

ChemRock: um sistema de análise e interpretação de dados litogeoquímicos como ferramenta para o estudo petrológico de rochas ígneas e seu contexto tectônico

ChemRock: a lithogeochemical data analysis and interpretation system as a tool to the petrological study of igneous rocks and their tectonic setting

Daisy Barbosa Alves | Mauro Biondi | Fabiana Rodrigues Leta | Leonardo Pereira de Lima | Sérgio de Castro Valente | Arthur Corval

Palavras-chave: litogeoquímica | programa de computação ChemRock | rochas vulcânicas | contexto tectônico | modelagem geodinâmica

Keywords: lithogeochemistry | ChemRock software | volcanic rocks | tectonic setting | geodynamic modeling

resumo

A petrologia de rochas ígneas é fortemente embasada em cálculos de dados litogeoquímicos que, quando realizados para um grande número de amostras, podem tornar a interpretação petrogenética uma tarefa complexa. Apresenta-se, aqui, o sistema computacional *ChemRock*, destinado à análise, interpretação e visualização de dados litogeoquímicos dentro de um contexto petrológico e geodinâmico.

O sistema funciona em ambiente *Windows* e possui uma interface simples e de fácil interação com o usuário. Reúne, em um mesmo ambiente, gráficos de classificação de rochas, de discriminação de séries e de paleoambientes tectônicos e módulos de interpretação de dados isotópicos e normativos (CIPW e mesonorma). Além disso, disponibiliza tabelas de coeficientes de partição e normalização propostos por diferentes autores, módulos de quantificação de processos de fusão parcial, cristalização fracionada e mistura binária. O sistema é capaz de gerar centenas de gráficos e tabelas pré-formatados que podem ser inseridos em relatórios digitais alóctones, além de possuir, também, um módulo de geração de relatórios. Disponibilizando métodos e facilidades em uso na literatura corrente, o *ChemRock* é uma ferramenta que agiliza a análise petrogenética.

introdução

Os estudos petrogenéticos de rochas ígneas dependem fortemente de dados geoquímicos e, para isto, fazem uso de cálculos de complexidade variada. Empregando um grande número de amostras, o uso de programas computacionais auxiliares é imprescindível para originar uma avaliação petrológica ágil e coerente.

Tradicionalmente, vários programas computacionais têm sido aplicados à interpretação petrológica. Alguns destes programas não foram elaborados para serem utilizados exclusivamente com este objetivo. É o caso de planilhas de cálculo, por exemplo, que servem a diversas finalidades, dentre as quais à análise semiquantitativa ou quantitativa de processos petrogenéticos. Outros programas, no entanto, têm sido elaborados para usos exclusivamente petrológicos. Um caso típico é o programa *Newpet* (Clarke, 1991), um *freeware* de uso amplo pela comunidade geocientífica e que reuniu uma série de módulos aplicados à petrologia ígnea, tais como o *Igpet*, o *GPP*, o *Newmix*, o *Newmelt*, o *NewCIPW* e a *MSONRM*. O *Newpet* permite ao usuário classificar rochas, discriminar séries e ambientes tectônicos, obter resultados normativos e mesonormativos, dentre outros. Além disso, inclui módulos de análise quantitativa para processos de fusão parcial e mistura binária.

Muito embora programas como o *Newpet* tenham representado um avanço na análise petrogenética, de um modo geral o petrólogo atual não consegue conduzir seu trabalho sem o auxílio de programas analíticos complementares, tais como planilhas de cálculos, bancos de dados, programas gráficos e editores de texto. Além disso, o *Newpet* foi desenvolvido para plataforma DOS, não estando habilitado a usar os recursos computacionais que vêm sendo paulatinamente disponibilizados na comunidade científica atual, como o uso de *mouse* e de impressoras em rede, e o controle dinâmico dos gráficos e dos diagramas gerados.

Em suma, a metodologia aplicada classicamente no estudo petrológico de rochas ígneas defronta-se atualmente com vários obstáculos, dentre os mais relevantes, talvez, o longo tempo

necessário à análise e ao atendimento das incompatibilidades entre os diversos programas computacionais utilizados. Neste contexto, solicitou-se ao Laboratório de Metrologia Dimensional e Computacional da Universidade Federal Fluminense o desenvolvimento do sistema *ChemRock*, destinado a se tornar uma ferramenta alternativa capaz de reduzir estes obstáculos e de gerar modelos petrogenéticos refinados, potencialmente capazes de utilização em abordagens geodinâmicas.

o ChemRock

O *ChemRock* é uma ferramenta desenvolvida em linguagem C++ para funcionar em ambiente *Windows* e utilizando o *MS-Access* como ferramenta de banco de dados. É um sistema monusuário que apresenta uma interface cooperativa bem estruturada, a qual propicia uma fácil interação homem-máquina e a elaboração de análises visualizando concomitantemente gráficos, tabelas de normalização e coeficientes de partição (fig. 1). Estas informações são recuperadas simultaneamente do banco de dados e de quaisquer outros itens disponíveis no sistema, auxiliando a comparação visual entre os mesmos.

O administrador do sistema *ChemRock* fornece um *login* e uma senha a cada usuário. Com o acesso autorizado, o usuário pode criar ou abrir uma avaliação que poderá conter mais de uma alternativa de análise e interpretação. O programa trabalha com dados analíticos relativos tanto a amostras de poços de perfuração quanto àquelas coletadas em afloramentos. Os dados litogeoquímicos podem ser cadastrados diretamente no *ChemRock* ou então importados de arquivos do tipo **.roc* (*Newpet*), **.wk1* (*Lotus*) ou **.xls* (*Excel*).

O conceito de alternativa consiste em permitir que o usuário crie análises diferentes dentro de uma mesma avaliação, seja utilizando gráficos e cálculos diferenciados ou utilizando conjuntos de amostras distintos (fig. 2). Uma alternativa pode ser composta por gráficos, módulos de mistura binária, cristalização fracionada, fusão parcial e/ou relatórios. Depois de comparar e avaliar todas as alternativas de análise, o usuário escolhe

aquela que considere mais aplicável à sua avaliação (Alternativa Oficial).

O usuário do *ChemRock* pode utilizar módulos para recálculos de ferro (Fe_2O_3 , FeO , Fe_2O_3^t e FeO^t) e para base anídrica, iniciar cálculos normativos (CIPW), mesonormativos, de razões iniciais e fatores ϵ de isótopos de Sr e Nd, bem como de idades modelo de Nd (para CHUR ou manto empobrecido; Faure, 1986), efetuar conversões de óxidos para elementos (e vice-versa), calcular o número de magnésio, índice de solidificação, densidade e índice agpaítico.

No estudo de rochas ígneas, o *ChemRock* disponibiliza diversos diagramas e/ou gráficos utilizados classicamente na discriminação de séries magmáticas (p.ex.: Irvine e Baragar, 1971; Miyashiro, 1974) e classificação química de rochas ígneas (p.ex.: Cox *et al.* 1979; LeMaitre, 1989). Do mesmo modo, diagramas de discriminação de ambientes tectônicos de rochas ígneas graníticas (p.ex.: Maniar e Piccoli, 1989) e rochas ígneas basálticas e andesíticas (p.ex.: Pearce e Cann, 1973), além de gráficos normativos (p.ex.: Grove *et al.* 1982) e gráficos isotópicos (p.ex.: Zindler e Hart, 1986; James, 1981) também podem ser utilizados pelo usuário do *ChemRock*. No momento, o sistema disponibiliza um total de 103 gráficos, contendo seus respectivos dados bibliográficos (autor, ano, descrição sumária e observações).

O *ChemRock* também permite que o usuário crie novos gráficos, oferece várias formas de formatação e configuração dos mesmos, além de possibilitar o destaque de um grupo de amostras, registrar análises dos gráficos ou escrever uma determinada observação (nota) sobre uma região específica do gráfico. O usuário pode ainda consultar a lista de amostras plotadas e não plotadas nos gráficos. Todos os gráficos podem ser salvos em formatos *.jpg, *.bmp ou inseridos diretamente no relatório da alternativa de análise.

O sistema *ChemRock* apresenta um total de 59 tabelas de fatores de normalização divididas entre elementos do grupo da platina, metais de transição, multi-elementares e elementos terras raras (p.ex.: Sun, 1982; McDonough *et al.* 1992). Caso seja necessário, o usuário pode ainda cadastrar novas tabelas de fatores de normalização.

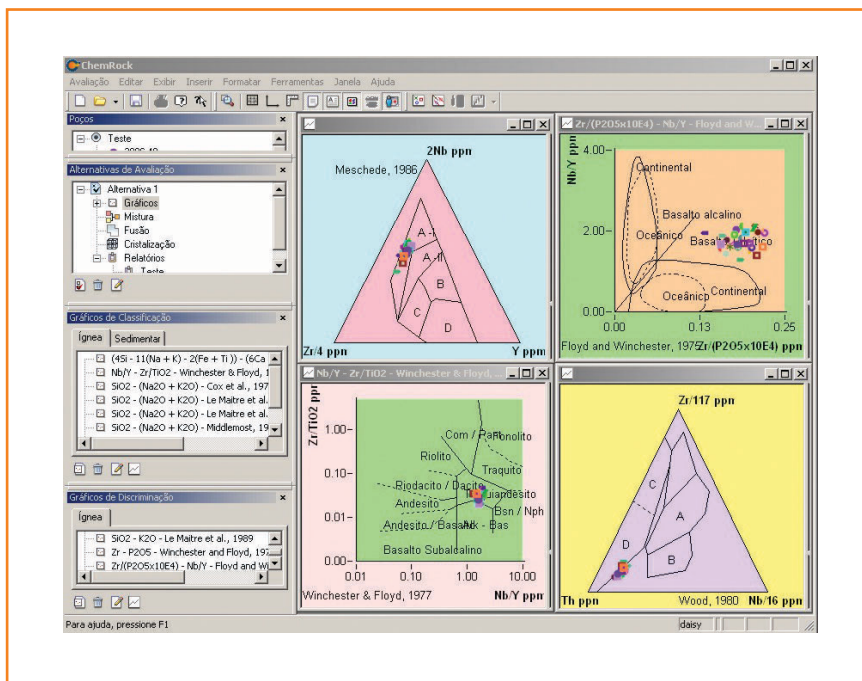


Figura 1 – Interface do sistema *ChemRock* mostrando o seu layout básico e uma série de gráficos tradicionalmente empregados na classificação de rochas ígneas e discriminação de ambientes geotectônicos.

Figure 1 – *ChemRock* system interface showing its basic layout and a set of diagrams traditionally used to classify igneous rocks and to discriminate their tectonic settings.

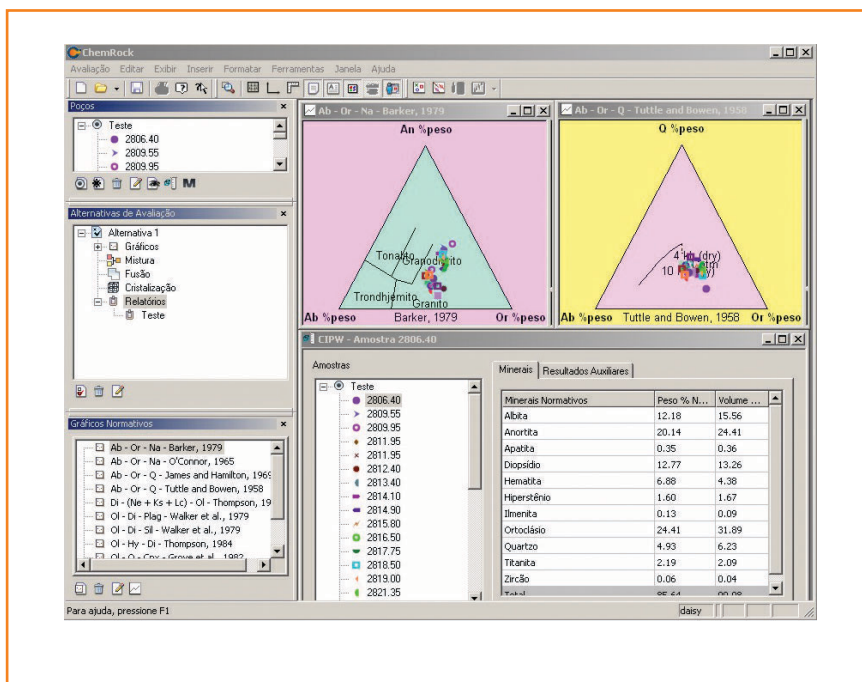


Figura 2 – Interface do sistema *ChemRock* mostrando o módulo de cálculo da norma CIPW e dois gráficos normativos.

Figure 2 – *ChemRock* system interface showing the module used to calculate CIPW norm and two normative diagrams.

No *ChemRock*, o usuário tem a flexibilidade de utilizar um fator de normalização próprio ou padronizado, sobre uma ou várias amostras ou sobre outros fatores de normalização, e os gráficos assim gerados podem ser exibidos em barra ou em linha. Para cada gráfico de normalização que possuir os elementos Ce e Eu, há a opção de visualizar os cálculos das respectivas anomalias.

Na construção de modelos petrogenéticos, o *ChemRock* inclui os seguintes módulos de análise quantitativa de dados geoquímicos: mistura binária (Faure, 1986), cristalização fracionada e fusão parcial (Wood e Fraser, 1976). Para cada um desses módulos, o sistema oferece recursos gráficos e técnicas de interface que agilizam a construção e definição do modelo mais adequado a um conjunto de amostras. O sistema permite que sejam criados diversos modelos simultaneamente, e para cada modelo os dados são visualizados em forma de tabelas ou, ainda, em gráficos que facilitam o entendimento dos processos de fusão, cristalização e mistura binária.

Tabela 1

Comparação da performance entre os sistemas tradicionalmente utilizados na análise petrogenética e o *ChemRock*.

Table 1

Performance comparison of traditional systems employed in petrogenetic analyses and *ChemRock*.

Aspectos	Outras Ferramentas	ChemRock
Sistema Operacional	DOS (mais freqüente) <i>Windows</i>	<i>Windows</i>
Amostras	Poucas opções de propriedades, cores, símbolos e de recálculos e fórmulas de conversão	Infinitas propriedades, opções de cores, símbolos e de cálculos de conversão Incorpora o conceito de poço
Gráficos	Poucos gráficos, visualização de um só gráfico por vez, modo de criação restrito, impressão em impressora local, poucas opções de formatos de exportação	Centenas de gráficos, embute uma metodologia de análise, várias possibilidades de formatação de gráficos (por região, legendas de região, por exemplo), criação de grupos de amostras, criação de notas, isolamento de campo disponível para análise, comparação visual, criação de sentenças, descrição e observação, exportação em formatos compatíveis, visualização tanto de amostras plotadas como não plotadas, impressão em impressora local ou da rede
Fusão parcial e cristalização fracionada	Sem gráficos, sem tabelas de coeficientes de partição, poucas opções de tabelas de normalização	Com gráficos, com centenas de tabelas de coeficientes de partição e dezenas de tabelas de normalização
Mistura binária	Sem gráficos e difícil entrada de dados	Com gráficos e possibilidade de arraste de tabelas e amostras
Fatores de normalização	Restritos	Flexibilidade, disponibilidade de centenas de tabelas e possibilidade de cálculos de anomalias de Ce e Eu
Relatórios	Não disponíveis e dependentes de outros programas gráficos, de cálculo e editores de texto	Arraste das opções de alternativas diretamente para o relatório integrado a editor de texto

Os módulos de fusão parcial e cristalização fracionada são suportados por 140 tabelas de coeficientes de partição.

Finalmente, o sistema permite que todos os resultados gerados pela avaliação, incluindo tabelas e gráficos, sejam incorporados a um editor de textos, compondo um relatório que pode ser pré-configurado.

comentários finais

Testes de validação do sistema, efetuados com especialistas e usuários típicos, demonstraram que a utilização do *ChemRock* otimiza em muito os estudos de avaliação petrogenética de rochas ígneas. O sistema oferece um ambiente integrado de trabalho que reúne tabelas, gráficos e métodos de cálculos. Deste modo, ele reduz problemas de compatibilidade com programas da plataforma *Windows*, especialmente aqueles inerentes à importação de arquivos gerados em sistema DOS. Além disso, o *ChemRock* integra, num mesmo sistema, ferramentas de análise qualitativa (diagramas discriminantes e de classificação diversos) e quantitativa (modelos de fusão parcial, cristalização fracionada e mistura binária). Na tabela 1 são sintetizadas as melhorias implementadas, o que possibilita uma comparação expedita dos seus recursos em relação às ferramentas utilizadas anteriormente. Uma estimativa conservadora de redução do tempo de análise, de modo geral, é de 60% a 70% para especialistas e de 40% a 50% para usuários leigos.

O sistema *ChemRock* representa, portanto, um avanço considerável no tocante às ferramentas computacionais atualmente disponíveis para a análise, interpretação e apresentação de dados petrológicos de rochas ígneas. A incorporação de modelos petrogenéticos que podem ser facilmente inseridos em modelos geodinâmicos de caráter preditivo, por outro lado, lhe traz uma vantagem adicional, pois o *ChemRock* se torna potencialmente capaz de reduzir custos em atividades exploratórias de bens geológicos.

agradecimentos

À Petrobras por direcionar recursos para o desenvolvimento do programa *ChemRock* e pela liberação deste trabalho para divulgação externa.

referências bibliográficas

- BARKER, F. Trondhjemite : definition, environment and hypotheses of origin. In: BARKER, F. (Ed.) **Trondhjemites, dacites and related rocks**. Elsevier : Amsterdam, 1979. p. 1-12.
- CLARKE, D. **NewPet for DOS** (software). St. John's, Newfoundland : Memorial University of Newfoundland, 1991.
- COX, K. G.; BELL, J. D.; PANKHURST, R. J. **The interpretation of igneous rocks**. London : Allen & Unwin, 1979. 450 p.
- FAURE, G. **Principles of isotope geology**. 2. ed. New York : Wiley, 1986. 589 p.
- FLOYD, P. A.; WINCHESTER, J. A. Magma-type and tectonic setting discrimination using immobile elements. **Earth and Planetary Science Letters**, Amsterdam, v. 27, n. 2, p. 211-218, Sep. 1975.
- GROVE, T. L.; GERLACH, D. C.; SANDO, T. W. Origin of late calc-alkaline series lavas at Medicine Lake Volcano by fractionation, assimilation and mixing. **Contributions to Mineralogy and Petrology**, Berlin, v. 80, p. 160-182, 1982.
- IRVINE, T. N.; BARAGAR, W. R. A. A guide to the chemical classification of the common volcanic rocks. **Canadian Journal of Earth Science**, Ottawa, v. 8, p. 523-548, 1971.
- JAMES, D. E. The combined use of oxygen and radiogenic isotopes as indicators of crustal contamination. **Annual Review of Earth Planetary Sciences**, Palo Alto, v. 9, p. 311-344, 1981.
- LeMAITRE, R. W. (Ed.) **A classification of igneous rocks and glossary of terms**. Oxford : Blackwell, 1989. 193 p.
- MANIAR, P. D.; PICCOLI, P. M. Tectonic discrimination of granitoids. **Geological Society of American Bulletin**, Boulder, Colo., v. 101, p. 635-643, 1989.
- McDONOUGH, W. F.; SUN, S.; RINGWOOD, A. E.; JAGOUTZ, E.; HOFMAN, A. W. K. Rb and Cs in the earth and moon and the evolution of the earth's mantle. **Geochimica et Cosmochimica Acta**, Oxford, v. 56, n. 3, p. 1001-1012, Mar. 1992.
- MESCHEDE, M. A method of discriminating between different types of mid-ocean ridge basalts and continental tholeiites with the Nb-Zr-Y diagram. **Chemical Geology**, Amsterdam, v. 56, n. 3-4, p. 207-218, Oct. 1986.
- MIYASHIRO, A. Volcanic rock series in island arcs and active continental margins. **American Journal of Science**, New Haven, v. 274, p. 321-355, 1974.
- PEARCE, J. A.; CANN, J. R. Tectonic setting of basic volcanic rocks determined using trace element analyses. **Earth and Planetary Science Letters**, Amsterdam, v. 19, n. 2, p. 290-300, Jun. 1973.
- SUN, S. S. Chemical composition and origin of the earth's primitive mantle. **Geochimica et Cosmochimica Acta**, Oxford, v. 46, n. 2, p. 179-192, Feb. 1982.
- TUTTLE, O. F.; BOWEN, N. L. **The origin of granite in the light of experimental studies in the system NaAlSi₃O₈-KAlSi₃O₈-SiO₂-H₂O**. New York : Geological Society of America, 1958. 153 p. (Geological Society of America. Memoir, 74).
- WINCHESTER, J. A.; FLOYD, P. A. Geochemical discrimination of different magma series and their differentiation products using immobile elements. **Chemical Geology**, Amsterdam, v. 20, p. 325-343, 1977.
- WOOD, D. A. The application of a Th-Hf-Ta diagram to problems of tectonomagmatic classification and to establishing the nature of crustal contamination of basaltic lavas of the British Tertiary volcanic province. **Earth and Planetary Science Letters**, Amsterdam, v. 50, n. 1, p. 11-30, Oct. 1980.
- WOOD, B. J.; FRASER, D. G. **Elementary thermodynamics for geologists**. Oxford : Oxford University Press, 1976. 303 p.

ZINDLER, A.; HART, S. R. Chemical geodynamics. **Annual Review of Earth Planetary Science**, Palo Alto, v. 14, p. 493-571, 1986.

abstract

Petrology of igneous rocks is strongly based on calculations of whole-rock geochemical data, which applied to a large number of samples can be very time-consuming. This paper presents ChemRock, a computer-based system used to analyze, interpret and visualize litho-geochemical data in a petrologic and geodynamic approach. It operates in a Windows platform and offers a simple and user-friendly interface. Within the same environment it is able to gather rock classification graphs used to discriminate series of tectonic paleoenvironments, and modules used to interpret normative (CIPW and mesonorm) and isotopic data. Besides, normalization and partition coefficients tables proposed by different authors, quantification modules of partial melting processes, crystal fractionation and binary mixture have been provided. It is capable of generating hundreds of graphs and pre-formatted tables that can be inserted in digital reports, and it is also provided with a module to generate its own reports. ChemRock is a tool to speed up petrogenetic analysis by offering methods and functionalities used in current literature.

autor principal

Daisy Barbosa Alves - ver p.154