

Web-alapú modális elemzési értékelő program (MACALC)

MACALC: A program for supporting modal analysis of rocks

ALMÁSI Béla¹ – CSÁMER Árpád² – FARKAS János³ – RÓZSA Péter²

(3 ábra)

Tárgyszavak: mikroszkópia, ROSIWAL-féle módszer, Web-szolgáltatás, Web-programozás
Keywords: microscopy, ROSIWAL's method, Web services, Web programming

Abstract

Modal analysis is a basic petrographic practice for the determination of the mineralogical composition and grain-size distribution of rocks. Amongst the techniques of modal analysis the authors regard the modified Rosiwal's method of measuring along lines as the optimal one. The software tool Modal Analysis Calculator (MACALC) which is introduced in this paper evaluates computational recorded data. It gives the minimal measuring length for the required accuracy and compiles tables for representing the results of the measurement. The program works as a World Wide Web (WWW) service: beside internet-access only a web browser is necessary to use it.

Összefoglalás

A modális elemzés kőzetek ásványos és szemcsenagysági összetétele meghatározásának alapvető petrográfiai módszere. A különféle eljárások közül a szerzők a módosított ROSIWAL-módszert tekintik az optimális technikának. Az itt bemutatott Modal Analysis Calculator (MACALC) a számítógépen rögzített mérési adatok kiértékelésének megkönnyítésére készült. Megadja a megkívánt pontossághoz szükséges minimális mérési hossz nagyságát, s az eredményeket táblázatos formában közli. A program web-szolgáltatásként működik, használatához csupán internet-hozzáférés és egy web-kereső megléte szükséges.

Bevezetés

A modális elemzés a kőzettani gyakorlatban az egyik leggyakoribb és legrutin-szerűbb mikroszkópos mérés. A módszer használatával meghatározható a kőzetalkotó ásványok relatív mennyisége, valamint a kőzet (esetleg valamely kőzetalkotó) szemcsenagysági eloszlása.

Az első modális elemzési eljárást DELESSE dolgozta ki (DELESSE 1848). Módszerének alapja a később róla elnevezett DELESSE-reláció, amely szerint egy bizonyos ásvány által elfoglalt terület úgy aránylik a teljes területhez, mint az adott ásvány térfogata a teljes térfogathoz.

¹Debreceni Egyetem, Informatikai Rendszerek és Hálózatok Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1. (almasi@inf.unideb.hu)

²Debreceni Egyetem, Ásvány- és Földtani Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1. (rozsap@puma.unideb.hu)

³Debreceni Egyetem, Információtechnológiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1. (farkasj@inf.unideb.hu)

ROSIWAL (1898) dolgozta ki a vonalmenti mérés módszerét. Ennek lényege, hogy kellő hosszúságú vezető mentén történő mérés esetén egy adott ásvány által lefedett hossz és az összhosszúság között megközelítőleg olyan arány áll fenn, mint az ásvány térfogata és a kőzet összterfogata között. A ROSIWAL-elvet alkalmazta SHAND (1916) adatrögzítő mikrométer asztalának, azaz az első integrációs asztal megalkotása során.

A legutóbbi, úgynevezett pontszámlálási modális elemzési mérési elvet THOMSON (1930) dolgozta ki, a megfelelő berendezés megalkotása pedig GLAGOLEV (1933) nevéhez fűződik. Az általa megalkotott pontszámláló berendezés – az integrációs asztal mellett – a modális elemzés mind a mai napig leggyakrabban használt berendezésének tekinthető.

A fenti modális elemzési módszereket CHAYES (1956), TEXTORIS (1971), legutóbb pedig JÁRAI et al. (1997) tekintették át. Megállapításuk szerint bármely modális elemzési módszerrel szemben három követelmény támasztható: (1) a megfelelő pontosság, (2) az egyszerűség, és (3) a gyorsaság. Egyetértve JÁRAI et al. (1997) véleményével, mi a ROSIWAL-féle módszert tekintjük a modális elemzés optimális eljárásának. Alkalmazása nem kíván különleges mérő és adatrögzítő berendezést (a minimális feltétel mindössze egy mikrométer okulár), ráadásul a kőzetalkotó ásványok relatív mennyisége, valamint szemcse nagysági összetétel egyazon mérési sorozat során meghatározható. Az alkotók vezetővonalra eső hossza egyenként is meghatározható, s így – kellő hosszúságú mérés esetén – az egyes ásványok szemcse nagyság-eloszlása külön-külön is megadható (KOZÁK 1979; RÓZSA & PAPP 1989; JÁRAI et al. 1997).

A mérés megbízhatósága

A módszer megbízhatóságának, illetve a kívánt pontosság elérése kérdésének elemzésével kapcsolatban több közlemény is született (JÁRAI et al. 1993, 1997). A legfontosabb megállapítások a következőkben foglalhatók össze. Alapesetként az ásványszemcsét tekintsük általános és szabálytalan alakúnak, ahol a szemcse jellemző átmérője a vele ekvivalens térfogatú gömb átmérőjével azonos. Az alkotók mennyiségi meghatározását a vékonycsiszolat d távolságra levő, párhuzamos, összesen h hosszúságú vezetővonalai mentén történő méréssel végezzük. Az egy alkotóra eső összes mért hossz legyen k . Így, célszerű feltevések mellett, a k/h arány az adott alkotó p térfogataránya körül ingadozik valamely σ^2 szórásnégyzetű normális eloszlással. A σ^2 -re

$$\sigma^2 = \frac{C}{h} \quad (1)$$

összefüggést kapjuk, ahol C a h -tól nem, viszont d -tól és p -tól, vagyis a kérdéses alkotók szemcséinek nagyság és irány szerinti eloszlásától függő konstans. A mért ásványos alkotók észlelt keresztmetszeteit tetszőleges választható szem nagysági intervallumokba sorolhatjuk. A j -edik frakcióba tartozó szemcsék maximális átmérőjét jelölje d_j , az összes anyaghoz viszonyított maximális arányát pedig p_j . Ekkor:

$$C \leq \sum_{j=1}^m p_j d_j \quad (2)$$

A p értéke $1-\delta$ biztonsággal és $\pm \Delta p$ hibával meghatározható, ha a mikroszkópi mérést legalább

$$h = C \left(\frac{a}{\Delta p} \right)^2 \quad (3)$$

összhosszúságban elvégezzük, ahol az a -t a

$$1 - \Phi(a) = \frac{\delta}{2} \quad (4)$$

egyenletből határozhatjuk meg. A

$$\Phi(a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^a e^{-\frac{x^2}{2}} dx \quad (5)$$

függvény néhány értéke pedig:

a	0,5	1	1,5	2	2,5	3	3,5
$\Phi(a)$	0,6915	0,8413	0,9332	0,9772	0,9938	0,9986	0,9997

Ha csupán korlátozott mennyiségű anyag áll rendelkezésünkre, vagyis a h értéke nem növelhető bizonyos határon felül, akkor h esetén a mérés megbízhatósága $a \pm \Delta p$ és a δ számításával megadható.

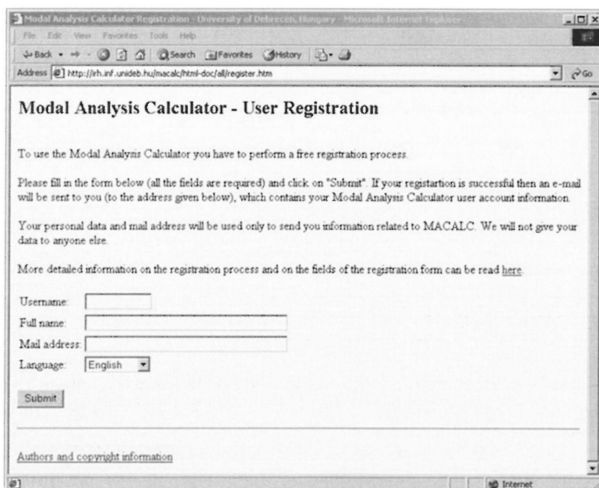
Az ásványos és a szemcsenagysági összetétel szimultán meghatározása esetén a módszer hátránya a nagy mennyiségű „papírmunka”. Ennek kiküszöbölésére kézenfekvő megoldás a számítógépes adatrögzítés és kiértékelés (TÓTH et al. 2003). A Modal Analysis Calculator (MACALC) lehetővé teszi a számítógépen rögzített adatok kiértékelését, az adatok megadott szempontok szerinti válogatását és rendezését, s az eredményeknek táblázatok formájában való összegzését. Bizonyos paraméterek változtatásával, a számítások a főhasználó igényei szerint módosíthatók.

A program leírása

Belépés

A MACALC szoftver bármely web kereső program (Internet Explorer 5.0, Netscape Navigator 4.8, Konqueror 3.0 stb.) segítségével elérhető web-alapú program. Használata nem kíván semmilyen különleges föltételt, még a szoftver telepítésére sincs szükség. Honlapjának címe: <http://irh.inf.unideb.hu/macalc>. A program használata a név és e-mail cím megadásával történő ingyenes regisztrációt követően történhet (1. ábra). A sikeres regisztráció után a felhasználó e-mailben kapja meg személyes MACALC web oldalának adatait (cím, felhasználói név, jelszó). A bejelentkezés után a jelszó megváltoztatható.

A számítás indításához az input MACALC fájl specifikálása szükséges (lásd később). Maga a MACALC fájl egy egyszerű szövegfájl, ami tartalmazza a mérési adatokat, valamint néhány egyéb paramétert (pontosság, megnevezések, kategóriahatárok stb.). Az input fájlt a főhasználó gépén kell elkészíteni, s arról kell a szolgáltató szerverre tölteni. Az input fájl mérete nem haladhatja meg a 100 ezer bájtot, ám a gyakorlatban ez nem lényeges korlátozás, hiszen 100 kilobájt több



1. ábra. A Modal Analysis Calculator web-szolgáltatás regisztrációs ablaka

Fig. 1 The registration window of the Modal Analysis Calculator WWW service

mint 10 ezer mérési adat tárolását teszi lehetővé. Az input adatfájlt a program ellenőrzi, s probléma esetén hibaüzenetet küld, a számítás befejeztével pedig egy output fájlt készít, ami a grafikus megjelenítéshez közvetlenül betölthető különféle táblázatkezelő programokba. Az output üzenet alapértelmezettként angol nyelvű, de a magyar nyelvű megjelenítés is választható. A számítás megkezdését követően az eredmények néhány másodperc múlva megjelennek a képernyőn.

Az input fájl

A MACALC input fájl egy egyszerű szövegfájl, amely soronként egy vagy több, pontosvesszővel (;) elválasztott értéket tartalmaz. Ez az úgynevezett CSV (Comma Separated Value) fájlformátum, amit az általánosan elterjedt táblázatkezelők közvetlenül képesek olvasni és írni, de egy közönséges ASCII szövegszerkesztő is alkalmas ilyen típusú fájl generálására. (Megjegyzendő, hogy a CSV formátum nevében szereplő 'comma' (=vessző) szó a valós alkalmazásokban a pontosvesszőre utal.) A fájlban belül a kettős kereszttel (#) vagy pontosvesszővel (;) kezdődő sorok kommentárt tartalmaznak; ilyenek, pontosvesszővel elválasztva, az adatsorokban is lehetnek. A felhasználó az input fájl bármely részében tetszőleges számú üres sort is hagyhat. Az input fájl két fő részből áll. Az elsőt „definíciós résznek”, a másodikat „adat résznek” nevezhetjük (2. ábra).

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	#	Amphibole-pyroxene dacite, Tardona Hills, Hungary									
2	#	Example input data - groundmass (matrix) is present									
3											
4		0.1		Error limit value is 0.1							
5											
6		4		One measurement unit is 4 micrometer							
7		10		First category boundary. The interval (0, 10] micrometer is for groundmass							
8		100		Second category boundary. The interval is (10, 100] micrometer							
9		1000		Third (and last) category boundary. The interval is (100, 1000] micrometer							
10											
11	F	feldspar	0.2	Feldspar is denoted by F, precision of Feldspar is 0.2 micrometer							
12	P	pyroxene	0.2	Pyroxene is denoted by P, precision of Pyroxene is 0.2 micrometer							
13	O	opaque	0.2	Opaque is denoted by O, precision of Opaque is 0.2 micrometer							
14	AM	amphibole	0.2	Amphibole is denoted by AM, precision of it is 0.2 micrometer							
15	*	groundmass	0.2	Groundmass must be denoted by *, precision of it is 0.2 micrometer							
16											
17	#	Groundmass must be the last of the definitions. The measurement data must follow it									
18											
19	F		20								
20	*		132								
21	F		3								
22	*		146								
23	F		40								
24	*		72								

2. ábra. Példa az MS-Excelben megnyitott CSV formátumú input fájlra

Fig. 2 Example for CSV input file format opened by MS-Excel

A definíciós rész a mérésre, a számításra és a mintára vonatkozó adatsorokat tartalmazza. Ezek az adatsorok a következők:

- Az első sorban adjuk meg a hibahatárt, azaz a 'delta' értéket, ami a minimálisan szükséges mérendő hossz kiszámításához szükséges.

- A második sorban a mérési egységnek fizikai egységre történő átszámításához szükséges arányszámot határozzuk meg (pl. egy beosztás mikrométerben kifejezett értéke).

- A következő néhány sorban a szemcsenagyság-összetételei kategória-határokat definiáljuk; kategóriánként külön sorba írva. Ha az alapanyagot (mátrixot) külön mérjük, az első kategória-határ-érték az alapanyag szemcsenagyság kategória-határát fogja jelenteni. A kategória-határok megadásánál a fizikai egységek használata szükséges.

- Ásványok. Az egyes ásványokat soronként kell definiálnunk, megadva rövidítésüket, teljes nevüket, a mérési pontosságot (ebben a sorrendben). A pontosság megadása a minimálisan szükséges mérési hossz kiszámításához szükséges.

- Elválasztó/alapanyagot definiáló sor. Ha nem definiálunk alapanyagot, akkor e sor csupán a definíciós és az adatrész elválasztására szolgál. Ez esetben a sor '*' karakterrel kezdődik, amit – mint más sorok esetében – pontosvesszővel elválasztva megjegyzések követhetnek. Ha alapanyagot kívánunk mérni, akkor e sort az alapanyag definiálására használjuk, pontosan úgy, ahogy az ásványos alkotók esetében. Az egyetlen megkötés az, hogy az alapanyag rövidítésére a '*' karaktert kell alkalmaznunk.

Az input adat része tartalmazza a mérési adatokat, valamint a mérési egységek esetleges változásait.

– A mérési adat az adott ásványra vonatkozó rövidítést, valamint a mért értéket tartalmazza. Egy sorban csak egy mérési adat lehet.

– A mérési egység változtatása. Alapértelmezésben a mérési érték mérési egységben van megadva. Az egység megváltoztatása paranccsal a mérési adatsorok minden egységét az itt megadott szorzó szerint fogja a program számolni. Ez a felhasználó számára hasznos lehet például akkor, ha a mérés közben változtatni kell a nagyításon. A mérési egység megváltoztatását jelző sor a 'unit' szóval kezdődik, s ezt követi a megváltoztatott érték.

Az output fájl

A MACALC számítás a számítási oldal 'Start' gombjának lenyomásakor kezdődik. Amennyiben az input fájl hibát tartalmaz, az error log fájl jelenik meg. A hibaüzenet az input fájl hibás sorának számával kezdődik, amit a hiba típusának megadása követ. Néhány, a fájl elején lévő hiba további hibákat generálhat, ezért tanácsos az első néhány hiba kijavítása után újraindítani számítást. A program csak a teljes mértékben hibátlan input fájlt fogadja el!

Az output eredmények megjelenítése néhány másodpercet vesz igénybe. A CSV formátumú MACALC output fájl három táblázatot tartalmaz (1. táblázat). Az első kettő az ásványos összetételre és szemcsenagyság-eloszlásra vonatkozó eredményekre vonatkozik. Az első táblázat az eredményeket fizikai egységben, a második százalékban adja meg. A harmadik táblázat az input adatokból az egyes ásványos összetevőkre, valamint (ha van) az alapanyagra számított, néhány statisztikai paramétert tartalmaz. A program a statisztikai adatokat fizikai egységekben adja meg. Mivel a mérések fizikai egysége valamilyen mérési hosszúságértékre vonatkozik, az alábbiakban a lineáris mérési terminológiát fogjuk használni. A számított statisztikai adatok a következők:

- A teljes mért hossz.
- Közéérték (a mért hossz és a mérések számának hányadosa).
- Minimális és maximális mért hossz.
- Adott alkotó esetében mért hossz.
- A mért hossz szórása.
- A mért hossz felső és alsó határa (közéérték és szórás összege, illetve különbsége).
- A mérendő hossz (a megadott hibahatár és pontosság eléréséhez szükséges még mérendő hosszúság).

Ha nincs alapanyag definiálva, akkor az alapanyagra vonatkozóan nem jelenik meg adat. Előfordulhat, hogy értelmezhetetlen eredményt kapnánk (például negatív alsó határ), vagy nincs elég adat valamely statisztikai paraméter kiszámításához. Ilyen esetekben a szoftver a cellába írt speciális jelöléssel (ez az angol nyelvű honlap esetében 'N/A') figyelmezteti a felhasználót.

A CSV fájlok input és output alkalmazása lehetővé teszi, hogy táblázatkezelőket használjunk az input fájl szerkesztésére, az output fájl megtekintésére és módosítására, valamint diagramok szerkesztésére, például Sun's OpenOffice Calc, Microsoft Excel, GNUPlot vagy a Ternplot (MARSHALL 1996) segítségével. A CSV formátum egyszerűségének köszönhetően a különféle szövegszerkesztőkkel (például

1. táblázat. Példa az MS-Excelben megnyitott CSV formátumú output fájlra
 Table 1 Example for CSV output file format opened by MS-Excel

Groundmass is defined						
Size distribution						
Minerals	feldspar	pyroxene	opaque	amphibole	groundmass	Sum
<=10	0	0	0	0	87276	87276
(10, 100)	4680	1332	824	128	0	6964
(100, 1000)	37100	5284	632	7604	0	50620
>1000	11528	0	0	9600	0	21128
Sum	53308	6616	1456	17332	87276	165988
Size distribution						
Minerals	feldspar	pyroxene	opaque	amphibole	groundmass	Sum
<=10	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	52.58%	52.58%
(10, 100)	2.82%	0.80%	0.50%	0.08%	0.00%	4.20%
(100, 1000)	22.35%	3.18%	0.38%	4.58%	0.00%	30.50%
>1000	6.95%	0.00%	0.00%	5.78%	0.00%	12.73%
Sum	32.12%	3.98%	0.88%	10.44%	52.58%	100%
Mineral statistics						
Minerals	feldspar	pyroxene	opaque	amphibole	groundmass	
Length measured	53308	6616	1456	17332	87276	
Mean	219.374	127.231	56	666.615	274.453	
Minimum	12	12	12	40	8	
Maximum	3012	680	316	2132	1820	
Range	3000	668	304	2092	1812	
Std Dev	339.236	140.571	68.67	584.455	228.293	
Lower limit	N/A	N/A	N/A	82.161	46.159	
Upper limit	558.611	267.802	124.67	1251.07	502.746	
Length to be measured	211810.254	715642.11	2002732.421	367754.14	20344.789	

emacs, joe, Microsoft Word vagy Microsoft Notepad) is létrehozhatjuk és megtekinthetjük az input és output fájlokat.

Következtetések

A klasszikus ROSIWAL-féle modális elemzési eljárást mind a mai napig széles körben használják a közettani gyakorlatban (lásd például SAROCCHI & MACÍAS 2004; SAROCCHI et al. 2005), és különféle építőanyagok vizsgálata során (lásd például ELSÉN 2000). A módszer használatával a kőzetalkotók relatív mennyisége, valamint a szemcse nagyság-összetétel egyazon méréssorozattal meghatározható. A módszer további előnye, hogy alkalmazásához mindössze egy mikrométer okulár szükséges. A módszer hátránya, hogy a kellő pontosságú mérés elvégzéséhez hosszú vezetőlapon kell mérnünk, s a mérés, valamint az eredmények összegzése és értékelése jelentős „papírmunkát” kíván, s viszonylag hosszú időt vehet igénybe.

Az itt bemutatott MACALC szoftver lehetővé teszi a mérések számítógépes értékelését: a megadott szemcse nagysági kategóriák, valamint ásványos alkotók szerint válogatja és rendezi az adatokat, s a végeredményt három táblázatban foglalja össze. A MACALC web-szolgáltatásként működő szoftver, igénybevételenek minimális feltétele csupán internet-hozzáférés és valamely web-kereső megléte. Extrém nagy fájlok kivételével, az input adatokat a program nagyon rövid idő alatt értékeli, ezért használata nemcsak a legújabb gyors, hanem a régebbi, lassúbb gépeken sem okoz problémát.

Köszönetnyilvánítás

A munka az OTKA T046579 számú kutatásának támogatásával készült.

Irodalom – References

- CHAYES, F. 1956: Petrographic Modal Analysis. – John Wiley & Sons, New York, 113 p.
- DELESSE, A. 1848: Procédé mécanique pour déterminer la composition des roches. – *Annales Des Mines* **13/4**, 379–388.
- EISEN, J. 2000: Automated air void analysis on hardened concrete. Results of a European intercomposition testing program. – *Cement and Concrete Research* **31**, 1027–1031.
- GLAGOLEV, A. A. 1933: On the geometrical methods of quantitative mineralogical analysis of rocks. – *Trans. Inst. Econ. Mineral.* **59**, Moscow, 47 p.
- JÁRAI A., KOZÁK M. & RÓZSA P. 1993: A mikroszkópi modális analízis optimális módszerének kiválasztása. – *Acta Geogr. Debrecina.* **30–31**, 113–132.
- JÁRAI, A., KOZÁK, M. & RÓZSA, P. 1997: Comparison of the Methods of Rock-Microscopic Grain-Size Determination and Quantitative Analysis. – *Math. Geol.* **29/8**, 977–991.
- KOZÁK M. 1979: Lehordási modelterület felépítésének és kőzetanyag-transzportjának földtani vizsgálata. – Kézirat, Egyetemi doktori értekezés, Debrecen. 179 p.
- MARSHALL, D. 1996: Ternplot: an excel spreadsheet for ternary diagrams. – *Comp. Geosci.* **22/6**, 697–699.
- ROSIWAL, A. 1898: Ueber geometrische Gesteinsanalysen usw. – *Verhandlung der K.-K. geologischen Reichsanstalt.* **5–6**, 143–175.
- RÓZSA P. & PAPP L. 1989: Tokaji-hegységi vulkáni és szubvulkáni kőzetek elkülönítése szemcseösszetételük alapján. – *Földt. Közl.* **118**, 265–275.
- SAROCCHI, D. & MACÍAS, J. L. 2004: Study of the textural characteristics of volcanoclastic deposits by means of image analysis. – Abstracts of 32nd IGC Florence 2004. 1. 602–603.
- SAROCCHI, D., BORSELLI, L. & MACÍAS, J. L., 2005: Construcción de perfiles granulométricos de depósitos piroclásticos por métodos ópticos. – *Rev. Mex. Cien. Geol.* **22/3**, 371–382.
- SHAND, S. J. 1916: A recording micrometer for rock analysis. – *J. Geol.* **24/4**, 394–403.
- TEXTORIS, D. A. 1971: Grain-size measurements in thin-section. – In: CARVER, R. E. (ed.): Procedures in sedimentary petrology. – Wiley Interscience, New York. 95–107.
- THOMSON, E. 1930: Quantitative microscopic analysis. – *J. Geol.* **38**, 193–222.
- TÓTH S., CSÁMER Á. & RÓZSA P. 2003: DOS-alapú program kőzetek modális elemzéséhez. – *Acta Geogr. Debrecina* **36**, 41–54.
- Kézirat beérkezett: 2006. 02. 21