

УДК 548.0:681.3.06

**КОМПЬЮТЕРНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ИДЕИ Г.Б. БОКИЯ О ВЫДЕЛЕНИИ ТАКСОНОВ
ДЛЯ ЕСТЕСТВЕННОЙ КЛАССИФИКАЦИИ МИНЕРАЛОВ**© 2009 **Б.М. Щедрин***, **Е.М. Бурова***Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова**Статья поступила 15 декабря 2008 г.*

В данной работе описана идея Г.Б. Бокия о выделении начальных уровней классификации царства минералов и результаты разработки базы данных, содержащей десятичные символы Г.Б. Бокия.

Ключевые слова: классификация минералов, десятичные символы минералов, компьютерный анализ, статистический анализ, программное обеспечение.

Георгий Борисович Бокий принадлежит блестящей плеяде создателей отечественной кристаллохимии и смежных наук. Много времени и сил он уделял вопросам систематизации кристаллических веществ. Эта тема занимала его с 50-х годов. Последние 30 лет жизни Г.Б. Бокий работал в Институте геологии рудных месторождений (ИГЕМ РАН). Он был чрезвычайно озабочен тем, что систематизация и терминология в науке о минералах отстает от других наук, в частности, биологических. Он, как никто другой, понимал, что без качественной систематики разобраться в большом объеме фактического материала невозможно, критиковал понятийную и терминологическую путаницу в минералогии.

В 1993 г. Г.Б. Бокий обратился к нам на факультет ВМК с просьбой разработать базу данных для проведения научных исследований по совершенствованию разрабатываемой им системы классификации минералов.

Первым этапом построения классификации является определение объекта классификации (низшего таксона). В качестве низшего таксона Г.Б. Бокий предложил понятие "минеральный вид", которое определил как "простое вещество или химическое соединение, выкристаллизовавшееся в результате гео- или космохимического процесса из природной физико-химической системы". Характерной чертой Г.Б. Бокия было акцентирование внимания научной общественности на важности применения строгих научных определений и терминов в науках о кристаллах. Он предостерегал от путаницы терминов "минеральный вид" и "минерал", указывал, что термин "минерал" гораздо шире, чем "минеральный вид". "Он употребляется для обозначения вида, разновидности, индивида, иногда агрегата кристаллов данного вида, аморфных минеральных образований и т.д. ... построить на этом термине строгую систематику, конечно, нельзя" [1]. Аморфные химические соединения, встречающиеся в минералогии, Г.Б. Бокий предлагал выделить в отдельную группу объектов и ввести для них термин "минералоиды" [1]. Принято различать минералы и их разновидности — модификации одного минерального вида по химическому составу, цвету или другим свойствам. Поэтому даже информация о том, сколько существует минералов, неоднозначна. В [2] отмечено, что современная минералогия насчитывает около 4000 минералов, в [3] даны сведения о 10 000 минералов и их модификаций. Г.Б. Бокий дал строгое определение минерального вида в случае наличия твердого раствора: за границу

* E-mail: bshchedr@cs.msu.su

Деление царства минералов на 20 типов и 71 класс по Г.Б. Бокию

Десятичный символ типа	Характеристика типа	Десятичные символы классов
11	Самородные металлы	1100
12	Интерметаллические соединения	1200
21	Самородные неметаллы	2100
22	Соединения неметаллов с металлами	2231, 2241, 2242, 2244, 2253, 2254, 2255, 2261
41	Соединения с углеродом	4100, 4141, 4151
42	Соединения с кремнием	4200
44	Соединения с оловом	4400
51	Соединения с азотом	5100
52	Соединения с фосфором	5200
53	Соединения с мышьяком	5300, 5353, 5354, 5362
54	Соединения с сурьмой	5400, 5454, 5462, 5464
55	Соединения с висмутом	5500, 5555, 5562, 5563, 5564
61	Соединения с кислородом	6100, 6131, 6137, 6141, 6142, 6143, 6144, 6151, 6152, 6153, 6154, 6155, 6162, 6163, 6164, 6171, 6175
62	Соединения с серой	6200, 6243, 6244, 6253, 6254, 6255, 6262
63	Соединения с селеном	6300, 6353, 6354, 6355, 6363, 6364
64	Соединения с теллуром	6400, 6454, 6455, 6464
72	Соединения с фтором	7200, 7232, 7242
73	Соединения с хлором	7300
74	Соединения с бромом	7400
75	Соединения с иодом	7500

вида между двумя предельными минеральными видами предложил принять их середину. Соответственно, в случае наличия трех предельных состояний — 33,3 % и т.д. [4, 5]. Это определение, в частности, позволило ему оценить число минеральных видов величиной около 4000.

Г.Б. Бокий предложил проводить первичную классификацию минералов по наличию в их химическом составе двух химических элементов, расположенных в Z-образной области периодической таблицы. Первичная классификация минералов по Г.Б. Бокию — это выделение 20 типов, которым он присвоил десятичные символы [1]. Смысл кодов для неметаллов — это номер столбца в таблице Менделеева (первая цифра) и положение химического элемента в столбце (вторая цифра). Пример: мышьяк находится в пятом столбце на третьей позиции, считая сверху. Соответственно символ 53 (табл. 1).

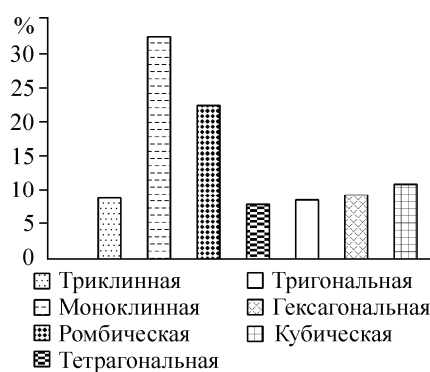
Г.Б. Бокий считал, что выделение высших таксонов должно базироваться на химической информации, для конкретизации низших можно использовать структурные особенности. В соответствии с этой идеей им был выделен 71 класс минералов на основе анализа второго по классификационной значимости элемента химической формулы минерала и предложены десятичные символы классов — четырехзначные числа, составленные из двух десятичных кодов химических элементов [1].

В результате компьютерного анализа информации было выявлено 76 классов (табл. 2). В базу данных не попали минералы из классов 2231 и 7232. Примеры минералов класса 2231: HVO_2 — метаболит и V(OH)_3 — сассолин. Примеры класса 7232: NaBF_4 — ферручит, $(\text{K,Cs})\text{BF}_4$ — авогадрит [1]. Выявлено пять дополнительных классов по отношению к предварительной классификации Г.Б. Бокия: 2243, 5173, 6264, 6274, 7231. Любопытно, что был выявлен один минерал класса 2243 (GeO_2 аржютит), наличие которого Г.Б. Бокий как бы предсказал в работе [1].

Классы минералов в компьютерной базе данных:
71 класс, предсказанный Г.Б. Бокием, и 5 найденных компьютерной программой

№	Символ Бокия	Число видов в БД	№	Символ Бокия	Число видов в БД	№	Символ Бокия	Число видов в БД
1	1100	29	26	5454	4	51	6200	130
2	1200	28	27	5462	4	52	6243	5
3	2100	17	28	5464	1	53	6244	25
4	2231	0	29	5500	5	54	6253	42
5	2241	18	30	5555	1	55	6254	64
6	2242	18	31	5562	1	56	6255	52
7	2243	1	32	5563	1	57	6262	10
8	2244	9	33	5564	2	58	6264	3
9	2253	17	34	6100	397	59	6274	1
10	2254	11	35	6131	110	60	6300	26
11	2255	30	36	6137	2	61	6353	3
12	2261	5	37	6141	163	62	6354	3
13	4100	4	38	6142	853	63	6355	4
14	4141	6	39	6143	4	64	6363	8
15	4151	2	40	6144	5	65	6364	2
16	4200	6	41	6151	9	66	6400	24
17	4400	7	42	6152	353	67	6454	2
18	5100	4	43	6153	210	68	6455	1
19	5173	1	44	6154	36	69	6464	9
20	5200	2	45	6155	14	70	7200	34
21	5300	25	46	6162	221	71	7231	2
22	5353	16	47	6163	12	72	7232	0
23	5354	1	48	6164	33	73	7242	3
24	5362	8	49	6171	189	74	7300	43
25	5400	13	50	6175	7	75	7400	4
						76	7500	4

Для работы с базами данных минералов была выбрана программа Access фирмы Microsoft [6]. Для записи запросов в реляционных базах данных применяется универсальный компьютерный информационно-логический язык структурированных запросов Structured Query Language (SQL) [7]. Для облегчения общения с базой пользователей, не владеющих профессионально SQL, в состав СУБД Access были включены такие программные средства, как "конструктор запросов" и "построитель выражений", позволяющие создавать запросы [6].



Созданный запрос может быть сохранен и вызван повторно для выполнения или изменения. Информацию о базе данных докладывали на XIV Международном совещании по рентгенографии минералов в Санкт-Петербурге в 1999 г. В виде Access-приложения информация хранится и в настоящее время на ВМК, она открыта для использования всеми желающими. Запросы позволили получить данные о распре-

Рис. 1. Симметричная статистика минералов в базе Г.Б. Бокия (распределение материалов по сингониям)

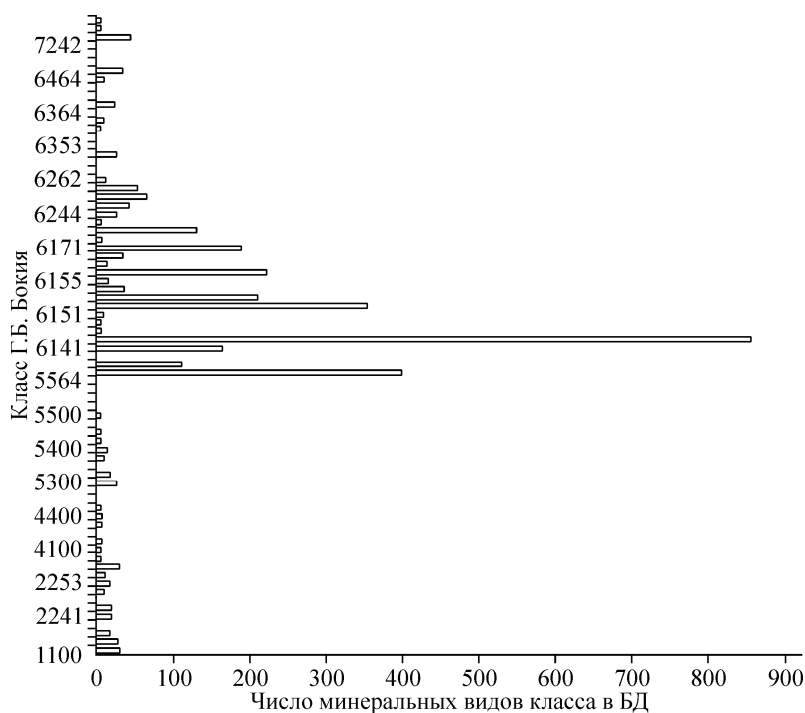


Рис. 2. Распределение минеральных видов по классам Г.Б. Бокия

лении минералов по сингониям. Программа Microsoft Graph представила полученные данные в форме диаграммы (рис. 1) [4]. Серия тестовых запросов позволила получить распределение минералов по таксонам (рис. 2).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бокий Г.Б. // Минер. журн. – 1992. – **14**, № 6. – С. 47.
2. Флейшер М. Словарь минеральных видов. – М.: Мир, 1990.
3. Штрюбель Г., Циммер З.Х. Минералогический словарь. – М.: Недра, 1987.
4. О критериях, используемых при рассмотрении новых минералов: Материалы Комиссии по новым материалам и названиям минералов // Зап. Всесоюз. минералог. об-ва. – 1977. – **106**, вып. 6. – С. 636 – 684.
5. Бокий Г.Б. // Там же. – 1974. – **103**, вып. 6. – С. 735 – 739.
6. Сергеев А.В. Access 2007. Новые возможности. – С.Пб.: Питер, 2008.
7. Клайн К. SQL. Справочник. – М.: КУДИЦ-ОБРАЗ, 2006.