

Pesquisas em Geociências

<http://seer.ufrgs.br/PesquisasemGeociencias>

Cálculos Petroquímicos Segundo o Sistema de Niggli por Computador IBM - 1130

Tânia Hofmeister, Hardy Jost, Eloy Lopes Loss
Pesquisas em Geociências, 3 (1): 35-46, Mai./Ago., 1974.

Versão online disponível em:

<http://seer.ufrgs.br/PesquisasemGeociencias/article/view/21851>

Publicado por

Instituto de Geociências



Portal de Periódicos
UFRGS

UNIVERSIDADE FEDERAL
DO RIO GRANDE DO SUL

Informações Adicionais

Email: pesquisas@ufrgs.br

Políticas: <http://seer.ufrgs.br/PesquisasemGeociencias/about/editorialPolicies#openAccessPolicy>

Submissão: <http://seer.ufrgs.br/PesquisasemGeociencias/about/submissions#onlineSubmissions>

Diretrizes: <http://seer.ufrgs.br/PesquisasemGeociencias/about/submissions#authorGuidelines>

Data de publicação - Mai./Ago., 1974.

Instituto de Geociências, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil

Cálculos Petroquímicos Segundo o Sistema de Niggli por Computador IBM - 1130*

TANIA HOFMEISTER**
HARDY JOST***
ELOY LOPES LOSS***

SUMMARY

The authors present a FORTRAN program for use in IBM-1130 computer which helps in the obtention of petrological parameters through the use of Niggli's System (Burri-1959). It comprises the calculation of Niggli's Numbers, values for the study of compositional and quantitative relations of normative feldspars, and other related data, as well as the base, standard cathanorm and QLM triangle values. A series of other helpful programs for petrological use will be published by the authors in a near future, as well as a continuation of this program wich will furnish the values for Niggli's Standard Cathanorm mineralogical variants.

SINOPSE

Os autores apresentam um programa em linguagem Fortran para uso em computador IBM-1130 a fim de proceder ao cálculo de parâmetros petrológicos, obedecendo ao Sistema de Niggli, conforme publicado por Burri (1959), e compreendendo a obtenção dos números de Niggli, dos valores para estudos das relações composicionais e quantitativas de feldspatos normativos e outros parâmetros similares, da base, da catanorma padrão e dos parâmetros para uso no triângulo QLM. Os autores anunciam, ao mesmo tempo, a preparação de programas com finalidades simi-

lares, visando a obtenção das variantes mineralógicas da catanorma padrão do Sistema de Niggli.

INTRODUÇÃO

Para permitir o inter-relacionamento entre o quimismo e composição mineralógica de uma rocha, muitos métodos foram elaborados, destacando-se, em especial, o de Cross, Iddings, Pirs-son e Washington (CIPW), e o de Niggli. Esses métodos envolvem grande soma de cálculos que, via de regra, exigem apreciável disponibilidade de tempo de parte dos interessados em obter os parâmetros petrológicos. Ainda mais, como o estudo do quimismo de rochas não pode ser expreso por uma única amostra, mas normalmente exige grande número de análises, para ser estatisticamente significativo, o fator tempo se torna extremamente crítico.

Assim sendo, o programa apresentado no presente trabalho foi desenvolvido com o objetivo de reduzir consideravelmente o tempo necessário

* - O presente trabalho foi executado com recursos da Câmara de Pós-Graduação e Pesquisas da UFRGS em 1972 e derivou, como sub-projeto, do «Projeto Andesito-Riolito do Eo-Paleozóico Sulriograndense». Contou, também, com a valiosa colaboração do Centro de Processamento de Dados (CPD) da UFRGS.
** - Bolsista de Aperfeiçoamento da Câmara de Pós-Graduação e Pesquisas da UFRGS.
*** - Professores do Instituto de Geociências da UFRGS.

para cálculos petroquímicos, empregando um computador IBM-1130 e o método de Niggli (Burri, 1959), tão completo quanto possível.

Trabalhos similares foram apresentados por Vitalino, Harvey e Cleveland (1965) e Amaral (1967). O primeiro apresenta a programação para cálculos de norma mas não para os números de Niggli, ao passo que o segundo apresenta o cálculo dos números de Niggli, porém mantém o processamento da análise química segundo o método de CIPW.

Com fundamentos na obra de Burri (ob. cit.) no presente programa, os cálculos são realizados até o ponto em que se inicia a determinação das variantes mineralógicas. Juntamente com a base e catanorma padrão são fornecidos os números de Niggli, os parâmetros para o triângulo QLM e uma série de outros parâmetros pertinentes ao método. É, portanto, necessário que se tenha em mãos a obra supra-citada para que a presente programação se complete no estudo que se pretende realizar. Ao programa em questão, seguir-se-ão outros, já em estágio de elaboração pelos autores, e que visam processar eletronicamente uma gama bastante ampla de parâmetros petroquímicos.

DESCRIÇÃO DO PROGRAMA

Para uma melhor compreensão inicial, o programa é apresentado sob forma resumida no diagrama da fig. 1.

O programa foi escrito na linguagem FORTRAN aceita pelo computador IBM-1130, e testado utilizando a Versão 2 - Modificação 11 do Sistema Monitor do mesmo computador.

A configuração do Sistema prevista para a sua execução é a seguinte:

- Memória de Núcleos de pelo menos 16 k de palavras.
- Leitora de Cartões IBM-2501 ou IBM-1442.
- Impressora IBM-1403 ou IBM-1132.
- 1 «cartdridge» de disco magnético, com grande área disponível de «Working Storage» (WS) para compilação.

Recomenda-se uma consulta prévia ao pessoal técnico da instalação onde o programa for executado.

DADOS DE ENTRADA

O «deck» de dados de entrada para o programa é composto de 3 tipos de cartões, a saber:

Cartões tipo 1: Marcam o início de um projeto

Devem obedecer ao seguinte formato de perfuração:

Col. 1 - «1»

Col. 2 a 79 - Nome do Projeto

Cartões tipo 2: Fornecem as especificações de cada amostra pertencente ao projeto iniciado.

As especificações de cada amostra requerem um total de dois cartões tipo «2»:

a) **Cartões 2.1:** Devem obedecer ao seguinte formato de perfuração:

Col. 1 - «2»

Col. 2 a 5 - Identificação da amostra, composta de até 4 caracteres alfanuméricos.

Col. 6 - «0» ou «1» - «0» se a amostra for composta de um só cartão tipo 2; «1» se a amostra for composta de dois cartões.

Col. 7 a 20 - Podem ser usadas para comentários, são ignoradas pelo programa.

Col. 21 a 80 - São usadas para a especificação das percentagens dos quinze primeiros óxidos componentes da amostra. Cada percentagem é especificada por um conjunto de 4 dígitos, dos quais os dois primeiros compõem a sua parte inteira, e os dois últimos, a sua parte decimal, com precisão ao nível do centésimo.

A ordem a ser obedecida na perfuração das percentagens é rígida, devendo ser rigorosamente seguida, e é a seguinte: SiO_2 , TiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 , FeO , MnO , MgO , CaO , Na_2O , K_2O , P_2O_5 , CO_2 , S , ZrO_2 , Cr_2O_3 .

b) **Cartões 2.2:** Devem obedecer ao seguinte formato de perfuração:

Col. 1 - «2»

Col. 2 a 5 - Identificação da amostra, composta de até 4 caracteres alfanuméricos.

Col. 6 - «2»

Col. 7 a 20 - Podem ser usadas para comentários e são ignoradas pelo programa.

Col. 21 a 48 - São usadas para a especificação dos 7 últimos óxidos componentes da amostra, em formato idêntico ao já descrito para os cartões 2.1.

A ordem a ser seguida na perfuração das percentagens dos óxidos deve ser a seguinte: Cl , F , BaO , NiO , SrO , CoO , Li_2O .

No caso da análise química não fornecer as percentagens de nenhum desses óxidos, haverá apenas um cartão tipo «2», com «O» perfurado na coluna 6.

Caso seja necessário o segundo cartão tipo «2», o primeiro deverá ter perfurado «1» na co-

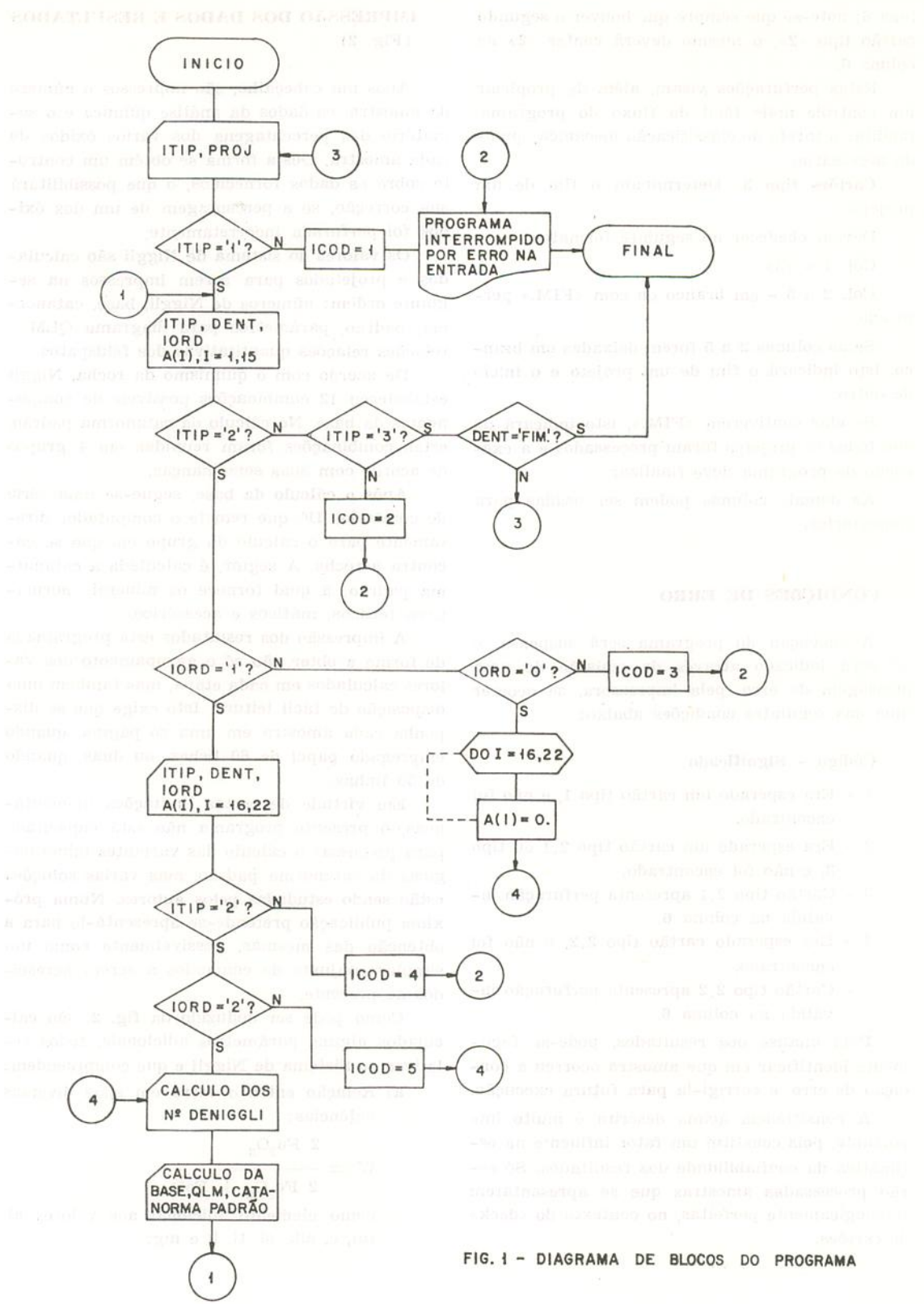


FIG. 1 - DIAGRAMA DE BLOCOS DO PROGRAMA

luna 6; note-se que sempre que houver o segundo cartão tipo «2», o mesmo deverá conter «2» na coluna 6.

Estas perfurações visam, além de propiciar um controle mais fácil do fluxo do programa, facilitar a tarefa de classificação mecânica, quando necessária.

Cartões tipo 3: Determinam o fim de um projeto.

Devem obedecer ao seguinte formato:

Col. 1 - «3»

Col. 2 a 5 - em branco ou com «FIM.» perfurado.

Se as colunas 2 a 5 forem deixadas em branco, isto indicará o fim de um projeto e o início de outro.

Se elas contiverem «FIM.», isto indicará de que todos os projetos foram processados e a execução do programa deve finalizar.

As demais colunas podem ser usadas para comentários.

CONDIÇÕES DE ERRO

A execução do programa será suspensa, e tal será indicado através da emissão de uma mensagem de erro, pela impressora, se ocorrer uma das seguintes condições abaixo:

Código - Significado

- 1 - Era esperado um cartão tipo 1, e não foi encontrado.
- 2 - Era esperado um cartão tipo 2.1 ou tipo 3, e não foi encontrado.
- 3 - Cartão tipo 2.1 apresenta perfuração inválida na coluna 6.
- 4 - Era esperado cartão tipo 2.2, e não foi encontrado.
- 5 - Cartão tipo 2.2 apresenta perfuração inválida na coluna 6.

Pela análise dos resultados, pode-se facilmente identificar em que amostra ocorreu a condição de erro, e corrigi-la para futura execução.

A consistência acima descrita é muito importante, pois constitui um fator influente na estimativa da confiabilidade dos resultados. Só serão processadas amostras que se apresentarem topologicamente perfeitas, no contexto do «deck» de cartões.

IMPRESSÃO DOS DADOS E RESULTADOS (Fig. 2)

Após um cabeçalho, são impressos o número da amostra, os dados da análise química e o somatório das percentagens dos vários óxidos de cada amostra. Desta forma se obtém um controle sobre os dados fornecidos, o que possibilitará sua correção, se a percentagem de um dos óxidos foi perfurada incorretamente.

Os valores do sistema de Niggli são calculados e projetados para serem impressos na seguinte ordem: números de Niggli, base, catanorma, padrão, parâmetros para diagrama QLM e relações quantitativas dos feldspatos.

De acordo com o quimismo da rocha, Niggli estabeleceu 12 combinações possíveis de componentes da base. No cálculo da catanorma padrão, estas combinações foram reunidas em 4 grupos de acordo com suas semelhanças.

Após o cálculo da base, segue-se uma série de comandos IF, que remete o computador diretamente para o cálculo do grupo em que se encontra a rocha. A seguir, é calculada a catanorma padrão, a qual fornece os minerais normativos félsicos, máficos e acessórios.

A impressão dos resultados está programada de forma a obter não só o agrupamento dos valores calculados em cada etapa, mas também uma disposição de fácil leitura. Isto exige que se disponha cada amostra em uma só página, quando empregado papel de 60 linhas, ou duas, quando de 30 linhas.

Em virtude de certas limitações momentâneas, o presente programa não está capacitado para processar o cálculo das variantes mineralógicas da catanorma padrão, mas várias soluções estão sendo estudadas pelos autores. Numa próxima publicação pretende-se apresentá-lo para a obtenção das mesmas, possivelmente como um simples conjunto de comandos a serem acrescentados ao presente.

Como pode ser deduzido da fig. 2, são calculados alguns parâmetros adicionais, todos relativos ao Sistema de Niggli e que compreendem:

- a) Relação entre o ferro em suas diversas valências:

$$W = \frac{2 \text{ Fe}_2\text{O}_3}{2 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + \text{ FeO}}$$

como elemento adicional aos valores al, fm, c, alk, si, ti, k e mg;

b) Obtenção de x e y, valores para estudo das relações composicionais e quantitativas de feldspatos normativos, onde:

x = relação entre feldspato potássico e feldspatos alcalinos

y = relação entre feldspatos alcalinos e feldspato total, de tal modo que:
 $k \cdot 2 \cdot \text{alk}$

$$x = \frac{\text{al} + \text{alk}}{2 \cdot \text{alk}} \quad e$$

$$y = \frac{\text{al} + \text{alk}}{2 \cdot \text{alk}} \quad \text{se não houver excesso de alumina, ou}$$

$$y = \frac{2 \cdot \text{alk}}{2 \cdot \text{alk} + c} \quad \text{se houver excesso de alumina.}$$

Para o caso de haver excesso de álcalis e um valor de qz positivo, o valor de y será dado em termos de aegerina normativa, que nesta circunstância impede a formação de anortita.

Os gráficos relativos ao estudo dos feldspatos normativos encontram-se na obra de Burri (ob. cit. 57, 58 e 60).

AGRADECIMENTOS

Os autores desejam expressar seus agradecimentos aos Professores Arthur Wentz Schneider

e Carlos Burger Jr. do Instituto de Geociências, e ao programador Caio Márcio Rodrigues da Cunha, do Centro de Processamento de Dados da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, que gentilmente revisaram e analisaram criticamente o presente trabalho.

Nossos agradecimentos também ao Centro de Processamento de Dados e à Câmara de Pós-Graduação e Pesquisas da UFRGS, pois sem sua colaboração esta publicação não poderia ter sido realizada.

BIBLIOGRAFIA CONSULTADA

AMARAL, G. - 1967 - Programa para Cálculos Petroquímicos (Norma e Valores de Niggli), em computador - Congresso Brasileiro de Geologia, 21º, Curitiba - **Anais**, p.113-8.

BURRI, C. - 1959 - Petrochemical calculations based on equivalents (Methods of Paul Niggli - Translated from German - Israel Program for Scientific Translations - Jerusalem, Sivan Press, 1964, 304p.

VITALINO, C. J.; HARVEY, R. D.; CLEVELAND, J. H. - 1965 - Computer program for norm calculation - *American Mineralogist*, Washington 50:495-8.


```

INTEGER PROJ(79)
DIMENSION A(22),B(22),C(22),Z(22),T(22)
DATA B/60.06,79.90,101.96,159.68,71.84,70.93,40.32,56.08,61.99,
*94.19,141.96,44.01,32.06,123.22,152.02,35.45,19.00,153.16,74.69,
*103.63,74.94,29.88/
DATA C/60.09,79.90,50.97,79.84,71.84,70.93,40.32,56.08,30.99,
*47.10,70.98,44.01,32.06,123.22,76.01,35.45,19.00,153.36,74.69
*,103.63,74.94,14.94/
DATA IUM/'1'/,IDOIS/'2'/,ITRES/'3'/,FIM/'FIM.'/,IZERO/'0'/
IENT=8
ISAI=5
1 READ(IENT,980)ITIP,PROJ
980 FORMAT(A1,79A1)
IF(ITIP-IUM)981,984,981
981 ICOD=1
982 WRITE(ISAI,983)ICOD
983 FORMAT(' *PROGRAMA INTERROMPIDO POR ERRO NA ENTRADA - CODIGO=11)
GO TO 147
984 READ(IENT,985)ITIP,DENT,IORD,(A(I),I=1,15)
IF(ITIP-IDOIS)986,989,986
986 IF(ITIP-ITRES)987,988,987
987 ICOD=2
GO TO 982
988 IF(DENT - FIM) 1,147,1
989 IF(IORD-IUM)990,992,990
990 IF(IORD-IZERO)991,997,991
991 ICOD=3
GO TO 982
992 READ(IENT,985)ITIP,DENT,IORD,(A(I),I=16,22)
985 FORMAT(A1,A4,A1,14X,15F4.2)
IF(ITIP-IDOIS)994,995,994
994 ICOD=4
GO TO 982
995 IF(IORD-IDOIS)996,999,996
996 ICOD=5
GO TO 982
997 DO 998 I=16,22
998 A(I)=0
999 WRITE(ISAI,1000)
1000 FORMAT('1',9X,'UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL',/10X,'CEN
*TRO DE PROCESSAMENTO DE DADOS',/10X,'INSTITUTO DE GEOCIENCIAS')
WRITE(ISAI,1001)
1001 FORMAT(10X,40('*'),'SISTEMA DE NIGGLI',53('*'))
WRITE(ISAI,1002)PROJ
1002 FORMAT(10X,'*** ',79A1,T120,'*/10X,*',T120,'*')
WRITE(ISAI,1003) DENT
1003 FORMAT(10X,'*** AMOSTRA NO. ',A4 ,T120,'*/10X,*',T120,'*/10X,*
*** VALORES DA ANALISE QUIMICA',T120,'*')
WRITE(ISAI,1004) (A(I),I=1,8)
1004 FORMAT(10X,'*',6X,'SIO2=',F5.2,3X,'TIO2=',F5.2,3X,'AL2O3=',F5.2,3X
*'FE2O3=',F5.2,3X,'FEO=',F5.2,3X,'MNO=',F5.2,3X,'MGO=',F5.2,3X,'CAO
*=',F5.2,3X,'*')
WRITE(ISAI,1005) (A(I),I=9,16)
1005 FORMAT(10X,'*',6X,'NA2O=',F5.2,4X,'K2O=',F5.2,4X,'P2O5=',F5.2,5X,'
*CO2=',F5.2,5X,'S=',F5.2,2X,'ZRO2=',F5.2,1X,'CR2O3=',F5.2,4X,'CL=',
*'F5.2,3X,'*')
WRITE(ISAI,1006) (A(I),I=17,22)
1006 FORMAT(10X,'*',9X,'F=',F5.2,4X,'BAO=',F5.2,5X,'NIO=',F5.2,5X,'SRO=
*',F5.2,3X,'COO=',F5.2,2X,'LI2O=',F5.2,T120,'*/10X,*',T120,'*')
ASOM=0.0
DO 10 I=1,22
10 ASOM=ASOM+A(I)
WRITE(ISAI,1007)ASOM

```

```

1007 FORMAT(10X,'*** SOMA DA ANALISE QUIMICA==',F6.2,T120,''/10X,'*',T
      *120,''/10X,'*** NUMEROS DE NIGGLI',T120,'*')
C *****
C   CALCULO DOS NUMEROS DE NIGLI
C *****
DO 12 I=1,22
12 Z(I)=A(I)*1000./B(I)
   AK=Z(10)/(Z(9)+Z(10)+Z(18))
   AMG=Z(7)/(Z(7)+Z(5)+2.*Z(4)+Z(6))
   WAST=2.*Z(4)/(2.*Z(4)+Z(5))
   Z(5)=Z(5)+2.*Z(4)+Z(7)+Z(6)+Z(19)+Z(21)+Z(22)
   ALKO=Z(9)+Z(10)+Z(18)+Z(20)
   X=Z(3)+Z(5)+Z(8)+ALKO
   AL=(100.*Z(3))/X
   FM=(100.*Z(5))/X
   CA=(100.*Z(8))/X
   ALK=(100.*ALKO)/X
   SI=(Z(1)*100.)/X
   P=(100.*Z(11))/X
   CO=(100.*Z(12))/X
   TI=(100.*Z(2))/X
   CL=(100.*Z(16))/X
   F=(100.*Z(17))/X
   S=(Z(13)*100.)/X
   IF(AL-ALK)13,14,14
13 SIT=(100.+3.*AL+ALK)
   GO TO 15
14 IF(AL-ALK+CA)150,151,151
150 SIT=100.+5.*ALK-AL
   GO TO 15
151 SIT=100.+4.*ALK
15 QTZ=SI-SIT
   IF(SI-SIT)156,153,153
153 IF(AL-ALK+CA)154,155,155
154 Y=(2.*ALK)/(AL+ALK)
   GO TO 156
155 Y=(2.*ALK)/(2.*ALK+CA)
156 TR=AL-ALK
   WRITE (ISAI,1008) AL,FM,CA,ALK,SI,P,CO,TI,CL,F,S,AK,AMG,WAST,QTZ,TR
1008 FORMAT(10X,'*',8X,'AL=',F6.2,4X,'FM=',F6.2,6X,'C=',F6.2,4X,'ALK=',
      *F6.2,T120,''/10X,'*',8X,'SI=',F6.2,5X,'P=',F6.2,5X,'CO=',F6.2,5X,
      *TI=',F6.2,3X,'CL=',F6.2,4X,'F=',F6.2,4X,'S=',F6.2,T120,''/10X,'*
      *.9X,'K=',F6.2,4X,'MG=',F6.2,6X,'W=',F6.2,T120,''/10X,'*',9X,'Q='
      *,F6.2,5X,'T=',F6.2,T120,'*')
C *****
C   CALCULO DA BASE SEGUNDO NIGGLI
C *****
DO 18 I=1,22
18 T(I)=A(I)*1000./C(I)
   SOMA=0.
DO 19 I=1,22
19 SOMA=SOMA+T(I)
   R=100./SOMA
   T(5)=T(5)+T(6)+T(19)
   T(10)=T(10)+T(20)+T(18)
   T(7)=T(7)+T(22)
   T(4)=T(4)+T(15)
   IF(T(11)-2.*T(8)/3.)177,177,178
177 CP=T(11)+3.*T(11)/2.
   T(8)=T(8)-3.*T(11)/2.
   T(11)=0.
   GO TO 179
178 CP=2.*T(8)/3.+T(8)
   T(11)=T(11)-2.*T(8)/3.
   T(8)=0.
   T(1)=T(1)+T(11)
   T(11)=0.
179 IF(T(16)-T(9))180,180,181
180 HL=2.*T(16)
   T(9)=T(9)-T(16)
   T(16)=0.
   GO TO 182
181 HL=2.*T(9)
   T(16)=T(16)-T(9)
   T(9)=0.
   T(4)=T(4)+T(16)
   T(16)=0.
182 IF(T(17)-2.*T(8))183,183,184
183 FR=T(17)+T(17)/2.
   T(8)=T(8)-T(17)/2.
   T(17)=0.
   GO TO 185

```


184 FR=3.*T(8)
 T(17)=T(17)-2.*T(8)
 T(8)=0.
 T(4)=T(4)+T(17)
 T(17)=0.
 185 IF(T(13)-2.*T(5))186,186,187
 186 PR=T(13)+T(13)/2.
 T(5)=T(5)-T(13)/2.
 T(13)=0.
 GO TO 188
 187 PR=3.*T(5)
 T(13)=T(13)-2.*T(5)
 T(5)=0.
 T(4)=T(4)+T(13)
 T(13)=0.
 188 IF(T(15)-2.*T(5))189,189,190
 189 CM=T(15)+T(15)/2.
 T(5)=T(5)-T(15)/2.
 T(15)=0.
 GO TO 191
 190 CM=3.*T(5)
 T(15)=T(15)-2.*T(5)
 T(5)=0.
 T(4)=T(4)+T(15)
 T(15)=0.
 191 RU=T(2)
 T(2)=0.
 IF(T(12)-T(8))192,192,193
 192 CC=2.*T(12)
 T(8)=T(8)-T(12)
 T(12)=0.
 GO TO 194
 193 CC=2.*T(8)
 T(12)=T(12)-T(8)
 T(8)=0.
 T(4)=T(4)+T(12)
 T(12)=0.
 194 IF(T(3)-T(10))20,21,21
 20 AKP=3.*T(3)
 T(10)=T(10)-T(3)
 T(1)=T(1)-T(3)
 AKS=T(10)+(T(10)/2.)
 T(1)=T(1)-(T(10)/2.)
 GO TO 22
 21 AKP=3.*T(10)
 T(3)=T(3)-T(10)
 T(1)=T(1)-T(10)
 AKS=0.
 22 T(10)=0.
 IF(T(3)-T(9))23,23,24
 23 ANE=3.*T(3)
 T(9)=T(9)-T(3)
 T(1)=T(1)-T(3)
 T(3)=0.
 ANS=T(9)+(T(9)/2.)
 T(1)=T(1)-(T(9)/2.)
 T(9)=0.
 CAL=0.
 GO TO 31
 24 ANE=3.*T(9)
 T(3)=T(3)-T(9)
 T(1)=T(1)-T(9)
 T(9)=0.
 ANS=0.
 IF(T(3)-(2.*T(8)))25,25,26
 25 CAL=T(3)+(T(3)/2.)
 T(8)=T(8)-(T(3)/2.)
 T(3)=0.
 31 CS=T(8)+(T(8)/2.)
 T(1)=T(1)-(T(8)/2.)
 T(8)=0.
 SP=0.
 GO TO 32
 26 CAL=3.*T(8)
 T(3)=T(3)-(2.*T(8))
 T(8)=0.
 CS=0.
 IF(T(3)-(T(7)*2))27,27,28
 27 SP=T(3)+(T(3)/2.)
 T(7)=T(7)-(T(3)/2.)
 T(3)=0.
 32 HZ=0.
 GO TO 33
 28 SP=3.*T(7)
 T(3)=T(3)-(2.*T(7))
 T(7)=0.
 IF(T(3)-(T(5)*2))29,29,30
 29 HZ=T(3)+(T(3)/2.)
 T(5)=T(5)-(T(3)/2.)
 T(3)=0.
 33 CD=0.
 GO TO 34
 30 HZ=3.*T(5)
 T(3)=T(3)-(2.*T(5))
 T(5)=0.
 CD=T(3)
 T(3)=0.
 34 FO=T(7)+(T(7)/2.)
 T(1)=T(1)-(T(7)/2.)
 FA=T(5)+(T(5)/2.)
 T(1)=T(1)-(T(5)/2.)
 FS=T(4)+(T(4)/2.)
 T(1)=T(1)-(T(4)/2.)
 ZR=2.*T(14)
 T(1)=T(1)-T(14)
 QZ=T(1)
 CP=CP*R
 HL=HL*R
 FR=FR*R
 PR=PR*R
 CM=CM*R
 RU=RU*R
 CC=CC*R
 AKP=AKP*R
 AKS=AKS*R
 ANE=ANE*R
 ANS=ANS*R
 CAL=CAL*R
 CS=CS*R
 SP=SP*R
 HZ=HZ*R
 CD=CD*R
 FO=FO*R
 FA=FA*R
 FS=FS*R
 ZR=ZR*R
 QZ=QZ*R

```

SBASE=AKP+AKS+ANE+ANS+CAL+CS+SP+HZ+CD+FO+FA+FS+
*ZR+QZ+CP+HL+FR+PR+CM+RU+CC
C *****
C CALCULO DO TRIANGULO Q L M
C *****
Q=QZ
DL=AKP+ANE+CAL
DM=CS+FO+FA+FS+ANS+AKS+RU+CP+HZ+SP+CD
WRITE(ISAI,1009)
1009 FORMAT(10X,'*',T120,'*/10X,'*** VALORES DA BASE',T120,'*/10X,'*
* ** COMPOSTOS FUNDAMENTAIS',T120,'*')
WRITE(ISAI,1010)AKP,AKS,ANE,ANS,CAL,CS,SP,HZ,CD,FO,FA,FS,ZR,QZ
1010 FORMAT(10X,'*',8X,'KP=',F5.2,5X,'KS=',F5.2,6X,'NE=',F5.2,6X,'NS=',
*F5.2,3X,'CAL=',F5.2,4X,'CS=',F5.2,4X,'SP=',F5.2,4X,'HZ=',F5.2,3X,'
**/10X,'*',9X,'C=',F5.2,5X,'FO=',F5.2,6X,'FA=',F5.2,6X,'FS=',F5.2,
*5X,'Z=',F5.2,5X,'Q=',F5.2,T120,'*')
WRITE(ISAI,1011)CP,HL,FR,PR,CM,RU,CC
1011 FORMAT(10X,'*',T120,'*/10X,'* ** COMPOSTOS ACESSORIOS',T120,'*/
*10X,'*',8X,'CP=',F5.2,5X,'HL=',F5.2,6X,'FR=',F5.2,6X,'PR=',F5.2,4X
*,'CM=',F5.2,4X,'RU=',F5.2,4X,'CC=',F5.2,T120,'*/10X,'*',T120,'*')
WRITE(ISAI,1013)SBASE
1013 FORMAT(10X,'*** SOMA DOS COMPONENTES DA BASE =',F6.2,T120,'*/10X,
*','T120,'*')
C *****
C COMBINACOES DAS COMPONENTES DA BASE
C *****
WRITE(ISAI,38)
38 FORMAT(10X,'*** MINERAIS NORMATIVOS CALCULADOS A PARTIR DA BASE',T
*120,'*')
IF(A(3)-(A(10)+A(9)))97,80,39
39 IF(A(3)-(A(10)+A(9)+.5*A(8)))40,40,41
40 IF(CS)61,61,80
41 IF(FA)48,48,61
C *****
C CALCULO DO S MINERAIS NORMATIVOS A PARTIR DA BASE
C *****
48 AMT=0.
HY=0.
EN=0.
WO=0.
FKS=0.
FNS=0.
AC=0.
AKAC=0.
ANSS=0.
AKSS=0.
HM=2.*FS/3.
QZ=QZ+(FS/3.)
FS=0.
IF(QZ-2.*CAL/3.)49,49,50
49 AN=5.*QZ/2.
CAL=CAL-(3.*QZ/2.)
GO TO 148
50 AN=5.*CAL/3.
QZ=QZ-(2.*CAL/3.)
CAL=0.
IF(QZ-2.*AKP/3.)51,51,52
51 OR=5.*QZ/2.
AKP=AKP-(3.*QZ/2.)
GO TO 149
52 OR=5.*AKP/3.
QZ=QZ-(2.*AKP/3.)
AKP=0.
IF(QZ-2.*ANE/3.)53,53,54
53 AB=5.*QZ/2.
ANE=ANE-(3.*QZ/2.)
GO TO 170
54 AB=5.*ANE/3.
QZ=QZ-2.*ANE/3.
ANE=0.
IF(QZ-5.*HZ/6.)55,55,56
55 FCORD=11.*QZ/5.
HZ=HZ-6.*QZ/5.
GO TO 171
56 FCORD=11.*HZ/6.
QZ=QZ-5.*HZ/6.
HZ=0.
IF(QZ-5.*SP/6.)57,57,58
57 CORD=11.*QZ/5.
SP=SP-6.*QZ/5.
GO TO 172
58 CORD=11.*SP/6.
QZ=QZ-5.*SP/6.
SP=0.
IF(QZ-CD/2.)59,59,60
59 SIL=3.*QZ
CD=CD-2.*QZ
GO TO 138
60 SIL=3.*CD/2.
QZ=QZ-CD/2.
CD=0.
GO TO 139

```



```

61 SIL=0.
   WO=0.
   FKS=0.
   FNS=0.
   AC=0.
   AKAC=0.
   ANSS=0.
   AKSS=0.
   IF(FS-2.*FA)62,63,64
62 AMT=FS
   FA=FA-FS/2.
   QZ=QZ+FS/2.
   HM=0.
   FS=0.
   GO TO 65
63 AMT=FS
   QZ=QZ+FA
   HM=0.
   FA=0.
   FS=0.
   GO TO 65
64 AMT=2.*FA
   FS=FS-2.*FA
   QZ=QZ+FA
   HM=2.*FS/3.
   QZ=QZ+FS/3.
   FA=0.
   FS=0.
65 IF(QZ-2.*CAL/3.)66,66,67
66 AN=5.*QZ/2.
   CAL=CAL-3.*QZ/2.
   GO TO 173
67 AN=5.*CAL/3.
   QZ=QZ-2.*CAL/3.
   CAL=0.
   IF(QZ-2.*AKP/3.)68,68,69
68 OR=5.*QZ/2.
   AKP=AKP-3.*QZ/2.
   GO TO 174
69 OR=5.*AKP/3.
   QZ=QZ-2.*AKP/3.
   AKP=0.
   IF(QZ-2.*ANE/3.)70,70,71
70 AB=5.*QZ/2.
   ANE=ANE-3.*QZ/2.
   GO TO 175
71 AB=5.*ANE/3.
   QZ=QZ-2.*ANE/3.
   ANE=0.
   IF(QZ-5.*HZ/6.)72,72,73
72 FCORD=11.*QZ/5.
   HZ=HZ-6.*QZ/5.
   GO TO 176
73 FCORD=11.*HZ/6.
   QZ=QZ-5.*HZ/6.
   HZ=0.
   IF(QZ-5.*SP/6.)74,74,75
74 CORD=11.*QZ/5.
   SP=SP-6.*QZ/5.
   GO TO 195
75 CORD=11.*SP/6.
   QZ=QZ-5.*SP/6.
   SP=0.
   IF(QZ-FA/3.)76,76,77
76 HY=4.*QZ
   FA=FA-3.*QZ
   GO TO 196
77 HY=4.*FA/3.
   QZ=QZ-FA/3.
   FA=0.
   IF(QZ-FO/3.)78,78,79
78 EN=4.*QZ
   FO=FO-3.*QZ
   GO TO 138
79 EN=4.*FO/3.
   QZ=QZ-FO/3.
   FO=0.
   GO TO 139
80 FCORD=0.
   CORD=0.
   SIL=0.
   FKS=0.
   FNS=0.
   AC=0.
   AKAC=0.
   ANSS=0.
   AKSS=0.
   IF(FS-2.*FA)81,82,83
81 AMT=FS
   FA=FA-FS/2.
   QZ=QZ+FS/2.
   HM=0.
   FS=0.
   GO TO 84
82 AMT=FS
   QZ=QZ+FA
   HM=0.
   FA=0.
   FS=0.
   GO TO 84
83 AMT=2.*FA
   FS=FS-2.*FA
   QZ=QZ+FA
   HM=2.*FS/3.
   QZ=QZ+FS/3.
   FA=0.
   FS=0.
84 IF(QZ-2.*CAL/3.)85,85,86
85 AN=5.*QZ/2.
   CAL=CAL-3.*QZ/2.
   GO TO 157
86 AN=5.*CAL/3.
   QZ=QZ-2.*CAL/3.
   CAL=0.
   IF(QZ-2.*AKP/3.)87,87,88
87 OR=5.*QZ/2.
   AKP=AKP-3.*QZ/2.
   GO TO 158
88 OR=5.*AKP/3.
   QZ=QZ-2.*AKP/3.
   AKP=0.
   IF(QZ-2.*ANE/3.)89,89,90
89 AB=5.*QZ/2.
   ANE=ANE-3.*QZ/2.
   GO TO 159
90 AB=5.*ANE/3.
   QZ=QZ-2.*ANE/3.
   ANE=0.
   IF(QZ-CS/3.)91,91,92
91 WO=4.*QZ
   CS=CS-3.*QZ
   GO TO 160

```

92 WO=4.*CS/3.
 QZ=QZ-CS/3.
 CS=0.
 IF(QZ-FA/3.)93,93,94
 93 HY=4.*QZ
 FA=FA-3.*QZ
 GO TO 161
 94 HY=4.*FA/3.
 QZ=QZ-FA/3.
 FA=0.
 IF(QZ-FO/3.)95,95,96
 95 EN=4.*QZ
 FO=FO-3*QZ
 GO TO 138
 96 EN=4.*FO/3.
 QZ=QZ-FO/3.
 FO=0.
 GO TO 139
 97 AN=0.
 FCORD=0.
 CORD=0.
 SIL=0.
 IF(AKS)98,98,99
 98 FKS=0.
 GO TO 103
 99 IF(AKS-FS)100,101,102
 100 FKS=2.*AKS
 FS=FS-AKS
 AKS=0.
 GO TO 103
 101 FKS=2.*AKS
 FS=0.
 AKS=0.
 GO TO 103
 102 FKS=2.*FS
 AKS=AKS-FS
 FS=0.
 103 IF(ANS-FS)104,105,106
 104 FNS=2.*ANS
 FS=FS-ANS
 ANS=0.
 GO TO 107
 105 FNS=2.*ANS
 ANS=0.
 FS=0.
 GO TO 107
 106 FNS=2.*FS
 ANS=ANS-FS
 FS=0.
 107 IF(FS)108,108,109
 108 AMT=0.
 HM=0.
 GO TO 113
 109 IF(FS-2.*FA)110,111,112
 110 AMT=FS
 FA=FA-FS/2.
 QZ=QZ+FS/2.
 HM=0.
 FS=0.
 GO TO 113
 111 AMT=FS
 QZ=QZ+FA
 HM=0.
 FA=0.
 FS=0.
 GO TO 113
 112 AMT=2.*FA
 FS=FS-(2.*FA)
 QZ=QZ+FA
 HM=2.*FS/3.
 QZ=QZ+FS/3.
 FA=0.
 FS=0.
 113 IF(QZ-FNS/3.)114,114,115
 114 AC=4.*QZ
 FNS=FNS-3.*QZ
 GO TO 162
 115 AC=4.*FNS/3.
 QZ=QZ-FNS/3.
 FNS=0.
 IF(QZ-FKS/3.)116,116,117
 116 AKAC=4.*QZ
 FKS=FKS-3.*QZ
 GO TO 163
 117 AKAC=4.*FKS/3.
 QZ=QZ-FKS/3.
 FKS=0
 IF(QZ-2.*AKP/3.)118,118,119
 118 OR=5.*QZ/2.
 AKP=AKP-3.*QZ/2.
 GO TO 164
 119 OR=5.*AKP/3.
 QZ=QZ-2.*AKP/3.
 AKP=0.
 IF(QZ-2.*ANE/3.)120,120,121
 120 AB=5.*QZ/2.
 ANE-ANE-3.*QZ/2.
 GO TO 165
 121 AB=5.*ANE/3.
 QZ=QZ-2.*ANE/3.
 ANE=0.
 IF(ANS)122,122,123
 122 ANSS=0.
 GO TO 126
 123 IF(QZ-ANS/3.)124,124,125
 124 ANSS=4.*QZ
 ANS=ANS-3.*QZ
 GO TO 166
 125 ANSS=4.*ANS/3.
 QZ=QZ-ANS/3.
 ANS=0.
 126 IF(AKS)127,127,128
 127 AKSS=0.
 GO TO 131
 128 IF(QZ-AKS/3.)129,129,130
 129 AKSS=4.*QZ
 AKS=AKS-3.*QZ
 GO TO 167
 130 AKSS=4.*AKS/3.
 QZ=QZ-AKS/3.
 AKS=0.
 131 IF(QZ-CS/3.)132,132,133
 132 WO=4.*QZ
 CS=CS-3.*QZ
 GO TO 168
 133 WO=4.*CS/3.
 QZ=QZ-CS/3.
 CS=0.
 IF(QZ-FA/3.)134,134,135
 134 HY=4.*QZ
 FA=FA-3.*QZ
 GO TO 169


```

135 HY=4.*FA/3.
    QZ=QZ-FA/3.
    FA=0.
    IF(QZ-FO/3.)136,136,137
136 EN=4.*QZ
    FO=FO-3.*QZ
    GO TO 138
137 EN=4.*FO/3.
    QZ=QZ-FO/3.
    FO=0.
    GO TO 139
148 OR=0.
149 AB=0.
170 FCORD=0.
171 CORD=0.
172 SIL=0.
    GO TO 138
173 OR=0.
174 AB=0.
175 FCORD=0.

176 CORD=0.
195 HY=0.
196 EN=0.
    GO TO 138
157 OR=0.
158 AB=0.
159 WO=0.
160 HY=0.
161 EN=0.
    GO TO 138
162 AKAC=0.
163 OR=0.
164 AB=0.
165 ANSS=0.
166 AKSS=0.
167 WO=0.
168 HY=0.
169 EN=0.
138 QZ=0.
139 WRITE(ISAI,140)

140 FORMAT(10X,'*** VALORES DA CATANORMA PADRAO A PARTIR DA BASE',T120
*,*/10X,'* ** COMPOSTOS FUNDAMENTAIS',T120,'*/10X,'*,5X,'* FEL
*SICOS',T120,'*')
    WRITE(ISAI,141)QZ,OR,AB,AN,SIL,ANSS,AKSS,WO
141 FORMAT(10X,'*,9X,'Q=',F5.2,5X,'OR=',F5.2,6X,'AB=',F5.2,6X,'AN=',F
*5.2,3X,'SIL=',F5.2,3X,'NS*=',F5.2,3X,'KS*=',F5.2,4X,'WO=',F5.2,T12
*O,'*')
    WRITE(ISAI,142)AKP,ANE,CAL,CD,ANS,AKS,CS
142 FORMAT(10X,'*,21X,'KP=',F5.2,6X,'NE=',F5.2,5X,'CAL=',F5.2,5X,'C='
*,F5.2,4X,'NS=',F5.2,4X,'KS=',F5.2,4X,'CS=',F5.2,T120,'*')
    WRITE(ISAI,143)HY,EN,FCORD,CORD,AC,AKA C
143 FORMAT(10X,'*,T120,'*/10X,'*,5X,'* MAFICOS',T120,'*/10X,'*,8X
*,'HY=',F5.2,5X,'EN=',F5.2,3X,'FCORD=',F5.2,4X,'CORD=',F5.2,4X,'AC='
*,F5.2,2X,'K-AC=',F5.2,T120,'*')
    WRITE(ISAI,144)FA,FO,HZ,SP,FNS,FKS,FS
144 FORMAT(10X,'*,8X,'FA=',F5.2,5X,'FO=',F5.2,6X,'HZ=',F5.2,6X,'SP=',
*F 5.2,3X,'FNS=',F5.2,3X,'FKS=',F5.2,4X,'FS=',F5.2,T120,'*')
    WRITE(ISAI,145)CP,RU,HM,AMT,CC,CM,PR,FR,HL
145 FORMAT(10X,'*,T120,'*/10X,'* ** COMPOSTOS ACESSORIOS',T120,'*/
*10X,'*,8X,'CP=',F5.2,5X,'RU=',F5.2,6X,'HM=',F5.2,6X,'MT=',F5.2,4X
*,'CC=',F5.2,4X,'CM=',F5.2,4X,'PR=',F5.2,T120,'*/10X,'*,8X,'FR=',
*F5.2,5X,'HL=',F5.2,T120,'*')
    SNOR=QZ+OR+AB+AN+SIL+ANSS+AKSS+WO+AKP+ANE+CAL+CD+ANS+AKS+CS+HY+EN+
*FCORD+CORD+AC+AKAC+FA+FO+HZ+SP+FNS+FKS+FS+CP+RU+HM+AMT+CC+CM+PR+FR
*HL
    WRITE(ISAI,1014)SNOR
1014 FORMAT(10X,'*** SOMA DOS COMPONENTES DA CATANORMA PADRAO =',F6.2,T
*120,'*/10X,'*,T120,'*')
    WRITE(ISAI,146)Q,DL,DM
146 FORMAT(10X,'*,T120,'*/10X,'*** TRIANGULO Q L M',T120,'*/10X,'*
*,9X,'Q=',F6.2,5X,'L=',F6.2,6X,'M=',F6.2,T120,'*/10X,'*,T120,'*')
    WRITE(ISAI,1012)Y,AK
1012 FORMAT(10X,'*** RELACOES QUANTITATIVAS DOS FELDSPATOS',T120,'*/10
*X,'*,9X,'Y=',F6.2,5X,'X=',F6.2,T120,'*')
    WRITE(ISAI,37)
37 FORMAT(10X,110('*'))
    GO TO 984
147 CALL EXIT
    END
FEATURES SUPPORTED
    ONE WORD INTEGERS
    IOCS
CORE REQUIREMENTS FOR
    COMMON      O VARIABLES 462 PROGRAM 5890
END OF COMPILATION
// XEQ
PESQUISAS, PORTO ALEGRE, 3(1): 35-46, AGOSTO 1974

```

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
CENTRO DE PROCESSAMENTO DE DADOS
INSTITUTO DE GEOCIENCIAS

```

*****SISTEMA DE NIGGLI*****
*** PROJETO ANDESITO-RIOLITO DO EO PALEOZOICO SUL RIOGRANDENSE
*
*** AMOSTRA NO. 0001
*
*** VALORES DA ANALISE QUIMICA
*   SIO2==73.14   TIO2== 0.39   AL2O3==16.23   FE2O3== 1.25   FEO== 0.40   MNO== 0.00   MGO== 0.70   CAO== 0.3
*   NA2O== 3.05   K2O== 4.12   P2O5== 0.15   CO2== 0.00   S== 0.00   ZRO2== 0.00   CR2O3== 0.00   CL== 0.0
*   F== 0.00   BAO== 0.00   NIO== 0.00   SRO== 0.00   COO== 0.00   LI2O== 0.00
*
*** SOMA DA ANALISE QUIMICA== 99.77
*
*** NUMEROS DE NIGGLI
*   AL== 53.60   FM== 12.99   C== 2.10   ALK== 31.29
*   SI==410.09   P== 0.35   CO== 0.00   TI== 1.64   CL== 0.00   F== 0.00   S== 0.00
*   K== 0.47   MG== 0.44   W== 0.73
*   Q==184.90   T== 22.30
*
*** VALORES DA BASE
** COMPOSTOS FUNDAMENTAIS
*   KP==14.79   KS== 0.00   NE==16.65   NS== 0.00   CAL== 0.51   CS== 0.00   SP== 2.93   HZ== 0.9
*   C== 4.54   FO== 0.00   FA== 0.00   FS== 1.32   Z== 0.00   Q==57.71
*
** COMPOSTOS ACESSORIOS
*   CP== 0.29   HL== 0.00   FR== 0.00   PR== 0.00   CM== 0.00   RU== 0.27   CC== 0.00
*
*** SOMA DOS COMPONENTES DA BASE == 100.00
*
*** MINERAIS NORMATIVOS CALCULADOS A PARTIR DA BASE
*** VALORES DA CATANORMA PADRAO A PARTIR DA BASE
** COMPOSTOS FUNDAMENTAIS
*   * FELSICOS
*   Q==31.34   OR== 24.66   AB==27.75   AN== 0.86   SIL== 6.81   NS*== 0.00   KS*== 0.00   WO== 0.0
*   KP== 0.00   NE== 0.00   CAL== 0.00   C== 0.00   NS== 0.00   KS== 0.00   CS== 0.0
*
*   * MAFICOS
*   HY== 0.00   EN== 0.00   FCORD== 1.72   CORD== 5.38   AC== 0.00   K-AC== 0.00
*   FA== 0.00   FO== 0.00   HZ== 0.00   SP== 0.00   FNS== 0.00   FKS== 0.00   FS== 0.00
*
** COMPOSTOS ACESSORIOS
*   CP== 0.29   RU== 0.27   HM== 0.88   MT== 0.00   CC== 0.00   CM== 0.00   PR== 0.00
*   FR== 0.00   HL== 0.00
*
*** SOMA DOS COMPONENTES DA CATANORMA PADRAO == 99.99
*
*** TRIANGULO Q L M
*   Q== 57.71   L== 31.96   M== 10.31
*
*** RELACOES QUANTITATIVAS DOS FELDSPATOS
*   Y== 0.96   X== 0.47
*****

```

Fig. 2 - Impressão dos dados e resultados.

```

PAGE 1      JOST
// JOB T
LOG DRIVE  CARTSPEC  CART AVAIL  PHY DRIVE  JOST      GEOLOGIA
0000      0008      0008      0000
          0009      0001
V2 M11    ACTUAL 16K  CONFIG 16K
// FOR
*IOCS(1403 PRINTER,2501 READER)
*ONE WORD INTEGERS
*LIST SOURCE PROGRAM
**NAME GEO/001 - CALCULOS PETROQUIMICOS

```