

Editada por el Centro de Información y Gestión Tecnológica. CIGET Pinar  
del Río

Vol. 14, No.2 abril - junio, 2012

## ARTÍCULO ORIGINAL

### **Sistema para el procesamiento integral de datos petroquímicos con fines docente-investigativos**

System for integral processing of petrochemistry data with investigative-educational purposes

**José Francisco Lastra-Rivero y Esther María Cruz-Gámez**

Doctor en Ciencias Geológicas. Universidad de Pinar del Río, Departamento de Geología, Calle Martí No. 270, esq. 27 de Noviembre, Pinar del Río, Cuba. Código Postal 20100.

E-mail: [jlastra@geo.upr.edu.cu](mailto:jlastra@geo.upr.edu.cu) ; [ecruz@geo.upr.edu.cu](mailto:ecruz@geo.upr.edu.cu)

---

## **RESUMEN**

Asignaturas relacionadas con el estudio de las rocas ígneas, sedimentarias y metamórficas de la carrera de Geología, han confrontado dificultades en el uso sistémico del procesamiento automatizado de datos petroquímicos, debido a la no disponibilidad de un software integrador sobre plataforma WINDOW. Esto ha constituido un impedimento para la consolidación de habilidades y hábitos investigativos desde la dimensión curricular, a la vez de dificultar la formación informática de los educandos.

Para la solución de este problema se concibió la elaboración de un sistema para el procesamiento analítico y gráfico de los datos petroquímicos, mediante su integración en una página web.

La metodología de trabajo concebida con estos fines incluyó: (1) revisión de la literatura más actualizada sobre cálculos y diagramas petroquímicos de mayor uso a nivel mundial; (2) definición de los componentes que integrarían el sistema y la estructura de cada uno; (3) preparación del fichero Excel base; (4) preparación de los diagramas petroquímicos base; (5) diseño del sistema e integración de sus componentes haciendo uso de las herramientas contenidas en una página web; (6) validación del sistema mediante el procesamiento de datos petroquímicos publicados en la literatura y procesados con otros sistemas.

La introducción de este sistema en las actividades docente-investigativas ha permitido comprobar la efectividad y aceptación por estudiantes y profesionales, mejorando las posibilidades de procesamiento analítico y gráfico de los datos petroquímicos respecto a las existentes con anterioridad.

**Palabras clave:** geoquímica, diagramas petroquímicos, rocas

## **ABSTRACT**

Courses of rocks igneous, sedimentary and metamorphic of the career of Geology, have confronted difficulties in the systemic use of the automated processing of petrochemical data, given the lack of integrative software on platform WINDOW. This has constituted an impediment for the consolidation of abilities and investigative habits from the curricular dimension, at the same time of hindering their computer formation.

For the solution of this problem was conceived the elaboration of a system for the analytic and graphic processing of the petrochemical data, by means of its integration in a web page.

The work methodology conceived with these purposes included: (1) revision of the most up-to-date literature on calculations and petrochemical diagrams of more use in the world; (2) definition of the components that would integrate the system and the structure of each one; (3) preparation of the base Excel file; (4) preparation of the base petrochemical diagram; (5) design of the system and integration of their components making use of the tools contained in a web page; (6) validation of the system through of the processing of petrochemical data published in the literature and processed with other systems.

The introduction of this system in the educational-investigative activities has allowed checking the effectiveness and acceptance for students and professors, improving the possibilities of analytic and graphic processing of the petrochemical data with regard to previously existent ones.

**Key words:** geochemistry, petrochemistry diagram, rocks

---

## INTRODUCCIÓN

En los planes de estudio de la carrera de Geología se ha prestado una atención especial a la necesidad de aplicar diversas herramientas computacionales para el procesamiento de la información geológica. Con el vertiginoso desarrollo de la informatización y las limitaciones que se poseen para acceder a sistemas automatizados especialmente diseñados con estos fines, se ha impuesto la necesidad de buscar vías alternativas que suplan este déficit y que paralelamente se ajusten a las necesidades de nuestro proceso docente-educativo.

El procesamiento de datos petroquímicos resulta una tarea engorrosa por la gran diversidad de cálculos y diagramas existentes en la literatura, pero al mismo tiempo de mucha utilidad para la caracterización petroquímica de las rocas. El presente trabajo tiene como objetivo ofrecer a los investigadores y estudiantes un sistema en el que se resuman los cálculos y diagramas petroquímicos de mayor aplicación en este campo de la geología y que les permita el procesamiento de los datos petroquímicos que les resulten de interés en su actividad docente y/o investigativa.

Las asignaturas Petrología Ígnea, Petrología Sedimentaria y Petrología Metamórfica, integradas a la disciplina Geoquímica de la carrera de Geología, no han estado ajenas a esta problemática, lo cual originó dificultades para desarrollar en los estudiantes habilidades y hábitos en su actividad investigativa desde la dimensión curricular. Para el procesamiento de datos petroquímicos se estuvo utilizando durante varios años el programa NEWPET con una desactualización evidente y un ambiente de trabajo inapropiado que conspiraban contra el cumplimiento de los objetivos de estas asignaturas.

Atendiendo a estas dificultades y necesidades se elaboró un sistema automatizado en el que se integren los cálculos y diagramas petroquímicos tradicionales y más novedosos, como expresión inmediata de un nivel de actualización superior en esta

temática y con implicaciones directas en el logro de habilidades docente-investigativas en los estudiantes.

## **MATERIALES Y MÉTODOS**

Para ejecutar este trabajo, se requirió únicamente una base material informática elemental (hardware y software), pero que resulta imprescindible para poder introducir y generalizar los resultados obtenidos en la docencia.

El hardware necesario está representado por una computadora personal Pentium IV con memoria RAM (mínimo 512 Mb), conectada a una red informática local. En la concepción del sistema se parte de la disponibilidad de diferentes softwares, tales como: un diseñador de páginas Web, las herramientas de Microsoft Office y un graficador.

En la selección del software se impone en primera instancia mantener la armonía y carácter sistémico de la estrategia de informática y computación de la carrera de Geología, contemplada en el contexto curricular. Como diseñador de páginas Web se decidió el uso de Macromedia Dreamweaver MX, el cual garantiza los hipervínculos y conexiones necesarias entre los diferentes componentes del sistema; la edición de textos es concebida con Microsoft Word 2005, siendo presentada en formato htm; las bases de datos y procesamientos analíticos que se derivan de éstas son ejecutados mediante Microsoft Excel 2005; la construcción de gráficos se ejecuta con Grapher 4, dada su versatilidad y facilidades en este tipo de procesamiento, además de tener antecedentes en su utilización por los estudiantes en otras asignaturas.

Atendiendo a que estos requerimientos mínimos estaban garantizados se concibió una metodología de trabajo consistente en:

(1) Revisión de la literatura más actualizada sobre cálculos y diagramas petroquímicos de mayor uso a nivel mundial.

Rollinson (1992) presenta una compilación extensa y clasificación de los cálculos y diagramas petroquímicos de mayor utilización en el mundo; consiguientemente, se adoptó como base los criterios presentados en este libro para la selección de los procedimientos analíticos y gráficos que debía contener el sistema, así como su estructura. También fueron revisados otros aspectos más actuales en relación con la construcción de diagramas petroquímicos, presentados por Raymond (2000).

Como resultado inmediato de esta revisión bibliográfica se concibió la realización de varios cálculos petroquímicos tradicionales para óxidos de elementos mayores y más de 60 diagramas petroquímicos basados en el procesamiento de óxidos de

elementos mayores y elementos trazas. Estas aplicaciones fueron subdivididas de acuerdo al tipo de roca: ígnea y sedimentaria (o sus equivalentes metamorfizados).  
(2) Definición de los componentes que integrarían el sistema y la estructura de cada uno.

La valoración de los componentes individuales tuvo en cuenta:

- Diseño y estructura de las bases de datos.
- Normalización de los datos originales sobre la base de determinados patrones (condritos, basaltos tipo MORB, manto primitivo, etc.).
- Procedimientos para la ejecución de los cálculos petroquímicos.
- Variantes para la preparación de los diagramas petroquímicos.

(3) Preparación del fichero Excel base.

El fundamento analítico del sistema está fundamentado en la preparación de un fichero Excel base, que está dividido estructuralmente en 4 bloques:

Bloque I- Bases de datos.

Bloque II- Normalización de los datos.

Bloque III- Cálculos petroquímicos.

Bloque IV- Diagramas petroquímicos.

Cada bloque está constituido por un sistema de hojas de cálculo entrelazadas entre sí y que contribuyen a procesamientos ejecutados en otros bloques.

(4) Preparación de los diagramas petroquímicos base.

Los diagramas petroquímicos base son preparados mediante el uso de GRAPHER 4, utilizando la información publicada a nivel internacional al respecto.

(5) Diseño del sistema e integración de sus componentes haciendo uso de las herramientas contenidas en una página web.

El nivel de simplicidad de una página Web y la facilidad para su divulgación y actualización, constituyeron elementos claves para utilizar esta herramienta computacional para la integración de los diferentes componentes de este sistema. Mediante el programa Macromedia Dreamweaver MX se diseñó el sistema con los hipervínculos o enlaces pertinentes, brindando al usuario, además de las posibilidades de ejecución de las aplicaciones del sistema, información necesaria para la selección de los cálculos petroquímicos y diagramas petroquímicos más adecuados a sus necesidades e instrucciones generales para la edición de sus propias bases de datos.

(6) Validación del sistema mediante el procesamiento de datos petroquímicos conocidos y procesados anteriormente con otros sistemas.

Para comprobar el grado de efectividad del sistema se realizó su validación utilizándolo en el procesamiento de bases de datos de publicaciones internacionales, demostrando su efectividad y confiabilidad. Esto fue posible a partir

de la introducción de este resultado en la asignatura Petrología I, haciendo partícipes a los estudiantes de esta valoración.

## RESULTADOS

El sistema ha sido denominado para su uso como Web\_Petroquímica. Su estructura parte de considerar dos bloques de procesamiento fundamentales, uno para rocas ígneas y el otro para rocas sedimentarias, la cual se representa en la página principal (Figura 1).

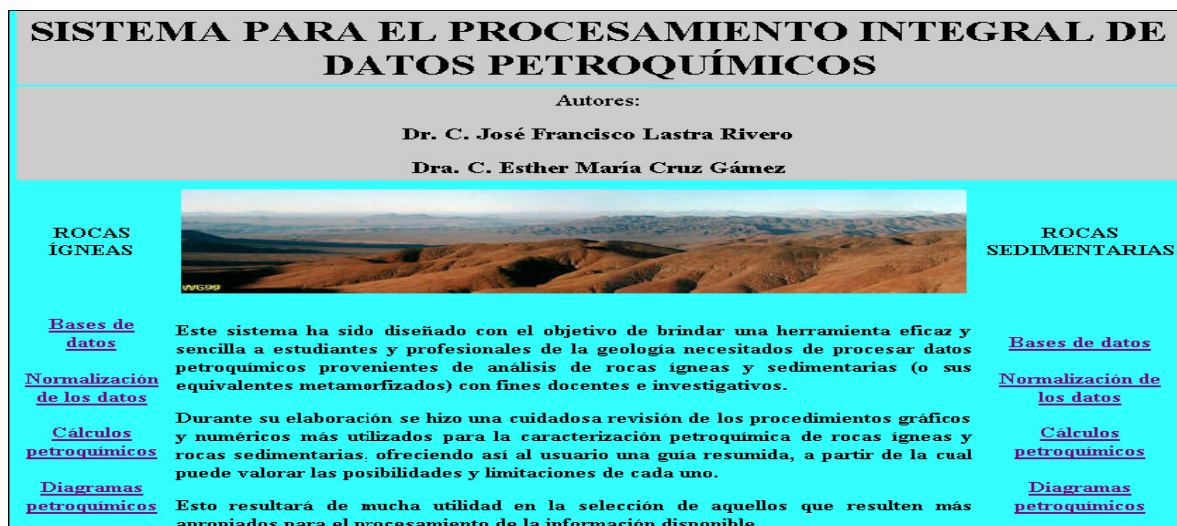


Figura 1- Diseño de la página principal del sistema.

Cada uno de los componentes indicados en esta página inicial está interconectado mediante hipervínculos con otras páginas. Desde estas páginas secundarias se puede acceder a diferentes herramientas que resultan de utilidad para el usuario del sistema.

La página secundaria que contiene las bases de datos posee una variada información sobre su estructura y construcción, además de mostrar un ejemplo. Esto coloca al usuario en condiciones de editar sus propias bases de datos (Figura 2).

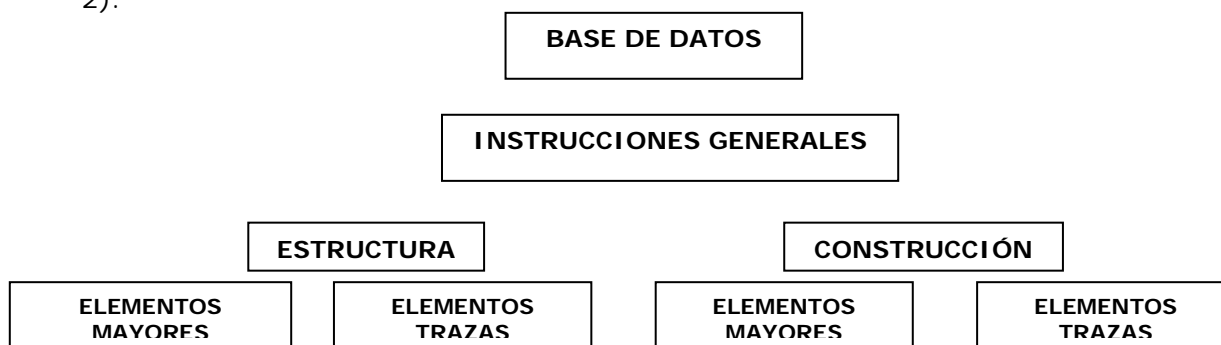
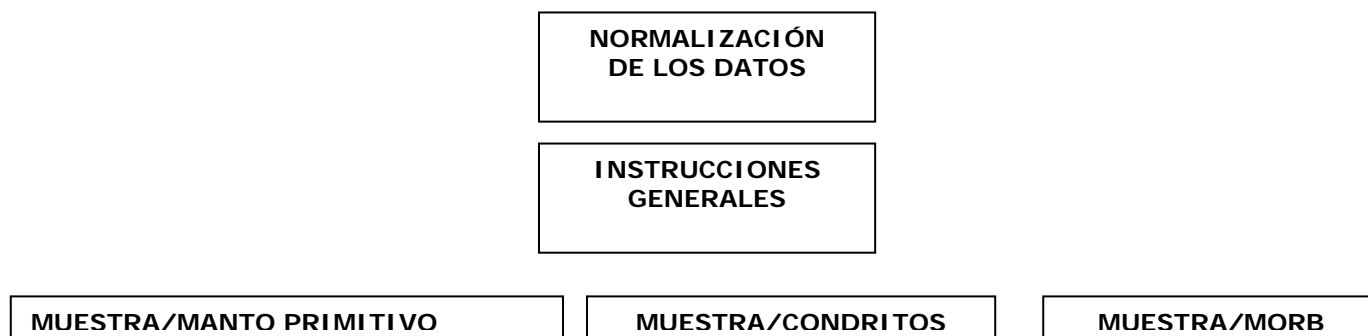


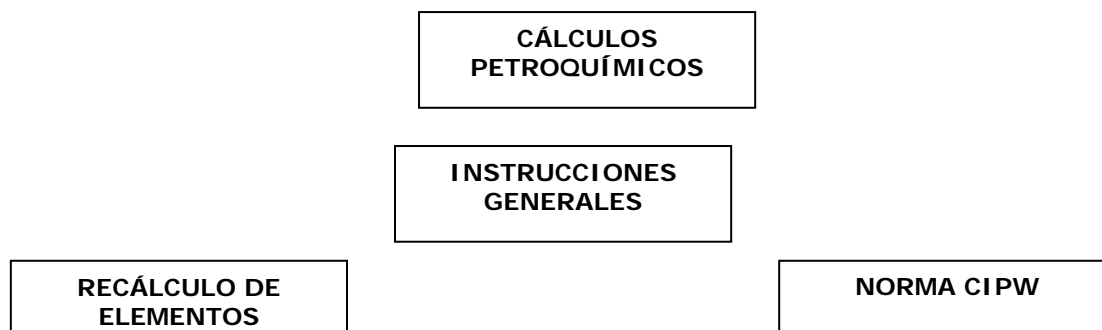
Figura 2- Diseño de la página secundaria para la preparación de las bases de datos.

La página secundaria para la normalización de los datos parte del principio de que algunos diagramas petroquímicos necesitan para su confección que los contenidos de varios de los elementos analizados sean normalizados respecto a algún patrón (manto primitivo, condritos, MORB, etc.). De tal manera, el sistema incluye en su diseño la normalización automatizada de los datos y su disponibilidad de los valores normalizados para la construcción de los diagramas que lo requieran (Figura 3).



**Figura 3- Diseño de la página secundaria para la normalización de los datos.**

La página secundaria que sirve de base a los cálculos petroquímicos se fundamenta en la necesidad de hacer algunas transformaciones a los datos originales (Figura 4).



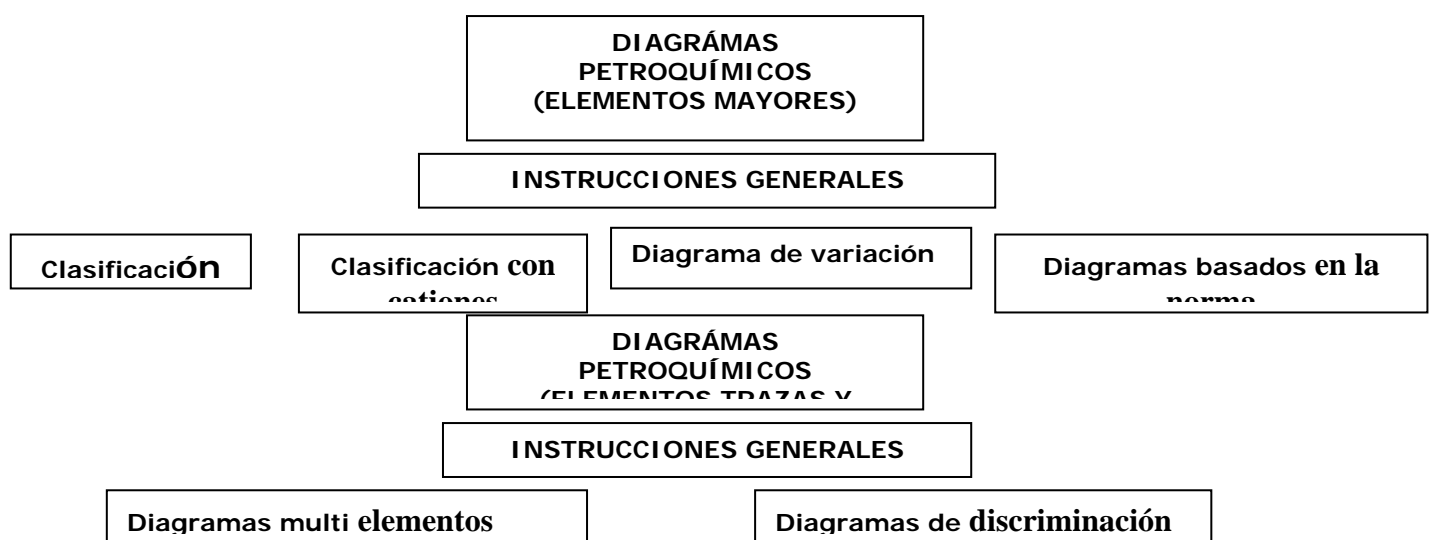
**Figura 4- Diseño de la página secundaria para los cálculos petroquímicos.**

Entre estas transformaciones la más simple y habitual consiste en convertir los contenidos de óxidos de elementos mayores (habitualmente expresados en % en masa) en contenidos de elementos simples (% catión, % mol), lo que resulta de utilidad para la construcción de determinados diagramas petroquímicos; una hoja de cálculo del fichero Excel base es destinada a este recálculo de elementos. También es común la determinación de la composición mineralógica normativa de las rocas ígneas según la norma CIPW (% en masa y % en volumen);

adicionalmente se realiza la estimación de la densidad, viscosidad, índice de diferenciación, temperatura y contenido de agua del magma desde el que se formó la roca ígnea analizada. Un programa Excel preparado por Hollocher (2007) ha sido insertado como hoja de cálculo independiente en el fichero Excel base, de manera tal que a partir de éste puedan estimarse todos estos parámetros para cada una de las muestras incluidas en la base de datos.

Los diagramas petroquímicos se presentan con un enfoque de clasificación acorde a los utilizados internacionalmente.

La existencia de muchas variedades de diagramas implica la necesidad de dividirlos preliminarmente según los elementos que participan en su construcción; las subdivisiones sucesivas permiten agrupaciones de diagramas con principios comunes (Figura 5).



**Figura 5-** Diseño de la página secundaria para los diagramas petroquímicos.

## DISCUSIÓN

El enfoque interactivo del sistema resulta novedoso y atractivo, garantizando facilidades de utilización por parte de los usuarios.

La información que se ofrece preliminarmente sobre las estructuras de las bases de datos, el fundamento de la normalización de los datos con diferentes patrones, los procedimientos para realizar los cálculos petroquímicos y las variantes de construcción de diagramas petroquímicos, le confieren al sistema un carácter integral en el que se combinan armónicamente los fundamentos teóricos y las aplicaciones prácticas. Esto resulta trascendental para que el estudiante adquiera las habilidades necesarias en la construcción de sus propias bases de datos y en la selección de los cálculos y diagramas que le resultan de interés.



La validación del sistema mediante el procesamiento de datos procedentes de diferentes publicaciones permitió su ajuste y la rectificación de algunas insuficiencias. Esto sentó las bases para su introducción y generalización en las actividades docente-investigativas de los estudiantes, con una certidumbre suficiente en los resultados que obtendrían del procesamiento. Con este fin fueron procesados los datos ofrecidos por Price *et al.* (1999) para rocas volcánicas (basaltos y andesitas) y Shannon *et al.* (1997) para rocas intrusivas (granitos y riolitas), los cuales se presentan como ejemplos a los estudiantes dentro del propio sistema. Esta constituye una vía eficaz para demostrar la efectividad del sistema e ilustrar los resultados de su aplicación.

Los estudiantes utilizaron activamente el sistema en la asignatura Petrología I, comparándolo con el sistema NEWPET usado con anterioridad. La introducción de este resultado en las actividades docentes permitió que los estudiantes crearan sus bases de datos de rocas ígneas, extraídas también de la literatura disponible, y realizaran seguidamente el procesamiento analítico y gráfico de esta información. Esto sirvió de punto de partida para la discusión de los resultados obtenidos en relación con los expuestos en los artículos de donde fueron recopilados estos datos. De acuerdo a encuestas realizadas a los estudiantes se pudo comprobar la aceptación superior de este sistema respecto al NEWPET, dadas sus posibilidades y ambiente de trabajo más simples.

Adicionalmente, el sistema fue aplicado al procesamiento de datos petroquímicos provenientes de rocas ígneas y sedimentarias de las regiones occidental y central de Cuba como parte del proyecto de investigación "Evolución geodinámica (paleogeográfica) de Cuba occidental y central entre el Jurásico y el Plioceno", desarrollado por el Departamento de Geología de la Universidad de Pinar del Río, con resultados satisfactorios.

## CONCLUSIONES

La introducción de este sistema en la docencia ha posibilitado fomentar hábitos y habilidades investigativos en los estudiantes de la Carrera de Geología desde la dimensión curricular, reportándoles una herramienta de trabajo de utilidad en su formación profesional e integrándose a su formación informática y de computación. Su introducción en la asignatura Petrología Ígnea permitió demostrar su aceptación por parte de los estudiantes, debido a las potencialidades superiores respecto al sistema NEWPET utilizado con anterioridad.

Este sistema está disponible para cualquier profesor, estudiante o profesional de la geología, interesado en este campo. Con un entrenamiento elemental adquirido en

unas pocas sesiones de trabajo, se logran las habilidades suficientes por parte de los usuarios para el uso efectivo y rutinario de este sistema en el procesamiento de sus propios datos petroquímicos de una manera sencilla y productiva.

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Hollocher, K., 2007. Programa para el cálculo de la norma CIPW:

<http://www.gli.cas.cz/ackerman/page/norm3.xls>.

Price R. C., R. B. Stewart, J. D. Woodhead, I. E. M. Smith, 1999. Petrogenesis of High-K Arc Magmas: Evidence from Egmont Volcano, North Island, New Zealand, *Journal of Petrology*, 40 (1): 167–197.

Raymond, L. A., 2000. Petrology. The Study of Igneous, Sedimentary & Metamorphic Rocks, 2 ed., USA, 719p.

Rollinson, H. R., 1993. Using geochemical data: evaluation, presentation, interpretation, 1 ed. Londres: Longman Group, 351p.

Shannon W. M., C. G. Barnes, M. E. Bickford, 1997. Grenville Magmatism in west Texas: Petrology and Geochemistry of the Red Bluff Granitic Suite. *Journal of Petrology*, 38 (10): 1279–1305.

**Aceptado:** julio 2011

**Publicado:** junio 2012

**DrC. José Francisco Lastra-Rivero.** Universidad de Pinar del Río, Departamento de Geología, Calle Martí No. 270, esq. 27 de Noviembre, Pinar del Río, Cuba. Código Postal 20100. E-mail: [jlastra@geo.upr.edu.cu](mailto:jlastra@geo.upr.edu.cu)