

УДК 552.08; 004.9

МЕТОД ИДЕНТИФИКАЦИИ МИНЕРАЛОВ ПО ХИМИЧЕСКОМУ СОСТАВУ НА ОСНОВЕ НЕЧЕТКОЙ ЛОГИКИ

© 2016 г. С.Д. Иванов

Институт физики Земли им. О.Ю. Шмидта РАН, г. Москва, Россия

Приводится обзор и сопоставление существующих подходов к определению минералов в образцах горных пород разных типов. Предлагается метод идентификации силикатных минералов по химическому составу с использованием аппарата нечеткой логики, который позволяет учитывать высокую вариабельность содержания отдельных элементов в составе минералов без ущерба для точности идентификации в целом.

Составы минералов описываются наборами задаваемых с помощью специального формального языка ограничений, которые включают ограничения на содержание отдельных элементов и их групп, примесей, а также на порядок элементов в группах замещения. Величина порогового значения ($R_{пор.}$) подбиралась в ходе работы с набором геохимических данных. Для увеличения числа определяемых минералов был создан инструмент, автоматически преобразующий кристаллохимическую формулу минерала в набор ограничений.

Разработанная на основе метода программа, которая доступна в виде веб-приложения, позволяет пользователю не только использовать имеющиеся наборы ограничений для идентификации минералов, но и создавать собственные.

Ключевые слова: идентификация минералов, нечеткая логика, веб-приложение, изоморфизм, твердые растворы.

Введение

Для правильной интерпретации петролого-геохимических данных о составе горной породы требуется знание не только ее валового химического состава, но и наименований и составов минералов, слагающих образец [Higgins, 2006], что важно, например, при решении задач геобаротермометрии [Перчук, Рябчиков, 1978].

Распространенным способом определения состава слагающих породу минералов является микронзондовый анализ, при котором, однако, может быть затруднено визуальное определение минералов в микрошлифах [Рид, 2008]. На качество анализа возможно влияние также таких факторов, как плохая подготовка проб, сбой в работе оборудования, ошибки оператора. В результате, анализ состава отдельных зерен может оказаться неверным.

В настоящей работе рассматривается метод идентификации минералов по химическому составу. Решение задачи идентификации заключается в установлении соответствия состава, полученного в ходе химического анализа, наименованию конкретного минерала или минеральной группы.

Следует отметить, что в рамках такого подхода невозможно различить полиморфные модификации минералов, так например, не могут быть распознаны кварц, коэсит и стишовит, имеющие одинаковый химический состав (SiO_2). Тем не менее, рассматриваемый метод идентификации представляется полезным, так как его применение сокращает число предполагаемых при анализе наименований минерала до единиц.

Известен целый ряд подходов к решению задачи идентификации минералов; наиболее распространенный из них состоит в непосредственном сравнении результатов химического анализа минерала с эталонным составом, который может быть рассчитан по теоретической формуле минерала или задан разработчиком. Такой подход, реализованный в программах *MinIdent* [Smith, Leibovitz, 1986], *GemIdent* [Omoumi, 1990], *MinIdent-Win* [Wilson, 2003], *MINCALC* [Bernhardt, 2010], не учитывает изоморфные замещения элементов в составе минерала и позволяет определять только те минералы, составы которых соответствуют конечным членам рядов твердых растворов.

Другой подход состоит в полуавтоматической идентификации с использованием интерактивных минералогических справочных систем, среди которых в первую очередь следует выделить систему *ATHENA*, поддерживаемую в течение более чем двадцати лет Департаментом минералогии Женевского музея естественной истории (<http://athena.unige.ch>). Названная система определяет наименование минерала по преобладающим в его составе элементам. Такой подход позволяет эффективно определять минералы, в составе которых содержится значительное количество редких элементов. Однако, если в состав минерала входят только петрогенные элементы, то вариантов, предлагаемых системой, становится чрезвычайно много.

Оригинальный подход предложен в системе иерархической классификации *RHA* [Петров, 2001], предполагающей использование только порядка элементов при сортировке их содержаний по убыванию. На этой основе возможно построение классификации, применимой, в частности, для горных пород и минералов. Следует отметить, что такой подход ориентирован на работу с валовыми данными и не учитывает изоморфные замещения элементов в составе минерала; кроме того, возможно, он является недостаточно избирательным.

Для работы с валовым составом образца применяются другие подходы. Методы нормативного пересчета, реализованные в таких программах, как *SEDNORM* [Cohen, Ward, 2001], *GCDkit* [Janousek, 2006] и др., рассчитывают характеристический минеральный состав, который не обязательно соответствует реальному. Методы, основанные на решении задачи баланса массы (программы *MODAN* [Paktunc, 1998], *Minlith* [Rosen, Abbyasov, Tipper, 2004], *A2M* [Poscha, Kurzb, 2007], *MC* [Чудненко, Авченко, Вах, 2013] и др.), предназначены для разложения известного валового состава на составы компонентов, что не требуется в случае проведения микронзондового анализа.

Метод, представленный в данной работе, основан на анализе относительного содержания отдельных элементов и их сумм в химическом составе минерала с применением аппарата нечеткой логики. Минерал (или минеральная группа) представляется в виде набора нечетких ограничений, налагаемых на химический состав. Такой набор может быть задан вручную или получен в результате автоматического анализа кристаллохимической формулы минерала. Идентификация проводится путем последовательного сопоставления состава минерала со всеми имеющимися наборами ограничений. При каждом таком сопоставлении рассчитывается величина, характеризующая степень соответствия состава минерала набору ограничений.

Предлагаемый метод имеет много общего с первым из вышеназванных подходов, однако отличается от него рассмотрением набора ограничений вместо эталонного состава и возможностью использования в ограничениях арифметических операций. Эти отличия позволяют методу анализировать минералы и минеральные группы с развитым изоморфизмом, а также твердые растворы.

Использованные данные

В работе использованы результаты микронзондового анализа 119 различных образцов, минеральный состав которых был определен заранее; всего были рассмотрены результаты 1428 анализов, предоставленных автору сотрудником Института физики Земли им. О.Ю. Шмидта РАН, кандидатом геолого-минералогических наук А.Л. Кулаковским.

Образцы отбирались в ходе полевых работ 1998–2013 гг. из раннедокембрийских пород Приладожья, включающих три геодинамических домена – карелиды Северного Приладожья, свекофенниды Западного Приладожья, шовную зону Мейери, разграничивающую два первых домена.

Микронзондовый анализ был выполнен в Лаборатории локальных методов исследования вещества Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова на микронзондовом комплексе на базе сканирующего электронного микроскопа *Jeol JSM-6480LV*. Обработка результатов проводилась при помощи программного обеспечения *SEM Control User Interface*, версия 7.11 (*Jeol Technics LTD*) и *INCA*, версия 17a (*Oxford Instrument*).

Методы анализа

Рассматриваемый метод идентификации сводится к установлению соответствия полученного в результате микронзондового анализа состава минерала набору заданных для него ограничений. Имея такие наборы для разных минералов, можно сопоставить химический состав с каждым из них и выбрать те, для которых степень соответствия окажется наибольшей. Данный метод может быть реализован с использованием аппарата нечеткой логики [Заде, 1976].

С учетом кристаллической структуры минералов за основу при выборе ограничений бралась теоретическая или эмпирическая химическая формула минерала. В этом случае при расчетах удобен переход к коэффициентам формул – количеству атомов того или иного химического элемента на структурную единицу минерала; запись ограничений в таких единицах удобна и интуитивно понятна. Наиболее простой способ перехода к ним состоит в нормировании состава минерала на содержание некоторых элементов (или элемента). Эти элементы выбираются так, чтобы их суммарное содержание было постоянным для структурной единицы данного минерала. При этом используется формула

$$C_{pfi} = \left\{ c_i \frac{N}{c_k + \dots + c_m} \right\},$$

где C_{pfi} – состав образца в коэффициентах формул; N – количество атомов, на которое производится нормирование; c_i – содержание i -го элемента в атомных процентах (число атомов элемента в единице вещества в процентах); $c_k + \dots + c_m$ – сумма содержаний элементов (k, \dots, m -го), на которую производится нормирование.

Для рассматриваемых далее силикатных минералов обычно выполняется нормирование на общее количество атомов кислорода, сумму катионов или анионов в кристаллохимической формуле минерала.

Рассмотренный способ пересчета является универсальным, но примитивным по сравнению с существующими более сложными алгоритмами, специализированными для определенных групп минералов, например, для амфиболов [Holland, Blundy, 1994].

Ограничения, характеризующие состав минерала, были разбиты на три группы. Первая (основная) – это ограничения содержания элементов на структурную единицу минерала, задаваемые в виде выражения, включающего название элемента, а также его максимально и минимально допустимые содержания, выраженные в коэффициентах формул.

Вторая группа включает единственное ограничение, которое является общим для всех минералов, – это ограничение на примеси в составе минерала.

Третья группа содержит ограничения на порядок в группах замещения, позволяющие различать минералы, наименование которых зависит от элементов, преобладающих в этих группах (например, Na-филлипсит, Са-филлипсит, К-филлипсит и т.п.).

Кроме перечисленных ограничений, для каждого минерала указывается набор элементов и количество атомов N для выполнения нормирования.

Чтобы воспользоваться аппаратом нечеткой логики, необходимо перейти от ограничений к функциям принадлежности, задаваемым для всех групп ограничений. Функция принадлежности для ограничений первой группы определяется как

$$F(V, A, B) = \begin{cases} 0, & V < A - \beta \\ 0, & V - A < 0 \\ 1 - \frac{A - V}{\beta}, & A - \beta \leq V - A \\ 1, & A \leq V \leq B \\ 1 - \frac{V - B}{\beta}, & B < V \leq B + \beta \\ 0, & V > B + \beta, \end{cases}$$

где V – результат вычислений в левой части ограничения; A и B – верхняя и нижняя граница допустимого содержания элемента в коэффициентах формул; β – параметр, определяющий угол наклона боковых сторон трапеции, форму которой имеет график F (в случае $A=B$ трапеция вырождается в треугольник).

Функция принадлежности, порождаемая ограничением на содержание примесей (вторая группа), имеет вид

$$F(W) = \begin{cases} 1 - \frac{\sum w_i}{N}, & \frac{\sum w_i}{N} < 1 \\ 0, & \frac{\sum w_i}{N} \geq 1, \end{cases}$$

где $\sum w_i$ – сумма содержаний всех (за исключением перечисленных в соответствующем ограничении) элементов в коэффициентах формул; N – число атомов, на которое проводилось нормирование. Деление на N позволяет устранить проблему, связанную с необоснованным уменьшением значения $F(W)$ при больших значениях N , например, при нормировании на 24 атома кислорода.

Функция принадлежности для ограничений третьей группы (на порядок в группах замещения) задается как

$$F(V_1, V_2) = \begin{cases} 1, & V_1 \geq V_2, \\ \tau, & V_1 < V_2, \end{cases}$$

где V_1, V_2 – результаты вычисления выражений в правой (V_1) и левой (V_2) части ограничения; τ – коэффициент, определяющий степень влияния ограничений этой группы на конечный результат.

Для оценки степени соответствия набора ограничений, описывающих минерал, результатам микрозондового анализа вводится результирующая функция в виде логического умножения всех функций принадлежности, полученных из набора ограничений для конкретного минерала:

$$R = F_1 \wedge F_2 \wedge \dots \wedge F_n,$$

где R – результирующая функция; $F_1 \wedge \dots \wedge F_n$ – функции принадлежности, порожденные соответствующими ограничениями.

Операция логического умножения выполняется в соответствии с правилами нечеткой логики. Значение результирующей функции интерпретируется как степень соответствия состава минерала набору ограничений. Для решения вопроса о соответствии необходимо задать пороговое значение $R_{\text{пор.}}$. Определение $R_{\text{пор.}}$, а также подбор значений параметров β и τ проводятся с использованием имеющихся геохимических данных.

В разработанной программе ограничения задаются на формальном языке в виде пар “ключ–значение”. Рассмотрим в качестве примера набор ограничений, описывающих биотит. В строках 1–4 табл. 1 содержатся справочные сведения о минерале; в строке 5 задается способ нормирования (в данном случае на кислород) и количество атомов, на которое нормирование будет выполняться (12); в строках 6–10 – ограничения на содержание в составе образца различных элементов, а также их сумм; в строке 11 приводится список всех элементов, входящих в состав минерала, для введения ограничения на содержание примесей. Ограничения из третьей группы для определения биотита не используются.

Таблица 1. Ограничения, используемые для определения биотита

Номер строки	Ключ	Значения
1	mineral	Bt
2	name	Biotite
3	id	Dana,71.02.02b
4	formula	$K(\text{Mg,Fe,Mn,Al,Ti})_3 \text{Al}(\text{AlSi}) \text{Si}_2\text{O}_{11} + (\text{H}_2\text{O},\text{F})$
5	norm	O,12
6	rule	$K=1$
7	rule	$\text{Mg,Fe,Mn,Al,Ti} = 3 \sim 7$
8	rule	$\text{Al} = 1 \sim 5$
9	rule	$\text{Fe,Mg,Mn,Ti} = 0 \sim 3$
10	rule	$\text{Si} = 2 \sim 4$
11	elements	O,K,Mg,Mn,Fe,Ti,Al,Si

Следующий шаг – это выбор значения $R_{\text{пор.}}$ и параметров β и τ . Определялись наиболее часто встречающиеся в наборе геохимических данных минералы – гранат (549 анализов), плагиоклаз (371 анализ) и биотит (356 анализов). Для них вручную составлялись наборы ограничений, после чего программа, реализующая рассматриваемый метод, применялась к анализам названных минералов.

Было выполнено несколько прогонов со значениями $R_{\text{пор.}}$ от 0.5 до 1. При этом оценивалась относительная доля ошибок первого (отсутствие определенного экспертом минерала в списке вариантов, выданных программой) и второго (наличие других минералов, кроме определенного экспертом, в списке вариантов, выданных программой) рода (рис. 1). Параметр β принимался равным 0.5.

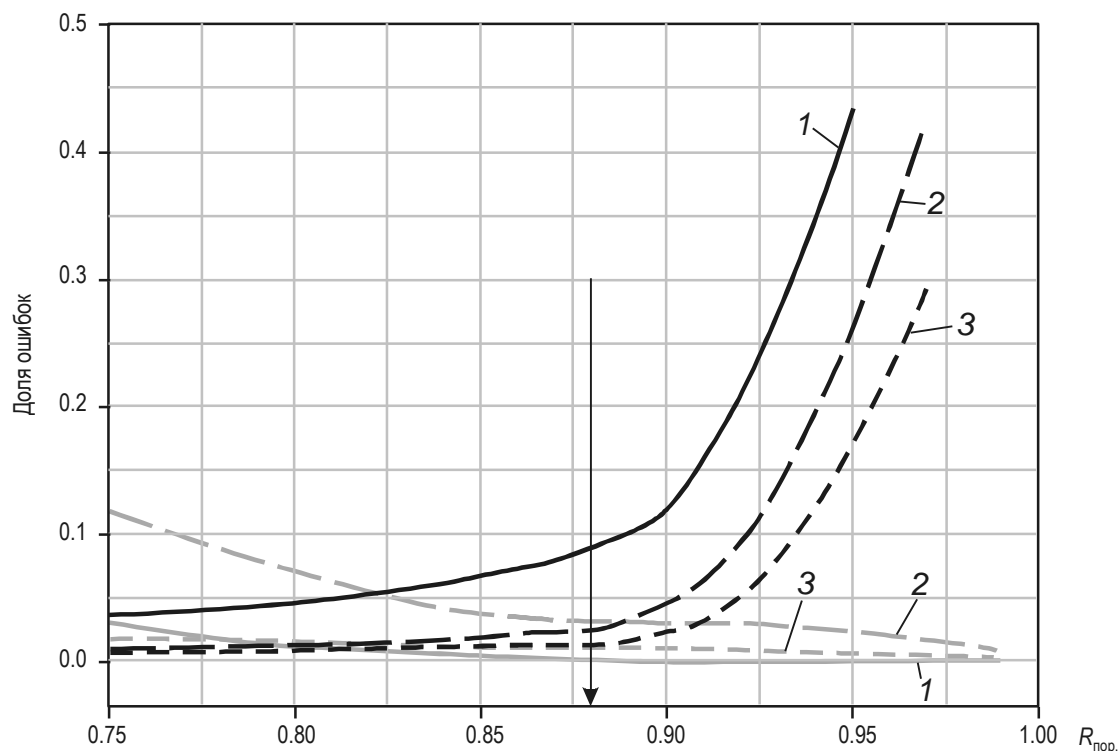


Рис. 1. К выбору значения $R_{\text{пор.}}$: черные кривые – доля ошибок первого рода для трех рассматриваемых минералов: биотита (1), граната (2), плагиоклаза (3); серые – доля ошибок второго рода для тех же минералов. Вертикальной стрелкой на горизонтальной оси отмечено выбранное значение $R_{\text{пор.}}=0.88$

Исходя из представленного графика, значение $R_{\text{пор.}}$ было принято равным 0.88. Так как порядок следования элементов является наименее существенным из всех типов ограничений, τ принималось равным 0.1.

После выбора параметров β и τ программа была применена ко всему объему имеющихся данных. Для всех минералов и твердых растворов, представленных в наборе данных, включая гранат, биотит, хлорит, корунд, клинопироксен, кордиерит, гиперстен, полевой шпат, мусковит, ставролит, шпинель и еще 22 распространенных породообразующих минерала и групп, вручную задавались наборы ограничений. Согласованность с экспертными оценками была установлена для 1301 из 1428 анализов, что составляет 91 %.

Распределение значений результирующей функции R и их интерпретация представлены на рис. 2. Соответствие состава определяемых минералов набору ограничений отображено серой заливкой, отсутствие такого соответствия – черной.

Для увеличения числа определяемых минералов автором была разработана отдельная программа, автоматически преобразующая формулу минерала в набор ограничений для его идентификации. Эта программа использовалась для анализа

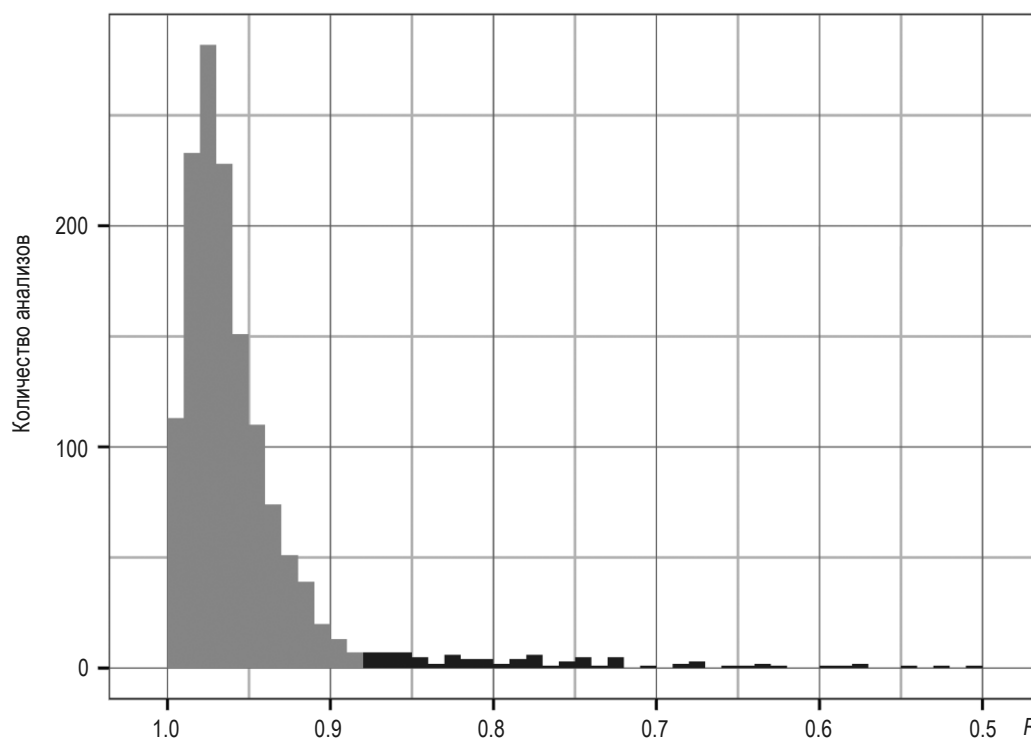


Рис. 2. Распределение значений результирующей функции R и их интерпретация (пояснения см. в тексте)

кристаллохимических формул силикатов, взятых из двух минералогических справочников [Anthony et al., 1995; Gaines et al., 1997]. В результате был получен 1791 набор ограничений. Из-за сложности автоматического расчета числа атомов кислорода для этих наборов ограничений применялось нормирование на содержание кремния или сумму содержаний кремния и алюминия.

Результаты и обсуждение

При применении программы, реализующей рассматриваемый метод идентификации минералов, к имеющемуся обширному набору геохимических данных доля успешных определений превысила 90 %, что свидетельствует об эффективности метода. Использование аппарата нечеткой логики позволяет учесть высокую вариабельность содержания отдельных элементов без ущерба для селективности определения.

В табл. 2 представлены результаты идентификации, выполненной для минерала следующего состава (в весовых процентах): $\text{SiO}_2 = 46.270$; $\text{TiO}_2 = 0.340$; $\text{Al}_2\text{O}_3 = 36.840$; $\text{Cr}_2\text{O}_3 = 0.570$; $\text{FeO} = 2.750$; $\text{MgO} = 1.820$; $\text{Na}_2\text{O} = 0.700$; $\text{K}_2\text{O} = 10.690$.

Строки 1, 2 в табл. 2 содержат информацию о том, что обнаружено единственное соответствие – минерал биотит; строка 3 – формулу минерала и отклонение результирующей функции от единицы; строка 4 – результат нормирования; строки 5–9 – отклонения для отдельных ограничений; строка 10 – отклонение от ограничения на содержание примесей.

Предложенный метод может быть использован для решения задач идентификации не только силикатов, но и любых других групп минералов, для которых можно провести нормирование на содержание определенного элемента или сумму содержаний нескольких элементов.

Таблица 2. Результаты идентификации для минерала с приведенным выше химическим составом

Номер строки	Ключ	Значения
1	Mineral	Biotite
2	Variants	Biotite
3	Variant	Dana,71.02.02b: Biotite: K(Mg,Fe,Mn,Al,Ti) ₃ Al (AlSi) Si ₂ O ₁₁ + (H ₂ O,F): 0.0900496
4	Formula	O:12.000000 Na:0.095038 Mg:0.189992 Al:3.040379 Si:3.240113 K:0.954975 Fe:0.161048 Norm: O: 12
5	Range	K:1 :0.090050
6	Range	Mg+Fe+Mn+Al+Ti:3~7 :0.000000
7	Range	Al:1~5 :0.000000
8	Range	Fe+Mg+Mn+Ti:0~3 :0.000000
9	Range	Si:2~4 :0.000000
10	Other	O,K,Mg,Mn,Fe,Ti,Al,Si :0.010550

При наличии данных о содержании кислорода и водорода возможно создание ограничений, учитывающих содержание анионов. Благодаря простому способу описания правил, пользователь может создавать свои наборы для решения специализированных задач. Примером таких задач может быть отбор данных для дальнейшего использования в геотермобарометрии. Программа реализована в виде модуля к петрологическому веб-приложению (<http://pin.ifz.ru>) [Иванов, 2014].

Для более эффективной идентификации минералов в случае очень большого числа ограничений (тысячи минералов) создана программа, транслирующая описание правил в исходный код на языке C++. Полученный код компилируется в исполняемый модуль, который непосредственно выполняет идентификацию. Этот подход позволил добиться существенного повышения скорости идентификации.

Справочники и минералогические базы данных содержат преимущественно формулы конечных членов рядов твердых растворов. Из-за этого автоматическое составление ограничений для твердых растворов и изоморфных рядов минералов не представляется возможным без привлечения дополнительной информации. Алгоритм, использованный в данной работе для автоматической обработки формул, пропускал минералы, содержащие алюминий и кремний сразу в нескольких группах, например, содержащие группы $(Fe, Mg, Al)_x (Al, Si)_y$. Другое ограничение алгоритма – невозможность правильного расчета содержания кислорода в формулах. Поэтому в наборах ограничений, полученных с помощью данного алгоритма, использован способ нормирования на сумму кремния и алюминия.

В связи с отмеченным для многих порообразующих минералов наборы ограничений пока могут создаваться только вручную, следствием чего может быть недостаточное количество наборов ограничений по группам минералов и твердым растворам (всего 32 набора). Кроме того ручное создание наборов требует дополнительного тестирования для сведения к минимуму числа ошибок как первого, так и второго рода. В процессе тестирования приходится корректировать ограничения или вводить дополнительные. Трудности также вызывает составление наборов ограничений для минералов с очень развитым и сложным изоморфизмом, например, для группы амфиболов; тем не менее, предложенный подход применим и для них.

Благодарности

Автор признателен Алексею Львовичу Кулаковскому (ИФЗ РАН) за предоставленные данные и конструктивные замечания, сделанные в процессе работы.

Литература

- Заде Л.А.* Понятие лингвистической переменной и его применение к принятию приближенных решений. М.: Мир, 1976. 165 с.
- Иванов С.Д.* Современная платформа для обработки результатов геохимических анализов // XV Международная конференция “Физико-химические и петрофизические исследования в науках о Земле”. Материалы конференции. М.: ИГЭМ РАН, 2014. С.92–94.
- Перчук Л.Л., Рябчиков И.Д.* Фазовое соответствие в минеральных системах. М.: Недра, 1976. 287 с.
- Петров Т.Г.* Информационный язык RHA для описания, систематизации и изучения изменений составов многокомпонентных объектов // Научно-техническая информация. М.: ВИНТИ, 2001. № 3. С.8–18.
- Рид С.Дж.Б.* Электронно-зондовый микроанализ и растровая электронная микроскопия в геологии. Пер. с англ. Д.Б. Петрова, И.М. Романенко, В.А. Ревенко. М.: Техносфера, 2008. 232 с. ISBN: 978-5-94836-177-2.
- Чудненко К.В., Авченко О.В., Вах А.С.* Программа MC – петрологический инструмент для вычисления реальных количеств минералов в горной породе, 2013. Электронная библиотека ДВГИ ДВО РАН, 2013. URL: http://fegi.ru/elibrary/elibrary/doc_details/361 (дата обращения: 12.02.2016).
- Anthony J.W., Bideaux R.A., Bladh K.W., Nichols M.C.* Handbook of Mineralogy, Volume 2: Silica, Silicates Tucson: Mineral Data Publishing, 1995. 458 p.
- Bernhardt H.-J.* MINCALC-V5, a non EXCEL based computer program for general electron-microprobe mineral analyses data processing // Abstracts of 20th IMA-Meeting. 2010. P.869.
- Cohen D., Ward C.R.* SEDNORM – a program to calculate a normative mineralogy for sedimentary rocks based on chemical analyses // Computers & Geosciences. 1991. V. 17, N 9. P.1235–1253.
- Gaines R.V., Catherine H., Skinner W., Foord E.E., Mason B., Rosenzweig A.* Dana's New Mineralogy: The System of Mineralogy of James Dwight Dana and Edward Salisbury Dana. 8th Edition. Hoboken: Wiley-Interscience, 1997. P.1872. ISBN: 978-0471193104.
- Higgins M.D.* Quantitative textural measurements in igneous and metamorphic petrology. Cambridge: Cambridge University Press, 2006. P.259. ISBN: 978-0521135153.
- Holland T., Blundy J.* Non-ideal interactions in calcic amphiboles and their bearing on amphibole-plagioclase thermometry // Contr. Mineral. Petrol. 1994. V. 116, N 4. P.433–447.
- Janousek V.* Interpretation of Whole-rock Geochemical Data in Igneous Geochemistry: Introducing Geochemical Data Toolkit (GCDkit) // Journal of Petrology. 2006. V. 47, N. 6. P.1255–1259.
- Paktunc A.D.* MODAN: an interactive computer program for estimating mineral quantities based on bulk composition // Computers & Geosciences. 1998. V. 24, N 5. P.425–431.
- Poscha M., Kurzb D.* A2M – A program to compute all possible mineral modes from geochemical analyses // Computers & Geosciences. 2007. V. 33, N 4. P.563–572.
- Omoumi H.* GemIdent: a data base for gems and some applications of the electron microprobe in gem characterisation // Heideh Omoumi MSc. Thesis. Alberta: University of Alberta, 1990. P.270.
- Rosen O.M., Abbyasov A.A., Tipper J.C.* MINLITH – an experience-based algorithm for estimating the likely mineralogical compositions of sedimentary rocks from bulk chemical analyses // Computers & Geosciences 2004. V. 30, N 6. P.647–661.
- Smith D.G.W., Leibovitz D.P.* MinIdent: a data base for minerals and a computer program for their identification // Canadian Mineralogist. 1986. V. 24. P.695–708.
- Wilson G.C.* MinIdent for Windows, version 3.00 Professional, database 1.0 // Canadian Mineralogist. 2003. V. 41. P.548–552.

Сведения об авторе

ИВАНОВ Станислав Дмитриевич – инженер, Институт физики Земли им. О.Ю. Шмидта РАН. 123242, Москва, ул. Большая Грузинская, д. 10, стр. 1. Тел.: +7(499) 254-89-97. E-mail: f0ma@ifz.ru

FUZZY LOGIC METHOD OF MINERAL IDENTIFICATION BY CHEMICAL COMPOSITION

S.D. Ivanov

Schmidt Institute of Physics of the Earth, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

Abstract. The paper describes the method of identification of silicate minerals by their chemical composition. The review and comparison of existing approaches to mineral identification is given. The method using the fuzzy logic for identification is proposed. This approach takes into account the high variability of individual elements in the mineral composition without affecting the overall accuracy of identification. Mineral compositions are described by the sets constraints written in a special formal language. These sets include constraints on individual elements and their groups, on impurities, and on the order of elements in exchange groups. The threshold value was estimated with usage of the geochemical data set. To increase the number of identified minerals, the special tool was created that automatically converts the crystal-mineral formula to a set of constraints. The software that implements this method is available as a web-application and allows mineral identification with existing constraint sets or user-created sets.

Keywords: mineral identification, fuzzy logic, web-application, isomorphism, solid solutions.

References

- Anthony J.W., Bideaux R.A., Bladh K.W., and Nichols M.C. *Handbook of Mineralogy*, Volume 2: Silica, Silicates Tucson: Mineral Data Publishing, 1995, pp. 904.
- Bernhardt H.-J. MINCALC-V5, a non EXCEL based computer program for general electron-microprobe mineral analyses data processing, *Abstracts of 20th IMA-Meeting*, 2010, pp. 869.
- Chudenko K.V., Avchenko O.V., Vah A.C. *Programma MC – petrologicheskoy instrument dlya vichisleniya realnykh kolichestv mineraliv v gornoy porode* (The MC Program – a petrological instrument for the calculation of real mineral contents in the rock), FEGI FEBRAS, 2013.
- Cohen D., Ward C.R. SEDNORM — a program to calculate a normative mineralogy for sedimentary rocks based on chemical analyses, *Computers & Geosciences*, 1991, vol. 17, no. 9, pp. 1235–1253.
- Gaines R.V., Catherine H., Skinner W., Foord E.E., Mason B., and Rosenzweig A. *Dana's New Mineralogy: The System of Mineralogy of James Dwight Dana and Edward Salisbury Dana*. 8th Edition. Hoboken: Wiley-Interscience, 1997. ISBN: 978-0471193104.
- Higgins M.D. *Quantitative textural measurements in igneous and metamorphic petrology*. Cambridge: Cambridge University Press, 2006, pp. 259. ISBN: 978-0521135153.
- Holland T. and Blundy J. Non-ideal interactions in calcic amphiboles and their bearing on amphibole-plagioclase thermometry, *Contr. Mineral. and Petrol.*, 1994, vol. 116, no. 4, pp. 433–447.
- Ivanov S.D. Modern Platform for Geochemical Data Processing, *The Fifteenth International Conference “Physical-Chemical And Petrophysical Researches In The Earth’s Sciences”*. Proceedings of the Conference. Moscow: IGEM RAS, 2014 (in Russ.).

- Janousek V. Interpretation of Whole-rock Geochemical Data in Igneous Geochemistry: Introducing Geochemical Data Toolkit (GCDkit), *Journal of Petrology*, 2006, vol. 47, no. 6, pp. 1255-1259.
- Le Maitre R.W. GENMIX — A generalized petrological mixing model program, *Computers & Geosciences*, 1981, vol. 7, no. 3, pp. 229–247.
- Omoumi H. *GemIdent: a data base for gems and some applications of the electron microprobe in gem characterization*, Heideh Omoumi MSc. Thesis. Alberta: University of Alberta, 1990, pp. 270.
- Paktunc A. D. MODAN: an interactive computer program for estimating mineral quantities based on bulk composition, *Computers & Geosciences*, 1998, vol. 24, no. 5, pp. 425–431.
- Perchuk L.L., Ryabchikov I.D., *Fazovoe sootvetstvie v mineralnyh sistemah* (The Matching Of Phases In The Mineral Systems). Moscow: Nedra, 1976.
- Petrov T.G. *Informacionny yazyk RHA dlya opisaniya, sistematizacii i izucheniya sostavov mnogokomponentnyh obektov* (The Information Language RHA for Describing, Systematization and Research of The Compositions of a Multicomponent Objects). Moscow: VINITI RAS.
- Poscha M. and Kurz D. A2M — A program to compute all possible mineral modes from geochemical analyses, *Computers & Geosciences*, 2007, vol. 33, no. 4, pp. 563–572.
- Reed S.J.B. *Electron Microprobe Analysis and Scanning Electron Microscopy in Geology*. Cambridge: Cambridge University Press, 2005.
- Rosen O. M., Abbyasov A.A., and Tipper J. C. MINLITH — an experience-based algorithm for estimating the likely mineralogical compositions of sedimentary rocks from bulk chemical analyses, *Computers & Geosciences*, 2004, vol. 30, no. 6, pp. 647–661.
- Smith D.G.W. and Leibovitz D.P. MinIdent: a data base for minerals and a computer program for their identification, *Canadian Mineralogist*, 1986, vol. 24, pp. 695-708.
- Wilson G.C. *MinIdent for Windows, version 3.00 Professional, database 1.0* // Canadian
- Zadeh L.A. The Concept of a Linguistic Variable and its Application to Approximate Reasoning – III, *Information Sciences*, 1972, no. 9, pp. 43-80.
- Mineralogist*, 2003, vol 41, pp. 548-552.