

doi: 10.11720/wtyht.2018.1300
周旋, 卢健, 金瑜. 基于 WPF 的岩石地球化学图解软件的研究与开发[J]. 物探与化探, 2018, 42(4): 811–816. <http://doi.org/10.11720/wtyht.2018.1300>
Zhou X, Lu J, Jin Y. Research and development of the lithogeochemical plot software based on WPF[J]. Geophysical and Geochemical Exploration, 2018, 42(4): 811–816. <http://doi.org/10.11720/wtyht.2018.1300>

基于 WPF 的岩石地球化学图解软件的研究与开发

周旋¹, 卢健², 金瑜¹

(1. 新疆远山矿产资源勘查有限公司, 新疆 乌鲁木齐 830011; 2. 福建嘉德信息技术有限公司, 福建 福州 350001)

摘 要: RockPlot 岩石地球化学图解软件是以岩石地球化学参数计算与图解为研究对象, 应用计算机处理岩石地球化学数据的一次新的尝试。系统整体运用 WPF 技术, 采用松耦合的插件式设计, 既保证岩石化学计算与图解的独立性, 也维持了系统的整体性; 采用简单、易于读写的 JSON 轻量级数据格式作为岩石化学计算与图解的统一配置模块, 提供了高度灵活的扩展功能, 并实现了矢量化输出。系统集计算与图解功能于一身, 提供了综合、整体的岩石地球化学数据处理应用体验。

关键词: WPF; 岩石地球化学; 岩石地球化学图解; 岩石地球化学参数计算; 三层结构

中图分类号: P632 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-8918(2018)04-0811-06

0 引言

岩石地球化学是近代岩石学和地球化学的交叉学科, 其目的是对岩石中各种化学元素、矿物进行分析研究、整理归纳、总结规律, 有效指导岩石地球化学工作, 对于岩石分类、岩石和矿床的成因分析、构造环境判别、地质演化等研究具有重要意义^[1-2]。

在岩石地球化学数据处理与分析过程中, 图解是研究工作的主要有效手段, 其以二维平面图形的形式简单、直观地表现出岩石地球化学的规律性。

随着计算机技术的推广应用, 国内外的岩石地球化学图解处理分析软件不断涌现, 如 IsoPlot^[3]、GCIS^[4]、CGDK^[5]、GCDkit^[6]、GeoKit^[7]、Petro-Graph^[8]、GCDPlot^[9]、GeoPlot^[10]、Minpet、IGpet、GeoMDIS 等。然而这些软件或多或少都存在各类问题: ①多数软件无岩石地球化学参数计算和扩展模块, 无法完成常用的岩石地球化学参数、岩石标准矿物计算; ②收录岩石地球化学图解的数量有限, 也没有准确的分类, 使得用户在使用过程中无法迅速完成所需要的图解制作; ③图解定义和扩展功能不足,

大部分软件仅完成了二轴图和三角图图解的基本功能, 对于特殊的向量图解(如扎氏图解)、四变量图解(如玄武岩类岩石的 OQNH 命名图解)无能为力, 另外, 部分软件图解功能为软件内置, 无法添加或扩展新的图解类型; ④对外部软件或操作系统具有依赖性, 上述岩石地球化学图解软件大部分是基于第三方软件(Microsoft Excel^[11]、CorelDRAW、R 语言等)开发的控件、插件或宏, 对母体软件的版本具有强烈的依赖, 还有部分软件为早期 Windows XP 时代开发, 在现今常用的 Windows7、Windows10 系统下已经无法运行。

1 研究工作思路及改进方案

笔者充分吸收国内外同类型软件的优点, 针对上述软件存在的主要问题, 提出了整套改进方案, 在岩石地球化学参数计算和扩展、岩石地球化学图解种类和数量、图解定义和扩展、软件运行平台等方面着手, 最终研发出 RockPlot 岩石地球化学图解软件^[12]。

1.1 软件的开发平台、系统体系结构设计

软件开发基于 WPF (windows presentation foun-

dation), WPF 属于 .NET Framework 3.0^[13] 的一部分, 是 Windows Vista 及其更高版本操作系统的默认组件。基于 WPF 开发岩石地球化学软件保证了软件的独立性, 既能在主流操作系统上直接运行, 又不依赖于第三方软件。

WPF 是微软新一代图形系统, 内部的图形对象已经提升到与控件几乎平等的地位, 其 System.Windows.Shapes 命名空间包含 Shape 和 Line、Polyline、Polygon、Path、Ractangle、Ellipse 等类, 这些“类”是岩石地球化学图解中的基本“元件”, 而 WPF 中的 Canvas 容器, 允许在指定的坐标位置放置上述基本形状类“元件”, 这种“Canvas 容器”与“元件+坐标位置”的组合方式, 间接实现了岩石地球化学图解的绘制和矢量化输出。

另外, 软件采用自由开放的 JSON (javascript object notation) 交换格式文件^[14] 作为软件主要功能的配置模块。图解 JOSN 配置文件中使用数值精确控制 Canvas 容器中图形的各个“元件”的尺寸、位置、颜色等属性, 计算 JSON 配置文件中使用运算符及逻辑代码对地球化学参数计算的计算过程进行控制, 极大提升了软件的可扩展性和灵活性。

综上, RockPlot 软件总体上采用 C# 中经典的三层构架, 分为表现层 (UI)、业务逻辑层 (BLL)、数据访问层 (DAL), 通过三层构架将上述特性有机结合, 再加上实体类库 (Model), 采用“高聚合、松耦合”的架构模式, 实现了软件可定义、可扩展度强^[15]、矢量文件输出、可移植性强、体积小等优势。

表 1 RockPlot 岩石地球化学图解软件的构架

构架	功能	
表现层 (UI)	界面外观层	提供与用户交互的界面
	界面规则层	根据用户指令调用业务接口, 并将数据传给业务层
业务逻辑层 (BLL)	业务接口层	依据表示层的指令实时绘制图解和进行计算, 并且构造出实体, 呈现到表现层上
数据访问层 (DAL)		本地配置的读取和存储

1.2 岩石地球化学参数计算和扩展

要查明岩石之间化学成分的联系人和差异, 需要同时对比岩石中大量的氧化物, 而对比过程相当繁杂。因此, 人们探索以一定的方式将数量较多的氧化物结合成数量较少的对比单元, 并选择适当的对比标准, 使对比工作变得简单、清晰。由于不同作者采用的自然矿物组合、分配方式、换算原则的差异, 从而出现了许多不同的岩石化学算法。

在 20 世纪 30 年代前后, 各种岩石化学计算方

法和分类方法相继提出^[16], 主要的计算方法为标准矿物算法 (CIPW 法^[17]、巴尔特—尼格里法、花岗岩类自然矿物法^[18])、全岩特征值算法 (尼格里法、王恒升法、吴利仁法、扎瓦里茨基法)、体积关系比较法 (标准体积中组分分子数法、巴尔特法、原子—重量法)、同型氧化物算法 (列文生—列星格法) 等, 还有其他众多的不同用途的岩石化学指数以及稀土元素化学参数计算。

各类岩石地球化学计算方法出发点不同, 计算方式各不相同, 需要将各种方法的计算过程编译成计算机语言, 软件才能顺利运算。而前人及文献中提出的岩石化学计算过程均为人工推算, 为单线程的方式, 不是通用流程, 较难编译成计算机可运行的通用式逻辑运算, 且各种计算方式过程复杂、流程分支多、互相嵌套、条件判断不严密等, 都可能造成计算机运算中断、错误。

基于上述问题, 笔者通过比对各种计算方法, 将地球化学计算过程从单线程的流水线方式改进为分步模式。软件除了实现常规的数学、三角、指数、幂次 (+、-、×、÷、sin、cos、log 等) 等数学计算之外, 还实现了布尔逻辑运算、条件判断分支运算 (if、&&、|| 等) 等高级流程控制, 用户通过 JSON 文件编译并自建流程精确控制流程中的逻辑关系, 将复杂的计算过程变成分步式可编程定义的形式, 运算中各个分支都能准确有效地运算, 不仅实现了复杂的岩石地球化学计算, 还很大程度上保证了计算功能的可扩展性。

例如尼格里岩石化学算法中岩石分类的条件判别如下:

正常类型: $alk < al < alk + c$
铝过饱和类型: $al > alk + c$
碱过饱和类型: $al < alk$

通过 RockPlot 中的逻辑、条件控制编译后的 JSON 交换格式语言如下:

```
"Name": "岩石类型"  
"Formula": "  
if( @ al@ >@ alk@ && @ al@ <@ alkc@ ) { '正常'  
if( @ al@ >@ alkc@ ) { '铝过饱和'  
if( @ al@ <@ alk@ ) { '碱过饱和'  
"
```

使用 JSON 交换格式文件简单、清晰地实现了尼格里岩石分类的条件判别。

1.3 图解的定义和扩展

对于岩石地球化学图解, 有多种表现形式, 虽然种类繁多, 但其核心的绘图方式是建立在人类所能

理解并利于传播的二维平面图形的形式。根据图解图面要素,几乎所有图解都可以分割为图解类型、坐标系统、分类方案、数据变量等几部分。

因此,岩石地球化学图解的绘制可以作为程序的功能模块抽象出来,形成不同类型的图解控件,并将不同的图解类型、坐标系统、分类方案、数据变量的要素形成依赖属性,通过文件定义,以参数的形式传给图解控件模块,从而实现程序的可扩展和开放性。RockPlot 软件系统定义的主要依赖属性结构如下。

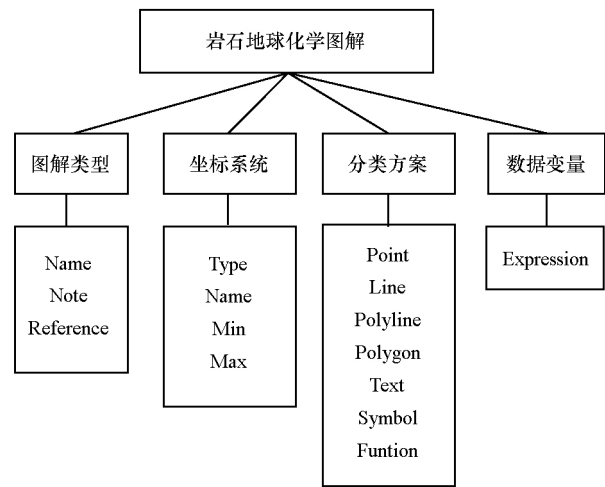


图 1 定义图解的主要依赖属性结构

为实现这部分功能,采用了统计和分析的方法,对地球化学图解制订统一的直线、曲线、区、填充、符号、字符、尺寸、颜色、位置、字体等的语义描述,采用 JSON^[19] 交换格式文件对要素进行语义描述,定义各种依赖属性,从而实现图解的绘制、扩展以及进行数据交换。

玄武岩 $w(\text{Zr})/w(\text{Y})-w(\text{Ti})/w(\text{Y})$ 判别图解的 JSON 交换格式文件如下^[20]:

```
"ChartName": "玄武岩 Zr/Y-Ti/Y 判别图解",
"SubChartName": "据 Pearce 和 Gale,1977",
"Type": "scatter",
"ChartWidth": 800.0,
"ChartHeight": 600.0,
"PlotAreaBorderColor": "#00FFFFFF",
"MarkerTypes": "Name",
"Sizes": "12",
"Colors": "#FF000000",
"XExpressions": ["[ Ti ]/[ Y ]"],
"YExpressions": ["[ Zr ]/[ Y ]"],
"PlotType": "xy",
"AxisList": [ {
    "Position": "left",
```

```
"Type": "line",
"Name": "Zr/Y",
"Max": 7.5,
"Min": 0.0,
}, ],
.....
"AnnotationList": [ {
    "Type": "text",
    "Text": "板缘玄武岩",
    "Color": "#FF000000",
    "Size": 12.0,
    "Font": "华文中宋",
    "TextPositionX": 200.0,
    "TextPositionY": 2.3
}, ],
"SeriesList": [ {
    "Name": "分类方案 1",
    "Type": "line",
    "Points": [
        { "X": 513.0, "Y": 0.0 },
        { "X": 77.5, "Y": 38.97 }
    ],
    "Color": "#FF000000",
    "Size": 1.0,
}, ]
```

JSON 文件代码中,冒号前面的内容代表各种依赖属性,冒号后面的内容代表各要素属性的语义描述,其结构清晰、简单明确,每个图解形成单独的 JSON 文件个体,互不影响,可扩展性极高^[21]。

1.4 图解的种类和数量

岩石地球化学图解和原理分散在各种文献中,通过整理岩石地球化学资料,查找岩石地球化学图解原始出处,并研究其发展路线,根据原始资料及原作者提供的数据对图解进行数字矢量化,确保数据的准确性。

目前 RockPlot 软件收集常用固定格式的图解 200 余个,分为 7 大类,涵盖沉积岩、变质岩、火山岩、侵入岩的岩石分类^[22-24]、成因分析、构造源区判别等。在软件中以 Treeview 的树形结构形式显示图解分类,按照文件夹形式自动形成排序、分类。

2 功能展示

图 2 是基于上述解决方案的基础上设计的 RockPlot 岩石地球化学图解主界面,将界面分为菜单栏(Menu)、图解索引区(Treeview)、图解显示区

(Canvas of plot)、状态栏(Status bar)4 个区域,其中菜单栏包含 4 个模块,分别是地球化学参数计算、参数计算配置编辑、地球化学图解、图解配置扩展。

2.1 地球化学参数计算与扩展

地球化学参数计算为软件的主要核心模块之一,纳入了岩石地球化学发展过程中的各种主要计算方法。通过编程语言 JSON 的控制,完成复杂的

计算过程。图 3 中显示了常用的岩石地球化学参数计算配置的编辑,选择需要编辑的参数后,在右侧的公式编辑框中使用软件内置的各种数学计算或者逻辑运算实现计算过程。图中展示了 Mg# 的计算过程。

$$Mg\# = [MgO] / 40.3044 / ([MgO] / 40.3044 + ([FeO] + 0.8998 * [Fe2O3]) / 71.9464$$

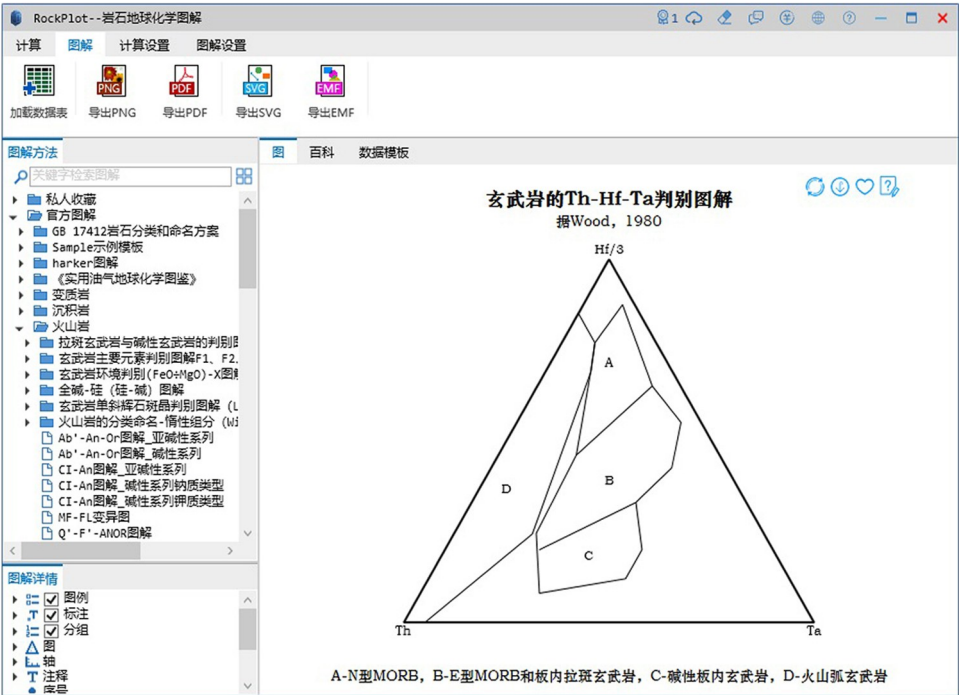


图 2 RockPlot 系统主界面

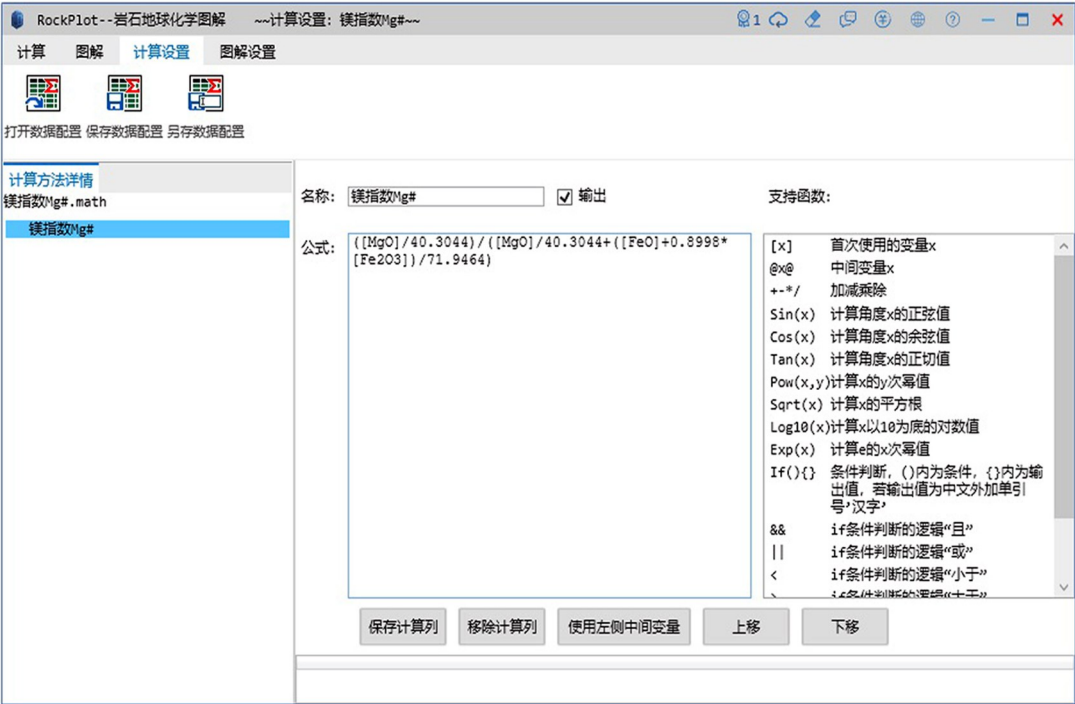


图 3 地球化学参数计算扩展

2.2 地球化学图解

此模块是 RockPlot 的核心功能,在用户加载数据后,读取相应的 JSON 配置文件,通过软件编译 JSON 文件配置信息,将用户加载的数据转化为坐标点、线和注释字符,投影到岩石地球化学图解的图面上,并在屏幕上显示出图解结果。目前支持 png、pdf 位图格式,svg、emf 矢量格式的文件输出。

2.3 图解配置扩展

用户可以在图解扩展的界面中将 RockPlot 未纳入的图解添加到系统中,通过在软件中以实时交互的方式对图解的类型、坐标系统、分类方案、数据变量等进行修改编辑,完成编辑后保存为 JSON 交换格式文件,该图解就自动加入 RockPlot 软件系统中,并在软件界面中显示,从而完成图解的扩展。

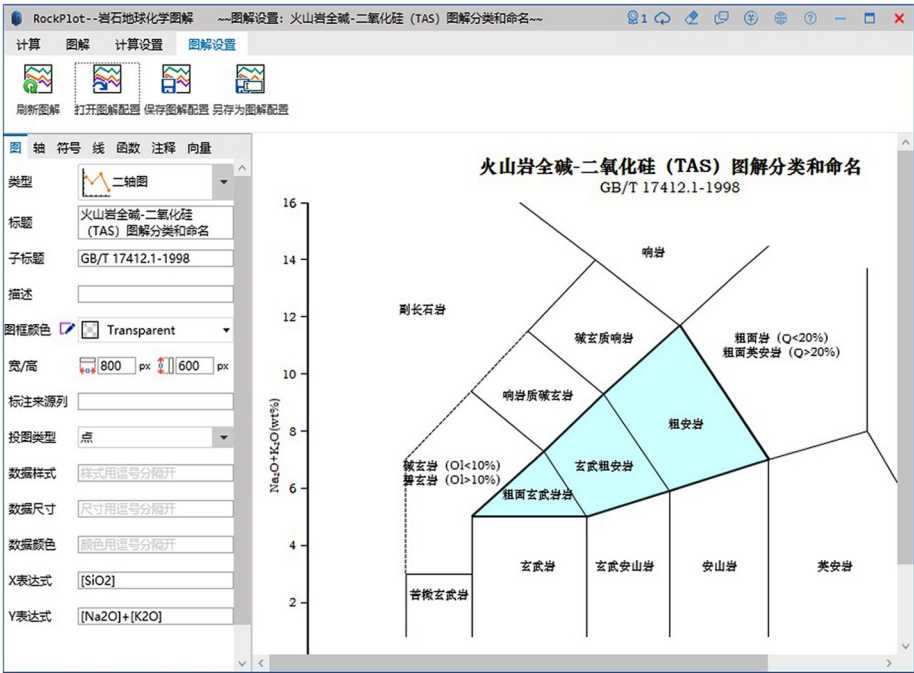


图 4 图解扩展

3 存在的不足和今后的发展方向

3.1 功能对比

岩石地球化学领域现今常用的图解和计算软件为 Geoplot、SigmaPlot,其中 Geoplot 是地学专业软件的代表,SigmaPlot 是统计学成图软件的代表。二者面向用户不同,各有所长,与 RockPlot 主要功能对比如下。

表 2 RockPlot、GeoPlot、SigmaPlot 功能对比

指标	Geoplot	SigmaPlot	RockPlot
运行平台	Excel vba	可独立运行	可独立运行
地球化学图解	内置部分图解	需自制图解	内置大量图解
地球化学计算	内置部分计算	无计算功能	内置大量计算
扩展性	不可扩展	不可扩展	扩展性极高

由表可知,RockPlot 是针对岩石地球化学研究需求而专门定制的软件,在图解、计算和扩展功能上均具有较强的优势。

总体看来,RockPlot 岩石地球化学图解软件是

应用计算机处理岩石地球化学数据的一次尝试。软件采用 JSON 文件作为软件的统一配置模块,实现了计算功能与图解功能的扩展;基于 WPF 开发保证了软件的独立性,不依赖第三方软件及操作系统,并实现了矢量格式文件的输出。系统集岩石地球化学计算与图解功能于一身,提供了综合、整体的岩石地球化学应用体系。

3.2 不足与发展方向

RockPlot 软件存在的不足之处是,未将地学研究重要手段的同位素地球化学参数计算与图解纳入软件,另外在地球科学领域,GIS 软件 (MapGIS、ArcGIS、ArcInfo 等) 已得到广泛的普及应用,软件目前还未实现与 GIS 的关联。

RockPlot 软件下一步除实现同位素模块和 GIS 关联外,还将搭建基于云环境 (Web 平台) 的岩石地球化学服务平台,使用国际通用的 HTML5 规范语言,将计算、图解功能移植到 Web 平台下,用户不需要运行客户端软件,只需打开网页浏览器就能完成所有操作,实现真正意义跨平台的云服务。

参考文献:

[1] 邱家骧,林景仟.岩石化学[M].北京:地质出版社,1991.

[2] Rollison H R.岩石地球化学[M].杨学明,杨晓勇,陈双喜,译.合肥:中国科技大学出版社,2000:40-83.

[3] Ludwing K R.Users manual for isoplot/Ex Rev.2.49: A geochronological toolkit for microsoft Excel[M]. Rerkdey:Berkeley Geochronology Center, 2001.

[4] Janousek V, Farrow C M, Erban V. Interpretation of whole-rock geochemical data in igneous geochemistry:introducing geochemical data toolkit(GCDkit) [J]. Journal of Petrology, 2006, 47(6): 1255-1259.

[5] Qiu J T, Song W J, Jiang C X, et al. CGDK: An extensible CorelDRAW VBA program for geological drafting [J]. Computers & Geosciences, 2013, 51: 34-38.

[6] 马海勇,董云鹏,杨钊,等.GCIS 地球化学工具软件的设计及其在地学中的应用[J].大地构造与成矿学,2013,37(3):546-552.

[7] 路远发.一个用 VBA 构建的地球化学工具软件包[J].地球化学,2004,33(5):460-464.

[8] Petrelli M, Poli G, Perugini D, et al. PetroGraph: A new software to visualize, model, and present geochemical data in igneous petrology [J]. Geochemistry, Geophysics, Geosystems, 2005, 6(7): 1029.

[9] Wang X R, Ma W F, Gao S, et al. GCDPlot: An extensible Microsoft Excel VBA program for geochemical discrimination diagrams [J]. Computers & Geosciences, 2008, 34: 1964-1969.

[10] Zhou J B, Li X H. GeoPlot: An Excel VBA program for geochemical data plotting[J]. Computers & Geosciences, 2006, 32: 554-560.

[11] 李静.Excel 软件在岩石学研究中的作图应用[J].云南地质, 2001,20(4):401-405.

[12] 刁明光,薛涛,吕志成,等.岩石地球化学图解信息分析辅助系统的研究与开发[J].地质通报,2011,30(5):729-736.

[13] 周杰韩.NET 框架与元模式研究[J].计算机工程与应用,2002, 38(23):141-143.

[14] Houlding S W. XML: An opportunity for meaningful data standards in the geosciences[J]. Computer & Geosciences, 2001, 27: 839-849.

[15] 陈三明,胡建明,丁彦礼,等.地学信息工程实用软件教程[M].北京:冶金工业出版社,2009.

[16] C·Д·契特维里科夫.岩石化学换算指南[M].刘智星,张世瑾,刘学伦,译.北京:中国工业出版社,1963.

[17] 刘宝良.CIPW 标准矿物计算法应用时存在问题的探讨[J].地质与资源,2001,10(3):180-183.

[18] 朱为方,唐春景.花岗岩类自然矿物岩石化学换算法及其应用[M].贵阳:贵州人民出版社,1983.

[19] 陈玮,贾宗璞.利用 JSON 降低 XML 数据冗余的研究[J].计算机应用与软件,2012,29(9):188-190.

[20] 薛涛,刁明光,吕志成.岩石地球化学图解辅助分析软件的关键问题及解决办法[J].现代地质,2013,27(6):1316-1322.

[21] Jack Xu. Practical WPF charts and graphics [M]. New York: Springer-Verlag, 2009.

[22] 国家质量技术监督局.GB/T 17412.1-1998 岩石分类和命名方案:火成岩岩石的分类和命名方案[S].北京:中国标准出版社,1998:4-6.

[23] 国家质量技术监督局.GB/T 17412.2-1998 岩石分类和命名方案:沉积岩岩石的分类和命名方案[S].北京:中国标准出版社,1998:2-3.

[24] 国家质量技术监督局.GB/T 17412.3-1998 岩石分类和命名方案:变质岩岩石的分类和命名方案[S].北京:中国标准出版社,1998:2-3.

Research and development of the lithogeochemical plot software based on WPF

ZHOU Xuan¹, LU Jian², JIN Yu¹

(1. Xinjiang Oyasa Mineral Exploration Co., Ltd., Urumqi 830011, China; 2. Fujian Gader Tech Co., Ltd., Fuzhou 350001, China)

Abstract: The RockPlot software used for plotting of lithogeochemistry is a new attempt which studies the calculation and plotting of geochemical parameters of rocks and processes geochemistry data of rock on computer. The system uses WPF technology and adopts loosely coupled plug-in design to ensure the independence of calculation and plotting of lithogeochemistry, and also to maintain the integrity of the system. Besides, the system applies lightweight data format of JSON that is simple and easy to read and write as a unified configuration module for the calculation and plotting of lithogeochemistry, provides highly flexible expansion function and realizes vectorization output. The system integrates computational and plotting functions, thus providing a comprehensive and integrated application system of lithogeochemistry.

Key words: windows presentation foundation; lithogeochemistry; lithogeochemistry plot; calculation of lithogeochemistry parameter; three-tier architecture