

Note brève:

ROCMIN : un logiciel de calcul et de report graphique des données géochimiques des roches et minéraux sur compatible PC*

*ROCMIN: a code for the calculation and graphic representation
of geochemical data of rocks and minerals on PC compatibles*

Jacques DELFOUR ⁽¹⁾, Emmanuel DELFOUR ⁽¹⁾

Mots-clés : Logiciel (ROCMIN), Analyse chimique, Affichage graphique, Roche, Minéral, Norme pétrographique, Formule structurale.

Résumé

ROCMIN est un petit logiciel (222 ko) sur compatible PC, destiné à une rapide exploitation graphique des données provenant d'analyses chimiques de roches ou de minéraux. Ces analyses, contenant jusqu'à 47 éléments majeurs et traces, sont stockées dans des fichiers ASCII au format Import/Export de type DBase III+. Les variables ou leurs combinaisons utilisées dans les diagrammes sont les données chimiques ou les paramètres calculés : CIPW, mésonorme, millications pour les roches, formule structurale pour les minéraux, y compris celle spécifique aux amphiboles (Leake). Les diagrammes, créés par l'utilisateur et de types binaire, ternaire, trapèze, abaque et spectre de Terres Rares, sont conservés en fichiers ASCII. Le traitement statistique (ACP) est également possible. Les sorties sur imprimante des calculs et diagrammes se font par copie d'écran.

Abstract

ROCMIN is a small program (222 ko) run on PC compatible computer providing rapid graphic display of data acquired from whole-rocks and common mineral analyses. These analyses, up to 47 major and trace elements, are stored in ASCII files of Import/Export DBase III + format. Variables and their combinations used for diagrams are chemical data or calculated parameters : CIPW norm, mesonorm, millications for rocks, structural formula for minerals, including the amphibole specific formula (Leake). The diagrams, constructed by the user and of rectangle, triangle, trapeze, abaque and Rare Earth patterns types, are stored in ASCII files. Statistical calculations (PCA) are available. Printer output of calculations and diagrams are obtained by screen copy.

Introduction

De nombreux programmes de calculs pétrographiques ont été développés, généralement sur des ordinateurs centraux et en réseaux. Ainsi au BRGM, FIESTA (Brinon et coll., 1983a, b; Pajon et coll., 1983) puis GDM sur VAX ou sur compatible PC (Lefevre, 1990) offrent parmi de multiples possibilités de calculs géostatistiques et de reports graphiques, des modules dédiés aux calculs pétrochimiques des roches et à ceux des formules structurales des principaux minéraux analysés à la microsonde électronique.

La puissance grandissante des ordinateurs personnels, de bureau ou portatifs, permet de regrouper dans

un seul logiciel le traitement des données géochimiques des roches et des minéraux et leur représentation graphique.

Ainsi ROCMIN comprend les calculs de la norme C.I.P.W., de la mésonorme pour les roches granitiques et de la formule structurale des minéraux communs, y compris celle spécifique aux amphiboles (Leake, 1978). Les calculs statistiques portent sur la moyenne, l'écart-type et sur l'analyse en composantes principales. Les données géochimiques sont représentées dans divers diagrammes rectangulaires ou triangulaires dont les paramètres et les champs de référence sont définissables par l'utilisateur dans un module de construction de diagramme. Le logiciel permet également la saisie et la gestion simplifiée des données analytiques.

* Manuscrit reçu le 17 février 1993, accepté définitivement le 25 mai 1993.

(1) La Cafarderie, 18140 Herry.

ROCMIN lit des fichiers d'analyses chimiques contenant au maximum les données des 47 variables suivantes :

– exprimées en pour-cent :

SiO₂, TiO₂, Al₂O₃, FeO, MnO, MgO, CaO, Na₂O, K₂O, Cr₂O₃, H₂OM, H₂OP, Fe₂O₃, P₂O₅, LiO₂, Cl, F, Si, SO₃, CO₂.

– exprimées en partie par million :

Be, V, Ni, Co, Sr, Rb, Ba, Zr, Y, Nb, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Yb, Lu, Hf, Th, Ta, U.

Ces données sont formatées suivant le mode standard ASCII avec délimitateurs, propre à la fonction export/import des principaux logiciels du commerce (DBASE III+, SUPERDB, etc ...).

L'utilisation d'un système de gestion de base de données (SGDB) contenant un grand nombre d'analyses chimiques de roches ou de minéraux, offre la possibilité de tri ou de sélection sur plusieurs critères avant d'exporter les fichiers directement lisibles par ROCMIN.

Le logiciel ROCMIN a une taille de 220 ko, les fichiers d'analyses et les fichiers diagrammes restent unitairement de petite taille. ROCMIN est utilisable sur disque dur mais aussi sur une seule disquette.

L'ergonomie est facilitée par l'usage de menus déroulants et de fenêtres de choix guidés.

Structure et fonctions de ROCMIN

Écrit en TURBO PASCAL 5.5, ROCMIN est constitué de plusieurs unités ayant chacune une tâche définie. Les unités sont divisées en procédures qui effectuent des calculs ou des fonctions particulières.

Le logiciel comprend les unités suivantes :

- un programme principal servant à l'initialisation de la mémoire réservée au programme et des unités ;
- une unité de déclaration des variables et des constantes (ex. poids moléculaires) ;
- une unité gérant l'interface utilisateur ;
- une unité interprétant les expressions polynomiales lues dans les fichiers diagrammes et lisant les fichiers analyses ;
- une unité « roche » où sont calculés la norme C.I.P.W., la mésonorme et divers paramètres chimico-minéralogiques. Le calcul de la norme C.I.P.W. est l'adaptation du programme écrit en Fortran IV par D. Fears (1985). Le calcul de la mésonorme est l'adaptation du programme écrit en Fortran IV par M. Kosinowski (1982).
- une unité « minéraux » où est calculée la formule structurale selon la méthode de Deer *et al.* (1983). Le calcul de la formule structurale et la dénomination des amphiboles est adapté du programme écrit en Basic par A. Mogessie et R. Tessadri (1982) ;
- une unité « statistique » qui adapte les programmes d'ACP écrits en Fortran IV par J. Davis (1973) et J. Carr (1990) ;
- une unité de gestion des données analytiques (saisie, correction, affichage,...) ;

- une unité « diagramme » servant à la saisie des divers types de diagrammes utilisateurs ;
- une unité « graphique » pour l'affichage des divers types de diagrammes (binaire, triangle, ...) ;
- une unité d'aide contenant et gérant les divers écrans de documentation concernant ROCMIN ;
- une unité de configuration pour la personnalisation des couleurs des écrans et des fenêtres. Les paramètres de cette configuration sont conservés dans un fichier ROCMIN.CFG.

Les fichiers d'analyses

Les analyses sont stockées dans des fichiers possédant la structure suivante :

« NECH », « SiO₂ », ..., « CO₂ », ..., « BE », ..., « U »
 « LE 1472 », « 58.00 », ..., », « 152.00 », ..., « 7.80 »
 « LE 390 », « 50.70 », ..., « 0.00 », ..., 1.30 »

Cette structure est la même pour les roches et les minéraux. L'ordre des éléments et des données analytiques correspondantes est celui exposé ci-dessus, mais leur nombre peut être limité aux données existantes, ainsi de NECH à CO₂ pour des roches dont on ne possède que les éléments majeurs ou NECH à Cr₂O₃ pour les minéraux analysés à la microsonde électronique .

Le choix d'un fichier de données d'analyses, de type XXXXXXXX.AC, entraîne la lecture de ce fichier et sa copie dans un fichier temporaire (ROCMIN.TMP) qui sert aux calculs géochimiques. Ce fichier temporaire est détruit en fin de session de ROCMIN.

Les fichiers diagrammes

Plusieurs types de diagrammes sont constructibles par l'utilisateur :

- 1 – décimal X et Y,
- 2 – décimal X et logarithmique Y,
- 3 – logarithmique X et décimal Y,
- 4 – logarithmique X et Y,
- 5 – triangulaire,
- 6 – trapèze (partie de triangle),
- 7 – abaque (décimal X et Y1 et Y2),
- 8 – terres rares.

Les paramètres entrés dans le fichier diagramme sont différents suivant le type de report (binaire décimal, logarithmique, triangulaire, etc ...). Par exemple pour un diagramme en X et Y décimal :

1 = Code du diagramme, c'est-à-dire le type du report

Miyashiro, 1975 = Titre du diagramme
 (« Fe₂O₃ » * 0.9 + « FeO ») / « MgO » = Formule du calcul en X

FeO*/MgO = Légende en X

0 = Borne inférieure de X

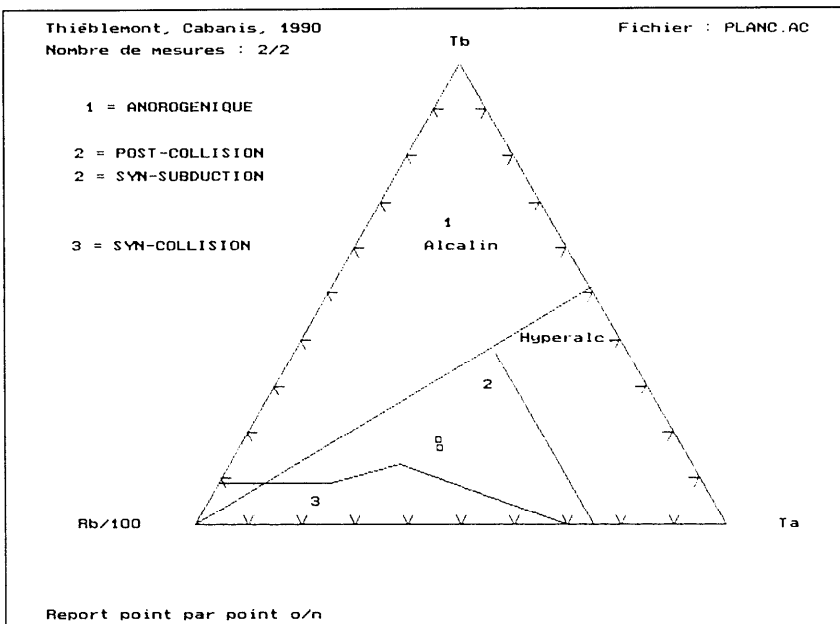
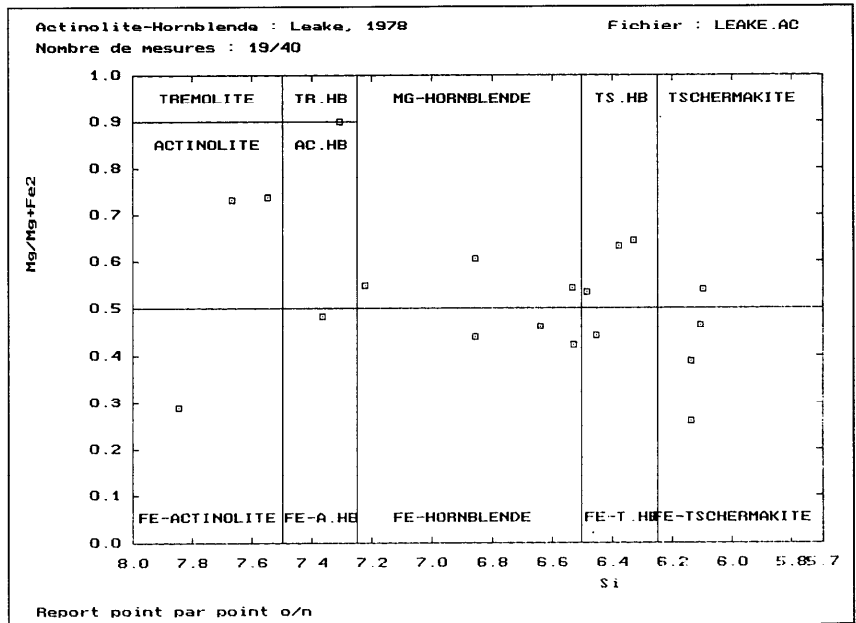
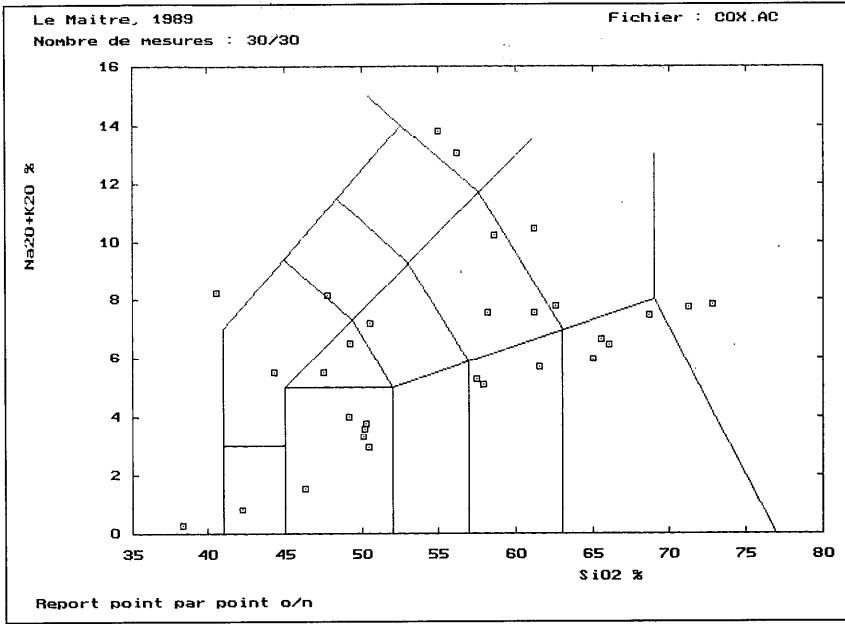


Fig. 1. - Exemples de diagrammes.
 Fig. 1. - Typical diagrams.

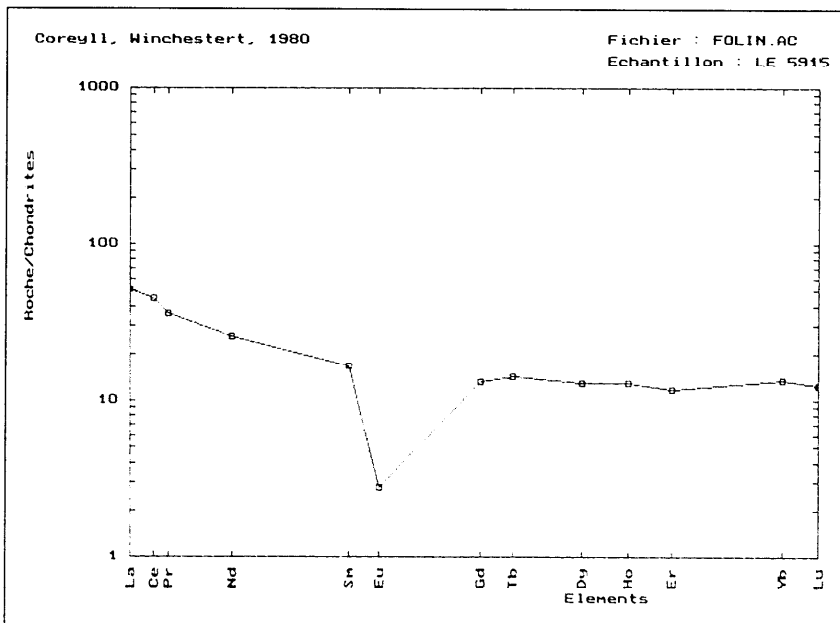
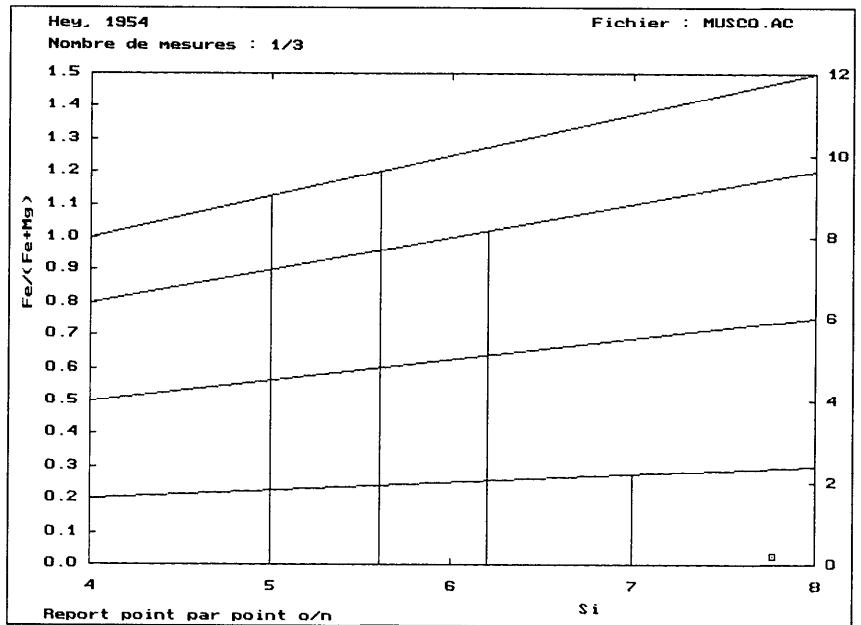
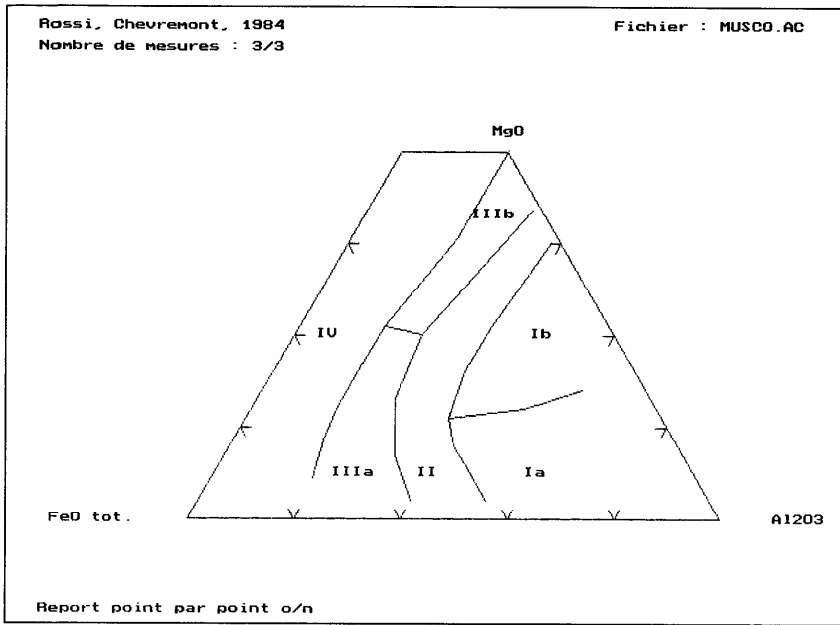


Fig. 1. - Exemples de diagrammes.
 Fig. 1. - Typical diagrams.

- 6 = Borne supérieure de X
- 1 = Intervalle des graduations sur X
- 0 = Nombre de décimales sur X
- « TiO2 » = Formule du calcul en Y
- TiO2 % = Légende en Y
- 0 = Borne inférieure de Y
- 4 = Borne supérieure de Y
- 0.5 = Intervalle des graduations sur Y
- 1 = Nombre de décimales sur Y
- 0 = Nombre de lignes (courbe de référence)
- 0 = Nombre de libellés (courbe de référence)

La saisie de ces paramètres est partiellement aidée par des fenêtres de choix, en particulier à quel type de roches ou de minéraux est destiné le diagramme :

Roches : commun, granite, volcanite, métamorphite

Minéraux : feldspath, biotite, pyroxène, grenat, muscovite, chlorite, péridot, amphibole

Cette caractérisation du diagramme est matérialisée dans l'extension attribuée au nom du fichier diagramme (ex ; AUTUN.GRA, AUTUN.BIO).

Les variables pouvant être prises en compte dans les diagrammes sont celles contenues dans le fichier de données analytiques de SiO₂ à U, ainsi que les variables calculées par ROCMIN telles que tous les minéraux de la norme C.I.P.W., les paramètres de De La Roche pour les roches ou les cations et les pôles des minéraux. Ces variables peuvent être combinées dans des formules algébriques qui sont interprétées par le programme, ex. :

- (« ZR »/1000)/« TIO2 »
- « ALBITE »+« ORTHOSE »
- « AL »-(8-« SI »)
- « MG »/(« MG »+« FE »)

Les lignes (courbe = suite de lignes droites) délimitant des champs de référence à l'intérieur du diagramme sont limitées au nombre de 25. Les légendes placées dans le diagramme sont limitées à 15. Pour les diagrammes rectangulaires, les courbes de référence et les légendes sont obligatoirement à l'intérieur du diagramme. Dans le cas des diagrammes triangulaires, courbes et légendes peuvent être étendues à l'extérieur du triangle (coordonnées négatives). Dans tous les cas, les coordonnées des lignes ou courbes de référence et la position des légendes sont entrées en unités propres

au diagramme : X et Y pour les diagrammes rectangulaires, pôle droit, pôle gauche et sommet pour les diagrammes triangulaires.

Dans le cas du diagramme Terres Rares, chaque élément est suivi de son coefficient de normalisation (Chondrites, MORB, etc ...). Les éléments doivent être classés suivant l'ordre croissant des poids atomiques.

Quelques exemples de diagrammes sont donnés à la figure 1 : x et y en décimal, triangle, trapèze, abaque (x, y1, y2 en décimal), terres rares (poids atomiques = décimal, abondance = logarithmique).

Limitations du logiciel

Actuellement le logiciel ne traite que 47 variables, celles les plus communément utilisées dans la caractérisation géochimique des roches. Certains minéraux normatifs ne sont pas calculés (ex. calcite, dolomite, ...).

Tous les pôles des pyroxènes ou des grenats ne sont pas pris en compte.

Les sorties sur imprimante des calculs pétrochimiques se font par la copie d'écran et échantillon par échantillon. L'affichage des diagrammes et leur impression par copie d'écran, n'offre qu'un seul symbole et une seule couleur interdisant la distinction de plusieurs groupes d'échantillons.

Toutes ces limitations peuvent être levées en complétant la programmation du logiciel.

Conclusion

Orienté pour traiter par diagrammes les données géochimiques des roches et des minéraux sur ordinateur personnel, ROCMIN reste d'un emploi simple et rapide.

Quelques fichiers d'analyses de référence (roches et minéraux) et plusieurs fichiers diagrammes accompagnent le logiciel.

Son utilisation est recommandée en aval de logiciel de gestion de données (DBASE, SUPERDB, etc. ...) dont les fonctions de tri et de sélection permettent d'exporter vers ROCMIN des fichiers contenant des données typées.

Références bibliographiques

BRINON Ph., POISSONNIER G. (1983a). - FIESTA. Fichiers extensibles structurés en tableaux. Notice de présentation. Rapport BRGM, 83 SGT 005 DTI.

BRINON Ph., PAJON D., PENNETIER A., POISSONNIER G., ROLET Ph. (1983b). - FIESTA. Fichiers extensibles structurés en tableaux. Notice d'utilisation des programmes de gestion de fichiers. Rapport BRGM, 83 SGT 004 DTI.

CARR J.R. (1990). - CORSPOND : a portable Fortran-77 program for correspondence analysis. *Computers & Geosciences*, **16**, n° 3, pp. 289-307.

DAVIS J.C. (1973). - Statistics and data analysis in geology. John Wiley & Sons, New York, 550 p.

DEBON F., LE FORT P. (1983). - A chemical-mineralogical classification of common plutonic rocks and associations. *Trans. Royal Soc. Edinburgh Earth Sci.*, **73**, pp. 135-149.

DEER W.A., HOWIE R.A., ZUSSMAN J. (1983). - An introduction to the rock-forming minerals. The English Language Book Society and Longman, 528 p.

DENAYER M.E (1951). - Tableaux de pétrographie. Éditions Lamare, Paris.

FEARS D. (1985). – A corrected CIPW program for interactive use. *Computers & Geosciences*, **11**, n° 6, pp. 787-797.

KOSINOWSKI M.H.F. (1982). – MSONRM, a Fortran program for the improved version of Mesonorm calculation. *Computers & Geosciences*, **8**, n° 1, pp. 11-20.

LA ROCHE H. DE, LETERRIER J., GRANDCLAUDE P., MARCHAL M. (1980). – A classification of volcanic and plutonic rocks using RI-R2 diagram and major elements analysis. Its relationships with current nomenclature. *Chemical Geology*, **29**, pp. 183-210.

LA ROCHE H. DE, STUSSI J.M., CHAURIS L. (1980). – Les granites à deux micas hercyniens français. Essais de cartographie et de corrélations géochimiques appuyés sur une banque de données. Implications pétrologiques et métallogéniques. *Sci. Terre*, **24**, n° 1, pp. 5-121.

LEAKE B.E. (1978). – Compiler for subcommittee on amphi-

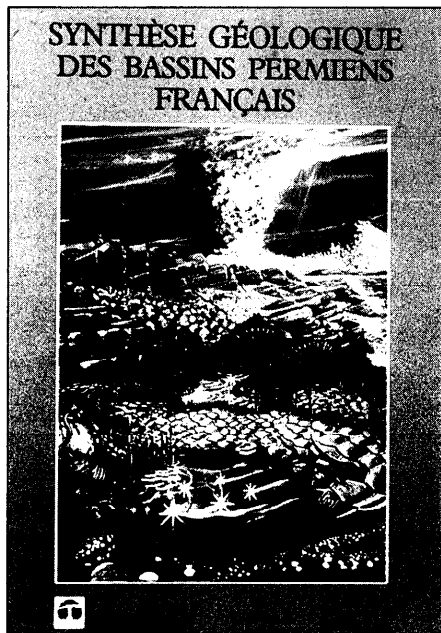
boles, I.M.A. Nomenclature of amphiboles. *Amer. Min.*, **63**, pp. 1023-1052.

LEFEUVRE E. (1990). – Applications géologiques et minières et système de gestion de bases de données. Séminaire international sur l'informatisation du patrimoine et bases de données associées, Rabat (Maroc), 26 novembre-7 décembre 1990.

MOGESSIE A., TESSADRI R. (1982). – A basic computer to determine the name of an amphibole from an electron microprobe analysis. *Geol. Paläont. Mitt. Innsbruck*, **11**, 7, pp. 259-289.

PAJON D., ROLET Ph. (1983). – Notice d'utilisation des programmes d'analyses de données implantés au BRGM sur VAX. Tome 1. Rapport BRGM 83 SGT 003 DTI.

TILL R. (1977). – The Hardrock Package, a serie of Fortran IV computer programs for performing and plotting petrochemical calculations. *Computers & Geosciences*, **3**, pp. 185-243.



SYNTHÈSE GÉOLOGIQUE DES BASSINS PERMIENS FRANÇAIS

**Coordination : Jean-Jacques Châteauneuf
et Geneviève Farjanel**

Mémoire du BRGM N° 128

Les bassins permien se situent au cœur d'un vaste ensemble géodynamique, identifié à la chaîne varisque, qui va des Appalaches à l'Oural et de la zone ouest-méditerranéenne à la mer du Nord. Elle intéresse à ce titre, une grande partie du continent est-américain et la plus grande partie de l'Europe.

De nombreux travaux ont été menés sur ces bassins, durant les trois dernières décennies, en raison de leur intérêt, qu'il soit fondamental ou économique. Mais le caractère le plus souvent ponctuel ou régional de ces recherches appelait une réflexion d'ensemble et une synthèse sur le sujet.

Cette dernière a été réalisée par une trentaine de spécialistes : géologues cartographes, sédimentologues, pétrographes, stratigraphes, géophysiciens ou volcanologistes qui viennent de l'enseignement supérieur, de la recherche, du Service géologique national ou de Sociétés minières.

L'ouvrage comprend deux parties distinctes qui sont : l'étude exhaustive des 17 bassins reconnus à ce jour en France et un ensemble de thèmes consacrés à la stratigraphie, la sédimentologie et le volcanisme. La conclusion générale quant à elle, replace l'histoire de ces bassins dans l'évolution tectono-climatique de l'Europe à cette époque.

Outre son intérêt pour les scientifiques attachés à la géologie fondamentale : géodynamique, géologie historique et régionale, cette synthèse constitue un outil de travail et de réflexion, fort bien documenté, pour les praticiens engagés dans la prospection des substances minérales et énergétiques.

288 pages, 200 figures, 14 planches hors-texte

PRIX PUBLIC : 750,00 F
+ 35 F de frais de port et d'emballage

Éditions du BRGM

AVENUE DE CONCYR - BP 6009

45060 ORLÉANS CEDEX 2

FRANCE - Tél. (33) 38.64.30.28

ISBN 2-7159-0455-X