



Criação de um Banco de Dados Petrofísicos e Geoquímicos de Rochas da Província Magmática do Paraná Utilizando Software Livre

Rodrigo Morelato, Departamento de Geofísica - IAG/USP, Brasil

Leila Soares Marques, Departamento de Geofísica - IAG/USP, Brasil

Copyright 2009, SBGf - Sociedade Brasileira de Geofísica

This paper was prepared for presentation at the 11th International Congress of the Brazilian Geophysical Society, held in Salvador, Brazil, August 24-28, 2009.

Contents of this paper were reviewed by the Technical Committee of the 11th International Congress of The Brazilian Geophysical Society. Ideas and concepts of the text are authors' responsibility and do not necessarily represent any position of the SBGf, its officers or members. Electronic reproduction or storage of any part of this paper for commercial purposes without the written consent of the Brazilian Geophysical Society is prohibited.

Abstract

The Paraná Magmatic Province is one of the largest continental flood basalts of the world. This province has been widely studied in order to investigate the genesis of its volcanic rocks as well the large-scale geodynamic process associate to continental break-up. Therefore, a huge amount of geological, geochemical, petrophysical and isotopic data have been obtained. However, since this important dataset has been acquired by different laboratories from Brazil and other countries, the information is distributed in a large number of publications. Considering the need to integrate all this important information for the geoscience community, the published data are been organized on a public domain database with the implementation of some routines for volcanic rock classification and chemical nomenclature. The database was created using PostgreSQL, which is a robust and reliable open source object relational database management system. Along with the database creation a frontend has been developed using PHP, which allows accessing the data through a web page, making variation diagrams and histograms, as well as printing tables.

Introdução

Desde a década de 80 os derrames, sills e diques da Província Magmática do Paraná têm sido intensamente investigados, com a obtenção de um enorme número de dados geológicos, geoquímicos, isotópicos e geocronológicos, que foram determinados em mais de 2.500 amostras. Porém estes dados encontram-se dispersos, devido ao fato de que os dados das rochas da província foram obtidos por diferentes grupos de pesquisa do Brasil e do exterior, constando em várias publicações nacionais e internacionais (e.g. Mantovani et al., 1985; Piccirillo e Melfi, 1988; Peate et al., 1999), o que dificulta o acesso e integração das informações, especialmente quando se deseja correlacionar dados geoquímicos e geofísicos. Estes últimos também foram obtidos por diferentes pesquisadores e incluem dados de densidade (Cônego Jr. et al., 2008), condutividade térmica (Raposo e Marangoni, 1988), suscetibilidade magnética, magnetização remanente natural e polaridade

de magnetização (Piccirillo e Melfi, 1988; Marques e Ernesto, 2004).

Este trabalho visa criar e disponibilizar um banco de dados de acesso público contendo informações geológicas, geofísicas e geoquímicas de diferentes rochas da Província Magmática do Paraná. Para isso, foi utilizado o modelo de banco de dados relacional, onde os dados são armazenados em relações, que corresponde ao termo matemático empregado para tabela.

O Sistema Gerenciador de Banco de Dados Relacional (SGBDR) escolhido para a criação do banco de dados foi o PostgreSQL, por ser um programa de código livre, confiável, robusto, expansível e com uma longa tradição, tendo sua implementação iniciada em 1986. O PostgreSQL é derivado do pacote POSTGRES, criado na Universidade da Califórnia em Berkeley. As versões atuais desse programa são descendentes de código livre do pacote original e continuam sendo desenvolvidas por uma grande comunidade de voluntários ao redor do mundo (The PostgreSQL Global Development Group, 2007).

Restrições e Checagens Aplicadas aos Dados

No projeto, todas as checagens de dados foram incluídas dentro do próprio banco de dados, para garantir que os dados e a estrutura do banco se mantenham concisos independentemente do programa cliente utilizado. Dessa forma, muitos tipos de restrições foram aplicados aos valores armazenados nas tabelas. As mais genéricas delas são as Restrições de Verificação, que ditam quando os valores de uma certa coluna devem estar de acordo com uma expressão booleana, como por exemplo, serem maiores que zero, estarem dentro de algum intervalo, serem menores do que os valores de uma outra coluna, etc.

Também existem a Restrição de Não-nulo e a de Unicidade, as quais impõem que os valores de uma coluna não devem ser nulos e que devem ser únicos, respectivamente. Quando unidas, as duas resultam na Restrição de Chave Primária, que permite utilizar o valor de uma coluna como um identificador único para as linhas da tabela, já que esse valor nunca se repetirá (unicidade) e sempre estará presente (não-nulo).

O último tipo de restrição é a Restrição de Chave Estrangeira, que especifica quando o valor de uma coluna, ou conjunto de colunas, deve corresponder a algum valor presente nas linhas de outra tabela. Essa restrição serve para manter a integridade relacional do banco de dados, permitindo separar as informações em várias tabelas relacionadas.

Modelo do Banco de Dados

O banco de dados foi dividido em várias tabelas relacionadas entre si, como pode ser visualizado no diagrama da Figura 1, composto basicamente de duas classes de dados: a) dados primários das amostras, contendo localização, composição química, concentração de elementos-traço, etc.; b) dados secundários, contendo a referência de onde foram extraídas as amostras, a qual coleção elas pertencem, etc. De acordo com Lehnert et al. (2000), os dados secundários, ou metadados, são úteis para melhorar a qualidade das consultas ao banco, diminuindo a possibilidade do usuário chegar a conclusões equivocadas em suas análises.

Além disso, as amostras foram divididas em coleções (tabela *colecção*), onde cada uma possui um número de série, que funciona como sua chave primária. As divisões das coleções em diferentes classes (por exemplo, se são de publicações estrangeiras ou nacionais, se foram analisadas em um certo laboratório, etc.) estão listadas na tabela auxiliar *col_tipos*, a fim de evitar repetição de classes.

A divisão das amostras em coleções se dá por dois motivos: a) mesmo que as amostras possuam identificadores (siglas, números de série, etc.) em sua fonte, estes podem ser conflitantes com os identificadores de amostras de outras fontes. Assim é possível separar duas amostras com a mesma sigla original em coleções diferentes; b) as coleções permitem uma divisão temática mais precisa, dando a oportunidade do usuário selecionar amostras pela coleção.

No banco de dados, a tabela central é a tabela *amostras*, onde são armazenados os dados cadastrais de cada amostra no banco de dados, como seu número de série interno (coluna *id_amostra*) que serve como chave primária da tabela e identificador daquela amostra dentro de todo o banco de dados. O código da amostra, geralmente a sigla/número que a identificava em sua fonte original, está armazenado na coluna *codigo*. Por fim, essa tabela contém a data de inserção do registro no banco (coluna *data_criacao*) e o número de série da sua fonte ou referência bibliográfica (coluna *id_referencia*).

As informações sobre as amostras foram subdivididas em tabelas temáticas, todas essas tabelas possuem a coluna *id_amostra*, que atua como sua chave primária. Essa coluna sempre faz referência a coluna *id_amostra* da tabela *amostras* (restrição de chave estrangeira), unindo as informações sobre uma mesma amostra pelo seu número de série. Dessa forma, para deletar uma amostra do banco, deve-se apagar o seu registro da tabela *amostras*, porque no PostgreSQL existe a opção de apagar as linhas que fazem referência juntamente com a linha referenciada. Essa opção evita a existência de pedaços de informações perdidos entre as tabelas do banco, garantindo a integridade referencial do mesmo (The PostgreSQL Global Development Group, 2007).

No campo de dados primários há cinco tabelas principais, a primeira delas é a tabela *oxidos*, que contém as informações sobre a análise dos elementos maiores e menores que compõem as rochas. Esta tabela possui colunas com informações do conteúdo em porcentagem de peso de SiO_2 , TiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 , FeO , MnO ,

MgO , CaO , Na_2O , K_2O e P_2O_5 , além da perda ao fogo (coluna *pf*), que corresponde a perda de massa da rocha após aquecimento a $1000\text{ }^\circ\text{C}$ e o conteúdo desses óxidos re-normalizados a 100% sem a perda ao fogo. Também contém a informação dos parâmetros R_1 e R_2 (colunas *r1* e *r2*), que são calculados a partir de certos óxidos de elementos maiores e utilizados no diagrama R_1 - R_2 empregado para a nomenclatura de rochas ígneas, proposto por De La Roche et al. (1980). Ademais, checagens impedem que a soma dos valores de uma linha da tabela sejam maiores que 100%, impedindo desse modo a inserção de linhas com valores claramente errados.

A segunda tabela de dados primários é a tabela *elementos_traco*, que armazena as informações sobre as concentrações, em $\mu\text{g/g}$, de elementos-traço das amostras e possui nove colunas com os elementos bário, cério, cromo, lantânio, níquel, rubídio, estrôncio, ítrio e zircônio. Essa tabela possui checagens para impedir que os valores inseridos sejam menores que zero, uma vez não é possível haver concentrações negativas.

A terceira é a tabela *localizacao*, que contém as informações sobre a localização geográfica das amostras, como a latitude e longitude da amostra na coluna *localizacao_geo*. O tipo *point* corresponde ao formato de dado utilizado nessa coluna, ou seja, um ponto geométrico num plano, sendo que a altitude da amostra foi armazenada na coluna *cota*. A coluna *setor*, por sua vez, se refere a qual setor da Província Magmática do Paraná a amostra pertence (norte: região situada acima do Alinhamento do Rio Piquiri; sul: região localizada abaixo do Alinhamento do Rio Uruguai; central: região situada entre esses dois alinhamentos). Os setores da província estão listados na tabela auxiliar *setores*, onde a coluna *setor* armazena a sigla do setor, a sua descrição está na coluna *descricao* e o número de série da referência de onde aquele setor se origina fica documentado na coluna *id_referencia*. Por último, é possível armazenar um comentário sobre a localização da amostra na coluna *comentario*.

A tabela *minerais_normativos* armazena a porcentagem em peso de minerais normativos (quartzo, olivina, etc., totalizando 34 minerais possíveis) da amostra. Os minerais normativos são aqueles calculados pela norma CIPW, através dos óxidos que formam a rocha. Nesse cálculo, assume-se que a rocha tenha se cristalizado em condições ideais e se calcula quais os minerais teóricos presentes, a partir dos óxidos que a formam. Esses cálculos são realizados por uma função criada dentro do banco de dados, que será comentada mais adiante. A tabela também possui várias checagens com relação ao conteúdo de minerais. Essas checagens impedem que sejam inseridas linhas nas quais a soma do conteúdo de minerais supere 100%. Além disso, há checagens para verificar a presença concomitante de minerais incompatíveis, como por exemplo, a existência de quartzo e olivina, assim se o quartzo é um mineral normativo da rocha, a quantidade de olivina normativa deve ser zero.

A última tabela é a tabela *classificacao_amostras*, que serve para armazenar a classificação e a nomenclatura de cada rocha de acordo com o diagrama TAS

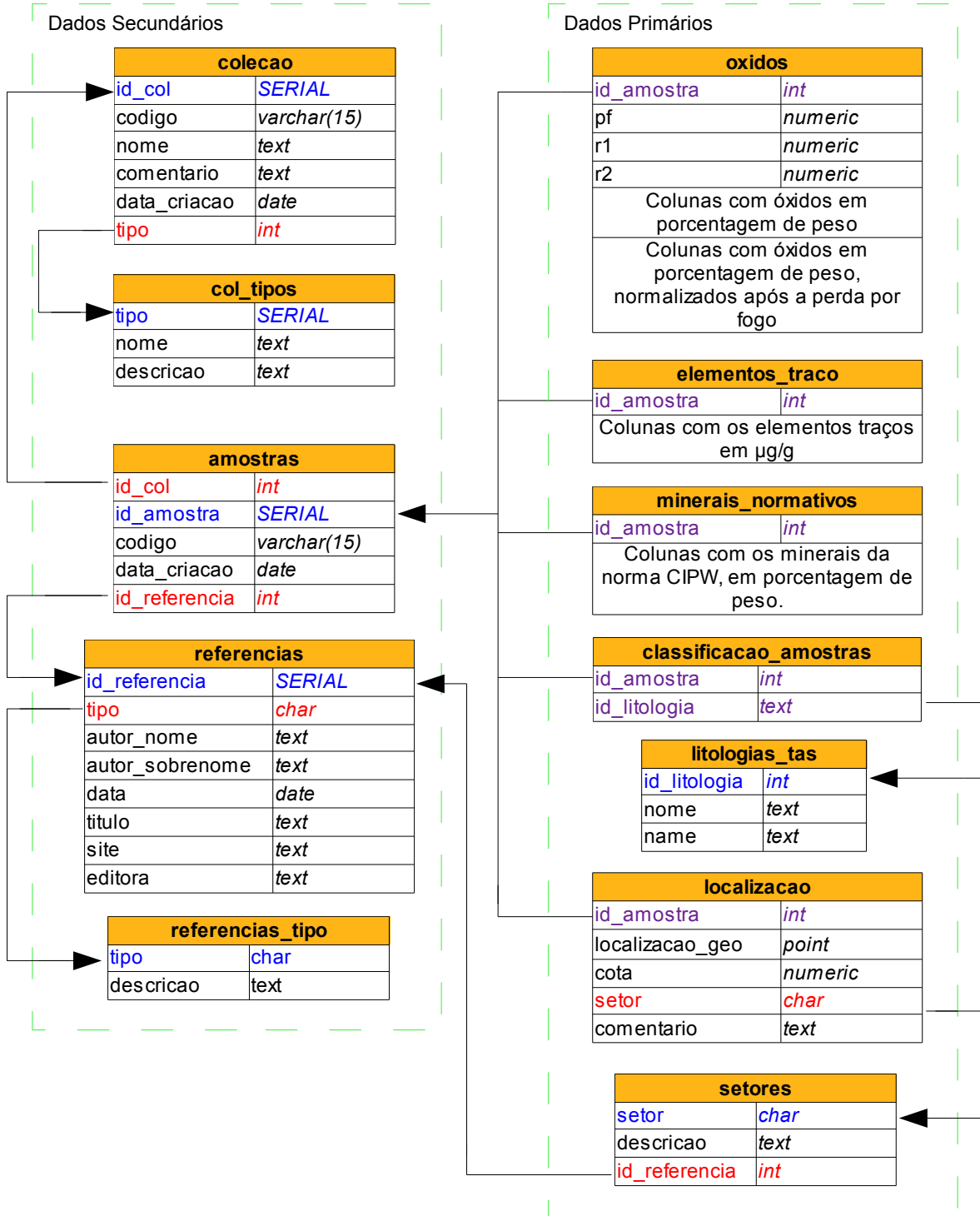


Figura 1: Diagrama esquemático da organização das tabelas no banco de dados. As colunas em vermelho possuem a restrição de chave estrangeira, em azul a restrição de chave primária e em magenta ambas as restrições. A seta indica quais colunas fazem referência a outras, indo da coluna que faz referência à coluna referenciada.

(Total Álcali-Sílica), recomendado pela Subcomissão de Rochas Ígneas da IUGS, proposto por Le Bas et al. (1986). Nesta tabela, a coluna *id_litologia* possui apenas um número associado ao nome de uma das litologias pertencentes ao diagrama TAS, sendo que a lista que relaciona esses nomes aos números está na tabela auxiliar *litologias_tas*.

Outras Funções e Procedimentos

Foram criadas várias funções para cálculos envolvendo os dados presentes no banco, visando facilitar a classificação e nomenclatura das rochas e expandir a sua funcionalidade. A primeira dessas funções, chamada de *calculo_normativo_tabela*, calcula os minerais que a rocha teria de acordo com a norma CIPW, utilizando um método simplificado da versão proposta por Johannsen em 1931, conforme apresentado em Motoki (2004).

A função citada anteriormente foi escrita com a linguagem procedural PL/PHP, por ser mais fácil criar e testar a função em PHP fora do banco e depois converter o código para a linguagem procedural. Essa função atualiza toda a tabela *minerais_normativos*, calculando os minerais normativos das amostras que possuem análise de óxidos.

A segunda dessas funções, chamada de *nomenclatura_TAS*, recebe como parâmetro o número de série de uma amostra e informa qual é a sua nomenclatura química de acordo com o diagrama TAS. Nesse diagrama, o eixo das abscissas representa a quantidade de SiO_2 da rocha e o eixo das ordenadas a quantidade de $\text{K}_2\text{O} + \text{Na}_2\text{O}$, o diagrama é dividido em vários campos, correspondendo a diferentes tipos litológicos. Assim, para a obtenção da nomenclatura verifica-se o campo no qual a amostra se encontra, considerando-se também mais algumas condições em relação às quantidades de certos minerais normativos.

Ao ser chamada, a função *nomenclatura_TAS* checa se a amostra possui dados sobre SiO_2 , K_2O e Na_2O . Uma vez verificada a existência dessas análises químicas, a função retorna um número que corresponde a uma litologia da tabela auxiliar *litologias_tas*. Para a nomenclatura das rochas pelo diagrama TAS a função utiliza o operador geométrico "@" do PostgreSQL. Esse operador booleano testa se um ponto está contido no interior de um polígono e, dessa forma, determinam-se os polígonos que delimitam as regiões das diferentes litologias do diagrama TAS e testa-se em qual destes a amostra se encontra. Ademais, são realizadas checagens extras em dois campos: a) no campo do trefrito-basanito, checa-se a quantidade de olivina normativa da rocha, que se for superior a 10%, a rocha é um tefrito, caso contrário é um basanito; b) no campo do traquito-traquidacito, verifica-se a quantidade de quartzo normativo da rocha, que se for superior a 20%, indica tratar-se de um traquidacito, caso contrário é um traquito.

Funcionalidades Atuais da Página do Banco de Dados

Atualmente, a página de acesso ao banco de dados permite a construção de três tipos de gráficos diferentes: Diagramas TAS, gráficos que relacionam as quantidades de diferentes elementos químicos das amostras ("gráfico 2D") e histogramas com a distribuição dos elementos que compõem as amostras.

Quanto à construção de histogramas, é possível escolher o elemento químico ou mineral normativo, cuja distribuição deseja-se investigar. A título de ilustração, está sendo mostrado o comportamento de bário nas amostras do banco que apresentam concentrações no intervalo de 0 a 1000 $\mu\text{g/g}$, as quais foram divididas em 10 intervalos, conforme mostrado na Figura 2.

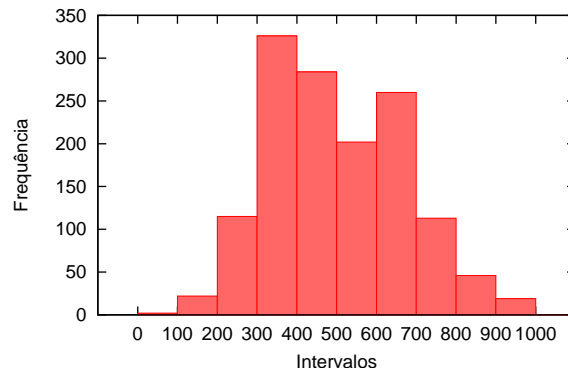


Figura 2: Histograma gerado pela página do banco de dados ilustrando a distribuição da concentração de bário nas amostras, no intervalo entre 0 e 1000 $\mu\text{g/g}$

O "gráfico 2D" permite comparar a relação entre um ou mais tipos de elementos químicos em função de um terceiro elemento. Assim, na pesquisa mostrada na Figura 3, é possível comparar como o lantânio e o cério variam em função de bário, quando a concentração deste último está entre 0 e 1000 $\mu\text{g/g}$, a de lantânio entre 0 e 100 $\mu\text{g/g}$ e a de cério entre 0 e 200 $\mu\text{g/g}$, obtendo-se assim os resultados ilustrados no gráfico da Figura 4.

Criação de um gráfico 2D

Parâmetros	Campo 1	Campo 2	Campo 3	Campo 4
Elemento/Óxido	Ba	La	Ce	-
Mínimo	0	0	0	0
Máximo	1000	100	200	0
Setor	-	-	-	-

Continuar

Figura 3: Pesquisa realizada na página de internet para gerar o "gráfico 2D", mostrado na Figura 4.

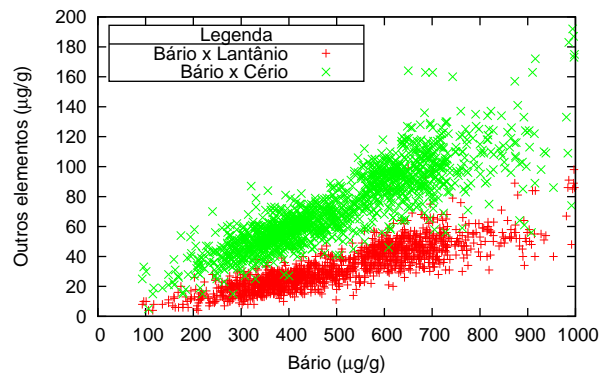


Figura 4: Gráfico gerado pela página do banco de dados, utilizando-se a pesquisa mostrada na Figura 3, que compara como as concentrações de lantânio e cério variam em função das de bário

Por fim, as opções de pesquisa para construção de um diagrama TAS são muito parecidas com as mostradas na Figura 3, para o "gráfico 2D". O propósito dessa pesquisa é investigar como a distribuição das amostras varia no diagrama TAS, quando selecionadas em relação à concentração de determinados elementos químicos e/ou em relação ao setor da Província Magmática do Paraná. Um exemplo com o diagrama TAS de todas as amostras do banco é mostrado na Figura 5.

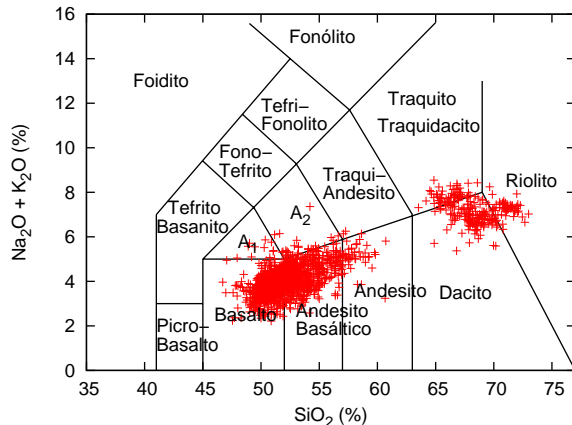


Figura 5: Diagrama TAS de todas as amostras presentes no banco de dados. Onde A₁ e A₂ são os campos do Traqui-Basalto e Traqui-Andesito Basáltico, respectivamente.

Conclusões

O banco de dados apresentado permite armazenar uma vasta gama de dados petrofísicos, geoquímicos e isotópicos publicados em diferentes trabalhos sobre as rochas da Província Magmática do Paraná. O modelo criado também se mostra muito flexível e simples, pois dá enfoque à modularidade. Esta permite a adequação a novos tipos de dados com a inserção de mais colunas nas tabelas já existentes ou a criação de novas tabelas. Ademais, a possibilidade de serem inseridas informações incoerentes é reduzida pelas checagens aplicadas às tabelas pelo próprio PostgreSQL.

Como visto nos exemplos, a consulta e sumarização da vasta gama de informações presentes é facilitada pelo banco de dados, por meio de consultas com junções entre tabelas e condições de pesquisa, que podem ser associadas a qualquer coluna presente. Além disso, é possível utilizar funções de agregação presentes no próprio programa.

Por fim, o mais importante a ressaltar é que os dados dispersos em diferentes publicações, ou praticamente inacessíveis, quando oriundos de publicações muito antigas ou trabalhos publicados em veículos de pequena circulação, estarão disponíveis ao público através da página na internet. Melhorias estão sendo constantemente aplicadas a fim de tornar a pesquisa e acesso aos dados de modo mais intuitivo, completo e amigável possível.

Referências

Cônego Jr., D., Drigo, C.S., Machado, F.B., Rocha Jr., E.R.V., Marques, L.S. e Nardy, A.J.R., 2008, Densidades

de rochas básicas intrusivas da região norte da Província Magmática do Paraná. 44º Congresso Brasileiro de Geologia, Curitiba, PR, Anais, 549.

De La Roche, H., Leterrier, J., Grandclaude, P., Marchal, M., 1980, A classification of volcanic and plutonic rocks using R₁-R₂ diagram and major element analyses. Its relationships with current nomenclature. *Chemical Geology*, 29:182-210.

Le Bas, M.J., Le Maitre, R.W., Streckeisen, A. e Zannettin, B., 1986, A chemical classification of volcanic rocks based on total alkali-silica diagram. *Journal of Petrology*, 27:745-750.

Lehnert, K., Su, Y., Langmuir, C.H., Sarbas, B. e Nohl, U., 2000, A global geochemical database structure for rocks. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems* - Technical Brief, Paper number 1999GC000026, ISSN: 1525-2027 - AGU & Geochemical Society, 1:16.

Mantovani, M.S.M., Marques, L.S., Sousa, M.A., Atalla, L.T., Civetta, L. e Innocenti, F., 1985, Trace element and strontium isotope constraints on the origin and evolution of Paraná continental flood basalts of Santa Catarina State (southern Brazil). *Journal of Petrology*, 26:187-209.

Marques, L.S. e Ernesto, M., 2004, O magmatismo toleítico da Bacia do Paraná. In: "Geologia do Continente Sul-Americano: Evolução da obra de Fernando Flávio Marques de Almeida", V. Mantesso Neto, A. Bartorelli, C.R. Carneiro e B.B. Brito Neves (eds.), Beca Produções Culturais Ltda., São Paulo, 245-263.

Motoki, A., 2004, Descrição petrográfica de rochas ígneas: apostila didática para a disciplina Petrologia I. Disponível em: <<http://motoki5.tripod.com/>>. Acesso em: 31 de janeiro de 2009.

Peate, D.W., Hawkesworth, C.J., Mantovani, M.S.M., Rogers, N.W. e Turner, S.P., 1999, Petrogenesis and stratigraphy of the high-Ti/Y Urubici magma type in the Paraná Flood Basalt Province and implications for the nature of 'Dupal'-type mantle in the South Atlantic region. *Journal of Petrology*, 40(3):451-473.

Piccirillo, E.M. e Melfi, A.J., 1988, The Mesozoic Flood Volcanism of the Paraná Basin: Petrogenetic and Geophysical Aspects. Instituto Astronômico e Geofísico - University of São Paulo, São Paulo, 600.

Raposo, M. I. B. e Marangoni, Y. R., 1988, Condutividade térmica dos diferentes litotipos vulcânicos da Bacia do Paraná. *Revista Brasileira de Geofísica*, Rio de Janeiro, 6:25-31.

The PostgreSQL Global Development Group, 2007, Documentação do PostgreSQL 8.0.0. Tradução de Halley Pacheco de Oliveira. Rio de Janeiro, 1227. Disponível em: <<http://sourceforge.net/projects/pgdocptbr/>>. Acesso em: 07 de março de 2009.

Agradecimentos

Ao CNPq pelo apoio financeiro e concessão de bolsa de iniciação científica para R.M. e ao analista de sistemas Marcos A. Morelato, pela sugestão de utilização do PostgreSQL. Os autores agradecem também aos colegas pelos dados fornecidos e sugestões para melhoria do trabalho.