

CALFRAC: PROGRAMA QUE QUANTIFICA O PROCESSO DE CRISTALIZAÇÃO FRACIONADA*Luciano Galdino¹; Leila Soares Marques²*¹ UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO; ² INSTITUTO DE ASTRONOMIA, GEOFÍSICA E CIÊNCIAS ATMOSFÉRICAS

RESUMO: A cristalização fracionada é um importante processo petrogenético de diferenciação magmática. Para testar a viabilidade desse processo em sistemas ígneos, bem como para calcular os percentuais de cada fase fracionada são utilizados alguns programas publicados na literatura, como por exemplo, XLFRAC, MAGFRAC e PETROGRAPH, nos quais elementos maiores, menores e traços são empregados para os ajustes. Entretanto, esses programas apresentam a dificuldade de que o próprio usuário tem que indicar as evoluções pretendidas para os cálculos e fazer uma de cada vez, além de não associarem aos cálculos os elementos-traço, os quais servem para confirmar os resultados adquiridos com os elementos maiores e menores. O objetivo deste trabalho é o de modernizar, tornar mais eficiente e aprimorar a quantificação do processo de cristalização fracionada. O CALFRAC está escrito na linguagem C++ e possui a grande vantagem de calcular, automaticamente e em poucos segundos, todas as possíveis combinações de evolução das amostras envolvidas, inclusive com a análise dos elementos-traço, sendo que o usuário não perde a interatividade que os programas acima citados oferecem, pois o usuário tem a liberdade de elaborar e alterar os dados dos arquivos importados pelo programa para realização dos cálculos. O programa calcula a fração total subtraída do magma inicial e as frações referentes a cada mineral fracionado através do cálculo do balanço de massa aplicado ao método dos mínimos quadrados, utilizando para isso as concentrações dos elementos maiores e menores. Para indicar as melhores soluções sobre possíveis evoluções, os programas publicados na literatura utilizam a soma dos resíduos quadrados, mas não fornecem “pesos” aos resíduos entre as concentrações calculadas e observadas dos óxidos de elementos maiores e menores, cujas concentrações são geralmente muito diferentes. Para evitar esse problema o CALFRAC utiliza a média dos erros relativos (entre as concentrações observadas e calculadas), de todos os óxidos utilizados no ajuste. No caso dos elementos-traço é utilizada a equação de Rayleigh para as evoluções selecionadas pelo balanço de massa e também é calculada a média dos erros relativos para indicar as melhores soluções para o processo evolutivo. Como entrada o programa solicita quatro arquivos contendo: 1) concentrações dos óxidos nas amostras; 2) concentrações dos óxidos nos minerais fracionados; 3) concentrações dos elementos-traço nas amostras; 4) coeficientes de partição dos elementos-traço. O programa ainda solicita o valor máximo admitido para a média dos erros relativos. Como saída, o programa fornece para cada solução, os nomes amostras entre as quais o processo de evolução é viável, a fração total de fases subtraídas, os minerais e suas porcentagens fracionadas, o erro relativo para cada óxido, o erro relativo para cada elemento traço e a média total dos erros relativos. Nesta primeira etapa o programa está sendo testado com amostras de rochas vulcânicas da Província Magmática do Paraná. Este trabalho recebe o apoio da FAPESP, CNPq e CAPES.

PALAVRAS-CHAVE: CRISTALIZAÇÃO FRACIONADA; MODELAGEM COMPUTACIONAL; PROVÍNCIA MAGMÁTICA DO PARANÁ.