



# Máster en Iniciación a la Investigación en Geología 60336 - Modelización geoquímica

Guía docente para el curso 2012 - 2013

Curso: 1, Semestre: 1, Créditos: 4.0

---

## Información básica

---

### Profesores

- Luis Francisco Auque Sanz lauque@unizar.es

- Maria Pilar Asta Andrés mpasta@unizar.es

### Recomendaciones para cursar esta asignatura

La asignatura está pensada para adquirir una especialización en el uso de los códigos de modelización geoquímica y, por ello, es recomendable que los alumnos posean conocimientos básicos de geoquímica de soluciones acuosas y hayan cursado las asignaturas de la Licenciatura de Geología de "Geología de Suelos" y/o "Geoquímica Aplicada" ofertadas por la Universidad de Zaragoza u otras que proporcionen los conocimientos equivalentes de geoquímica.

Se recomienda al alumno abordar la asignatura con un plan de trabajo continuado, revisando los conocimientos y realizando los ejercicios propuestos con la mayor constancia posible. Para facilitar el aprendizaje, se ofrecen además de las sesiones presenciales, distintas vías académicas de apoyo (tutorías presenciales y atención a distancia por correo electrónico) para resolver las dudas durante el desarrollo de la asignatura o para orientar la realización de los ejercicios y trabajos personales.

### Actividades y fechas clave de la asignatura

Información específica

Las fechas de inicio de la asignatura se harán públicas antes del comienzo del curso académico.

---

## Inicio

---

### Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

**El estudiante, para superar esta asignatura, deberá demostrar los siguientes resultados...**

- 1: Es capaz de analizar un problema geoquímico y determinar la forma más adecuada de resolverlo.
- 2: Plantea con soltura la resolución numérica de distintos tipos de problemas geoquímicos con la ayuda de algunos de los programas de cálculo más habituales e interpretar de forma crítica los resultados obtenidos.

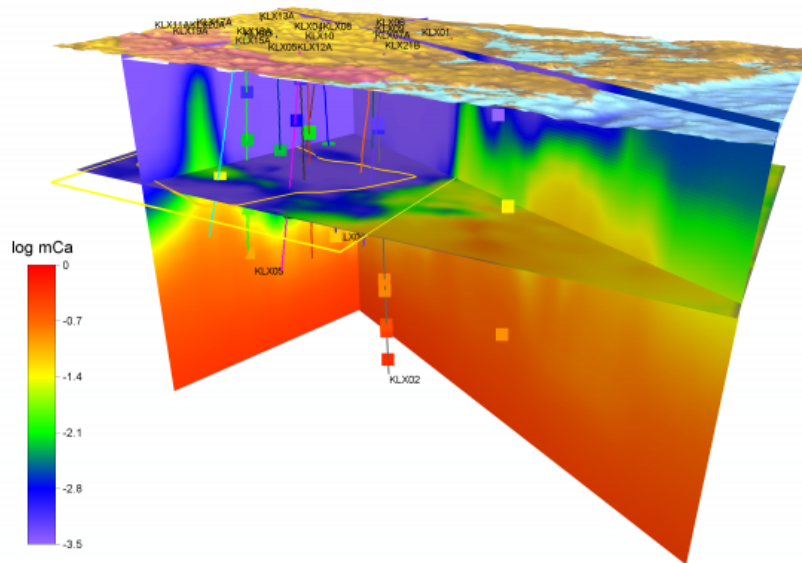
- 3: Es capaz de proponer modelos conceptuales que permitan evaluar el comportamiento futuro de los sistemas estudiados.
- 4: Puede realizar un informe técnico o una publicación científica capaz de transferir adecuadamente los resultados de un estudio geoquímico.

## Introducción

### Breve presentación de la asignatura

La Modelización Geoquímica es una de las ramas de la Geología con mayor potencialidad práctica ya que los procesos geoquímicos son parte integrada de problemáticas asociadas a distintas disciplinas (Petrología, Estratigrafía, Hidrogeología, Edafología, Geomicrobiología, Paleoecología, etc) e incluso a muchas aplicaciones agrícolas y medioambientales. Esta asignatura es recomendable para cualquier alumno que sienta interés por la Geoquímica y, en especial, por la modelización de procesos geoquímicos de interacción agua-roca-gas en diversos tipos de sistemas naturales o modificados por la actividad humana.

La realización del curso capacitará al alumno para seleccionar los datos geoquímicos más relevantes de un sistema real, para plantear diversas hipótesis sobre los procesos que tienen lugar en el mismo, para comprobar la validez de dichas hipótesis con la ayuda de programas de cálculo geoquímico de uso común, para plantear simulaciones predictivas y para interpretar y comunicar los principales resultados obtenidos en los cálculos y simulaciones. De este modo, el alumno ampliará notablemente sus capacidades laborales y conseguirá la formación necesaria para resolver un amplio número de problemas científicos y aplicados.



En esta asignatura se presentarán los principios teóricos básicos de los principales procesos geoquímicos de interacción agua-roca-gas y se profundizará en la aplicación práctica de dichos principios teóricos, a través de diversos programas de cálculo geoquímico, a problemas reales encontrados en diversos tipos de sistemas naturales o afectados por la actividad antrópica.

---

## Contexto y competencias

---

# **Sentido, contexto, relevancia y objetivos generales de la asignatura**

## **La asignatura y sus resultados previstos responden a los siguientes planteamientos y objetivos:**

La investigación geoquímica y, en concreto, la modelización geoquímica, requiere conocer y aplicar con soltura un amplio conjunto de principios teóricos y de metodologías de trabajo. Por ello, el planteamiento general de esta asignatura está encaminado a que los alumnos se familiaricen con los principios teóricos básicos de los principales procesos geoquímicos de interacción agua-roca-gas y profundicen en la aplicación práctica de dichos principios teóricos, a través de diversos programas de cálculo geoquímico, a problemas reales encontrados en diversos tipos de sistemas naturales o afectados por la actividad antrópica. Como parte importante de este objetivo general se pretende además que el alumno perfeccione su capacidad para elaborar y analizar los resultados obtenidos y presentarlos de forma eficaz

## **Contexto y sentido de la asignatura en la titulación**

Esta asignatura es recomendable para cualquier alumno que sienta interés por la Geoquímica y, en especial, por la modelización de procesos geoquímicos de interacción agua-roca-gas en diversos tipos de sistemas naturales (de baja temperatura) o modificados por la actividad humana. En la asignatura se proporcionarán los conocimientos básicos sobre distintos tipos de procesos geoquímicos y su tratamiento mediante técnicas de Modelización Geoquímica a la vez que se presentarán las posibles aplicaciones en la resolución de diversos problemas científicos y medioambientales. La realización del curso capacitará al alumno para seleccionar los datos geoquímicos más relevantes de un sistema real, para plantear diversas hipótesis sobre los procesos de interacción agua-roca-gas que se dan en el mismo, para comprobar la validez de dichas hipótesis con la ayuda de programas de cálculo geoquímico, para plantear simulaciones predictivas y para interpretar y comunicar los principales resultados obtenidos en los cálculos y simulaciones.

## **Al superar la asignatura, el estudiante será más competente para...**

- 1:** Evaluar la calidad de los datos geoquímicos disponibles y plantear metodologías adecuadas de obtención de nuevos datos.
- 2:** Analizar un problema geoquímico y determinar la forma más adecuada de resolverlo.
- 3:** Plantear numéricamente la resolución de distintos tipos de problemas geoquímicos con la ayuda de algunos de los programas de cálculo más habituales e interpretar de forma crítica los resultados obtenidos.
- 4:** Proponer modelos conceptuales de comportamiento que permitan evaluar el comportamiento futuro de los sistemas estudiados.
- 5:** Realizar un informe técnico o una publicación científica capaz de transferir adecuadamente los resultados de un estudio geoquímico.

## **Importancia de los resultados de aprendizaje que se obtienen en la asignatura:**

La Modelización Geoquímica es una de las ramas de la Geología con mayor potencialidad práctica, ya que los procesos geoquímicos son parte integrada de problemáticas asociadas a distintas disciplinas (Petrología, Estratigrafía, Hidrogeología, Edafología, Geomicrobiología, Paleoecología, etc.) e incluso a muchas aplicaciones agrícolas y medioambientales. La realización de esta asignatura y la adquisición de las competencias involucradas permitirán al alumno, por tanto, ampliar sus capacidades laborales y le proporcionarán la formación necesaria para resolver un amplio número de problemas científicos y aplicados. Por otro lado, esta asignatura permitirá al alumno desarrollar su capacidad crítica y de análisis de forma que sea capaz de tomar decisiones debidamente razonadas, lo que supone un indudable complemento a la formación académica.

---

# Evaluación

---

## Actividades de evaluación

**El estudiante deberá demostrar que ha alcanzado los resultados de aprendizaje previstos mediante las siguientes actividades de evaluación**

**1:** Evaluación continua. Esta modalidad de evaluación contemplará tres aspectos.

- En primer lugar la resolución de preguntas en las clases teóricas sobre los temas explicados y de ejercicios o casos prácticos simples en las sesiones de prácticas (25 % de la calificación final).
- En segundo lugar se evaluará la capacidad del alumno para plantear y resolver diversos problemas geoquímicos con la ayuda de programas de cálculo geoquímico y su capacidad crítica de análisis de los resultados obtenidos y de sus implicaciones prácticas. Para ello el alumno elaborará y presentará un informe escrito de cada una de las prácticas guiadas que se realicen. La nota final de esta parte se computará como la media de las calificaciones obtenidas en los informes y supondrá un 25% de la calificación final del estudiante en la asignatura.
- Por último, parte de la calificación se obtendrá a partir de la ejecución de un trabajo individual de carácter práctico que tratará sobre uno de los procesos o sistemas estudiados durante el curso, aplicando para ello los conocimientos adquiridos. Dicho trabajo se presentará en forma de informe escrito, que se calificará entre 0 y 10 y supondrá un 50% de la calificación final del estudiante en la asignatura.

Cada uno de los ejercicios o trabajos evaluados se calificará de 0 a 10, entendiéndose superado con una calificación igual o superior a 5 puntos. No obstante, se considerará la calificación global, obtenida aplicando las proporciones indicadas, como indicador de la consecución en conjunto de los resultados de aprendizaje previstos para esta asignatura.

**2:** Evaluación global. El estudiante que no opte por la evaluación continua, o que no supere la asignatura por este procedimiento, deberá realizar una prueba global que consistirá en dos exámenes. El primero, de carácter teórico, consistirá en la resolución de cuestiones relativas a los distintos temas tratados en la asignatura. En el segundo, de carácter práctico, el alumno deberá resolver varios ejercicios relativos tanto a las prácticas de gabinete como de ordenador realizadas a lo largo de la asignatura. Cada examen será calificado de 0 a 10 entendiéndose superado con una calificación igual o superior a 5 puntos. No obstante, se considerará la calificación global, obtenida aplicando las proporciones indicadas, como indicador de la consecución en conjunto de los resultados de aprendizaje previstos para esta asignatura. Esta prueba se realizará en cada una de las convocatorias a las que tengan derecho los estudiantes, en las fechas asignadas por la Facultad de Ciencias y publicadas en su página Web. La convocatoria especificando la hora y lugar de realización de cada prueba se publicará en el tablón de anuncios del Área de Petrología y Geoquímica del departamento de Ciencias de la Tierra (1ª planta del Edificio C de Ciencias).

## Pruebas para estudiantes no presenciales

En principio esta asignatura está diseñada para estudiantes presenciales. No obstante, en el caso de que hubiera estudiantes no presenciales la evaluación del curso para éstos se realizaría mediante la misma evaluación global que se propone en el punto 2 anterior.

---

## Actividades y recursos

---

## Presentación metodológica general

**El proceso de aprendizaje que se ha diseñado para esta asignatura se basa en lo siguiente:**

El proceso de aprendizaje se ha diseñado para proporcionar a los alumnos la necesaria interrelación entre los conocimientos teóricos y su aplicación práctica para la resolución de problemas reales en distintos tipos de sistemas geoquímicos. De este modo, el alumno desarrollará competencias que le permitirán enfrentarse a distintos tipos de investigación geoquímica pero también a la resolución de problemas técnicos de indudable aplicación laboral fuera del ámbito académico.

El proceso de aprendizaje consta de tres acciones formativas complementarias (punto siguiente) que se corresponden con cada una de las actividades de evaluación planteadas en el apartado de "Actividades de evaluación".

## Actividades de aprendizaje programadas (Se incluye programa)

**El programa que se ofrece al estudiante para ayudarle a lograr los resultados previstos comprende las siguientes actividades...**

**1:** Adquisición de conocimientos básicos sobre procesos geoquímicos de interacción agua-roca-gas y su estudio mediante la realización de cálculos con la ayuda de programas geoquímicos. Dicha acción se llevará a cabo por medio de 20 h de clases teóricas (presenciales) en las que se desarrollará el siguiente programa:

### *Principios Básicos*

I: Tratamiento termodinámico de los sistemas geoquímicos básicos de baja temperatura.

II: Modelización Geoquímica: aproximaciones, tipos de cálculos geoquímicos, bases de datos termodinámicos, incertidumbres

### *Modelización de procesos*

- Disolución-precipitación. Ejemplos.
- Mezclas. Ejemplos
- Evaporación. Ejemplos
- Procesos Redox. Ejemplos
- Procesos de superficie. Ejemplos

### *Aplicaciones*

- A la geoquímica de suelos
- A la contaminación por aguas ácidas
- A la prospección de recursos geotermales
- Al almacenamiento geológico de residuos radiactivos
- Al almacenamiento geológico del CO<sub>2</sub>

**2:** **Prácticas de ordenador**, en las cuales el alumno aplicará los conocimientos adquiridos en la primera actividad formativa. En estas sesiones, desarrolladas durante 20 h, se le proporcionará al estudiante indicaciones para que, de forma autónoma pero bajo supervisión del profesor, plantee y resuelva diferentes problemas geoquímicos con la ayuda de programas de cálculo geoquímico y para que aprenda e evalúe los resultados obtenidos. A partir de las prácticas de gabinete realizadas, cada alumno elaborará un informe escrito para su evaluación. El contenido de las distintas prácticas de gabinete con el ordenador es el siguiente:

I - Simulación de procesos de disolución-precipitación

II - Simulación de procesos de mezcla

III - Simulación de procesos de evaporación

IV - Simulación de procesos redox

V - Simulación de procesos de superficie

VI - Trabajo específico del alumno sobre un caso concreto.

**3:** Realización de un **trabajo individual** sobre uno de los procesos o sistemas estudiados durante el curso, a elección del alumno y aplicando para ello los conocimientos adquiridos.

**4:** Durante la elaboración de los informes de las prácticas de gabinete y del trabajo individual, los estudiantes recibirán ayuda personalizada por parte del profesor mediante tutorías presenciales y correo electrónico.

Además, se recomienda también hacer uso de los recursos no presenciales para el seguimiento de la asignatura, como los incluidos en las páginas web dispuestas a tal efecto y la bibliografía indicada.

## Planificación y calendario

### Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

#### 4 créditos ECTS:

- Horas de teoría: 20
- Horas de prácticas (ordenador): 20
- Horas otros (Trabajo personal y actividades relacionadas): 60
- Total horas: 100

El horario previsto será:

**Sesiones de teoría:** Lunes de 16.00 a 19.00

**Sesiones de prácticas:** Martes de 16.00 a 19.00

Lugar de impartición:

Todas las sesiones se impartirán en el **Seminario 27 del Área de Petrología y Geoquímica** (Planta 1 del Edificio C)

Presentación de trabajos:

Los informes de las prácticas de gabinete se entregarán la semana siguiente a su realización.

El informe final con el trabajo personal deberá entregarse el último día lectivo del primer cuatrimestre.

## Recursos

### Bibliografía

1. Appelo, C.A.J. y Postma, D. (2005), *Geochemistry, Groundwater & Pollution*, Balkema Publishers, 2<sup>nd</sup> Edition. 649 pp; ISBN: 04 1536 4231.
2. Bethke, C. (2008), *Geochemical and Biogeochemical Reaction Modeling Cambridge University Press, 2<sup>nd</sup> Edition, 543 pp.;* ISBN: 978-0-521-87554-7
3. Deutsch, W.J. (1997), *Groundwater Geochemistry: Fundamentals and Applications to Contamination*, Lewis Publishers, Inc., 221 pp; ISBN: 0873713087.
4. Drever, J.I. (1997), *The Geochemistry of Natural Waters: Surface and Groundwater Environments* (3<sup>a</sup> edición), Prentice Hall, 436 pp; ISBN: 0132727900.
5. Faure, G. (1997), *Principles and Applications of Geochemistry (2<sup>nd</sup> Edition)*, Prentice Hall, 626 pp; ISBN: 0023364505.
6. Kehew, A.E. (2001), *Applied Chemical Hydrogeology*, Prentice Hall, 368 pp; ISBN: 0132709279.
7. Langmuir, D. (1996), *Aqueous Environmental Geochemistry*, Prentice Hall, 600 pp; ISBN: 0023674121.
8. Stumm, W. y Morgan, J.J. (1996), *Aquatic Chemistry. Chemical equilibria and rates in natural waters (3<sup>rd</sup> edition)*, John Wiley & Sons; ISBN: 0471511854.
9. Zhu, C. y Anderson, G. (2002), *Environmental Applications of Geochemical Modeling*, Cambridge Univ. Press, 284 pp.; ISBN: 0521005779.

## Referencias bibliográficas de la bibliografía recomendada

- Appelo, C.A.J.. Geochemistry, groundwater and pollution / C.A.J. Appelo , D. Postma. Rotterdam : A. A. Balkema , print. 1999
- Bethke, C.. Geochemical Reaction Modelling: Concepts and Applications. Oxford: University Press,1996

- Drever, James I.. The geochemistry of natural waters / James I. Drever . - 3rd ed. Englewood Cliffs : Prentice Hall, cop. 1997
- Kehew, Alan E.. Applied chemical hydrogeology / Alan E. Kehew. New Jersey : Prentice Hall , cop. 2001.
- Langmuir, Donald.. Aqueous environmental geochemistry / Donald Langmuir. Upper Saddle River, New jersey : Prentice Hall, cop. 1997.
- Parkhurst, D.L.. User's guide to PHREEQC (Versión 2), a computer program for speciation... Science Report WRRIR, 1999
- Stumm, W.. Aquatic Chemistry. Chemical equilibria and rates in natural waters. - 3rd. ed. New York: Wiley & Sons, 1996
- Zhu, Chen.. Environmental applications of geochemical modeling / Chen Zhu and Greg Anderson. Cambridge : Cambridge University Press , 2002.