

火山岩岩石化学、地球化学数据库 管理系统及应用程序

尚如相 曾广瑜 李德兴

(中国地质科学院地质研究所)

主题词: 数据库; 火山岩; 岩石化学; 地球化学; 管理系统; 应用程序

提 要: 在微机上用dBASE III建立了火山岩岩石化学、地球化学数据库管理系统, 开发了应用程序。火山岩数据库包括岩石描述、主要氧化物含量、稀土元素含量、其他微量元素含量、同位素分析、矿物分析等六个子库, 可以存贮二百余项有关火山岩的数据和信息。数据库管理系统具有建立数据库结构、数据维护、数据输出、应用程序接口及退出系统等项功能。操作简便, 易于掌握。应用程序主要包括岩石化学、地球化学和数理统计等计算程序, 各种地球化学图件的绘图程序。火山岩数据库及其管理系统和应用程序为火山岩岩石化学、地球化学的综合研究提供了一种方便、实用和有效的手段。

在多年的火山岩研究工作和区调工作中, 积累了大量的火山岩岩石化学、地球化学数据, 随着工作的进一步深入, 还将补充和增加更多新的信息和数据。充分利用这些数据, 使之在火山岩的综合研究、指导找矿中发挥更大的作用, 已成为当务之急。为此, 我们在微机上, 采用 dBASE III 系统, 建立了火山岩岩石化学、地球化学数据库; 开发了数据库的管理系统和应用程序的接口; 编制了火山岩岩石化学、地球化学计算和作图的应用程序, 为大量的信息和数据的存贮、分类、筛选、计算和成图等操作, 提供了一种有效的手段。利用管理系统和应用程序, 可以保证数据计算的准确性和精度; 快速地绘制各种地球化学图件; 打印数据表格, 因而大大地提高了工作效率。

一、数据库的结构

dBASE III 系统最多可以给一个数据库提供128个字段^[1]。但是, 对于一个岩石样品来说, 通过岩石标本和薄片的鉴定, 利用各种现代化的分析手段进行测试, 我们往往可以得到几百项信息和数据, 这样多的数据项在一个 dBASE III 数据库中是容纳不了的。为了解决这一问题, 分别建立了岩石描述、主要氧化物含量、稀土元素含量、其他微量元素含量、同位素分析和单矿物分析等六个数据库, 分类进行存贮。六个数据库中都包含有样品号、岩石名称、岩石类型、样品所属时代、采样位置和有关矿产等共同字段, 以便于记录的检索和各数据库之间建立关联。除上述字段之外, 各数据库的主要字段分述如下:

岩石描述数据库主要包括岩石产出的构造位置、产状、岩相,岩石的颜色、结构、构造、主要造岩(或斑晶)矿物成分及其百分含量、基质含量等字段。

主要氧化物数据库是最主要和记录、字段最多的数据库。包括了 SiO_2 、 TiO_2 、 Al_2O_3 、 Fe_2O_3 、 FeO 、 MnO 、 MgO 、 CaO 、 Na_2O 、 K_2O 、 P_2O_5 、 H_2O^+ 、 H_2O^- 、 CO_2 等14种主要氧化物分析结果。此外,还存贮了如下内容:(1)用全碱—硅化学分类图解(国际地科联岩石分类命名委员会火成岩分类分委会推荐的图解)对火山岩进行分类和命名的判别结果^[2];(2)经铁校正(Le Maitre, 1976),并去掉 CO_2 和 H_2O 后,重新换算成100%的11种氧化物的含量;(3)用CIPW法计算的23种标准矿物的含量^[3];(4)主要氧化物之间的比值和各种岩石化学指数14种;(5)QAPF双三角图和五种三角图中各端员的百分数等。这些判别或计算结果,是用户输入主要氧化物后,系统自动计算、存贮的派生数据。

稀土元素数据库除La、Ce、Pr、Nd、Sm、Eu、Gd、Tb、Dy、Ho、Er、Tm、Yb、Lu等14种镧系元素外,还包括了Y和Sc。

其他微量元素数据库包括大离子亲石元素、部分高场强元素、过渡族金属元素和贵金属元素等共计36种元素的分析结果。

同位素数据库包括Sr、Pb、Nd等放射性同位素,O、H、S等稳定同位素的分析结果和分析偏差。

矿物分析数据库包括单矿物样品的编号、矿物名称、分析方法及19种主要氧化物含量的分析结果。

上述六个数据库共可以存贮一个岩石样品的223种鉴定、分析和计算的数据和信息。系统自动进行的岩石分类命名、CIPW标准矿物计算,氧化物比值、岩石化学指数计算和作图参数等判别、计算产生的派生数据,占用了样品输入时的时间和磁盘的存贮空间,这是不利的一面,但另一方面,避免了每次使用派生数据时,都要计算一遍的重复工作,提高了系统的效率,简化了应用程序,为利用派生数据进行计算、作图或打印输出提供了方便。

二、数据库管理系统

火山岩数据库管理系统(以下简称HSDBMS),是用dBASE III的指令或命令编写的应用程序,是面向数据库用户的界面。运行HSDBMS,用户可以建立自己的数据库结构;进行数据的存取、增删、检索、修改等操作;还可以通过系统提供的接口程序调用岩石化学、地球化学应用程序,对数据库中的数据进行复杂地计算、绘图等操作。HSDBMS由一个主程序模块和十个二级子模块,共三十多个命令文件组成(图1)。主模块为用户提供了系统各项功能的主菜单,供用户选择。

(一) HSDBMS的主要功能

1. 建立数据库和索引文件 按照屏幕上选择数据库种类的菜单和输入驱动器名、欲建立的数据库文件名的提示,用户做出回答后,系统即可按用户的要求建立一个由用户自己命名的数据库,同时分别建立以样号、岩石名称、岩石类型、采样位置和时代,以及有关矿产为关键词的六个索引文件。

2. 数据管理 数据管理由数据输入、修改和记录删除三个子模块完成。

数据由用户利用键盘输入,存入磁盘。用户选用数据输入子模块后,还需指定输入数据

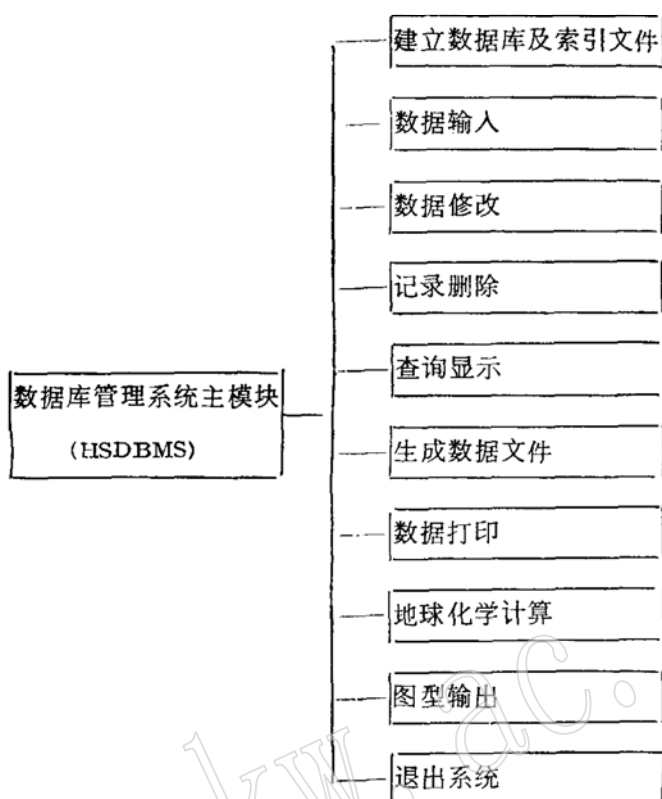


图1 火山岩数据库管理系统结构框图

Fig. 1 Block diagram of data base management system of volcanic rocks

的数据库种类和数据库文件名, 然后才能开始向数据库中增加新的记录。为了便于输入, 为六种数据库分别设计了不同的、清楚整齐的屏幕格式, 并按格式显示出上一条已输入过的记录内容。如果本次输入的某些字段的数据值与屏幕上显示的上一条记录的数据相同时, 只需按回车键即可, 不必重新输入, 这种方法既可以提高输入的速度, 又可以减少输入中的错误。用户输数据时, 必须首先输入样品号, 系统将会在使用数据库中检查是否有样品号相同的记录, 如果有重复的样品号, 系统给予提示, 并拒绝数据入库, 避免造成记录的重复和混乱。输入记录时, 系统提供了全屏编辑的工作方式, 用户可以随时任意调动光标, 用修改上一条记录的方法输入本条记录, 或出现输入错误时, 随时调回光标进行改正。输入的记录除存入用户自己定名的数据库文件之外, 系统还自动在 dBASE III 的默认磁盘中存贮输入的数据, 以做备份。如果用户输入的是岩石主要氧化物分析结果, 在输入记录工作告一段落, 返回主菜单之前, 系统则将本次输入的一批数据进行岩石分类命名判别、CIPW 标准矿物计算, 并将分类判别和计算结果存入磁盘。每条记录输入之后, 系统为用户提供一次改正输入错误的机会。当然, 也可以在输入工作结束后, 运用数据修改模块, 进行数据的更新和修改。

记录中数据的修改和更新是由修改数据子模块完成的。用户可以调出一个或一组需要修改的记录, 在与输入记录相同的屏幕格式下, 修改已存入磁盘的数据。修改的范围只包括用户输入的原始数据。由系统产生的派生数据, 用户只能调用而不能直接修改。派生的数据的修改是在用户改正了原始数据后, 由系统按改正的数据重新计算, 进行相应的更新而完成的。

删除一个或一组记录时,系统首先把欲删除的记录逐条按格式在屏幕上显示出来,由用户核对无误,再次确认后方予删除。如果用户认为显示出的这条记录不应删除,系统可以把它继续保留下来。采用这种慎重的方法,可以确保数据库中记录不会由于操作失误而造成丢失。记录删除后,系统要重新整理数据库和索引文件,因此需要较长的等待时间。最好的方法是采用集中处理的方式。就是说,在积累了一定数量需删除的记录时,再进行一次统一的删除工作,这样可以相对减少等待的时间。尤其是数据库中已存贮了大量数据时,这种处理方法的优越性更加明显。

3. 数据输出 数据库中数据输出具有灵活多样的方式,由数据打印、屏幕显示、数据文件生成和地球化学计算以及绘图等模块完成。可以按格式在屏幕上显示出用户指定的数据库中的指定记录,供用户查询使用;也可以由打印机以表格的方式打印出用户指定的记录中指定的字段的数据。数据还可以按用户的要求首先在屏幕上绘制成图,以图形方式表现出来,进而可用绘图仪将图形绘出。另外,系统中的数据文件生成模块,可以按用户的要求,利用数据库中的数据产生新的数据库文件、顺序数据文件或随机数据文件。这些数据文件生成在用户指定的驱动器中的磁盘上,可以做为用户自己编制的应用程序的原始数据来源,也可以用来与其他用户进行数据交换。

4. 应用程序接口 系统中的地球化学计算和作图两个子模块为用户使用系统附属的应用程序提供了一系列接口程序。用户按照计算或作图的子菜单,选择要求计算机完成什么工作,并对屏幕上的选用数据库种类菜单做出回答,输入使用的数据库文件名,调用哪些记录,使用哪些字段,就可按用户的要求,利用数据库中已存贮的数据完成相应的计算和作图工作。用户完全不必关心使用什么应用程序和调用数据的方法及过程,简化了应用程序调用手续,为用户利用数据库解决实际问题提供了方便条件。

5. 退出系统 主菜单是退出火山岩数据库管理系统的唯一出口,退出系统子模块负责处理系统复原的善后工作,并为用户提供了返回 dBASE III 系统还是返回 DOS 操作系统的选择。

(二) HSDBMS 的主要特点

HSDBMS 规划设计的出发点是为不熟悉计算机高级语言和 dBASE III 系统的用户服务。因此,在系统的设计中力求做到为用户提供各种方便;使操作尽量简单、明确;避免在误操作时无意中退出系统,造成用户不知所措或数据丢失。

1. 火山岩数据库采用菜单式和人机对话方式进行管理。在屏幕上以菜单方式列出系统的各项功能、数据库种类、各数据库中包括的字段等,供用户以键入菜单中编号的方式进行选择。或在适当的时候,以提问题的方式征求用户的意见,只有得到用户的正确回答后,系统方能继续运行。总之,用户只需按少数几个键就能运行系统,按自己的要求使用数据库和应用程序。因此,尽管用户不具备计算机高级语言和 dBASE III 系统的知识,仍能在很短的时间内学会数据库的操作和使用。

2. 对于系统正在进行的工作、当前的状态、以及操作的方法有明确的提示。系统开始运行后即以鲜明的颜色在屏幕的左上角显示出菜单的名称或当前使用的数据库种类或正在使用的数据库文件名;屏幕的右上角则显示出当前正在进行的工作,如“输入记录”、“修改记录”、“岩浆演化计算”、“绘直方图”等,使用户一目了然系统当前的工作状态。在需要使用

外围设备时,系统则及时提醒用户打开打印机或绘图仪,或将磁盘插入适当的驱动器,做好准备后系统才能继续正常工作,避免操作失误。使用应用程序接口进行计算或作图时,需选择记录中的字段,系统会在屏幕下方指导用户如何正确选择字段。类似的提示和操作指导不再一一例举。这些提示使系统变得更易于操作,用户感到心中有数,使用方便。

3. 为用户提供了七种检索记录的方法。在记录的修改、查询、删除、数据文件生成、数据打印输出以及计算和作图等操作中,系统为用户提供了按记录号、样品号、岩石名称、岩石类型、采样位置、样品所属时代及有关矿产等七种选择记录的方法。在选择记录的菜单中,列出了七种检索方式,利用菜单用户可以调用一个或一组符合要求的记录。分类检索的方式在用户进行特定的岩石化学、地球化学综合研究中是非常有意义的。例如用户在进行某一岩类、某一地区、某一时代或与某一矿种有关的火山岩的专题研究中,可以有目的地只选用数据库中与本专题研究有关的所有的记录,排除了其他记录的干扰。当然,有必要时也可以按记录号或样品号选一个记录,或按记录号选择库中所有的记录。

4. 错误判断及处理是 HSDBMS 的一项重要功能。对于用户使用过程中的操作失误采取了三种处理方法。一是系统不予理睬,拒绝继续向下工作。例如在菜单选择操作时,用户的选择超出菜单指定的范围时,系统不做任何反映或反复显示同一菜单,只有得到了用户正确回答之后,系统才能继续运行。二是设置了「[ESC]——返回主菜单」的提示,在屏幕下方出现这一提示时,用户按[ESC]键,可以随时返回主菜单,使系统从头开始工作。这一设置的目的是在用户进行菜单选择时,不慎做了错误选择,防止系统继续向下运行,而返回主菜单,给用户以重新选择的机会。三是指出操作错误,提示改正方法。总之,通过对错误的诊断和处理程序,系统力求做到使主菜单成为系统的唯一出口,为用户提供多种改正错误的机会和方法,维护系统的正常运行。

5. 屏幕格式清楚、整齐。系统为六种数据库分别准备了各自的屏幕格式。屏幕格式采用不同的背景色分别显示提示内容和数据内容,直观性强。此外,格式中除提示了当前使用的数据库文件名和当前正在进行的操作方式之外,还显示出所用的数据库共有多少条记录,当前显示的是第几号记录和本条记录是当前操作的第几个记录。如果数据库中数据项太多,则将一条记录分成几屏加以显示。

三、应用程序

应用程序用 FORTRAN 和 BASIC 语言编写,源程序经编译形成执行文件,主要包括计算和作图两大类。应用程序是火山岩数据库管理系统的一个有机组成部分,主要供用户在管理系统中,通过应用程序接口与数据库联接使用。另一方面,由于应用程序又是一个个独立的可执行文件,因此也可以在 DOS 操作系统下直接键入文件名运行。应用程序采用了数据文件输入的方式采集计算或作图的原始数据,所以在 DOS 操作系统下运行时,用户必须首先利用管理系统中数据文件生成模块,生成应用程序要求的顺序数据文件,或用 DOS 的行编辑命令事先准备好数据文件,方能运行^[4]。

应用程序是火山岩数据库及其管理系统中,用于解决地球化学、岩石化学研究的实际问题的附属部分,所以其内容有较强的火山岩研究的专业性质。目前已有的主要程序包括:火山岩分类命名判别、CIPW 法标准矿物计算、尼格里-巴尔特法标准矿物计算、稀土元素计算、

岩浆演化模拟计算^[6]等;数理统计方面的有相关分析^[6]、因子分析、趋势面分析、马尔科夫分析等程序。作图程序有全碱-硅分类图解和 QAPF 双三角图分类图解;直角坐标图、单对数直角坐标图(x轴为元素名称、y轴为对数坐标)、双对数直角坐标图(x、y轴均为对数坐标)、三角图、直方图^[7]、趋势面分析图等屏幕绘图程序。绘图程序还包括了用与 HP-GL、HP-7475A 或 RD-GL、SK-GL 绘图语言相兼容的绘图命令编制的绘图仪绘图程序。如果用户配备有相应的绘图仪,就可用绘图程序在绘图仪上绘出精美的图件。根据火山岩研究工作的需要,应用程序还将不断地补充和发展。

四、火山岩数据库在火山岩研究中的应用

火山岩数据库及其管理系统和应用程序主要用于火山岩岩石化学和地球化学的综合研究,按用户提出的特定要求提供数据库中已存贮的数据,并进行各种地球化学、岩石化学计算,绘制地球化学图表,打印数据表格。为用户提供一个高效可靠的研究工具。

用户使用本系统之前应尽可能全面地收集和准备火山岩岩石样品的描述和各种分析数据。选用分析项目完整、分析数据可靠的样品,对研究才有实际意义。第一次使用管理系统工作时,用户应首先建立自己定名的数据库和索引文件,然后就可以将准备好的数据通过键盘输入库中。数据的入库是一项长期的、艰巨的积累过程,数据库中可靠的数据越多,在科研工作中发挥的作用也越大。数据输入过程中,即使是熟练的操作人员也难免出现错误,所以数据入库后一般都要进行整理和维护,改正输入中的错误,删除多余的、分析精度差的记录,确保数据的正确、可靠。这是一切工作的基础,是至关重要的步骤。数据库中有数据,就可以利用管理系统提供的数据输出、计算和作图等功能,进行数据表格的打印、输出计算结果、绘制地球化学、岩石化学图表等工作,为地球化学研究提供数据和形象的图表素材。

火山岩岩石化学、地球化学数据库及其管理系统和应用程序在我所的南极菲尔德斯半岛火山岩研究项目和其他几个火山岩与金矿成矿关系研究项目中,已得到了初步应用,收到了较好的效果。在实际科研项目的应用中,一方面为各项目提供了服务,提高了工作效率,另一方面也使系统和应用程序受到了检验,得以不断完善和发展,目前的数据库和管理系统是为火山岩的综合研究服务的,但其主体部分有一定的通用性,因此经过适当的调整和补充,可以很容易地扩大到整个火成岩的范围,也可以改造成变质岩或沉积岩岩石学的数据库和管理系统。

在系统的规划设计、应用程序计算模式选择等方面,李兆熊研究员给予了指导帮助,在应用程序开发方面丁毅同志协助做了一部分工作。胡光晓同志对系统的改进曾给予大力支持和密切协作,在此一并表示谢意。

参 考 文 献

- [1] 王秉湖、张喜英,1986,关系型数据库应用——怎样使用dBASE III,北京科学技术出版社。
- [2] Lebas, M. J., Le Maitre, R. W., Streckeisen, A. and Zanettin, B., 1986, A chemical classification of Volcanic rocks based on the total alkali-silica diagram, *Journal of Petrology*, Vol. 27, Part 3, P745—P750.
- [3] Kelsey, C. H., 1965 Calculation of the CIPW norm, *Mineral Mag.* Vol. 34, P276—P282.

- [4] 周明德等, 1985, 微型计算机IBM—PC (0520) 系统原理及应用, 清华大学出版社, 286—302.
- [5] Morris, paul A., 1984, MAGFRAC, A BASIC Program for Least—squares approximation of fractional crystallization, *Computers and Geosciences*, Vol. 10, No. 4, 437—P444.
- [6] 沈步明等, 1987, 微型计算机在岩石学和矿物学上的应用, 科学出版社, 199—P202.
- [7] 王强如等, 1987, 计算机屏幕绘图与数字仿真, 天津大学出版社, 81—95.

Data Base Management System and Application Programs for the Research of Volcanic Rocks

Shang Ruxiang Zeng Guangyu Li Dexing

(Institute of Geology, Chinese Academy of Geological Sciences)

Key Words: data base; volcanic rock; petrochemistry; geochemistry; management system; application program

Abstract

A data base management system for volcanic rocks based on dBASE III has been set up on microcomputer. The system for research of petrochemistry and geochemistry of volcanic rocks consists of six data bases: description of rock, analysis of oxide, REE, trace elements, isotope and minerals. More than two hundreds of information or data are stored in the six bases. The management system can be used to set up the structure of data bases, manage data, provide interfaces for application programs and exit system. The application programs contain those for the calculation of geochemistry and petrochemistry of volcanic rocks, mathematical statistics and for drawing various geochemistry diagrams. Data bases for volcanic rocks, its management system and application programs provide a convenient, practical and efficient tool for the research of geochemistry and petrochemistry of volcanic rocks.