

基于 Web 平台的岩石矿物数据处理软件新进展

陈章玉, 王方正

(中国地质大学 地球科学学院, 湖北 武汉 430074)

摘 要: 基于 Web(Word wide Web 万维网)平台的岩石矿物数据处理软件是按照浏览器/服务器的模式工作,即用户以客户端浏览器为计算平台,而计算的应用程序及数据库在服务器端运行。本文介绍了当前岩石矿物数据处理软件的发展现状和趋势及成功开发基于 Web 平台的岩石数据处理程序的范例,探讨了开发基于 Web 平台的岩石矿物数据处理软件的实现方法及优越性,从而论证了建立基于 Web 平台的岩石矿物数据处理软件的必要性和可行性。

关 键 词: Web 技术; 岩石矿物; 数据处理软件

中图分类号: TP319: P57/58 文献标识码: A 文章编号: 1007-2802(2001)02-0098-05

90 年代以来, 互联网技术的迅速发展为科学信息的交流和资源共享提供了良好的空间。开发基于 Web 平台的应用程序, 可实现实时交互式计算, 方便了各种软件的更新、扩充和维护。基于 Web 平台的应用程序按浏览器/服务器的模式工作, 即用户以客户端浏览器为计算平台, 而计算的应用程序在单一服务器上执行。对开发者来说, 可随时扩充广泛的内容、应用最新的研究方法和成果; 对用户来说, 随时使用的都是最新的版本和成果, 且不需特殊设置与软件安装, 可使用任何浏览器^[1]。

在岩石学、矿物学数据处理的领域, 计算机的应用已相当广泛, 当前已有的各种软件包数量很多, 所包含的内容也层次不齐, 而近几年新发展的基于 Web 平台的应用程序又为这一领域软件的发展注入新的活力。本文从软件发展、更新、扩充、维护及开发环境等方面, 介绍了开发基于 Web 平台的专业软件的优越性, 并列举了成功应用该方法的研究实例以及实现方法, 从而论证了开发基于 Web 平台的岩石矿物数据处理系统的必要性和可行性。

1 岩石矿物数据处理软件发展现状简介

当前岩石矿物数据处理软件的发展主要表现在

以下两个方面:

(1) 多功能软件包的集成化: 岩石学、矿物学是计算机应用较早的学科, 主要表现为岩石矿物成分分析结果的处理和分析。早些年的软件多数是针对特定任务的单独程序, 国内早在 80 年代, 沈步明、从柏林利用 Basic 语言, 编著了《微型计算机在岩石学和矿物学上的应用》^[2]一书, 其中包括岩石化学数据处理等 20 多个常用的独立的程序。单一程序不方便数据的转换和管理, 开发多功能软件包可方便数据的转换和综合利用, 并对同一批数据进行综合处理和分析。至 1998 年, 马鸿文编著了《结晶岩热力学软件》^[3]一书, 介绍了作者近十年来, 用 Fortran77 语言编写的结晶岩热力学软件与应用实例, 除热力学计算程序外, 也包括常见的岩石化学、矿物化学数据处理程序, 并实现了数据库的管理功能。

国外 80 年代至 90 年代初, 多数软件也属功能单一的程序, 只是编程的语言和计算平台各不相同。如根据矿物电子探针分析或湿化学分析数据计算矿物晶体化学式的 MINFILE^[4]、HYPERFORM^[5]、PASFORM^[6]等, HYPERFORM 是适用于苹果机运行的软件, 而 PASFORM 为 IBM PC 机或 PC 兼容机运行的软件。

还有根据成分分析数据对岩石、矿物分类命名的软件,例如用于角闪石命名的软件包就有 EMPAMPH^[7]、AMPHCAL^[8]、AMPH^[9] 等几个版本。AMPHCAL 与 EMP-AMPH 同为根据国际矿物学会的角闪石分类命名方案对分类角闪石的软件,但前者为 QuickBasic 程序,后者为 Hypercard 程序。

近几年出现了一些功能比较全面的软件,如 Minpet: 主要用于矿物晶体化学式计算、CIPW 标准矿物计算、岩浆岩的判别分析图、稀土元素分配型式图、微量元素蛛网图等;基于 Mathematic 的 PET (Petrological elementary tools) 软件包^[10] 主要用于矿物化学式计算、热力学计算、地质温压计的计算、角闪石分类及变质组合分析等。还有一些用于温压计计算的软件如: GPT^[11] 用于岩石中地质温压计的计算(72 个温度计,59 个压力计等),其温压计计算主要针对泥质变质岩;计算方法改进后新的计算程序,如用 Fortran 77 编写 BDT^[12],黑云母-石榴子石温度计。

(2) 网络化: Internet 的迅速发展,使 Web 应用程序以它诸多的优势很快兴起;但利用 Web 技术开发科学专业软件还处于起步阶段。目前,在岩石矿物学领域开发基于 Web 的应用程序国外已有进展,如 WEBINVEQ 地质温压计^[1],便是基于 Web 的交互式科学软件的初探。

WEBINVEQ 是传统的温压计的综合,因此对正在研究变质岩岩石学的地质学家和已获得一个或多个样品矿物组合化学分析资料的地质学家是非常有用的。WEBINVEQ 当前还只是一种初探性的研究,用于促使用户对此方法的反馈信息,重点放在用户的界面和方便调试上,而不是在外观和计算的效率上。该站点在建立最初的约一年时间内,为众多用户计算了达 1 500 多个温压计,并获得了有价值的反馈信息,这些反馈信息对程序的更新有着重要的意义。该应用程序使用 Perl 作为公共网关接口的脚本语言,使用 ASCII 文件作为 Perl 脚本语言和 MATLAB 代码的信息交换,大大地简化了程序的调试。

国内在其他领域也陆续有此种应用的出现,如化学领域中,基于 Web 方式的优势区相图的计算^[16],采用了 ISAPI、Java 等技术,实现了网络化的优势区相图的计算,把原已实现的部分功能及化学数据库功能移植到 Windows 平台并在网上运行,实现资源共享,网络化实时计算。

由于这一领域刚刚起步,因此实例较少,本文主要针对这一技术,探讨其优越性及实现方法。

2 开发基于 Web 平台的专业数据处理软件的优点

无论在国内还是国外,用于数据处理的软件包数量很多,但内容丰富,且计算机平台、操作系统、使用的编辑器是各种各样的,这样往往不方便管理和数据交换,把应用程序从一个计算机平台移到另一个平台,依然代价很大;另一方面,专业性的软件由于其所依赖的科学方法不断发展,新方法的不断出现,就需要对原代码进行修改和更新,如何方便地实现更新和维护,扩充内容成为一种需要;同时,相对频繁的修改和更新必将导致各种软件包的不同版本数量庞大,这对使用者和开发者都不方便^[1]。

而基于 Web 平台的应用程序为上述问题提供了一个很好的解决办法,Web 应用程序实现单一服务器执行计算。它的优点主要表现在以下几个方面^[1, 13 14]:

(1) 只需维护单一版本,简化了软件发布和更新。科学软件的一个特性是,它是科学研究的一部分,因此总是在发展之中,新方法的不断出现,需要对原始代码进行修改。由于基于 Web 方式的应用程序,其程序原代码只存在服务器上,因此程序开发人员可随时应用最新的研究方法和成果在服务器上修改代码,用户就能实时使用最新的版本,而且根据用户的反馈,通常需要增加功能、改善软件。另一方面,科学软件不同于商业软件,用户数量相对较少且分散。

(2) 用户界面统一: 尽管科学的软件通常只有很少的用户,而用户的计算平台、操作系统和编辑器却是各种各样的。从开发者的观点来说,在各种不同的界面上实现图形输出增加了开发的复杂程度。而基于 Web 平台的浏览器/服务器工作模式,客户端只需使用简单、易学易用的 Web 浏览器作为用户界面。

(3) 有利于形成统一标准: 大部分独立于软件的硬件是图形接口。通过使用 Web 浏览器作为图形接口,用户不管使用什么样的显示器或硬件拷贝设备,都能被当地的系统支持。

(4) 方便调试: 因为所有的错误文件都在单一服

务器上,所以简化了调试的过程。

(5)方便用户反馈信息,从而根据用户需求不断对软件进行完善:通常一个新软件的发布都需要一个测试版本,供感兴趣的科学家对此软件进行测试。这就增大了使用者的负担,不但要求去发现问题,增强软件功能,还要求用户同开发者进行交流,而在 Web 上,大多数浏览器提供了“E-mail to”功能,所以简化了反馈信息,E-mail 直接发送反馈信息,明显提高了反馈过程。

此外,它可以方便地实现和数据库的连接,为 internet/intranet 用户提供远程高效率的服务,必将取代传统的联机甚至单机版本的数据处理及管理系统。由此可见,Web 技术在更深层次上进一步促进了岩石矿物学软件的集成软件标准的形成,对专业软件的发展有着深刻的影响。

当然,基于 Web 平台的应用程序也有其局限性:由于网络传输速度的限制,其运行速度不如单机版本的快,开发程序也不如单机版本灵活方便。但随着网络带宽技术问题的解决,这一局限性会逐渐减小。而且对于以往只能在工作站上运行的较复杂的科学计算问题,应用浏览器/服务器模式,把复杂的计算任务放到服务器上执行,则可充分发挥服务器的高性能优势。

3 基于 Web 平台的岩石矿物数据处理软件的实现方法

基于 Web 平台的应用程序即为 Web 应用程序。Web 应用程序的实现方法有很多,如通用网关接口 CGI, IDC 与 IIS, ADC 和 ISAPI 等。其中 CGI 是传统方式,也是很好的解决办法,但不易开发,更改成本高、功能有限、不易检错等,而 ISAPI 开发步骤繁琐,还有线程同步问题。用这些接口除了难以创建和更新外,网关程序和 HTML 程序不集成也是一大弊端。而 ASP 技术不仅能实现 CGI 的所有的功能,还有许多显著的优点,如:(1)完全与 HTML 文件融合在一起;(2)容易创建,不需要其它编译、链接程序;(3)面向对象的并通过 ActiveX Server 对象可扩展。

ASP^[13]是微软近几年推出的新兴的动态站点设计技术,它是一个服务器端的脚本环境,在站点的 Web 服务器上解释脚本,可产生并执行动态、交互式、高性能的站点服务器应用程序。而且 ASP 可以

胜任基于微软 Web 服务器的各种动态数据库的发布,因此,ASP 正在逐渐取代传统的 Web 技术,成为动态站点设计者的首选工具。

在单机上实现许多岩石矿物数据处理功能的软件早先一般是用 Fortran 语言实现的,而目前要实现在服务器端运行的 Web 应用程序,当前比较简单、快捷而功能也比较齐全的技术是 ASP,它支持 VBscript、Javascript 等脚本语言,并且便于建立与数据库的连接,实现网上的实时计算和数据的管理。

这里我们以计算晶体化学式为例,介绍其实现过程。整个过程流程图如图 1 所示。

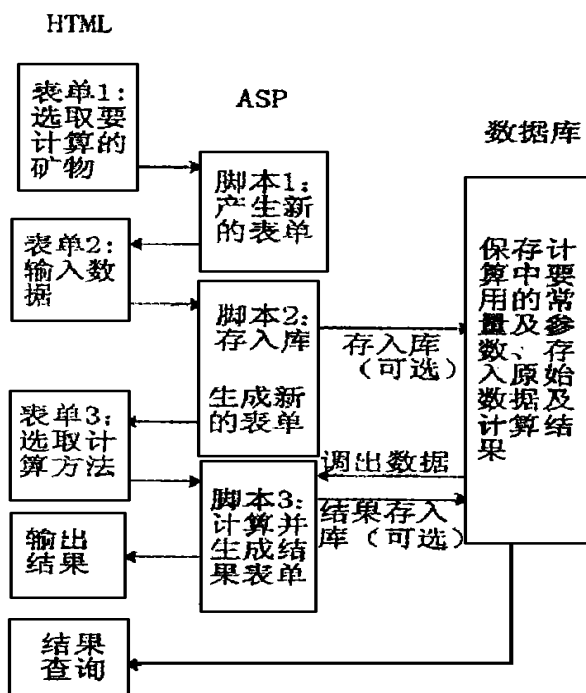


图 1 数据处理流程图

Fig. 1 process diagram of calculating mineral formula

(1)首先在服务器端建立一简单的数据库,包含计算过程中要用到的各种常量和参数,如分子量、元素电价及计算基准等。并建立一空的表单,用于用户存入原始数据及计算结果。

(2)用 HTML 编写表单 1,用于提供用户可选取计算的矿物。该表单提交给 ASP 脚本 1 处理,同时生成表单 2,用于用户输入原始数据。

(3)输入的原始数据由表单 2 提交给脚本 2 处理,可选择保存到临时文件或存入数据库。脚本 2 与数据库连接并把数据写入库。脚本 2 同时生成表

单 3, 供用户选择计算的标准, 是否进行 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ 的矫正等。

(4) 表单 3 的选项由脚本 3 处理, 脚本 3 依据表单 3 的选择, 按照要求从数据库中调出数据, 完成计算并生成输出结果的报告。计算的结果也可以选择保存到数据库中。

由于原始数据及计算结果都保留在数据库中, 故可以再利用这些数据进行其它项目的计算或供结果的查询, 这样方便了数据的综合处理、转化及管理。

此外, Vbscript 没有绘图函数, 因此要实现绘图功能, 必须编写服务器组件。服务器组件应该编译成执行速度快的*.dll 文件, 这可以用 Visual Basic 和 Visual C++ 来实现。

用 IIS 作为 Web 服务器, 可支持各种硬件配置, 并且在 Windows NT 服务器中, 包含有 ASP 脚本的引擎。这种脚本环境可在 IIS 和数据库服务器中交换信息。以这种安排, 可支持的数据库有两种, 一是微软的 Access, 使用方便, 它利用图形界面逐步的让新手一步步建立数据库, 用户不需要知道 SQL, 而可以使用 Access。其最大缺点是处理用户输入量较少。二是微软的 SQL 服务器, 可用于多用户, 但要求高, 需要精通 SQL, 用之设计、创造、维护数据库。

4 结 语

从国内外情况来看, 开发基于 Web 平台的专业软件已成燎原之势。各个领域都有基于 Web 平台的专业软件初探性的开发研究并初见成效。专业软件的集成化和网络化已成为技术发展的主要趋势。

参考文献:

- [1] Gordon T M. WEBINVEQ thermobametry: an experiment in providing interactives cientific software on the world wide web[J]. Computers and Geosciences, 1998, 24, 43- 49.
- [2] 沈步明, 从柏林. 微型计算机在岩石学和矿物学上的应用[M]. 北京: 北京科技出版社, 1987.
- [3] 马鸿文. 结晶岩热力学软件[M]. 北京: 地质出版社, 1998.
- [4] Affi A M, Essene E. MINFILE: a microcomputer program for storage and manipulation of chemical data on minerals[J]. American Mineralogist, 1988, 73, 446- 448.
- [5] Bjerh S C, Mogessie A, Bjerg E A. HYPER-FORM- A Hypercard program for Macintosh microcomputers to calculate mineral fomulae from electron microprobe and wet chemical analysis[J]. Computers & Geosciences, 1992, 18(6): 717- 745.
- [6] Bjerh S C, Mogessie A, Bjerg E A. PASFORM- A program for IBM pc or pe compatible computers to calculate mineral formulae from electron microprobe and wet chemical analysis[J]. Computers & Geosciences, 1995, 21(10): 1187- 1190.
- [7] Mogessie A, Tessadri R, Beltman C B. EMP-EMPH: A hypercard program to determine the of an amphibole from electron microprobe analysis according to the International Mineralogical Association scheme [J]. Computers & Geosciences, 1990, 16: 309- 330.
- [8] Yavaz F. AMPHCAL: a quickbasic program for determining the amphibole name fom electron microprobe analysis using IMA rules[J]. Computers & Geosciences, 1996, 22: 101- 107.
- [9] Rameshwar R D. AMPH: a program for calculating fomulae and for assigning names to the amphibole group of minerals[J]. Computers & Geosciences, 1996, 22: 931- 934.
- [10] Dachs E, PET: Petrological elementary tools for mathematica[J]. Computers & Geosciences, 1998, 24: 219- 235.
- [11] Reche J, Martinez F J. GPT: An excel spreadsheet for thermobarometry calculations in metapeliteic rocks[J]. Computers and Geosciences, 1996, 22: 775- 784.
- [12] Jowhar J N. BDT: a Fortran77 computer program for biotite-gamet geothermometry[J]. Computers & Geosciences, 1999, 25: 609- 620.
- [13] 李世杰. ASP 网页设计手册[M]. 北京: 清华大学出版社, 1999.
- [14] 徐芳, 李晓霞, 温浩. Web 技术对化学软件发展的影响[J]. 计算机与应用化学, 1999, 16(3): 181- 186.
- [15] 朱其平. ASP——开发动态 Web 应用的最佳环境[J]. 计算机世界, 1999(3): 17- 19.
- [16] 刘武平, 张平民. 快速建立 WWW 的化学数据库体系[J]. 计算机与应用化学, 2000, 17(3): 224- 226.
- [17] 蔡宁, 方学良, 杨章远, 等. 基于 WWW 方式的优势区相图计算[J]. 计算机与应用化学, 1999, 16(4), 316- 320.

The Implement of Web-Based Petrology-Mineralogy Data-Processing Software

CHEN Zhang-yu WANG Fang-zheng

(*Faculty of Earth Science, China University of Geoscience, Hubei, Wuhan, 430074, China*)

Abstract: The web-based petrology-mineralogy data-processing software works in the mode of browser/server, takes the client computing platform as browser and the application and database to run in the server. This article introduces the present developing situation and trend of petrology-mineralogy data-processing software and management system, and examples of the implementation of web-based Petrology data-processing program, and discusses the implementation method, advantage, necessity and possibility of developing web-based petrology-mineralogy data-processing software.

Key words: webtechnique; petrology-mineralogy; data-processing software