

УДК 004.9:54,55

GEOCHEMICAL FUNCTIONS — НАДСТРОЙКА ДЛЯ ОБРАБОТКИ МИНЕРАЛОГО-ГЕОХИМИЧЕСКИХ ДАННЫХ В MICROSOFT EXCEL

Виктор Анатольевич Зайцев✉

Институт геохимии и аналитической химии имени В.И. Вернадского РАН (ГЕОХИ РАН), Москва, Россия; va_zaitsev@inbox.ru

Аннотация. Представлено описание программы-надстройки для Microsoft Excel, содержащей ряд функций для автоматизации рутинных операций, часто встречающихся при обработке минералогических и геохимических данных: нормировании величин, расчете формул минералов и статистической обработке анализов.

Ключевые слова: Microsoft Excel Add-ins, компьютерная программа, геохимические вычисления, расчет формул минералов, обработка неполных геохимических данных, обработка неравноточных результатов

Для цитирования: Зайцев В.А. Geochemical functions — надстройка для обработки минералого-геохимических данных в Microsoft Excel // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 4. Геология. 2022. № 3. С. 54–60.

GEOCHEMICAL FUNCTIONS ADD-IN TO MS EXCEL FOR GEOCHEMICAL AND MINERALOGICAL DATA PROCESSING

Victor A. Zaitsev✉

V.I. Vernadsky Institute for geochemistry and analytical chemistry RAS, Moscow, Russia; va_zaitsev@inbox.ru

Abstract. «Geochemical functions» is a new free Add-In to MS Excel for geochemists and mineralogists. It implements useful functions for routine operations in geochemical and mineralogical calculations: abundance normalization, calculations of empirical formula coefficients from chemical and EMPA analyses, statistical operations with partial and unequal data.

Keywords: Microsoft Excel Add-ins, geochemical calculations, calculations of empirical formulas of minerals, processing of incomplete data, the weighted average of measurements with unequal errors

For citation: Zaitsev V.A. Geochemical functions Add-In to MS Excel for geochemical and mineralogical data processing. *Moscow University Geol. Bull.* 2022; 3: 54–60 (In Russ.).

Введение. В любой деятельности приходится совершать рутинные операции, затрачивая на них те силы и время, которые можно было бы потратить на творчество. Не составляет исключение и такая важная часть работы геохимиков, минералогов и петрологов, как обработка результатов анализов. Несмотря на наличие ряда специализированных программ, таких, как Mincalc [Bernhardt, 2010], CALCMIN [Brandelik, 2009], WinPyrox [Yavuz, 2013], WinGrt [Yavuz, Yildirim, 2020], GeoPlot [Zhou, Li, 2006], PetroPlot [Su, et al., 2003], PetroPlot [Petrelli et al., 2005], или шаблонов для ряда четко очерченных задач [Ersoy, Helvasi, 2010; Putirka, 2017] (и другие программы этого автора, см. его веб-сайт), самым используемым инструментом для этого остается непосредственно Microsoft Excel благодаря своей гибкости, простоте и мощности.

Готовые решения, безусловно, удобны, когда пользователь работает с одними и теми же типами пород, широко распространенными пороодообразующими минералами и не должен задумываться о том, как работает программа и применим ли данный инструмент в конкретном случае или нет. В нестандартной ситуации они могут давать

ошибочные результаты, поскольку алгоритм и промежуточные этапы вычислений оказываются скрыты от пользователей. Кроме того, в ряде случаев эти программы работают с собственными типами файлов, что требует хотя бы простой, но конвертации данных, что также ограничивает их использование.

Перестройка шаблонов Excel, особенно чужих, под себя требует скрупулезности и квалификации, подчас не меньшей, чем программирование нового расчета, поэтому многие пользователи предпочитают работать только со своими файлами и создавать новые таблицы под каждый расчет. В этих случаях исследователям приходится каждый раз вручную вносить химические и геохимические константы или использовать шаблоны электронных таблиц, редактируя их под каждую задачу, убирая из них лишнее или добавляя новое.

Принципиально иное решение — дать пользователю доступ к востребованным константам и операциям непосредственно с рабочего листа, определив их в виде функций. Это было выполнено автором в виде программы Geochemical functions. Программа распространяется в режиме «бесплатно для неком-

мерческого использования» с обязательной ссылкой на программу и эту статью.

Описание разработки. Geochemical functions представляет собой надстройку для Microsoft Excel, содержащую ряд функций для рутинных операций при обработке минералого-геохимических данных в электронных таблицах.

Надстройка реализована в Visual Basic for Excel в формате, поддерживаемом EXCEL начиная с версии 2003. Она состоит из оболочки и макроса, содержащего описание всех функций и процедуру, которая объявляет функции в списке функций EXCEL, как группу Geochemical, и включает подсказки в окне формул.

Установка программы. Файл для установки надстройки Geochemical Functions может быть скачан с сайта ГЕОХИ РАН URL: http://www.geokhi.ru/DocLab14/GEOKHI_Zaitsev.xla.

Установка осуществляется через пункты меню «Надстройки» (Файл → Параметры Excel → Надстройки), где в выпадающем списке «Управление» требуется выбрать пункт «Надстройки Excel» и нажать кнопку «Перейти». После этого в появившемся меню «Надстройки» нажать «Обзор...». В появившемся окне «Обзор» нужно указать расположение файла Zaitsev_GEOKHI.xla, который будет автоматически скопирован в папку AppData\Roaming\Microsoft\AddIns.

Альтернативный вариант — внедрение модуля из надстройки Geochemical в рабочий файл либо создание файла из шаблона, содержащего этот модуль (шаблон можно скачать с сайта ГЕОХИ http://www.geokhi.ru/DocLab14/GEOKHI_Zai.xltm), однако в этом случае функции будут локальными, т. е. привязанными к данному файлу.

Описание функций. Реализованные в надстройке функции можно разделить на несколько групп. Прежде всего это функции, предоставляющие табличные данные, — геохимические константы для каждого элемента (они перечислены в таблице). Эти функции имеют единственный аргумент — символ элемента или оксида. Это может быть текст (по правилам Excel заключенный в двойные кавычки), но практичнее — ссылка на ячейку с соответствующим текстом.

К этим функциям близка функция REF(), возвращающая литературную ссылку на источник используемых данных о распространенности элементов в хондрите и примитивной мантии, ее аргументом может быть “CI” [Lodders et al., 2009] или “PM” [Palme, O'Neill, 2014]. Без аргументов эта функция возвращает ссылку на данную статью.

Естественным продолжением функций CI() и PM() стали функции нормализации: CI_Norm(), PM_Norm(). Эти функции получают два аргумента: первый — символ элемента или оксида, второй — содержание компонента и возвращают содержание, нормированное на содержание в хондрите или в примитивной мантии. Важно, что, если первый

аргумент — символ элемента, второй должен быть выражен в ppm, а если первый аргумент — символ оксида, второй должен быть выражен в массовых процентах (масс.%). Работа этих функций продемонстрирована в таблице.

Вторая группа функций предназначена для пересчета данных химических анализов минералов на формульные единицы.

Как известно, в общем виде процедура расчета формул минералов сводится к переводу значений весового содержания компонентов в мольные количества (деление концентрации в массовых процентах на молярную массу элемента или оксида, если содержание выражено в весовых процентах оксидов) и нормированию полученных мольных количеств на обоснованно выбранную сумму атомов элементов таким образом, чтобы в результате полученные значения содержания элементов в формульных единицах максимально соответствовали брутто-формуле рассматриваемого минерала. В ряде случаев после этого, базирываясь на кристаллохимических представлениях, оценивают содержание элементов, не определяемых в анализе, и соотношение валентных форм для элементов с переменной валентностью. В качестве базы для нормировки для разных минералов выбирают: сумму всех входящих в минерал элементов, суммарное число атомов кислорода, приходящееся на все элементы, некоторую сумму катионов.

Для упрощения этой процедуры реализованы функции N_At() и N_Ox(), аргументами которых выступают ссылки на горизонтальный интервал ячеек с химическими символами элементов (или оксидов) и на равный по размеру горизонтальный интервал с концентрацией элементов в масс.%. Первая из этих функций выдает суммарное число молей атомов выбранных элементов, содержащихся в 100 г проанализированного минерала, а вторая — общее число молей атомов кислорода, приходящихся на эти элементы. Обе эти величины могут быть использованы для нормирования мольных количеств элементов при пересчете формул.

Для случаев, когда пересчет формул ведется не на кислород, а на некоторую сумму атомов, пользователю предлагается функция APFU(). Эта функция возвращает содержание элемента в формульных единицах. Она имеет пять аргументов: первый — число атомов в формуле, на которое должно быть нормализовано значение (важно, что это всегда сумма атомов элементов, выбранных для нормировки, а не число приходящихся на них атомов кислорода); второй — символ элемента, для которого требуется определить формульный коэффициент (или его оксида); третий — содержание этого элемента в масс.% элемента или оксида соответственно; четвертый — непрерывный диапазон символов элементов или оксидов, на сумму которых должна рассчитываться формула; пятый — диапазон содержания этих элементов.

Список «табличных» функций и примеры их использования

Функция	Пояснение	Примеры записи	Результат
Wt()	Молярный вес элемента или молярный вес оксида, приходящийся на один атом входящего в него элемента	Wt(«Fe»)	55.847
		Wt(«FeO»)	71.8454
		Wt(«Fe2O3»)	79.8461
		Wt(«FeO1.5»)	79.8461
Cation()	Символ катиона, входящего в оксид (при необходимости добавляет к символу элемента заряд)	Cation(«SiO2»)	Si
		Cation(«UO2»)	U4+
El()	Вычленяет символ элемента из записи, обычной для результатов ICP-MS	El(«Co59»)	Co
		El(«59Co»)	Co
		El(«Co59(LR)»)	Co
REF()	Ссылка на источник данных о значениях содержания элементов в хондрите CI или примитивной мантии PM	Ref(«PM»)	Palme H. O'Neill H.St.C. (2014). 3.1 — Cosmochemical Estimates of Mantle Composition. Treatise on Geochemistry (2th Ed.) Vol. 3, 2014, Pages 1–39
		Ref(«CI»)	Lodders, K., Palme, H., & Gail, H.-P. (2009). 4.4 Abundances of the elements in the Solar System. Landolt-Boernstein — Group VI Astronomy and Astrophysics, 712–770
CI()	Содержание элемента в хондрите CI. Если в качестве аргумента записан символ элемента, возвращает содержание в ppm, если оксида — в масс.%	CI(«Ti»)	451
		PM(«TiO2»)	0.075228
PM()	Содержание элемента в примитивной мантии. Если в качестве аргумента записан символ элемента, возвращает содержание в ppm, если оксида — в масс.%	PM(«Ti»)	1265
		PM(«TiO2»)	0.211006
CI_Norm()	Содержание элемента, нормированное на содержание в хондрите	CI_Norm(«Ti»;451)	1
		CI_Norm(«TiO2»; 0.075228)	1
PM_Norm()	Содержание элемента, нормированное на содержание в примитивной мантии	PM_Norm(«Ti»;1265)	1
		PM_Norm(«TiO2»; 0.211006)	1

Примечание. Во всех случаях вместо символов, заключенных в кавычки, может стоять ссылка на ячейку с соответствующими данными, например PM(B5), и такой вариант, как правило, удобнее.

Если содержание элементов выражено в масс.% оксидов, иногда требуется рассчитать и число атомов кислорода, приходящееся на все входящие в минерал элементы. В наиболее простых случаях, когда все атомы катионов входят в сумму, к которой приводятся значения содержания элементов в формуле (как это происходит при расчете формул минералов группы шпинели или оливина), это можно сделать при помощи функции O_ARFU(). Она принимает три аргумента: первый — число атомов катионов в формуле, на которые должно быть нормализовано значение, второй — диапазон символов оксидов, третий — диапазон содержания этих оксидов и возвращает оценку числа атомов кислорода в формуле минерала, которую в дальнейшем можно использовать для расчета распределения по степеням окисления элементов, обладающих переменной

валентностью (например, разделения двух- и трехвалентного железа).

Для более сложных случаев предназначена функция ChargeSum(), аргументы которой — символы элементов и значения их содержания в формульных единицах, а результат — заряд, приходящийся на выделенный фрагмент формулы минерала.

Примеры использования этих функций приведены на рис. 1 и 2. На рис. 1 продемонстрирован расчет формулы плагиоклаза по данным микрозондового анализа, приведенного в строках 2 и 3, по [Zaitsev et al., 2018], тремя способами: без использования новых функций с явным вычислением молярных количеств (строка 6) и нормализацией на сумму катионов, равную 5 (строка 11); с приведением молярных количеств к числу атомов кислорода, равному 8 (строка 12); и на сумму катионов, равную

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	Весовые проценты											
2	Na2O	K2O	CaO	FeO	Al2O3	SiO2	Total	=N_Ox(A1:F1;A2:F2) или =(A6+B6)/2+C6+D6+E6*1.5+F6*2				
3	5.29	0.35	11.06	0.47	27.80	54.13	99.10					
4	Мольные количества											
5	Na	K	Ca	Fe	Al	Si	Сумма	O	=N_At(A\$1:F\$1;A2:F2) или =СУММ(A6:F6)			
6	0.17	0.01	0.20	0.01	0.55	0.90	1.83	2.91				
7	Формульные единицы											
8	=5*A6/\$G\$6		=Cation(A2)		=F3/Wt(F\$2) или =F3/60.0848			=O_Apfu(2;A1:F1;A2:F2)				
9	Na	K	Ca	Fe	Al	Si	O	=(A11+B11)/2+C11+(D11+E11)*1.5+F11*2				
10	0.47	0.02	0.54	0.02	1.49	2.46	7.98					
11	0.47	0.02	0.54	0.02	1.50	2.47	8					
12	0.47	0.02	0.54	0.02	1.49	2.46	7.97	=O_Apfu(2;A1:F1;A2:F2)				
13	0.47	0.02	0.54	0.02	1.49	2.46	7.97					
14	=8*A6/\$H6		=Apfu(2;A\$1;A2;\$A\$1:\$F\$1;\$A2:\$F2)									
15												
16												
17			Ca+Na+K		Si+Al+Fe			O				
18			1.03		3.97							
19												
20	=5*N_At(A2:C2;A3:C3)/N_At(A2:F2;A3:F3)											

Рис. 1. Расчет формулы плагиоклаза из микрозондового анализа: стандартным образом, с явным вычислением молярных количеств (столбцы A–F в строке 6) и приведением к сумме катионов, равной 5 (результат в строке 11); то же с приведением к 8 атомам кислорода (результат в строке 12) и напрямую из химического анализа (все вычисления происходят в программе-надстройке) на сумму катионов, равную 5 (результат в строке 13). В строке 18 вычислены суммы катионов, занимающих девятивершинники и тетраэдры. В прямоугольных выносках показаны формулы, находящиеся в ячейках. Знаки «\$» формируют абсолютные ссылки, необходимые для копирования ячеек вниз в случае, если под первым анализом будут добавлено еще несколько

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T	U
1	Массовые проценты							Формульные единицы							Массовые проценты						
2	Ne	MgO	TiO2	Cr2O3	MnO	FeO	Total	Mg	Ti	Cr	Mn	Fe			Fe3+	Fe2+		Fe2O3	FeO(corr)	Total (corr)	
3	21/1.	3.81	10.05	0.64	0.43	79.95	94.88	0.21	0.28	0.02	0.01	2.48			1.42	1.06		50.98	34.08	99.99	
4																					
5																					
6																					
7																					
8																					
9																					
10																					
11																					

=Cation(B2)

=Apfu(3;B\$2;B3;\$B\$2:\$F\$2;\$B3:\$F3)

=M3-O3

=F3*P3/M3

=8-ChargeSum(\$I\$2:\$M\$2;I3:M3)
или
=2*(4-O_Apfu(3;B\$2:F\$2;B3:F3))

=F3*(Wt(\$R\$2)/Wt(\$F\$2))*(O3/M3)

Рис. 2. Расчет формулы магнетита по данным микрозондового анализа с последующим разделением FeO на FeO и Fe₂O₃ и корректировкой суммы анализа

5, при помощи функций Apfu() и O_Apfu() (строка 13). Легко видеть, что формульные коэффициенты катионов в строках 11 и 13 совпадают, поскольку они вычислены одним и тем же способом, только в первом случае арифметические вычисления происходят на листе таблицы, а во втором — «внутри» функции Apfu(). Небольшое различие в коэффициенте при кислороде связано с тем, что в первом случае железо считается трехвалентным, как это следует из кристаллохимии плагиоклаза, а в последнем — двухвалентным, как это следует из записи анализа. Недостаток кислорода до 8 формульных единиц указывает на то, что стоит считать железо трехвалентным, но при низком содержании железа ошибки анализа других элементов влияют на этот формульный коэффициент значительно сильнее. В строке 18 показано вычисление сумм катионов, занимающих девятивершинники и тетраэдры, минуя все промежуточные операции.

На рис. 2 показан расчет формулы магнетита с разделением железа на двух- и трехвалентное по стехиометрии, выполненный с применением новых функций. Содержание трехвалентного железа можно с равным успехом оценить с использованием как функции ChargeSum() из предварительно рассчитанных содержаний металлов в формульных единицах (ф.е.), так и с использованием функции O_Apfu() непосредственно из данных анализа. В последнем случае содержание двухвалентного железа можно рассчитать из данных химического анализа напрямую (без расчета суммарного железа в отдельной ячейке). Затем с учетом полученного соотношения двух- и трехвалентного железа рассчитано содержание железа в виде двух- и трехвалентного оксидов, и наблюдаемая сумма анализа скорректирована, как показано в ячейках R3, S3 и T3.

Третью группу функций можно назвать статистическими, они предназначены для обработки на-

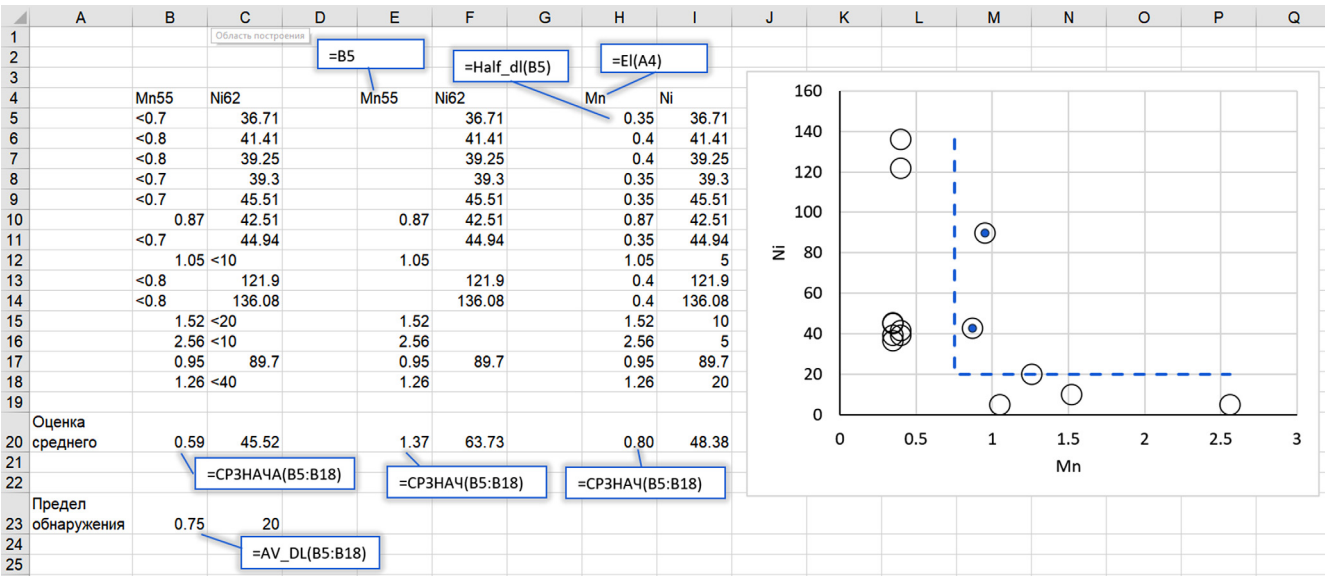


Рис. 3. Использование новых функций для обработки LA ICP-MS анализов пирротина. На диаграмме показана зависимость содержания Ni от Mn, построенная двумя способами: стандартный вариант, когда на график попадают только точки, для которых значения концентрации обоих элементов выше предела обнаружения (черные точки), и с использованием функции Half_DL() (белые кружки). Пунктирными линиями показаны средние пределы обнаружения, полученные при помощи функции Av_DL()

боров данных, о части из которых известно, что они ниже предела обнаружения: Half_dl() и Av_DL(), и для вычисления средневзвешенного значения Wt_Av и его стандартного отклонения по результатам неравноточных измерений.

Функция Half_DL() предназначена для того, чтобы заменить нулевые значения на половину предела обнаружения. Аргументом служит ссылка на ячейку, в которой может быть число либо запись <dl, где dl — величина предела обнаружения. В первом случае функция возвращает численное значение, равное аргументу, а во втором — половине числа, записанного после знака меньше.

Функция Av_DL() возвращает среднее значение из чисел, записанных после знака меньше, и игнорирует ячейки с числовыми значениями. Аргументом функции служит диапазон ячеек, некоторые из которых содержат информацию о том, что содержание ниже предела обнаружения в формате "<dl", где dl — величина предела обнаружения.

Пример использования этих функций показан на рис. 3 на примере данных LA ICP-MS по содержанию марганца и никеля в пирротине из Ковдорского месторождения (пределы обнаружения округлены до десятых и подогнаны так, чтобы читатель легко мог проделать соответствующие вычисления вручную, но чтобы это не меняло картины).

В ячейках с B4 по C18 приведены исходные данные, эти же данные, за исключением данных ниже предела обнаружения, скопированы в ячейки с E4 по F18 так, как это сделал бы исследователь для построения графика. Значения концентраций этих элементов обратно коррелированы, но показать это на графике проблематично, поскольку только в двух анализах определена концентрация обоих элемен-

тов, в остальных случаях концентрация одного из этих элементов определена, а другого — зафиксирована ниже предела обнаружения. Таким образом, на бинарную диаграмму попадают только две точки (показаны черными точками), не дающие представления о характере распределения элементов. Ячейки с H5 по I18 заполнены численными значениями концентрации, в случаях меньше предела обнаружения — числами, равными половине от предела обнаружения при помощи функции Half_DL(), а ячейки H4 и I4 — символами элементов при помощи функции E1(), чтобы в дальнейшем можно было применять функции CI_Norm() и PM_Norm(), о которых шла речь выше.

Построенные по данным этого диапазона точки показаны на диаграмме белыми кружками. Их расположение делает очевидной обратную корреляцию и вскрывает более сложную структуру данных — демонстрирует наличие тесной группы анализов, в которых ~40 ppm Ni, а Mn — ниже предела обнаружения. Пунктирные линии на графике построены с использованием функции Av_DL() и очерчивают область количественных данных. Интуитивно понятно и моделирование подтверждает, что «потеря» отрицательной корреляции за счет данных ниже предела обнаружения — закономерный эффект, и учет таких данных с помощью функции Half_DL() — эффективное средство борьбы с ним.

Еще один сценарий использования функции Half_DL() — оценка среднего содержания компонента, когда часть анализов оказывается ниже предела обнаружения (см. ячейки H20:I20). Такая оценка всегда ближе к истинной величине, чем среднее, рассчитываемое с использованием функции CPЗНАЧ(), которая считает все определения ниже предела

Рис. 4. Расчет средневзвешенного для трех оценок трекового возраста апатита из карбоната Гулинского массива, по [Myshenkova et al., 2020]

	A	B	C	D	E	F
1						
2		Age	±			
3		250.1	41			
4		246.1	28.5			
5		231.2	31.8			
6						
7						
8		241.71	16.27			
9						
10						
11		=Wt_Av(B3:B5;C3:C5)				
12						
13		=Wt_S(B3:B5;C3:C5)*СТЮДЕНТ.ОБР(0.95;СЧЁТ(С3:С5)-1)				
14						
15						

обнаружения нулями, то есть дает заведомо заниженную оценку, и чем среднее, рассчитываемое с использованием функции СРЗНАЧ(), которая включает в расчет среднего только числовые значения, следовательно, дает заведомо завышенную оценку.

В ряде случаев возникает необходимость усреднения неравноточных данных (полученных разными методами или на разном объеме опробования). Для этого используют весовое среднее, когда каждому из значений приписывают определенный вес. Таким образом, формула весового среднего $X = \sum(x_i p_i) / \sum(p_i)$, где x_i — единичная изменение или оценка значения X , а p_i — его вес. Как правило, веса принимают обратно пропорциональными дисперсии для каждого измерения [Русяева, 2016]. Эта обработка реализована при помощи функции Wt_Av(), аргументами которой служат ссылки на диапазон значений и диапазон с оценками их среднеквадратичной ошибки. В реальности среднеквадратичная оценка измерений, как правило, неизвестна, а приводятся доверительные интервалы, в качестве второго аргумента приходится брать диапазон, содержащий доверительные интервалы. Это возможно, поскольку среднеквадратичная ошибка и доверительный интервал почти пропорциональны. Для оценки средней квадратической ошибки полученной величины предназначена функция Wt_S() с теми же аргументами. Важно, что независимо от того, использовались ли в качестве второго аргумента среднеквадратичные ошибки или доверительные интервалы, результатом функции Wt_S() будет среднеквадратичная оценка, для получения доверительного интервала необходимо умножить ее на коэффициент Стьюдента. Использование функций Wt_Av() и Wt_S показано на рис. 4.

Результаты исследований и их обсуждение.

Идея разработки состояла в том, чтобы обеспечить пользователю максимальный простор для творчества и в то же время подстраховать его от явных ошибок, заставляя обращать внимание на необычные ситуации, встречающиеся в его данных. Для

этого требуется соблюсти баланс, с одной стороны, наиболее полно включив варианты записи, которые может встретить минералог и геохимик в химических анализах, а с другой — не включить в них формулы, которые, скорее всего, свидетельствуют об опечатке, хотя бы они и существовали в виде химических соединений. Например, при записи Wt(«U3O8») или Wt(«Cb») программа вернет значение молярного веса U₃O₈ или атомного веса ниобия соответственно, поскольку такие записи встречаются в старой литературе, но выдаст предупреждение об ошибке при записи Wt(«Co2O3»), Wt («CrO»), Wt(«CO»), потому что, вероятнее всего, имели место опечатки в формулах Cr₂O₃, CoO и CO₂.

Определенный компромисс существует также между удобством и однозначностью в вопросе приписывания валентности как формальной степени окисления, поскольку далеко не все известные химикам степени окисления элементов реализуются при геохимическом описании объектов: например, двухвалентный кремний не только известен как вещество, но и даже зафиксирован в форме частицы SiO как компонент газовой фазы [Schaefer, Fegley, 2004], но во всех химических анализах кремний подразумевается четырехвалентным, поэтому функция Cation(«SiO2») вернет Si, а функция ChargeSum() встретив среди аргументов запись «Si» обработает его как четырехвалентный.

Для удобства пользователя программа распознает формулы, записанные разными способами, например, оксид алюминия может быть с равным успехом записан в виде «Al2O3» и «AlO1.5», а карбонат-ион — в виде «CO3», «(CO3)», «[CO3]2-», «CO32-», «(CO3)2-», «(CO32-)». Степень вариативности поддерживаемых химических формул прямо связана с тем, насколько часто компонент встречается в работе геохимиков. Это также результат внутреннего компромисса, поскольку технически невозможно записать абсолютно все варианты записи всех компонентов. Если окажется, что необходимо включение дополнительных компонентов (оксидов или ионов)

или вариантов записи, автор готов внести их в состав следующей версии программы.

Заключение. Представляемая надстройка Geochemical Functions для MS Excel была создана в конце 2019 г., зарегистрирована Федеральной службой по интеллектуальной собственности (свидетельство № 201966643) и в течение полутора лет использовалась (и дорабатывалась) автором в ГЕОХИ РАН на компьютерах под управлением Windows 10, Windows XP и Mac OS.

Использование надстройки существенно ускоряет рутинные вычисления, но для эффективной работы пользователь должен уметь проводить все вычисления самостоятельно, а на этапе освоения

надстройки — проверять результаты расчетами без использования новых функций, причем не с одним, а с группой анализов, чтобы контролировать правильность использования абсолютных и относительных ссылок.

Программа распространяется в режиме «бесплатно для некоммерческого использования» с обязательной ссылкой на программу и на эту статью. Файл для установки надстройки Geochemical Functions может быть скачан с сайта ГЕОХИ РАН URL: http://www.geokhi.ru/DocLab14/GEOKHI_Zaitsev.xla), автор также готов предоставить его по запросу.

Финансирование. Работа выполнена в рамках темы по государственному заданию ГЕОХИ РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Русяева Е.А. Теория математической обработки геодезических измерений: Учеб. пособие. Ч. I. Теория ошибок измерений. М.: МИИГАиК, 2016. 56 с.

Bernhardt H.J. MINCALC-V5 a non EXCEL based computer program for general electron-microprobe mineral analyses data processing // Acta Mineralogica-Petrographica. Abstr. Ser. 2010. Vol. 6. P. 869.

Brandelik A. CALCMIN — an EXCEL™ Visual Basic application for calculating mineral structural formulae from electron microprobe analyses // Computers & Geosci. 2010. Vol. 35, N 7. P. 1540–1551. DOI: 10.1016/j.cageo.2008.09.011

Ersoy E.Y., Helvacı C. FC-AFC-FCA and mixing modeler: A Microsoft® Excel® spreadsheet program for modeling geochemical differentiation of magma by crystal fractionation, crustal assimilation and mixing // Computers & Geosci. 2009. Vol. 36, N 3. P. 383–390. DOI: 10.1016/j.cageo.2009.06.007

Lodders K., Palme H., Gail H.-P. 4.4 Abundances of the elements in the Solar System. Landolt-Börnstein — Group VI // Astronomy and Astrophysics. 2009. Vol. 4B. P. 712–770. DOI: 10.1007/978-3-540-88055-4_34

Myshenkova M.S., Zaitsev V.A., Thomson S. et al. Thermal history of the Guli pluton (North of the Siberian platform) according to apatite fission-track dating and computer modeling // Geodynamics & Tectonophysics. 2020. Vol. 11, N 1. P. 75–87.

Palme H., O'Neill H.St.C. 3.1 — Cosmochemical estimates of mantle composition // Treatise on Geochemistry. 2014. Vol. 3. P. 1–39.

Petrelli M., Poli G., Perugini D., Peccerillo A. PetroGraph: A new software to visualize, model, and present geochemical data in igneous petrology // Geochem., Geophys., Geosystems. 2005. Vol. 6, N 7. P. 1–15. DOI:10.1029/2005gc000932

Putirka K. URL: <http://www.fresnostate.edu/csm/ees/faculty-staff/putirka.html> (дата обращения: 01.12.2021).

Putirka K. Geothermometry and Geobarometry // Encyclopedia of Earth Sci. Series. Springer. 2017. P. 597–614.

Schaefer L., Fegley B.Jr. A thermodynamic model of high temperature lava vaporization on Io // Icarus. 2004. Vol. 169. P. 216–241.

Su Y., Langmuir C.H., Asimow P. PetroPlot: A plotting and data management tool set for Microsoft Excel // Geochem., Geophys., Geosystems. 2003. Vol. 4, N 3. P. 2002GC000323

Yavuz F. WinPyrox: A Windows program for pyroxene calculation classification and thermobarometry // Amer. Mineral. 2013. Vol. 98, N 7. P. 1338–1359.

Zaitsev V.A., Elizarov D.V., Bychkova Y.V. et al. First data on the geochemistry and age of the Kontay intrusion in Polar Siberia // Geochem. Intern. 2018. Vol. 56, N 3. P. 211–225.

Zhou J., Li X. GeoPlot: An Excel VBA program for geochemical data plotting // Computers & Geosciences. 2006. Vol. 32, N 4. P. 554–560.

Статья поступила в редакцию 31.08.2021,
одобрена после рецензирования 10.03.2022,
принята к публикации 31.05.2022