

Red para la elaboración de materiales docentes en el análisis y tratamiento de datos geoquímicos y petrológicos



David Benavente García; Juan Carlos Cañaveras Jiménez; Javier Martínez Martínez; Salvador Ordóñez Delgado; Concepción Pla Bru; Rubén Puertas Poveda. Departamento de Ciencias de la Tierra y Medio Ambiente. Universidad de Alicante. 03690 San Vicente del Raspeig.

1. Introducción

La experiencia adquirida durante la implementación de los primeros cursos del Grado en Geología ha puesto de manifiesto las debilidades relacionadas con el material docente existente. Concretamente, estas debilidades se refieren a los contenidos geoquímicos y petrológicos enmarcados en asignaturas como Petrología Ignea y Metamórfica, Petrología Sedimentaria y Geoquímica y Prospección Geoquímica. En estas materias se trabaja con bases de datos que incluyen múltiples elementos (variables) y diversos puntos de muestreo (casos), originándose una gran cantidad de información con la que trabajar. En el proceso de tratamiento de estos datos es indispensable el conocimiento de los diferentes pasos intermedios que se realizan, las suposiciones que se consideran para obtener los resultados y los errores derivados de ellas, aspectos que los materiales docentes existentes no consideran.

Como consecuencia, esta red tiene como objetivo el desarrollo de material docente específico que incluya el desarrollo tanto de manuales como rutinas y cálculos con software libre, garantizando la coherencia tanto en la distribución de contenidos como en las metodologías docentes y de evaluación. En este trabajo se van a mostrar los resultados de dos tipos de material desarrollado en el marco de la Red: Norma CIPW (para el estudio de rocas ígneas) y scripts en el programa R (estudio estadístico de datos geoquímicos y petrológicos).

2. Características de los materiales elaborados

Norma CIPW:

- Lenguaje de programación Delphi 2010.
- Entorno gráfico, compilado y orientado a objetos.
- Componentes pregenerados, procedentes de librerías de libre acceso (Jedi Component Library, Jedi Visual Component Library, etc.).
- Cálculos con varias rocas a la vez.
- Los datos se introducen manualmente o desde archivos de texto.
- Información de los componentes modales de cada roca.
- Resultado en forma de archivo de texto.
- Menú de ayuda.

Scripts en R:

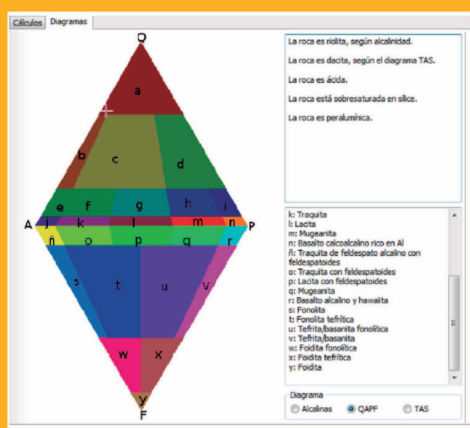
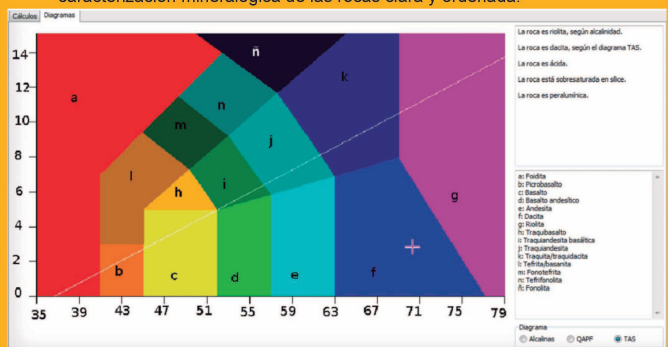
- Robustez de cálculo, posibilidad de manipular datos, funciones y gráficos.
- Libre acceso.
- Los scripts incluyen y explican las instrucciones y comandos esenciales.
- Se ejecutan de forma directa o bien llamando a programas o funciones.
- Las funciones o subrutinas de mayor complejidad se ejecutan en programas independientes.

3. Resultados

Norma CIPW:

Óxidos	% masa	% seco	PM óxido	Prop. mol.	Ap	H	Th	Pr	On	S
SiO2	50	70.423	60.084	1172.088	1172.088	0	0	0	0	0
TiO2	1	1.408	79.865	17.633	17.633	0	0	0	0	17.6
Al2O3	3	4.225	391.961	41.941	41.941	0	0	0	0	0
Fe2O3	1	1.408	129.687	8.82	8.82	0	0	0	0	0
FeO	4	5.634	71.844	76.417	98.272	0	0	0	0	17.6
MgO	1	1.408	70.937	19.855	0	0	0	0	0	0
MgO	4	5.634	40.304	136.783	136.783	0	0	0	0	0
CaO	5	7.042	56.077	123.582	123.582	0	0	0	0	0
Na2O	1	1.408	61.979	22.725	22.725	0	0	0	0	0
K2O	1	1.408	94.167	14.653	14.653	0	0	0	0	0
P2O5	0	0	141.943	0	0	0	0	0	0	0
H2O	0	0	38.015	0	0	0	0	0	0	0
H2O	0	0	74.692	0	0	0	0	0	0	0
SiO	0	0	133.329	0	0	0	0	0	0	0
SiO	0	0	30.659	0	0	0	0	0	0	0
O	0	0	35.453	0	0	0	0	0	0	0
SO3	0	0	80.062	0	0	0	0	0	0	0
F	0	0	77.916	0	0	0	0	0	0	0

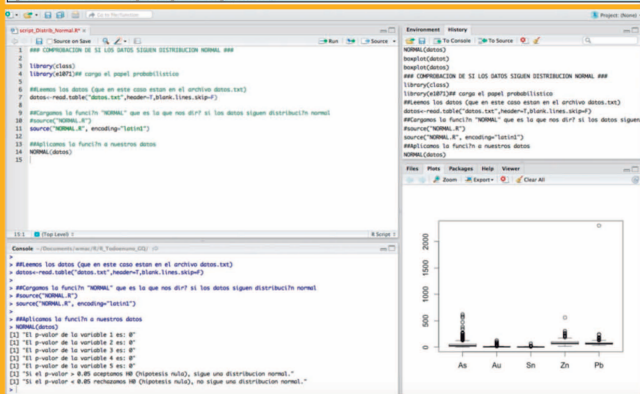
- Se calcula la composición mineral modal teórica de una roca ígnea a partir de su composición química.
- El cálculo se realiza paso a paso: se ven los cálculos realizados y el resultado parcial obtenido.
- Permite el cálculo de varias rocas a la vez, proporcionando al alumno una caracterización mineralógica de las rocas clara y ordenada.



Se visualizan y calculan las clasificaciones de las rocas, tanto gráficas (diagramas QAPF, TAS y AFM) como aquellas que se basan en su composición química o mineral (contenido en sílice y alúmina, etc.)

Scripts en R:

```
### COMPONENTES PRINCIPALES ###
# Para esta practica es necesario tener en la misma carpeta
# que el script las funciones de R: ACP.R, stand.R, Comp_Prin.R y Comp_Prin_Rot.R.
# Leemos los datos.
datos<-read.table("datos.txt",header=T,blank.lines.skip=F)
# Definimos el limite que se tomará para la varianza explicada
# y el número de componentes principales que se tomarán.
# Por defecto, estos valores son 70 % y 0 respectivamente. Si elegimos el valor 0
# de número de componentes principales, entonces el programa utiliza en número de
# componentes hasta que expliquen el porcentaje de varianza que hemos establecido.
lim<-0.70
Comp<=0
# Cargamos la función componentes principales y la aplicamos a la matriz de datos.
source("Comp_Prin.R");
Comp<-Comp_Prin(datos,limite=lim,componentes=comp)
# Si queremos podemos aplicar componentes principales rotados. Para ello cargamos la
# función componentes principales rotados y la aplicamos a la matriz de datos.
source("Comp_Prin_Rot.R");
Comp_Prin_Rot(datos,limite=lim,componentes=comp)
# Por ultimo podemos obtener y guardar las puntuaciones del análisis sin rotar
puntuaciones<-CP$princ$princ$scores
```



- Se han desarrollado scripts para los distintos tipos de cálculos estadísticos:
 - Estadística descriptiva y test de normalidad.
 - Matriz de correlación y gráficos de dispersión.
 - Regresión lineal simple y múltiple.
 - Regresión no lineal.
 - Análisis de componentes principales.
- El alumno ejecuta cada una de las líneas, entendiendo simultáneamente el cálculo que está realizando en cada momento.
- La salida gráfica de R permite visualizar cada elemento al mismo tiempo: script, consola (con los pasos y resultados obtenidos), historial y gráficos, dando al alumno una visión global de los cálculos realizados y una estructuración del análisis de los datos objeto de estudio.

4. Conclusiones

La implantación de estos materiales ha sido muy satisfactoria, tanto desde el punto de vista metodológico (enlazar los contenidos teóricos con la asignatura y con prácticas reales), formativo (se han alcanzado los objetivos del aprendizaje establecidos en la memoria del Grado de Geología), así como calificativo. La metodología propuesta ensalza el aprendizaje de los conceptos petrológicos y geoquímicos en detrimento de los cálculos matemáticos, demostrando una mayor aceptación de las prácticas entre el alumnado.