

Петрохимические программы

наиболее известные петрохимические программы, ссылки на которые приводятся в различных научных статьях геологической тематики.

<http://evkor.net.ru/>

Основные задачи петрохимических программ:

1. Хранение, сортировка и классификация аналитических данных по породам и минералам.
2. Расчет геохимических коэффициентов, модулей, миналов и других вычисляемых параметров на основе аналитических данных.
3. Вывод фигуративных точек вещественного состава горных пород и минералов на различные дискриминационные и классификационные диаграммы.
4. Статистический анализ информационно-аналитических массивов.
5. Подготовка данных для публикации и другого геологического программного обеспечения.

Важной особенностью подобного программного обеспечения является тот факт, что оно, как правило, создается и развивается не обычными программистами, а специалистами в области наук о Земле, что обеспечивает грамотный подход к решаемым задачам и их актуальность. Поэтому умение пользоваться таким программным обеспечением и участие в его развитии и совершенствовании может служить свидетельством высокой квалификации современных исследователей.

MinFile, MinCalc и т.п.

Американская программа **MinFile** является одной из первых программ подобного рода, появившихся на PC и приобретших определенную популярность. Ее авторами являются сотрудники Мичиганского университета Абдулкадер Афифи и Эрик Иссене (Afifi & Essene, 1988), создавшие эту программу на языке QuickBASIC в 1988 г.

Программа позволяла рассчитывать коэффициенты кристаллохимических формул минералов по их химическим анализам классическим кислородным или катионным методом. Данные анализов и расчетов могли сохраняться в виде текстовых файлов определенного формата, которые в дальнейшем могли заново загружаться в программу для редактирования и пересчета. Кроме того, в программе присутствовала функция перевода оксидов в элементы и наоборот - элементов в оксиды.

Дальнейшим развитием этой программы являлась программа **MinCalc** (Waters, 1992), работающая с подготовленными файлами разного формата. Подобные программы, рассчитывающие кристаллохимические формулы минералов отдельных минеральных групп - **Amphcalc**, **Calcprgx** и т.п.

Из российских разработок - программа **CRYSTAL** (Перетяжко, 1996), с русскоязычным интерфейсом - позволяет рассчитывать формулы минералов различными методами, рассчитывать баланс масс для минералов, пород и расплавов, производить нормирование составов пород методом CIPW и выполнять статистическую обработку данных. Обладает графическими функциями, позволяющими строить гистограммы, двумерные и треугольные диаграммы, а также графики функций и REE-диаграммы.

Все эти программы работают под MS DOS, а потому теперь практически не развиваются и не поддерживаются своими разработчиками.

IgPet



Майкл Карп

е - пр
р -
жерси
и и пе

ак DOS

ас приложение с графическим

IgPet позволяет интерпретировать аналитические данные вещественного состава магматических и изверженных пород, в том числе данные редкоземельного и изотопного анализа, вычислять нормативные минералы по методу CIPW, рассчитывать для них различные петрохимические модули и индексы, выносить эти данные на разнообразные типовые диаграммы и графики, а так же создавать собственные графические зависимости и схемы распределения.

Программа обладает собственным весьма развитым графическим пакетом, который позволяет создавать диаграммы и графики различного типа: точечные двумерные, треугольные, спайдер и REE-диаграммы, а также линейные графики с обычной и логарифмической размерностью шкал.

Статистические функции программы позволяют строить линии трендов и регрессий по различным апробированным алгоритмам.

Список доступных классификационных диаграмм весьма обширен, в него включено большинство известных петрохимических диаграмм для изверженных и магматических пород, такие как диаграммы Pearce, Irvine and Baragar, O'Hara, Walker, Grove, Baker and Eggler, Wood, Thompson, Sun and McDonough и т.п.

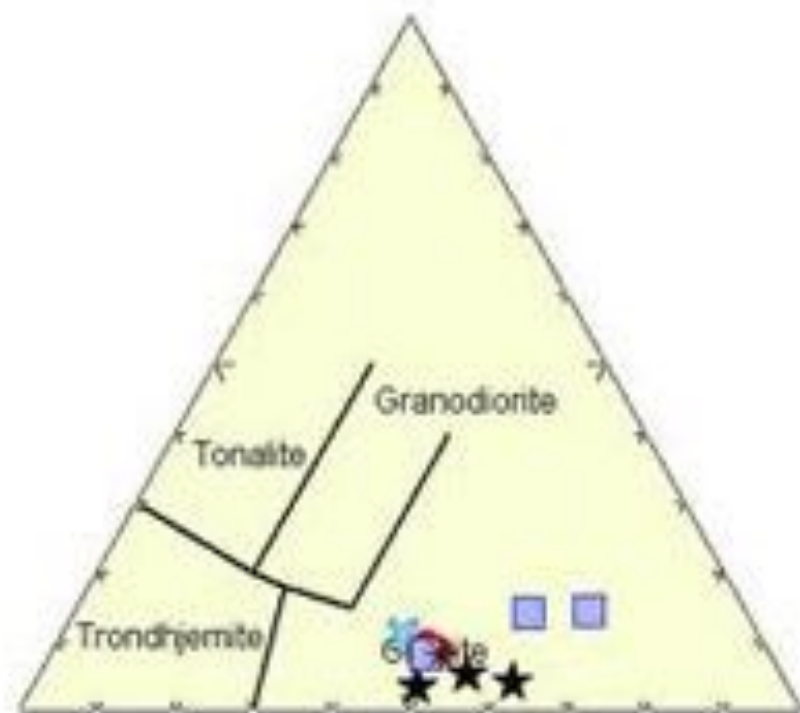
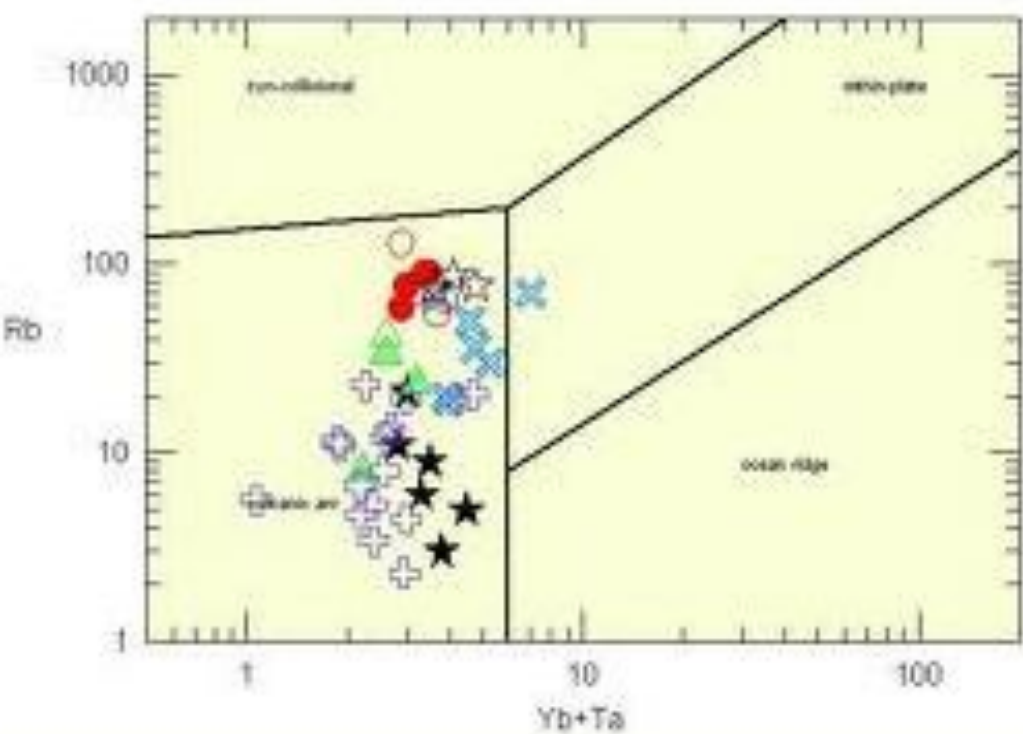
Предусмотрен импорт/экспорт данных из электронных таблиц типа MS Excel.

IgPet - коммерческая программа. Стоимость простой лицензии составляет 199 \$.

При всех своих несомненных достоинствах программа IgPet ориентирована, прежде всего, на работу с аналитическими данными изверженных и магматических пород.

Использовать ее для работы с метаморфически измененными породами уже гораздо сложнее, не говоря уже про работу с осадочными породами.

Тем не менее, в настоящее время IgPet является одной из самых популярных петрохимических программ.



Примеры диаграмм программы IgPet

MinPet

- MinPet - Mineralogical and Petrological data processing system - геохимическая программа, созданная в 1995 г. сотрудником канадской геологической службы Линдой Ричард (Richard, 1995) как полноценное Windows приложение. Финальная версия MinPet, до сих пор доступная в сети Интернет, имеет номер 2.02. Существовали более ранние DOS версии, но широкого распространения они не получили.
- Минералогическая часть этой программы. Тщательный расчет коэффициентов кристаллическости. Минералы группируются в группы, для каждой группы предлагается количество анионов (С, ОН групп), на заданном уровне редактирования списков рассчитываются составы классификационные амфиболов, биотитов, платиноидов и пироксенов, амфиболов, хлоритов, несколько классификаций могут быть выбраны из списка.



Линда Ричард

сильной стороной алгоритмы расчета мультиминеральных групп, для каждой группы - на заданное количество гидроксильных групп с возможностью редактирования. Коэффициенты кристаллическости вынесены на экран минеральных групп: амфиболов, оливинов, пироксенов, минеральных групп - амфиболов, хлоритов, которые могут быть

 Open	 Handling	 Enter/Edit	 Select
 Select	 Set	 Statistics	 Calculate
 Binary	 Ternary	 Flow	 Spider
 Discrim	 Hibboth	 Histogram	 Range
 Recal	 Classify	 Anomaly	 Pie Chart
 Help	 Periodic	 Table Data	 Exit

Minpet

Mineralogical and Petrological

Data Processing System

By

Linda R. Richard

 Calculator	 Status
----------------	------------

This Copy Belongs To

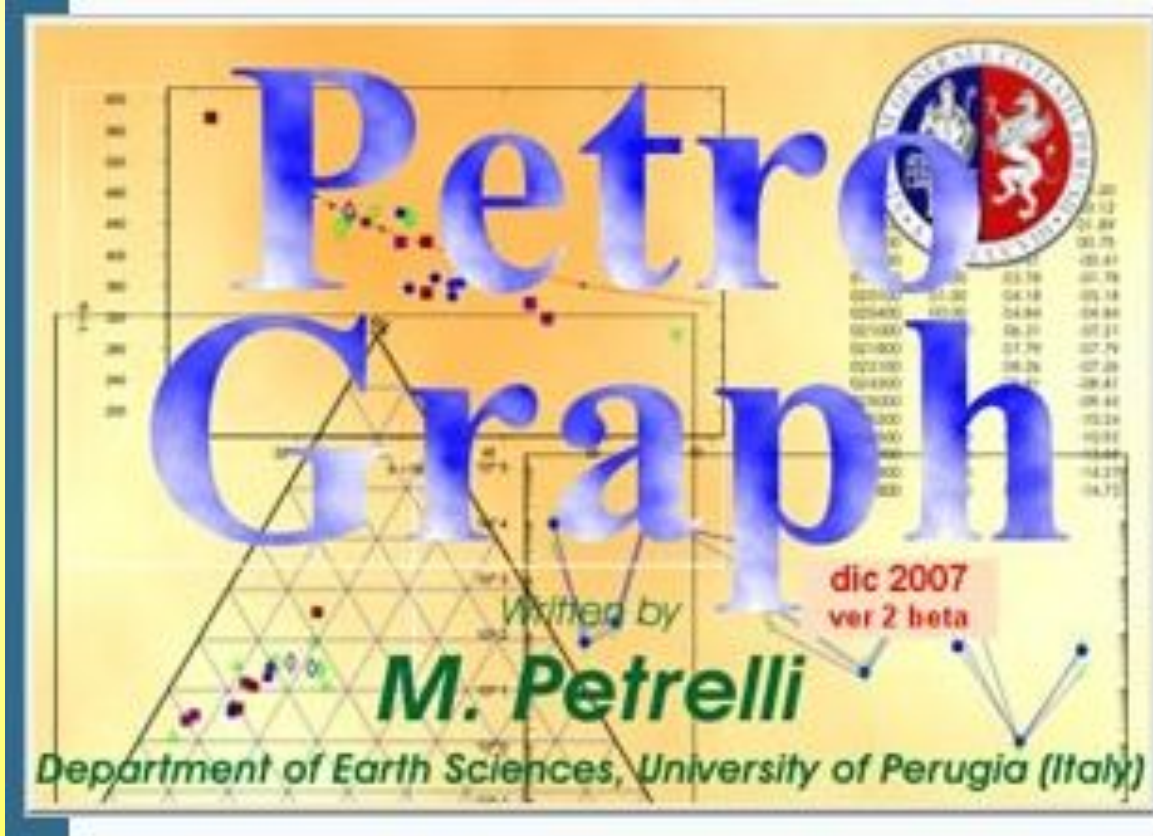
Главное окно программы MinPet

- **Петрохимическая часть программы.** Из расчетных методов присутствует только расчет 25 нормативных минералов по методу CIPW. Но составы пород можно выносить на **40 дискриминационных диаграмм**, которые разделены на 4 группы: базальты (17 диаграмм), граниты (11 диаграмм), ультрамафиты (8 диаграмм) и классификационные диаграммы для пород (4 диаграммы). Для метаморфитов и осадочных пород диаграммы отсутствуют. Весьма полезными являются REE и спайдер-диаграммы с нормированием по различным реперным эталонам - углистым хондритам, мантийным составам, различным коровым составам и т.п., вплоть до морской и речной воды.
- Кроме всего этого с помощью графического пакета программы пользователь может на основе аналитических данных создавать произвольные двумерные и треугольные диаграммы, а также гистограммы, круговые диаграммы и т.п.

Petrograph



Маурицио Петрелли



Программа Petrograph была создана в 2005 г. сотрудником университета г. Перуджа Маурицио Петрелли (Petrelli et al., 2005). Написана на MS Visual Basic v.6.0 и поэтому хорошо совместима с любыми современными Windows ОС. Последняя версия 2007 г., имеет номер 2 (beta) и отличается от предыдущих версий наличием инсталлятора.

Программа предназначена для работы с петрохимическими данными анализов изверженных и магматических пород. Составы пород могут выноситься на различные типы дискриминационных диаграмм - классификационные и "петро-тектонические", двумерные и треугольные. Всего в программе используется **19 дискриминационных** диаграмм для вулканических и интрузивных пород.

Кроме того, REE-диаграммы - 17 реперных эталонов, либо относительно произвольных эталонов, определенных пользователем.

Предусмотрена возможность рассчитывать модели кристаллизации расплавов по изотопному составу по методу Лангмюра и Де Паоло.

Импорт данных возможен из электронных таблиц Excel.

Главное достоинство программы кроме современного графического интерфейса в том, что она **бесплатная** и доступна для свободного скачивания с [сайта автора](#).



GCDkit



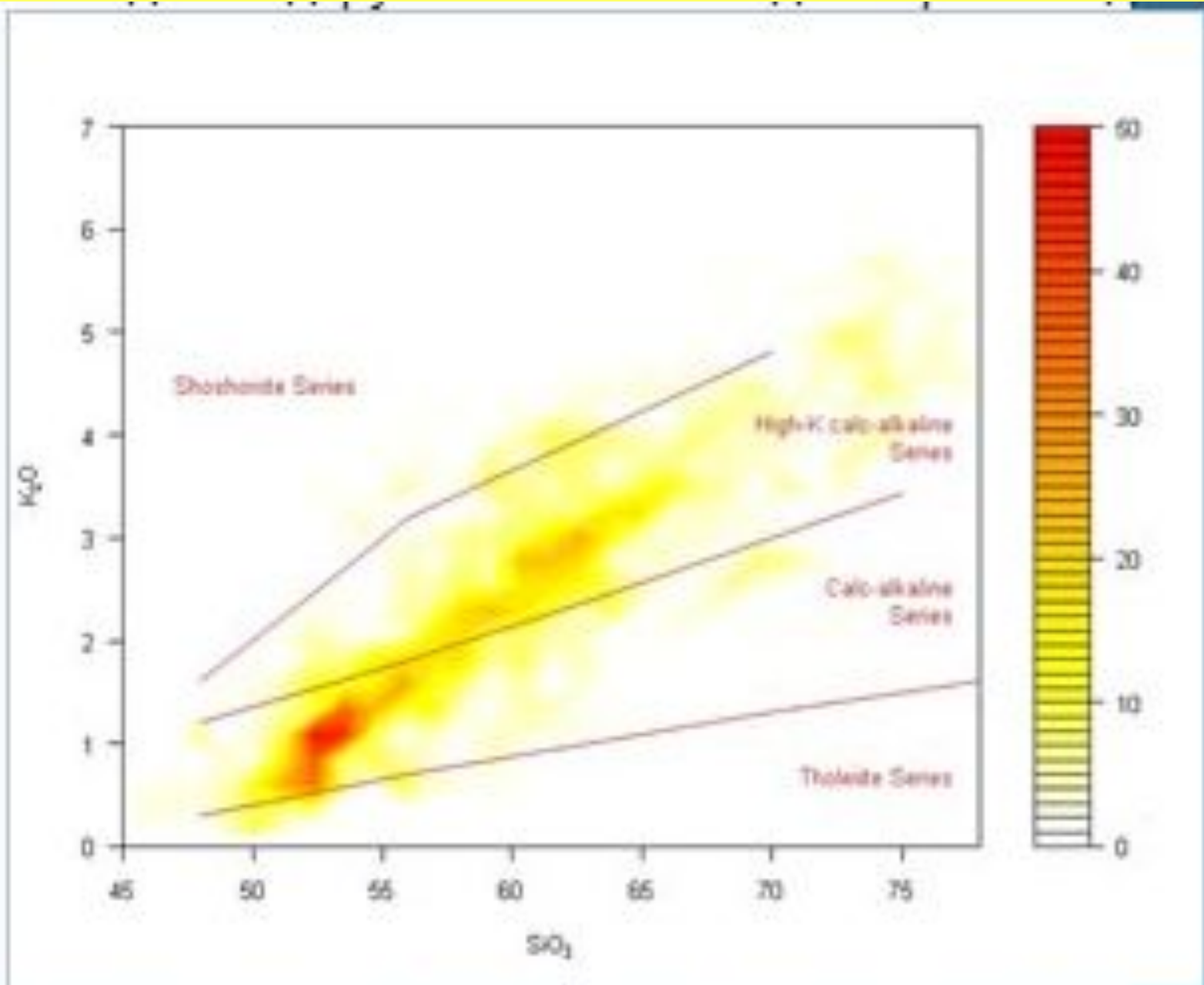
Войтек Янушек

- GeoChemical Data ToolKit - система для обработки вулканических пород. Написана на языке R, статистических вычислений и их графического представления для установки и использования предварительно подготовленного интерпретатора языка R.
- Авторы - сотрудники чешской геологической службы Войтек Эрбан, а также сотрудник университета (Janousek, Farrow, Erban, 2006). Последняя

Основные функции и свойства программы:

- Стандартные геохимические вычисления, основанные на данных химического состава пород, в том числе редкоземельного и изотопного.
- Эффективное управление данными, их поиск и сортировка.
- Отображение аналитических и расчетных данных на различных типах дискриминационных диаграмм (двумерных, треугольных и спайдер-диаграммах).
- Подготовка графического аналитического материала для публикации
- Модульная компоновка, позволяющая пользователям легко расширять функциональность программы и модифицировать ее согласно потребностям своего

- **Бесплатность и открытость** приложения благодаря использованию программного обеспечения с исходным открытым кодом.
- Расчетные методы GCDkit представлены различными нормализациями: CIPW в редакции Хатчинсона, катанормы Ниггли и мезонормы для гранитоидов, вычислениями большого набора петрохимических модулей и индексов, необходимых для дискриминационных диаграмм и т.п.
- В графический пакет входит **35 дискриминационных диаграмм**, разделенных на две группы: классификационные диаграммы и геотектонические диаграммы. Классификационные диаграммы в свою очередь разделены на три подгруппы - общие, диаграммы для вулканических и диаграммы для интрузивных пород. Геотектонические диаграммы разделены на две подгруппы - базальтоиды и гранитоиды.



Пример классификационной диаграммы GCDKit

- Спайдер и REE диаграммы - нормирование по 17 реперным эталонам.
Можно строить различные графические зависимости в виде двумерных, треугольных, трехмерных и пузырьковых диаграмм.
- Графику можно сохранить в виде метафайла формата .EMF, либо в виде файла PostScript формата .PS, либо в формате .PDF, либо скопировать в виде метафайла или растрового изображения в буфер обмена.
- GCDkit может импортировать данные из файлов разных форматов. В первую очередь из однотабличных файлов баз данных dBase (которые используют такие программы как IgPet и MinPet, а также типа MS Access.
- Данные также можно импортировать из электронных таблиц MS Excel. Свои данные программа сохраняет в структурированных текстовых файлах формата .DATA, могут быть экспортированы в таблицы MS Excel и базы данных MS Access.
- GCDkit **распространяется свободно и бесплатно**, последнюю версию и соответствующую версию интерпретатора языка R вместе можно скачать на [сайте программы](#).
- По данным известного web-каталога программного обеспечения Software Informer индекс популярности GCDkit равен 52, в то время как у программ IgPet и Petrograph этот индекс равен 17, а MinPet вообще не попала в каталог. Результаты поисковых запросов в Google Академии распределились таким образом: MinPet - 155 ссылок, GCDkit - 118, IgPet - 91, Petrograph - 64.

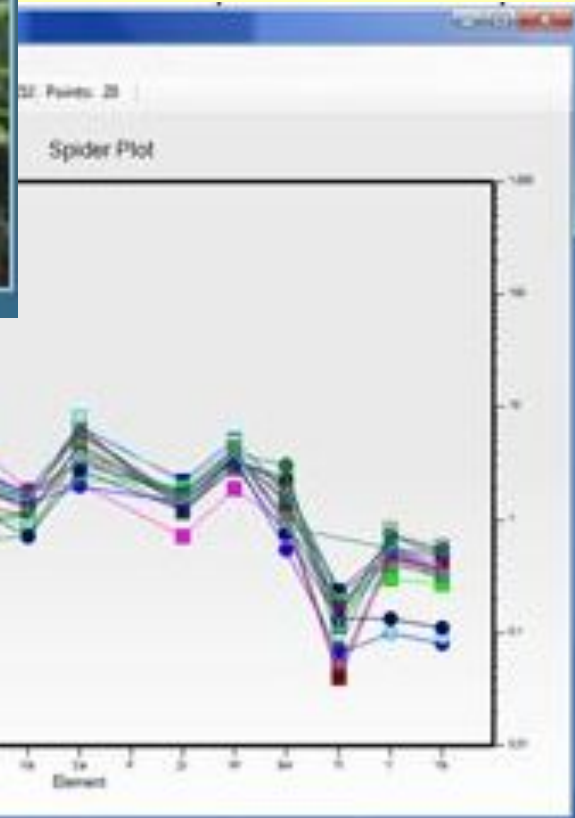
WinRock

- Известный австралийский разработчик геологического программного обеспечения MinServ (Mineral Services) предлагает свой вариант петрохимического процессора под названием WinRock (Kanen, 2004). Эта программа имеет стандартный многооконный Windows-интерфейс, обладает собственным графическим пакетом и имеет встроенные электронные таблицы для ввода и расчета данных. Программа работает только с химическими анализами пород, при этом, в отличие от других программ этого типа, способна обрабатывать аналитические данные не только вулканических и магматических, но также и **метаморфических и осадочных пород**. Для классификации и диагностики пород по химическому составу WinRock использует **27 различных классификационных диаграмм**, как двумерных, так и треугольных. Кроме этого возможно построение спайдер-диаграмм для нормализации редкоземельного состава пород по **11 реперным эталонам**. Помимо диаграмм программа предоставляет еще 10 классификационных таблиц для различных типов пород - от ультрамафитов до конгломератов и метеоритов.



WinRock

Rock Classification
XY and Ternary Plots
CIPW Norms
Petrographic Database



Пример REE-диаграммы программы WinRock

- Расчет составов пород на нормативные минералы по методу CIPW, пересчет на нормативные минералы составы щелочно-карбонатных пород по методике Le Bas (1973), а также расчет наиболее часто определяемых петрохимических соотношений и индексов.

Программа сохраняет данные в виде excel-таблиц, а также в виде текстовых файлов с разделителями. Импорт данных в программу возможен из структурированных текстовых файлов с различными разделителями, а также из электронных таблиц MS Excel.

- Графические данные программа сохраняет в графических файлах различного формата: .BMP, .JPG, .PDF и т.п. Отличительной особенностью WinRock является способность программы напрямую работать с различными справочными базами данных, в первую очередь - от того же производителя MinServ. Менеджер баз данных дает возможность организовать вывод данных из баз различного формата.
- WinRock - коммерческая программа. Ее цена составляет **499 AU\$**, а в комплекте с минеральной справочной базой данных Geolbases - **599 AU\$**. Продажей программы занимается сетевой дистрибьютор Geologynet на [своем web-сайте](#).

Программы, основанные на MS Excel

FORMULA - расчет коэффициентов кристаллохимических формул минералов кислородным методом, PX-NOM Роберта Штурма (Sturm, 2002) - электронная таблица для расчета кристаллохимических формул пироксенов, определение их номенклатуры, а также вычисление термобарометрических параметров их образования с помощью жадеит-кварцевого геобарометра и пироксен-гранатовых геотермометров.

Электронная таблица **GTcalc** (Locock, 2008), позволяющую рассчитать составы гранатов на 29 минералов (15 основных и еще 14 гипотетических) и т.п.

Из отечественных разработок - электронная таблица **Make Mineral** (2004 г., ИГЕМ РАН) – расчет коэффициентов кристаллохимических формул амфиболов, биотитов, клинопироксенов, апатитов, хлоритов, гранатов и магнетитов, а также определение термобарометрических условий образования минеральных парагенезисов с помощью амфибол-гранатового геотермометра и клинопироксен-плагиоклаз-кварцевого геобарометра.

CalcMin - программа немецкого исследователя Андреаса Бранделика (Brandelik, 2009) - для работы с данными по минералам. Хотя она и создана на основе MS Excel, но благодаря использованию программных VBA-макросов, программа имеет собственный графический интерфейс и собственный формат дата-файлов .CMI. Программа позволяет импортировать данные из других excel-таблиц, а также из файлов данных микронда Camesa SX.

В зависимости от вида минерала программа предлагает 24 метода расчета коэффициентов кристаллохимической формулы минерала и его минеральных компонентов.

Для тех, кто владеет методами программирования на VBA, возможно ввести в программу собственные алгоритмы расчета.

Результаты расчета аналитических данных минералов в виде файлов формата .CMP могут использоваться в качестве входных данных для другой excel-программы этого же автора - **PTGIBBS**, предназначенной для расчета термобарометрических параметров (Brandelik & Massonne, 2004).

Петрохимические excel-программ

PetroPlot (Su, Langmuir & Asimow, 2003) – вынесение данных по составу горных пород на произвольные двумерные диаграммы, а также REE-диаграммы с нормализацией по различным реперным эталонам. Программа управляется собственным пунктом меню MS Excel, появляющегося после интеграции в Excel надстройки программы. Алгоритмы расчетов и построения диаграмм выполнены в виде VBA-макросов.

Программа получила свое развитие усилиями китайских разработчиков, создавших сначала **GeoPlot** (Zhou & Li, 2006), а затем **GCDPlot** (Wang, Ma, et al., 2008). Компоновка программы осталась той же, однако за счет увеличения числа VBA-макросов, программа приобрела возможность выносить аналитические и расчетные данные на большое количество типовых дискриминационных диаграмм, как двумерных, так и треугольных. Кроме того, пользователь получил возможность самостоятельно создавать собственные дискриминационные диаграммы, данные о которых сохраняются в INI-файлах.

Следует заметить, что большинство мощных и функциональных программ, таких, как IgPet, GCDkit, MinPet, достаточно узко ориентированы на решение задач в области изучения вулканических и магматических пород.

Что касается изучения метаморфических пород и, тем более, осадочных пород, то здесь применение этих программ ограничивается только самыми общими функциями, такими, как расчет кристаллохимических формул минералов и нормирование редкоземельного состава пород по реперным эталонам, поскольку дискриминационные диаграммы и специфические расчеты петрохимических индексов для этого типа породных ассоциаций отсутствуют.

Более-менее полнофункциональной в этом смысле программой является коммерческая WinRock, но и там большая часть диаграмм относится к вулканическим и магматическим породам.

Термобарометрия

Результаты пересчетов состава пород и минералов часто служат исходными данными для расчета термобарометрических параметров возникновения равновесных минеральных парагенезисов и различных петрологических моделей. Для этого также используется специализированное программное обеспечение, самыми известными представителями которого являются программы **ThermoCalc**, **TWQ**, **Theriak-Domino** и т.п. Естественно, что совмещение в едином программном пакете петрохимических и петрологических функций является весьма перспективной идеей. Попытки такого совмещения функций наблюдаются в виде использования выходных файлов петрохимических программ в качестве входных файлов данных для петрологических программ. Примером могут служить программы **CalcMin** и **PTGIBBS** Андреаса Бранделика. В других программах для этого предлагаются функции расчета различных геотермометров и геобарометров.

Сложность заключается в том, что для достоверности этих расчетов необходимо получение аналитических данных из реально существующих в природе минеральных парагенезисов, грубо говоря - из одного образца, в то время как в петрохимических базах часто используются данные, полученные из разных источников, которые лишь географически и описательно принадлежат одному и тому же объекту. Тем не менее, введение петрологических функций в петрохимические программы является одним из перспективных направлений развития этого типа программного обеспечения.

PetroExplorer

С учетом всех приведенных выше соображений был создан геохимический процессор, получившего название PetroExplorer (Е.В. Кориневский, 2010). Программа существует и развивается уже более 5 лет. Первоначально возникшая, как простая Excel-таблица, в настоящее время она преобразована в полноценное многооконное Windows-приложение, сопряженное с базой данных, обладающее собственным графическим пакетом и возможностью генерировать и загружать графические файлы в формате .JPG. По существу программа является управляющим модулем для баз данных MS Access.

Основными функциями программы являются возможность хранить в базе данных и рассчитывать химические анализы минералов пяти пороодообразующих 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. 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 петро- и литохимические модули. Основным базовым 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 миналы 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.

PetroExplorer можно использовать 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.

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 используются метод *CIPW* нормативного пересчета составов пород, а также другие оригинальные методики, изложенные в литературных источниках и Интернет-публикациях.

Для расчета термодинамических параметров использованы алгоритмы, применяющиеся в термодинамических программах **TRF** и **GeoPath** Института экспериментальной минералогии РАН, а также опубликованные за последние 10 лет в различных литературных источниках.

Программа разрабатывается в Институте минералогии УрО РАН, как методологическое и инструментальное дополнение к многолетним исследованиям автора геологии и вещественного состава Ильменогорского метаморфического комплекса.

Программа **распространяется свободно и бесплатно** на принципах Универсальной общественной лицензии GNU GPL. Последнюю версию программы, имеющую номер 2.4 можно загрузить с данного сайта поддержки.

По сравнению с зарубежными аналогами **PetroExplorer** пока обладает довольно скромными возможностями, список доступных дискриминационных диаграмм невелик, но зато предлагаются диаграммы не только для магматических и вулканических, но и для метаморфических (**диаграмма Маракушева**) и осадочных (**диаграмма Коссовской-Тучковой** для песчаников) пород.

В ближайших планах автора - существенное увеличение списка дискриминационных диаграмм, внедрение функции построения REE-диаграмм нормализации редкоземельного состава пород по эталонным реперам, увеличение числа термобарометрических сенсоров, добавление новых методов расчета формул минералов и т.д. При этом основной упор предполагается делать на отечественные методики.

Интерфейс программы - русскоязычный, планируется перевод на английский язык.

Наиболее полный перечень отечественных ДД, их описание и анализ можно найти в методическом руководстве «Основы геодинамического анализа при геологическом картировании» (1997).

автор программы IgPet Майкл Карр:

"главная опасность этого программного обеспечения - непринужденность, с которой неверные и незрелые выводы могут быть подкреплены большим количеством красивых диаграмм. Что эти программы могут делать наиболее легко и просто - так это подтвердить неверные гипотезы!" (Carr, 2010).