

Análisis Visual en Geología

M. Luján Ganuza⁽¹⁾, Gabriela Ferracutti^(2,3), María Florencia Gargiulo^(2,3),
Silvia M. Castro⁽¹⁾, Krešimir Matković⁽⁴⁾, Ernesto A. Bjerg^(2,3), Eduard Gröller⁽⁵⁾

mlg@cs.uns.edu.ar, gferrac@uns.edu.ar, florenciagargiulo@gmail.com, smc@cs.uns.edu.ar,
Matkovic@vrvis.at, ebjerg@ingeosur-conicet.gob.ar, groeller@cg.tuwien.ac.at

⁽¹⁾ Laboratorio de Investigación y Desarrollo en Visualización y Computación Gráfica (VyGLab)
Departamento de Ciencias e Ingeniería de la Computación, Universidad Nacional del Sur

⁽²⁾ Departamento de Geología, Universidad Nacional del Sur.
Avda. Alem 1253 - Bahía Blanca, Argentina

⁽³⁾ INGEOSUR, CONICET-CCT Bahía Blanca, Argentina

⁽⁴⁾ VRVis Zentrum für Virtual Reality und Visualisierung Forschungs-GmbH,
Donau-City-Strasse 1, 1220 Vienna, Austria

⁽⁵⁾ Technische Universität Wien, Institut für Computergraphik und Algorithmen,
Favoritenstrasse 9-11 / E186, A-1040 Vienna, Austria

Resumen

Los geólogos usualmente trabajan con rocas que tienen edades oscilando entre pocos a miles de millones de años. Uno de los objetivos es tratar de reconstruir los ambientes geológicos donde se formaron las rocas y la sucesión de eventos que las afectaron desde su formación a fin de comprender la evolución geológica de la Tierra, identificar regiones donde se localizan depósitos minerales de interés económico, recursos de combustibles, etc. Para alcanzar estos objetivos, recolectan información y muestras de rocas y minerales en el campo, En particular estos últimos son analizados en laboratorio con instrumentos para obtener datos geoquímicos de minerales, como por ejemplo de los que conforman el grupo del espinelo. Dada la gran cantidad de datos generados, los científicos se ven obligados a analizar grandes volúmenes de información para arribar a conclusiones basadas en datos objetivos.

El flujo del trabajo de análisis de los geólogos incluye el uso tedioso de varias herramientas y métodos manuales relativamente complejos y propensos a

errores para comparar diferentes gráficos y tablas. Para mejorarlo, los integrantes de este proyecto desarrollaron un *framework* de análisis visual de datos geológicos. Una realimentación muy positiva de los expertos del dominio sobre éste y el gran potencial de mejoramiento motiva esta línea de trabajo.

Palabras clave: *Análisis Visual. Visualización en Geología, Visualización en Ciencias Naturales.*

Contexto

Este trabajo continúa la línea presentada en [8] y se lleva a cabo con investigadores del Laboratorio de Investigación y Desarrollo en Visualización y Computación Gráfica (VyGLab) del Dpto. de Ciencias e Ingeniería de la Computación Universidad Nacional del Sur (UNS), el Dpto. de Geología de la UNS y el INGEOSUR CCT-CONICET, Bahía Blanca, Argentina y el VRVis Research Center y la Vienna University of Technology, Viena, Austria.

La línea de Investigación presentada está inserta en los proyectos acreditados

Representaciones Visuales e Interacciones para el Análisis Visual de Grandes Conjuntos de Datos (24/N028)) y *Rocas máficas-ultramáficas: petrología, geoquímica y estructura (24/H108)*, dirigidos respectivamente por la Dra. Silvia Castro y el Dr. Ernesto Bjerg, ambos financiados por la Secretaría General de Ciencia y Tecnología de la Universidad Nacional del Sur.

Introducción

En esta línea de Investigación se está trabajando en colaboración con investigadores de Geología para avanzar en el conocimiento sobre la visualización de datos en Ciencias de la Tierra.

Una vez que los geólogos recolectan información y muestras de minerales y rocas en el campo, estas muestras son analizadas para obtener datos geoquímicos. En el caso particular de los minerales del grupo del espinelo, de cada muestra de espinelo se miden 11 elementos químicos mayoritarios y a partir de estos se obtienen 22 miembros finales, que son combinaciones de elementos químicos mayoritarios.

Los instrumentos de análisis utilizados generan gran cantidad de datos enfrentando a los científicos a la ardua tarea de analizar e interpretar grandes volúmenes de datos multidimensionales.

Líneas de Investigación, Desarrollo e Innovación

Los minerales del grupo del espinelo son óxidos constituyentes de las rocas ígneas y metamórficas. Éstos proveen información muy útil relacionada con el ambiente geológico en el cual las rocas que los contienen se formaron. Esto es debido tanto al hecho de que son muy sensibles a las condiciones que

prevalecieron durante la cristalización de las rocas ya que además son muy resistentes a ser modificados químicamente luego de su cristalización. Por lo tanto constituyen excelentes indicadores de los ambientes geológicos así como herramientas de exploración muy valiosas en la búsqueda de depósitos minerales de interés económico.

El estudio de un conjunto adecuado de rocas, especialmente de aquellas con minerales del grupo del espinelo permite reconstruir el ambiente tectónico en el cual se formaron las rocas y su historia evolutiva desde su formación hasta el presente. Es por esto que es esencial contar con indicadores, tales como los minerales del grupo del espinelo, cuya composición química permita proveer evidencia acerca del ambiente tectónico en el que se formaron determinadas rocas. La determinación del ambiente tectónico ayuda a entender la evolución geológica de la Tierra y también a localizar, por ejemplo, otros tipos de depósitos minerales.

Para llevar a cabo estas tareas los geólogos usan, entre otros criterios, la composición química de los minerales del grupo del espinelo. Ésta permite a los geólogos definir campos composicionales de acuerdo a los ambientes tectónicos en los cuales se desarrolló el grupo del espinelo.

Barnes and Roeder [1] compilaron en una base de datos más de 26.000 análisis de espinelos correspondientes a rocas ígneas y metamórficas. Esta base de datos se utiliza para delinear y construir campos composicionales característicos (o patrones) de espinelos de varios ambientes tectónicos y composiciones del magma a partir del cual se formaron.

Manipular y analizar grandes conjuntos de datos de composiciones de espinelos

es un proceso que consume muchísimo tiempo y es proclive a errores, dado que cada mineral está compuesto por varios elementos químicos cuyas proporciones, además, están influenciadas por factores geológicos, mineralógicos, cristalográficos y químicos.

Por lo tanto, surge la necesidad de visualizar los datos de modo tal que sea posible y sencillo compararlos y también integrar distintos conjuntos de datos [6].

En este contexto, un problema importante es obtener una representación adecuada de composiciones minerales de modo tal que distintos grupos de muestras puedan compararse intuitivamente contra un determinado patrón que caracteriza el ambiente tectónico en el cual fueron formados.

Los geólogos usan a menudo diagramas estáticos para soportar el análisis de sus datos. Los datos de los espinelos tienen ciertas características específicas; cada muestra de espinelo tiene asociada varios atributos numéricos. Estos datos se representan usualmente en gráficos específicos. La mayoría de los correspondientes a composiciones de espinelos se plasma en espacios prismáticos que proveen diagramas 3D [9] y que permiten la visualización de proyecciones de los conjuntos de datos sobre las caras de los prismas.

Estos espacios prismáticos se han generalizado a pesar de que son difíciles de dibujar a mano. Por lo tanto, los geólogos utilizan principalmente gráficos binarios y ternarios para estudiar las proyecciones del prisma y evaluar las correlaciones entre los elementos químicos y/o los óxidos. El flujo de trabajo actual de análisis de los geólogos requiere que éstos trabajen con diferentes aplicaciones para producir dichos gráficos que además, usualmente, no son

interactivas. Además, el uso de varias herramientas requiere de métodos manuales relativamente complejos y propensos a errores para comparar diferentes gráficos y tablas. Sin duda, el análisis visual interactivo puede ayudar a mejorar significativamente la eficiencia ([3], [13]).

Esto, en su conjunto, motivó que los integrantes de este proyecto desarrollaran varias técnicas y herramientas de análisis visual interactivo de datos geológicos ([6], [7]). Una realimentación muy positiva de los expertos del dominio sobre éste y un gran potencial de mejoramiento motiva seguir trabajando en esta línea para progresar en el diseño de soluciones de análisis visual en este campo de aplicación.

Resultados y Objetivos

Ya se mencionó que si bien es más conveniente la graficación de los espinelos en espacios prismáticos [9], los científicos utilizan mayormente diagramas binarios y ternarios para evaluar las correlaciones de los elementos químicos o de los óxidos, debido a la ausencia de herramientas para la generación de gráficos 3D en espacios prismáticos. Además, dada la falta de una aplicación que integre la mayoría de los diagramas comúnmente utilizados para analizar los minerales del grupo del espinelo, los científicos trabajan típicamente con diferentes aplicaciones como por ejemplo MinCalc [2], IGPet [4], GCDkit [9] y MinPet [11], desarrollados para una mejor representación y análisis de los datos. Estos les permiten generar diagramas específicos pero que usualmente no son interactivos. En 1990 Macintosh [16] desarrolló dos paquetes para graficar análisis de espinelos en dos prismas

composicionales específicos pero las únicas interacciones incluidas eran agrandar y achicar dichos prismas y elegir el punto de visión; adicionalmente se podían distinguir hasta cinco grupos diferentes de análisis de espinelos por medio de diferentes símbolos. En 2012, presentamos la aplicación SpinelViz [6] que consiste en un visor interactivo 3D para graficar y explorar el prisma de los espinelos y que permite visualizar diferentes conjuntos de datos a la vez. SpinelViz provee la capacidad de manipular, graficar y proyectar datos en 2D y 3D que ayuda al usuario a comprender mejor los datos.

Posteriormente, desarrollamos el Spinel Explorer [7] que integra los gráficos específicos dedicados a la exploración de los espinelos con otros gráficos convencionales en un marco de análisis visual interactivo. Si bien hay disponibles una gran variedad de sistemas de visualización interactivos; algunos son específicos para determinados dominios y otros son herramientas de propósito general como, por ejemplo, Xmdv Tool [12], Polaris [14] y GGobi [15]. En lo que respecta a trabajar con datos minerales del grupo de los espinelos, ninguna de las herramientas existentes, específicas o de propósito general, pueden emplearse directamente. De acuerdo a nuestro conocimiento del estado del arte, ninguna de estas herramientas soporta, por ejemplo, vistas de diagramas triangulares y los prismas de los espinelos, dado que estos gráficos son sumamente específicos. Además, el Spinel Explorer soporta brushing iterativo compuesto. Muchos investigadores explotan el *brushing* tal como fue originalmente descrito por Martin y Ward [10]. Nosotros pusimos especial atención al diseño de las interacciones para las nuevas vistas (gráficos triangulares y prismas). El

brushing en las nuevas vistas fue diseñado para que soporte la semántica de los datos [5] por lo cual agregamos *brushing* triangular. El Spinel Explorer utiliza los principios básicos del análisis visual y las múltiples vistas coordinadas.

Continuando en la línea de los trabajos realizados hasta el momento ([6], [7], [8]), el objetivo general es continuar trabajando en colaboración con investigadores de Geología para avanzar en el conocimiento sobre el análisis visual de datos en Ciencias de la Tierra; esto es:

- Contribuir al desarrollo de tecnología de base para generar visualizaciones que ayuden a científicos de Ciencias de la Tierra en la determinación del ambiente geológico en el que se formaron determinadas rocas y sus minerales constituyentes y las características de los procesos que posteriormente los afectaron.
- Desarrollar herramientas de apoyo a la prospección de recursos naturales basadas en el análisis visual.
- Fortalecer la colaboración entre integrantes del proyecto y crear oportunidades constructivas de interacción entre los investigadores que sean de mutuo beneficio científico y práctico.

Formación de Recursos Humanos

Los autores de esta contribución trabajan desde hace varios años en la búsqueda de herramientas visuales a ser aplicadas en el campo de las Ciencias Geológicas.

Tesis de Doctorado en Ciencias de la Computación (en desarrollo)

- María Luján Ganuza. Tema: *Servicios Web en Visualización*. Dirección: Dra. Silvia Castro.

Cursos de Pre/Post grado relacionados con el tema de la línea de Investigación

dictados por integrantes del Grupo de Trabajo

Cursos de Pregrado

- *Visualización*. Materia optativa para los estudiantes de la Licenciatura en Cs. de la Computación y de la Ingeniería en Sistemas de Computación. UNS
- *Procesamiento de Imágenes*. Materia optativa para los estudiantes de la Ingeniería en Sistemas de Computación. UNS

Cursos de Posgrado

- *Procesamiento y Análisis de Imágenes*. Silvia Castro, Dpto de Cs e Ing de la Computación, UNS.

Referencias

- [1] Barnes, S.J., Roeder, P.L. *The range of spinel compositions in terrestrial mafic and ultramafic rocks*. Journal of Petrology, 42(12):2279–2302, 2001.
- [2] Bernhardt, H.J. *Mincalc-v5, a software tool for mineral analyses data processing*. Acta Microscopica, 16:43–44, 2007.
- [3] Card, S., Mackinlay, J., Shneiderman, B., Readings in Information Visualization – Using Vision to Think, M. K., 1999.
- [4] Carr, M. *Igpet for windows*. Terra Softa Inc., Somerset, NJ, 2002.
- [5] Escarza, S., Larrea, M., Urribarri, D., Martig, S., Castro, S., *Integrating Semantics in the Visualization Process*. En Scientific Visualization: Interactions, Features, Metaphors, Dagstuhl FOLLOW-UPS Series Hans Hagen Ed., Schloss Dagstuhl-Leibniz-Zentrum für Informatik. Dagstuhl, Alemania, 2, 92-102, Vol2, 2011.
- [6] Ganuza, M.L., Castro, S.M., Ferracutti, G., Bjerg, E., Martig, S.R. *SpinelViz: An interactive 3d application for visualizing spinel group minerals*. Computers & Geosciences, 48(0):50 – 56, 2012.
- [7] Ganuza, M.L., Ferracutti, G., Gargiulo, M.F., Castro, S., Bjerg, E., Gröller, E.,

Matković, K., *The Spinel Explorer - Interactive Visual Analysis of Spinel Group Minerals*, IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics 20, 12 (2014), 1913-1922.

[8] Ganuza, L., Larrea, M., Martig, S., Castro, S., Bjerg, E., Ferracutti, G., *Visualización en Ciencias Geológicas*, WICC 2012.

[9] Janouek, V., Farrow, C.M., Erban, V. *Interpretation of whole-rock geochemical data in igneous geochemistry: Introducing geochemical data toolkit (gcdkit)*. Journal of Petrology, 47(6):1255–1259, 2006.

[10] Martin, A., Ward, M. *High dimensional brushing for interactive exploration of multivariate data*. In Visualization, 1995. Visualization '95. Proceedings., IEEE Conference on, pages 271–, Oct 1995.

[11] Richard, L. *Minpet*. Software program, MinPet Geological Software, 294, 1997.

[12] Rundensteiner, E.A., Ward, M.O., Xie, Z., Cui, Q., Wad, C.V., Yang, D., Huang, S. *Xmdvtoolq: Quality-aware interactive data exploration*. In Proceedings of the 2007 ACM SIGMOD International Conference on Management of Data, SIGMOD '07, pages 1109–1112, New York, NY, USA, 2007.

[13] Shneiderman, B., *Inventing discovery tools: Combining information visualization with data mining*. Information Visualization, 1(1):5–12, Mar.2002.

[14] Stolte, C., Hanrahan, P. *Polaris: A system for query, analysis and visualization of multi-dimensional relational databases*. IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, 8:52–65, 2002.

[15] Swayne, D.F., Lang, D.T., Buja, A., Cook, D. *Ggobi: Evolving from xgobi into an extensible framework for interactive data visualization*. Comput. Stat. Data Anal., 43(4):423–444, Aug. 2003.

[16] Williams, K.L., Rock, N. M. S., Carroll, G.W. *Spinel and spinelab: Macintosh programs to plot spinel analyses in the three-dimensional oxidized (magnetite) and reduced (ulvospinel) prisms*. American Mineralogist, 75:1428–1430, 1990.