

文章编号 : 0379 - 1726(2004)05 - 0459 - 06

GeoKit : 一个用 VBA 构建的 地球化学工具软件包

路远发

(中国地质调查局 宜昌地质矿产研究所, 湖北 宜昌 443003)

摘 要 : GeoKit 是一个建立在 Excel 平台上 ,应用 VBA 编写而成的地球化学数据处理工具软件包 ,由主控模块、辅助模块和应用程序三个部分组成。主控模块文件格式为加载宏 ,是系统的控制中枢 ,可以实施对其他文件的控制与调用 ;辅助模块由 Access 数据库及由 Excel 建立的管理系统构成 ,可以方便地实现地球化学数据库的管理 ;应用软件由多个具有不同功能的相对独立的 Excel 文件构成 ,其主要组件包括以图形为主的地球化学散点图、稀土元素分布模式图、微量元素比值蛛网图和以参数计算为主的 CIPW 标准矿物计算、铅同位素模式年龄和参数计算及 Sr-Nd 同位素参数计算等。GeoKit 界面友好 ,使用方便 ,是广大地质 - 地球化学工作者有用的工具软件。

关键词 : 地球化学 ; 数据处理 ; 工具软件 ; VBA

中图分类号 : P59; TP317.3 **文献标识码 :** A

0 引 言

地球化学参数和图解是地质 - 地球化学研究工作中常用的有效手段。借助这些图解和参数 ,可以进行岩石分类、岩石和矿床的成因判别 ;进行构造环境的判别研究进而研究地质演化历史等。因此 ,在从事岩石学、矿床学和地球化学等研究工作中 ,经常要进行地球化学参数的计算^[1]和图解的绘制工作 ,其中有一些格式是固定的 ,如各种岩石的分类图解^[2-4]、稀土元素分布模式图解、某些从全球岩石地球化学数据库中提炼出来的构造环境判别图解 (如 Pearce 等的花岗岩类微量元素构造环境判别图解) 以及一些经验判别图解等^[5-8]。这些图解及参数计算的原理分散在各种文献中 ,一方面给使用者经常性的引用带来不便 ,另一方面利用手工投图也会花费引用者大量的劳动并且也不够准确。现代计算机技术为收集、存储和处理这些常见的参数、图形提供了便利的条件。前人已在这方面做过不少努力 ,其中有代表性的软件有 NewPet、Winsurf/ Surfer 和 MinPet 以及火成岩岩石化学处理专业软件 IGPET 和同位素年代学数据处理专业软件 Isoplot^[9]。应当

指出 ,目前业内流行的这些软件都是从国外引进的 ,没有我国自主知识产权的软件。此外 ,这些软件的工作界面也不符合国人的使用习惯。本文介绍笔者近年来开发的地球化学工具软件包——GeoKit。

1 GeoKit 的开发平台

GeoKit 是在 Microsoft Excel 平台上进行二次开发建立的一套地球化学工具软件包 (a geochemical toolkit for Microsoft Excel)。Microsoft Excel 是 Microsoft Office 家族中的一个成员 ,是一套专门的表格处理软件。除表格处理外 ,Excel 还具有较强大的数据管理与运算功能、有大量的内建函数、具有丰富的图形处理功能 (如 Office97/2000/xp/2003 等都内置了数十种图表)。Microsoft Excel 还提供了强大的数据库功能 ,以方便用户在使用电子表格时调用数据库。用户在使用中可以调用由 Excel 建立的小型数据库内容 ,也可以调用、管理由 Access、FoxPro、SQL Server 和 dBase 等数据库软件建立的大型数据库内容。此外 ,Excel 更为强大的数据处理能力还表现在它提供了一套可编程的宏语言 (Visual Basic for Application ,简称 VBA)^[10,11]。VBA 是一个完整的开

收稿日期 : 2004 - 04 - 02 ; 改回日期 : 2004 - 05 - 10 ; 接受日期 : 2004 - 05 - 18

基金项目 : 国土资源部定向基金 (地科定 97 - 17) ; 中国地质调查局项目 (200313000041)

作者简介 : 路远发 (1959 -) , 男 , 研究员 , 地球化学专业。E-mail: luyf@yctws.net olig@21cn.com

GeoKit 下载网址: <http://www.yctws.net>

发环境,与 Visual Basic 独立版本一致,并且为所有的 Microsoft Office 应用程序共享。利用 VBA 和 Excel 自身强大的图表处理功能,可以很方便地实现 GeoKit 的既定功能。另外,Excel 另一重要特点是可以通过录制宏的方法自动录制操作过程,只要对录制的宏稍作编辑即可将其转换为通用的程序代码,其方便性是其他编程语言难以比拟的。Excel 强大的数据及图表处理功能越来越多地受到人们的关注,著名的 Isoplot 软件的 Windows 版本就是建立在 Excel 平台之上的,就连高精度二次离子探针质谱 (SHRIMP II) 的数据处理软件 (Squid) 也是在 Excel 环境下用 VBA 写成的。

2 GeoKit 的组成与结构

GeoKit 系统按功能可分主控模块、辅助模块和应用程序三个部分,如图 1 所示。

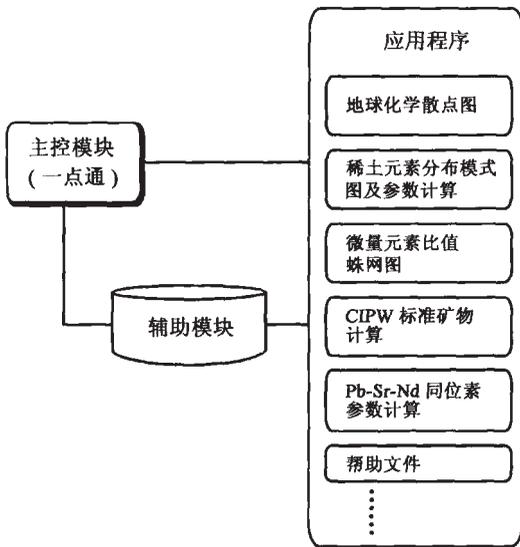


图 1 GeoKit 系统结构图
Fig. 1 Components of GeoKit

2.1 主控模块

主控模块是 GeoKit 系统的控制中枢,文件的格式为加载宏(xla),它在 Excel 启动时自动加载。正确加载后,在 Excel 系统菜单的最右边会自动生成一个名为“一点通(Y)”的下拉式用户菜单,GeoKit 的所有功能均可通过该菜单来调用(图 2)。

GeoKit 由一系列相互独立的含有宏(程序)的 Excel 文件构成,为便于调用,需对这些相对独立的

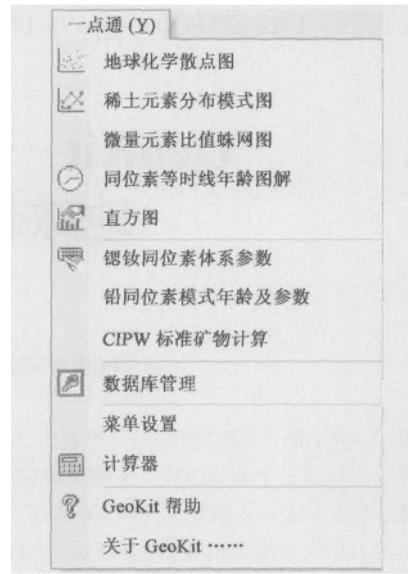


图 2 一点通菜单

Fig. 2 Menu of A User's Addin

文件用一个文件将其连接起来,“一点通”加载宏就是起这样的作用,所以称之为主控模块。

2.2 辅助模块:数据库及其管理系统

虽然 Geokit 的应用软件是在 Excel 环境下开发的,可以在打开应用程序时像常规的 Excel 文档一样进行数据的录入、编辑(特别是通过复制和粘贴)来管理用户数据,并且 Excel 本身即是一个不错的数据库软件,但对于大量数据的管理来说还是利用数据库更为方便与快捷。为此,本系统建立了一个数据库文件(UserData.mdb)及其管理系统(为 Excel 文件,文件名为 dManager.xls)为用户管理自己的地球化学数据提供了一个有用的工具。数据库由一张主表和若干子表构成,其结构关系见图 3 和表 1。

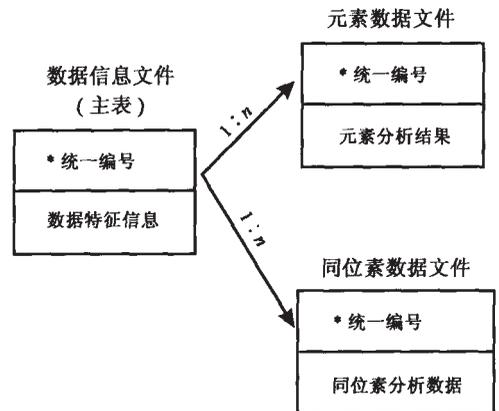


图 3 UserData 数据库文件关系图

Fig. 3 Relationship between tables in User's Database

表 1 数据库主要数据文件表

Table 1 Tables in database

数据文件	主要字段
主 表	统一编号、样品标识、样品数目、数据类型、岩石类型、样品地质特征、资料来源、分析单位、分析时间
元素	统一编号、60 多项元素(氧化物%, 微量元素 $\mu\text{g/g}$, Au、Hg ng/g)
Rb-Sr 同位素	统一编号、原始样号、样品名称、Rb-Sr 含量、同位素比值及分析误差
Sm-Nd 同位素	统一编号、原始样号、样品名称、Sm-Nd 含量、同位素比值及分析误差
Pb 同位素	统一编号、原始样号、矿物特征、Pb 同位素比值
U-Pb 同位素	统一编号、点号、U-Pb 含量、同位素比值
Ar-Ar 同位素	统一编号、分项号、加热温度、同位素比值、 $^{39}\text{Ar}(\%)$ 、表面年龄及年龄误差

在 Excel 下建立的管理系统有多种数据输入方式,可以在 Excel 的工作表中像编辑工作表一样输入与编辑数据,也可以在专用的数据录入对话框中录入。对话框中的数据与工作表相关联而非直接与数据库相关联。当数据编辑好后点击“数据入库”就可以将记录存入数据库或将数据库中已有的记录刷新。

2.3 应用程序

应用程序分布在一个个相对独立的 Excel 文件中,现将当前主要几个文件介绍如下。

2.3.1 地球化学散点图

地球化学散点图是在 Excel 图表中散点图样式的基础上增强了许多自动化功能而实现的,具有如下主要功能。

(1) 数据管理形式多样,数据管理方便、快捷,可以按常规的 Excel 方法键入用户数据,可以通过复制、粘贴的方法从其他已有的 Excel 文档中获得数据,还可方便地从自带的数据库 (Userdata. Mdb) 中取得数据。

(2) 支持任意直角坐标和三角形散点图。特别值得一提的是 Excel 图表中没有三角形散点图功能,这是笔者自主开发的一个用户图表形式,丰富了 Excel 的图表功能。

(3) 可以任意修改图形的大小(既可以用鼠标随意拖放也可准确地设定其尺寸)。

(4) 可以随意对数据进行分组,可方便地设置、修改各组数据的格式(包括形状、大小和颜色)。系统共提供了 10 种符号、17 种颜色可供选择。可以显示和隐藏图例。

(5) 内置了数十种常用的地球化学图,并给出了相应的文献出处及注解,使用方便。这是本应用程序的亮点所在。

2.3.2 稀土元素分布模式图和微量元素比值蛛网图

稀土元素分布模式图和微量元素比值蛛网图是岩石学及地球化学研究中常用的两种图解,是研究岩石物质来源、成因与演化以及壳幔相互作用的有效手段。

这两种图解都由两个文件构成。两者都利用了 Excel 图表中的折线图样式,其工作原理基本相同,即通过将用户的分析数据相对于一个已知的标准进行标准化然后按一定的顺序绘制成折线图。本系统针对这两种图解的特点增强了自动化性能,其主要功能如下。

(1) 与地球化学散点图一样,可由多种方式组织数据。

(2) 稀土元素具有对球粒陨石、北美页岩和洋脊玄武岩 (MORB) 三种标准进行标准化作图的功能。对每一个标准化方式,系统中给出了多套标准数据,同时也允许用户修改和添加自己的标准。

(3) 因为目前不同的学者在制作微量元素比值蛛网图时所使用的元素组合及元素的顺序略有不同^[12-14],所以本系统将元素组合分为三种,其一是按 Pearce^[12, 13] 给定的元素组合及顺序 (Sr、K₂O、Rb、Ba、Th、Ta、Nb、Ce、P₂O₅、Zr、Hf、Sm、TiO₂、Y、Yb) 适用于基性-超基性岩类;其二为中性岩类相对洋脊花岗岩标准化的蛛网图 (K₂O、Rb、Ba、Th、Ta、Nb、Ce、Zr、Hf、Sm、Y、Yb);第三,为了增强软件的通用性,笔者还建立了第三种组合即用户自定义组合,用户可以根据自己的需要自行选择元素组合、安排元素的顺序,只要给出相应的标准,即可得到用户自定义的蛛网图。

(4) 可以方便地设置、修改每一条曲线的格式(包括点的形状、大小和颜色及线的线型、颜色和粗细)。

(5) 稀土元素分布模式图在完成原始数据的标

准化的同时还完成了多种稀土元素参数的计算,如 ΣREE 、 LREE 、 HREE 、 LREE/HREE 、 δEu 和 δCe 等。

2.3.3 CIPW 标准矿物及主要岩石化学参数计算

CIPW 标准矿物是岩石化学研究中最常用的重要参数,也是火成岩标准矿物分类的基础数据。本程序可用于基性岩到酸性岩各类火成岩 CIPW 标准矿物计算。在计算标准矿物的同时还给出了部分岩石化学参数的计算结果,如 A/CNK 、 SI 、 σ 、 AR 等,当然还可以根据需要增加其他参数,本程序是研究岩石化学的有用工具。

2.3.4 Pb-Sr-Nd 同位素参数计算

Pb-Sr-Nd 多元同位素示踪技术是地球化学研究的一个重要内容,是研究物质来源、壳幔相互作用、地壳演化的重要手段。为此,笔者编制了两个小程序来实现同位素参数的计算,即 Pb 同位素模式年龄及参数计算和 Sr-Nd 同位素参数计算。主要参数包括:

(1) Pb 同位素:模式年龄 $t(\text{Ma})$ 、 μ 、 ω 、 Th/U 及朱炳泉建立的矢量参数 V_1 、 V_2 、 $\Delta \alpha$ 、 $\Delta \beta$ 、 $\Delta \gamma$ ^[15,16]。

(2) Sr-Nd 同位素参数: $\varepsilon_{\text{Sr}}(0)$ 、 $\varepsilon_{\text{Sr}}(t)$ 、 $t_{\text{mod}}(\text{Ma})$ 、 $f_{\text{Rb}/\text{Sr}}$ 、 $(^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr})_i$ 、 $\varepsilon_{\text{Nd}}(0)$ 、 $\varepsilon_{\text{Nd}}(t)$ 、 $f_{\text{Sm}/\text{Nd}}$ 、 t_{DM} 、 $t_{2\text{DM}}$ 、 $(^{143}\text{Nd}/^{144}\text{Nd})_i$ 。

这些参数可基本满足 Pb-Sr-Nd 多元同位素示踪研究的需要。

2.3.5 其他

以上介绍的是 GeoKit 的几个主要应用程序,此外 GeoKit 中还有几个小工具,如直方图、同位素等时线年龄图解(含 Ar-Ar 坪年龄谱图,不提供准确年龄计算)、帮助文件以及对 Windows 计算器的调用等。随着时间的推移,该系统还在不断地扩展,但所有可用功能都将显示在“一点通”菜单中。

3 安装与应用实例

3.1 安装

因 Geokit 由多个相对独立的应用程序构成,且

随着时间的推移还将不断更新与增添新的功能。为了便于软件的传输与发布,笔者利用安装制作软件将其打包成一个安装软件(GeoKit.exe)。运行该软件按照提示可完成解压、安装过程(运行安装前应先关闭所有 Excel 文档及程序)。安装成功后,在启动 Excel 时,主控文件(一点通.xla)会自动加载,并会在用户的 Excel 菜单最右边出现一个名为“一点通(Y)”的下拉式菜单(图 2),通过该菜单实施对系统其他功能的调用与控制。

3.2 应用举例——以地球化学散点图为例

地球化学散点图的制作过程为:(1)打开 Excel 软件,这时“一点通”菜单会自动加载(图 2);(2)在一点通菜单中选择“地球化学散点图”,打开相应的应用程序。图 4 是地球化学散点的标题栏、菜单栏和工具栏,可以看出它类似于但又不同于常规的 Excel 工作界面;(3)点击工具栏上“图表”按钮,切换到三元/二元图表工作表;(4)在用户数据区编辑数据(包括分组,分组工作也可在图形制作过程中及完成后进行调整);(5)点击工具栏上“作图”按钮,完成草图(任意散点图);(6)根据需要修改数据格式(符号、大小和颜色)或调整数据分组;(7)从图形库中选择你的图形将其加载到当前图表中。

这样,一个完整的地球化学散点图就完成了。图 5 是利用该软件完成的两个样图。

4 存在的不足及今后开发方向

由于笔者水平有限,该软件还存在许多不足之处,与国外同类软件相比还存在着一定差距,其功能还有待于进一步改进、提高。

(1)目前所有应用程序所涉及的数据处理都只限于笔者日常研究工作中经常用到的,因而受笔者本人研究方向的限制,本软件还缺乏真正的专业软件的系统性与完整性。

(2)在散点图程序中,目前收集的图形种类还不够系统与全面,比如还缺少沉积岩类和变质岩类的分类与判别图解。

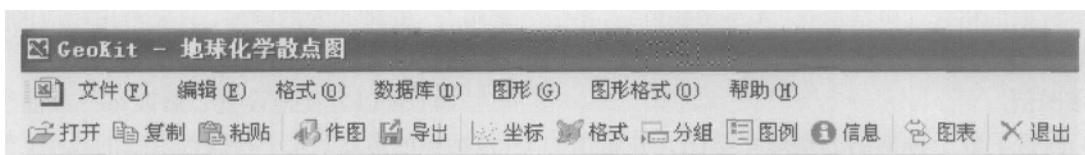


图 4 地球化学散点图的工作界面(标题栏、菜单栏和工具栏)

Fig. 4 Interface of Scatter for Geochemistry (title bar, menu bar and tool bar)

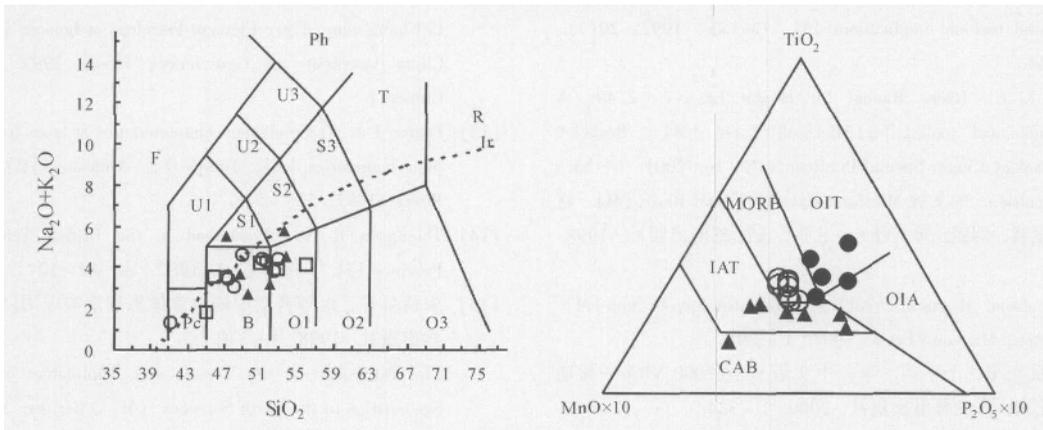


图 5 用“地球化学散点图”制作的两个样图(未显示图例及图注)

Fig. 5 Two sample diagrams with Scatter for Geochemistry (legends and comments not showed)

(3) 稳定同位素地球化学是地球化学研究的一个重要领域,有大量的参数计算与图解,是地学研究的重要手段,但本软件尚未涉及。这是本软件今后开发的一个重要方向。

(4) 直方图是地球化学研究中常用的统计图解,有着十分广泛的应用。本软件目前所提供的直方图的功能还很简单,仅有线型的设置而不能进行充填色(或花纹)的设置,相应的图例设置也很简单,尚难满足不同层次工作的需要。

(5) 在放射性同位素数据处理方面,考虑到 Isoplot 的广泛应用,本软件当前版本还没有设计年龄计算程序,而只设计了图形的绘制功能。考虑到 Isoplot 在中文系统中兼容性不好,难以在国内(特别是基层地质单位)普及这一事实,作为一款专业软件的系统性,GeoKit 将在今后的版本中逐步实现年龄的计算功能。

(6) 在矿物学研究中,人们经常要计算矿物的化学式和端员组分,绘制相关的矿物化学参数图解,并借以解决一些基础地质、矿产地质问题,如矿物形成的温度、压力、物质来源和矿床成因等,GeoKit 的新版本开发将其列为重要的内容。

(7) 目前 GIS 软件(如 MapGis、ArcInfo、MapInfo 等)已在地球科学领域得到了广泛的应用,这也是“数字地球”的发展趋势。本软件目前还没有实现与 GIS 的关联,这也将是本软件进一步开发的方向。

5 结 语

建立在 Excel 平台上的 GeoKit 具有界面友好,使用方便之特点,对于有 Excel 基础的用户来说几乎不需要任何学习即可使用。目前该软件在宜昌地

质矿产研究所、成都地质矿产研究所、南京地质矿产研究所、西安地质矿产研究所、中国科学院广州地球化学研究所、中国科学院地球化学研究所、中山大学、合肥工业大学、中国地质大学、中国地质科学院以及部分省局地质调查研究院等单位得到广泛使用。用户们对该软件给予了较高的评价,并对软件的开发进展给予热心关注。

鉴于本软件还存在诸多的不足,笔者欢迎各位同行专家在使用本软件过程中就软件存在的问题提出宝贵的意见和建议,以便笔者对其做进一步的完善,使其成为广大地学工作者真正有用、好用的工具软件。

参考文献 (References):

- [1] 邱家骧, 林景仟. 岩石化学 [M]. 北京: 地质出版社, 1991. 1~276.
Qiu Jia-xiang, Lin Jing-qian. Petrochemistry [M]. Beijing: Geological Publishing House, 1991. 1~276 (in Chinese).
- [2] Le Bas M J, Le Maitre R W, Woolley A R. The construction of the total alkali-silica chemical classification of volcanic rocks [J]. Mineral Petrol, 1992, 46: 1~22.
- [3] Le Bas M J, Streckeisen A. The IUGS systematics of igneous rocks [J]. J Geol Soc London, 1991, 148(4): 825~833.
- [4] Middlemost E A K. Naming materials in the magma/igneous rock system [J]. Earth Sci Rev, 1994, 37(3-4): 215~224.
- [5] Winchester J A, Floyd P A. Geochemical discrimination of different magma series and their differentiation products using immobile elements [J]. Chem Geol, 1977, 20(4): 325~343.
- [6] Pearce J A, Harris N B W, Tindle A G. Trace element discrimination diagrams for the tectonic interpretation of granitic rocks [J]. J Petrol, 1984, 25: 956~983.
- [7] Mullen E D. MnO/TiO₂/P₂O₅: A minor element discriminant for basaltic rocks of oceanic environments and its implications for petrogenesis [J]. Earth Planet Sci Lett, 1983, 62(1): 53~62.
- [8] Eby G N. Chemical subdivision of the A-type granitoids: Petro-

- genetic and tectonic implications [J]. *Geology*, 1992, 20(7): 641 ~ 644.
- [9] Ludwig K R. Users Manual for Isoplot/Ex rev. 2.49: A Geochronological toolkit for Microsoft Excel [M]. Berkeley Geochronology Center Special Publication No. 1a, 2001. 1 ~ 55.
- [10] Reed Jacobson. 中文版 Microsoft Excel97 Visual Basic [M]. 赵丹亚, 霍巍, 邵丽, 等 (译). 北京: 人民邮电出版社, 1998. 1 ~ 354.
- Reed Jacobson. Microsoft Excel97/Visual Basic Step by Step [M]. Washington: Microsoft Press, 1997. 1 ~ 340.
- [11] 王川, 阮兴平, 于平剑, 等. 中文版 Office2000 VBA 一册通 [M]. 北京: 人民邮电出版社, 2000. 1 ~ 334.
- Wang Chuan, Ruan Xing-ping, Yu Ping-jian, *et al.* All in One for Office2000 VBA of Chinese Edition [M]. Beijing: Posts & Telecom Press, 2000. 1 ~ 334 (in Chinese).
- [12] 李昌年. 火成岩微量元素岩石学 [M]. 武汉: 中国地质大学出版社, 1992. 1 ~ 195.
- Li Chang-nian. Trace Element Petrology of Igneous [M]. Wuhan: China University of Geosciences Press, 1992. 1 ~ 195 (in Chinese).
- [13] Pearce J A. Trace element characteristics of lavas from destructive plate boundaries [A]. Thorps R S. Andesites [C]. Chichester: Wiley, 1982. 525 ~ 548.
- [14] Thompson R N. Magmatism in the British Tertiary volcanic Province [J]. *Scott J Geol*, 1982, 18: 49 ~ 107.
- [15] 朱炳泉等. 地球科学中同位素体系理论与应用 [M]. 北京: 科学出版社, 1998. 1 ~ 330.
- Zhu Bing-quan *et al.* Theory and Application of the Isotopic Systematics in the Earth Sciences [M]. Beijing: Science Press, 1998. 1 ~ 330 (in Chinese).
- [16] 朱炳泉. 地球化学省与地球化学急变带 [M]. 北京: 科学出版社, 2001. 1 ~ 118.
- Zhu Bing-quan. Geochemical Provinces and Geochemical Steep Zones [M]. Beijing: Science Press, 2001. 1 ~ 118 (in Chinese).

GeoKit—A geochemical toolkit for Microsoft Excel

LU Yuan-fa

Yichang Institute of Geology and Mineral Resources, China Geological Survey, Yichang 443003, China

Correspondence should be addressed to LU Yuan-fa (E-mail: luyf@yctws.net, olig@21cn.com)

Received April 2, 2004; revised May 10, 2004; accepted May 18, 2004; published September, 2004

Abstract: GeoKit is a geochemical toolkit for Microsoft Excel designed with visual basic for application (VBA). The software system is composed of three components including controlling file, supporting system and working programs. The controlling file is an "addin" named "Click&OK.xla" (in Chinese), which will be automatically loaded at starting of Excel and create a user's drop-down menu. This user's menu controls all other functions. The supporting system consists of a database (Access) and an administering file (Excel) with which users could conveniently and efficiently manage their geochemical data. There are many working programs with different functions in GeoKit such as Scatter for Geochemistry, REE Pattern Diagram, Trace Element Ratio Spidergram, Calculation for CIPW Normative Minerals and Petrochemical Parameters, Pb-Sr-Nd Isotope Parameters and so on. The GeoKit is friendship in interface and convenient in use and is a useful tool software for geological and geochemical workers.

Key words: geochemistry; data processing; tool software; VBA