ученого совета ИЭМ РАН
член-корреспондент РАН, д.г.-м.н.

 Шаповалов Ю.Б.

Ученый секретарь совета, к.г.-м.н.

 Федькин В.В.

ПОДПИСЬ *С.А. Макаева*
Кобельникова ЗАВЕРЯЮ
ЗАВ.КАНЦЕЛЯРИЕЙ ИЭМ РАН
Е.А. Гихонирова

