

УДК: 004.9

Интерактивный реестр геосенсоров на основе веб-приложения

С. Д. Иванов

Институт физики Земли им. О. Ю. Шмидта РАН,
Россия, 123242, г. Москва, Б. Грузинская ул., д. 10, стр. 1

E-mail: f0ma@ifz.ru

Получено 14.03.2016, после доработки — 26.05.2016.

Принято к публикации 07.08.2016.

Выбор и корректное использование инструмента минеральной геотермобарометрии — геосенсора — является сложной задачей из-за большого разнообразия существующих сенсоров, с одной стороны, и наличия специфических требований к их использованию с другой. Для снижения трудоемкости и обеспечения информационной поддержки использования геосенсоров в статье предлагается организация набора геосенсоров в рамках компьютерной системы, называемой интерактивным реестром. В статье дается формальное описание термодинамического геосенсора как функции состава минералов и независимых параметров, а также рассматриваются основные этапы получения оценок давления и температуры, общие для всех сенсоров: переход к коэффициентам формул, расчет дополнительных параметров и непосредственное вычисление искомого значения. Рассматриваются существующие программы — коллекции геосенсоров, выполненные как в виде отдельных приложений, так и в виде электронных таблиц, анализируются достоинства и недостатки этих подходов. Дается описание справочной информации, необходимой для использования геосенсора: в минеральном парагенезисе, в точности и пределах значений параметров, в литературной ссылке и др. Предлагается реализации реестра геосенсоров на базе веб-приложения, использующего технологию вики. Применение технологии вики позволяет эффективно организовать плохо формализуемую справочную информацию о сенсоре и его алгоритм, записанный на языке программирования в рамках единой информационной системы. Для структурирования информации используются ссылки, пространства имен и вики-разметка. В статье рассматривается реализация данного приложения на основе вики-системы DokuWiki и специально разработанного RESTful-сервера, позволяющего пользователю использовать геосенсоры, описанные в реестре для обработки собственных данных. В качестве языка описания геосенсоров в приложении используется язык R, для выполнения расчетов используется сервер RServe. Для контроля корректности работы сенсоров каждый из них снабжается юнит-тестом. Пользовательский интерфейс приложения разработан в виде плагинов к системе DokuWiki. Приводится пример использования разработанного приложения. В заключение рассматриваются вопросы безопасности и производительности разработанного приложения, а также возможность его масштабирования.

Ключевые слова: геоберотермометрия, геосенсор, веб-приложение, вики

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 16–35–00571 мол_а.

UDC: 004.9

Web-based interactive registry of the geosensors

S. D. Ivanov

Schmidt Institute of Physics of the Earth of the RAS,
10–1 Bolshaya Gruzinskaya st., Moscow, 123242, Russia

E-mail: f0ma@ifz.ru

Received 14.03.2016, after completion – 26.05.2016.

Accepted for publication 07.08.2016.

Selection and correct applying of the geosensor – the instrument of mineral geothermobarometry is challenging because of the wide variety of existing geosensors on the one hand and the availability of specific requirements for their use on the other. In this paper, organization of the geosensors within the computer system called interactive registry was proposed for reducing the labor intensity of the geosensors usage and providing information support for them. The article provides a formal description of the thermodynamic geosensor, as a function of the minerals composition and independent parameters, as well as the basic steps of pressure and temperature estimation which are common for all geosensors: conversion to the formula units, calculation of the additional parameters and the calculation of the required values. Existing collections of geosensors made as standalone applications, or as spreadsheets was examined for advantages and disadvantages of these approaches. Additional information necessary to use the geosensor was described: paragenesis, accuracy and range of parameter values, reference and others. Implementation of the geosensors registry as the web-based application which uses wiki technology was proposed. Usage of the wiki technology allows to effectively organize not so well formalized additional information about the geosensor and its algorithm which had written in a programming language into a single information system. For information organization links, namespaces and wiki markup was used. The article discusses the implementation of the applications on the top of DokuWiki system with specially designed RESTful server, allowing users to apply the geosensors from the registry to their own data. Programming language R uses as a geosensors description language. RServe server uses for calculations. The unit-test for each geosensor allows to check the correctness of its implementation. The user interface of the application was developed as DokuWiki plug-in. The example of usage was given. In the article conclusion, the questions of the application security, performance and scaling was discussed.

Keywords: geothermobarometry, geosensor, web application, wiki

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2016, vol. 8, no. 4, pp. 621–632 (Russian).

The work was funded by RFBR projects 16–35–00571 mol_a.

Введение

Методы количественной оценки условий формирования горной породы на основе анализа химического состава минералов, слагающих ее, носят название «геотермометры» и «геобарометры». Эти методы также называют геосенсорами [Симакин, Закревская, Салова, 2012], геобаротермометрами [Авченко, Вах, Чудненко, Худоложкин, 2014] или инструментами [Перчук, Рябчиков, 1978].

Геосенсор, по сути, является моделью распределения химических элементов между компонентами горной породы в зависимости от условий ее формирования. Эти условия включают температуру, давление и исходный химический состав, а также, возможно, другие параметры, такие как активность и состав флюида. Конкретные числовые параметры такой модели могут рассчитываться теоретически, определяться в ходе эксперимента или на основе анализа большого количества природных образцов [Перчук, Рябчиков, 1978]. В последнем случае подразумевается, что условия эволюции данных пород известны благодаря другим методам. Процесс получения конкретных числовых параметров геосенсора носит название калибровки [Spear, 1995].

Существует большое разнообразие геосенсоров для различных пород и минеральных ассоциаций. Их число на сегодняшний день исчисляется многими десятками. Для одной минеральной ассоциации может существовать несколько различных геосенсоров, а для каждого сенсора может быть опубликовано несколько калибровок. Например, гранат-клинопироксеновый геотермометр, применяемый для оценки температур в эклогитах, высокобарных гранулитах, гранат-амфиболитах и гранат-перидотитах, предложенный Эллисом и Грином в 1979 году [Ellis, Green, 1979], совершенствуется до сих пор и насчитывает уже не менее двенадцати калибровок [Nakamura, 2009].

Серьезной проблемой, стоящей перед специалистом-геологом, является выбор конкретного сенсора или набора сенсоров, который допустимо применять к его исходным данным. Несмотря на фундаментальность принципов, лежащих в основе геобаротермометрии, существует большая опасность некорректного применения ее методов. Прежде всего, любой сенсор предполагает равновесность той минеральной ассоциации, к которой он применяется [Перчук, Рябчиков, 1978]. Также принципиальное значение имеет история химических реакций и процессов кристаллизации, происходивших в породе [Spear, 1995]. Кроме того, все калибровки сенсоров выполняются для конкретных горных пород, минеральных ассоциаций и диапазонов содержания химических элементов. Авторы сенсора, в свою очередь, могут накладывать дополнительные ограничения на его применение, в связи с чем может потребоваться дополнительное знакомство с первоисточником. Например, ограничения на использование биотитового геотермометра Генри [Henry, Guidotti, Thomson, 2005] включают ограничения на диапазон давлений, на содержание магния, на присутствие в ассоциации ильменита или рутила в качестве источника титана, на присутствие кварца в качестве источника кремния, а также на присутствие графита для обеспечения необходимых параметров флюида. Некоторые геосенсоры требуют сложного многоступенчатого расчета (см., например, [Перчук, 2004]) или специфических методов подготовки исходных данных (см., например, [Putirka, 2008]).

Организованные тем или иным образом коллекции сенсоров создавались неоднократно как в виде отдельных приложений (например, [Fonarev, Graphchikov, Konilov, 1991; Чудненко, Авченко, Вах, 2013] и др.), так и в виде электронных таблиц (например, [Brey, Bulatov, Giris, 2008; Preston, 2011; Nora et al., 2013] и др.). Оба подхода имеют свои достоинства и недостатки. Коллекции на основе электронных таблиц наиболее просты, однако реализация сложных методов расчета в них является чрезвычайно громоздкой и может потребовать нетривиального использования макросов. При работе в электронных таблицах велик объем рутинных операций и возрастает опасность случайной ошибки пользователя. Для приложений сложность методов

и опасность ошибки не так актуальны. Проблемой для них является совместимость с различными платформами в контексте существующего на сегодняшний день их большого разнообразия и быстрого устаревания. С появлением новых сенсоров и калибровок встает вопрос об актуализации таких коллекций и создании инфраструктуры обновлений. Как приложения, так и электронные таблицы, как правило, предоставляют пользователю скудную информацию о методе, ограничиваясь только названием сенсора и литературной ссылкой. Этих сведений может быть недостаточно для обоснованного выбора того или иного сенсора.

Эти проблемы делают актуальным создание реестра геосенсоров: информационной системы, объединяющей в себе большой набор различных алгоритмов геосенсоров и справочную информацию, необходимую для обоснованного выбора того или иного сенсора. Термин «реестр» вводится в данной работе для обозначения системы, сочетающей в себе организованное хранилище информации о методах, библиотеку алгоритмов методов и инструмента выполнения расчетов, позволяющего использовать имеющиеся в библиотеке методы. Данная совокупность возможностей не покрывается в полной мере такими распространенными терминами, как «база», «коллекция» или «библиотека», в то же время понятие «информационная система» слишком расплывчато и пространно. Кроме того, введением этого термина хочется подчеркнуть наличие в реестре некоторых требований и правил, применяемых при описании методов.

В данной работе рассмотрены архитектура и реализация реестра геосенсоров на основе веб-приложения, позволяющего собирать и организовывать методы в рамках общего каталога, снабжать каждый метод дополнительной справочной информацией благодаря использованию технологии вики и выполнять расчет непосредственно через Интернет без необходимости установки дополнительного программного обеспечения на компьютер пользователя.

Формальное описание геосенсора

Общее определение геосенсора можно дать в виде следующей функции:

$$V = f(C_1, C_2, \dots, C_n, a_1, a_2, \dots, a_p),$$

где V — определяемое сенсором значение (температура в случае термометра и давление в случае барометра), f — функция сенсора, C_1, \dots, C_n — составы минералов, a_1, \dots, a_p — свободные параметры. Число минералов n , вовлеченных в расчет, может колебаться от одного (в случае мономинерального сенсора) до 4–5 (для сенсоров, моделирующих реакции в многокомпонентных системах, например, GASP [Holdaway, 2001] или GPMB [Hodges, Crowley, 1985]). Следует отметить, что в это число входят только те минералы, химический состав которых непосредственно используется в расчете, а не все минералы парагенезиса, для которого разработан сенсор. Количество свободных параметров p может быть равным нулю. В этом случае определяемое значение зависит только от химического состава минералов. Однако, как правило, p равно 1. Тогда в качестве a_1 выступает второй термодинамический параметр (для геобарометра — температура, для геотермометра — давление). Возможно использование и других внешних параметров. Например, в хлоритовых термометрах, рассмотренных в работе [De Caritat, Hutcheon, Walshe, 1993], необходим учет солености водного флюида и активности CO_2 .

Вычисление значения функции f можно представить в виде нескольких последовательных этапов. Первым является переход к коэффициентам формул (к. ф.), которые, как правило, и используются при построении геосенсора. Для этого исходный состав нормируется на содержание определенного элемента или их суммы:

$$C_i^n = f_i^n(C_i),$$

где f_i^n — функция, выполняющая геохимический пересчет (нормирование) для i -го минерала, C_i^n — пересчитанный состав i -го минерала. Распространенным подходом является нормирование на сумму катионов или количество атомов кислорода в элементарной ячейке минерала. Микронзондовый анализ, являющийся наиболее распространенным методом исследования составов отдельных минералов в горных породах, не позволяет определять содержание элементов легче углерода и не различает степени окисления элементов [Reed, 2005]. Из-за этого алгоритм нормирования часто дополняется расчетом содержания железа Fe^{3+} и Fe^{2+} . Эти значения вычисляются на основе оценки дисбаланса между катионами и анионами. Также алгоритм пересчета может включать в себя вычисление содержания элементов в различных слоях кристаллической структуры минерала. Например, сложный многоэтапный алгоритм расчета для амфиболов представлен в работе [Holland, Blundy, 1994].

После пересчета могут рассчитываться дополнительные величины, такие как содержание отдельных минералов и характеристические коэффициенты, например магнетиальность, щелочность и т. п., которые также могут быть использованы при расчете искомого параметра

$$X_i = f_i^x(C_i^n),$$

где f_i^x — функция, рассчитывающая соответствующие дополнительные значения.

Наконец, расчет искомого параметра выполняется с помощью соотношения

$$V = f'(C_1^n, C_2^n, \dots, C_n^n, X_1, X_2, \dots, X_m, a_1, a_2, \dots, a_p),$$

где f' — функция, которая принимает в качестве аргументов пересчитанные составы минералов, дополнительные величины, а также свободные параметры.

Подобное разделение расчета на три этапа удобно, т. к. часто f^n и f^x определяются только минералом и могут быть использованы без изменений в нескольких сенсорах (например, стандартный пересчет для клинопироксена, предложенный в [Sturm, 2002]).

Геотермометр и геобарометр для одного типа пород могут объединяться в геотермобарометр [Аранович, 1991]. При этом вычисление давления и температуры происходит итерационно, начиная с определенных начальных значений:

$$\begin{cases} P = f_P(C_1, C_2, \dots, C_n, T', a_2, a_3, \dots), \\ T = f_T(C_1, C_2, \dots, C_n, P', b_2, b_3, \dots), \end{cases}$$

где f_P и f_T — функции барометра и термометра соответственно, а P' и T' — значения давления и температуры, полученные на предыдущем шаге алгоритма.

Интерактивный реестр

Интерактивный реестр методов геобаротермометрии должен решать следующие задачи: организация и хранение справочной информации о методах, хранение методов расчета, записанных на языке программирования, и расчета с помощью имеющихся методов. Учитывая тот факт, что выбор метода для выполнения конкретного расчета сам по себе является достаточно сложной для пользователя задачей, для обоснованного выбора сенсора реестр должен предоставлять как минимум следующую справочную информацию [Иванов, 2015]:

- информация о публикации: библиографическая ссылка на статью, по возможности ссылка на полнотекстовую версию статьи;
- информация о парагенезисе, для которого предназначен данный сенсор;

- точность метода;
- пределы входных и выходных значений;
- информация о наборе данных, на которых выполнялась калибровка;
- список геобаротермометров и/или их калибровок, которые могут рассматриваться как устаревшие в связи с публикацией данного сенсора;
- особые указания по использованию сенсора, данные автором и, возможно, другими пользователями.

Учитывая необходимость хранения большого числа плохо формализуемой информации о методе, следует обратить внимание на документоориентированные системы. В данной работе в качестве базовой системы для хранения этой информации была выбрана веб-система на основе технологии вики [Leuf, Cunningham, 2001].

Вики являются разновидностью систем управления содержимым веб-сайтов (англ. content management system, CMS). В первую очередь они предназначены для сайтов, материалы на которых размещают не только владельцы ресурса, но и его пользователи, причем пользователи работают совместно над одними и теми же материалами. Наиболее широко известным проектом, использующим технологию вики, является Википедия (<http://wikipedia.org>). В сфере наук о Земле в России широко известен проект «Все о геологии» (<http://geo.web.ru/>).

Основными чертами сайтов, основанных на технологии вики, являются: возможность многократно править текст страниц инструментами самого сайта; наличие специального языка разметки, позволяющего легко выделять структурные и семантические элементы текста, добавлять гиперссылки; наличие системы управления версиями страниц и истории правок; ориентация на работу со многими авторами [Leuf, Cunningham, 2001]. Хотя считается, что в вики вносить изменения в страницы может любой пользователь, современные вики поддерживают списки управления доступом (англ. access control lists, ACL), которые позволяют гибко задавать права на доступ к отдельным страницам и разделам вики, в том числе разграничивать уровни доступа между пользователями, авторами и администраторами.

Использование веб-приложения позволяет снять проблему совместимости, так как для работы с ним не требуется установка дополнительного программного обеспечения на компьютер пользователя. Также снимается проблема актуальности, так как пользователи всегда работают с последней доступной версией системы. В качестве недостатка данного решения следует отметить, что для использования веб-приложения необходим доступ в Интернет. Для устранения этого недостатка необходимо обеспечить возможность загружать реестр или определенную его часть на компьютер пользователя для работы без подключения к Интернету.

При использовании технологии вики описание сенсора, дополнительную информацию о нем и его исходный код можно хранить непосредственно на странице, посвященной данному сенсору. При этом для выделения структурных элементов страницы необходимо использовать вики-разметку. В современных вики-системах могут использоваться как встроенные, так и добавляемые с помощью модулей элементы вики-разметки. Организация страниц внутри вики-системы может быть выполнена при помощи механизма пространств имен. Также для организации страниц могут быть использованы теги и гиперссылки.

Код, размещенный на странице метода, должен следовать определенному установленному интерфейсу взаимодействия с системой. В данной работе для решения этой задачи были разработаны конвенции, которым должен следовать код метода. Конвенции касаются не только оформления кода, но и тех идентификаторов, которые должны в нем использоваться. Кроме

того, размещенный код должен быть снабжен юнит-тестом, который обеспечивает формальную проверку корректности его работы.

Отдельные страницы в рамках веб-приложения должны быть выделены для организации интерактивного взаимодействия с пользователем: проведения расчетов с использованием доступных методов. Это могут быть отдельные страницы сайта или, как и сделано в данной работе, страницы самой вики с интегрированными в них элементами управления.

Реализация

Общая архитектура разработанного приложения представлена на рисунке 1. Базовой платформой для разработки реестра методов был выбрана открытая система DokuWiki, ориентированная на совместную работу с технической документацией (<https://www.dokuwiki.org/>). DokuWiki предоставляет широкий набор инструментов для организации информации, как встроенных в систему (язык разметки, гиперссылки, пространства имен, поиск и др.), так и предоставляемые в виде подключаемых модулей (теги, инфографика и др.). Система написана на языке программирования PHP и предоставляет развитый API для подключения сторонних модулей — плагинов.

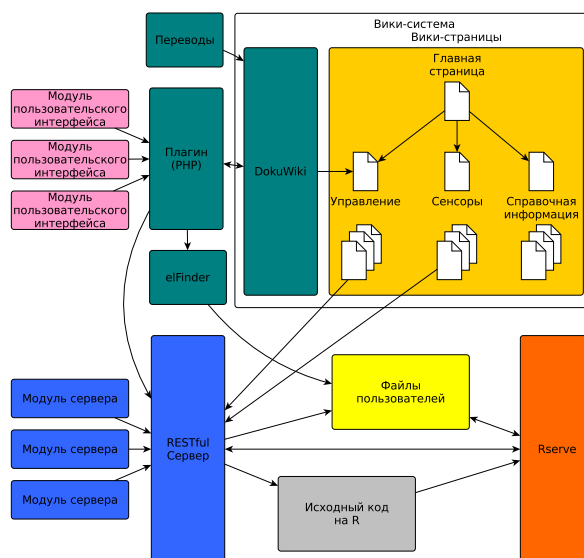


Рис. 1. Архитектура разработанного реестра методов геобаротермометрии

Для каждого метода, добавляемого в реестр, выделяется отдельная страница вики, имеющая уникальный адрес (URL). Страницы, посвященные методам расчета, организованы при помощи системы пространств имен. Выделяются пространства имен для геобарометров, геотермометров, фугометров, методов минералогического пересчета, методов построения дискриминационных диаграмм и методов расчета дополнительных величин. Для каждого пространства создается страница с содержанием, на которой перечислены все доступные для использования методы. Страница каждого метода состоит из заголовка, краткого описания, карточки с основными сведениями о методе, раздела с подробным описанием и его исходным кодом, записанным на языке программирования R¹. Язык R в решении подобных задач также используется в инструментари GCDKit [Janousek, 2006].

¹ R — свободный интерпретируемый язык программирования, обладает C-подобным синтаксисом и имеет в своем арсенале мощные инструменты для работы с табличными данными, характерными для геохимических расчетов.

Интерфейс выполнения расчетов, управления файлами и построения графиков реализован с помощью *модулей пользовательского интерфейса*, написанных на HTML с использованием JavaScript. Модули встраиваются в отведенные для них страницы вики с помощью специально разработанного плагина к системе DokuWiki.

Центральным компонентом разработанного приложения является *RESTful-сервер* [Fielding, 2000], написанный на языке программирования Python3 на основе библиотеки web.py (<http://webpy.org/>), который решает следующие задачи: извлечение кода методов из вики-страниц, управление сервером вычислений, обработка информационных запросов и запросов на расчет от модулей пользовательского интерфейса (через REST API с использованием AJAX¹), управление доступом к данным пользователей. Сервер состоит из ядра, обеспечивающего базовые функции HTTP-сервера, и подключаемых модулей, обрабатывающих запросы от соответствующих модулей пользовательского интерфейса. Ядро сервера предоставляет подключаемым модулям API для работы с файлами пользователя, сервером вычислений и реестром методов. Также данный сервер по запросу пользователя формирует мгновенный снимок всех доступных методов и позволяет загрузить его в виде архива. Это позволяет работать с сенсорами локально на компьютере пользователя без необходимости подключения к Интернету.

Для непосредственного исполнения кода методов используется *сервер вычислений* RServe. При получении запроса на расчет RESTful-сервер подключается к RServe и дает команду на загрузку соответствующего метода, после чего вызывает его, передавая необходимые параметры.

Все текстовые данные в системе имеют кодировку Unicode UTF-8. Поддержка многоязычности реализована средствами DokuWiki. Интерфейс системы на данный момент поддерживает два языка: русский и английский. Описание геосенсоров в реестре дается на языке первоисточника.

Пользовательский интерфейс и пример использования приложения

Полный цикл работы с приложением включает в себя несколько этапов: импорт данных в приложение, выбор интересующего сенсора, расчет с его использованием и экспорт результатов.

Импорт, просмотр и экспорт файлов осуществляются через страницу управления файлами (рис. 2, а), выполненную с использованием файлового менеджера eFinder (<http://elfinder.org/>), подключенного к DokuWiki в качестве плагина. В ходе импорта файл из формата электронных таблиц (xls, xlsx, csv, ods) преобразуется к формату, принятому в системе (csv-файл, размеченный в соответствии с RFC4180 [Shafranovich, 2005]). После этого файл становится доступным для других модулей пользовательского интерфейса.

Расчет с использованием геосенсоров может быть выполнен на соответствующей странице (рис. 2, б). Для этого необходимо выбрать тип сенсора и конкретный сенсор. После этого можно ознакомиться с кратким описанием сенсора, а при необходимости и с полным, нажав кнопку «Подробнее». После этого следует выбрать файл с исходными данными из списка доступных и конкретные составы из него, задать диапазоны для свободных параметров и нажать кнопку «Рассчитать» для выполнения расчета.

В качестве примера использования приложения можно рассмотреть оценку пиковых условий метаморфизма для эклогитов Блыбского комплекса Северного Кавказа с помощью нового сенсора, полученного на основе анализа большого объема литературных данных [Камзолкин, Иванов, Конилов, 2015]. Данный сенсор использует стандартный пересчет на 11 атомов кислорода. В качестве входных данных использовалась электронная таблица, содержащая составы

¹ AJAX (от англ. Asynchronous Javascript and XML) — механизм взаимодействия между браузером и веб-сервером, при котором обмен данными происходит без перезагрузки страницы.

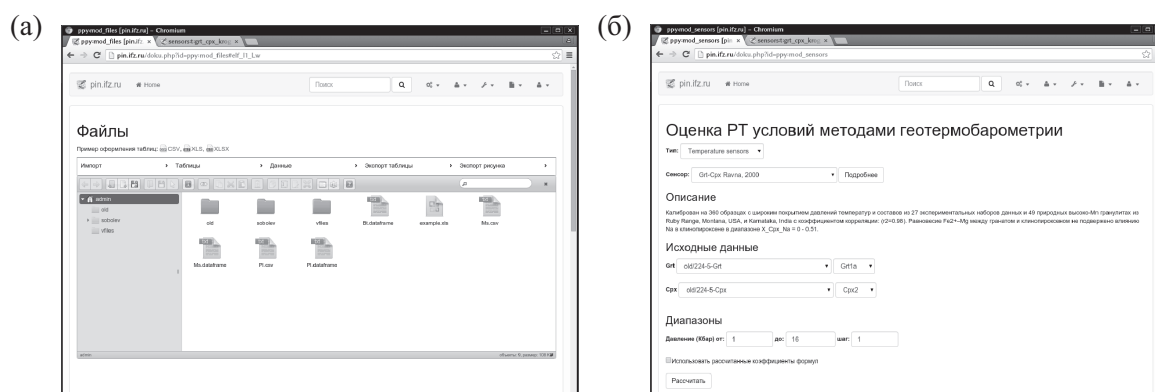


Рис. 2. Снимки экрана приложения: а) страница управления файлами; б) страница расчета с использованием геосенсоров

фенгита из образцов, отобранных В. А. Камзолкиным в ходе полевых сезонов 2012–2014 годов. Таблица, содержащая составы образцов в виде весовых процентов окислов, была отформатирована в соответствии с требованиями, предъявляемыми приложением к импортируемым данным, и сохранена в формате xls. Далее она была загружена в приложение через файловый менеджер, импортирована как набор данных и в модуле «Оценка РТ условий с помощью геосенсоров» был выполнен расчет. Для этого из списков были выбраны упомянутый выше сенсор и импортированный набор данных, а также была задана температура в 680 °С, установленная для пиковых условий проградного метаморфизма эклогитов урочища Красной Скалы на р. Уруштен [Perchuk, Philiprot, 1997], после чего был выполнен непосредственно расчет. Фрагмент исходных данных и результатов представлен в таблице 1. В результате дальнейшей статической обработки полученных результатов и учета погрешности изменений был оценен диапазон давлений пиковых условий метаморфизма для данных пород [Камзолкин, Иванов, Конилов, 2015].

Заключение

В данной работе представлены веб-приложение (реестр геобаротермометров), сочетающее в себе информационно-справочную систему по методам геобаротермометрии, и инструмент для выполнения расчетов с использованием этих методов. Приложение реализовано и развернуто на виртуальной серверной инфраструктуре ИФЗ РАН и доступно по адресу: <http://pin.ifz.ru>. Система была апробирована при исследовании возможностей фенгитового монуинерального геобарометра в рамках прикладной задачи оценки пиковых условий метаморфизма эклогитов Блыбского комплекса Северного Кавказа [Камзолкин, Иванов, Конилов, 2015].

Пополнение реестра новыми геосенсорами является достаточно трудоемкой задачей, требующей внимательного анализа первоисточника, выявления ключевых особенностей сенсора и его ограничений. Для решения этой задачи планируется привлечение к пополнению и правке реестра заинтересованных специалистов-геологов.

Юнит-тестирование на уровне методов позволяет контролировать их работоспособность. Несмотря на то что данный подход не дает полной гарантии корректности реализации метода, следует отметить, что в существующих системах геобаротермометрии механизм контроля правильности выполнения расчета, как правило, отсутствует. Помимо выполнения юнит-теста, проводится статический анализ кода метода на наличие ошибок и нарушение конвенций, а также проверка соответствия страницы метода правилам оформления.

Таблица 1. Исходные данные (по [Камзолкин, Иванов, Конилов, 2015]) и результаты расчета с использованием приложения (фрагмент)

Исходные данные в весовых процентах окислов				
Name	124-1В-03	124-1В-07	kz10-11-02	kz10-11-05
SiO ₂ _wtp	46.92	45.23	51.52	45.28
TiO ₂ _wtp	0.50	0.64	0.74	0.11
Al ₂ O ₃ _wtp	29.43	30.63	27.29	24.32
FeO_wtp	3.61	4.22	3.49	3.66
MnO_wtp	0.18	0.01	0.04	0.00
MgO_wtp	2.28	1.49	2.80	3.07
CaO_wtp	0.00	0.27	0.00	0.05
Na ₂ O_wtp	0.64	0.69	0.42	0.04
K ₂ O_wtp	9.33	9.47	10.60	9.67
Результат расчета в °С и Кбар соответственно				
Name	124-1В-03	124-1В-07	kz10-11-02	kz10-11-05
T_seq	680	680	680	680
P_calc_ph_kamzolkin_ivanov	13	12	23	23

Имеющаяся у пользователей возможность создавать код, который будет выполняться на сервере, вызывает потенциальные проблемы с безопасностью. В данной работе для ее обеспечения используются два механизма. Во-первых, добавление кода метода в реестр для пользователей, не принадлежащих к группе разработчиков, производится только после его модерации, а анонимные пользователи не могут вносить изменения в страницы системы. Во-вторых, сервер вычислений RServe запущен от лица псевдопользователя nobody, что минимизирует последствия возможного исполнения вредоносного кода.

Все использованные в разработке программные пакеты и библиотеки являются свободным ПО. Благодаря применению механизма плагинов и выносу сервера в отдельное приложение имеется возможность обновления версий DokuWiki и других компонентов системы без нарушений ее работоспособности.

Наиболее узким местом системы с точки зрения производительности является передача данных между REST-сервером и RServe. Объем таких операций по возможности сокращен, передача данных в RServe ограничивается только вызовом функций. При необходимости передачи достаточно больших объемов данных они сохраняются в промежуточный файл.

При росте количества пользователей может встать задача горизонтального масштабирования. Наиболее актуальным является масштабирование на уровне сервера вычислений и на уровне доступа к данным. На уровне вычислений масштабирование может быть выполнено за счет запуска нескольких серверов вычислений и организации очереди запросов на расчет. На уровне доступа к данным масштабирование может быть реализовано за счет хранения данных в распределенных файловых системах, например GlusterFS [Iustinus, 2012].

Список литературы (References)

- Авченко О. В., Вах А. С., Чудненко К. В., Худоложкин В. О. Генезис гранатосодержащих пород Березитового месторождения (Верхнее Приамурье, Россия) // Геология рудных месторождений. — 2014. — Т. 56, № 1. — С. 19–40.

- Avchenko O. V., Vakh A. S., Chudnenko K. V., Khudolozhkin V. O.* Genesis granatosoderzhashhikh porod Berezitovogo mestorozhdeniya (Verkhnee Priamur'e, Rossiya) [Genesis of garnet-bearing rocks of Berezitovoye deposits (Upper Amur region, Russia)] // *Geologiya rudnykh mestorozhdenij*. — 2014. — Т. 56, No. 1. — С. 19–40 (in Russian).
- Аранович Л. Я.* Минеральные равновесия многокомпонентных твердых растворов. — М.: Наука, 1991. — 253 с.
- Aranovich L. Ya.* Mineral'nye ravnovesiya mnogokomponentnykh tverdykh rastvorov [Mineral equilibria of multicomponent solid solutions]. — Moskva: Nauka, 1991. — 253 s. (in Russian).
- Иванов С. Д.* Современная платформа для обработки результатов геохимических анализов // Физико-химические и петрофизические исследования в науках о Земле: Материалы конференции. — М., 2014. — С. 92–94.
- Ivanov S. D.* Sovremennaya platforma dlya obrabotki rezul'tatov geokhimicheskikh analizov [Modern platform for geochemical data processing] // *Fiziko-khimicheskie i petrofizicheskie issledovaniya v nauках o Zemle: Materialy konferentsii*. — Moskva, 2014. — С. 92–94 (in Russian).
- Камзолкин В. А., Иванов С. Д., Конилов А. Н.* Эмпирический фенгитовый геобарометр: Обоснование, калибровка и практическое применение // Записки Российского минералогического общества. — 2015. Т. 144, № 5. — С. 1–14.
- Kamzolkin V. A., Ivanov S. D., Konilov A. N.* Ehmpiricheskij fengitovyj geobarometr: Obosnovanie, kalibrovka i prakticheskoe primeneniye [Empirical phengitic geobarometr: calibration, substantiation and practical application] // *Zapiski Rossijskogo Mineralogicheskogo Obshhestva*. — 2015. Т. 144, No. 5. — С. 1–14 (in Russian).
- Перчук А. Л.* Петрология и минеральная хронометрия коровых эклогитов: Диссертация ... доктора геол.-мин. наук. — М., 2004. — 333 с.
- Perchuk A. L.* Petrologiya i mineral'naya khronometriya korovykh ehklogitov [Petrology and mineral chronometry of the crustal eclogites]: Dissertatsiya ... doktora geol.-min. nauk. — Moskva, 2004. — 333 s. (in Russian).
- Перчук Л. Л., Рябчиков И. Д.* Фазовое соответствие в минеральных системах. — М.: Недра, 1976. — 287 с.
- Perchuk L. L., Ryabchikov I. D.* Fazovoe sootvetstvie v mineral'nykh sistemakh [Phase matching in mineral systems]. — Moskva: Nedra, 1976. — 287 s. (in Russian).
- Симакин А. Г., Закревская О. Ю., Салова Т. П.* Оценка условий кристаллизации кортландитов Камчатки по составам амфиболов // Вестник Отделения наук о Земле РАН. — 2012. — Т. 4: спец. вып. — С. 1–4.
- Simakin A. G., Zakrevskaya O. Yu., Salova T. P.* Otsenka uslovij kristallizatsii kortlanditov Kamchatki po sostavam amfibolov [Evaluation of cortlandites crystallization conditions of Kamchatka on amphibole composition] // *Vestnik Otdeleniya nauk o Zemle RAN*. — 2012. — Т. 4: спец. вып. — С. 1–4 (in Russian).
- Чудненко К. В., Авченко О. В., Вах А. С.* Программа MS — петрологический инструмент для вычисления реальных количеств минералов в горной породе. Электронная библиотека ДВГИ ДВО РАН, 2013. — URL: http://fegi.ru/elibrary/elibrary/doc_details/361 (дата обращения: 14.03.2016).
- Chudnenko K. V., Avchenko O. V., Vakh A. S.* Programma MS — petrologicheskij instrument dlya vychisleniya real'nykh kolichestv mineralov v gornoj porode [Program MS — an petrological tool to calculate the actual amounts of the minerals in the rock]. Ehlektronnaya biblioteka DVGI DVO RAN, 2013. — URL: http://fegi.ru/elibrary/elibrary/doc_details/361 (access date: 14.03.2016) (in Russian).
- Brey G. P., Bulatov V. K., Girnits A. V.* Geobarometry for Peridotites: Experiments in Simple and Natural Systems from 6 to 10 GPa // *Journal of Petrology*. — 2008. — Vol. 49, No. 1. — P. 3–24.
- Caddick M. J., Thompson A. B.* Quantifying the tectono-metamorphic evolution of pelitic rocks from a wide range of tectonic settings: mineral compositions in equilibrium // *Contributions to Mineralogy and Petrology*, 2008. — No. 156. — P. 177–195.
- De Caritat P., Hutcheon I., Walshe J. L.* Chlorite Geothermometry: a Review // *Clays and Clay Minerals*. — 1993 — Vol. 41, No. 2. — P. 219–239.

- Ellis D. J., Green D. H.* An experimental study of the effect of Ca upon garnet-clinopyroxene Fe-Mg exchange equilibria // *Contributions to Mineralogy and Petrology*. — 1979. — No. 71. — P. 13–22.
- Fielding R. T.* Architectural Styles and the Design of Network-based Software Architectures, dissertation, submitted in partial satisfaction of the requirements for the degree of doctor of philosophy // *Information and Computer Science*. — Irvine: University of California, 2000. — P. 180.
- Fonarev V. I., Graphchikov A. A., Konilov A. N.* A consistent system of geothermometers for metamorphic complexes // *International Geology Review*. — 1991. — Vol. 33. No. 8. — P. 743–783.
- Gualda G.* MINCAL — Microsoft EXCEL workbooks to calculate mineral formulae. — URL: <https://my.vanderbilt.edu/ggualda/mincal/> (дата обращения: 14.03.2016).
- Henry D. J., Guidotti C. V., Thomson J. A.* The Ti-saturation surface for low-to-medium pressure metapelitic biotite: Implications for Geothermometry and Ti-substitution Mechanisms // *American Mineralogist*. — 2005. — Vol. 90. — P. 316–328.
- Holdaway M. J.* Recalibration of the GASP geobarometer in light of recent garnet and plagioclase activity models and versions of the garnet-biotite geothermometer // *American Mineralogist*. — 2001. — Vol. 86, No. 10. — P. 1117–1129.
- Holland T., Blundy J.* Non-ideal interactions in calcic amphiboles and their bearing on amphibole-plagioclase thermometry // *Contributions Mineral Petrology*. — 1994. — Vol. 116. — P. 433–447.
- Hodges K. V., Crowley P. D.* Error estimation and empirical geothermobarometry for pelitic systems // *American Mineralogist*. — 1985. — Vol. 70, No. 7–8. — P. 702–709.
- Hora J. M., Kronz A., Moller-McNett S., Worner G.* An Excel-based tool for evaluating and visualizing geothermobarometry data // *Computer & Geosciences*. — 2013. — Vol. 56. — P. 178–185.
- Iustinus T. A.* Glusterfs. — Saarbrücken: Cel Publishing, 2012. — P. 72.
- Janousek V.* Interpretation of Whole-rock Geochemical Data in Igneous Geochemistry: Introducing Geochemical Data Toolkit (GCDkit) // *Journal of Petrology*. — 2006. — Vol. 47, No. 6. — P. 1255–1259.
- Leuf B. A., Cunningham W.* The Wiki Way: Quick Collaboration on the Web. — Boston: Addison-Wesley, 2001. — P. 362.
- Massonne H.-J., Schreyer W.* Phengite geobarometry based on the limiting assemblage with K-feldspar, phlogopite, and quartz // *Contributions Mineral Petrology*. — 1987. — No. 96. — P. 212–224.
- Nakamura D.* A new formulation of garnet-clinopyroxene geothermometer based on accumulation and statistical analysis of a large experimental data set // *Journal of Metamorphic Geology*. — 2009. — Vol. 27, No. 7. — P. 495–508.
- Perchuk A. L., Philippot P.* Rapid cooling and exhumation of eclogitic rocks from the Great Caucasus, Russia // *Journal of Metamorphic Geology*. — 1997. — Vol. 15, No. 3. — P. 299–310.
- Preston J.* Gabbrosoft — Mineralogical spreadsheet. — URL: <http://www.gabbrosoft.org/spreadsheets.html> (дата обращения: 14.03.2016).
- Putirka K. D.* Thermometers and Barometers for Volcanic Systems // *Reviews in Mineralogy and Geochemistry*. — 2008. — Vol. 69, No. 1. — P. 61–120.
- Reed S. J. B.* Electron Microprobe Analysis and Scanning Electron Microscopy in Geology. Second Edition. — Cambridge, New York, Melbourne, Madrid, Cape Town, Singapore, San Paulo: Cambridge University Press, 2005. — P. 216.
- Shafraanovich Y.* RFC4180: Common Format and MIME Type for Comma-Separated Values (CSV) Files // *The Internet Society*. — 2005.
- Spear F. S.* Metamorphic Phase Equilibria and Pressure-Temperature-Time Paths. — Washington: Mineral Society of America, 1995. — P. 799.
- Sturm R.* PX-NOM an interactive spreadsheet program for the computation of pyroxene analyses derived from the electron microprobe // *Computers & Geosciences*. — 2002. — Vol. 28, No. 4. — P. 473–483.