

地球化学数据系统*

赵平

(中科院地质所)

陈江峰

(中国科技大学)

地球化学数据系统是在 dBASE III 关系数据库管理系统上开发的应用软件。该系统通过提供菜单实现人机界面对话,操作简单,使用灵活,移植性强,能在短时间内完成大量数据处理,较好地解决了数据库与程序库接口的问题。本文介绍了该系统的基本原理、体系结构、功能和应用环境。

为了适应地球化学量化的需要,笔者在 IBM-PC 微机软件 dBASE III 关系数据库管理系统上开发了地球化学数据系统。该系统有操作简单、使用灵活、安全性好、移植性强的特点,还具有快速查询、增加、删除、修改记录,打印报表的功能。系统内附有一套岩石化学数据处理程序,为用户处理数据、绘制图件提供了方便,并可在短时间内完成大量数据处理,较好地解决了数据管理、存储、查询,以及数据库与程序库接口的问题。

地球化学数据系统的创建

随着科学技术的发展,人们获得数据的途径越来越广泛。对数据进行各种数学处理,是认识客观世界的一种手段。电子计算机的出现和更新,又为处理和分析数据提供了方便。数据文件作为数据存储的一种形式,存在着以下弱点:一个数据文件仅对应一个或几个应用程序(图 1);数据文件不易扩充,修改费时间;具有较大的冗余度;数据不易管理等。数据库具有很强的数据管理功能、最小的冗余度和较高的数据与程序的独立性,多个应用程序可共享数据集合(图 2)。但是,要能灵活运用数据库管理数据,则必须有一定的计算机专业知识,而且目前的微型计算机的数据库管理系统基本上不具备科学计算能力。为了解决这些问题,笔者在 dBASE III 数据库管理系统的基础

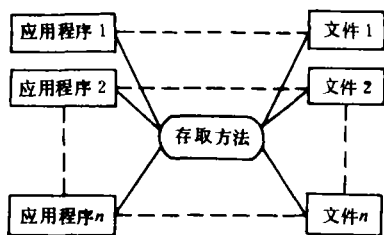


图 1

上,开发了地球化学数据系统。该系统通过不断地向用户提供菜单让其选择,实现了人机界面的对话,故使用者不需具备计算机专业知识,也不必掌握 dBASE III 的具体功能和操作便可运行本系统。同时,笔者又用高级语言(编译 BASIC, PASCAL)编制了一套程序,形成命令模块后存入系统,并对 dBASE III 软件的模块进行了调整,使其具有调用命令模块运行程序的功能。系统内数据库与程序库接口的媒介是数据文件。

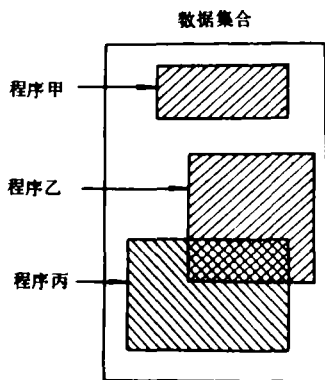


图 2

地球化学数据系统的基本原理

通过地球化学工作所得的原始数据,可通过键盘输入系统,存入磁盘;同时,系统可对原始数据进行 CIPW 计算,结果也存入磁盘,以便用户随时调用。当用户需要了解某一方面内容时,通过键盘向系统发出请求,系统根据用户的要求,将符合条件的内容或显示、或打印、或形成数据文件。用户在形成了数据文件的基础上,可直接调用程序库中程序对数据进行处理,处理结果可显示、可打印、可绘成图件供用户分析研究(图 3)。

*系中国科学院基金资助课题。

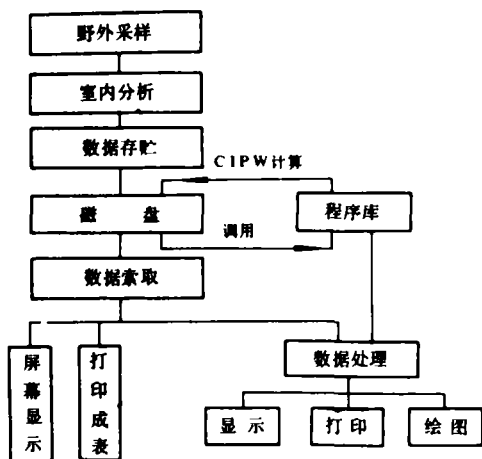


图3 地球化学数据系统原理图

地球化学数据系统的结构、系统设计和功能

地球化学数据系统主要由两个数据库和一个程序库有机地联系在一起。数据库中一个存放原始数据(下称为原始数据库),另一个存放原始数据的CIPW结果(下称为扩展数据库)。原始数据库包括以下内容:样品编号,样品产状,样品岩性, SiO_2 、 TiO_2 、 Al_2O_3 、 Fe_2O_3 、 FeO 、 MnO 、 MgO 、 CaO 、 Na_2O 、 K_2O 、 P_2O_5 、 CO_2 、 H_2O 、total(前13项主要造岩氧化物之和)、Cu、Pb、Zn、Au、Mo、Mn、Ba、Zr、Ni、Co、Cr、V、Ga、B、Sr、Nb、Sn、Ag和含矿性,共计36项。扩展数据库包括:样品产状,岩性, Ab、Ac、An、Ap、C、Di、Hm、Hy、Lc、Ilm、Mt、Ne、Ns、Ol、Or、Q、Tpn、Q1、Ab1、Or1 ($Q1 + Ab1 + Qr1 = 100\%$)、Qr2、Ab2、An2 ($Or2 +$

$Ab2 + An2 = 100\%$),共计25项。程序库中有22个数据处理程序。其中绘图程序4个,用IBM-PC编译BASIC语言编写,图形可由打印机输出。其余18个程序由PASCAL语言编写。在程序编制过程中,考虑了程序与数据库接口以及程序与程序接口的问题。如调用R型因子分析命令模块后,则能顺利地调用绘制因子图命令模块,分别绘制因子载荷平面图和因子得分平面图。

整个系统总体呈树形结构(或称层状模型,图4),由模块连接而成,模块与模块之间只有纵向联系,无横向联系。系统对于用户在使用中出现的非法操作,或给予提示,或不予理睬,这就保证了系统内数据的正确性和安全性。

用户启动系统后,首先进入主模块,屏幕上显示的是一张主菜单,提供出7种状态供用户选择,这7种状态是:原始数据库、扩展数据库、形成数据文件、文件管理、数据处理、系统维护和退出系统。

1.原始数据库:在这一状态,用户可通过菜单选择以下功能:查询记录、增加记录、删除记录、修改记录、打印报表、快速浏览和返回上一级状态。查询方式有:样品编号、样品产状、样品岩性、主要造岩元素特征、微量元素特征。后两种查询方式还可结合样品的含矿性进行。

2.扩展数据库:扩展数据库的内容是间接获得的,系统不允许用户直接修改其内容,只允许用户查询记录、快速浏览、打印报表和返回上一级状态。查

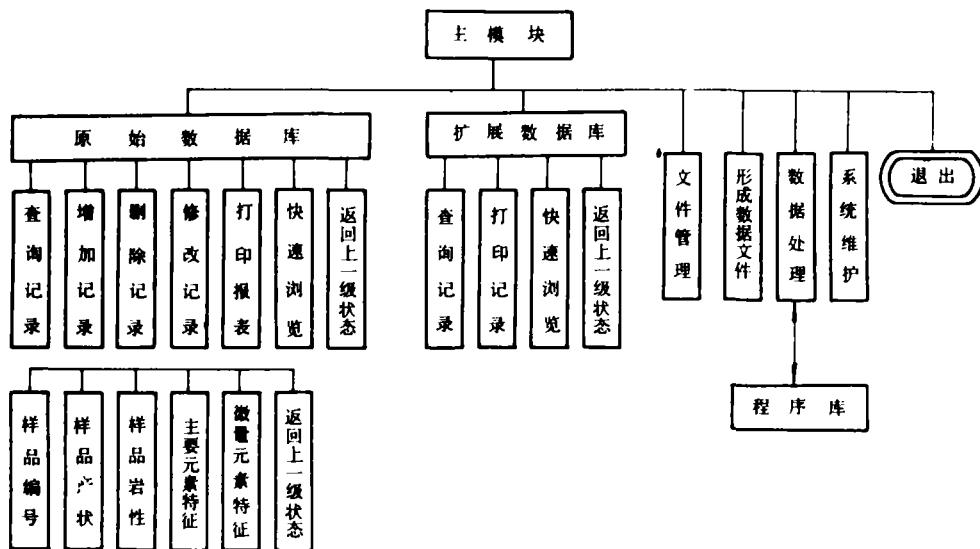


图4 地球化学数据系统结构图

询按样品产状进行。

3.形成数据文件:如前所述,数据库与程序库接口的媒介是数据文件,数据文件由此状态生成。本系统不允许将原始数据库和扩展数据库中的内容混入一个数据文件中。用户进入该状态必须先回答准备从哪一个数据库中取出数据形成数据文件,然后才能根据系统的提示进行操作。

4.文件管理:文件管理状态具有编辑文件、删除文件、复制文件、更换文件名、显示文件内容和查看文件目录之功能。

5.数据处理:系统向用户提供程序库的程序清单,一旦用户已建立了数据文件,键入程序名便可执行程序。但数据文件必须符合一定的规范才能与程序接口。程序库中程序功能如下:

DR1.EXE	绘制三端元图
DR2.EXE	绘制REE配分图
DR3.EXE	绘制数据统计直方图
DR4.EXE	绘制因子图

CIPW.COM CIPW计算及各种岩石化学参数计算

CHANGE.COM 对数据项进行 $\ln(x)$, $\exp(x)$, x^2 , $\sqrt{x}$, $1.0/x$, 乘一常数, 空操作等变换

CHANGEA.COM 对数据项与数据项进行 +, -, $\times$, $/$, 删除数据项, 空操作等变换

F.COM	F分布的单侧分位数
CHI.COM	χ^2 分布的单侧分位数
CHENO.COM	正态分布的拟合优度检验
MRA.COM	多元回归分析
SRA.COM	逐步回归分析

DAI.COM	判别分析
SDA.COM	多级逐步判别分析
SCAR.COM	R型逐步聚类分析
SCARM.COM	R型模糊聚类分析
SCAQ.COM	Q型逐步聚类分析
SCAQM.COM	Q型模糊聚类分析
PCAR.COM	R型因子分析
PCAQ.COM	Q型因子分析
COA.COM	对应分析
ANAVQ.COM	Q型非线性映射

6.系统维护:用户在原始数据库中增加记录、删除记录或者修改了记录的主要造岩元素氧化物的百分含量后,必须对系统进行维护,以保证数据的正确性。系统维护主要完成两件事:一是对total项进行修改;一是对扩展数据库的内容重新整理。系统维护需要较多的磁盘空间,运行时间也比较长,一般以集中增、删、修改记录后再维护为好。在对原始数据库中记录进行CIPW计算时,若遇到 $\text{CaO} < 3 \times \text{P}_2\text{O}_5$ 等情况,屏幕显示该记录的样品产状和出错信息,程序自动跳向处理下一记录,系统维护完毕返回主模块。

地球化学数据系统运行环境及应用

地球化学数据系统适用于具有256 K字节以上内存的IBM-PC (/XT, /AT) 及其兼容机,彩色或单色图形显示器,配备图形打印机。

笔者应用该系统对安徽中生代部分中酸性岩体进行了岩石化学特征分析,取得了比较满意的结果,证明该系统具有较强的数据处理能力。

该系统开发过程中得到了张培仁、钟龙云等同志热情协助,谨致谢意。

A Geochemical Data System

Zhao Ping

(Institute of Geology, Academia Sinica)

Chen Jiangfeng

(University of Science and Technology of China)

Abstract

The Geochemical data system presented in this paper is a practical software developed on the dBASE III relational data base management system. According to the menu served the system carries out the man-machine interaction with following merits: easy to manipulate, flexible for using, good transplantation to other system, processing mass data in a very short time, and better treatment of the interface problem between data base and program library. The basic principle, system architecture, functions and application environments of the system are introduced in this paper.