

Strukturering af geologiske EDB-programmer

TOM SVANE PETERSEN OG ANNE-LISE JENSEN



Petersen, T. S. og Jensen, A.-L.: Strukturering af geologiske EDB-programmer. *Dansk geol. Foren., Årsskrift for 1977*, side 5-7. København, 3. januar 1978.

A procedure for structuring the utilization of existing geological computer programmes is outlined. The programmes should be arranged to their relevance for various geological subdisciplines, into so-called programme packets. The geochemical programme-packet from the Geological Survey of Greenland is reviewed as an example.

Tom Svane Petersen, Grønlands Geologiske Undersøgelse, Østervoldgade 10, DK-1350 København K. – Anne-Lise Jensen, Institut for Almen Geologi, Østervoldgade 10, DK-1350 København K, 15. oktober 1977.

Den store udvikling der er sket indenfor databehandling har medført, at der efterhånden findes et stort antal programmer relevante for geologisk arbejde.

Disse programmer findes i øjeblikket spredt hos de personer, der benytter eller har benyttet dem. Det er normalt, at geologer, der programmerer, har adskillige programmer liggende, uden at der ligger alment tilgængelige oplysninger herom. Det er følgelig vanskeligt eller umuligt for potentielle brugere af allerede eksisterende programmer at finde frem til disse.

Formålet med denne artikel er at vise, hvordan man kan strukturere et informations-system om programmeller og de i dem indgående program-pakker med udgangspunkt i GGU's geokemiske programmel.

Programmerne er hovedsagelig kodet i FORTRAN V og asci-fortran. De er implementeret på UNIVAC 1110 på RECKU (regnecentralen ved Københavns Universitet) samt for nogles vedkommende på PDP 11/34 på GGU (Grønlands Geologiske Undersøgelse).

Styreprogrammet er kodet i ascii-fortran Sperry Univac (1975). Det består af et hovedprogram, der styrer indlæsning og søgning på de filer, hvor oplysningerne om de forskellige programmer ligger, og udskriver herfra den af brugeren specificerede information.

Strukturering i emner

Først er der foretaget en afgrænsning af de forskellige emner, hvorunder programmerne hen-

hører i såkaldte program-pakker. Her må man holde sig for øje, at det er et geologisk programmel. Som enheder, program-pakker, er valgt følgende: en matematisk pakke, en hjælpe-pakke, en geokemisk database-pakke, en statistisk pakke, en petrologisk pakke og endelig en pakke med beskrivelser til informations-systemet, en informations-syntax.

Strukturering af de enkelte pakker

De forskellige programmer, der er til rådighed, rubriceres nu efter indhold i program-pakkerne.

For nogle programmers vedkommende kan en placering i en bestemt pakke være vanskelig, derfor er her valgt at lade beskrivelsen af disse indgå i flere program-pakker, hvortil de har relationer. Hver program-pakke er således opbygget af flere programmer. Til hver program findes en kort beskrivelse af hvad programmet udfører, hvem programmøren er, hvilke input/output filer, der er nødvendige, om programmet er publiceret, om der findes yderligere dokumentation, om programmet er konverserende eller ikke-konverserende, hvilke computere, det er implementeret på, hvordan det kan eksekveres, og til sidst i hvilket sprog og i hvilken dialekt programmet er skrevet (algol 6, fortran IV, pl/I etc.).

Den matematiske pakke

Den matematiske pakke indeholder hovedsagelig subrutiner til matrice operationer. Følgende programmer findes: (mmuld) til multiplikation af orthogonale matricer, (mprint) til udskrivning af

matricer, (mtran) til transponering af matricer, (mread) til udlæsning af matricer, (lign) til løsning af lineære ligninger, (minv) til invertering af matricer, (mdivk) til division af en matrice med en konstant, (multh) til multiplikation af en matrice med en konstant, (msub) til subtraktion af to matricer, (madd) til addition af matricer, (mmult) til multiplikation af to matricer, (mcopy) kopiering af en matrice og (hnf) til invertering af en matrice.

Den statistiske pakke

Følgende programmer findes: (BMD02R) udfører trinvis regressions-analyse; (BMD01M) beregner principalkomponenter af standardiserede data, desuden beregnes korrelation og kovarians koefficienterne (Multi); (BMD04M) udfører en diskriminantanalyse for to grupper ved beregning af en lineær funktion for hver af grupperne; (BMD05M) udfører som ovennævnte program en diskriminantanalyse, men for flere grupper; (BMD07M) udfører en trinvis diskriminantanalyse mellem flere grupper. Det er muligt ved brug af dette program at få oplyst, hvor »godt« de enkelte grupper er adskilte og hvilke variable (f.eks. de kemiske elementer), der er de bedste til at adskille. (BMD08M) udfører en faktoranalyse såvel R-mode som Q-mode (tilføjelse lavet af den ene af forfatterne TSP), det er muligt at rotere faktorvektorerne ved 3 forskellige metoder, (BMD10M) bestemmelse af statistiske outliers.

Alle ovenstående programmer er modificeret fra BMD (1973) IBM version til UNIVAC 1110 version af TSP. Denne pakke er under udbygning med bl.a. programmer fra Davis (1973).

Den petrologiske pakke

Følgende programmer findes: (norm2) der bl.a. udregner CIPW-vægtnorm, kation-norm, norm med fast Fe_2O_3 (kan varieres af brugeren), derudover 50 petrologiske relevante parametre (Or-An-Ab, Q-Or-Ab etc.); (pp102) er et plot-program, der på en calcompplotter tegner trekomponent og tokomponent plot. Det er muligt at tage direkte input fra andre programmer f.eks. norm2. (fisk2) Petersen (1977) beregner ud fra en kemisk analyse og eventuelt sammensætningen af plagioklas modus af hornblende-biotit gnejs og

amfiboliter, (mass2) beregner masseabsorptionskoefficienter for forskellige bølgelængder ud fra en kemisk analyse af hovedelementerne, (leas2) er et petrologisk mixing-program, hvorfra det er muligt bl.a. at beregne modernagmasammensætninger ud fra kemiske analyser af mineraler og restmelte, (nigg2) udregner Niggli værdier efter et regneskema givet af Johanssen (1931), (klas2) klassificerer vulkanske bjergarter, og (wolf) udregner Von Wolf-værdier.

Hjælpe-pakke

Følgende programmer findes i Hjælpe-pakken: (summmu) kontrollerer summen af hovedelementanalyser, som er skrevet i det format, der anvendes på Mineralogisk Museum; (sumggu) samme som ovenstående, blot det format der anvendes på Grønlands Geologiske Undersøgelser, (conalfa) konverterer store bogstaver til små, (konfil) sammenkæder fra flere filer til en file (dette program kan bl.a. være aktuelt i (pp102) og (BMDTRANS), der transformerer variable således at de ligger mellem 0 og 1.

Informations-pakke

For at gøre systemet så brugbart som muligt må det være let at indføje beskrivelser til nye programmer, således at et program af almen interesse, f.eks. overtaget fra en anden institution, kan indføjes i systemet også af den ikke rutinerede bruger. Der er derfor indlagt en programpakke, der indeholder en beskrivelse af, hvordan nye programmer indføjes, og hvilke informationer der skal foreligge om disse.

Den geokemiske databasepakke er endnu ikke implementeret.

Output

Output fra systemet indeholder alle oplysninger, der er indskrevet om et program. Derudover fås oplysning om hvornår sidste opdatering af systemet har fundet sted. Output-sektoren er desuden struktureret således, at det dels er muligt at få oplysninger om et enkelt program, dels om alle programmerne i den enkelte pakke.

Yderligere oplysninger om programmerne, hvordan disse kan benyttes via RECKU, og eventuelle kopier af enkelte af de programmer, som er udviklet af GGU, kan fås ved at rette henvendelse til GGU eller TSP.

Tak

Forfatterne takker S. Maaløe, F. Kalsbeek, Å. Nielsen, E. Hoch og L. Dyrhauge Hansen for værdifulde diskussioner. Oversigten er publiceret med tilladelse fra direktør K. Ellitsgaard-Rasmussen, Grønlands Geologiske Undersøgelse.

Litteratur

BMD, Biomedical computer program. University of California Press, Berkeley 1973.

Davis, J. C. 1973: Statistics and data analysis in Geology. John Wiley & Sons, New York.

Johannsen, A. 1931: *A descriptive petrography of the igneous rocks.* Univ. Chicago Press.

Petersen, T. S. 1977: FISK: A Fortran programme to estimate the mode of (hornblende-) biotite gneiss and amphibolites from chemical analyses. *Computers & Geosciences*, vol. 3. 19-24.

Sperry Univac 1975, *Fortran (ASCII) programmer reference 1100 series UP-8244.* Sperry Rand Corp. USA, 282 p.