



Instituto de Geociências - IG/UnB

Segunda Avaliação

Disciplina: 396338 - Programação para Geociências

Professor: Marcelo Peres Rocha

Aluno: Gabriel de Souza Franco

N: 15/0026901

Brasília, 20 de maio de 2016.

1-Introdução:

Dados de química mineral são muito utilizados para discussão de problemas petrológicos. Todavia, são obtidas apenas as porcentagens em óxidos de uma microsonda eletrônica e as fórmulas devem ser recompostas antes de abordar as questões.

Neste sentido, este *script* visa a dar maior celeridade ao processo da obtenção dos dados até os diagramas finais.

2-Objetivos:

Este relatório visa a descrever os procedimentos utilizados para, a partir de uma tabela contendo apenas os dados de porcentagem de óxidos de análises minerais de anfibólios e piroxênios, calcular parâmetros de interesse, classificar as amostras em diagramas e criar um arquivo com estes parâmetros.

3 - Materiais e métodos:

Para criação do *script* supracitado fez-se uso apenas do programa MATLAB® versão R2012a, uma vez que a disciplina teve como foco a utilização deste programa.

4 - Descrição do início do programa:

O programa começa com o comando "clear all" de modo a apagar qualquer dado armazenado no MATLAB previamente que poderia intervir no funcionamento do programa para o propósito desejado (linha 2).

Em segundo lugar, o comando "load Planilha.txt" permite carregar os dados armazenados neste arquivo. Ele apresenta as porcentagens de óxidos de uma mesma análise distribuídos ao longo de uma linha, pois esta é a forma dos dados recebida da microsonda eletrônica (linha 5).

Primeiramente, o usuário, por meio de um comando input que determina "s", escolhe se seus dados são de piroxênios ou hornblendas (os anfibólios magmáticos), pois os passos a serem tomados e os produtos finais são distintos. Em seguida, é feita a matriz transposta para facilitar o processamento destes dados (assim tem-se uma análise por coluna e cada óxido na mesma linha de diferentes colunas) e com o uso do comando size, cria-se lim e lim2, que correspondem respectivamente à quantidade de linhas e colunas da matriz transposta (linhas 8 a 12).

Com base em um condicional vinculado ao valor de "s", o programa dá prosseguimento a anfibólios ou piroxênios (linha 15).

5 - Descrição do processamento de piroxênios:

O primeiro passo consiste em dividir as porcentagens dos óxidos pelas suas respectivas massas e multiplicar pela quantidade de cátions na fórmula de uma molécula do óxido, de forma que se multiplica por 1 para SiO_2 e se multiplica por 2 para Na_2O para obtenção dos moles de cada cátion (linhas 16 a 24).

Em segundo lugar, se soma os números obtidos para cada análise, que deveria totalizar 4, porém sempre apresenta desvios. Portanto deve-se normalizar multiplicando todos os elementos pela soma "S" deles e dividindo por 4. Desta forma, obtêm-se a quantidade de cada cátion na fórmula (linhas 26 a 28).

Em seguida, se numera as análises e é feito um gráfico da linha 10 pela linha 4, o que corresponde ao número da análise pelo Cr na fórmula (Fig. 1) (linhas 30 a 34).

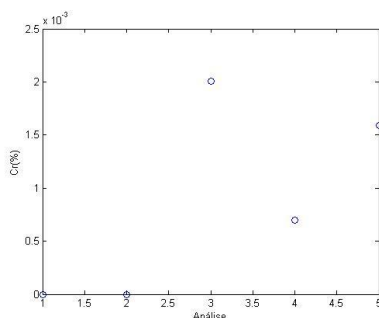


Figura 1: Teores de Cr das diversas análises.

Além disto, é necessário plotar estas amostras em um diagrama triangular reduzido, cujo funcionamento é semelhante ao triângulo de composições RGB de gamaespectrometria, onde cada vértice indica 100% daquele membro e 0% dos demais. Todavia, piroxênios não têm mais que 50% de composição do membro cálcico (wollastonita), de forma que o diagrama é reduzido de um triângulo a um trapézio.

Usa-se o comando load para carregar o arquivo Coordenadasdodiagrama.txt, onde estão incluídas os valores correspondentes aos vértices e linhas divisoras dos campos do diagrama (linha 41).

Para plotar (Fig. 2), usa-se um artifício de conversão dos dados, onde se plota nas ordenadas a variável de topo do diagrama $\sqrt{3}/2$ e nas abscissas a soma de metade da variável do vértice superior e a variável do vértice inferior. No caso das análises, ainda é indispensável normalizar os três elementos (Ca, Mg e Fe) por 100, multiplicando por 100 e dividindo pela soma destes (linhas 36 a 39), procedimento

este que já foi feito antes das bordas do gráfico e divisões dos campos a serem inseridos no arquivo Coordenadasdodiagrama.txt (linhas 36 a 48).

De fato, originalmente este diagrama (Fig. 2) tinha seus campos augita e pigeonita reduzido sem relação ao mostrado, contudo, na prática, chama-se por estes nomes os piroxênios que plotam nos campos como mostrados no diagrama.

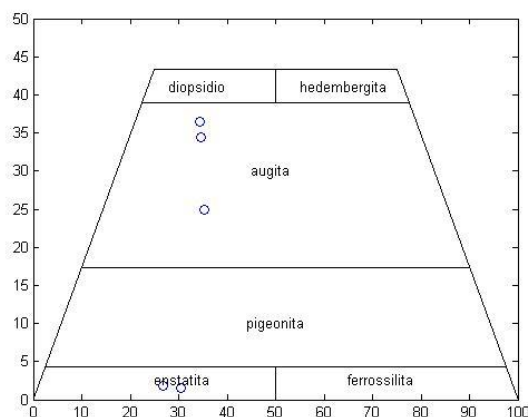


Figura 2: Diagrama de classificação de piroxênios, com base em Morimoto et al., 2004.

Por último, utiliza-se o comando save para salvar a planilha em um arquivo .txt de nome Resultadopiroxenios e codificação ascii (linha 49).

6 - Descrição do processamento de hornblendas:

Em razão da estrutura ser mais complexa e precisarmos do Fe^{3+} , o procedimento de com os dados analíticos é um pouco diferente, pois a microsonda analisa o Fe sem diferenciar seu estado de valência.

Portanto iniciamos dividindo pela massa do óxido e em seguida se cria uma matriz Propoxidos, multiplicando o resultado anterior pela quantidade de átomos de oxigênio na fórmula, sendo por exemplo 2 para SiO_2 e 1 para MnO (linhas 51 a 72).

Procede-se então a soma dos óxidos de cada análise (todas as linhas de cada coluna). Como anfibólios têm 46 cargas negativas, isto corresponde a 23 oxigênios e portanto se normaliza multiplicando os dados de Planilha por 23, dividindo pela soma recém calculada e multiplicando pelo número de cátions em cada fórmula da molécula. Isto é armazenado na matriz Cations (linhas 73 a 84).

Contudo, a tabela Cations não contém valores de Fe^{3+} , que são necessários para anfibólios em razão da distribuição dos cátions ao fim. Isto se dá fazendo um balanço de cargas presentes até o momento e recalculando o Fe^{3+} .

Portanto se calcula S2 e S1, que representam as somas das colunas da tabela Cations do Si até o Mg no caso de S1 e do Si até o Ca no caso de S2. Com base nisto, usa-se um *loop* que virá a culminar com os valores de Fe^{3+} de cada amostra (linhas 86 e 87).

Começamos por criar as colunas das matrizes Ca e Mn, que são a tabela Cations multiplicada por 15 e 13 e divididas por S2 e S1 respectivamente. O motivo disto é que estes somatórios são esperados de ter 15 e 13 cátions totais e seus desvios representam a presença de Fe^{3+} , pois até o momento só se contabiliza o Fe^{2+} , no qual também está incluso o Fe^{3+} (linhas 90 e 91).

Cria-se a linha 1 da tabela Cargas coluna a coluna, povoando com os elementos de Ca ou Mn da respectiva análise e multiplicado pelo número de cargas de cada elemento. A escolha de Ca ou Mn depende do conteúdo de Ca da análise, uma vez que anfibólitos podem ter muita variação composicional e em se tratando de anfibólitos de diferentes origens, estes se originarão em diferentes condições de oxidação e, em decorrência disto, permitirão mais ou menos Fe^{3+} . De fato, para anfibólitos ígneos, há abundância de Ca em relação a muitos anfibólitos metamórficos e, portanto, será comum utilizar a tabela Ca nesta etapa (linhas 93 a 97).

Cria-se as linhas da tabela Cationsd que, com base em se Si, Ti e Al totalizam ou não 8, esta matriz corresponde a Mn ou Ca. A lógica desta condição é semelhante à citada no parágrafo anterior, uma vez que teoricamente um sítio tetraédrico poderia até mesmo ficar parcialmente vazio, já que precisa de 8 átomos por fórmula. No entanto, em anfibólitos de origem ígnea este sítio sempre é totalmente preenchido, normalmente por apenas Si e Al, sem fazer uso do Ti, por isso se usa a matriz Mn (linhas 99 a 103).

O *loop* termina com um condicional que averigua se há cargas suficientes no número calculado em cada coluna de Cargas. A coluna da matriz Fe3 assume o valor 0 se houver cargas suficientes ou completa o restante no caso de falta (linhas 105 a 110).

Ao fim, usa-se o comando vertcat para concatenar cationsdefinitivos e Fe3 em uma única matriz M, seguido da subtração do Fe^{3+} do Fe^{2+} (linha 111).

A isto, se segue a distribuição dos cátions em seus respectivos sítios (T, C, B e A). Respectivamente, no sítio T há preferência por Si, Al e Ti, no C, Al, Ti, Fe^{3+} , Cr, Mg, Fe^{2+} e Mn. O sítio B tem preferência por acomodar respectivamente Mg, Fe^{2+} , Mn, Ca e Na e o sítio A acomoda Na e K. Em razão disto, alguns elementos entram diretamente no sítio, tal como Si no sítio T, ao passo que outros só entram se não estiver totalmente preenchido e o que sobra do elemento passa ao sítio seguinte, tal como o Al. Consequentemente, para estes elementos usa-se um condicional para o primeiro sítio e uma subtração para o segundo, o que pode levar a várias condições encadeadas, tal como a do Mg, Fe^{2+} e Mn no sítio C (linhas 119 a 153).

Tendo a fórmula do mineral analisado pronta, é possível calcular os parâmetros e variáveis intensivas de Ridolfi et al., 2009, que consistem respectivamente em Si^* , Mg^* e Al_T e T , ΔNNO , P e fO_2 (linhas 172 a 180).

Em seguida carrega-se o arquivo Graficoanfibilios.txt que será usado mais adiante e é plotado o gráfico de $TvsfO_2$ (Fig. 3) onde são plotadas as curvas do *buffer* NNO(oxidação do níquel) e NNO+2 e análises como círculos (linhas 183 a 193).

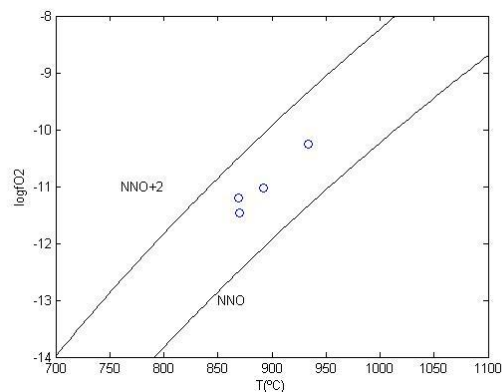


Figura 3: Gráfico de temperatura por fugacidade de oxigênio.

Posteriormente, há um condicional que escolhe o diagrama adequado onde constam os nomes dos anfibólios (Fig. 4), com base em *Leake et al., 2007*. As divisões dos campos dos dois diagramas constam no arquivo Graficoanfibilios.txt que foi carregado (linhas 195 a 211).

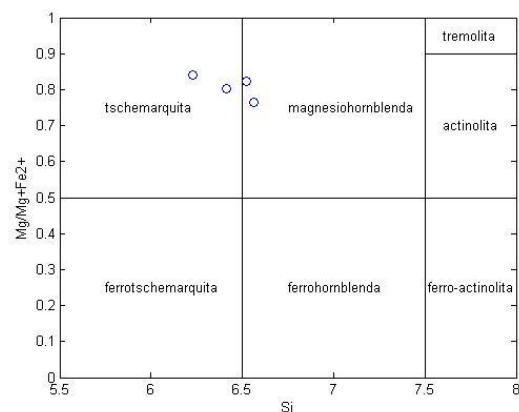


Figura 4: Diagrama de classificação de anfibólios segundo Leake et al., 1997 e Leake et al., 2004.

Por último, é concatenado Cationsdefinitivos e Parametros, formando a tabela Saida. Segue-se a isto o comando save para salvar um arquivo .txt de nome Resultadoanfibilios em codificação ascii (linhas 213 a 216).

7-Conclusões:

O *script* permitiu automatizar um processo que pode tomar alguns minutos, no caso de poucas amostras, ou muitas horas.

Cabe ressaltar que é necessário que o usuário tenha dados em um arquivo .txt de nome "Planilha" no formato correto, ou seja, que as colunas sigam a ordem: Si, Ti, Al, Cr, Fe, Mn, Mg, Ca, Na e K (apenas no caso de anfibólios). Também se deve ter em mente que é voltado para minerais de rochas ígneas, pois os parâmetros foram calibrados para este tipo de rocha.

8-Referências bibliográficas:

LEAKE, B. E., WOOLEY, A. R., ARPS, C. E. S., BIRCH, W. D., GILBERT, M. C., GRICE, J.D., HAWTHORNE, F. C., KATO, A., KISCH, H. J., KRIVOVICHEV, V. G., LINTHOUT, K., LAIRD, J., MANDARINO, J. A., MARESCH, W. V., NICKEL, E. H., ROCK, N. M. S., SCHUMACHER, J. C., SMITH, D. C., STEPHENSON, N. C. N., UNGARETTI, L., WHITTAKER, E. J. W. & YOUZHI, G. 1997. Nomenclature of amphiboles: report of the subcommittee on amphiboles of the International Mineralogical Association, commission on new minerals and mineral names. The Canadian Mineralogist v.35 pp.219-246.

LEAKE, B. E., WOOLEY, A. R., BIRCH, W. D., BURKE, E. A. J., FERRARIS, G., GRICE, J.D., HAWTHORNE, F. C., KISCH, H. J., KRIVOVICHEV, V. G., SCHUMACHER, J. C., STEPHENSON, N. C. N. & WHITTAKER, E. J. W. 2004. Nomenclature of amphiboles: Additions and revisions to the International Mineralogical Association's amphibole nomenclature. American Mineralogist v.89 pp.883-887.

MORIMOTO, L., FABRIES, J., FERGUSON, A. K., GINZBURG, I. V., ROSS, M., SEIFERT, F. A., ZUSSMAN, J. 1988. Nomenclature of pyroxenes. American Mineralogist v.73 pp.1123-1133.

RIDOLFI, F., RENZULLI, A. & PUERINI, M. 2010. Stability and chemical equilibrium of amphibole in calc-alkaline magmas: an overview, new thermobarometric formulations and application to subduction-related volcanoes. Contributions to Mineralogy and Petrology v.160 pp.45-66.