

PRÉSENTATION D'UN PROGRAMME DE CALCUL AUTOMATIQUE
DE NORMES ET DE PARAMÈTRES
A PARTIR D'ANALYSES CHIMIQUES (PCAL 01 — IBM 7040) (*)

par P. KUMMERT (**), J. LAVREAU (**), et J. MICHOT (**)

(3 figures dans le texte)

Introduite par P. CORDIER en 1815, la classification des roches à partir de l'analyse chimique a été développée depuis lors de diverses manières. En 1902, CROSS, IDDINGS, PIRSSON et WASHINGTON présentèrent une classification quantitative chimico-minéralogique des roches ignées basée sur le calcul de la norme. En 1923, P. NIGGLI développa un système de représentation s'appuyant sur une série de paramètres obtenus en traitant les pourcentages d'oxydes, système qui permet de classer toute roche dans un groupe déterminé, en particulier de rapporter les roches ignées à des types magmatiques caractéristiques. Tout en restant unéquivoque dans la plupart des cas, et présentant une réelle importance dans les questions liées aux variations de chimisme d'une série lithologique déterminée, le système paramétrique de NIGGLI ne fournit pas à lui seul une image suffisante de la roche étudiée; il présente souvent l'inconvénient de ne pas permettre la distinction parmi des roches de même composition formées sous des conditions physiques du milieu différentes, entre autres, parmi celles qui s'édifient au cours du processus métamorphique dans diverses zones de l'écorce terrestre.

C'est la raison pour laquelle, à côté des caractéristiques chimiques proprement dites, il est nécessaire de joindre le cliché minéralogique de la roche analysée. Dans les cas généraux où les problèmes du chimisme des roches sont principalement en discussion, la représentation de leur association minérale observée au microscope (mode), association liée aux moindres variations des conditions physiques : température, pression statique, pressions partielles, et dépendant parfois d'une superposition de ces conditions, n'apporte pas les renseignements souhaités. C'est dès lors par le biais de la norme, association minérale virtuelle calculée à partir de l'analyse chimique, que les clichés minéralogiques sont obtenus. De tels clichés ont été proposés par d'autres auteurs que les C.I.P.W., en particulier par P. NIGGLI (1936) et par T. F. W. BARTH (1959). Outre qu'ils peuvent être définis pour diverses conditions physiques générales (catanorme, mésonorme, épinorme), ces clichés minéralogiques peuvent également, dans certains cas favorables, être comparés à la composition minéralogique réelle des roches étudiées (gneiss granitiques et granites par exemple).

Le programme (PCAL 01) présenté ici pour l'ordinateur I.B.M. 7040 du centre de calcul de l'U.L.B., calcule automatiquement à partir de la composition chimique exprimée en % en poids des oxydes principaux :

(*) Communication faite durant la séance du 2 décembre 1969. Manuscrit déposé le 6 janvier 1970.

(**) Laboratoire de Minéralogie et de Pétrologie, Université Libre de Bruxelles, av. F.-D. Roosevelt 50, 1050 Bruxelles.

- la conversion en millimoles des pourcentages d'oxydes,
- les principaux paramètres de Niggli,
- les pourcentages en cations,
- la proportion d'anions pour 100 cations,
- la norme CIPW,
- la catanorme,
- une mésonorme,
- une épिनorme,
- le rapport des coupholites aux barylites (calculé à partir de la norme CIPW).

Les quantités d'OH et de C, non utilisées ou utilisées en excès au cours de la composition des normes, sont calculées et imprimées sous chacune de celles-ci. Il en est de même pour la quantité de Si utilisée en excès et qui n'a pu être compensée par l'opération de désilicification.

Le programme calcule en outre en sous-routine :

- les rapports Q : Or : Ab, et Or : Ab : An, d'après la catanorme et la mésonorme (triangles d'eutectique),
- la position de la roche dans des triangles (ACF)*, (A'KF')*, (ACF)**, (A'KF)**, après correction pour les minéraux accessoires et pour ceux qui n'interviennent pas dans l'un ou l'autre de ces triangles (triangles catanormaux* mésonormaux**).

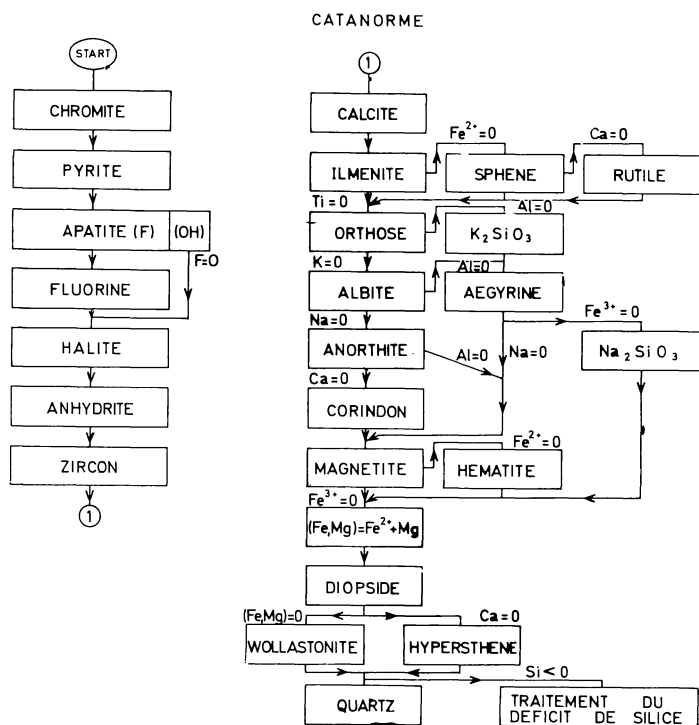


Fig. 1. — Schéma du calcul pour les minéraux accessoires et la catanorme.

Une troisième sous-routine permet enfin de classer, par ordre croissant en Si, les paramètres de NIGGLI de la série des roches étudiées et de les placer dans les diagrammes de variation.

La norme CIPW et la catanorme ne présentent pas de différences par rapport aux schémas proposés par les auteurs précédents (tableau I; fig. 1).

TABLEAU I

*Minéraux des normes**Catanorme et CIPW**Coupholites*

Quartz	SiO ₂	Corindon	Al ₂ O ₃	Néphéline	NaAlSi ₃ O ₈
Orthose	KAlSi ₃ O ₈	Halite	NaCl	Leucite	KAlSi ₂ O ₆
Albite	NaAlSi ₃ O ₈	Anhydrite	CaSO ₄		
Anorthite	CaAl ₂ Si ₂ O ₈	Zircon	ZrSiO ₄		

Barylites

Diopside (Mg)	MgCaSi ₂ O ₆	Forstérite	Mg ₂ SiO ₄	Aegyrine	NaFeSi ₂ O ₆
Hedenbergite	FeCaSi ₂ O ₆	Fayalite	Fe ₂ SiO ₄	—	Na ₂ SiO ₃
Enstatite	MgSiO ₃	Spinelle (Mg)	MgAl ₂ O ₄	—	K ₂ SiO ₃
Ferrosilite	FeSiO ₃	Hercynite	FeAl ₂ O ₄		
Wollastonite	CaSiO ₃		Ca ₂ SiO ₄		
Ilménite	FeTiO ₃	Chromite	FeCr ₂ O ₄	Fluorine	CaF ₂
Sphène	CaTiSiO ₅	Magnétite	Fe ₃ O ₄	Calcite	CaCO ₃
Pérowskite	CaTiO ₃	Hématite	Fe ₂ O ₃	Apatite	Ca ₂ (PO ₄) ₃ (F,OH)
Rutile	TiO ₂	Pyrite	FeS ₂		

Mésosnorme

Biotite	K(Mg,Fe) ₃ AlSi ₃ O ₁₀ (OH) ₂	Sillimanite	SiAl ₂ O ₅
Muscovite	KAl ₃ Si ₃ O ₁₀ (OH) ₂	Grenat	(Mg,Fe) ₃ Al ₂ Si ₃ O ₁₂
Hornblende	Ca ₂ (Mg,Fe) ₄ Al ₂ Si ₇ O ₂₂ (OH) ₂	Cordiérite	(Mg,Fe) ₂ Al ₄ Si ₅ O ₁₈
Anthophyllite	(Mg,Fe) ₇ Si ₃ O ₂₂ (OH) ₂	Diopside	(Mg,Fe)CaSi ₂ O ₆
Riebeckite	Na ₂ Fe ₃ Fe ₂ Si ₈ O ₂₂ (OH) ₂	Olivine	(Mg,Fe) ₂ SiO ₄
		Spinelle	(Mg,Fe)Al ₂ O ₄

Quartz — Orthose — Albite — Anorthite — Corindon — Zircon — Halite — Anhydrite — Calcite — Apatite — Fluorine — Chromite — Sphène — Rutile — Pérowskite — Magnétite — Hématite — Pyrite — Na₂SiO₃ — K₂SiO₃

Epinorme

Amésite	(Fe,Mg) ₂ Al ₂ SiO ₅ (OH) ₄	Andalousite	SiAl ₂ O ₅
Serpentine	(Fe,Mg) ₃ Si ₂ O ₅ (OH) ₄	Dolomite	Ca(Mg,Fe)(CO ₃) ₂
Clinzoïsite	Ca ₂ Al ₃ Si ₃ O ₁₂ (OH)	Sylvite	KCl
Pyrophyllite	AlSi ₃ O ₅ (OH)		

Quartz — Orthose — Albite — Muscovite — Calcite — Halite — Fluorine — Apatite — Anhydrite — Zircon — Chromite — Rutile — Hématite — Pyrite.

Par contre la liste des minéraux normatifs de la mésozone a été notablement modifiée par rapport à celle proposée par BARTH. On s'est en effet attaché à former des minéraux fréquents en mésozone, en particulier des minéraux alumineux : sillicates d'alumine, cordiérite, grenat, hornblende, ... (tableau I; fig. 2).

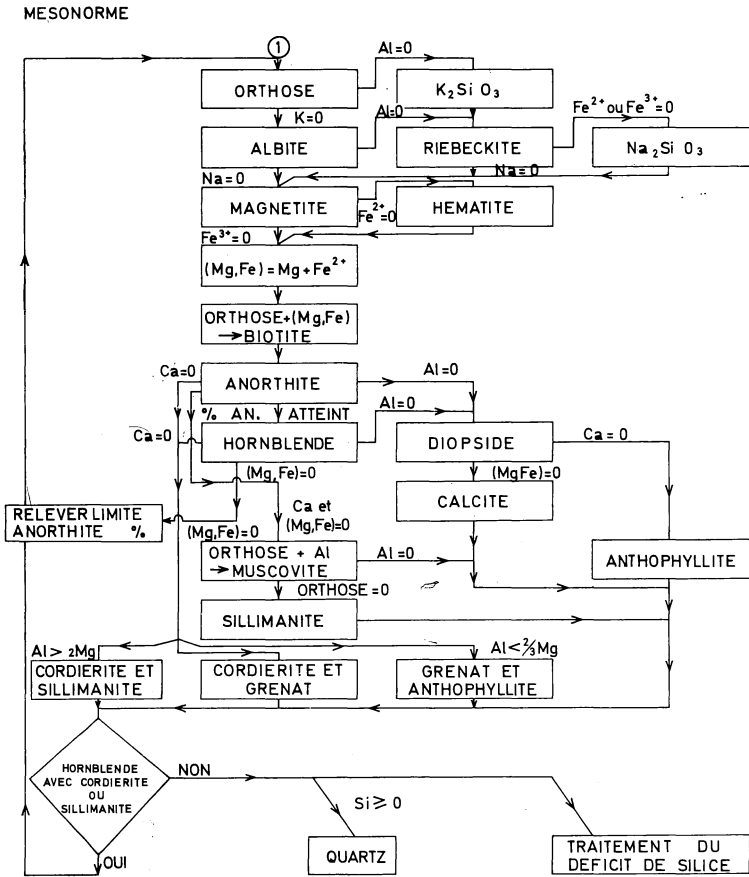


Fig. 2. — Schéma du calcul pour la mésonorme.

La répartition de l'Al, après création des feldspaths alcalins, a été réalisée en fixant un pourcentage maximum à la teneur en An du plagioclase pour chaque roche en particulier. Dans le cas où ce processus conduit à des associations instables, le programme permet d'élever la teneur en anorthite par bonds successifs de quelques %, jusqu'à disparition de l'association critique (fig. 2).

L'orthose a été calculée, mais est transformée directement en biotite, compte tenu des teneurs en Fe-Mg, et en muscovite si l'Al se présente en excès après constitution des feldspaths (fig. 2). On a également modifié les réactions qui permettent de traiter le déficit en silice pour rapprocher les associations minérales virtuelles de celles observées dans la nature (tableau II).

TABLEAU II

Traitement du déficit de silice

Les réactions successives sont calculées jusqu'à compensation du déficit.

Catanorme

- 1 Sphène → Pérowskite
- 2 Hypersthène → Olivine
- 3 Albite → Néphéline
- 4 Orthose → Leucite
- 5 Diopside → Wollastonite + Olivine
- 6 Corindon + Olivine → Spinelle
- 7 Wollastonite → Ca_2SiO_4

Mésnorme

- 1 Sphène → Pérowskite
- 2 Cordiérite → Spinelle
- 3 Diopside → Anthophyllite + Calcite
- 4 Sillimanite → Corindon

Epinorme

- 1 Serpentine + Calcite → Dolomite
- 2 Pyrophyllite → Andalousite

La liste des minéraux normatifs de l'épizone a également été modifiée par rapport à celle proposée par BARTH (tableau I; fig. 3).

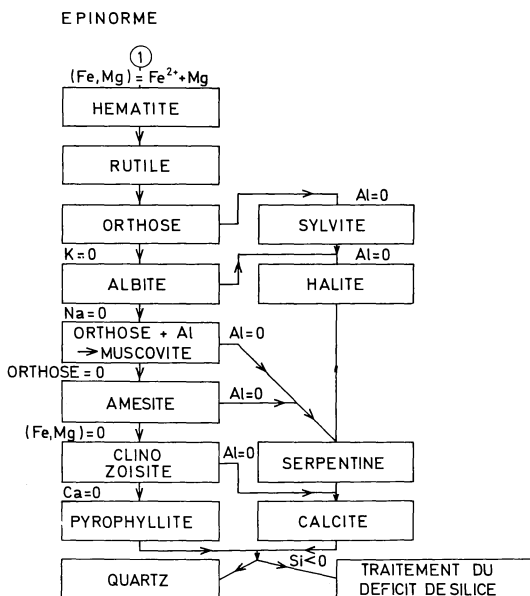


Fig. 3. — Schéma du calcul pour l'épinorme.

Les personnes intéressées par le programme de calcul dont les grandes lignes ont été développées ci-dessus peuvent l'obtenir en écrivant au Laboratoire de Minéralogie-Pétrologie, Université Libre de Bruxelles, avenue F.-D. Roosevelt, 50, 1050 Bruxelles (Belgium).

BIBLIOGRAPHIE

- BARTH, T. F. W., 1959. — Principles of classification and norm calculations of metamorphic rocks. *Jour. Geol.*, vol. 67, pp. 135-152.
- CORDIER, P., 1815. — Mémoire sur les substances minérales, dites en masse, qui entrent dans la composition des roches volcaniques de tous les âges. *Jour. de physique*, Paris.
- CROSS, W., IDDINGS, J. P., PIRSSON, L. V. and WASHINGTON, H. S., 1902. — A quantitative chemico-mineralogical classification and nomenclature of igneous rocks. *Jour. Geol.*, vol. 10, pp. 555-690.
- NIGGLI, P., 1923. — Gesteins- und Mineralprovinzen. Berlin, Borntraeger.
- NIGGLI, P., 1936. — Über Molekularnormen zur Gesteinsberechnung. *Schweiz. Min. Petr. Mitt.*, vol. 16, pp. 295-317.

DISCUSSION

M. KLERKX : Dans le cas des roches éruptives, on constate parfois qu'il existe une différence entre le mode et la norme, différence qui peut être attribuée notamment au degré d'oxydation du Fe. La méthode de calcul proposée permet-elle d'élaborer plusieurs solutions qui correspondraient à des degrés d'oxydation différents du Fe ?

Réponse : Dans le calcul de la norme, le Fe^{3+} est réparti parmi les minéraux accessoires. Le poids équivalent de ces minéraux est largement supérieure à l'équivalent moléculaire sur lequel s'appuie le calcul, de sorte qu'apparaît toujours dans ces cas une forte différence entre le mode et la norme.

Dans son expression actuelle, le programme proposé n'envisage pas la possibilité de diverses solutions correspondant à des degrés d'oxydation différents du fer.

M. DENAEYER constate que les auteurs poussent très loin, dans des détails de grande finesse, les calculs et interprétations résultant des analyses chimiques. Or, celles-ci sont toujours entachées d'erreurs inévitables. L'affinement des méthodes de calcul est-il justifié dans ces conditions ?

Réponse : Le programme présenté ne va pas jusqu'aux détails de grande finesse que lui suppose Monsieur Denaeyer. Plutôt que l'affinement des méthodes de calcul, il vise au traitement rapide de données chimiques nombreuses dans un but de comparaison statistique.