



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
ENERGÍA – FUENTES RENOVABLES (GEOTERMIA)

EVALUACIÓN Y DESARROLLO DE GEOTERMÓMETROS DE GASES PARA LA
PREDICCIÓN DE TEMPERATURAS DE SISTEMAS GEOTÉRMICOS

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN INGENIERÍA

PRESENTA:
CHRISTIAN GUADALUPE GARCÍA LÓPEZ

TUTORES PRINCIPALES

DR. EDGAR R. SANTOYO GUTIÉRREZ - INSTITUTO DE ENERGÍAS RENOVABLES
DR. PANDARINATH KAILASA – INSTITUTO DE ENERGÍAS RENOVABLES

COMITÉ TUTOR

DR. OCTAVIO GARCÍA VALLADARES – INSTITUTO DE ENERGÍAS RENOVABLES
DR. JORGE ALBERTO ANDAVERDE ARREDONDO – UNIVERSIDAD VERACRUZANA
DR. ALFONSO ARAGÓN AGUILAR – INSTITUTO DE INVESTIGACIONES ELÉCTRICAS

TEMIXCO, MORELOS, JUNIO 2018



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

Presidente: DR. OCTAVIO GARCÍA VALLADARES
Secretario: DR. JORGE ALBERTO ANDAVERDE ARREDONDO
Vocal: DR. EDGAR ROLANDO SANTOYO GUTIÉRREZ
1^{er.} Suplente: DR. PANDARINATH KAILASA
2^{do} Suplente: DR. ALFONSO ARAGÓN AGUILAR

Lugar o lugares donde se realizó la tesis:

INSTITUTO DE ENERGÍAS RENOVABLES
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

TUTORES DE TESIS:

DR. EDGAR R. SANTOYO GUTIÉRREZ

DR. PANDARINATH KAILASA

FIRMA

FIRMA

ÍNDICE GENERAL

	Página
ÍNDICE DE FIGURAS	4
ÍNDICE DE TABLAS	5
RESUMEN	6
ABSTRACT	7
CAPÍTULO 1 INTRODUCCIÓN	8
1.1 Generalidades de la Energía Geotérmica.....	8
1.2 Justificación del proyecto doctoral	12
1.3 Objetivos de la tesis	14
1.4 Estructura general de la tesis	14
CAPÍTULO 2 DETERMINACIÓN DE LA TEMPERATURA DE YACIMIENTOS GEOTÉRMICOS	16
2.1 Introducción.....	16
2.2 Herramientas de medición física	17
2.2.1 Dispositivos analógicos	18
2.2.2 Dispositivos digitales.....	18
2.2.3 Dispositivos de fibra óptica	19
2.3 Herramientas de predicción	19
2.3.1 Simuladores numéricos.....	19
2.3.2 Inclusiones fluidas	20
2.3.3 Geotermómetros químicos.....	21
2.3.4 Geotermómetros mineralógicos.....	31
CAPÍTULO 3 FUNDAMENTOS GENERALES DE REDES NEURONALES ARTIFICIALES Y GEOQUIMIOMETRÍA	33
3.1 Redes Neuronales Artificiales (RNA)	33
3.1.1 Definición de red neuronal artificial	34
3.1.2 Conceptos básicos	36
3.1.3 Ventajas de las RNA	38
3.1.4 Aplicaciones documentadas en estudios geocientíficos.....	39
3.2 Geoquimiometría.....	43
3.2.1 Medidas de tendencia central y dispersión.....	43
3.2.2 Pruebas estadísticas F y <i>t</i> -student.....	46
CAPÍTULO 4 FUNDAMENTOS GENERALES DE GEOTERMOMETRÍA DE GASES	50
4.1 Introducción.....	50
4.2 Origen de los geotermómetros químicos.....	50
4.3 Reacciones y ecuaciones propuestas de geotermometría de gases.....	53

CAPÍTULO 5 EVALUACIÓN GEOQUIMIOMÉTRICA DE LA EFICIENCIA DE LOS GEOTERMÓMETROS	62
5.1 Estudios previos.....	63
5.2 Metodología.....	64
5.3 Resultados.....	73
5.3.1 Resultados: Geotermómetros de solutos.....	73
5.3.2 Resultados: Geotermómetros de gases	87
5.3.3 Resultados: Comparación	100
5.4 Conclusiones.....	101
CAPÍTULO 6 NUEVOS GEOTERMÓMETROS DE GASES MEDIANTE TÉCNICAS DE GEOQUIMIOMETRÍA Y REDES NEURONALES ARTIFICIALES	103
6.1 Introducción.....	103
6.2 Metodología de trabajo.....	104
6.2.1 Etapa 1: Creación y compilación de la base de datos BDGGeoM ₁	106
6.2.2 Etapa 2: Selección de arquitecturas básicas de RNA	108
6.2.3 Etapa 3: Desarrollo de ecuaciones geotermométricas de gases.....	111
6.2.4 Etapa 4: Análisis comparativo entre las eficiencias de predicción de los nuevos geotermómetros RNA y geotermómetros reportados en la literatura mundial	114
6.3 Resultados y discusión	115
6.3.1 Etapa 1: Creación y compilación de la base de datos BDGGeoM ₁	115
6.3.2 Etapa 2: Selección de arquitecturas básicas de RNA	116
6.3.3 Etapa 3: Desarrollo de ecuaciones geotermométricas de gases.....	118
6.3.4 Etapa 4: Análisis comparativo entre las eficiencias de predicción de los nuevos geotermómetros RNA y geotermómetros reportados en la literatura mundial	123
6.4 Conclusiones.....	126
Recomendaciones	128
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	129

ÍNDICE DE FIGURAS

	Página
Fig. 1 Capacidad mundial instalada en 2015	9
Fig. 2 Comparación de los variación de los usos directos para los años 1995, 2000, 2005, 2010 y 2015	10
Fig. 3 Modelo general de una red neuronal	35
Fig. 4 Detalles de un modelo de red neuronal	36
Fig. 5 Principales funciones de activación	37
Fig. 6 Porcentajes de éxito de los geotermómetros de Na/K aplicados en los campos geotérmicos estudiados.....	75
Fig. 7 Geotermómetros de Na/K más exitosos prediciendo la temperatura de yacimiento de los sistemas geotérmicos estudiados. Las figuras 7a-7d representan las temperaturas de yacimiento estimadas por los geotermómetros de soluto TNKFT73 vs BHT, TNKF79 vs BHT, TNKT80 vs BHT, TNKDSR08 vs BHT, respectivamente	85
Fig. 8 Porcentajes de éxito de los geotermómetros de gases aplicados en los campos geotérmicos estudiados.....	88
Fig. 9 Geotermómetros de gases más exitosos prediciendo la temperatura de yacimiento de los sistemas geotérmicos estudiados.....	93
Fig. 10 Metodología geoquimiométrica utilizada para el desarrollo de nuevas ecuaciones geotermométricas de gases	105
Fig. 11 Comparación entre los valores medidos en campo y los calculados con los modelos de red neuronal artificial N=536.....	119

ÍNDICE DE TABLAS

	Página
Tabla 1 Lista de geotermómetros de solutos existentes	24
Tabla 2 Lista de geotermómetros de gases existentes	29
Tabla 3 Base de datos usada para la aplicación de los geotermómetros	67
Tabla 4 Comparación de las temperaturas de yacimiento estimadas usando diferentes geotermómetros de Na/K con la temperatura de fondo de pozo medida (BHT)...	76
Tabla 5 Parámetros estadísticos de las temperaturas estimadas por geotermómetros de Na/K y BHT, y grupos de temperaturas estimadas por geotermómetros, basados en las pruebas F y <i>t</i> de student.....	80
Tabla 6 Resumen de los resultados obtenidos con la geotermometría de Na/K para los campos geotérmicos estudiados	86
Tabla 7 Comparación de las temperaturas de yacimiento estimadas usando diferentes geotermómetros de gases con la temperatura de fondo de pozo medida (BHT)...	90
Tabla 8 Parámetros estadísticos de las temperaturas estimadas por geotermómetros de gases y BHT, y grupos de temperaturas estimadas por geotermómetros, basados en las pruebas F y <i>t</i> de student.....	94
Tabla 9 Resumen de los resultados obtenidos con la geotermometría de gases para los campos geotérmicos estudiados	99
Tabla 10 Base de datos externa	113
Tabla 11 Parámetros estadísticos para la evaluación de las diferencias entre los datos medidos y los datos simulados	115
Tabla 12 Distribución estadística de las variables de entrada y salida usadas para el entrenamiento de la RNA.....	116
Tabla 13 Análisis de las diversas arquitecturas	120
Tabla 14 Coeficientes de pesos y bias obtenidos mediante el modelo RNA ₁	123
Tabla 15 Coeficientes de pesos y bias obtenidos mediante el modelo RNA ₂	124
Tabla 16 Porcentajes de contribución de los gases (entradas) sobre la temperatura estimada por medio de las RNA (salida).....	124
Tabla 17 Temperaturas estimadas con las dos nuevas ecuaciones geotermométricas y estimación de errores.....	126

RESUMEN

Este trabajo de tesis presenta un estudio geoquimiométrico - cuantitativo para evaluar la eficiencia de algunos geotermómetros de gases existentes. Así mismo presenta el desarrollo, mediante la herramienta computacional de red neuronal artificial, de dos nuevas ecuaciones geotermométricas de gases aplicables en campos geotérmicos del mundo.

Se estimaron las temperaturas de yacimiento de diez sistemas geotérmicos del mundo aplicando 13 geotermómetros de soluto, específicamente Na/K, y 21 geotermómetros de gases. Las temperaturas predichas fueron evaluadas y comparadas, usando técnicas geoquimiométricas, con las temperaturas de fondo de pozo medidas. Los geotermómetros de Na/K son más exitosos que los geotermómetros de gases prediciendo temperaturas de yacimiento confiables en sistemas de líquido dominante. Se observó una baja eficiencia sistemática de los geotermómetros de Na/K para predecir temperaturas confiables en sistemas de vapor dominante. Por otro lado, los geotermómetros de gases fueron más útiles para predecir temperaturas en sistemas geotérmicos de vapor dominante y de líquido dominante de alta temperatura. En general, los geotermómetros de gases muestran baja eficiencia en la predicción para los campos geotérmicos en los cuales los geotermómetros de Na/K muestran una alta eficiencia y viceversa. Las temperaturas de yacimiento predichas por geotermómetros de gases, en general, muestran más dispersión que aquellas inferidas por geotermómetros de Na/K.

Producto de la evaluación, se detectaron diferencias significativas entre las temperaturas predichas con los geotermómetros de gases, razón por la cual la parte complementaria de este proyecto doctoral se orientó al desarrollo de 2 ecuaciones geotermométricas de gases que mejoren la capacidad de predicción de las ecuaciones existentes. Con este fin, se utilizaron las redes neuronales artificiales para el desarrollo de las nuevas ecuaciones. Las cuales al ser aplicadas en campos geotérmicos que no participaron en el entrenamiento muestran un buen desempeño.

ABSTRACT

This thesis presents a geochemical - quantitative study for the evaluation of the efficiency of some existing gas geothermometers. It also presents the development, through the computational tool of artificial neural red, of two new gas geothermometric equations applicable in geothermal fields of the world.

The generation temperatures of ten geothermal systems in the world were estimated by applying 13 geothermometers of ease, specifically Na / K, and 21 geothermometers of gases. The temperatures were evaluated and compared, using geochemical techniques, with the measured downhole temperatures. Na / K geothermometers are more successful than gas geothermometers that predict reliable reservoir temperatures in dominant liquid systems. A low systematic efficiency of Na / K geotherms was observed to predict temperatures in dominant steam systems. On the other hand, gas geotherms were more useful for predicting temperatures in dominant and high temperature geothermal steam systems. In general, the geothermometers of gases show low efficiency in the prediction for the geothermal fields in which the geotherms of Na / K show a high efficiency and vice versa. The reservoir temperatures predicted by gas geothermometers, in general, show more dispersion than those inferred by Na / K geothermometers.

Product of the evaluation, the differences between the temperatures predicted with the gas parameters, reason for which the complementary part of this doctoral project was oriented to the development of 2 geothermal gas equations that improve the predictive capacity of the existing equations. To this end, artificial neural networks were used for the development of the new equations. Which when applied in geothermal fields that, do not participate in the training, show a good performance.

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

1.1 Generalidades de la Energía Geotérmica

Entre las manifestaciones físicas de la existencia de calor dentro de la Tierra están las erupciones volcánicas, las fumarolas, los géiseres, los manantiales termales, entre otros. Geotermia se refiere a la energía térmica almacenada en el interior de la Tierra producida principalmente por el decaimiento radiactivo de isótopos (Santoyo & Barragán, 2010). Aunque actualmente se utiliza la geotermia para referirse a la energía aprovechable en la generación de electricidad, el calor proveniente de nuestro planeta se ha empleado desde la antigüedad hasta nuestros días con otros usos directos, tales como la balneología, producción y secado de alimentos, la calefacción de espacios, el acondicionamiento térmico de edificios mediante bombas de calor, entre muchas otras aplicaciones (Cataldi et al., 1999).

La geotermia es una energía alterna a los combustibles fósiles e inocua con el medio ambiente. El vapor de agua utilizado para la generación geotermoeléctrica provee una fuente renovable de energía más limpia en comparación con los combustibles fósiles no renovables (carbón, petróleo y gas natural) usados en otro tipo de plantas de potencia (p. ej., termoeléctricas, carboeléctricas).

La geotermia puede emplearse en la generación de electricidad y en otros usos directos (Lund & Boyd, 2016). En México, el aprovechamiento de los recursos geotérmicos ha sido principalmente encausado a la generación de energía eléctrica. Sin embargo a nivel mundial existen otros usos.

Generación de electricidad: La capacidad mundial instalada actual (2015) es de 12,729 MW, logrando un incremento del 17% con respecto al año 2010, y se espera que para el 2020 alcance aproximadamente los 21,443 MW (Bertani, 2016). En la Figura 1 se presenta un mapa mundial con la capacidad instalada de los países que actualmente generan electricidad por

medio de los recursos geotérmicos. Hoy en día, se tienen operando centrales geotermoeléctricas en, al menos 24 países, y nuevos proyectos de generación se encuentran en fase de construcción o gestación (Rybach, 2014).

La tecnología geotermoeléctrica desarrollada, si bien ha sido asimilada, se ha concentrado en la explotación de los sistemas hidrotermales de alta temperatura ($>200^{\circ}\text{C}$) cuyo origen está asociado con fenómenos tectónicos activos de la Tierra, lo cual explica su limitada disponibilidad en zonas volcánicas (Torres et al., 1993). Yacimientos de vapor y líquido dominante con fluidos de alta temperatura (200°C - 300°C) han sido los sistemas explotados comercialmente para alcanzar la capacidad instalada (Santoyo et al., 2014).

Usos directos: En usos directos (también provenientes del aprovechamiento de los recursos hidrotermales), la capacidad instalada mundial al 2015 fue de 70,885 MWt con un uso de energía de 592,638 TJ/año (164,635 GWh/año), equivalentes a un ahorro de 352 millones de barriles de petróleo por año (Lund & Boyd, 2016). Entre las principales aplicaciones destacan las bombas de calor geotérmicas para calentamiento/enfriamiento de viviendas, el calentamiento de distritos, espacios e invernaderos, la balneología, el calor de uso industrial, entre otros (Figura 2). Estos usos directos se dan cuando las temperaturas de los recursos están entre 50°C y 150°C (Santoyo et al., 2014)

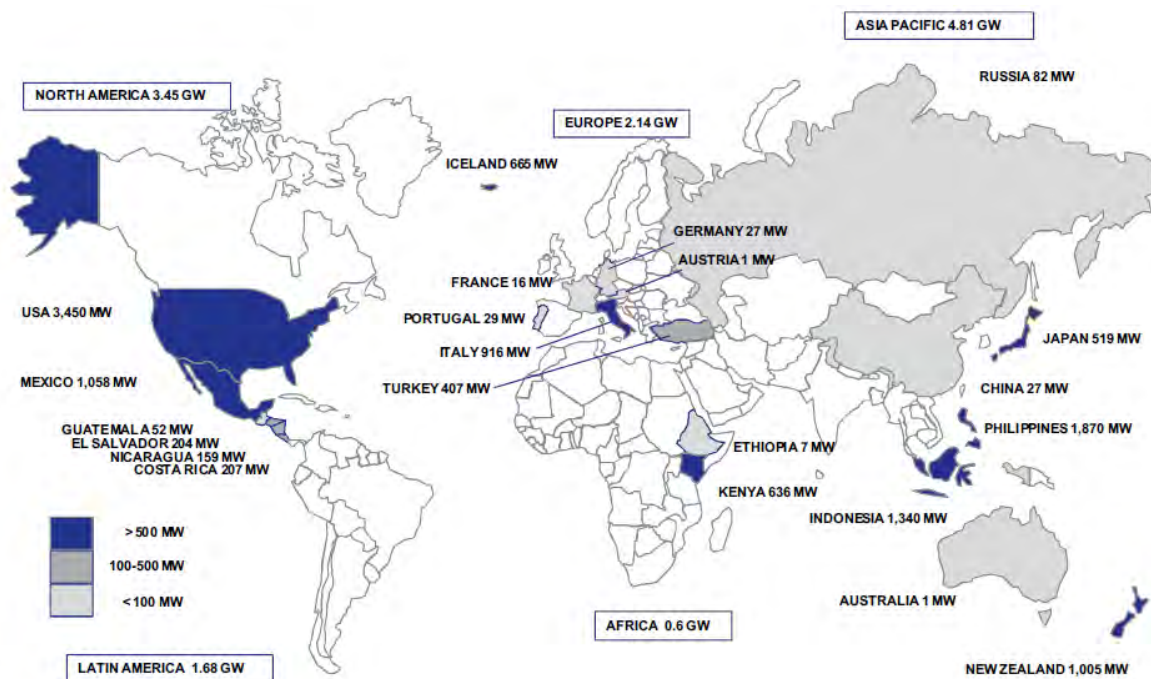


Figura 1. Capacidad mundial instalada en 2015 (Bertani, 2016).

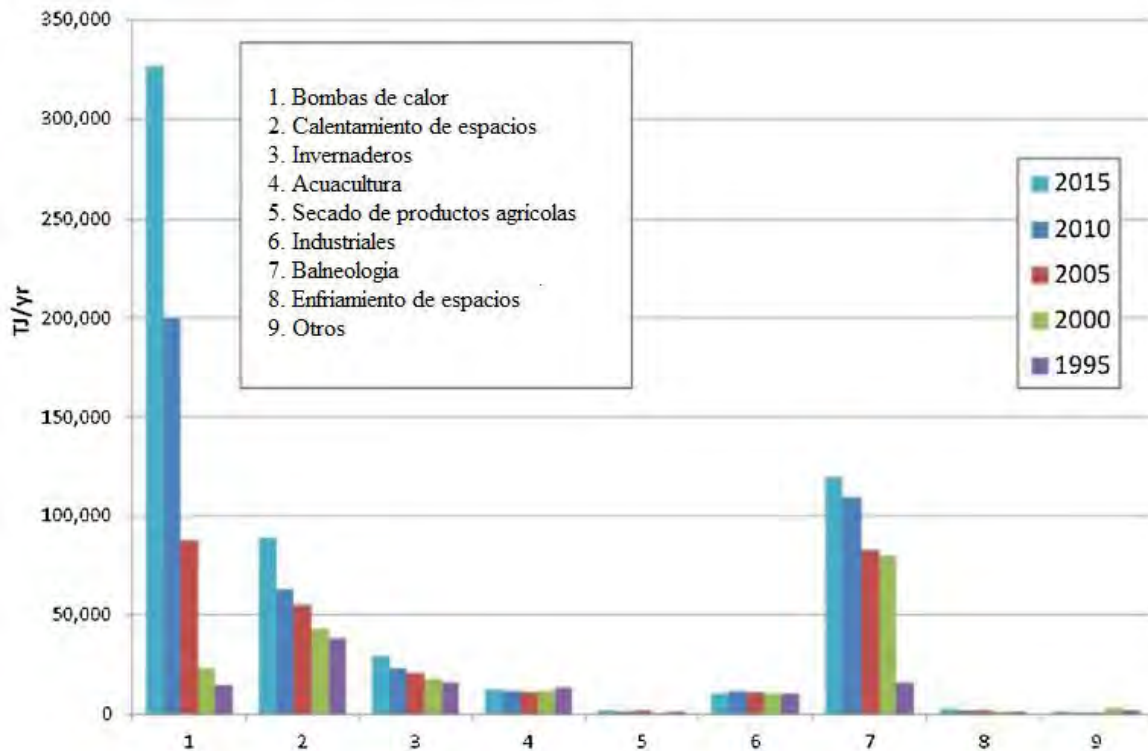


Figura 2. Comparación de la variación de los usos directos para los años 1995, 2000, 2005, 2010 y 2015 (Lund & Boyd, 2016).

Hoy en día, alrededor de 78 países reportan experiencia sobre la utilización de la geotermia y cerca de 90 países han identificado recursos, que podrían desde una perspectiva técnica, satisfacer sus futuras demandas de electricidad y calor de proceso con un beneficio adicional en el ahorro de combustibles primarios (Gehring & Loksha, 2012; Santoyo et al., 2014). Estados Unidos de Norteamérica (EUA), Filipinas, Indonesia, México, y Nueva Zelanda son los países que lideran la producción geotermoeléctrica (Bertani, 2016), mientras que China, EUA, Suecia, Turquía y Alemania lo hacen en usos directos (Lund & Boyd, 2016).

En el escenario de generación de electricidad, México ocupa el cuarto lugar a nivel mundial en la producción de electricidad con una capacidad instalada de 1,058 MWe (capacidad efectiva de 883 MWe: Gutiérrez-Negrín, 2015) a partir del aprovechamiento de sus recursos, por debajo de Estados Unidos, Filipinas e Indonesia (Bertani, 2016). Existen en México cinco campos geotérmicos en producción, Cerro Prieto, Baja California (720 MW), Los Azufres, Michoacán (227.4 MW), Los Humeros, Puebla (93.6 MW), Las Tres Vírgenes, Baja California Sur (10 MW) y Domo San Pedro, Nayarit (10 MW) (Gutiérrez-Negrín, 2015).

Cerro Prieto es uno de los campos geotérmicos más grandes en el mundo y el primero en importancia en México. Los Azufres y Los Humeros se ubican en el Cinturón Volcánico Mexicano, CVM (Suárez et al., 2000), el primero se localiza en el Estado de Michoacán, a 92 km al Este de la ciudad de Morelia (González-Partida et al., 2000), mientras que el segundo en la parte Este-central de México, en la colindancia de los Estados de Puebla y Veracruz. Las Tres Vírgenes es el campo geotérmico más pequeño en extensión y se localiza a 33 km de la ciudad de Santa Rosalía, en el Estado de Baja California, Sur (Verma et al., 2006). Domo San Pedro se localiza en la porción sur del Estado de Nayarit, 20 km al oeste del volcán Ceboruco (Castillo & De la Cruz, 1992).

Estudios prospectivos realizados por la Comisión Federal de Electricidad indican que esta capacidad podría ser incrementada en 200 MWe adicionales mediante la construcción de las nuevas plantas: Cerro Prieto V (100 MWe), Los Humeros II (25 MWe) y Cerritos Colorados, Jalisco (75 MWe): Gutiérrez-Negrín et al., 2010. Por otro lado, estudios de exploración han identificado nuevas zonas promisorias con un potencial probable de ~500 MWe, entre las cuales destacan Tulechek y Ejido de León en Baja California, Piedras de Lumbre en Chihuahua, Acoculco en Puebla, Lago de Cuitzeo en Michoacán y el Volcán Chichonal en Chiapas (Flores-Armenta, 2013): Santoyo et al., 2014.

Hoy en día, la geotermia representa entre un 0.3 y 0.4% del total de la generación eléctrica mundial, aún cuando sólo se explotan los sistemas hidrotermales, que constituyen una fracción muy pequeña de la inmensa cantidad de energía disponible en la Tierra (Santoyo & Barragán, 2010).

Estudios de prospección energética al 2050 indican que la generación geotermoeléctrica mundial alcanzará una capacidad instalada entre 140 y 160 GWe con una producción entre los 1,100 y 1,266 TWh/año (Goldstein et al., 2013; Rybach, 2014).

Por otro lado, la prospección geotérmica en México es alentadora, Ordaz-Méndez et al. (2011) con base en un inventario de 1,300 manifestaciones termales (de alta-mediana-baja entalpia) y estudios de simulación predicen reservas de ~9,686 MWe (probadas: 186 MWe adicionales; probables: 2,077 MWe; y posibles: 7,422.88 MWe).

Gutiérrez-Negrín (2015) por su parte, realizó predicciones de la futura capacidad geotérmica instalada en el país en el 2030, la cual será alrededor de los 4,500 MW, lo que representa un incremento de 3,500 MW sobre la capacidad actual.

En resumen, se tiene reconocido que el potencial de energía geotérmica disponible en varias partes del mundo es muy superior a la cantidad de energía que actualmente se explota, por lo que se pronostica que esta fuente de energía desempeñará un papel muy importante en el portafolio energético futuro de algunos países (Santoyo et al., 2014).

1.2 Justificación del proyecto doctoral

La energía es un factor fundamental para el desarrollo económico y social de los países, por lo tanto, resulta indispensable y oportuno aprovechar todos los recursos energéticos disponibles de manera eficiente y sustentable. El uso de las energías renovables (ER), en particular de la geotermia, está teniendo un papel muy importante en el portafolio energético de muchos países. Se espera que en el 2020, se incremente a nivel mundial la producción de electricidad de 12,729 MW a 21,443 MW a través del aprovechamiento de los recursos geotérmicos provenientes de los sistemas geotérmicos convectivos convencionales (Bertani, 2016). Ante este escenario promisorio, y la posibilidad de enfrentar una posible crisis energética en el futuro, las ER y en particular la geotermia, requerirán de desarrollar las tecnologías para un mejor aprovechamiento rentable de sus recursos (sin riesgos técnicos y económicos), y con procesos eficientes, limpios y sustentables.

El principal recurso de un yacimiento geotérmico es el calor contenido, el cual es extraído del subsuelo por el fluido productor. La tasa de producción es influenciada por la presión, la temperatura, entalpía, permeabilidad y las dimensiones del yacimiento, así como por las propiedades termofísicas del fluido (Aragón et al., 2008).

Entre estos parámetros destaca, la predicción de la distribución de la temperatura en la parte principal del yacimiento, como uno de los factores más importantes que ayudan a determinar el potencial de energía disponible en un sistema geotérmico que requiere ser explotado, y con ello asegurar el valor económico de un proyecto geotérmico de explotación. La temperatura de los yacimientos puede medirse en pozos (en la etapa de explotación) o bien inferirse mediante herramientas geotermométricas empíricas en la etapa de exploración, entre los

cuales destaca el uso de geotermómetros de solutos, gases, isótopos y de minerales. Numerosas ecuaciones han sido derivadas y propuestas en la literatura, entre las cuales destacan los geotermómetros de solutos (aplicables para sistemas geotérmicos de líquido dominante), los geotermómetros de gases (aplicables para sistemas geotérmicos de vapor dominante), entre muchos otros geotermómetros.

No obstante del avance alcanzado en la literatura geotérmica sobre el desarrollo de diversas herramientas geotermométricas (solutos y gases) para predicción de la temperatura, en estudios previos de geoquimiometría se han encontrado diferencias significativas entre las temperaturas predichas por estas herramientas y las temperaturas medidas en los pozos (una vez que han sido construidos). Estas diferencias producen una gran incertidumbre cuando se requiere conocer el potencial energético de un sistema y la factibilidad de explotar un proyecto geotérmico a escala comercial. Ante este problema geocientífico, resulta pertinente seguir trabajando en el desarrollo de ecuaciones geotermométricas mejoradas que minimicen las diferencias entre las temperaturas predichas y las medidas, para con ello reducir las incertidumbres en un proyecto comercial de generación geotermoeléctrica. Con estos propósitos, en el presente proyecto de investigación doctoral se planteó explorar el uso de técnicas geoquimiométricas avanzadas y de redes neuronales artificiales para resolver el problema geoquímico-termodinámico multivariado y multicomponente asociado con los sistemas de composición química de gases que dominan en los yacimientos geotérmicos con el objeto de desarrollar nuevos geotermómetros mejorados de este tipo.

Como parte complementaria y fundamental de este trabajo de investigación, se reporta por primera vez una evaluación geoquimiométrica exhaustiva de los geotermómetros de gases reportados en la literatura para demostrar la existencia de las diferencias significativas entre las temperaturas predichas y las medidas, y con ello justificar el desarrollo de nuevas ecuaciones geotermométricas.

De esta forma, se plantearon los siguientes objetivos generales y específicos de la tesis doctoral:

1.3 Objetivos de la tesis

Objetivo general:

- Desarrollar nuevas herramientas geotermométricas basadas en la composición química de la fase gaseosa de fluidos geotérmicos y el uso de técnicas geoquimiométricas y de redes neuronales artificiales para la determinación de temperaturas más confiables de los yacimientos.

Objetivos específicos:

- ✓ Revisión y análisis de la literatura geotérmica mundial,
- ✓ Creación y compilación de una base de datos mundial sobre la composición gaseosa de fluidos geotérmicos producidos en una amplia variedad de sistemas geotérmicos,
- ✓ Evaluación geoquimiométrica de geotermómetros de solutos y gases existentes en la literatura mundial,
- ✓ Aplicación de técnicas de inteligencia artificial, específicamente de redes neuronales artificiales, para abordar el problema geoquímico-termodinámico multivariado y multicomponente de los geotermómetros de gases, y
- ✓ Desarrollo de un nuevo geotermómetro de gases para la industria geotérmica.

1.4 Estructura general de la tesis

El trabajo de investigación a describir en esta tesis considera la presentación de seis capítulos, en los cuales se presenta: (1) panorama actual de la energía geotérmica en el mundo, los objetivos, justificación y la estructura general de la tesis; (2) las herramientas existentes para la medición y predicción de la temperatura de yacimiento, dentro de estas se encuentran los geotermómetros, los cuales son el tema central de esta tesis; (3) los conceptos básicos de las redes neuronales artificiales y de la Geoquimiometría así como su aplicación en las Ciencias de la Tierra; (4) los fundamentos termodinámicos de la geotermometría, especialmente la geotermometría de gases; (5) la metodología desarrollada para la evaluación geoquimiométrica de la eficiencia de los geotermómetros tanto de solutos como de gases así como los resultados obtenidos con esta evaluación y las conclusiones a las que se llegó; y (6)

la metodología de redes neuronales artificiales seguida para el desarrollo de nuevas ecuaciones geotermométricas de gases, los resultados de la aplicación de estas ecuaciones y las conclusiones y recomendaciones de este estudio. Finalmente, se presenta el listado de referencias bibliográficas que describe la literatura de apoyo y el estado del arte de estudios previos relacionados con el objetivo general del proyecto.

CAPÍTULO 2

DETERMINACIÓN DE LA TEMPERATURA DE YACIMIENTOS GEOTERMICOS

2.1 Introducción

La determinación confiable de temperaturas de fondo en los yacimientos es ampliamente reconocida como una tarea importante para la estimación del potencial o reservas de energía disponibles en los sistemas geotérmicos. La distribución de la temperatura en la parte principal del yacimiento es uno de los factores importantes que determinan el valor económico de un recurso geotérmico (Ángel et al., 1989; García-López et al., 2014).

Los registros de temperatura y presión son ampliamente utilizados en la exploración y explotación de un proyecto geotérmico comercial de generación eléctrica. Su aplicación inicia cuando la perforación comienza, y se lleva a cabo en forma sistemática en todos los pozos que son perforados para un desarrollo geotérmico. Los registros de temperatura y presión son llevados a cabo durante la perforación de pozos, durante el calentamiento después de la perforación y durante las pruebas de flujo. El mayor reto en el análisis de estos registros es definir las condiciones de temperatura y presión del yacimiento para determinar el perfil de temperatura de la formación de cada pozo. La temperatura y los registros de presión se utilizan para determinar su potencial y monitorear los cambios y la respuesta a largo plazo del proceso de explotación del yacimiento (Steingrímsson, 2013).

La estimación de la temperatura de yacimiento es fundamental en la estimación del potencial geotérmico de una zona. El método volumétrico de estimación propuesto por el Servicio Geológico de los Estados Unidos de Norteamérica, (United States Geological Survey, USGS:

Garg & Combs, 2011) junto con las simulaciones Monte Carlo es frecuentemente la herramienta usada para estimar la capacidad de generación eléctrica de un sistema geotérmico.

La metodología básicamente consiste en combinar funciones de densidad de probabilidad para ciertas estimaciones de temperatura, área, espesor y factor de recuperación térmica de un yacimiento geotérmico para obtener la función de distribución de probabilidad para el calor almacenado y la energía recuperable. La capacidad eléctrica del potencial yacimiento geotérmico es entonces calculada mediante una eficiencia de conversión junto con la estimación de energía recuperable. Esta depende de la temperatura de referencia (temperatura ambiente o de condensación en una planta de generación) y del ciclo de potencia. El calor almacenado en el yacimiento geotérmico (Q), está dado por:

$$Q = V\rho c(T_R - T_r) \quad (1)$$

Donde, V es el volumen del yacimiento, ρc es la capacidad calorífica volumétrica de la roca saturada de fluido, T_R es la temperatura promedio del yacimiento y T_r es la temperatura de referencia.

Las estimaciones del calor recuperable dependen directamente de la elección de la temperatura (Garg & Combs, 2011), por lo que este trabajo contribuye a una menor incertidumbre asociada a este parámetro.

La temperatura de los yacimientos puede medirse o determinarse por diversos métodos, entre ellos encontramos a las herramientas de medición física y las herramientas de predicción (los simuladores numéricos, las inclusiones fluidas y los geotermómetros químicos y mineralógicos).

2.2 Herramientas de medición física

Son aquellas que permiten medir directamente la temperatura a través del pozo perforado. Estas han evolucionado con el paso del tiempo y pueden agruparse como se presenta a continuación.

2.2.1 Dispositivos Analógicos

Una amplia variedad de instrumentos han sido usados para medir la temperatura en los pozos geotérmicos desde que la perforación geotérmica se volvió común hace aproximadamente cien años. El primer termómetro usado fue uno de mercurio, el cual se bajaba repetidamente dentro del pozo y se detenía a cierta profundidad. Con este instrumentos eran necesarias varias corridas para establecer el perfil de temperatura del pozo (Steingrímsson, 2013; Danielsen, 2008). Los medidores mecánicos para alta temperatura fueron desarrollados en la industria petrolera en la década de los 30 por la compañía estadounidense Geophysical Research Corporation. Esos instrumentos fueron llamados Amerada RPG y posteriormente fueron producidos instrumentos similares por la compañía Kuster. Los medidores Amerada miden con un tubo que contiene un líquido especial que hierve en un intervalo de temperatura de 100-300°C. Los medidores Kuster usan un sensor bimetálico para la determinación de temperatura. Los medidores bajan dentro del pozo sobre una línea de acero y registra la temperatura con una aguja de pluma sobre un oropel recubierto de carbono dentro de un reloj registrador. Pueden ser registrados varios puntos (20-30) durante una corrida. Los medidores son robustos y fiables con una exactitud de $\pm 2^{\circ}\text{C}$. Su limitante es el escaso número de datos obtenidos.

2.2.2 Dispositivos digitales

Desde mediados de los años 80 se desarrollaron varios instrumentos electrónicos de alta temperatura con una superficie de lectura. La compañía Kuster desarrolló en el año 2000 un medidor electrónico llamado K10. Su versión inicial consistía en una herramienta que bajaba dentro del pozo a través de una línea de acero y registraba las mediciones dentro de una memoria que se incluía dentro de la herramienta. La memoria y las baterías se encerraban en una carcasa a presión y un frasco Dewar (para protección del calor) para protegerlos del ambiente caliente por varias horas. La herramienta bajaba típicamente a una velocidad de 30m/min y los datos eran colectados dentro de una memoria en segundos o con un intervalo de aproximadamente un metro de profundidad. La exactitud de este tipo de dispositivos es de $\pm 0.5^{\circ}\text{C}$.

2.2.3 Dispositivos de fibra óptica

Durante los años 80, investigadores desarrollaron una forma de medir la temperatura a lo largo de un tramo de fibra óptica y, para comienzos de la década de 1990, esta tecnología ya se había integrado en ciertos tipos de terminaciones de pozos de petróleo y gas sin requerir partes móviles o componentes electrónicos de fondo de pozo. La tecnología de medición de la distribución de la temperatura (DTS) emplea un rayo láser y un filamento continuo de fibra óptica para recolectar datos de la distribución espacial de la temperatura. En lugar de efectuar un registro instantáneo de la temperatura durante las carreras ocasionales e infrecuentes de adquisición de registros, un sistema DTS de fibra óptica obtiene mediciones extremadamente sensibles de la temperatura del pozo a intervalos de tiempo regulares y a lo largo de cada metro de un pozo. Este proceso de muestreo uniforme posibilita que el sistema DTS señale la hora y la posición de los cambios de temperatura a medida que se produce, mejorando la comprensión de los procesos que ocurren dentro del pozo (Brown, 2009). La exactitud de este tipo de dispositivos es de $\pm 0.2^{\circ}\text{C}$ (Angel et al., 1989; Wisian et al., 1998).

2.3 Herramientas de predicción

Las temperaturas de fondo en pozos geotérmicos en construcción son obtenidas por medio de: simuladores numéricos, análisis de inclusiones fluidas, geotermómetros químicos y geotermómetros mineralógicos. Sin embargo, estas medidas solo proveen una aproximación de las temperaturas que dominan en los sistemas geotérmicos.

2.3.1 Simuladores numéricos

Los simuladores numéricos representan una alternativa importante para conocer el historial térmico completo del campo de temperaturas en un sistema geotérmico (pozo-formación), con las siguientes ventajas de predicción: rápida estimación, bajo costo, aplicabilidad in-situ y transportabilidad, entre otras. La mayoría de estas herramientas numéricas se basan en los procesos de transferencia de calor que ocurren durante la perforación (con la circulación de un fluido) y la recuperación térmica del pozo (Espinosa-Paredes et al., 2001; García et al., 1998). A este tipo de temperaturas se les conoce como temperaturas estabilizadas de la formación, y se refieren a las temperaturas vírgenes que existían cuando el sistema no había sido perturbado térmicamente con la circulación de fluido de perforación.

Recientemente Wong, et al., 2012 desarrollaron un método analítico a través de una patente para determinar la temperatura estabilizada de formación, la cual requiere las primeras mediciones de temperatura del pozo a una determinada profundidad para reconstruir el comportamiento térmico y determinar la temperatura original del sistema. Básicamente consiste en utilizar un método matemático de relación de polinomios con los datos de temperatura que se miden en el fondo del pozo, en un lapso de tiempo generalmente menor a las 36 horas. Con esta información, el método es capaz de reconstruir el comportamiento térmico para su extrapolación a tiempo infinito.

2.3.2 Inclusiones Fluidas

La microtermometría es la técnica empleada para determinar los cambios que ocurren dentro de una inclusión fluida en función de la temperatura. La inclusión fluida es caracterizada por contener una cantidad de fluido atrapado en un mineral en el momento de su cristalización. Se sabe que esta inclusión puede preservar las condiciones termodinámicas originales del sistema, en lo que se refiere a temperatura, composición y densidad del fluido atrapado. Para estudiar inclusiones fluidas se preparan secciones delgadas pulidas de fragmentos de roca por ambos lados, las que pueden observarse en un microscopio y ser calentadas o enfriadas en una platina especialmente diseñada para este propósito. A este estudio, técnicamente se le denomina estudio microtermométrico, aporta evidencias sobre la historia de distintos eventos en diversos ambientes geológicos que ocurrieron durante la cristalización de un mineral, ya que los paleo-fluidos existentes en una inclusión son trazadores naturales que proveen información sobre la temperatura, presión, densidad y salinidad del fluido en el momento de su atrapamiento. Asimismo el estudio petrográfico de rocas y minerales con inclusiones fluidas permite discriminar las inclusiones primarias formadas durante la cristalización del mineral que las hospeda, de las inclusiones secundarias formadas durante procesos posteriores o influidas por procesos posteriores a la cristalización del mineral. En estas inclusiones primarias el contenido corresponde al fluido hidrotermal atrapado durante la cristalización del mineral y representa una pequeña muestra de la solución hidrotermal original. El tamaño de estas inclusiones usualmente varía entre 3 y 20 μm (aunque puede variar entre 1 a 100 μm).

El estudio microtermométrico se realiza paralelamente con las operaciones de perforación de un pozo, por lo que proporciona información rápida de los procesos que han ocurrido actuando como indicadores de zonas geotérmicas de interés, por el hecho de proveer cuantitativamente valor de la temperatura de homogenización, la cual suele ser equivalente a las temperaturas estabilizadas de la formación (Izquierdo et al., 2008; Partida et al, 1997).

2.3.3 Geotermómetros químicos

Los geotermómetros constituyen una importante herramienta geoquímica para la exploración y desarrollo de los recursos geotérmicos. Además suelen ser herramientas muy importantes para la fase de explotación, monitoreando la respuesta a la producción de los yacimientos geotérmicos. Durante la fase de exploración, la geotermometría es usada para estimar temperaturas del subsuelo usando la composición química de los manantiales termales y las fumarolas. Durante las fases de desarrollo y monitoreo, la geotermometría ha sido satisfactoriamente aplicada para interpretar la composición de las descargas de los pozos en los horizontes de producción. Asimismo es usada para dilucidar las reacciones químicas que ocurren en la zona de despresurización alrededor de los pozos, que resulta de la ebullición o del enfriamiento por la recarga con agua fría (Arnórsson & D'Amore, 2000; Karingithi, 2009).

Un geotermómetro es una ecuación matemática-empírica que relaciona la temperatura del yacimiento con la composición química de los fluidos que afloran de manera natural o por medio de pozos a la superficie (Árnórsson & Gunnlaugsson, 1985). El principio general en el que basan los geotermómetros asume que, en las condiciones de equilibrio térmico del reservorio, los solutos que intervienen en la fórmula están en equilibrio químico entre sí. Es decir, que la temperatura depende del equilibrio químico o isotópico que prevalece en el acuífero. Los geotermómetros químicos constituyen probablemente la herramienta geoquímica más importante para la exploración y desarrollo de recursos geotérmicos. En la literatura han sido propuesto una gran variedad de geotermómetros químicos, entre los cuales destacan por su aplicación continua los geotermómetros de: (i) solutos; (ii) gases; e (iii) isotópicos

Los geotermómetros de fase líquida y gaseosa son llamados en conjunto geotermómetros químicos.

En general, los geotermómetros pueden desarrollarse a partir de:

- ✓ Ecuaciones analíticas fundamentadas en bases de datos creadas con mediciones de temperatura de fondo de pozo y de composición química de fluidos muestreados en pozos o manifestaciones termales.
- ✓ Experimentos de solubilidad de minerales, de datos calorimétricos o de estudios de interacción agua-roca en condiciones de equilibrio químico y termodinámico.

Cuando los geotermómetros son aplicados para estimar temperaturas del subsuelo o del acuífero, se hace una suposición, que el equilibrio químico o isotópico dependiente de la temperatura, prevalece en la fuente del acuífero. Las reacciones químicas e isotópicas no modifican significativamente la composición del fluido a medida que asciende desde el acuífero de origen al punto de muestreo, si se trata de un manantial termal, una fumarola, o una cabezal de pozo (Karingithi, 2009). La experiencia muestra que los resultados de la aplicación de diferentes geotermómetros químicos e isotópicos a veces dan buenos resultados y a veces las diferencias son grandes.

Geotermómetros de solutos. Manifestaciones superficiales como descargas de vapor de fumarolas y manantiales termales en áreas geotérmicas indican la prevalencia de actividad volcánica en el subsuelo. La química de estos fluidos geotérmicos provee información importante sobre las condiciones térmicas del yacimiento (Santoyo et al., 1991; Nicholson, 1993). Los procesos magmáticos y volcánicos, las altas cadenas montañosas, y sistemas de fallas activas favorecen el ascenso de aguas profundas que se descargan en la superficie en forma de manantiales termales (Lambrakis & Kallergis 2005). Los manantiales termales (Güileç, 1994; Simmons et al., 1994; Quinto et al., 1995; Nieva et al., 1997; Ahmed et al., 2002; Lambrakis & Kallergis, 2005; Allen et al., 2006; Dotsika et al., 2006; Verma et al., 2006; Siebe et al., 2007) y fluidos provenientes de pozos (Kruger et al., 1985; Güileç 1994; Portugal et al., 2000; Verma, 2002; González-Partida et al., 2003, 2005; Verma et al., 2006; Díaz- González et al., 2008; Palabiyik & Serpen 2008) son ampliamente usados para la estimación de temperaturas de yacimiento a través de geotermómetros de solutos. Estos geotermómetros son herramientas valiosas en la evaluación de nuevos campos y en el

monitoreo hidrológico de sistemas geotérmicos en producción. La geotermometría de solutos está basada en la dependencia a la temperatura del equilibrio químico, el cual existe entre el agua y los minerales presentes en la roca a la temperatura del yacimiento geotérmico. Frecuentemente, los geotermómetros de solutos son aplicados indistintamente a todos los fluidos geotérmicos sin considerar el tipo de fluido (Pandarinath, 2011).

Los geotermómetros de solutos han sido usados por décadas para inferir la temperatura de yacimientos geotérmicos empleando análisis de muestras de fluido provenientes de manantiales y pozos de exploración colectadas en la superficie (Spycher, 2014). Los más comúnmente aplicados incluyen los basados en la concentración de sílice (SiO_2) (Fournier & Rowe, 1966; Fournier, 1977; Fournier & Potter, 1982; Verma & Santoyo, 1997); sodio-potasio (Na-K) (Fournier & Truesdell, 1973; Truesdell, 1976; Fournier, 1979; Arnórsson et al., 1983; Nieva & Nieva, 1987; Giggenbach 1988, Verma & Santoyo, 1997; D'Amore & Arnórsson, 2000; Can, 2002; Díaz-González et al., 2008) y sodio-potasio-calcio (Na-K-Ca) (Fournier & Truesdell, 1973; Nieva & Nieva, 1987; Kharaka & Mariner, 1989). Estos geotermómetros y sus muchas modificaciones han sido aplicados satisfactoriamente a muchas aguas geotérmicas y pueden ser implementados fácilmente a través de ecuaciones simples ya sea directamente o a través de diversos paquetes de software disponibles (Verma et al., 2008; Powell & Cumming, 2010).

En la siguiente tabla (Tabla 1) se presenta un listado de los geotermómetros de solutos existentes actualmente.

Tabla 1. Lista de geotermómetros de solutos existentes (modificado de Verma et al., 2008)

No.	Geotermómetro	Ecuación	Abreviatura del geotermómetro
1	Na-K (Fournier & Truesdell, 1973)	$\{777/[\log(\text{Na}/\text{K}) + 0.700]\} - 273.15$	TNKF73
2	Na-K (Truesdell, 1976)	$\{855.6/[\log(\text{Na}/\text{K}) + 0.8573]\} - 273.15$	TNKT76
3	Na-K (Fournier, 1979)	$\{1217(\pm 93.9)/[\log(\text{Na}/\text{K}) + 1.483]\} - 273.15$	TNKF79
4	Na-K (Tonani, 1980)	$\{833/[\log(\text{Na}/\text{K}) + 0.780]\} - 273.15$	TNKT80
5	Na-K (Arnórsson, 1983)	$\{933/[\log(\text{Na}/\text{K}) + 0.993]\} - 273.15$	TNKA83
6	Na-K (Arnórsson, 1983)	$\{1319/[\log(\text{Na}/\text{K}) + 1.699]\} - 273.15$	TNK2A83
7	Na-K (Nieva & Nieva, 1987)	$\{1178/[\log(\text{Na}_m/\text{K}_m) + 1.239]\} - 273.15$	TNKNN87
8	Na-K (Giggenbach, 1988)	$\{1390/[\log(\text{Na}/\text{K}) + 1.75]\} - 273.15$	TNKG88
9	Na-K (Verma & Santoyo, 1997)	$\{1289(\pm 76)/[\log(\text{Na}/\text{K}) + 1.615]\} - 273.15$	TNKVS97
10	Na-K (Arnórsson, 2000)	$733.6 - 770.551[\log(\text{Na}_m/\text{K}_m)] + 378.189[\log(\text{Na}_m/\text{K}_m)]^2 - 95.753[\log(\text{Na}_m/\text{K}_m)]^3 + 9.544[\log(\text{Na}_m/\text{K}_m)]^4$	TNKA00
11	Na-K (Can, 2002)	$\{1052/[1 + \exp(1.714(\log(\text{Na}/\text{K}) + 0.252))]\} + 76$	TNKCO2
12	Na-K (DíazGonzález-Santoyo-Reyes, 2007)	$\{883(\pm 15)/[\log(\text{Na}/\text{K}) + 0.894(\pm 0.032)]\} - 273.15$	TNKDSR08
13	Na-K (DíazGonzález-Santoyo-Reyes, 2007)	$\{833/[\log(\text{Na}/\text{K}) + 0.908]\} - 273.15$	TNK2DSR08
14	K-Mg (Giggenbach, 1988)	$\{4410/[14.0 - \log(\text{K}^2/\text{Mg})]\} - 273.15$	TKMG88
15	K-Mg (Fournier, 1991)	$\{2330/[7.35 - \log(\text{K}^2/\text{Mg})]\} - 273.15$	TKMF91
16	K-Mg (Fournier, 1991)	$\{1077/[4.033 + \log(\text{K}^2/\text{Mg})]\} - 273.15$	TKM2F91
17	Li-Mg (Kharaka & Mariner, 1989)	$\{2200/[5.47 - \log(\text{Li}/(\text{Mg}^{0.5}))]\} - 273.15$	TLMKM89
18	Li-Mg (Kharaka & Mariner, 1989)	$\{1910/[4.63 - \log(\text{Li}/(\text{Mg}^{0.5}))]\} - 273.15$	TLM2KM89
19	Na-Li (Fouillac & Michard, 1981)	$\{1000(\pm 47)/[\log(\text{Na}_m/\text{Li}_m) + 0.38(\pm 0.11)]\} - 273.15$	TNLFM81
20	Na-Li (Fouillac & Michard, 1981)	$\{1195(\pm 75)/[\log(\text{Na}_m/\text{Li}_m) - 0.19(\pm 0.25)]\} - 273.15$	TNL2FM81
21	Na-Li (Kharaka & Mariner, 1989)	$\{1590/[\log(\text{Na}/\text{Li}) + 0.779]\} - 273.15$	TNLKM89
22	Na-Li (Verma & Santoyo, 1997)	$\{1049(\pm 44)/[\log(\text{Na}_m/\text{Li}_m) + 0.44(\pm 0.10)]\} - 273.15$	TNLVS97
23	Na-Li (Verma & Santoyo, 1997)	$\{1267(\pm 35)/[\log(\text{Na}_m/\text{Li}_m) + 0.07(\pm 0.10)]\} - 273.15$	TNL2VS97

continúa

No.	Geotermómetro	Ecuación	Abreviatura del geotermómetro
24	Na-K-Ca (Fournier&Truesdell, 1973)	$\{1647/[\log(\text{Na}_m/\text{K}_m) + \beta(\log((\text{Ca}_m)0.5/\text{Na}_m) + 2.06) + 2.47]\}-273.15$	TNKCF73
25	Na-K-Ca (Kharaka&Mariner, 1989)	$\{1120/[\log(\text{Na}/\text{K}) + \beta(\log(\text{Ca}0.5/\text{Na}) + 2.06) + 1.32]\}-273.15$	TNKCKM89
26	Na-K-Mg (Nieva&Nieva, 1987)	$\{11140/[6 \log(\text{Na}_m/\text{K}_m) + \log(\text{Mg}_m/(\text{Na}_m)^2) + 18.30]\}-273.15$	TNKMNN87
27	Na-K-Ca-Mg (Nieva&Nieva, 1987)	$\{16000/[3 \log(\text{Na}_m/\text{K}_m) + 3 \log(\text{Ca}_m/(\text{Na}_m)^2) - \log(\text{Mg}_m/(\text{Na}_m)^2) + 44.67]\}-273.15$	TNKCMN87
28	Na-K-Ca-Mg (Nieva&Nieva, 1987)	$\{10080/[5 \log(\text{Na}_m/\text{K}_m) + 2 \log(\text{Ca}_m/(\text{Na}_m)^2) - \log(\text{Mg}_m/(\text{Na}_m)^2) + 16.65]\}-273.15$	TNKCM2N87
29	Quartz (Fournier, 1977)	$[1309/(5.19-\log S)]-273.15$	TSF77
30	Quartz (Fournier, 1977)	$[1522/(5.75-\log S)]-273.15$	TS2F77
31	Quartz (Fournier&Potter, 1982)	$-42.198(\pm 1.345) + 0.28831(\pm 0.01337)S - 3.6686 \times 10^{-4}(\pm 3.152 \times 10^{-5})S^2 + 3.1665 \times 10^{-7}(\pm 2.421 \times 10^{-7})S^3 + 77.034(\pm 1.216)\log S$	TSFP82
32	Quartz (Verma&Santoyo, 1997)	$-\{44.119(\pm 0.438)\} + \{0.24469(\pm 0.00573)\}S - \{1.7414 \times 10^{-4}(\pm 1.365 \times 10^{-5})\}S^2 + \{79.305(\pm 0.427)\}\log S$	TSVS97
33	Quartz (Verma&Santoyo, 1997)	$[140.82(\pm 0.00)] + [0.23517(\pm 0.00179)]S$	TS2VS97
34	Quartz (Árnórsson, 2000)	$-55.3 + 0.3659S - 3.954 \times 10^{-4}S^2 + 5.5132 \times 10^{-7}S^3 + 74.360 \log S$	TS2A00
35	Quartz (Verma, 2000)	$\{[1175.7(\pm 31.7)]/[4.88(\pm 0.08)-\log S]\}-273.15$	TSV00

Entre el gran número de geotermómetros propuestos en la literatura de la industria geotermia, los geotermómetros de Na/K (que relacionan las concentraciones de los feldespatos plagioclasas y álcalis) han mostrado proveer temperaturas más confiables y consistentes en estudios de exploración y explotación. De hecho, este comportamiento estable del geotermómetro ha motivado que sus ecuaciones sean, hoy en día, las más usadas en la industria geotérmica mundial, y por lo tanto las más estudiadas y criticadas en la literatura (Díaz-González et al., 2008; Díaz-González & Santoyo, 2010).

Geotermómetros de gases. En muchos campos, las manifestaciones superficiales sólo consisten en suelos calientes y fumarolas. Cuando es este el caso se necesita de los geotermómetros gaseosos (Árnórsson, 2000). En sistemas de líquido dominante o mezcla, pueden ser usados los geotermómetros de solutos y de gases, siendo más común emplear los de solutos. Sin embargo, en sistemas de vapor dominante los geotermómetros de soluto no

pueden ser utilizados, siendo recomendables los geotermómetros de gases. Estos geotermómetros se apoyan en la concentración de gases, tales como CO₂, H₂S, NH₃, H₂, CH₄, N₂ y vapor de H₂O (Santoyo et al., 1993). Los geotermómetros gaseosos son útiles para predecir temperaturas en sistemas geotérmicos de alta temperatura, aunque son más complejos de utilizar (Arnórsson & Gunnlaugsson, 1985). Esencialmente existen tres tipos de geotermómetros de gas, los cuales se encuentran basados en:

- 1) Equilibrio químico gas-gas
- 2) Equilibrio químico gas-sólido (mineral) incluyendo H₂S, H₂ y CH₄ asumiendo al CO₂ fijado externamente de acuerdo a métodos empíricos
- 3) Equilibrio químico gas-sólido (mineral)

Los primeros dos grupos de geotermómetros requieren sólo de datos sobre la abundancia relativa de los componentes gaseosos en la fase gaseosa, mientras que el tercer grupo requiere la concentración del gas en el vapor (Árnorsson, 2000).

Los principales gases en el vapor geotérmico son CO₂, H₂S, H₂, CH₄, N₂, NH₃, CO y O₂. Los gases nobles en el vapor incluyen He, Ne, Ar, etc. El dióxido de carbono (CO₂) es generalmente el principal componente, comprende más del 80% de los gases no condensables y su concentración en la descarga total incrementa con la temperatura del yacimiento (Ping, 1991). Ellis (1957) señaló que los gases constituyentes del vapor natural podrían ser usados para predecir temperatura.

El primer geotermómetro de gases empírico fue propuesto por Tonani (1973), el cual relaciona las concentraciones de los gases metano (CH₄) e hidrógeno (H₂) en los gases no condensables. D' Amore & Panichi (1980) sugirieron un geotermómetro semi-empírico basado en la composición gaseosa de fluidos provenientes de 34 sistemas geotérmicos. El primer geotermómetro termodinámico de gases fue desarrollado por D'Amore et al., (1982) y fue evaluado con datos de los campos geotérmicos de Geysers y Larderello. Algunos geotermómetros de gases como los mencionados anteriormente emplean solamente las concentraciones de algunos gases para estimar la temperatura del yacimiento. Sin embargo, existen otros geotermómetros más complejos como el propuesto por Bertrami et al. (1985)

que además de emplear la concentración de gases también requiere sus coeficientes de partición y la fracción vapor. Este autor plantea dos ecuaciones interrelacionadas basadas en la concentración del monóxido de carbono (CO), considerado como un gas traza por sus bajas concentraciones y su alta dificultad de medición. Asimismo D'Amore & Truesdell (1985) generaron una nueva forma de obtener la temperatura y la fracción vapor en yacimientos, adecuada para sistemas de alta y baja temperatura. Posteriormente se han desarrollado varios geotermómetros que relacionan otros componentes gaseosos y al mismo tiempo tratan de mejorar la predicción de temperaturas.

Algunos geotermómetros requieren sólo de datos sobre concentración de los componentes gaseosos en la fase gaseosa mientras que otros requieren la concentración del gas en el vapor (Árnórsson, 2000). Estas concentraciones son usadas en diferentes unidades como son: por ciento volumen, mmol/mol, fracción molar, por ciento mol y milimol por kilogramo de vapor, siendo necesarias las conversiones entre ellas para la aplicación de las ecuaciones geotermométricas (Tabla 2).

Los geotermómetros gaseosos son útiles para predecir temperaturas en sistemas geotérmicos de alta temperatura, aunque son más complejos de utilizar (Árnórsson & Gunnlaugsson, 1985). Este trabajo de investigación se centra en los geotermómetros de gases.

Geotermómetros isotópicos. Los geotermómetros de isótopos están basados en el fraccionamiento isotópico entre componentes en equilibrio, este proceso es controlado por la temperatura del yacimiento. El fraccionamiento es mayor para los elementos más ligeros que se encuentran en sistemas geotérmicos, tales como, helio, hidrógeno, carbono, oxígeno, y azufre. La diferencia en composición isotópica entre un par de componentes seleccionados puede ser usada para evaluar la temperatura del subsuelo ya que la distribución relativa de isótopos sobre las fases y componentes de un sistema geotérmico es generalmente una función única de la temperatura. Se asume que la composición isotópica no cambia conforme el fluido geotérmico asciende a la superficie. Las reacciones de intercambio isotópico pueden llevarse a cabo entre gases y la fase vapor, un mineral y la fase gas, agua y un soluto o entre dos solutos. Aunque existen muchos procesos de intercambio de isótopos, pocos han sido usados

debido a la simplicidad de coleccionar y preparar la muestra, facilidad de medición isotópica y el conocimiento de las constantes de equilibrio (Karingithi, 2009).

Tabla 2. Lista de geotermómetros de gases existentes (modificado de Pérez-Barrera et al., 2011)

No.	Geotermómetro	Ecuación	Unidades	Abreviatura
1	CO ₂ (Arnórsson & Gunnlaugsson, 1985)	$-44.1 + 269.25 \log(CO_2) - 76.88 \{\log(CO_2)\}^2 + 9.52 \{\log(CO_2)\}^3$	mmol/kg	AG85_1
2	CO ₂ (Arnórsson et al., 1998)	$4.724 \{\log(CO_2)\}^3 - 11.068 \{\log(CO_2)\}^2 + 72.012 \{\log(CO_2)\} + 121.8$	mmol/kg	A98_2
3	CO ₂ - H ₂ (Equation-1; Arnórsson & Gunnlaugsson, 1985)	$341.7 - 28.57 \log\left(\frac{CO_2}{H_2}\right)$	mmol/kg	AG85_3
4	CO ₂ - H ₂ (Equation-2; Arnórsson & Gunnlaugsson, 1985)	$311.7 - 66.72 \log\left(\frac{CO_2}{H_2}\right)$	mmol/kg	AG85_4
5	CO ₂ - Ar (Giggenbach, 1991)	$\log\left(\frac{CO_2}{Ar}\right) = -15.0921 + 0.0277 * T + \frac{2048}{T}$	mmol/mol	G91_5
6	CO ₂ -H ₂ S (Model-3; Supranto et al., 1996)	$\frac{738.3091}{(\%Vol\ gas)^{0.0008} (CO_2 / H_2S)^{0.1037}}$	%Volumen	S96_6
7	CO ₂ -H ₂ S-CH ₄ (Model-2; Supranto et al., 1996)	$1138.9501 \frac{(\%Vol\ gas)^{0.0037} (H_2S)^{0.1076}}{(CO_2)^{0.2019} (CH_4)^{0.0056}}$	%Volumen	S96_7
8	CO ₂ - H ₂ S - H ₂ - CH ₄ (D'Amore & Panichi, 1980)	$\frac{24775}{2 \log\left(\frac{CH_4}{CO_2}\right) - 6 \log\left(\frac{H_2}{CO_2}\right) - 3 \log\left(\frac{H_2S}{CO_2}\right) + 7 \log(P_{CO_2}) + 36.05} - 273.15$	%Volumen	DP80_8
9	CH ₄ - CO ₂ (Giggenbach, 1991)	$\frac{4625}{10.4 + \log\left(\frac{CH_4}{CO_2}\right)} - 273.15$	mmol/mol	G91_9
10	CH ₄ - CO ₂ - H ₂ (Nehring & D'Amore, 1984)	$\frac{(5.5697 - R) + \sqrt{(R - 5.5697)^2 + 1056.34368}}{0.03936} - 273.15$	Fracción molar	ND84_10

continúa

No.	Geotermómetro	Ecuación	Unidades	Abreviatura
11	H ₂ (Equation-1; Arnórsson & Gunnlaugsson, 1985)	$277.2 + 20.99 \log(H_2)$	mmol/kg	AG85_11
12	H ₂ (Equation-2; Arnórsson & Gunnlaugsson, 1985)	$212.2 + 38.59 \log(H_2)$	mmol/kg	AG85_12
13	H ₂ (Arnórsson et al. 1998)	$6.630 \{\log(H_2)\}^3 + 5.836 \{\log(H_2)\}^2 + 56.168 \{\log(H_2)\} + 227.1$	mmol/kg	A98_13
14	H ₂ – Ar (Giggenbach, 1991)	$70 \left\{ 2.5 + \log\left(\frac{H_2}{Ar}\right) \right\}$	mmol/mol	G91_14
15	H ₂ – CO ₂ (Nehring & D'Amore, 1984)	$\frac{(S + 1.89499) + \sqrt{(S + 1.89499)^2 + 128.90864}}{0.01432} - 273.15$	Fracción molar	ND84_15
16	H ₂ S (Equation-1; Arnórsson & Gunnlaugsson, 1985)	$246.7 + 44.8 \log(H_2S)$	mmol/kg	AG85_16
17	H ₂ S (Equation-2; Arnórsson & Gunnlaugsson, 1985)	$173.2 + 65.04 \log(H_2S)$	mmol/kg	AG85_17
18	H ₂ S (Arnórsson et al., 1998)	$4.811 \{\log(H_2S)\}^2 + 66.152 \{\log(H_2S)\} + 177.6$	mmol/kg	A98_18
19	H ₂ S (Blamey, 2006)	$64.68 \log(H_2S) + 427.8$ $75.85 \log(H_2S) + 458.6$	<i>if %molH₂S < 0.00175</i> <i>if %molH₂S ≥ 0.00175</i>	%mol B06_19
20	H ₂ S – CO ₂ (Nehring & D'Amore, 1984)	$5.78356V^2 + 110.212V + 662.814$	Fracción molar	ND84_20
21	H ₂ S – H ₂ (Arnórsson & Gunnlaugsson, 1985)	$304.1 - 39.48 \log\left(\frac{H_2S}{H_2}\right)$	mmol/kg	AG85_21

Los logaritmos son base 10.

El primer geotermómetro de isótopos se basó en el fraccionamiento isotópico del carbono entre el metano y el dióxido de carbono y fue aplicado en USA. Posteriormente, varios otros geotermómetros han sido propuestos (Ping, 1991).

2.3.4 Geotermómetros mineralógicos

Un método para estimar temperaturas de fondo en sistemas geotérmicos incluye el cálculo de coeficientes de reacción de datos analíticos en las aguas térmicas para un conjunto de minerales sobre un rango de temperatura para observar en qué temperatura existe el equilibrio entre el agua y esos minerales. Reed & Spycher (1984) propusieron esta aproximación. La selección de minerales debe incluir aquellos que se presentan como minerales hidrotermales en un sistema geotérmico, en particular aquellos que ocurren en el mismo tipo de roca que el sistema en exploración. Los minerales que deben ser siempre considerados incluyen el cuarzo o calcedonia, los feldespatos alcalinos (albita y microclina), calcita, en algunos casos anhidrita, fluorita y/o zeolitas, esmectita, clorita, wairakita, prehnita, epidota y mica. Incluso pirita, pirrotita y magnetita deben también ser considerados para sistemas de alta temperatura. Si varios minerales indican aproximadamente la misma temperatura de equilibrio debe ser considerado un promedio para ese conjunto de minerales como la mejor estimación para la temperatura de fondo (Arnórsson, 2000; Bruhn et al., 2010).

Los geotermómetros minerales se basan principalmente en la estabilidad de los minerales en respuesta a cambios en las condiciones físico-químicas. Algunos minerales primarios en las rocas se vuelven inestables como resultado de interacciones entre ellos y los fluidos geotérmicos. Debido a esta inestabilidad, se alcanza un nuevo estado de equilibrio entre los minerales y los fluidos geotérmicos mediante la disolución de minerales primarios y la precipitación de nuevas fases, conocidos como minerales secundarios o minerales hidrotermales. El tipo y la concentración de los minerales secundarios están controlados por la temperatura, composición química de los minerales primarios y los fluidos (especialmente el pH), y otros (Browne, 1984). Los minerales hidrotermales (arcillosos y no arcillosos) en los sistemas geotérmicos pueden ser utilizados para estimar el intervalo aproximado de temperatura del yacimiento, con control sobre otros factores, tales como la composición de los minerales primarios y fluidos, y los procesos de interacción agua-roca.

La presencia o ausencia de los minerales alterados como calcosilicatos en general y minerales arcillosos en particular depende, entre otros factores, de las temperaturas de los fluidos geotérmicos. Los minerales arcillosos de capas mezcladas han sido usados como indicadores de cambios de temperatura en muchos sistemas geotérmicos alrededor del mundo (Harvey & Browne, 2000). La esmectita es típicamente estable por debajo de 140°C y la illita por encima de 220°C en sistemas geotérmicos activos (Browne, 1984). La montmorillonita no se produce por encima de los 160°C, pero la clorita y la clorita-illita se forman a temperaturas que exceden los 160°C. La illita es estable entre los 220 y 300°C y se transforma en muscovita por encima de los 300°C (Simmons & Browne, 1998). Algunos minerales hidrotermales no arcillosos, como el granate y los anfíboles, se presentan típicamente por encima de los 320°C, y son importantes indicadores de temperatura. La epidota es reportada en varios campos por encima de los 240-260°C (por ejemplo, Bird et al., 1984; Bird & Spieler, 2004).

CAPÍTULO 3

FUNDAMENTOS GENERALES DE REDES NEURONALES ARTIFICIALES Y GEOQUIMIOMETRÍA

3. 1 Redes Neuronales Artificiales (RNA)

La inteligencia artificial es la disciplina que estudia la forma de diseñar procesos que exhiban características que comúnmente se asocian con el comportamiento humano inteligente (García Martínez, 1997). La inteligencia artificial sintetiza y automatiza tareas intelectuales y es, por lo tanto, potencialmente relevante para cualquier ámbito de la actividad intelectual humana (Russell & Norving, 2004). Actualmente esta ciencia está comprendida por varios subcampos que van desde áreas de propósito general, como el aprendizaje y la percepción, a otras más específicas como la demostración de teoremas matemáticos, el diagnóstico de enfermedades, etc.

Uno de los modelos que ha surgido para emular el proceso de aprendizaje es la red neuronal artificial. Las redes neuronales son modelos que intentan reproducir el comportamiento del cerebro humano (Hilera & Martínez, 1995). Una red neuronal consiste en un conjunto de elementos de procesamiento, llamados neuronas, los cuales se conectan entre sí (Koehn, 1994). La organización y disposición de las neuronas dentro de una red neuronal se denomina topología, y viene dada por el número de capas, la cantidad de neuronas por capa, el grado de conectividad, y el tipo de conexión entre neuronas.

Una vez determinada la topología de la red neuronal es necesario entrenarla. En la etapa de entrenamiento la red es capaz de aprender relaciones complejas entre entradas y salidas mediante el ajuste de los pesos de las conexiones entre neuronas.

Widrow & Lehr (1990) identifican una cantidad significativa de algoritmos de entrenamiento. La mayoría de éstos utilizan información del gradiente de una función de error para ajustar los pesos de las conexiones, y se los llaman algoritmos de gradiente descendente (Porto, 1998).

Las redes neuronales artificiales han sido aplicadas con éxito en gran cantidad de problemas, como por ejemplo, en problemas de: reconocimiento de patrones, clasificación, visión, control, predicción, entre otros (Zilouchian, 2001).

3.1.1 Definición de red neuronal artificial

Las redes neuronales artificiales (RNA) son modelos matemáticos que intentan reproducir el funcionamiento del cerebro humano, en particular del sistema nervioso. Como todo modelo, realizan una simplificación del sistema real que simulan y toman las características principales del mismo para la resolución de una tarea determinada.

Una red neuronal artificial (RNA) se compone de un determinado número de neuronas artificiales interconectadas masivamente mediante canales de información denominados conexiones, formando una estructura paralela y distribuida con el objetivo de solucionar una tarea computacional específica. En términos generales, una RNA es básicamente una herramienta computacional que permite, a través de un número finito de ciclos de aprendizaje, asociar variables de entrada con variables de salida, por lo que se entiende que una RNA es un aproximador de funciones. El aprendizaje puede ser esencialmente de dos tipos: supervisado y no supervisado. Esta característica de correlacionar variables le otorga también la capacidad de clasificar datos de entrada.

McCulloch & Pitts (1943) desarrollaron el primer modelo de una neurona artificial. En la Figura 3 se muestra esquemáticamente este modelo, el cual consta de: (i) un conjunto de entradas x_i ; (ii) cada entrada está asociada a un valor ajustable w_i denominado peso sináptico; (iii) la neurona tiene un peso sináptico denominado umbral θ que se interpreta como el valor mínimo que debe superar la neurona para su activación; (iv) la neurona tiene una salida y,

que está en función de los pesos (w_1, w_2, \dots, w_n), de los valores de las entradas (x_1, x_2, \dots, x_n), del umbral θ y de una función de activación ϕ (que limita la amplitud de la salida neuronal).

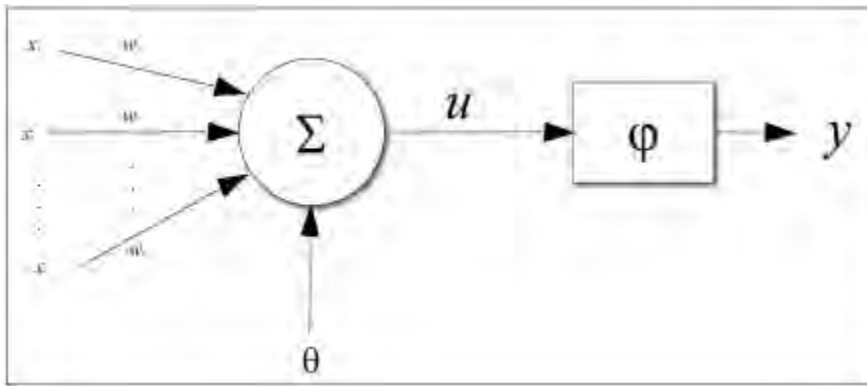


Figura 3. Modelo general de una red neuronal (modificado de: McCulloch & Pitts, 1943)

Las neuronas se organizan en capas de entrada, ocultas y de salida para formar una RNA (ver Figura 4). Los datos ingresan por medio de la “capa de entrada”, pasan a través de la “capa oculta” y salen por la “capa de salida”. Cabe mencionar que la capa oculta puede estar constituida por varias capas (Matich, 2001). Cada neurona se conecta con otra neurona a través de conexiones. Una conexión se establece entre dos neuronas cuando la salida de una neurona se convierte en la entrada de otra. Dependiendo del tipo de conexión, las RNA pueden clasificarse en dos tipos: (i) con conexiones hacia adelante (feedforward); y, (ii) con conexiones hacia atrás (feedback), también conocidas como redes recurrentes. Las funciones de activación más usadas son las funciones del tipo sigmoideal (entre las cuales destacan la función logística y la función tangente hiperbólica) y la función lineal (Díaz-González et al., 2008). En la literatura se reporta (p.ej., Singh & Chandra, 2003) que ciertas RNA son consideradas como aproximadores universales de funciones continuas.

Dichas RNA poseen las siguientes características: tienen conexiones hacia adelante, tienen una sola capa oculta en donde se usan funciones sigmoideales y tienen una capa de salida con funciones de activación lineal. Chandra & Singh (2004) reportan que puede existir una función de activación preferente dependiendo de la tarea a resolver y de los datos específicos

de entrenamiento. Lo cual sugiere que los algoritmos de entrenamiento se adaptan a la función de activación para conducir a un entrenamiento más rápido.

Una red neuronal se caracteriza por su patrón de conexión entre las neuronas (llamado su arquitectura) y su método de determinación de los pesos de las conexiones (llamado su entrenamiento o algoritmo de aprendizaje).

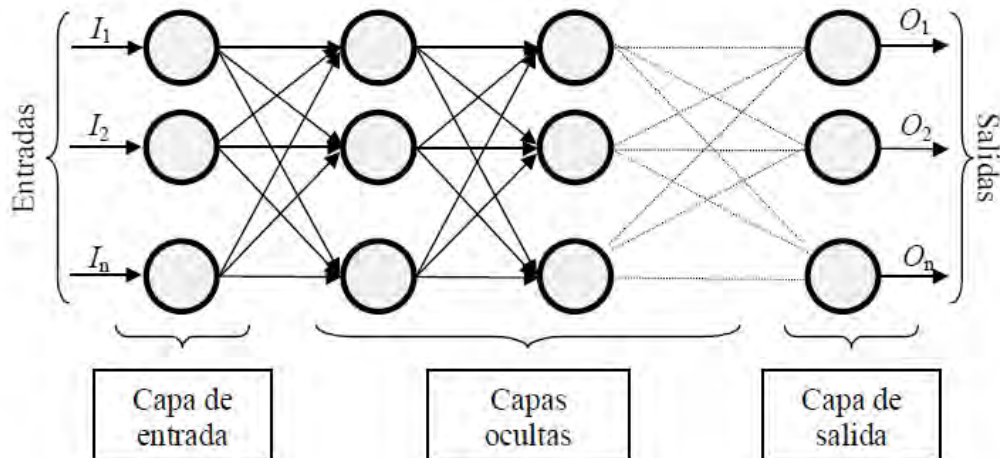


Figura 4. Detalles de un modelo de red neuronal (Matich, 2001)

Recientemente las redes neuronales artificiales se han vuelto muy populares debido a su aplicabilidad y capacidad para aprender modelos no lineales así como su simple aplicación.

3.1.2 Conceptos básicos

Existen algunos conceptos que son fundamentales para el claro entendimiento y aplicación de los modelos de redes neuronales. Estos son los siguientes.

Entradas - Salidas. Las entradas y salidas de una neurona pueden ser clasificadas en dos grandes grupos, binarias o continuas. Las neuronas binarias (digitales) sólo admiten dos valores posibles. En general en este tipo de neurona se utilizan los siguientes dos caracteres $\{0,1\}$ o $\{-1,1\}$. Por su parte, las neuronas continuas (analógicas) admiten valores dentro de un determinado rango, que en general suele definirse como $[-1, 1]$. La selección del tipo de neurona a utilizar depende de la aplicación y del modelo a construir.

Pesos Sinápticos. El peso sináptico w_{ij} define la fuerza de una conexión sináptica entre dos neuronas, la neurona presináptica i y la neurona postsináptica j . Los pesos sinápticos pueden tomar valores positivos, negativos o cero. En caso de una entrada positiva, un peso positivo actúa como excitador, mientras que un peso negativo actúa como inhibidor. En caso de que el peso sea cero, no existe comunicación entre el par de neuronas. Mediante el ajuste de los pesos sinápticos la red es capaz de adaptarse a cualquier entorno y realizar una determinada tarea.

Función de Activación. La función de activación determina el estado de activación actual de la neurona con base en el potencial resultante y al estado de activación anterior de la neurona. Sin embargo, en la mayoría de los modelos se suele ignorar el estado anterior de la neurona, definiéndose el estado de activación en función del potencial resultante. La Tabla 3 muestra un listado de algunas de las funciones de activación más utilizadas en los distintos modelos de redes neuronales artificiales.

Función	Formula	Rango
Identidad	$y = x$	$[-\infty, \infty]$
Escalón	$y = \begin{cases} +1 & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases}$	$[0, 1]$
	$y = \begin{cases} +1 & \text{si } x \geq 0 \\ -1 & \text{si } x < 0 \end{cases}$	$[-1, 1]$
Lineal a tramos	$y = \begin{cases} x & \text{si } -1 \leq x \leq 1 \\ +1 & \text{si } x > 1 \\ -1 & \text{si } x < -1 \end{cases}$	$[-1, 1]$
Sigmoidea	$y = \frac{1}{1 + e^{-x}}$	$[0, 1]$
	$y = \tanh(x)$	$[-1, 1]$
Sinusoidal	$y = \text{Sen}(\omega \cdot x + \varphi)$	$[-1, 1]$

Figura 5. Principales funciones de activación (Bertona, 2005)

Algoritmo de Garson. La contribución relativa de cada variable de entrada puede ser calculada mediante el algoritmo propuesto por Garson en (1991), el cual está descrito por la siguiente ecuación:

$$CR_p = \frac{\sum_{j=1}^n \frac{|w_{jp}| |v_j|}{I}}{\sum_{k=1}^I |w_{jk}|} = \frac{\sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^n \frac{|w_{jp}| |v_j|}{I}}{\sum_{k=1}^I |w_{jk}|}$$

(2)

en donde:

p es la entrada de la cual desea conocer su contribución relativa

n es el número de las neuronas ocultas

j es la j -ésima neurona oculta

I es el número de entradas de la RNA

w_{jp} peso sináptico de la entrada p hacia la neurona j

v_j peso sináptico de la neurona j hacia la salida

w_{jk} peso sináptico de la entrada k hacia la neurona j

3.1.3 Ventajas de las RNA

- ✓ *Aprendizaje adaptativo.* Capacidad de aprender a realizar tareas basadas en un entrenamiento o en una experiencia inicial.
- ✓ *Auto-organización.* Una red neuronal puede crear su propia organización o representación de la información que recibe mediante una etapa de aprendizaje.
- ✓ *Tolerancia a fallos.* La destrucción parcial de una red conduce a una degradación de su estructura; sin embargo, algunas capacidades de la red se pueden retener, incluso sufriendo un gran daño.
- ✓ *Operación en tiempo real.* Los cálculos neuronales pueden ser realizados en paralelo; para esto se diseñan y fabrican máquinas con hardware especial para obtener esta capacidad.
- ✓ *Fácil inserción dentro de la tecnología existente.* Se pueden obtener chips especializados para redes neuronales que mejoran su capacidad en ciertas tareas. Ello facilitará la integración modular en los sistemas existentes.

Debido a estas y otras ventajas, las redes neuronales han sido aplicadas en diversas áreas de las ciencias de la Tierra como se detalla a continuación

3.1.4 Aplicaciones documentadas en estudios geocientíficos

Geofísica. En el año 2000, Guada- Barrález diseñó un sistema automático de adquisición de datos sísmicos en tiempo real y lo implementó en la Red Sismológica de los Andes Venezolanos, operada por el Laboratorio de Geofísica de la Universidad de los Andes. El sistema funciona en una computadora que tiene incorporado una tarjeta de adquisición de datos y un programa controlador, ambos especialmente diseñados para la detección de eventos sísmicos. A fin de disminuir la detección de eventos falsos utilizó redes neuronales artificiales para el reconocimiento de patrones sísmicos. El algoritmo desarrollado es tan eficiente y consume tan pocos recursos de cómputo que puede operar en tiempo real en cualquier computadora personal.

Gutiérrez-Guevara (2005) aplicó las redes neuronales artificiales a la reconstrucción de registros geofísicos. Esta aplicación es de utilidad en los pozos en los que no se llevó a cabo el registro a lo largo de todo el pozo. Los registros son necesarios para llevar a cabo una caracterización del yacimiento, ya que se cuantifican de manera aproximada las propiedades físicas del fluido, dando una idea sobre la capacidad de almacenaje, la movilidad de fluidos y el tipo de fluido que satura la formación.

García-Rodríguez (2005) usó la computación neuronal para la identificación de litologías ya que es un problema de reconocimiento de patrones y las redes neuronales presentan una alternativa para automatizar el proceso de discriminación de litologías en registros de pozos. El conocimiento de las litologías presentes en una unidad de estudio es un factor importante a la hora de caracterizar un yacimiento.

A la fecha, existen gran cantidad de programas comerciales que permiten estimar y/o identificar propiedades de yacimientos, tipo de litología, ambientes sedimentarios, a partir de datos de campo usando diversas arquitecturas de redes neuronales y distintos paradigmas de

entrenamiento. Entre los más populares podemos mencionar: *SE/SCLASS* , *ROCKCELL*, *EMERGE*, *GDI*, *D-TECT* entre otros (Banchs, n.d.).

Geología. Rigol-Sánchez (2010) propuso un modelo de redes neuronales artificiales de tipo “back-propagation” para discriminar zonas de gran potencial minero en el campo de oro de Rodalquilar, sudeste de España. Utilizando datos de exploración a distancia de detección y minerales almacenados en una base de datos GIS. Seleccionó un modelo de red neural con tres neuronas en la capa oculta. La red entrenada estima un mapa potencial de oro de manera eficiente, lo que indica que pueden ser detectadas áreas tanto conocidas como desconocidas. Estos resultados iniciales sugieren que la red neuronal artificial puede ser una herramienta eficaz para la exploración de minerales.

Geoquímica. Estudios geoquímicos de elementos mayores y en trazas proveen de claves importantes para el entendimiento de procesos geológicos tanto de escala regional como global. Sin embargo, dado el constante incremento del volumen de información disponible, los geoquímicos se ven enfrentados cada vez con mayor frecuencia al problema de extraer información de bases de datos con un gran número de variables. Una herramienta comúnmente utilizada para atacar este problema es el Análisis de Componentes Principales (PCA, “Partial Component Analysis”). Sin embargo, por tratarse de un método lineal, las relaciones de mayor orden (no-lineales) entre las variables no son tomadas en cuenta. En tal sentido una oportunidad única para el estudio geoquímico multivariado lo proveen las técnicas modernas de análisis a través del uso de Redes Neuronales Artificiales Auto-organizativas (RNAA). Lacassie et al. (2003) utilizaron un algoritmo con el objetivo de encontrar representaciones visuales que simplifiquen el análisis químico multivariado sin perder la información relevante.

Guirese (2012) aplicó las redes neuronales artificiales a datos geoquímicos para realizar un análisis multi-elemento de este set de datos, el cual incluye un número elevado de muestras con características litológicas y mineralógicas variadas. Como resultado del análisis mediante RNA, fue posible sub-dividir el set de datos en 6 Grupos Geoquímicos, es decir, 6 conjuntos de muestras con características geoquímicas similares. La proyección de esta

información sobre el área de estudio, permitió identificar marcadas zonaciones geoquímicas, donde destacan dos zonas prospectivas.

Geohidrología. Rizzo & Dougherty (1994) sugirieron que las redes neuronales artificiales pueden ser herramientas útiles en geohidrología cuando se aplica a problemas específicos bien definidos para los que están bien adaptados, tales como la caracterización de acuíferos.

Hsu et al. (2002) mostraron que las redes neuronales artificiales (RNA) pueden ser útiles en la predicción de las variables hidrológicas, tales como el caudal, en particular cuando los procesos subyacentes tienen relaciones no lineales complejas.

Chitsazan et al. (2013) aplicaron el enfoque de red neuronal artificial (ANN) para pronosticar la fluctuación del nivel del agua subterránea en Aghili llano, el suroeste de Irán. Usó en la capa de entrada la Lluvia, la evaporación, la humedad relativa, la temperatura (máxima y mínima), la descarga del canal de riego y la recarga de aguas subterráneas, mientras que el futuro nivel de las aguas subterráneas lo usó como capa de salida. El grado de precisión del modelo ANN en la predicción es aceptable. Por lo tanto, determinó que las redes neuronales artificiales proporcionan un método factible para predecir el nivel de las aguas subterráneas en Aghili llano.

Aplicaciones en la Geotermia. Las redes neuronales artificiales se han aplicado en el desarrollo de geotermómetros de líquido, principalmente Na/K (p.ej. Bayram, 2001; Can, 2002; Díaz-González et al., 2008; Díaz-González & Santoyo, 2010) o en la estimación de la distribución de temperaturas estabilizadas (Spichak, 2006; Bassam et al., 2010).

Bayram (2001) y Can (2002) reportaron nuevas ecuaciones geotermométricas de Na/K usando redes neuronales artificiales (RNA). Bayram (2001) propuso un modelo simple de RNA empleando una función de activación sigmoideal no-lineal, la cual fue entrenada con las ecuaciones de algunos geotermómetros previamente desarrollados. La arquitectura de la RNA fue entrenada con datos sintéticos de Na y K (como neuronas de entrada) y las temperaturas de yacimiento (como neuronas de salida), inferidas a partir de las predicciones

de seis geotermómetros de Na/K: Truesdell y Fournier (1976); Fournier (1979); Tonani (1980); Arnórsson (1983); Nieva & Nieva (1987); y Giggenbach (1988), estando ausente en este análisis, por razones desconocidas, el de Verma & Santoyo (1997). Por su parte, Can (2002) desarrolló empíricamente una nueva ecuación geotermométrica de Na/K a partir de una base de datos mundial conteniendo un número muy limitado de datos de temperatura y composición ($n=39$) obtenidos de mediciones en pozos geotérmicos de varias partes del mundo. Esta RNA consideró un modelo simple de una neurona en la capa oculta, una entrada, y una salida, la cual fue entrenada con el algoritmo de retropropagación de error para la obtención de pesos ponderados usando una función de activación sigmoideal.

Bassam et al. (2010) utilizaron una red neuronal artificial para desarrollar un nuevo modelo predictivo para el cálculo de temperaturas estabilizadas de formación (TEF) en pozos geotérmicos. Se entrenó con éxito una arquitectura de tres capas utilizando una base de datos de pozos geotérmicos que contiene estimaciones de TEF estadísticamente normalizadas. Para la optimización del modelo de red neuronal artificial se usaron el algoritmo de aprendizaje Levenberg-Marquardt, la función de activación tangente hiperbólica sigmoide en la capa oculta y la función de activación lineal en la capa de salida.

Por otra parte, Álvarez del Castillo et al. (2012) desarrollaron una metodología basada en un modelo de red neuronal artificial para la obtención de una nueva correlación para determinar la fracción volumétrica de vapor en flujos bifásicos de pozos geotérmicos productores. En este trabajo se evaluaron diferentes funciones de activación para la capa oculta y la capa de salida y se usó el algoritmo de Levenberg-Marquardt.

Estas investigaciones señalan la utilidad y éxito que presentan las redes neuronales artificiales en el campo de las Ciencias de la Tierra. Siendo una herramienta práctica y económica para la industria geotérmica.

3. 2 Geoquimiometría

La estadística es una ciencia que se deriva de las matemáticas y puede definirse como “la ciencia que trata con la metodología de la colección, presentación y análisis de los datos, así como su uso” (Verma, 2005). Cuando es utilizada para analizar datos químicos se ha definido como quimiometría, en la cual los datos son transformados en información usada para la toma de decisiones (Beebe et al., 1998). Cuando estas herramientas estadísticas se aplican para el análisis de datos geoquímicos surge una nueva ciencia denominada “Geoquimiometría” (Verma, 2005). Esta última es empleada en esta tesis para el análisis de datos de composición química de la fase vapor de los fluidos geotérmicos así como el análisis de las temperaturas predichas por los geotermómetros.

3.2.1 Medidas de tendencia central y dispersión

Las medidas de tendencia central, llamadas así porque tienden a localizarse en el centro de la distribución de datos, son de gran importancia en el manejo de las técnicas estadísticas. Sin embargo, su interpretación no debe hacerse aisladamente de las medidas de dispersión, ya que la representatividad de ellas está asociada con el grado de concentración de la información (Guarín, 2002). Dentro de estas medidas se encuentran la media, moda, mediana, cuartil medio, cuartil superior, cuartil inferior, media geométrica, media armónica, media “tijereada” y la media “winsorizada”. Aun cuando la medida de tendencia central más comúnmente usada es la media, los otros parámetros señalados han demostrado una gran utilidad, especialmente cuando la distribución de datos experimentales se aparta de una distribución normal o cuando están presentes valores desviados, conocidos en la literatura estadística especializada como “outliers” (Verma, 2005). A continuación se describirán brevemente las medidas de tendencia central más usadas.

Media. También conocida como el “promedio”, “centroide”, “centro de gravedad” o parámetro estadístico de primer momento. La media (\bar{x}) es la suma de todos los valores de las mediciones o medidas ($x_1+x_2+x_3+\dots+x_n$), dividida por el número total de medidas (n):

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} \quad (3)$$

Es importante recordar que cuando la distribución de datos no es totalmente normal o Gaussiana, la media no es una medida adecuada para expresar su tendencia central (P. ej. Simpson, 1990; Verma, 2005).

Mediana. A partir de un arreglo ordenado de mediciones o medidas $x_1, x_2, x_3, \dots, x_{n-1}, x_n$, la mediana es el valor central ($x_{(n+1)/2}$) cuando el número de observaciones n es impar. Y para un número par de observaciones, la mediana es la media aritmética de los dos valores centrales $x_{(n/2)}$ y $x_{((n/2)+1)}$ (p.ej., Simpson, 1990; Miller & Miller, 1993; Guarín, 2002; Verma, 2005).

Moda. Siendo el valor más frecuente observado en un conjunto de datos, se puede estimar a partir de un arreglo ordenado de datos como podría ser $x_1, x_2, x_3, \dots, x_{n-1}, x_n$, o a partir de un histograma (p.ej. Simpson, 1990; Miller & Miller, 1993; Guarín, 2002; Verma, 2005). Después de describir las medidas de tendencia central, ahora se detallaran las principales medidas de dispersión.

En el análisis estadístico no basta el cálculo e interpretación de las medidas de tendencia central, ya que, por ejemplo, cuando pretendemos representar toda una información con la media aritmética, no estamos siendo absolutamente fieles a la realidad, pues suelen existir datos extremos inferiores y superiores a la media aritmética, los cuales, en honor a la verdad, no están siendo bien representados por este parámetro (Guarín, 2002). Para esto existen las medidas de dispersión.

Las medidas de dispersión son parámetros estadísticos que indican que tanto se alejan del centro los valores de la distribución de datos en una muestra. Para medir el grado de dispersión de una variable, se utilizan principalmente los siguientes indicadores: intervalo total o rango, intervalo intercuartil, desviación estándar, coeficiente de variación, desviación estándar relativa, desviación estándar geométrica, desviación mediana, error estándar de la media, límites de confianza e intervalos de confianza de la media, momentos de una distribución (media, varianza, skewness, kurtosis): Simpson, 1990; Guarín, 2002; Verma, 2005.

Desviación estándar. Este parámetro es el más frecuentemente usado como medida de dispersión. La desviación estándar (s) de la muestra está dada por:

$$s = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{(n-1)}} \quad (4)$$

Es importante mencionar que el parámetro s es una estimación de la desviación estándar de la población σ . En otras palabras, la repetición de un experimento genera diferentes valores de s (p.ej. Miller & Miller, 1993; Jensen et al., 2000; Guarín, 2002; Verma, 2005).

Coefficiente de Variación. El coeficiente de variación (c_v) se define como la relación que existe entre la desviación estándar de la muestra y su media (p.ej. Jensen et al., 2000; Guarín, 2002; Verma, 2005):

$$c_v = \frac{s}{\bar{x}} \quad (5)$$

Desviación estándar relativa. Cuando s_v requiere ser expresado en porcentaje, la desviación estándar relativa (%DER, equivalente en inglés a “Relative Estándar Deviation”: RSD%) resulta ser un parámetro muy útil (P.ej. Guarín, 2002; Verma, 2005):

$$s_v (\%) = \text{DER} = \text{RSD} = 100 s_v \quad (6)$$

Límites de confianza de la media e intervalo de confianza de la media. El intervalo dentro del cual se puede suponer que se encuentra el valor verdadero, es conocido como un intervalo de confianza, mientras que los valores extremos de dicho intervalo se llaman límites de confianza. El término “confianza” implica que podemos afirmar con una cierta probabilidad que el intervalo señalado incluye al valor verdadero. El tamaño del intervalo de confianza dependerá de la probabilidad que se quiera tener en éste para incluir el valor verdadero: cuanto más grande la certeza, más grande será el intervalo requerido. Generalmente, se usa el 95% ó 99% como niveles de confianza para expresar el intervalo de confianza de la media (también referidos con respecto a los niveles de significancia de 0.05 ó 0.01, respectivamente; Jensen, 1990; Miller & Miller, 1993; Verma, 2005).

Suponiendo una muestra del tamaño n , con una distribución normal, los límites de confianza de la media estarán dados por:

$$\bar{x} \pm \left\{ t_{n-1} \left(\frac{s}{\sqrt{n}} \right) \right\} \quad (7)$$

donde el subíndice $(n-1)$ se conoce como los grados de libertad (df o ν). El valor de t (también conocido como valor crítico) correspondiente a estos grados de libertad y un determinado nivel de confianza (nivel de significado) para ambas colas, se obtiene de tablas estadísticas de t (Miller & Miller, 1993; Barnett & Lewis, 1994; Verma & Quiroz, 2006).

Una vez obtenidos los límites, se puede expresar el intervalo de confianza de la media como:

$$\left[\bar{x} - \left\{ t_{n-1} \left(\frac{s}{\sqrt{n}} \right) \right\} \right] < \bar{x} < \left[\bar{x} + \left\{ t_{n-1} \left(\frac{s}{\sqrt{n}} \right) \right\} \right] \quad (8)$$

3.2.2 Pruebas estadísticas F y t -student

Tal y como se mencionó anteriormente, los datos que se manejan son muestras estadísticas, ya que nunca se conoce la población original (la cual teóricamente se asume que tiene una distribución normal). Por esta razón surgen los conceptos de pruebas de significancia para evaluar “si dos ó más muestras estadísticas provienen de la misma población o de poblaciones diferentes”.

La aplicación de una prueba estadística de significancia requiere: (i) formular una hipótesis nula (H_0) y una hipótesis alterna (H_1) adecuada; (ii) calcular el valor de un estadístico, una función matemática apropiada para resolver la validez estadística de dichas hipótesis; (iii) comparar el valor del estadístico calculado con el valor crítico a un determinado nivel de confianza; y (iv) concluir con la aceptación o rechazo de cualquiera de las dos hipótesis propuestas inicialmente a un cierto nivel de significancia. Las pruebas más comunes son la prueba F y la prueba t que se describen a continuación.

Prueba F . El objetivo de esta prueba es verificar la hipótesis nula H_0 que establece que “las dos muestras tienen la misma varianza” o, en su defecto, una hipótesis alterna H_1 que propone que “las dos muestras tienen diferentes varianzas”. Suponiendo que se cuenta con dos muestras x y y con sus respectivas desviaciones estándar s_x y s_y , estimadas a partir de su número de datos, n_x y n_y . El estadístico de la prueba F se define mediante la siguiente ecuación (Miller & Miller, 1993; Jensen, 2000; Verma, 2005):

$$F = \frac{s_x^2}{s_y^2} \quad (9)$$

donde F debe ser ≥ 1 . Los grados de libertad para el numerador y para el denominador son respectivamente n_x-1 y n_y-1 . En caso de que el valor sea < 1 , se debe calcular el estadístico como:

$$F = \frac{s_y^2}{s_x^2} \quad (10)$$

De tal manera que $F \geq 1$. El valor del estadístico F (calculado) se compara con el valor crítico de la distribución F (compilado de tablas estadísticas de F), ya sea para nivel de confianza del 95% o del 99% (p. ej., Miller & Miller, 1993; Barnett & Lewis, 1994). Es importante señalar que se debe tener mucho cuidado en identificar correctamente el numerador y el denominador del estadístico para cada caso, ya que las tablas de valor críticos no son simétricas. Cuando el valor del estadístico calculado es menor que el valor crítico de la tabla correspondiente, se acepta la hipótesis nula H_0 y se concluye que no existe diferencia significativa entre las varianzas. De lo contrario, cuando el valor calculado es mayor que el valor crítico de la tabla, se dice que la hipótesis nula no es válida y que por ende, se acepta la hipótesis alterna H_1 y se concluye que existe diferencia significativa entre las varianzas de las muestras evaluadas (Miller & Miller, 1993; Jensen, 2000; Verma, 2005).

Prueba t -Student. La prueba t -Student sirve para comparar el valor de dos medias calculadas de sus respectivas muestras. Esta se debe aplicar, generalmente, después de la prueba F . En esta prueba, la hipótesis nula H_0 establece que “las medias de las muestras son iguales” o que “las muestras vienen de la misma población o de poblaciones idénticas”, mientras que la hipótesis alterna H_1 plantea que “las medias de las muestras son diferentes”, que “existe diferencia significativa (a un cierto nivel de confianza) entre las dos medias”, o que

simplemente “las muestras no vienen de una misma población o vienen de poblaciones diferentes” (Miller & Miller, 1993; Jensen, 2000; Verma, 2005).

Cuando se aplica la prueba *t*-Student bajo esta hipótesis alterna H_0 o H_1 , se le llama prueba *t*-Student con dos colas (“two tailed test”). Se puede plantear la hipótesis alterna H_1 de una forma diferente, “si la media de la muestra es menor (o mayor) que la de la otra muestra”. En este caso, se llama prueba *t*-Student de una cola (“one tailed test”). En ambos casos se recomienda usar la prueba *t*-Student con un nivel de confianza de 95 ó 99% (Verma, 2005).

Prueba t-Student cuando las varianzas son iguales. Cuando la prueba F confirma la validez de la hipótesis nula H_0 , la prueba *t*-Student debe ser aplicada usando las siguientes ecuaciones (Miller & Miller, 1993; Jensen, 2000; Verma, 2005):

$$t = \frac{|\bar{x} - \bar{y}|}{s \left(\sqrt{\frac{1}{n_x} + \frac{1}{n_y}} \right)} \quad (11)$$

donde \bar{x} y \bar{y} son las medias de las dos muestras con un número de datos n_x y n_y respectivamente; s_x y s_y son las desviaciones estándar y finalmente s , la desviación estándar combinada de las dos muestras, la cual puede calcularse mediante la siguiente ecuación:

$$s = \sqrt{\frac{(n_x - 1)s_x^2 + (n_y - 1)s_y^2}{(n_x + n_y - 2)}} \quad (12)$$

Nótese que (n_x+n_y-2) son los grados de libertad para el valor crítico de la distribución t. La hipótesis nula H_0 se rechaza (y por lo tanto, la hipótesis alterna H_1 se acepta), si el valor del estadístico t-student (calculado) es mayor que el valor crítico tabulado para la distribución t que corresponde a la prueba de dos colas. De lo contrario (cuando el valor del estadístico calculado es menor o igual que el tabulado), se acepta la hipótesis nula H_0 como cierta o verdadera.

Prueba t-Student cuando las varianzas son diferentes. Cuando la prueba F nos indique que la hipótesis alterna es verdadera (las varianzas no son iguales) se calcula el estadístico t de acuerdo a la ecuación:

$$t = \frac{|x - y|}{\sqrt{\frac{s_x^2}{n_x} + \frac{s_y^2}{n_y}}} \quad (13)$$

Podemos notar que esta ecuación es más compleja que la utilizada cuando las varianzas son iguales. Por esta misma razón no pueden mezclarse (las varianzas). Asimismo para calcular los grados de libertad se necesita una ecuación aún más compleja:

$$v = \frac{\left(\frac{s_x^2}{n_x} + \frac{s_y^2}{n_y}\right)^2}{\left(\frac{s_x^4}{n_x^2(n_x - 1)} + \frac{s_y^4}{n_y^2(n_y - 1)}\right)} \quad (14)$$

El valor calculado no será un entero, por lo que los grados de libertad se obtienen truncando (y no redondeando) el número fraccionario obtenido.

Posteriormente se compara el valor del estadístico t calculado con el de las tablas de valores críticos y se toma la decisión que corresponda acerca de la hipótesis nula (H_0) y alterna (H_1) (Miller & Miller, 1993; Jensen, 2000; Verma, 2005).

CAPÍTULO 4

FUNDAMENTOS DE GEOTERMOMETRÍA DE GASES

4.1 Introducción

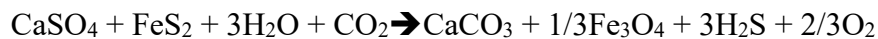
Ellis en 1957 señaló que los gases que constituyen el vapor magmático natural podrían ser usados para predecir temperatura. Los gases geotérmicos son introducidos originalmente en el fluido geotérmico por la recarga de agua, la interacción fluido-roca en el yacimiento o por invasión de fluido magmático. En un yacimiento sin perturbaciones, las concentraciones de los gases son controladas por las reacciones en equilibrio a la temperatura del yacimiento. Cuando ocurre la ebullición, la partición de gases entre la fase líquida y la fase vapor es controlada por la entalpía del fluido geotérmico y la temperatura de ebullición. La concentración de gases en el vapor es controlada por la fracción vapor y las concentraciones iniciales de los gases. En ciertos casos, donde el vapor puede viajar sin obstáculo a la superficie, como en pozos y fisuras amplias, ocurrirán cambios insignificantes en las concentraciones de los gases y sus proporciones y esos pueden ser usados como geotermómetros (Ping, 1996). La mayoría de los geotermómetros de gases requieren que sean conocidas las razones gas/vapor y vapor/fluido, así como las concentraciones de las especies gaseosas participantes (Henley, 1984).

4.2 Origen de los gases geotérmicos

La fase vapor del fluido geotérmico está compuesta principalmente de agua (~90-95% de H₂O) y en menor proporción de algunos gases (5-10%), entre los cuales destacan: CO₂, H₂S, H₂, CH₄, N₂, NH₃, CO y O₂. Estos gases son también conocidos como “gases incondensables”. Con respecto a la fase gaseosa del fluido geotérmico el dióxido de carbono (CO₂) es generalmente el mayor componente gaseoso, frecuentemente comprende más del 80% de los gases no condensables (Nicholson, 1993) y su concentración en la descarga total incrementa con la temperatura del yacimiento. El gas puede ser producido por alteración

térmica de las rocas carbonatadas, por la degradación de materia orgánica presente dentro de rocas sedimentarias y por solutos en el agua meteórica (la conversión de HCO_3 a CO_2) o puede ser, en parte, de origen magmático. La influencia del CO_2 no debe ser subestimada ya que la química del agua, la densidad, el pH, el punto de ebullición, la alteración de las rocas y la incrustación son procesos controlados en cierto grado por la concentración de CO_2 . Barnes et al. (1978) encontraron una estrecha relación entre las emanaciones de CO_2 y la sismicidad en ciertas áreas sugiriendo que la producción de CO_2 está relacionada con la actividad tectónica.

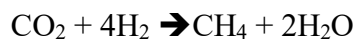
La concentración de ácido sulfhídrico (H_2S) en los fluidos geotérmicos varía ampliamente, pero se considera formado por la reducción del sulfato de calcio y por el sulfuro de hierro parcialmente reducido y parcialmente oxidado:



Comúnmente la concentración de H_2S decrece conforme el vapor asciende a la superficie, debido a las reacciones llevadas a cabo con la pared de roca, la disociación del azufre o la oxidación.

El hidrógeno (H_2) es un gas altamente reactivo, su concentración en ocasiones varía con la concentración de H_2S . Truesdell & Nehring en 1978 sugirieron que el hidrógeno es producido por reacciones a altas temperaturas del agua con los óxidos ferrosos y los silicatos contenidos en las rocas del yacimiento.

La concentración del metano (CH_4) es baja en el vapor, la reacción de Fischer-Tropsch:



ha sido aplicada satisfactoriamente en algunos campos geotérmicos para explicar su origen (Hulston & McCabe, 1962; Truesdell & Nehring, 1978). Además es posible que se derive de la descomposición de material orgánico y por la reacción entre material de carbono e

hidrógeno molecular (Gunter & Musgrave, 1971; Pnaichi et al., 1976; Panichi et al., 1978; D'Amore & Panichi, 1980).

El amoníaco (NH₃) es más soluble de los gases geotérmicos. Una alta concentración de amoníaco puede ser resultado de la alteración de materia orgánica presente en rocas sedimentarias. Conforme migra a la superficie, este gas puede ser removido como consecuencia de la reacción con las rocas de la pared o por disolución dentro del vapor.

El nitrógeno (N₂) se origina del agua meteórica saturada con aire atmosférico. Otro posible origen es la disociación de amoníaco,



lo que se atribuye a la degradación térmica de material orgánico rico en nitrógeno en las capas sedimentarias del Paleozoico-Triásico (D'Amore & Nuti, 1977).

La concentración de oxígeno (O₂) es muy baja en muestras no contaminadas, tanto es así que es difícil de ser detectada (Ping, 1991). La presencia de oxígeno en una muestra frecuentemente indica contaminación por aire durante el procedimiento de muestreo (Nicholson, 1993).

Los gases nobles atmosféricos: helio (He), neón (Ne), argón (Ar), kriptón (Kr) y xenón (Xe) contribuyen al fluido geotérmico por recarga de agua meteórica y adicionalmente, el He y Ar, por reacciones de lixiviación de la roca.

Los gases pueden ser divididos en dos grupos principales (Nicholson, 1993):

Gases reactivos: H₂O, CO₂, H₂S, NH₃, H₂, N₂, y CH₄. Estos gases intervienen en los procesos de equilibrio químico y proveen información sobre anomalías térmicas del subsuelo y la distribución temporal y espacial de la temperatura de un sistema geotérmico (a través de estudios geotermométricos).

Gases inertes o conservativos: gases nobles, hidrocarburos diferentes al CH₄. No toman parte en las reacciones químicas y pueden ser usados como trazadores naturales del subsuelo para proveer información sobre las fuentes de calor.

4.3 Reacciones y ecuaciones propuestas de geotermometría de gases

El primer geotermómetro empírico de gases fue propuesto por Tonani en 1973:

$$T^{\circ}C = \frac{9150}{\log \frac{CH_4}{H_2} + \log P_{CO_2} + 16.8} - 273.15 \quad (15)$$

de la que derivan:

$$T^{\circ}C = \frac{9150}{\log \frac{CH_4}{H_2} + 1 + 16.8} - 273.15 \quad \text{para } P_{CO_2} = 0.1 \text{ atm}$$

(16)

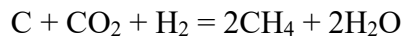
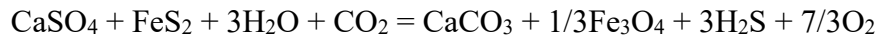
$$T^{\circ}C = \frac{9150}{\log \frac{CH_4}{H_2} + 16.8} - 273.15 \quad \text{para } P_{CO_2} = 1.0 \text{ atm} \quad (17)$$

$$T^{\circ}C = \frac{9150}{\log \frac{CH_4}{H_2} - 1 + 16.8} - 273.15 \quad \text{para } P_{CO_2} = 10 \text{ atm} \quad (18)$$

donde CH₄ y H₂ son las concentraciones de los gases en la mezcla de gases no condensables (% volumen). P_{CO₂} se calcula a partir del pH, el contenido de HCO₃ en la fase líquida de un pozo o del agua proveniente de un manantial cercano y asumiendo una temperatura de yacimiento admisible (Ping, 1991).

Debido a que los geotermómetros de gases son generalmente usados en etapas tempranas de la exploración, y aún no se sabe mucho acerca del sistema, el requerimiento de P_{CO₂} es una gran desventaja. Posteriormente, en 1980, D'Amore & Panichi sugirieron un geotermómetro de gases semi-empírico basado en la composición química de fluidos provenientes de 34

sistemas geotérmicos. Ellos encontraron que había una relación entre la concentración de H₂S, H₂, CH₄, CO₂ y la temperatura del yacimiento. Fueron consideradas las siguientes reacciones:



La primera reacción involucra carbón elemental (grafito) mientras que el segundo involucra anhidrita (CaSO₄), pirita (FeS₂) y magnetita (Fe₃O₄) además de otros gases (Arnórsson, 2000). La dependencia de la temperatura de las constantes de equilibrio para esas reacciones está descrita por:

$$\log K = 6.82 + \frac{11801}{T} - 7.11x \log T \quad (19)$$

y

$$\log K = 23.68 - \frac{62220}{T} \quad (20)$$

Se asumió que la presión parcial del oxígeno estaba controlada por un factor externo en función de la temperatura:

$$\log P_{\text{O}_2} = 8.20 - \frac{23643}{T(^{\circ}\text{K})} \quad (21)$$

El geotermómetro fue expresado:

$$T^{\circ}\text{C} = \frac{24775}{\alpha + \beta + 36.05} - 273.15 \quad (22)$$

donde:

$$\alpha = 2 \log \frac{\text{CH}_4}{\text{CO}_2} - 6 \log \frac{\text{H}_2}{\text{CO}_2} - 3 \log \frac{\text{H}_2\text{S}}{\text{CO}_2}$$

$$\beta = -7 \log P_{\text{CO}_2}$$

Si el pH, el contenido de HCO_3^- y una temperatura de yacimiento admisible no están disponibles, proponen los siguientes criterios en un orden de magnitud para P_{CO_2} :

- (a) $P_{\text{CO}_2} = 0.1 \text{ atm}$ if CO_2 (% volumen) <75
- (b) $P_{\text{CO}_2} = 1.0 \text{ atm}$ if CO_2 (% volumen) >75
- (c) $P_{\text{CO}_2} = 10 \text{ atm}$ if CO_2 (% volumen) >75 , $\text{CH}_4 > 2\text{H}_2$, and $\text{H}_2\text{S} > 2\text{H}_2$

Sin embargo, este geotermómetro también requiere saber la presión parcial del CO_2 antes de usarlo (Ping, 1991; Ping, 1996; Cisne, 2006). El método de seleccionar la presión parcial de CO_2 es arbitrario y no se puede esperar que aplique para todos los campos. Sin embargo, para varios sistemas geotérmicos brinda valores de temperatura que igualan a aquellos encontrados en pozos (Arnórsson, 2000).

Usando datos termodinámicos de solubilidades de gases y estabilidad de minerales, Nehring & D'Amore (1984) derivaron los siguientes geotermómetros:

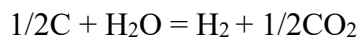
$$T_{(HC)} = 190.3 + 55.97Q_{HC} - 0.14Q_{HC}^2 \quad (23)$$

y

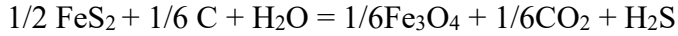
$$T_{(SC)} = 194.3 + 56.44Q_{SC} + 1.53Q_{SC}^2 \quad (24)$$

donde: $Q_{HC} = \log m_{\text{H}_2} + 0.5 \log m_{\text{CO}_2}$ y $Q_{SC} = \log m_{\text{H}_2\text{S}} + 1/6 \log m_{\text{CO}_2}$, las concentraciones están en mmol/kg.

Estos geotermómetros están basados en las siguientes reacciones:



y



y en la suposición de que el fluido colectado en pozos es representativo del agua en el yacimiento geotérmico (Ping, 1991).

D'Amore & Truesdell (1985) generaron una nueva forma de obtener la temperatura y la fracción vapor en los yacimientos. Esta es aplicable a campos geotérmicos de alta y baja temperatura. Las principales suposiciones son:

- 1) La muestra de descarga es obtenida de una única fuente de fluido, el cual consiste en una mezcla de líquido y vapor.
- 2) La fuente de fluido y las reacciones consideradas están en equilibrio químico y termodinámico.
- 3) No hay ni ganancia ni pérdida de masa (Ping, 1991).

Las ecuaciones del balance de masa son:

$$n_{H_2O,v} + n_{H_2O,l} = n_{H_2O,WH} \quad (25)$$

$$n_{i,v} + n_{i,l} = n_{i,WH} \quad (26)$$

$$B_i = \frac{\left(\frac{n_i}{n_{H_2O}} \right)_v}{\left(\frac{n_i}{n_{H_2O}} \right)_l} \quad (27)$$

$$y = \frac{n_{H_2O,v}}{(n_{H_2O,v} + n_{H_2O,l})} \quad (28)$$

A_i es definido como:

$$A_i = y + \frac{(1-y)}{B_i} \quad (29)$$

entonces:

$$\left(\frac{n_i}{n_{H_2O}}\right)_v = \frac{\left(\frac{n_i}{n_{H_2O}}\right)_{WH}}{A_i} \quad (30)$$

donde:

n_i es el número de moles del componente i ;

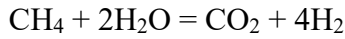
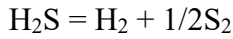
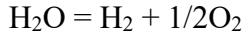
v y l indican fase vapor y fase líquida;

WH indican cabezal

y es la fracción molar del vapor en el yacimiento con respecto a la descarga total;

B_i es el coeficiente de distribución molar entre las fases vapor y líquida para las especies i .

Se consideran las siguientes reacciones y sus expresiones de equilibrio:



$$\log\left(\frac{n_{H_2}}{n_{H_2O}}\right)_{WH} = 2.52 - \frac{12776}{T} - \frac{1}{2}\log f_{O_2} + \log A_{H_2}$$

$$\log\left(\frac{n_{H_2S}}{n_{H_2O}}\right)_{WH} = 5.12 - \frac{6483.5}{T} - 0.79\log T - \frac{1}{6}\log f_{O_2} + \log A_{H_2S}$$

$$4\log\left(\frac{n_{H_2}}{n_{H_2O}}\right)_{WH} + \log\left(\frac{n_{CO_2}}{n_{CH_4}}\right)_{WH} = -25.42 - \frac{3806.6}{T} + 8.304\log T + \log\left(\frac{A_{CO_2}}{A_{CH_4}}\right) + 4\log A_{H_2}$$

Las tres ecuaciones contienen tres variables independientes: temperatura, y y fugacidad del oxígeno. D'Amore & Truesdell definieron FT, HSC y HSH y fue escrito un programa para encontrar las soluciones numéricas (Ping, 1991; Ping, 1996).

$$HSC = 6 \log\left(\frac{H_2S}{H_2O}\right) + 2 \log\left(\frac{H_2}{H_2O}\right) - \log\left(\frac{CH_4}{CO_2}\right) \quad (31)$$

$$FT = 4 \log\left(\frac{H_2}{H_2O}\right) - \log\left(\frac{CH_4}{CO_2}\right) \quad (32)$$

$$HSH = 3 \log\left(\frac{H_2S}{H_2O}\right) - \log\left(\frac{H_2}{H_2O}\right) \quad (33)$$

Arnórsson (1983) sugirió un geotermómetro empírico basado solo en la concentración de CO_2 en el vapor. Más tarde propuso cinco geotermómetros de gases, los cuales fueron calibrados con datos provenientes de ciertos pozos seleccionados (Arnórsson & Gunnlaugsson, 1985). Esos geotermómetros están basados en la suposición de que los yacimientos geotérmicos son sistemas de una sola fase. Tres de estos geotermómetros están basados en la concentración total de CO_2 , H_2S y H_2 en el vapor, y los otros dos están basados en las proporciones CO_2/H_2 y H_2S/H_2 . Se propusieron diferentes funciones para diferentes rangos de temperatura y concentraciones de cloruros para los geotermómetros de H_2 , H_2S y CO_2/H_2 , debido a que diversos estudios mineralógicos de pozos muestran que prevalecen diferentes concentraciones de gases a diferentes temperaturas para aguas diluidas y salmueras. Ellos señalan que en ocasiones es mejor calibrar los geotermómetros usando datos geotérmicos que termodinámicos, particularmente cuando está involucrado el equilibrio de minerales de silicato. Algunos errores pequeños en los datos termodinámicos de esos minerales pueden producir desviaciones inaceptables en las predicciones de temperatura aún si el error es menor que una milésima parte de la entalpía de formación del mineral. A continuación se presentan las funciones de temperatura para los geotermómetros de gases propuestos.

$$T(\text{CO}_2) = -44.1 + 269.25 \log m_{\text{CO}_2} - 76.88(\log m_{\text{CO}_2})^2 + 9.52(\log m_{\text{CO}_2})^3 \quad (34)$$

$$T(\text{H}_2\text{S})^a = 246.7 + 44.81 \log m_{\text{H}_2\text{S}} \quad (35)$$

$$T(\text{H}_2\text{S})^b = 173.2 + 65.04 \log m_{\text{H}_2\text{S}} \quad (36)$$

$$T(\text{H}_2)^a = 277.2 + 20.99 \log m_{\text{H}_2} \quad (37)$$

$$T(\text{H}_2)^b = 212.2 + 38.59 \log m_{\text{H}_2} \quad (38)$$

$$T(\text{CO}_2 / \text{H}_2)^a = 341.7 - 28.57 \log m_{\text{CO}_2/\text{H}_2} \quad (39)$$

$$T(\text{CO}_2 / \text{H}_2)^b = 311.7 - 66.72 \log m_{\text{CO}_2/\text{H}_2} \quad (40)$$

$$T(\text{H}_2\text{S} / \text{H}_2)^a = 304.1 - 39.48 \log m_{\text{H}_2\text{S}/\text{H}_2} \quad (41)$$

La temperatura está en °C; T(CO₂) aplica para todas las aguas (T > 100°C). El superíndice “a” identifica a las ecuaciones válidas para las aguas arriba de 300°C o aguas en el rango 200-300°C si el cloruro es mayor a 500 ppm. El superíndice “b” identifica las ecuaciones válidas para aguas por debajo de 200°C y en el rango 200-300°C si el cloruro es menor a 500 ppm. Las concentraciones están dadas en mmol/kg de vapor.

Arnórsson (1987) desarrolló un geotermómetro de N₂/CO₂, el cual está basado en la suposición de que la concentración de N₂ en el yacimiento deriva del agua meteórica local en equilibrio con el aire atmosférico. Las funciones de temperatura para agua a 25°C y 5°C están dadas por:

$$T(25^\circ\text{C}) = 135.9 + 63.14 \log(m_{\text{CO}_2} / m_{\text{N}_2}) + 6.241 \log(m_{\text{CO}_2} / m_{\text{N}_2})^2 - 1.813 \log(m_{\text{CO}_2} / m_{\text{N}_2})^3 \quad (42)$$

$$T(5^\circ\text{C}) = 148.5 + 64.35 \log(m_{\text{CO}_2} / m_{\text{N}_2}) + 5.239 \log(m_{\text{CO}_2} / m_{\text{N}_2})^2 - 1.832 \log(m_{\text{CO}_2} / m_{\text{N}_2})^3 \quad (43)$$

Se debe ser cuidadoso al aplicar este geotermómetro ya que la posible contaminación atmosférica durante el muestreo puede afectar la estimación. Además existe el riesgo de que una pequeña cantidad de oxígeno pueda disolverse en la solución de hidróxido de sodio o potasio por lo que una corrección de la contaminación es muy difícil (Ping, 1991; Ping, 1996; Arnórsson, 2000; Altamirano, 2006).

En 1991 Giggenbach propuso geotermómetros de gases basados en proporciones. Las funciones de temperatura de estos geotermómetros son (en %mol):

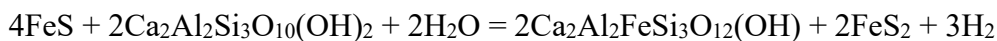
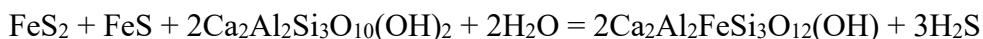
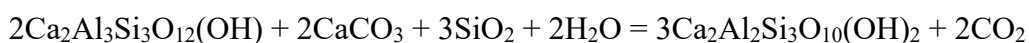
$$T_{H_2/Ar} = 70 \left(2.5 + \log \frac{H_2}{Ar} \right) \quad (44)$$

$$T_{CH_4/CO_2} = \frac{4625}{10.4 + \log \frac{CH_4}{CO_2}} - 273.15 \quad (45)$$

La calibración del geotermómetro de H₂/Ar está basado en la suposición de que la proporción de ácido ferroso a férrico en la roca fija la fugacidad de la relación H₂/H₂O. Así mismo, las concentraciones de Ar son consideradas como las del agua saturada con aire a 25°C (Ping, 1996; Arnórsson, 2000; Altamirano, 2006). El CO₂ fue considerado por la siguiente reacción:



Los geotermómetros de gases de Arnórsson et al. (1998) utilizan las concentraciones de las especies gaseosas en mmol/kg. Las ecuaciones para esos geotermómetros están basadas en las siguientes reacciones:



Las ecuaciones geotermométricas obtenidas son válidas para gases presentes en el vapor a una presión atmosférica a 100°C:

$$T(CO_2) = 4.724Q^3 - 11.068Q^2 + 72.012Q + 121.8 \quad (46)$$

$$T(H_2S) = 4.811Q^2 + 66.152Q + 177.6 \quad (47)$$

$$T(H_2) = 6.630Q^3 + 5.836Q^2 + 56.168Q + 227.1 \quad (48)$$

donde $Q = \log \text{ mmol/kg}$ del gas.

Con la suposición de que las concentraciones de N_2 y Ar en aguas de yacimientos geotérmicos es igual a aquella presente en el agua saturada con aire a 5°C , fueron obtenidas las siguientes ecuaciones geotermométricas:

$$T(CO_2 / N_2) = 1.739Q^3 + 7.599Q^2 + 48.751Q + 173.2 \quad (49)$$

$$T(H_2S / Ar) = 4.108Q^2 + 42.265Q + 137.6 \quad (50)$$

$$T(H_2 / Ar) = 0.640Q^2 + 43.260Q + 170.0 \quad (51)$$

donde Q representa el logaritmo de la relación respectiva.

En resumen, no obstante el importante desarrollo alcanzado en las técnicas geotermométricas y las mejoras realizadas a los geotermómetros, tanto de solutos como de gases, la predicción de temperaturas geotérmicas sigue exhibiendo problemas, especialmente cuando éstas dos herramientas se aplican en un mismo sitio (ver, p. ej., Verma *et al.*, 2006a; Palabiyik & Serpen, 2008). Es en estos problemas en los que se basa este trabajo de investigación.

CAPÍTULO 5

EVALUACIÓN GEOQUIMIOMÉTRICA DE LA EFICIENCIA DE LOS GEOTERMÓMETROS

La inmensa cantidad de energía almacenada en sistemas hidrotermales y de roca seca caliente hace de la energía geotérmica una importante fuente de energía renovable y sustentable a ser considerada para el futuro (Chamorro et al. 2012). La estimación confiable de temperaturas de yacimientos profundos en ese tipo de sistemas es ampliamente reconocida como una tarea importante para la estimación de las reservas de la energía geotérmica. Por lo tanto, el desarrollo de metodologías geoquímicas para mejorar la exploración y explotación de recursos geotérmicos es concebido como un objetivo importante para la industria geotérmica. Los geotermómetros son herramientas valiosas utilizadas para la predicción de temperaturas de equilibrio en la profundidad, la evaluación de las reservas de energía en la exploración de nuevos sistemas geotérmicos, y para el monitoreo geoquímico de los campos existentes en explotación (Verma & Santoyo 1997; Díaz-González et al., 2008). Los geotermómetros de solutos y gases son herramientas prácticas y de bajo costo de uso común para la predicción de temperaturas de equilibrio de los sistemas geotérmicos “convectivos” (hidrotermales). La composición química de los fluidos geotérmicos provenientes de manifestaciones superficiales, tales como, fumarolas y manantiales termales, así como fluidos extraídos de los pozos de producción refleja las condiciones que prevalecen en el yacimiento, la actividad volcánica en el subsuelo, entre otros procesos importantes (p. ej., Nicholson 1993; Arnórsson 2000a). La composición química de las fases líquida y vapor de estos fluidos geotérmicos también proporciona limitaciones importantes en los procesos hidrogenoquímicos, los patrones de flujo subterráneo, así como las condiciones térmicas (geotermometría) y de recarga del yacimiento (Nicholson, 1993). Se han propuesto geotermómetros de solutos y de gases para estimar temperaturas de yacimiento usando la composición química de las salmueras geotérmicas y gases, respectivamente (por ejemplo, Fournier 1979; D'Amore &

Panichi 1980; Arnórsson & Gunnlaugsson 1983; Nehring & D'Amore 1984; Verma & Santoyo 1997; Díaz-González et al 2008).

No obstante el importante desarrollo alcanzado en las técnicas geotermométricas y las mejoras realizadas a los geotermómetros, tanto de solutos como de gases, la predicción de temperaturas geotérmicas sigue exhibiendo problemas, especialmente cuando éstas dos herramientas se aplican en un mismo sitio (ver, p. ej., Verma *et al.*, 2006a; Palabiyik & Serpen, 2008). Por esta razón, se han realizado algunos estudios de evaluación de las ecuaciones geotermométricas existentes.

5.1 Estudios previos

Santoyo & Verma (1993) y Verma & Santoyo (1997) criticaron, por primera vez, la validez y confiabilidad de los geotermómetros de Na/K mediante la teoría estadística de propagación de errores y la aplicación de la prueba de discordancia para datos bivariados, respectivamente. Esta metodología les permitió evaluar el efecto de los errores estadísticos (debidos a la regresión de los datos de temperatura y log Na/K) y los errores analíticos (de Na y K), sobre las temperaturas calculadas por el geotermómetro de Na/K de Fournier (1979). A partir de este estudio se encontró que los errores de los coeficientes del geotermómetro (inferidos por regresión lineal ordinaria, RLO) constituyen la principal fuente de error de esta ecuación.

Reseñas mundiales recientes (p. ej., Díaz-González et al., 2008) exponen, como problemática de la predicción confiable de temperaturas, la influencia de fuentes asociadas de error en los geotermómetros, entre las cuales destacan los errores de: (i) análisis químicos y de las mediciones de temperatura de fondo en los pozos; (ii) coeficientes de regresión de las ecuaciones; (iii) uso incorrecto de las ecuaciones geotermométricas y de las unidades de concentración en éstas; (iv) la calibración de geotermómetros y sus condiciones de aplicabilidad de temperatura y concentración; (v) la escasez de datos de composición geoquímica; (vi) el manejo estadísticamente correcto de datos composicionales; y (vii) la

presencia de valores desviados o discordantes en las bases de datos usadas para la calibración de los geotermómetros.

Debido a esta problemática, que se ha reflejado en las incertidumbres y discrepancias que exhiben actualmente la mayoría de los geotermómetros usados en la predicción de temperaturas, se realizó una evaluación geoquimiométrica en algunos geotermómetros de solutos y de gases.

5.2 Metodología

Se estimaron las temperaturas de yacimiento en 10 sistemas o campos geotérmicos del mundo aplicando 13 geotermómetros de soluto, específicamente de Na/K (por ser el más estable y sistemático en su capacidad de predicción), y por primera vez en la literatura mundial, 21 geotermómetros de gases (con ecuaciones que determinan directamente la temperatura de yacimiento como una función de las concentraciones de los gases participantes en una amplia variedad de reacciones que dominan en ambientes geotérmicos). Las temperaturas predichas, fueron evaluadas y comparadas con temperaturas de fondo medidas en pozos mediante técnicas geoquimiométricas.

Con estos propósitos, se creó una base de datos que contiene información de la composición química de fluidos de pozos de campos geotérmicos del mundo (fases líquida y vapor) y mediciones de temperatura de fondo (referidas como BHT por su definición en inglés “Bottom Hole Temperature”). Esta base de datos contiene información compilada de pozos productores perforados en los siguientes campos geotérmicos, incluyendo su fuente original (Tabla 3): Los Azufres, LAGF (González-Partida et al. 2005); Los Humeros, LHGF (Tello et al. 2000); Las Tres Vírgenes, LTVGF (Verma et al. 2006); Cerro Prieto, CPGF (Nieva et al. 1982); Takigami, TGF (Furuya et al. 2000); Berlín, BGF (D’Amore & Mejía 1999); Krafla, KGF (Arnórsson & Gunnlaugsson 1985; Gudmundsson & Arnórsson 2002; Arnórsson et al. 2010; Sanjuan et al. 2010); Námafjall, NGF (Arnórsson & Gunnlaugsson 1985; Gudmundsson & Arnórsson 2002); Hveragerdi, HGF (Arnórsson & Gunnlaugsson 1985), y Svartsen, SGF (Arnórsson & Gunnlaugsson 1985).

A pesar de que existen muchos geotermómetros de solutos disponibles en la literatura, en este trabajo se consideraron solo los geotermómetros de Na/K, ya que son los menos afectados por los procesos de dilución o mezcla además de que son ampliamente usados para la exploración de campos geotérmicos (Díaz-González et al. 2008). En este trabajo, la geotermometría de cationes está basada en los 12 geotermómetros de Na/K disponibles en la literatura (es decir, Fournier & Truesdell 1973; Truesdell 1976; Fournier 1979; Tonani 1980; Arnórsson et al. 1983; Giggenbach 1988; Verma & Santoyo 1997; Arnórsson 2000b; Can 2002; Díaz-González et al. 2008; se puede ver la lista completa en la tabla 1 y en Verma et al. 2008). Para aplicar correctamente todas las ecuaciones de los geotermómetros de Na/K se usó el programa SolGeo (Verma et al. 2008), el cual fue desarrollado para estimar temperaturas de yacimientos.

En el caso de la geotermometría de gases, se usó el programa GasGeo (Pandarinath et al. 2011; Pérez-Barrera 2011). Este programa fue desarrollado para 21 geotermómetros simples, lo que significa que solo requiere la concentración de los gases como dato principal (ver tabla 2; D'Amore & Panichi 1980; Nehring & D'Amore 1984; Arnórsson & Gunnlaugsson 1985; Giggenbach & D'Amore 1991; Supranto et al. 1996; Arnórsson et al. 1998; Blamey 2006). Entre los 21 geotermómetros, 11 ecuaciones requieren la composición de los gases en unidades de concentración de mmol/kg, tres en mmol/mol, tres en %vol, tres en fracción molar, y uno solo en %mol. Una hoja de Excel integrada al programa GasGeo es capaz de convertir las unidades de concentración de %peso a mmol/kg, si está disponible el dato de contenido total de gas.

Excepto por esto, la conversión de unidades de concentración en otras es una tarea compleja que requiere varios datos fisicoquímicos de los gases (por ejemplo, presión, contenido total del gas, etc.), los cuales raramente son reportados en la literatura. Debido a esta limitante, se estimaron las temperaturas de yacimiento aplicando solo aquellos geotermómetros que requieren las unidades de concentración en las que están reportados los gases. Por ejemplo, si la literatura reporta los datos de gases en %vol, GasGeo aplica solo los geotermómetros que requieren las concentraciones en esas unidades. La única excepción es, si la concentración del gas está reportada en %peso y el dato de contenido total del gas está

disponible, se realiza una conversión de %peso a mmol/kg y son aplicados todos los geotermómetros que requieren las unidades de mmol/kg. Los geotermómetros de gases que consideran las estimaciones de temperaturas como una función de más variables independientes, como el exceso de vapor y los coeficientes de distribución de los gases en las fases líquida y vapor, entre otras (por ejemplo, Bertrami et al. 1985), no fueron considerados en este estudio.

Por otro lado, las unidades de concentración del Na y el K en el agua y las unidades del gas en las muestras de vapor así como el número de geotermómetros aplicados (n) para cada sistema geotérmico estudiado son: LAGF (mg/l, n=11; mmol/kg, n=11); LTVG (mg/l, n=11; mmol/kg, n=11); LHGF (mg/l, n=11; mmol/mol, n=3); CPGF (mg/l, n=13; fracción molar, n=13); TGF (ppm, n=11; %volumen, n=1); BGF (mg/kg, n=11; mmol/mol, n=1); KGF (ppm, n=11; mmol/kg, n=11); NGF (ppm, n=11; mmol/kg, n=11); HGF (ppm, n=11; mmol/kg, n=11); y SGF (ppm, n=11; mmol/kg, n=11). La confiabilidad de las temperaturas de yacimiento estimadas a través de los geotermómetros de solutos y de gases fue evaluada comparando esas estimaciones con las medidas de BHT de los pozos geotérmicos. La ecuación usada para esta comparación, en términos de porcentaje de diferencia (%) fue:

$$Diferencia(\%) = \left(\frac{T_{geo} - T_{BHT}}{T_{BHT}} \right) \times 100 \quad (52)$$

donde T_{geo} es la temperatura del yacimiento estimada por cualquier geotermómetro, ya sea de soluto (T_{sg}) o de gas (T_{gg}) usando la correspondiente química del fluido (agua o gas), y T_{BHT} es la temperatura de fondo de pozo medida. Las mediciones de BHT son consideradas aquí como las temperaturas más representativas en un pozo geotérmico. Cuando el valor del porcentaje de diferencia es positivo, la temperatura predicha por el geotermómetro es mayor que la BHT de los pozos (lo que puede interpretarse como sobreestimación) y viceversa. Se calcularon los porcentajes de diferencia y se usaron como parámetros estadísticos para entender qué porcentaje de las estimaciones geotermométricas son:

Tabla 3. Base de datos usada para la aplicación de los geotermómetros

Número consecutivo	Pozo geotérmico	BHT (°C)	Concentración de Na-K en fluidos geotérmicos			Concentración de gases geotérmicos				
			Na	K	Cg	CO ₂	H ₂ S	H ₂	Ar	CH ₄
<i>Sistema geotérmico Los Azufres, México (latitud 19.84° N; longitud -100.60°O; unidades del agua en mg/L y gases en mmol/kg)</i>										
1	AZ-002	280	3722.40	510.10	1.17	191.41	7.53	2.38	1.31	0.00
2	AZ-004	334	1672.00	381.00	0.13	25.04	2.71	0.50	0.00	0.04
3	AZ-005	296	234.70	61.42	3.11	694.39	12.49	1.54	0.25	0.62
4	AZ-009	329	2112.00	544.22	0.84	102.01	7.60	16.08	3.22	0.00
5	AZ-013	271	27.40	2.60	2.09	460.47	13.47	6.98	0.06	0.77
6	AZ-016	287	4442.00	746.00	4.01	898.41	6.79	3.60	0.17	0.00
7	AZ-018	271	1697.10	379.80	8.02	1806.47	10.68	1.59	0.05	1.92
8	AZ-019	277	2247.00	573.00	0.21	40.03	5.45	1.54	0.07	0.13
9	AZ-022	302	1970.00	497.00	1.25	272.10	8.22	1.86	0.02	0.19
10	AZ-025	248	1716.50	403.00	0.59	128.16	4.54	0.88	0.01	0.26
11	AZ-026	278	1712.70	368.50	12.93	2917.99	10.78	1.73	0.07	5.14
12	AZ-028	302	1753.20	387.00	0.31	63.88	4.91	0.99	1.05	0.04
13	AZ-033	265	3605.80	651.00	3.16	700.95	6.47	1.51	0.18	0.46
14	AZ-035	276	1035.00	224.70	1.59	352.23	8.35	1.46	0.07	0.28
15	AZ-036	267	3195.00	521.24	3.92	872.45	9.88	2.90	0.18	0.35
16	AZ-042	295	1636.00	363.00	0.49	105.59	7.42	0.00	0.00	0.00
17	AZ-043	262	1539.80	330.60	2.08	463.17	9.73	0.97	0.02	0.46
18	AZ-045	278	1000.00	277.00	0.49	54.68	6.24	19.67	1.71	0.00
19	AZ-046	274	3494.70	542.78	2.05	441.63	7.94	4.07	0.08	0.04
20	AZ-047	352	4426.20	1162.50	1.60	354.28	8.86	1.16	0.71	0.25
21	AZ-048	311	1583.10	365.50	0.21	41.24	5.84	0.53	0.01	0.12
22	AZ-051	301	1402.70	345.10	0.60	128.00	7.12	1.24	0.08	0.46
23	AZ-055	281	2111.60	505.00	0.85	187.42	5.12	0.91	0.03	0.13

continúa

Número consecutivo	Pozo geotérmico	BHT (°C)	Concentración de Na-K en fluidos geotérmicos		Cg	Concentración de gases geotérmicos				
			Na	K		CO ₂	H ₂ S	H ₂	Ar	CH ₄
24	AZ-056	327	2085.00	618.00	0.52	106.93	10.62	1.38	0.06	0.28
<i>Sistema geotérmico Las Tres Virgenes, México (latitud 27.40° N; longitud -112.40°O; unidades del agua en mg/L y gases en mmol/kg)</i>										
1	LV1-1995	220	4435	700	1.40	311.43	4.93	3.40	0.14	0.13
2	LV1-1996	220	4435	700	2.40	529.52	12.68	6.67	0.14	1.20
3	LV2-1998	266	2600	400	2.20	490.39	7.04	1.75	0.08	0.41
4	LV3-1995	250	4400	740	6.20	1367.92	16.37	11.99	0.67	2.01
5	LV3-1996	250	4400	740	1.30	292.14	3.81	2.84	0.08	1.08
6	LV3-1998	250	4400	740	0.80	180.43	1.57	0.00	0.00	0.00
7	LV4-1997	223	5500	1000	1.76	391.51	1.76	---	---	---
8	LV5-1997	225	4900	770	1.48	327.54	2.17	2.20	0.19	1.08
<i>Sistema geotérmico Los Humeros, México (latitud 19.35° N; longitud 97.23°O; unidades del agua en mg/L y gases en mmol/mol)</i>										
1	H-1	204	267.00	45.00	17.70	982.10	10.90	1.16	0.02	1.56
2	H-6	322	142.00	31.00	21.50	910.10	58.60	5.59	0.09	16.89
3	H-7	340	177.00	36.00	11.20	928.20	50.50	4.54	0.12	3.14
4	H-8	284	243.00	48.00	17.40	946.50	36.90	3.66	0.11	4.43
5	H-9	307	250.00	52.00	11.00	857.40	70.30	14.00	0.30	33.69
6	H-11	384	207.00	32.00	21.00	962.40	25.60	2.12	0.05	4.26
7	H-12	356	87.00	19.00	40.50	921.10	40.00	6.55	0.03	27.04
8	H-15	268	113.00	21.00	18.50	863.50	73.20	12.30	0.26	39.14
9	H-16	319	549.00	24.00	8.10	868.30	90.40	8.20	0.16	22.21
10	H-17	267	91.00	19.00	11.60	913.80	59.00	4.50	0.08	12.51
11	H-19	262	140.00	21.00	15.40	958.80	33.00	1.58	0.03	0.58
12	H-20	330	160.00	20.00	24.70	897.00	70.00	5.85	0.08	18.89
13	H-28	363	228.00	19.00	18.10	958.30	24.70	2.72	0.05	6.79
14	H-30	304	205.00	29.00	8.70	820.30	123.00	11.48	0.29	25.23

continúa

Número consecutivo	Pozo geotérmico	BHT (°C)	Concentración de Na-K en fluidos geotérmicos		Cg	Concentración de gases geotérmicos				
			Na	K		CO ₂	H ₂ S	H ₂	Ar	CH ₄
15	H-31	300	115.00	21.00	14.90	870.50	73.20	10.73	0.20	33.68
16	H-32	350	64.00	12.00	10.60	914.20	61.00	4.13	0.08	13.12
17	H-33	290	363.00	33.00	8.10	864.40	90.50	9.11	0.24	17.46
18	H-34	302	177.00	24.00	22.60	969.40	18.50	1.98	0.03	4.81
<i>Sistema geotérmico Takigami, Japón (latitud 33.12° N; longitud 131.55° O; unidades del agua en ppm y gases en %volumen)</i>										
1	TT-1	212	443.00	41.00		85.10	5.50	0.04		0.80
2	TT-2	205	466.00	47.10		75.70	7.00	0.20		0.90
3	TT-7	217	475.00	63.30		84.70	9.00	0.06		0.77
4	TT-8	215	488.00	57.40		71.80	5.90	0.10		0.51
5	TT-13	246	514.00	93.30		67.60	4.10	0.09		0.70
6	TT-14	238	502.00	89.00		83.10	11.00	0.09		1.20
<i>Sistema geotérmico Berlín, El Salvador (latitud 13°30' N; longitud 88°32' O; unidades del agua en mg/kg y gases en mmol/mol)</i>										
1	TR-1	239	2766.00	232.00		398	33.4	3.1		0.6
2	TR-2a	289	2900.00	622.00		2066	71.6	6.9		1
3	TR-2b	289	2900.00	622.00		1223	134.3	14.4		3
4	TR-3	296	4942.00	975.00		1050	130	18		2.6
5	TR-5a	305	2695.00	711.00		790	197	16.7		2.7
6	TR-5b	305	2695.00	711.00		744	147.2	13		3
7	TR-9a	295	3201.00	731.00		1210	10	18		3
8	TR-9b	295	3201.00	731.00		1701	137.8	17.1		3.3
9	TR-10	250	3104.00	496.00		3206	50.6	14.3		4.9
<i>Sistema geotérmico Krafla, Islandia (latitud 65°42' N; longitud 16.46° O; unidades del agua en ppm y gases en mmol/kg)</i>										
1	well-K21	170	142.77	19.94		110.25	19.45	14.28		0.460
2	well-K14	330	157.25	20.72		317	32.0	31.10	0.039	0.175

continúa

Número consecutivo	Pozo geotérmico	BHT (°C)	Composición química del agua geotérmica		Cg	Concentración de gases geotérmicos				
			Na	K		CO ₂	H ₂ S	H ₂	Ar	CH ₄
3	well-K20	300	214.26	43.79		887	40.5	24.70	0.049	0.320
4	well-K12	320	135.41	26.20		314	27.3	13.30	0.031	0.354
5	well-K13a	327	279.56	31.28		228	27.2	20.50	0.021	0.081
6	well-K28	240	222.08	25.80		64	2.5	1.00	0.429	0.414
7	well-K15	340	206.22	38.32		250	37.5	21.20	0.034	0.044
8	well-K14b	324	22.80	3.81		260	15.8	38.80	0.950	0.144
9	well-K17	290	112.42	20.33		184	26.4	29.70	0.050	0.799
10	well-K5	300	195.18	17.99		66	6.2	4.40	0.281	1.257
11	well-K13b	327	273.81	30.11		204	25.0	29.40	0.073	0.087
12	well-K24	225	217.94	25.80		59	7.4	0.20	0.232	1.064
13	well-K27	320	159.78	25.41		135	18.9	23.00	0.060	0.258
14	well-K9	290	221.62	26.20		53	47.9		0.037	0.210
15	well-KRA_6	300	165.80	33.04		250.1	3.8	6.59	1.920	0.711
16	well-KRA8	215	193.00	25.46		44.9	5.7	0.19	0.038	0.299
17	well-KRA13	325	223.60	46.20		213.2	11.9	15.20	0.389	0.259
18	well-KRA14	295	146.20	32.40		608.1	2.8	31.44	3.950	0.683
19	well-KRA16	300	142.60	30.70		314.9	24.6	20.88	0.215	0.664
20	Krafla-27	247	237.00	34.50		50	3.6	6.96	0.174	0.518
21	Krafla-32	299	235.00	53.90		79.8	24.2		0.042	0.045
<i>Sistema geotérmico Námafjal, Islandia (latitud 65.38° N; longitud 16.48°O; unidades del agua en ppm y gases en mmol/kg)</i>										
1	well-N11	290	100.47	15.64		110.00	42.70	54.80	0.04	0.62
2	well-N4	280	164.15	19.94		70.00	26.30	36.40	0.06	3.61
3	well-NAM11	320	89.20	16.98		56.44	38.25	86.52	2.74	0.17

continúa

Número consecutivo	Pozo geotérmico	BHT (°C)	Composición química del agua geotérmica		Cg	Concentración de gases geotérmicos				
			Na	K		CO ₂	H ₂ S	H ₂	Ar	CH ₄
<i>Sistema geotérmico Hveragerdi, Islandia (latitud 64.02° N; longitud 21.17°O; unidades del agua en ppm y gases en mmol/kg)</i>										
1	well-HVE2	182	168.00	13.80		32.16	4.4	0.70		0.072
2	well-HVE6	215	164.20	20.72		56.41	2.7	1.39	0.306	0.094
3	well-HVE7	225	176.80	21.28		69.82	6.0	1.27	0.980	0.150
<i>Sistema geotérmico Svartsen, Islandia (latitud 63°52' N; longitud 22°25'O; unidades del agua en ppm y gases en mmol/kg)</i>										
1	well-SVA5	240	6670.00	1110.00		88.57	1.4	0.15		0.045
2	well-SVA6	240	8330.00	1160.00		62.14	2.2	0.03		0.047

- (1) iguales (no hay diferencias; con la estricta condición de que tales diferencias adoptan valores $\leq 0.5\%$, lo que significa que las estimaciones de temperaturas son similares a la BHT).
- (2) diferencias aceptables, positivas o negativas, en el intervalo cerrado $0.5\% \leq T_{geo} \leq 20\%$, donde se asumió el porcentaje $\leq 20\%$ como el límite superior basado en los errores totales propagados cuantificados en algunos geotermómetros de solutos (por ejemplo, Verma & Santoyo 1997; Díaz-González et al. 2008); diferencias similares fueron asumidas también para los geotermómetros de gases, aunque debe reconocerse que no hay estudios estadísticos en la literatura relacionados con la evaluación del error en estos geotermómetros; y
- (3) Estimaciones inaceptables, cuando las diferencias son mayores al 20%, ya sea sobreestimado o subestimado (en las tablas 4 y 7 aparece como $>20\%$)

Adicionalmente, se compararon la existencia o ausencia de diferencias significativas entre la temperatura predicha por cada geotermómetro (ya sea de soluto o de gas) y la BHT correspondiente para cada sistema geotérmico (es decir, asumiendo el promedio de temperaturas por campo). Tales diferencias han sido calculadas por la aplicación de las conocidas pruebas F y *t* de student (Miller & Miller 2000); Verma 2005). Estas pruebas estadísticas requieren la estimación de los siguientes parámetros básicos: el número total de datos (es decir, el número total de pozos geotérmicos por campo), medias estadísticas de las dos variables que serán comparadas (estimaciones geotermométricas y BHT), desviación estándar de las medias estimadas, y los límites de confianza al 95% para la media (bajo la suposición de que la muestra exhibe una distribución normal o Gaussiana). Por ejemplo, en el caso de LAGF (n=24 pozos geotérmicos) y las estimaciones de temperaturas predichas por un geotermómetro (por ejemplo, TNK2A83, después de aplicar las restricciones matemáticas y geoquímicas, n=22), las medias de las estimaciones geotermométricas y de las mediciones de BHT serán calculadas con las siguientes ecuaciones:

$$Media_{TNK2A83-LAGF} = \frac{\sum_{i=1}^{22} TNK2A83(i)}{22} \quad (53)$$

$$Media_{BHT-LAGF} = \frac{\sum_{i=1}^{22} BHT(i)}{22} \quad (54)$$

Del mismo modo, fueron calculados los valores de las correspondientes desviaciones estándar y varianzas para estas muestras de temperaturas estimadas usando una hoja de cálculo de Excel.

Sobre la base de estas pruebas estadísticas, los geotermómetros (Na/K y gases) para cada sistema geotérmico fueron agrupados en cuatro categorías: Grupo 1, sin diferencias estadísticamente significativas en las medias y en las varianzas; Grupo 2, diferencias estadísticamente significativas solo en las varianzas; Grupo 3, diferencias estadísticamente significativas solo en las medias; y Grupo 4, diferencias estadísticamente significativas tanto en las medias como en las varianzas.

Se consideró la posibilidad de similitud estadísticamente significativa entre las temperaturas estimadas con geotermómetros y las medidas BHT cuando (1) no existen diferencias estadísticamente significativas en las medias y en las varianzas (grupo 1) y (2) no existen diferencias estadísticamente significativas en las medias (es decir, que solo existen diferencias en las varianzas; grupo 2), lo que significa que la hipótesis nula H_0 (no existe diferencia entre las temperaturas estimadas con geotermómetros y las medidas BHT) es aceptada. Por el contrario, existen diferencias estadísticamente significativas entre las temperaturas estimadas con geotermómetros y las medidas BHT cuando (3) existen diferencias estadísticamente significativas solo en las medias (grupo 3); y (4) existen diferencia estadísticamente significativas tanto en las medias como en las varianzas (grupo 4), lo que significa que la hipótesis nula H_0 es rechazada (y por lo tanto, es aceptada la hipótesis alternativa H_1)

5.3 Resultados

En este apartado encontramos los principales resultados obtenidos en esta investigación.

5.3.1 Resultados: Geotermometría de solutos

La comparación estadística de las diferencias (%) entre T_{sg} y BHT para todos los campos geotérmicos (ecuación 2) indicó que hasta el 5% del número total de T_{sg} estimadas fueron similares (sin diferencias, redondeando los datos de temperatura a enteros) a las

correspondientes BHT; (1) 5% para LAGF y BGF, (2) 4% para CPGF, (3) 3% para TGF y HGF, (4) 2% para LHGF y KGF, y (5) ninguno para LTVGF, NGF y SGF.

Cuando las diferencias calculadas entre las estimaciones del geotermómetro y BHT fueron <20%, la confiabilidad de la geotermometría de Na/K para predecir temperaturas para todos los campos geotérmicos fue: (1) excelente eficiencia de predicción para todas las estimaciones T_{sg} (lo que significa que el 100% de las estimaciones caen sistemáticamente dentro del límite aceptable de diferencias) para 4 de los 10 campos geotérmicos estudiados (CPGF, TGF, HGF, y SGF; Figura 6); (2) alta eficiencia de predicción (lo que significa que ~90% de las estimaciones de T_{sg} cae dentro del límite aceptable de diferencias) para tres campos geotérmicos (LAGF, LTVGF y BGF; Figura 6); y (3) baja eficiencia de predicción (53-76%) para las estimaciones de T_{sg} , caen dentro del límite aceptable de diferencias para los tres campos geotérmicos restantes (LHGF, KGF y NGF; tablas 4 y 6, Figura 6). Por lo tanto, la comparación de la T_{sg} estimada con la correspondiente BHT indica una predicción confiable para los geotermómetros de Na/K (tablas 4 y 6) para LAGF, LTVGF, CPGF, TGF, BGF, HGF y SGF, mientras que una baja eficiencia de predicción fue observada para los campos geotérmicos LHGF, KGF y NGF.

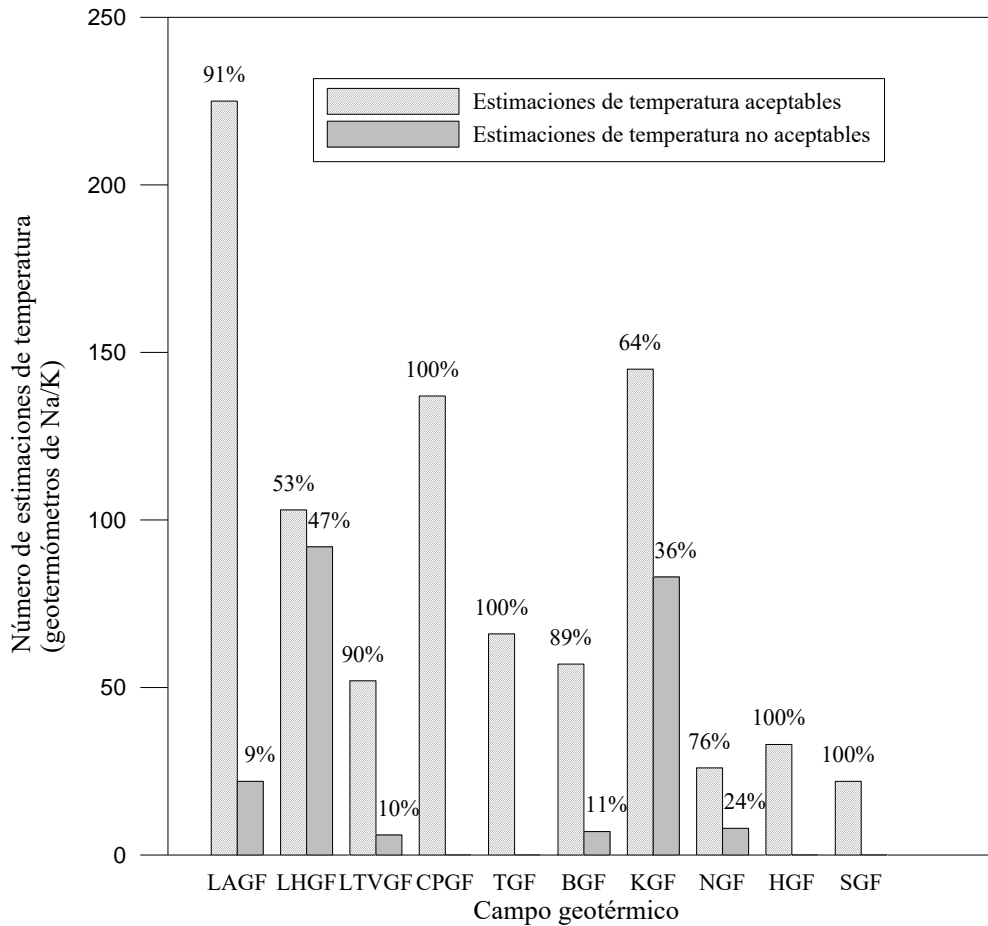


Figura 6. Porcentajes de éxito de los geotermómetros de Na/K aplicados en los campos geotérmicos estudiados.

Los casos de eficiencia baja de predicción (confirmados por altos porcentajes de diferencias significativas >20%) fueron probablemente debidos a los modelos físicos conceptuales de estos yacimientos (por ejemplo, LHGF es un sistema geotérmico de vapor dominante, mientras que KGF tiene la misma estructura de yacimiento en la zona más profunda >2200m). En ambos sistemas de vapor dominante se asume una mejor predicción de temperaturas por la geotermometría de gases debido a la preferencia de partición de los gases en el vapor). En el caso de NGF, un yacimiento de líquido dominante de alta temperatura (con temperaturas superiores a los 300°C reportadas en al menos uno de los tres pozos analizados), el intervalo de aplicación de los geotermómetros posiblemente afectó la predicción debido a problemas de extrapolación.

Tabla 4. Comparación de las temperaturas de yacimiento estimadas usando diferentes geotermómetros de Na/K con la temperatura de fondo de pozo medida (BHT)

Geotermómetro	Diferencias entre las temperaturas geotermométricas estimadas y las BHT medidas				
	Estimaciones de temperatura mayores que la respectiva BHT		Iguales	Estimaciones de temperatura menores que la respectiva BHT	
	>20%	≤20%	0	≤20%	>20%
<i>Sistema geotérmico Los Azufres, México</i>					
TNKFT73	2 (24)	11 (24)	2 (24)	8 (24)	1 (24)
TNKT76	-	-	-	4 (6)	2 (6)
TNKF79	1 (24)	12 (24)	1 (24)	9 (24)	1 (24)
TNKT80	2 (24)	15 (24)	-	6 (24)	1 (24)
TNKA83	-	-	-	2 (3)	1 (3)
TNK2A83	-	10 (22)	1 (22)	11 (22)	-
TNKG88	1 (24)	15 (24)	-	8 (24)	-
TNKVS97	1 (24)	11 (24)	2 (24)	9 (24)	1 (24)
TNKA00	-	10 (24)	2 (24)	11 (24)	1 (24)
TNKC02	-	10 (24)	3 (24)	10 (24)	1 (24)
TNKDSR08	2 (24)	11 (24)	1 (24)	9 (24)	1 (24)
TNK2DS08	1 (24)	11 (24)	-	10 (24)	2 (24)
<i>Sistema geotérmico Los Humeros, México</i>					
TNKFT73	1 (18)	2 (18)	-	7 (18)	8 (18)
TNKT76	1 (14)	-	-	5 (14)	8 (14)
TNKF79	1 (18)	2 (18)	1 (18)	8 (18)	6 (18)
TNKT80	1 (18)	3 (18)	-	7 (18)	7 (18)
TNKA83	-	-	-	1 (8)	7 (8)
TNK2A83	1 (11)	2 (11)	-	6 (11)	2 (11)
TNKG88	1 (18)	4 (18)	-	8 (18)	5 (18)
TNKVS97	1 (18)	2 (18)	1 (18)	8 (18)	6 (18)
TNKA00	1 (18)	1 (18)	-	8 (18)	8 (18)
TNKC02	1 (18)	1 (18)	1 (18)	7 (18)	8 (18)
TNKDSR08	1 (18)	2 (18)	-	7 (18)	8 (18)
TNK2DS08	1 (18)	1 (18)	-	8 (18)	8 (18)
<i>Sistema geotérmico Las Tres Vírgenes, México</i>					
TNKFT73	-	4 (5)	-	1 (5)	-
TNKT76	-	3 (5)	-	2 (5)	-
TNKF79	1 (5)	3 (5)	-	1 (5)	-
TNKT80	1 (5)	3 (5)	-	1 (5)	-
TNKA83	-	2 (3)	-	1 (3)	-
TNK2A83	-	4 (5)	-	1 (5)	-
TNKG88	3 (5)	2 (5)	-	-	-
TNKVS97	1 (5)	3 (5)	-	1 (5)	-
TNKA00	-	4 (5)	-	1 (5)	-
TNKC02	-	4 (5)	-	1 (5)	-
TNKDSR08	-	4 (5)	-	1 (5)	-
TNK2DS08	-	4 (5)	-	1 (5)	-
<i>Sistema geotérmico Cerro Prieto, México</i>					
TNKFT73	-	6 (13)	-	7 (13)	-
TNKT76	-	-	-	7 (7)	-
TNKF79	-	4 (13)	-	9 (13)	-
TNKT80	-	6 (13)	-	7 (13)	-
TNK2A83	-	2 (13)	1 (13)	10 (13)	-
TNKG88	-	5 (13)	1 (13)	7 (13)	-

continúa

Diferencias (en porcentaje) entre las temperaturas geotermométricas estimadas y las BHT medidas					
Geotermómetro	Estimaciones de temperatura mayores que la respectiva BHT			Estimaciones de temperatura menores que la respectiva BHT	
	>20%	≤20%	0	≤20%	>20%
TNKVS97	-	3 (13)	1 (13)	9 (13)	-
TNKA00	-	2 (13)	-	11 (13)	-
TNKC02	-	2 (13)	1 (13)	10 (13)	-
TNKDSR08	-	5 (13)	-	8 (13)	-
TNK2DS08	-	2 (13)	1 (13)	10 (13)	-
<i>Sistema geotérmico Takigami, Japón</i>					
TNKFT73	-	3 (6)	-	3 (6)	-
TNKT76	-	2 (6)	-	4 (6)	-
TNKF79	-	5 (6)	-	1 (6)	-
TNKT80	-	3 (6)	1 (6)	2 (6)	-
TNKA83	-	1 (4)	1 (4)	2 (4)	-
TNK2A83	-	2 (2)	-	-	-
TNKG88	-	6 (6)	-	-	-
TNKVS97	-	6 (6)	-	-	-
TNKA00	-	4 (6)	-	2 (6)	-
TNKC02	-	5 (6)	-	1 (6)	-
TNKDSR08	-	3 (6)	-	3 (6)	-
TNK2DS08	-	3 (6)	-	3 (6)	-
<i>Sistema geotérmico Berlin, El Salvador</i>					
TNKFT73	-	3 (6)	-	2 (6)	1 (6)
TNKT76	-	-	-	2 (3)	1 (3)
TNKF79	-	4 (6)	-	2 (6)	-
TNKT80	-	4 (6)	-	1 (6)	1 (6)
TNKA83	-	-	-	1 (2)	1 (2)
TNK2A83	-	1 (5)	1 (5)	3 (5)	-
TNKG88	-	4 (6)	-	2 (6)	-
TNKVS97	-	4 (6)	-	2 (6)	-
TNKA00	-	1 (6)	-	4 (6)	1 (6)
TNKC02	-	1 (6)	1 (6)	4 (6)	-
TNKDSR08	-	3 (6)	1 (6)	1 (6)	1 (6)
TNK2DS08	-	2 (6)	-	3 (6)	1 (6)
<i>Sistema geotérmico Krafla, Islandia</i>					
TNKFT73	1 (21)	3 (21)	-	9 (21)	8 (21)
TNKT76	1 (17)	-	1 (17)	7 (17)	8 (17)
TNKF79	1 (21)	3 (21)	2 (21)	11 (21)	4 (21)
TNKT80	1 (21)	4 (21)	-	11 (21)	5 (21)
TNKA83	1 (11)	1 (11)	-	3 (11)	6 (11)
TNK2A83	-	-	-	10 (11)	1 (11)
TNKG88	1 (21)	7 (21)	-	9 (21)	4 (21)
TNKVS97	1 (21)	3 (21)	2 (21)	11 (21)	4 (21)
TNKA00	1 (21)	1 (21)	-	11 (21)	8 (21)
TNKC02	1 (21)	1 (21)	-	11 (21)	8 (21)
TNKDSR08	1 (21)	3 (21)	-	9 (21)	8 (21)
TNK2DS08	1 (21)	1 (21)	-	11 (21)	8 (21)
<i>Sistema geotérmico Námafjal, Islandia</i>					
TNKFT73	-	-	-	2 (3)	1 (3)
TNKT76	-	-	-	2 (3)	1 (3)
TNKF79	-	-	-	2 (3)	1 (3)
TNKT80	-	-	-	2 (3)	1 (3)

continúa

Diferencias (en porcentaje) entre las temperaturas geotermométricas estimadas y las BHT medidas					
Estimaciones de temperatura mayores que la respectiva BHT			Iguals	Estimaciones de temperatura menores que la respectiva BHT	
Geotermómetro	>20%	≤20%	0	≤20%	>20%
TNKA83	-	-	-	1 (2)	1 (2)
TNK2A83	-	-	-	2 (2)	-
TNKG88	-	-	-	3 (3)	-
TNKVS97	-	-	-	3 (3)	-
TNKA00	-	-	-	2 (3)	1 (3)
TNKC02	-	-	-	3 (3)	-
TNKDSR08	-	-	-	2 (3)	1 (3)
TNK2DS08	-	-	-	2 (3)	1 (3)
<i>Sistema geotérmico Hveragerdi, Islandia</i>					
TNKFT73	-	-	-	3 (3)	-
TNKT76	-	-	-	3 (3)	-
TNKF79	-	3 (3)	-	-	-
TNKT80	-	1 (3)	-	2 (3)	-
TNKA83	-	1 (3)	-	2 (3)	-
TNKG88	-	3 (3)	-	-	-
TNKVS97	-	3 (3)	-	-	-
TNKA00	-	2 (3)	-	1 (3)	-
TNKC02	-	2 (3)	-	1 (3)	-
TNKDSR08	-	1 (3)	-	2 (3)	-
TNK2DS08	-	-	1 (3)	2 (3)	-
<i>Sistema geotérmico Svartsen, Islandia</i>					
TNKFT73	-	1 (2)	-	1 (2)	-
TNKT76	-	1 (2)	-	1 (2)	-
TNKF79	-	2 (2)	-	-	-
TNKT80	-	1 (2)	-	1 (2)	-
TNKA83	-	-	-	1 (1)	-
TNK2A83	-	1 (2)	-	-	-
TNKG88	-	2 (2)	-	-	-
TNKVS97	-	2 (2)	-	-	-
TNKA00	-	1 (2)	-	1 (2)	-
TNKC02	-	1 (2)	-	1 (2)	-
TNKDSR08	-	1 (2)	-	1 (2)	-
TNK2DS08	-	1 (2)	-	1 (2)	-

Por ejemplo, 2(24) significa que de las temperaturas de yacimiento estimadas con el geotermómetro de solutos TNKFT73, 2 de 24 muestran una diferencia >20% en comparación con las BHT de los pozos respectivos.

Por otro lado, las pruebas estadísticas F y *t* de student revelaron que no existen diferencias significativas entre la temperatura predicha y la BHT del campo geotérmico para los siguientes geotermómetros de Na/K aplicados: (1) todos los geotermómetros para BGF y HGF; (2) excepto TNKT76 y TNKA83, los restantes 10 geotermómetros para LAGF; (3) excepto TNK2A83, TNKG88, y TNKVS97, los restantes 9 para TGF; (4) 7 de 12 geotermómetros (TNKFT73, TNKT76, TNKA83, TNKA00, TNKC02, TNKDSR08, y TNK2DS08) para LTVGF; (5) 6 de 11 (TNKFT73, TNKF79, TNKT80, TNKG88,

TNKVS97, y TNKDSR08) para CPGF; (6) 5 de 12 (TNKF79, TNKT80, TNK2A83, TNKG88, y TNKVS97) para NGF; (7) solo uno (TNKG88) de 12 para KGF; y (8) ninguno de 12 para LHGF.

A partir de este análisis estadístico, se infirió también que los geotermómetros TNKFT73, TNKF79, TNKT80, y TNKDSR08 tienen más éxito, ya que proveen estimaciones de temperatura comparables con la BHT para 6 de 10 campos geotérmicos (Figura 7), seguidos por TNKG88, TNKVS97, TNKA00, TNKC02, y TNK2DSR08, los cuales predicen satisfactoriamente para 5 de 10. Estimaciones menos exitosas para 4 de 10 campos geotérmicos fueron dadas por los geotermómetros TNKT76 y TNKA83, mientras que TNK2A83 solo estimó razonablemente para 3 de 10 campos geotérmicos.

Mediante la comparación de las temperaturas estimadas con los geotermómetros de solutos y su correspondiente BHT para todos los campos geotérmicos, se observó que los geotermómetros de solutos proveen una temperatura subestimada más significativa para los campos geotérmicos LHGF (84%), KGF (83%), y NGF (100%), mientras que las mayores sobreestimaciones de temperatura fueron obtenidas para LTVGF (79%) y TGF (67%). Las temperaturas subestimadas obtenidas para LHGF y KGF pueden deberse a las características físicas de la naturaleza de vapor dominante de los yacimientos (donde se limita la cantidad de fluido o líquido presente), mientras que en NGF es probablemente debido a las limitaciones en la aplicación del geotermómetro (es decir, el intervalo de temperatura en el que trabaja). Esta baja eficiencia prediciendo confiablemente las temperaturas para los campos geotérmicos NGF, KGF y LHGF fue así mismo confirmada después de aplicar las pruebas *F* y *t*.

Por otro lado, las temperaturas sobreestimadas calculadas para LTVGF son probablemente debidas a efectos de mezcla del fluido geotérmico con agua de mar con una consecuente dilución de la química del fluido. La posible presencia de agua de mar en estos fluidos de LTVGF fueron sugeridos por Verma et al., 2006.

Tabla 5. Parámetros estadísticos de las temperaturas estimadas por geotermómetros de Na/K y BHT, y grupos de temperaturas estimadas por geotermómetros, basados en las pruebas F y *t* de student

Geotermómetro	No. de pozos	Temperatura estimada por geotermómetros de Na/K			Temperatura de fondo de pozo			Geotermómetros de Na/K (Los grupos están basados en las similitudes entre las temperaturas estimadas y la BHT a través de las pruebas F y <i>t</i> de student)			
		media (°C)	d.e.	L.C. para la media (95%)	media (°C)	d.e.	L.C. para la media (95%)	Grupo-1	Grupo-2	Grupo-3	Grupo-4
Sistema geotérmico Los Azufres, México											
TNKFT73	24	297	42	279-314	290	26	279-301		TNKFT73		
TNKT76	6	229	28	200-258	274	8	265-283				TNKT76
TNKF79	24	293	27	281-305	290	26	279-301	TNKF79			
TNKT80	24	304	40	286-321	290	26	279-301		TNKT80		
TNKA83	3	221	28	151-292	275	5	264-286				TNKA83
TNK2A83	22	289	17	282-297	292	26	280-303		TNK2A83		
TNKG88	24	302	25	291-312	290	26	279-301	TNKG88			
TNKVS97	24	292	26	281-303	290	26	279-301	TNKVS97			
TNKA00	24	284	30	271-297	290	26	279-301	TNKA00			
TNKC02	24	285	29	273-298	290	26	279-301	TNKC02			
TNKDSR08	24	293	37	278-309	290	26	279-301		TNKDSR08		
TNK2DS08	24	288	36	273-304	290	26	279-301		TNK2DS08		
Sistema geotérmico Los Humeros, México											
TNKFT73	18	244	53	217-270	308	43	287-330			TNKFT73	
TNKT76	14	223	47	196-250	307	46	280-334			TNKT76	
TNKF79	18	258	38	239-276	308	43	287-330			TNKF79	
TNKT80	18	253	52	227-278	308	43	287-330			TNKT80	
TNKA83	8	206	42	172-241	319	39	286-352			TNKA83	
TNK2A83	11	273	11	266-281	307	51	273-342				TNK2A83
TNKG88	18	270	35	252-287	308	43	287-330			TNKG88	
TNKVS97	18	258	36	241-276	308	43	287-330			TNKVS97	
TNKA00	18	246	40	226-265	308	43	287-330			TNKA00	
TNKC02	18	248	38	229-267	308	43	287-330			TNKC02	
TNKDSR08	18	246	48	223-270	308	43	287-330			TNKDSR08	
TNK2DS08	18	242	47	219-266	308	43	287-330			TNK2DS08	
Sistema geotérmico Las Tres Vírgenes, México											
TNKFT73	5	250	11	237-263	237	20	212-262	TNKFT73			
TNKT76	5	242	9	230-253	237	20	212-262	TNKT76			

TNKF79	5	263	7	254-272	237	20	212-262				TNKF79
TNKT80	5	259	10	246-271	237	20	212-262			TNKT80	
<i>continúa</i>											
Geotermómetro	No. de pozos	Temperatura estimada por geotermómetros de Na/K			Temperatura de fondo de pozo			Geotermómetros de Na/K (Los grupos están basados en las similitudes entre las temperaturas estimadas y la BHT a través de las pruebas F y t de student)			
		media (°C)	d.e.	L.C. para la media (95%)	media (°C)	d.e.	L.C. para la media (95%)	Grupo-1	Grupo-2	Grupo-3	Grupo-4
TNKA83	3	245	2	241-250	237	25	174-300	TNKA83			
TNK2A83	5	258	6	250-266	237	20	212-262				TNK2A83
TNKG88	5	275	6	267-283	237	20	212-262				TNKG88
TNKVS97	5	264	7	255-272	237	20	212-262				TNKVS97
TNKA00	5	251	8	241-260	237	20	212-262	TNKA00			
TNKC02	5	253	8	243-262	237	20	212-262		TNKC02		
TNKDSR08	5	252	9	241-264	237	20	212-262	TNKDSR08			
TNK2DS08	5	248	9	237-259	237	20	212-262	TNK2DS08			
Sistema geotérmico Cerro Prieto, México											
TNKFT73	13	291	20	279-303	298	15	289-307	TNKFT73			
TNKT76	7	266	9	257-274	295	10	286-304			TNKT76	
TNKF79	13	290	12	282-297	298	15	289-307	TNKF79			
TNKT80	13	298	19	287-309	298	15	289-307	TNKT80			
TNK2A83	13	282	11	275-288	298	15	289-307			TNK2A83	
TNKG88	13	299	11	292-306	298	15	289-307	TNKG88			
TNKVS97	13	289	12	282-296	298	15	289-307	TNKVS97			
TNKA00	13	280	14	272-289	298	15	289-307			TNKA00	
TNKC02	13	282	14	273-290	298	15	289-307			TNKC02	
TNKDSR08	13	288	17	278-299	298	15	289-307	TNKDSR08			
TNK2DS08	13	283	17	273-294	298	15	289-307			TNK2DS08	
Sistema geotérmico Takigami, Japón											
TNKFT73	6	219	38	178-259	222	16	205-239		TNKFT73		
TNKT76	6	214	34	178-250	222	16	205-239	TNKT76			
TNKF79	6	241	27	213-269	222	16	205-239	TNKF79			
TNKT80	6	229	37	189-268	222	16	205-239			TNKT80	
TNKA83	4	205	17	178-233	212	5	204-221			TNKA83	
TNK2A83	2	266			242					TNK2A83	
TNKG88	6	255	25	229-281	222	16	205-239			TNKG88	
TNKVS97	6	243	25	216-270	222	16	205-239			TNKVS97	

TNKA00	6	227	29	197-258	222	16	205-239	TNKA00				
TNKC02	6	230	28	201-259	222	16	205-239	TNKC02				
TNKDSR08	6	225	35	188-261	222	16	205-239	TNKDSR08				
TNK2DS08	6	221	34	185-256	222	16	205-239	TNK2DS08				
Sistema geotérmico Berlin, El Salvador												
TNKFT73	6	271	60	208-334	279	27	250-308	TNKFT73				
<i>continúa</i>												
Geotermómetro	No. de pozos	Temperatura estimada por geotermómetros de Na/K			Temperatura de fondo de pozo			Geotermómetros de Na/K (Los grupos están basados en las similitudes entre las temperaturas estimadas y la BHT a través de las pruebas F y t de student)				
		media (°C)	d.e.	L.C. para la media (95%)	media (°C)	d.e.	L.C. para la media (95%)	Grupo-1	Grupo-2	Grupo-3	Grupo-4	
TNKT76	3	224	53	92-356	262	30	187-337	TNKT76				
TNKF79	6	276	41	233-318	279	27	250-308	TNKF79				
TNKT80	6	279	58	218-340	279	27	250-308	TNKT80				
TNKA83	2	213			245			TNKA83				
TNK2A83	5	282	19	259-306	287	21	260-314	TNK2A83				
TNKG88	6	287	37	248-325	279	27	250-308	TNKG88				
TNKVS97	6	275	38	235-315	279	27	250-308	TNKVS97				
TNKA00	6	266	44	220-311	279	27	250-308	TNKA00				
TNKC02	6	267	42	223-311	279	27	250-308	TNKC02				
TNKDSR08	6	271	53	215-326	279	27	250-308	TNKDSR08				
TNK2DS08	6	266	52	211-321	279	27	250-308	TNK2DS08				
Sistema geotérmico Krafla, Islandia												
TNKFT73	21	245	41	226-263	290	45	269-310			TNKFT73		
TNKT76	17	226	31	211-242	286	49	261-311					TNKT76
TNKF79	21	259	28	247-272	290	45	269-310					TNKF79
TNKT80	21	254	39	236-272	290	45	269-310					TNKT80
TNKA83	11	218	17	207-230	272	55	235-309					TNKA83
TNK2A83	11	275	11	267-282	310	16	300-321			TNK2A83		
TNKG88	21	271	25	260-283	290	45	269-310		TNKG88			
TNKVS97	21	260	26	248-272	290	45	269-310					TNKVS97
TNKA00	21	247	30	233-260	290	45	269-310			TNKA00		
TNKC02	21	249	29	236-262	290	45	269-310					TNKC02
TNKDSR08	21	248	36	231-264	290	45	269-310			TNKDSR08		
TNK2DS08	21	244	36	227-260	290	45	269-310			TNK2DS08		
Sistema geotérmico Namafjal, Islandia												

TNKFT73	3	241	33	159-323	297	21	245-348		TNKFT73		
TNKT76	3	234	29	162-326	297	21	245-348		TNKT76		
TNKF79	3	257	23	201-313	297	21	245-348	TNKF79			
TNKT80	3	250	32	171-330	297	21	245-348	TNKT80			
TNKA83	2	231			285				TNKA83		
TNK2A83	2	263			305			TNK2A83			
TNKG88	3	269	21	217-322	297	21	245-348	TNKG88			
TNKVS97	3	258	22	205-311	297	21	245-348	TNKVS97			
TNKA00	3	244	24	185-304	297	21	245-348		TNKA00		
TNKC02	3	247	24	188-305	297	21	245-348		TNKC02		
<i>continúa</i>											
Geotermómetro	No. de pozos	Temperatura estimada por geotermómetros de Na/K			Temperatura de fondo de pozo			Geotermómetros de Na/K (Los grupos están basados en las similitudes entre las temperaturas estimadas y la BHT a través de las pruebas F y t de student)			
		media (°C)	d.e.	L.C. para la media (95%)	media (°C)	d.e.	L.C. para la media (95%)	Grupo-1	Grupo-2	Grupo-3	Grupo-4
TNKDSR08	3	245	30	172-318	297	21	245-348			TNKDSR08	
TNK2DS08	3	240	29	168-312	297	21	245-348			TNK2DS08	
Sistema geotérmico Hveragerdi, Islandia											
TNKFT73	3	194	28	125-263	207	23	151-263	TNKFT73			
TNKT76	3	192	25	129-255	207	23	151-263	TNKT76			
TNKF79	3	224	20	174-274	207	23	151-263	TNKF79			
TNKT80	3	204	27	137-272	207	23	151-263	TNKT80			
TNKA83	3	204	24	144-264	207	23	151-263	TNKA83			
TNKG88	3	239	19	191-287	207	23	151-263	TNKG88			
TNKVS97	3	226	20	178-275	207	23	151-263	TNKVS97			
TNKA00	3	209	21	157-261	207	23	151-263	TNKA00			
TNKC02	3	213	20	164-262	207	23	151-263	TNKC02			
TNKDSR08	3	202	25	139-265	207	23	151-263	TNKDSR08			
TNK2DS08	3	199	25	137-261	207	23	151-263	TNK2DS08			
Sistema geotérmico Svartsen, Islandia											
TNKFT73	2	239			240						
TNKT76	2	233			240						
TNKF79	2	256			240						
TNKT80	2	249			240						
TNKA83	1	231			231						
TNK2A83	1	259			259						

TNKG88	2	269	240
TNKVS97	2	257	240
TNKA00	2	243	240
TNKC02	2	246	240
TNKDSR08	2	243	240
TNK2DS08	2	239	240

d.e: desviación estándar; L.C: límites de confianza

Grupo-1: No existen diferencias estadísticamente significativas en las medias y varianzas

Grupo-2: Existen diferencias estadísticamente significativas solamente en las varianzas

Grupo-3: Existen diferencias estadísticamente significativas solamente en las medias

Grupo-4: Existen diferencias estadísticamente significativas tanto en las medias como en las varianzas

Entre los geotermómetros de Na/K aplicados, TNKT76 de Truesdell, 1976 y TNKA83 de Arnórsson et al., 1983 predijeron temperaturas de yacimiento sistemáticamente sobreestimadas en comparación con la BHT correspondiente para todos los sistemas geotérmicos estudiados (excepto para LTVGF; tabla 4)

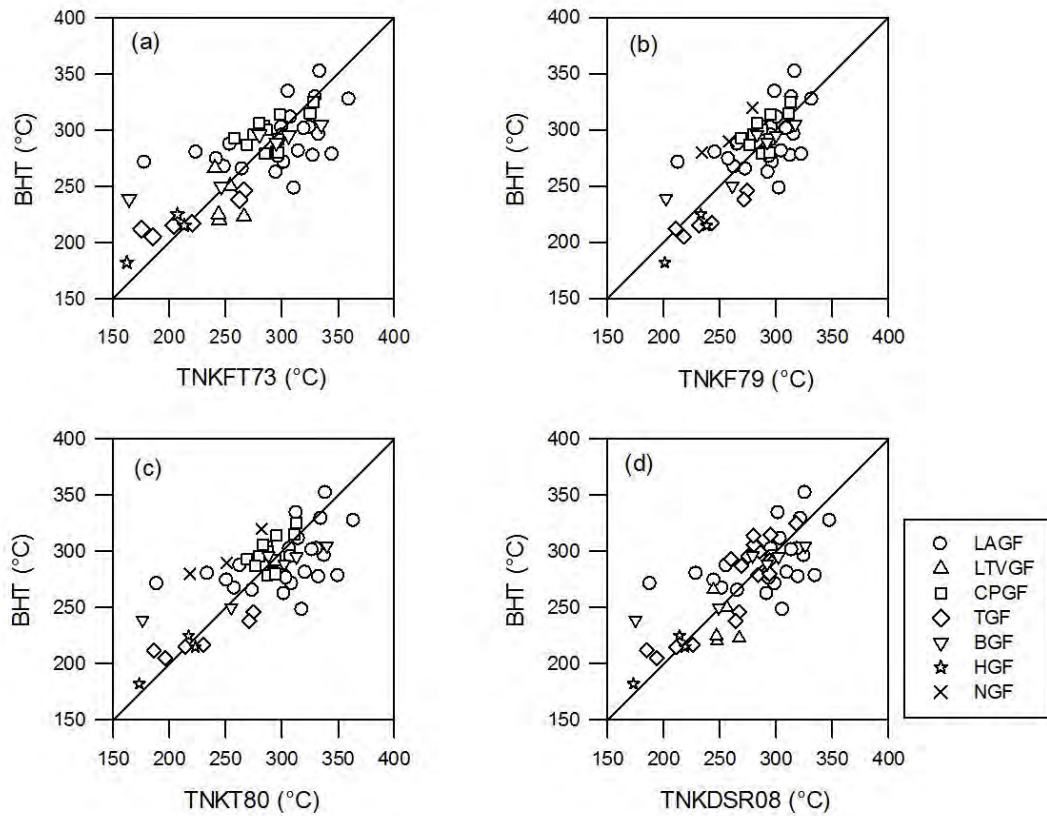


Figura 7. Geotermómetros de Na/K más exitosos prediciendo la temperatura de yacimiento de los sistemas geotérmicos estudiados. Las figuras 7a-7d representan las temperaturas de yacimiento estimadas por los geotermómetros de soluto TNKFT73 vs BHT, TNKF79 vs BHT, TNKT80 vs BHT, TNKDSR08 vs BHT, respectivamente

Tabla 6. Resumen de los resultados obtenidos con la geotermometría de Na/K para los campos geotérmicos estudiados

Sistema geotérmico	No. de pozos	No. de geotermómetros	Temperaturas estimadas	Sin diferencia ($T_{Na/K} \approx BHT$)	Diferencias aceptables (<20%)	Diferencias significativas (>20%)	Sobreestimadas	Subestimadas
LAGF	24	12	247	5% (12/247)	86% (213/247)	9% (22/247)	54% (126/235)	46% (109/235)
LHGF	18	12	195	2% (3/195)	51% (100/195)	47% (92/195)	16% (31/192)	84% (161/192)
LTVGF	5	12	58		90% (52/58)	10% (6/58)	79% (46/58)	21% (12/58)
CPGF	13	12	137	4% (5/137)	96% (132/137)	0% (0/137)	28% (37/132)	72% (95/132)
TGF	6	12	66	3% (2/66)	97% (64/66)	0% (0/66)	67% (43/64)	33% (21/64)
BGF	9	12	64	5% (3/64)	84% (54/64)	11% (7/64)	44% (27/61)	56% (34/61)
KGF	21	12	228	2% (5/228)	61% (140/228)	37% (83/228)	17% (38/223)	83% (185/223)
NGF	3	12	34		76% (26/34)	24% (8/34)	0% (0/34)	100% (34/34)
HGF	3	11	33	3% (1/33)	97% (32/33)	0% (0/33)	50% (16/32)	50% (16/32)
SGF	2	12	22		100% (22/22)	0% (0/22)	64% (14/22)	36% (8/22)

5.3.2 Resultados: geotermómetros de gases

El análisis estadístico comparativo de las diferencias (%) entre T_{gg} y BHT para todos los campos geotérmicos (ecuación 52) indica que hasta el 11% de las estimaciones con T_{gg} fueron similares (sin diferencias, cuando se redondean los datos de temperatura a enteros) a las correspondientes BHT: (1) 11% para BGF; (2) 3% para NGF y HGF; (3) 2% para LAGF, LHGF y LTVGF; (4) 1% para CPGF y KGF; y (5) ninguno para TGF y SGF.

Cuando las diferencias calculadas entre las estimaciones de los geotermómetros y BHT fueron $<20\%$ (límite aceptable de diferencias), la confiabilidad de la geotermometría de gases para predecir temperaturas para todos los campos geotérmicos fue: (1) alta eficiencia de predicción (lo que significa que el 80-87% de las estimaciones T_{gg} caen dentro del límite aceptable de diferencias) para solo tres campos geotérmicos (CPGF, KGF y NGF; figura 8) y (2) baja eficiencia de predicción (lo que significa que 50-72% de las estimaciones T_{gg} caen dentro del límite aceptable de diferencias) para los restantes siete campos geotérmicos (LAGF, LHGF, LTVGF, TGF, BGF, HGF, y SGF; tablas 7 y 9; Figura 8). Todas estas inferencias se hicieron considerando las estimaciones de T_{gg} de todos los pozos juntos para un campo geotérmico.

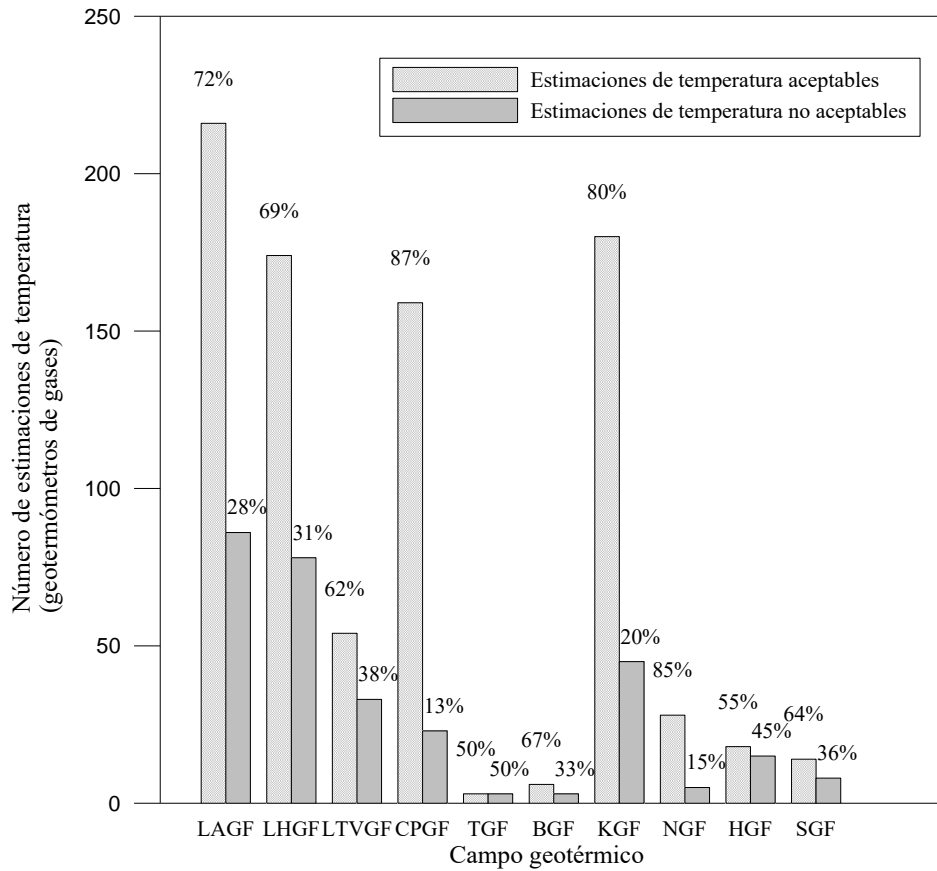


Figura 8. Porcentajes de éxito de los geotermómetros de gases aplicados en los campos geotérmicos estudiados

Por lo tanto, la comparación de T_{gg} estimadas con las correspondientes BHT indican una eficiencia de predicción confiable de los geotermómetros de gases para los campos CPGF, KGF y NGF, mientras que una baja eficiencia de predicción fue observada para los campos geotérmicos LAGF, LHGF, LTVGF, TGF, BGF, HGF, y SGF.

Los casos de alta eficiencia de predicción (confirmados por altos porcentajes de diferencias aceptables; <20%) para CPGF, KGF y NGF fueron debido probablemente a los modelos físicos y conceptuales de estos yacimientos y la fuerte relación existente entre las composiciones gaseosas y las estimaciones de temperaturas inferidas de la aplicación de los geotermómetros de gases (es decir, las temperaturas no dependen de otros parámetros químicos como el exceso de vapor, los coeficientes de distribución del gas, etc.). KGF tiene la estructura de un yacimiento de vapor dominante en la zona más profunda (>220m). CPGF es un sistema de alta temperatura en el cual un yacimiento más profundo de alta temperatura

(beta; >1500m; 300-340°C) se extiende a lo largo de todo el campo geotérmico. Del mismo modo, NGF es un yacimiento de líquido dominante de alta temperatura con temperaturas >300°C reportadas en al menos uno de los tres pozos analizados. En ambos, yacimientos geotérmicos de vapor dominante y alta temperatura, se asume tener una mejor predicción de temperaturas por geotermometría de gases debido a la partición preferencial del gas en el vapor. Arnórsson y Gunnlaugsson (1985) sugirieron que los geotermómetros de gases son muy útiles para predecir temperaturas de subsuelo en sistemas geotérmicos de alta temperatura.

La baja eficiencia de predicción observada para los restantes campos geotérmicos (LAGF, LTVGF, TGF, BGF, HGF, y SGF), que se caracterizan principalmente por yacimientos de líquido dominante, se debió probablemente a la presencia de procesos geoquímicos más complejos asociados con esos sistemas debido a que las composiciones de los gases y las constantes de equilibrio de las reacciones involucradas no dependen solo de la temperatura, sino también del exceso de vapor, los coeficientes de distribución de los gases, entre otros parámetros importantes, los cuales fueron previamente citados por algunos autores (por ejemplo, Bertrami et al. 1985; Santoyo et al. 1991).

En el caso de LHGF, este puede ser diferenciado como un yacimiento de líquido dominante en la parte superior (profundidades entre 1400-1900 m) y de vapor dominante en la parte inferior (profundidades >2100m). De los 18 pozos de este campo considerados en el estudio, 10 están localizados en el yacimiento inferior y los 8 restantes en el yacimiento superior. Esta debe ser la razón para que las estimaciones de T_{gg} no muestren una buena predicción (solo 69% de las estimaciones de T_{gg} caen dentro del límite aceptable de diferencias) para este campo geotérmico. Todas esas suposiciones fueron hechas considerando las estimaciones de T_{gg} para todos los pozos juntos para un campo geotérmico.

Tabla 7. Comparación de las temperaturas de yacimiento estimadas usando diferentes geotermómetros de gases con la temperatura de fondo de pozo medida (BHT)

Diferencias (en porcentaje) entre las temperaturas geotermométricas estimadas y las BHT medidas					
Geotermómetro	Estimaciones de temperatura mayores que la respectiva BHT			Estimaciones de temperatura menores que la respectiva BHT	
	>20%	±20%	0	±20%	>20%
<i>Sistema geotérmico Los Azufres, México</i>					
AG85_1	3 (24)	10 (24)	-	9 (24)	2 (24)
A98_2	6 (24)	7 (24)	-	8 (24)	3 (24)
AG85_3	-	8 (23)	1 (23)	14 (23)	-
AG85_4	-	1 (23)	-	-	22 (23)
G91_5	-	5 (22)	2 (22)	9 (22)	6 (22)
AG85_11	-	13 (23)	-	9 (23)	1 (23)
AG85_12	-	-	-	11 (23)	12 (23)
A98_13	-	2 (23)	-	15 (23)	6 (23)
G91_14	1 (22)	5 (22)	-	11 (22)	5 (22)
AG85_16	-	12 (24)	1 (24)	11 (24)	-
AG85_17	-	-	-	13 (24)	11 (24)
A98_18	-	-	-	17 (24)	7 (24)
AG85_21	-	10 (23)	1 (23)	11 (23)	1 (23)
<i>Sistema geotérmico Los Humeros, México</i>					
AG85_1	3 (18)	8 (18)	1 (18)	6 (18)	-
A98_2	6 (18)	7 (18)	1 (18)	4 (18)	-
AG85_3	1 (18)	2 (18)	1 (18)	10 (18)	4 (18)
AG85_4	-	-	-	-	18 (18)
G91_5	1 (18)	3 (18)	-	13 (18)	1 (18)
G91_9	2 (18)	2 (18)	-	7 (18)	7 (18)
AG85_11	1 (18)	4 (18)	1 (18)	10 (18)	2 (18)
AG85_12	-	1 (18)	-	7 (18)	10 (18)
A98_13	-	2 (18)	-	12 (18)	4 (18)
G91_14	1 (18)	3 (18)	1 (18)	12 (18)	1 (18)
AG85_16	2 (18)	10 (18)	1 (18)	5 (18)	-
AG85_17	-	4 (18)	-	10 (18)	4 (18)
A98_18	1 (18)	7 (18)	-	8 (18)	2 (18)
AG85_21	1 (18)	1 (18)	-	10 (18)	6 (18)
<i>Sistema geotérmico Las Tres Vírgenes, México</i>					
AG85_1	5 (8)	3 (8)	-	-	-
A98_2	7 (8)	1 (8)	-	-	-
AG85_3	3 (6)	3 (6)	-	-	-
AG85_4	-	-	-	2 (6)	4 (6)
G91_5	-	5 (6)	1 (6)	-	-
AG85_11	3 (6)	3 (6)	-	-	-
AG85_12	-	3 (6)	1 (6)	2 (6)	-
A98_13	2 (6)	3 (6)	-	1 (6)	-
G91_14	2 (5)	3 (5)	-	-	-
AG85_16	2 (8)	6 (8)	-	-	-
AG85_17	-	2 (8)	-	5 (8)	1 (8)
A98_18	-	3 (8)	-	4 (8)	1 (8)
AG85_21	3 (6)	3 (6)	-	-	-

continúa

Diferencias (en porcentaje) entre las temperaturas geotermométricas estimadas y las BHT medidas					
Geotermómetro	Estimaciones de temperatura mayores que la respectiva BHT			Estimaciones de temperatura menores que la respectiva BHT	
	>20%	±20%	0	±20%	>20%
<i>Sistema geotérmico Cerro Prieto, México</i>					
AG85_1	-	5 (13)	1 (13)	7 (13)	-
A98_2	-	7 (13)	-	6 (13)	-
AG85_3	-	7 (13)	-	6 (13)	-
AG85_4	-	-	-	1 (13)	12 (13)
ND84_10	4 (13)	8 (13)	-	1 (13)	-
AG85_11	-	6 (13)	-	7 (13)	-
AG85_12	-	-	-	11 (13)	2 (13)
A98_13	1 (13)	3 (13)	-	9 (13)	-
ND84_15	-	6 (13)	-	7 (13)	-
AG85_16	-	7 (13)	-	6 (13)	-
AG85_17	-	-	-	11 (13)	2 (13)
A98_18	-	-	-	11 (13)	2 (13)
ND84_20	-	2 (13)	-	11 (13)	-
AG85_21	-	5 (13)	2 (13)	6 (13)	-
<i>Sistema geotérmico Takigami, Japón</i>					
DP80_8	1 (6)	3 (6)	-	-	2 (6)
<i>Sistema geotérmico Berlin, El Salvador</i>					
G91_9	3 (9)	5 (9)	1 (9)	-	-
<i>Sistema geotérmico Krafla, Islandia</i>					
AG85_1	1 (21)	5 (21)	-	15 (21)	-
A98_2	1 (21)	6 (21)	-	14 (21)	-
AG85_3	5 (20)	5 (20)	1 (20)	9 (20)	-
AG85_4	1 (20)	1 (20)	-	4 (20)	14 (20)
AG85_11	2 (20)	8 (20)	-	10 (20)	-
AG85_12	1 (20)	-	-	16 (20)	3 (20)
A98_13	1 (20)	10 (20)	1 (20)	8 (20)	-
AG85_16	3 (21)	7 (21)	-	11 (21)	-
AG85_17	1 (21)	2 (21)	-	13 (21)	5 (21)
A98_18	1 (21)	3 (21)	-	13 (21)	4 (21)
AG85_21	2 (20)	7 (20)	1 (20)	10 (20)	-
<i>Sistema geotérmico Námafjal, Islandia</i>					
AG85_1	-	-	-	2 (3)	1 (3)
A98_2	-	-	-	2 (3)	1 (3)
AG85_3	-	3 (3)	-	-	-
AG85_4	-	3 (3)	-	-	-
AG85_11	-	2 (3)	-	1 (3)	-
AG85_12	-	-	-	3 (3)	-
A98_13	3 (3)	-	-	-	-
AG85_16	-	2 (3)	-	1 (3)	-
AG85_17	-	-	-	3 (3)	-
A98_18	-	1 (3)	1 (3)	1 (3)	-
AG85_21	-	2 (3)	-	1 (3)	-
<i>Sistema geotérmico Hveragerdi, Islandia</i>					
AG85_1	1 (3)	2 (3)	-	-	-
A98_2	1 (3)	2 (3)	-	-	-
AG85_3	3 (3)	-	-	-	-
AG85_4	-	1 (3)	-	2 (3)	-
AG85_11	3 (3)	-	-	-	-

continúa

Diferencias (en porcentaje) entre las temperaturas geotermométricas estimadas y las BHT medidas					
Geotermómetro	Estimaciones de temperatura mayores que la respectiva BHT			Estimaciones de temperatura menores que la respectiva BHT	
	>20%	±20%	0	±20%	>20%
AG85_12	-	2 (3)	-	1 (3)	-
A98_13	-	3 (3)	-	-	-
AG85_16	3 (3)	-	-	-	-
AG85_17	-	1 (3)	1 (3)	1 (3)	-
A98_18	1 (3)	1 (3)	-	1 (3)	-
AG85_21	3 (3)	-	-	-	-
<i>Sistema geotérmico Svartsen, Islandia</i>					
AG85_1	-	2 (2)	-	-	-
A98_2	-	2 (2)	-	-	-
AG85_3	-	2 (2)	-	-	-
AG85_4	-	-	-	-	2 (2)
AG85_11	-	2 (2)	-	-	-
AG85_12	-	-	-	-	2 (2)
A98_13	-	-	-	-	2 (2)
AG85_16	-	2 (2)	-	-	-
AG85_17	-	-	-	1 (2)	1 (2)
A98_18	-	-	-	1 (2)	1 (2)
AG85_21	-	1 (2)	-	1 (2)	-

Por ejemplo, 2(24) significa que de las temperaturas de yacimiento estimadas con el geotermómetro de solutos TNKFT73, 2 de 24 muestran una diferencia >20% en comparación con las BHT de los pozos respectivos.

Las pruebas estadísticas F y *t* de student no revelaron diferencias significativas entre las temperaturas predichas y las BHT para los siguientes geotermómetros de gases aplicados:

- (1) El único geotermómetro de gases aplicado (DP80) al campo geotérmico TGF;
- (2) 7 de 11 geotermómetros de gases para los campos geotérmicos KGF (AG85_1, A98_2, AG85_3, AG85_11, A98_13, AG85_16, y AG85_21), NGF (AG85_4, AG85_11, AG85_12, AG85_16, AG85_17, A98_18, y AG85_21), y HGF (AG85_1, A98_2, AG85_4, AG85_12, A98_13, AG85_17, y A98_18);
- (3) Eficiencia mixta para el campo CPGF (8 de 14 geotermómetros de gases; AG85_1, A98_2, AG85_3, AG85_11, A98_13, ND84_15, AG85_16, y AG85_21) y LAGF (6 de 13 geotermómetros; AG85_1, A98_2, AG85_3, AG85_11, AG85_16, y AG85_21); y
- (4) Eficiencia baja para LHGF (4 de 14 geotermómetros de gases; AG85_1, G91_14, AG85_16, y A98_18), LTVGF (2 de 13 geotermómetros de gases; AG85_12 y A98_18), y BGF (ninguno).

A partir de este análisis estadístico, también se infiere que los geotermómetros AG85_1 y AG85_16 tienen más éxito y proveen estimaciones de temperaturas más cercanas a la BHT para 5 de los 10 campos geotérmicos (Figura 9), seguido por A98_2, AG85_11, A98_18, y AG85_21, que predicen satisfactoriamente para 4 de los 10 campos. Las predicción de estimaciones aceptables por otros geotermómetros de gases es la siguiente: (1) AG85_3, AG85_12 y A98_13 para 3 de los 10 campos geotérmicos; (2) AG85_4 y AG85_17 para 2 de los 10 campos; y (3) DP80_8, G91_14 y ND84_15 para 1 de los 10 campos geotérmicos.

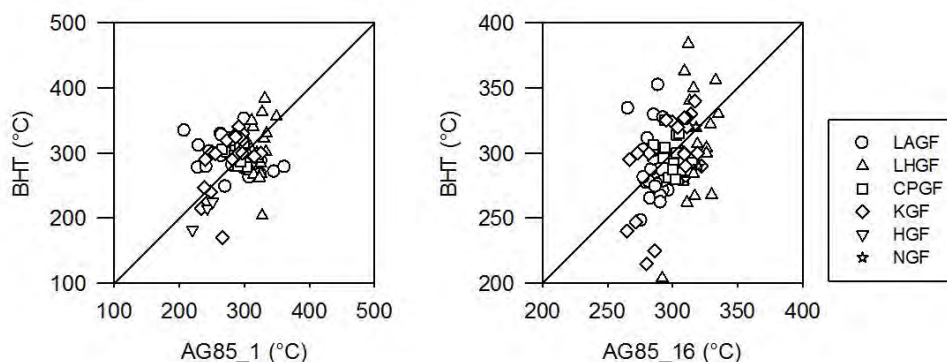


Figura 9. Geotermómetros de gases más exitosos prediciendo la temperatura de yacimiento de los sistemas geotérmicos estudiados.

Mediante la comparación de temperaturas estimadas con geotermómetros de gases y sus correspondientes BHT para todos los campos geotérmicos, se observó también que los geotermómetros de gases proporcionan temperaturas subestimadas más significativas ($T_{gg} < BHT$) para LAGF (72%), LHGF (70%), CPGF (66%) y KGF (67%), mientras que las mayores sobreestimaciones de temperaturas ($T_{gg} > BHT$) fueron obtenidas para LTVGF (76%), TGF (67%), BGF (100%) y HGF (67%). Las temperaturas están igualmente sobreestimadas (50%) y subestimadas (50%) para NGF y SGF. Interesantemente, tanto los geotermómetros de solutos como los de gases proporcionaron temperaturas subestimadas para LHGF, CPGF y KGF y sobreestimadas para LTVGF y TGF.

Tabla 8. Parámetros estadísticos de las temperaturas estimadas por geotermómetros de gases y BHT, y grupos de temperaturas estimadas por geotermómetros, basados en las pruebas F y *t* de student

Geotermómetro	No. de pozos	Temperatura estimada por geotermómetros de gases			Temperatura de fondo de pozo			Geotermómetros de gases (Los grupos están basados en las similitudes entre las temperaturas estimadas y la BHT a través de las pruebas F y <i>t</i> de student)			
		media (°C)	d.e.	L.C. para la media (95%)	media (°C)	d.e.	L.C. para la media (95%)	Grupo-1	Grupo-2	Grupo-3	Grupo-4
Sistema geotérmico Los Azufres, México											
AG85_1	24	286	39	270-303	290	26	279-301		AG85_1		
A98_2	24	299	56	275-323	290	26	279-301		A98_2		
AG85_3	23	282	18	274-290	290	26	279-301	AG85_3			
AG85_4	23	171	43	153-190	290	26	279-301			AG85_4	
G91_5	22	250	47	229-271	288	25	277-299				G91_5
AG85_11	23	283	8	279-287	290	26	279-301		AG85_11		
AG85_12	23	223	16	216-230	290	26	279-301				AG85_12
A98_13	23	246	28	233-258	290	26	279-301			A98_13	
G91_14	22	261	40	243-279	288	25	277-299				G91_14
AG85_16	24	286	7	283-289	290	26	279-301		AG85_16		
AG85_17	24	230	10	225-234	290	26	279-301				AG85_17
A98_18	24	239	12	234-244	290	26	279-301				A98_18
AG85_21	23	281	15	274-287	290	26	279-301		AG85_21		
Sistema geotérmico Los Humeros, México											
AG85_1	18	321	13	315-327	308	43	287-330		AG85_1		
A98_2	18	351	25	339-363	308	43	287-330				A98_2
AG85_3	18	277	10	272-282	308	43	287-330				AG85_3
AG85_4	18	160	23	148-171	308	43	287-330				AG85_4
G91_5	18	283	19	274-293	308	43	287-330				G91_5
G91_9	18	277	36	259-295	308	43	287-330			G91_9	
AG85_11	18	290	7	287-293	308	43	287-330				AG85_11
AG85_12	18	235	12	229-241	308	43	287-330				AG85_12
A98_13	18	266	23	255-277	308	43	287-330				A98_13
G91_14	18	296	12	290-302	308	43	287-330		G91_14		
AG85_16	18	318	11	313-323	308	43	287-330		AG85_16		
AG85_17	18	277	15	269-285	308	43	287-330				AG85_17
A98_18	18	296	19	286-305	308	43	287-330		A98_18		

continúa

Geotermómetro	No. de pozos	Temperatura estimada por geotermómetros de gases			Temperatura de fondo de pozo			Geotermómetros de gases (Los grupos están basados en las similitudes entre las temperaturas estimadas y la BHT a través de las pruebas F y t de student)			
		media (°C)	d.e.	L.C. para la media (95%)	media (°C)	d.e.	L.C. para la media (95%)	Grupo-1	Grupo-2	Grupo-3	Grupo-4
AG85_21	18	265	6	262-268	308	43	287-330				AG85_21
Sistema geotérmico Las Tres Vírgenes, México											
AG85_1	8	304	16	290-318	238	18	223-253			AG85_1	
A98_2	8	320	30	295-345	238	18	223-253			A98_2	
AG85_3	6	282	6	276-288	239	19	218-259				AG85_3
AG85_4	6	172	13	158-186	239	19	218-259			AG85_4	
G91_5	6	258	10	247-268	239	19	218-259			G91_5	
AG85_11	6	289	7	282-296	239	19	218-259				AG85_11
AG85_12	6	235	12	222-247	239	19	218-259	AG85_12			
A98_13	6	264	23	240-289	239	19	218-259			A98_13	
G91_14	6	271	15	255-287	239	19	218-259			G91_14	
AG85_16	8	276	17	262-290	238	18	223-253			AG85_16	
AG85_17	8	216	25	195-237	238	18	223-253			AG85_17	
A98_18	8	223	28	200-247	238	18	223-253	A98_18			
AG85_21	6	296	8	287-304	239	19	218-259				AG85_21
Sistema geotérmico Cerro Prieto, México											
AG85_1	13	292	13	284-300	298	15	289-307	AG85_1			
A98_2	13	299	21	286-311	298	15	289-307	A98_2			
AG85_3	13	301	5	299-304	298	15	289-307		AG85_3		
AG85_4	13	218	11	211-224	298	15	289-307			AG85_4	
ND84_10	13	334	19	322-346	298	15	289-307			ND84_10	
AG85_11	13	299	5	295-302	298	15	289-307		AG85_11		
AG85_12	13	251	10	245-257	298	15	289-307			AG85_12	
A98_13	13	298	24	284-313	298	15	289-307		A98_13		
ND84_15	13	297	16	287-307	298	15	289-307	ND84_15			
AG85_16	13	300	8	295-305	298	15	289-307		AG85_16		
AG85_17	13	250	11	244-257	298	15	289-307			AG85_17	
A98_18	13	263	13	255-271	298	15	289-307			A98_18	
ND84_20	13	275	11	268-282	298	15	289-307				ND84_20
AG85_21	13	297	6	293-301	298	15	289-307		AG85_21		
Sistema geotérmico Takigami, Japón											
DP80_8	6	223	65	155-292	222	16	205-239		DP80_8		
Sistema geotérmico Berlin, El Salvador											
G91_9	9	329	22	312-346	285	24	267-303			G91_9	

continúa

Geotermómetro	No. de pozos	Temperatura estimada por geotermómetros de gases			Temperatura de fondo de pozo			Geotermómetros de gases (Los grupos están basados en las similitudes entre las temperaturas estimadas y la BHT a través de las pruebas F y t de student)			
		media	d.e.	L.C.	media	d.e.	L.C. para la media	Grupo-1	Grupo-2	Grupo-3	Grupo-4
		(°C)		para la media (95%)	(°C)		(95%)				
Sistema geotérmico Krafla, Islandia											
AG85_1	21	276	26	264-288	290	45	269-310		AG85_1		
A98_2	21	280	35	264-296	290	45	269-310	A98_2			
AG85_3	20	307	15	300-314	290	46	268-311		AG85_3		
AG85_4	20	230	34	214-246	290	46	268-311			AG85_4	
AG85_11	20	298	15	291-305	290	46	268-311		AG85_11		
AG85_12	20	251	27	238-263	290	46	268-311				AG85_12
A98_13	20	304	51	280-328	290	46	268-311	A98_13			
AG85_16	21	298	18	290-306	290	45	269-310		AG85_16		
AG85_17	21	248	27	236-260	290	45	269-310				AG85_17
A98_18	21	261	31	246-275	290	45	269-310			A98_18	
AG85_21	20	299	23	289-310	290	46	268-311		AG85_21		
Sistema geotérmico Namafjal, Islandia											
AG85_1	3	253	12	224-283	297	21	245-348			AG85_1	
A98_2	3	250	12	220-280	297	21	245-348			A98_2	
AG85_3	3	338	8	318-358	297	21	245-348			AG85_3	
AG85_4	3	303	18	257-349	297	21	245-348	AG85_4			
AG85_11	3	314	4	304-324	297	21	245-348		AG85_11		
AG85_12	3	280	7	262-298	297	21	245-348	AG85_12			
A98_13	3	379	26	315-444	297	21	245-348			A98_13	
AG85_16	3	316	5	304-328	297	21	245-348	AG85_16			
AG85_17	3	274	7	256-291	297	21	245-348	AG85_17			
A98_18	3	291	9	269-313	297	21	245-348	A98_18			
AG85_21	3	312	5	299-325	297	21	245-348	AG85_21			
Sistema geotérmico Hveragerdi, Islandia											
AG85_1	3	238	16	198-278	207	23	151-263	AG85_1			
A98_2	3	236	13	204-268	207	23	151-263	A98_2			
AG85_3	3	294	2	289-299	207	23	151-263				AG85_3
AG85_4	3	200	4	189-211	207	23	151-263		AG85_4		
AG85_11	3	278	3	269-286	207	23	151-263				AG85_11
AG85_12	3	213	6	198-229	207	23	151-263	AG85_12			
A98_13	3	229	9	206-252	207	23	151-263	A98_13			
AG85_16	3	274	8	255-294	207	23	151-263			AG85_16	
AG85_17	3	213	12	185-242	207	23	151-263	AG85_17			

continúa

Geotermómetro	No. de pozos	Temperatura estimada por geotermómetros de gases			Temperatura de fondo de pozo			Geotermómetros de gases (Los grupos están basados en las similitudes entre las temperaturas estimadas y la BHT a través de las pruebas F y t de student)			
		media (°C)	d.e.	L.C. para la media (95%)	media (°C)	d.e.	L.C. para la media (95%)	Grupo-1	Grupo-2	Grupo-3	Grupo-4
A98_18	3	220	13	189-252	207	23	151-263	A98_18			
AG85_21	3	281	11	254-307	207	23	151-263			AG85_21	
Sistema geotérmico Svartsen, Islandia											
AG85_1	2	253			240						
A98_2	2	249			240						
AG85_3	2	256			240						
AG85_4	2	110			240						
AG85_11	2	253			240						
AG85_12	2	168			240						
A98_13	2	159			240						
AG85_16	2	257			240						
AG85_17	2	188			240						
A98_18	2	193			240						
AG85_21	2	250			240						

d.e: desviación estándar; L.C: límites de confianza

Grupo-1: No existen diferencias estadísticamente significativas en las medias y varianzas

Grupo-2: Existen diferencias estadísticamente significativas solamente en las varianzas

Grupo-3: Existen diferencias estadísticamente significativas solamente en las medias

Grupo-4: Existen diferencias estadísticamente significativas tanto en las medias como en las varianzas

Los geotermómetros de gases (AG85_3, AG85_4, AG85_11, AG85_12, AG85_16, AG85_17, y AG85_21) de Arnórsson and Gunnlaugsson (1985) son aplicables para aguas geotérmicas de los sistemas con temperaturas de yacimiento $>300^{\circ}\text{C}$ o con rangos entre $200\text{-}300^{\circ}\text{C}$ si las concentraciones de Cl son >500 ppm. Aunque estas condiciones de aplicación no se cumplen para la aplicación de algunos geotermómetros para aguas de pozos de algunos de los sistemas geotérmicos, estos geotermómetros de gases han predicho temperaturas de yacimiento comparables con la BHT: (1) AG85_3 para KGF (promedio de BHT = 289°C y Cl < 500 ppm); (2) AG85_11 para KGF (promedio de BHT = 289°C y Cl < 500 ppm) y NGF (promedio de BHT = 297°C y Cl < 500 ppm); (3) AG85_16 para KGF (promedio de BHT = 289°C y Cl < 500 ppm) y NGF (promedio de BHT = 297°C y Cl < 500 ppm); y (4) AG85_21 para KGF (promedio de BHT = 289°C y Cl < 500 ppm) y NGF (promedio de BHT = 297°C y Cl < 500 ppm). Los promedios de BHT de los pozos estudiados en los sistemas geotérmicos de Islandia KGF y NGF son 289°C y 297°C respectivamente. Como estos son sistemas de alta temperatura, el desempeño confiable de los geotermómetros de gases es esperado. Esta puede ser la razón para los funcionamientos fiables de algunos de los geotermómetros de gases de Arnórsson y Gunnlaugsson (1985), a pesar de que las aguas geotérmicas no reúnan las condiciones requeridas para su aplicación. Arnórsson y Gunnlaugsson (1985) reportaron que los geotermómetros de gases son útiles para predecir las temperaturas de subsuelo en sistemas geotérmicos de alta temperatura. Los promedios de BHT de los pozos estudiados de los otros dos sistemas geotérmicos de Islandia HGF y SGF son 207°C y 240°C . Como los pozos estudiados de esos sistemas no se caracterizan por altas temperaturas, los geotermómetros de gases de Arnórsson y Gunnlaugsson (1985) para estos dos sistemas geotérmicos no pronosticaron temperaturas confiables.

Tabla 9. Resumen de los resultados obtenidos con la geotermometría de gases para los campos geotérmicos estudiados

Sistema geotérmico	No. de pozos	No. de geotermómetros	Temperaturas estimadas	Sin diferencia ($T_{gg} \approx BHT$)	Diferencias aceptables (<20%)	Diferencias significativas (>20%)	Sobreestimadas	Subestimadas
LAGF	24	13	302	2% (5/302)	70% (211/302)	28% (86/302)	28% (83/297)	72% (1214/297)
LHGF	18	14	252	2% (6/252)	67% (168/252)	31% (78/252)	30% (73/246)	70% (173/246)
LTVGF	5	13	87	2% (2/87)	60% (52/87)	38% (33/87)	76% (65/85)	24% (20/85)
CPGF	13	14	182	1% (3/182)	86% (156/182)	13% (23/182)	34% (61/179)	66% (118/179)
TGF	6	1	6		50% (3/6)	50% (3/6)	67% (4/6)	33% (2/6)
BGF	9	1	9	11% (1/9)	56% (5/9)	33% (3/9)	100% (8/8)	0% (0/8)
KGF	21	11	225	1% (2/225)	79% (177/225)	20% (45/225)	33% (73/222)	67% (149/222)
NGF	3	11	33	3% (1/11)	82% (27/33)	15% (5/33)	50% (16/32)	50% (16/32)
HGF	3	11	33	3% (1/11)	51% (17/33)	46% (15/33)	84% (27/32)	16% (5/32)
SGF	2	11	22		64% (14/22)	36% (8/22)	50% (11/22)	50% (11/22)

5.3.3 Resultados: comparación

La comparación de las temperaturas estimadas por geotermometría de Na/K con las correspondientes BHT indica una eficiencia de predicción confiable (excelente a alta) de los geotermómetros de Na/K (tablas 4 y 6; Figura 6) para LAGF, CPGF, LTVGF, TGF, BGF, HGF, y SGF, mientras que, se observó una baja eficiencia de predicción para los campos geotérmicos LHGF, KGF, y NGF. En el caso de geotermómetros de gas, la eficiencia está en la situación inversa. Los geotermómetros de gases han indicado baja eficiencia de predicción para los campos geotérmicos (LAGF, LTVGF, TGF, BGF, HGF y SGF, excepto CPGF para el cual se observaron predicciones aceptables) y una alta eficiencia de predicción para los campos geotérmicos (KGF y NGF, excepto LHGF en el cual se observó una baja eficiencia de predicción). En general, esto sugiere que (1) los geotermómetros Na/K son más exitosos en la predicción de temperaturas de yacimiento confiables que los geotermómetros de gases; (2) los sistemas geotérmicos para los que los geotermómetros de Na/K han indicado alta eficiencia de predicción, los geotermómetros de gases tienen eficiencia de predicción baja y viceversa, con sólo dos excepciones; y (3) los geotermómetros de gases, en comparación con los de soluto, son más útiles para predecir temperaturas en sistemas geotérmicos de vapor dominante de alta temperatura.

La predicción sistemática de temperaturas subestimadas para ambos geotermómetros, de solutos y de gases, para LHGF, CPGF y KGF es probablemente debido a que estos son sistemas geotérmicos de alta temperatura (los promedios de BHT de los pozos estudiados son 308°C, 298°C y 290°C respectivamente; tablas 5 y 8) con estructuras complejas y caracterizados por yacimientos someros de líquido dominante y yacimientos profundos de vapor dominante.

La predicción sistemática de temperaturas sobreestimadas para ambos geotermómetros, de solutos y de gases, para LTVGF y TGF es probablemente debido a que estos son sistemas geotérmicos de baja temperatura (los promedios de BHT de los pozos estudiados son 238°C y 222°C respectivamente; tablas 5 y 8). Además de esto, las temperaturas sobreestimadas calculadas para LTVGF son probablemente debidas a los efectos de la mezcla de los fluidos

geotérmicos profundos con agua de mar. La presencia del componente agua de mar en esos fluidos de LTVGF fue sugerido por Verma et al., 2006.

5.4 Conclusiones

Se realizó exitosamente un estudio geoquimiométrico para la evaluación de la eficiencia en la predicción de los geotermómetros de Na/K y de gases y la comparación estadística entre ellos. La evaluación de las temperaturas predichas depende de los datos de composición química del fluido, las ecuaciones geotermométricas, la precisión y exactitud de la temperatura medida en los pozos productores (como dato principal y fundamental), y en algunos geotermómetros, el conocimiento de los coeficientes de regresión y sus incertidumbres.

Los geotermómetros de Na/K son más exitosos que los geotermómetros de gases prediciendo temperaturas de yacimiento confiables en sistemas de líquido dominante.

Cuatro geotermómetros de Na/K (TNKFT73, TNKF79, TNKT80, y TNKDSR08) estimaron temperaturas cercanas a las temperaturas de fondo de pozo (BHT) para 6 de los 10 campos geotérmicos, seguidos por cinco geotermómetros (TNKG88, TNKVS97, TNKA00, TNKC02, y TNK2DSR08) los cuales estimaron satisfactoriamente para 5 de los 10 campos geotérmicos.

Se observó una baja eficiencia sistemática de los geotermómetros de Na/K para predecir temperaturas confiables en sistemas de vapor dominante. Por otro lado, los geotermómetros de gases fueron más útiles para predecir temperaturas en sistemas geotérmicos de vapor dominante y de líquido dominante de alta temperatura.

Dos geotermómetros de gases (AG85_1 y AG85_16) estimaron temperaturas cercanas a la BHT para 5 de los 10 campos geotérmicos, seguidos por cuatro geotermómetros (A98_2, AG85_11, A98_18, y AG85_21), los cuales estimaron satisfactoriamente para 4 de los 10 campos geotérmicos.

En general, los geotermómetros de gases muestran baja eficiencia en la predicción para los campos geotérmicos en los cuales los geotermómetros de Na/K muestran una alta eficiencia y viceversa.

Las temperaturas de yacimiento predichas por geotermómetros de gases, en general, muestran más dispersión que aquellas inferidas por geotermómetros de Na/K. Así mismo, los análisis de propagación de errores son requeridos para evaluar las incertidumbres totales en los geotermómetros de gases. El desarrollo de geotermómetros nuevos y mejorados es necesario para la industria geotérmica.

CAPÍTULO 6

NUEVOS GEOTERMÓMETROS DE GASES MEDIANTE TÉCNICAS DE GEOQUIMIOMETRÍA Y REDES NEURONALES ARTIFICIALES

6.1 Introducción

La determinación de la temperatura de fondo en pozos y yacimientos geotérmicos es una tarea fundamental requerida para una mejor explotación y optimización del recurso. Las mediciones directas de temperatura durante la construcción/operación del pozo resultan muy costosas, y por ello, herramientas geoquímicas y computacionales son recomendadas para la predicción de dichas temperaturas. Entre estas herramientas destacan los geotermómetros químicos (solutos, gases e isótopos) y la simulación de procesos fisicoquímicos y de transferencia de calor por su bajo costo (e.g., García et al., 1998; Santoyo et al., 2000; Bayram, 2001; Can, 2002; Díaz-González et al., 2008; Bassam et al., 2010; Espinoza-Ojeda et al., 2016).

En el contexto de los geotermómetros químicos, hoy en día existen en la literatura numerosas ecuaciones geotermométricas de gases cuya confiabilidad de predicción se ha visto limitada debido a las fuentes de incertidumbre asociadas con la determinación de la composición química de la fase vapor del fluido geotérmico, el muestreo de fluidos y los análisis químicos. Por lo tanto, el desarrollo de estas herramientas sigue representando un reto científico para llevar a cabo una estimación de temperaturas de fondo más confiable para la industria geotérmica.

Como parte del desarrollo de los geotermómetros de gases históricamente se han utilizado herramientas estadísticas de análisis multivariado (básicamente regresión lineal, logarítmica y polinomial) para correlacionar las concentraciones de los gases y las temperaturas medidas en el fondo de los sistemas (es decir, a condiciones de yacimiento): D'Amore & Nuti, 1997; D'Amore & Panichi, 1980; Arnórddon & Gunnlaugsson, 1985; Koga et al., 1995; Ping & Armannsson, 1996; Supranto et al., 1996; Powell & Cumming, 2010. Sin embargo, la naturaleza compleja de las reacciones de interacción roca-agua-gas y la termodinámica de los sistemas gaseosos asociados en ambientes geotérmicos, ha limitado la obtención y confiabilidad de los modelos geotermométricos debido a problemas multivariados que afectan la eficiencia de predicción de estas herramientas. Como se mencionó anteriormente, las RNA han sido recomendadas como herramientas de simulación para modelar y resolver problemas multivariados en ciencias exactas e ingeniería. En este trabajo de investigación se propone el uso de las RNA para el desarrollo de nuevas y mejores ecuaciones geotermométricas para su aplicación en la exploración y explotación de sistemas geotérmicos.

En este capítulo de la tesis se describen los resultados obtenidos del entrenamiento de estas técnicas de inteligencia artificial para correlacionar la composición multi-componente ccde la fase gaseosa de un fluido geotérmico y las temperaturas medidas en pozos geotérmicos productores.

6.2 Metodología de trabajo

La metodología geoquimiométrica desarrollada para la obtención de nuevas ecuaciones geotermométricas de gases es presentada esquemáticamente mediante el diagrama de flujo de la Fig. 10. Esta metodología se resume en las siguientes 4 etapas principales: (i) Creación y compilación de una nueva base de datos de composición química de la fase gaseosa de fluidos provenientes de pozos geotérmicos del mundo (BDGGeoM₁); (2) Selección de arquitecturas básicas de RNA para el entrenamiento de la correlación concentración y temperatura; (3) Desarrollo de las nuevas ecuaciones geotermométricas de gases; y (4) Análisis comparativo entre las eficiencias de predicción de los nuevos geotermómetros RNA y geotermómetros reportados en la literatura mundial.

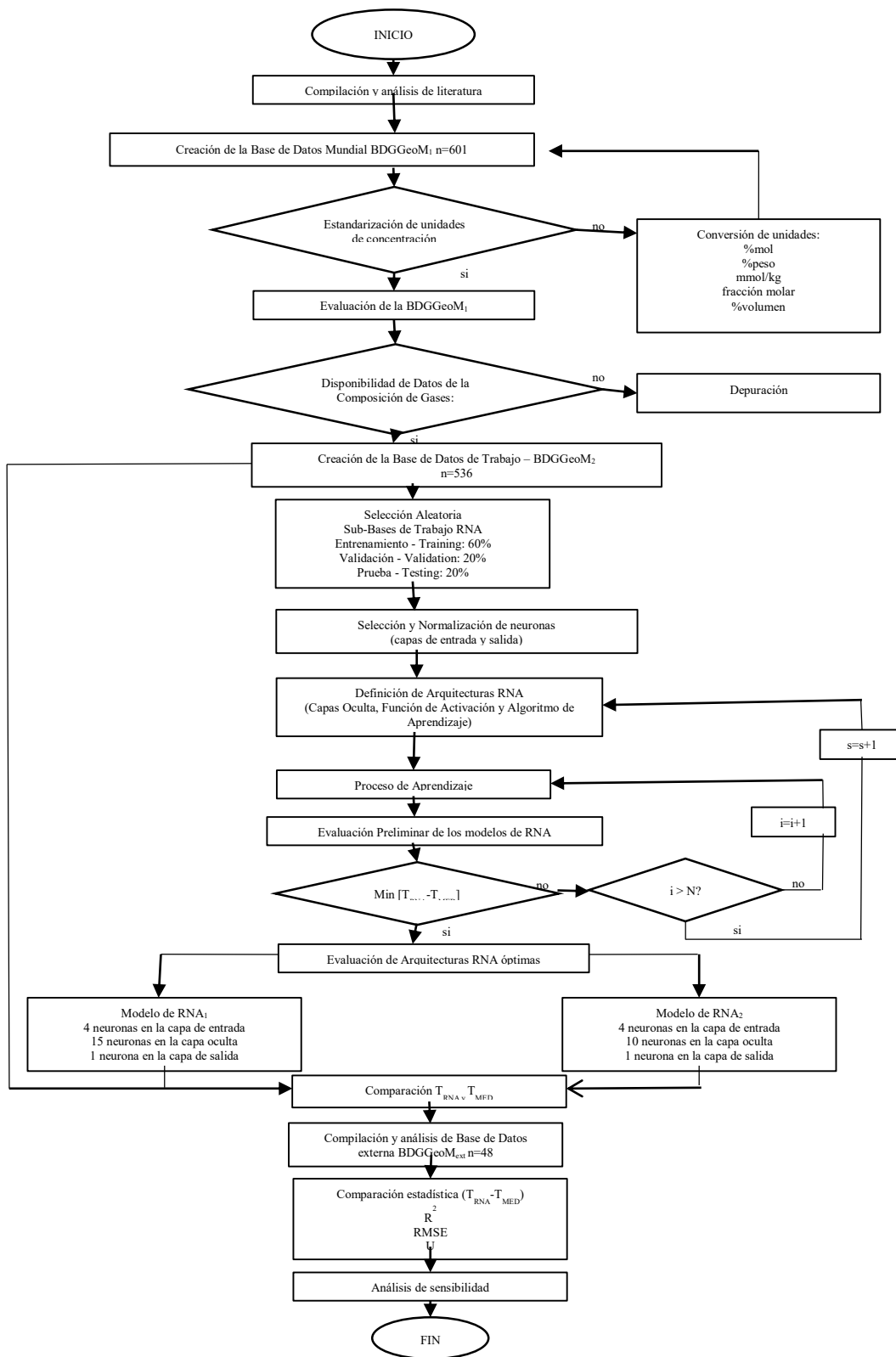


Figura 10. Metodología geoquimiométrica utilizada para el desarrollo de nuevas ecuaciones geotermométricas de gases

6.2.1 Etapa 1: Creación y compilación de la base de datos BDGGeoM₁

Con el objeto de realizar el presente trabajo, se creó una base de datos con registros de la composición química analizados en la fase gaseosa de fluidos procedentes de pozos geotérmicos del mundo, incluyendo las mediciones directas de la temperatura de fondo en los pozos (BHT). La BDGGeoM₁ fue creada utilizando el software comercial STATISTICA[®]. La selección de este software se hizo debido al respaldo que ofrece en la aplicación correcta de pruebas y cálculo de parámetros estadísticos y a la capacidad de manejo de grandes volúmenes de datos (StatSoft, Inc., 2007).

Los datos a ser considerados como registros de la BDGGeoM₁ debieron cumplir estrictamente con las 3 características siguientes: (1) disponibilidad de la composición química de la fase gaseosa (He, H₂, Ar, N₂, CH₄, CO₂, H₂S, NH₃, entre otros); (2) aplicabilidad de un criterio de verificación de calidad de los análisis químicos a través de la concentración total de gases cuantificados en porcentaje (100%) ó en unidades molares (1000 mmol/mol); y (3) la disponibilidad de la temperatura medida en los pozos (BHT), que básicamente constituyó el parámetro más estricto de la compilación debido a la dificultad para acceder esta información por los altos costos involucrados en las mediciones, su naturaleza confidencial y su obvia protección. Atendiendo estas condiciones de información, las fuentes de datos para llevar a cabo exitosamente dicha compilación incluyeron: artículos publicados en revistas internacionales indizadas, memorias de congresos nacionales e internacionales y reportes técnicos disponibles en Internet.

BDGGeoM₁ contiene registros tales como: nombre del pozo, sistema geotérmico al que pertenece, país donde se ubica, fecha de muestreo, temperatura medida, fracción vapor, fracción del gas en el vapor, concentración de las principales especies gaseosas (CO₂, H₂S, NH₃, CH₄, N₂, H₂) que componen al fluido en diferentes unidades de concentración, tipo de sistema geotérmico, estimaciones de temperaturas realizadas mediante la aplicación de 21 geotermómetros de gases existentes en la literatura (ver Tabla 2) y la referencia bibliográfica de la cual fueron obtenidos los datos.

Durante la compilación de datos, se detectó que los autores de los trabajos suelen reportar, en forma arbitraria, en una amplia variedad de unidades de concentración (p. ej., partes por mil molar, mmol/mol, fracción molar por mil, %mol, %peso, % volumen). Ante este problema, inicialmente se respetó y compiló la unidad de concentración básica reportada en los trabajos, y se optó por convertir los datos de la BDGGeoM₁ en las siguientes unidades de concentración: mmol/kg vapor, mmol/mol, por ciento peso, y fracción molar base húmeda. Estas unidades son requeridas para aplicar los geotermómetros de gases seleccionados para llevar subsecuentemente la etapa de evaluación y comparación estadística (ver Tabla 2, y el manual de conversiones reportado por Pérez-Zarate, 2015). De esta tarea, se adoptó las unidades mmol/mol como los datos principales de entrada al modelo RNA por ser la unidad de concentración más usada en estudios geoquímicos reportados en el mundo.

Previo al entrenamiento del modelo de red neuronal se utilizaron los dos criterios siguientes para la depuración de la base de datos BDGGeoM₁:

- 1) Disponibilidad de los datos de concentración de 4 gases (indicadores termométricos):
Con la aplicación de este criterio, se consideraron únicamente los registros en los que se reportara el análisis químico de, al menos, 2 gases mayores (CO₂ y H₂S) y 2 gases traza (CH₄ y H₂), considerados como indicadores termométricos claves en sistemas geotérmicos. Aquellos trabajos que no reportaron la concentración de estos 4 gases fueron eliminados de la base de datos. Estos gases fueron seleccionados debido a que son considerados como componentes principales de la fase vapor del fluido geotérmico, y a que se emplean regularmente para estimar las temperaturas con las ecuaciones geotermométricas de referencia desarrolladas a la fecha (ver Tabla 2).
- 2) Eliminación de registros con ceros: Se eliminaron los registros cuya concentración de alguno de los gases antes mencionados fuera reportada como cero. Esto se realizó ya que la presencia de ceros afecta el entrenamiento de la red neuronal.

6.2.2 Etapa 2: Selección de arquitecturas básicas de RNA.

El entrenamiento de los modelos básicos de RNA se realizó mediante el uso del módulo Neural Networks Toolbox del software comercial MATLAB® (2012). El entrenamiento se fundamentó en los siguientes 8 Procesos, los cuales son descritos brevemente a continuación:

- i. Selección de las neuronas en la capa de entrada: se evaluaron 17 combinaciones con las neuronas de entrada utilizando básicamente 3 características geoquímicas principales que imperan en las reacciones químicas de gases existentes en yacimientos geotérmicos.
 - a) Reacciones químicas de gases en sistemas binarios en las cuales se evaluaron las primeras 4 combinaciones siguientes:
 - ✓ $\text{CO}_2/\text{H}_2\text{S}$
 - ✓ $\log \text{CO}_2/\text{H}_2\text{S}$;
 - ✓ CO_2, H_2 ;
 - ✓ $\text{H}_2\text{S}/\text{H}_2$
 - b) Reacciones químicas de gases en sistemas ternarios en las cuales se evaluaron las 11 combinaciones siguientes:
 - ✓ $\text{CO}_2, \text{H}_2\text{S}, \text{CH}_4$
 - ✓ $\log \text{CO}_2, \log \text{H}_2\text{S}, \log \text{CH}_4$
 - ✓ $\text{CO}_2, \text{H}_2\text{S}, \text{H}_2$
 - ✓ $\log \text{CO}_2, \log \text{H}_2\text{S}, \log \text{H}_2$
 - ✓ $\log \text{H}_2\text{S}/\text{CO}_2, \log \text{CH}_4/\text{CO}_2, \log \text{H}_2/\text{CO}_2$
 - ✓ $\log \text{CO}_2/\text{H}_2, \log \text{H}_2\text{S}/\text{H}_2, \log \text{CH}_4/\text{H}_2$
 - ✓ $\log \text{CO}_2/\text{H}_2\text{S}, \log \text{CH}_4/\text{H}_2\text{S}, \log \text{H}_2/\text{H}_2\text{S}$
 - ✓ $\log \text{CO}_2/\text{CH}_4, \log \text{H}_2\text{S}/\text{CH}_4, \log \text{H}_2/\text{CH}_4$
 - ✓ $\text{CO}_2, \text{CH}_4, \text{H}_2$
 - ✓ $\log \text{CO}_2, \log \text{CH}_4, \log \text{H}_2$
 - ✓ $\text{H}_2\text{S}/\text{CO}_2, \text{CH}_4/\text{CO}_2, \text{H}_2/\text{CO}_2$

c) Reacciones químicas de gases en sistemas multi-componente en las cuales se evaluaron las 2 últimas combinaciones:

- ✓ CO₂, H₂S, CH₄, H₂
- ✓ logCO₂, logH₂S, logCH₄, logH₂

Estas 17 combinaciones consideran las concentraciones y relaciones química de gases usualmente utilizadas por geotermómetros de gases propuestos en la literatura (ver Tabla 2).

ii. Normalización: Con el objeto de definir el intervalo de aplicación de la función de transferencia en la RNA, se llevaron a cabo los siguientes tipos de normalización:

a) Normalización entre 0 y 1 para las variables de entrada que no usan el logaritmo base 10. Esta normalización se realizó porque la función de transferencia (tansig) requiere valores entre -1 y 1. Sin embargo, dado que no existen concentraciones negativas de los gases, solo se consideró la parte positiva. Para llevarla a cabo esta normalización, se aplicó la ecuación siguiente:

$$y_n = \frac{y_r}{1.1 * \max y_r} \quad (55)$$

donde: y_n representa a la variable normalizada, y_r es el valor real de la variable y , y $\max y_r$ es el máximo valor del vector de la variable y .

b) Normalización entre -1 y 1 para las variables que utilizan el logaritmo base 10. Debido a que la función de transferencia usada (tansig) requiere valores entre -1 y 1. En este caso de normalización, al aplicar logaritmos a las concentraciones o relaciones químicas de los gases sí existen valores negativos. Para esta normalización se aplicó la ecuación:

$$y = \frac{(y_{\max} - y_{\min}) * (x - x_{\min})}{(x_{\max} - x_{\min})} + y_{\min} \quad (56)$$

donde: y es la variable normalizada, y_{\max} es el valor máximo de la variable normalizada, es decir, 1, y_{\min} es el valor mínimo de la variable normalizada, es decir -1, x es el valor real de la variable, x_{\min} es el valor mínimo del vector de la variable a normalizar y x_{\max} es el valor máximo del vector de la variable.

- iii. Selección de neuronas de la capa oculta: el número óptimo de neuronas en la capa oculta fue difícil de especificar ya que generalmente depende de la complejidad del problema. Basado en estudios previos realizados (Bassam et al., 2010, 2014), se realizaron simulaciones con un número variable de neuronas en la capa oculta, iniciando con 1 y aumentando en 5, hasta llegar a un número máximo de 30 neuronas.
- iv. Selección de neuronas de la capa de salida: En todos los casos simulados, se consideró una sola neurona en la capa de salida que consistió en la temperatura medida, BHT por ser ésta el target principal de la simulación. Así mismo se efectuaron pruebas con variaciones a este parámetro de salida, entre las cuales se usaron: \sqrt{BHT} , $\frac{1}{BHT}$, $\frac{1}{\sqrt{BHT}}$ y $\frac{1000}{BHT_k}$, donde BHT_k se refiere a la temperatura absoluta (medida en K).
- v. Selección de algoritmo de entrenamiento y función de transferencia: De acuerdo a trabajos previos realizados por Álvarez del Castillo et al. (2012), ; Bassam et al., 2010, 2014 y 2015 y Díaz-González et al., 2013), el algoritmo de entrenamiento que mejores resultados ha proporcionado (con base en velocidad y alcance del target), ha sido el algoritmo de Levenberg-Marquardt (Lourakis, 2005); mientras que la función de transferencia usada fue *tansig* con un dominio de -1 a 1.

- vi. Distribución de datos para las etapas de entrenamiento (“trainig”), validación (“validation”) y prueba (“testing”): los datos fueron distribuidos en 5 partes, 3/5 (60%) fueron usados para entrenamiento; 1/5 (20%) para validación; y 1/5 (20%) para prueba. Esta distribución se realizó para evitar que la red neuronal experimentará un problema de sobre-ajuste, esto quiere decir, que dado un conjunto de datos, la RNA reproduzca muy bien el comportamiento de éstos, pero no necesariamente, el de nuevos datos.

- vii. Definición del número de iteraciones: Inicialmente se realizaron pruebas preliminares de 10 iteraciones con las arquitecturas propuestas con el objetivo de tener un panorama general del comportamiento de las arquitecturas. Dado que las arquitecturas mostraron valores bajos promisorios del parámetro estadístico de evaluación (RMSE), se decidió determinar un número máximo de iteraciones de $N=1000$ para las pruebas finales de evaluación.

- viii. Definición de parámetros de convergencia: los parámetros de convergencia considerados como criterio de paro del entrenamiento fueron: 1) alcanzar un buen coeficiente de correlación lineal (r) entre la temperatura medida (BHT_m) y la temperatura predicha por la RNA (BHT_{RNA}); ó 2) alcanzar el número máximo de iteraciones programadas ($N=1,000$).

6.2.3 Etapa 3: Desarrollo de ecuaciones geotermométricas de gases

Como se mencionó anteriormente, a partir de las arquitecturas entrenadas, se eligieron las RNA que mostraron el mejor resultado en función del parámetro r alcanzado (esto es, una minimización preliminar del error entre la BHT_m y la temperatura predicha por la red). Estas arquitecturas fueron entrenadas con el número de iteraciones máxima hasta encontrar el valor óptimo del coeficiente de correlación (r), teniendo cuidado de evitar el problema de sobre-ajuste. Los coeficientes óptimos (pesos y bias) de estas arquitecturas RNA fueron entonces usados para la derivación de las nuevas ecuaciones geotermométricas que predicen la temperatura de reservorio a partir de la composición química de los gases (en unidades de concentración base-seca: mmol/mol) utilizando los intervalos de composición química de la fase gaseosa con los cuales se entrenó.

A partir de estas ecuaciones geotermométricas, se procedió a realizar una aplicación integral para calcular las temperaturas de los datos de composición incluidos en la base de datos original para validar su capacidad de predicción en el intervalo de entrenamiento. Los resultados predichos por los modelos RNA fueron comparados con los datos de temperatura medidos en pozos geotérmicos e incluidos en la misma base de datos. Este análisis comparativo se realizó usando los 2 siguientes parámetros estadísticos: (i) Error cuadrado de la media (RMSE, Ec. 57); y (ii) el coeficiente de determinación (r Ec. 58). A partir de los resultados, se confirmó que las arquitecturas RNA que presentaron el valor mínimo de RMSE, y el valor más alto de r fueron consideradas como los mejores modelos RNA para efectos de aplicación futura con bases de datos externas para eliminar su sesgo de estimación.

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [BHT_m(i) - BHT_{RNA}(i)]^2} \quad (57)$$

$$r = \sqrt{1 - \frac{\sum_{i=1}^n (BHT_{m(i)} - BHT_{RNA(i)})^2}{\sum_{i=1}^n BHT_{m(i)} - \overline{BHT}_m)^2}} \quad (58)$$

Con estos propósitos de aplicación futura, los dos modelos RNA seleccionados fueron programados en lenguaje FORTRAN® para disponer de una herramienta computacional de fácil interacción entre usuarios y bases de datos. El código de cómputo fue desarrollado usando los coeficientes, tanto de la capa de entrada, como de la capa oculta, ambos generados por los mejores modelos RNA (usando los criterios estadísticos de evaluación: minimización de RMSE y maximización de r). Detalles del código fueron reportados en un manual de usuario disponible para su aplicación (ver Pérez-Zarate, 2015).

Análisis de sensibilidad. Con el objeto de determinar la contribución relativa de cada una de las variables de entrada (neuronas de entrada) en la estimación de la temperatura de reservorio se aplicó el algoritmo de Garson (1991). Este algoritmo básicamente está representado por la ecuación 59.

Tabla 10. Base de datos externa (BDGGeoM_{ext})

n	Pozo	Campo	País	BHT _m °C	CO ₂	H ₂ S mmol/mol	CH ₄	H ₂	Referencia
1	TR-2	Berlín	El Salvador	295	924.002	46.911	1.750	6.725	Renderos, 2002
2	TR-2	Berlín	El Salvador	295	882.906	80.981	2.026	14.112	
3	TR-2	Berlín	El Salvador	295	880.693	84.005	2.258	10.011	
4	TR-2	Berlín	El Salvador	295	857.143	123.459	2.180	10.977	
5	TR-2	Berlín	El Salvador	295	880.294	86.731	1.948	10.174	
6	TR-2	Berlín	El Salvador	295	874.166	84.349	1.917	11.042	
7	TR-2	Berlín	El Salvador	295	867.829	95.768	1.997	10.905	
8	TR-2	Berlín	El Salvador	295	839.881	110.946	2.845	12.598	
9	TR-4	Berlín	El Salvador	298	856.385	96.213	1.809	9.609	
10	TR-4B	Berlín	El Salvador	285	903.111	60.871	1.031	6.720	
11	TR-4B	Berlín	El Salvador	285	917.609	55.676	1.045	7.782	
12	TR-4B	Berlín	El Salvador	285	889.513	76.712	1.739	10.835	
13	TR-4B	Berlín	El Salvador	285	916.328	67.626	1.327	7.463	
14	TR-4C	Berlín	El Salvador	295	864.895	47.398	1.249	5.745	
15	TR-4C	Berlín	El Salvador	295	894.257	70.379	1.568	8.652	
16	TR-4C	Berlín	El Salvador	295	824.308	136.643	1.504	25.391	
17	TR-4C	Berlín	El Salvador	295	846.008	84.316	2.234	14.116	
18	TR-5	Berlín	El Salvador	305	884.430	83.691	1.782	10.494	
19	TR-5a	Berlín	El Salvador	295	853.651	83.154	1.781	8.905	
20	TR-5a	Berlín	El Salvador	295	873.574	88.975	2.022	10.273	
21	TR-5a	Berlín	El Salvador	295	835.197	103.869	2.907	12.522	
22	TR-5B	Berlín	El Salvador	285	867.876	97.604	1.749	9.132	
23	TR-5B	Berlín	El Salvador	285	874.903	84.315	1.905	11.148	
24	TR-5B	Berlín	El Salvador	285	876.519	89.805	1.999	12.379	
25	TR-5B	Berlín	El Salvador	285	832.735	94.185	2.872	13.281	
26	TR-5C	Berlín	El Salvador	285	854.276	103.277	2.398	11.278	
27	TR-5C	Berlín	El Salvador	285	868.513	93.215	2.330	16.761	
28	TR-5C	Berlín	El Salvador	285	854.009	107.708	2.503	12.589	
29	TR-9	Berlín	El Salvador	285	903.829	68.904	1.574	7.617	
30	TR-9	Berlín	El Salvador	285	871.809	93.039	2.232	11.229	
31	TR-9	Berlín	El Salvador	285	908.238	60.812	1.678	8.984	
32	TR-9	Berlín	El Salvador	285	904.935	75.753	1.259	9.003	
33	TR-9	Berlín	El Salvador	285	917.006	58.355	1.112	8.290	
34	TR-9	Berlín	El Salvador	285	863.363	90.165	1.802	12.988	
35	TR-9	Berlín	El Salvador	285	870.902	95.214	1.903	11.856	
36	TR-9	Berlín	El Salvador	285	858.067	90.871	2.813	14.489	
37	Grensdalur	Hverragerdi	Islandia	181	834.000	75.000	2.000	20.000	Arnórsson et al., 1998
38	5	Krafla	Islandia	212	813.000	135.000	2.000	10.000	
39	9	Krafla	Islandia	238	865.000	95.000	1.000	10.000	
40	11	Krafla	Islandia	261	870.000	94.000	0.483	26.000	
41	12	Krafla	Islandia	184	892.000	76.000	0.377	27.000	
42	14	Krafla	Islandia	246	834.000	80.000	0.197	60.000	
43	15	Krafla	Islandia	288	826.000	114.000	5.000	50.000	
44	19	Krafla	Islandia	248	887.000	57.000	0.115	40.000	
45	20	Krafla	Islandia	288	923.000	38.000	0.181	21.000	
46	20	Krafla	Islandia	288	931.000	44.000	0.203	22.000	
47	25	Krafla	Islandia	220	813.000	100.000	4.000	4.000	
48	26	Krafla	Islandia	299	864.000	97.000	0.481	33.000	

$$CR_p = \frac{\sum_{j=1}^n \frac{|w_{jp}| |v_j|}{\sum_{k=1}^I |w_{jk}|}}{\sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^n \frac{|w_{jp}| |v_j|}{\sum_{k=1}^I |w_{jk}|}} \quad (59)$$

En donde p es la entrada de la cual se desea conocer su contribución relativa, n es el número de neuronas en la capa oculta, j es la j -ésima neurona oculta, I es el número de entradas de la red neuronal, w_{jp} es el peso sináptico de la entrada p hacia la neurona j , v_j es el peso sináptico de la neurona j hacia la salida y w_{jk} peso sináptico de la entrada k hacia la neurona j .

6.2.4 Etapa 4: Análisis comparativo entre las eficiencias de predicción de los nuevos geotermómetros RNA y geotermómetros reportados en la literatura mundial.

Con el objetivo de evaluar objetivamente, y sin sesgo estadístico, la capacidad de predicción de los nuevos geotermómetros de gases (exactitud), se creó una nueva base de datos (BDGGeoM_{ext}) con composiciones de fluidos procedentes de 48 pozos geotérmicos. Es importante mencionar que los datos contenidos en la BDGGeoM_{ext} no formaron parte de la BDGGeoM₁ original y que fueron seleccionados aleatoriamente para evitar errores de sesgo en estas pruebas de aplicación. Los datos de la BDGGeoM_{ext} se presentan en la Tabla 10, y básicamente incluyen datos recolectados de los siguientes campos geotérmicos del mundo: (i) Berlín, El Salvador, con temperaturas de reservorio entre 285°C y 305°C (n=36; Renderos, 2002); (ii) Grensladur, Hveragerdi, con temperatura de reservorio de 181°C (n=1); y (iii) Krafla, Islandia, con temperaturas de reservorio entre 184°C y 299°C (n= 11; Arnórsson et al., 1998). Las series de datos representan sistemas geotérmicos de mediana y alta temperatura.

La eficiencia de predicción fue evaluada en términos de la exactitud mediante las ecuaciones mostradas en la Tabla 11.

Tabla 11. Parámetros estadísticos para la evaluación de las diferencias entre los datos medidos y los datos simulados.

Parámetro estadístico	Ecuación
RMSE (Root Mean Square Error)	$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [BHT_m(i) - BHT_{RNA}(i)]^2}$
MAPE (Mean Absolute Percentage Error)	$MAPE = \frac{\sum_{i=1}^n \left \frac{BHT_{RNA} - BHT_m}{BHT_{RNA}} \right }{n} \times 100$
Theil's U (Coeficiente de incertidumbre)	$r = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^n (BHT_{RNA(i)} - BHT_{m(i)})^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (BHT_{geot(i)} - BHT_{m(i)})^2}}$

BHT_m es la temperatura de reservorio medida en campo; BHT_{RNA} es la temperatura de reservorio estimada mediante los modelos de RNA; BHT_{geot} es la temperatura de reservorio estimada con los geotermómetros de gases existentes. RMSE es una medida de precisión entre los valores predichos por un modelo y los valores observados o medidos. El coeficiente de incertidumbre U es usado para medir la eficiencia de predicción de un modelo cuando éste es comparado con otros. Valores de U menores que 1 indican que los errores obtenidos con el modelo evaluado son menores que los obtenidos con otros modelos.

6.3 Resultados y Discusión

6.3.1 Etapa 1: Creación y compilación de la base de datos BDGGeoM₁.

Los datos de composición química de la fase vapor y de temperatura de fondo medida en pozos fueron compilados de varias fuentes de información, entre las cuales destaca: artículos publicados en revistas internacionales indizadas, revistas con arbitraje, memorias de congresos nacionales e internacionales y reportes internos.

Estos datos de composición y temperatura medida proceden específicamente de varios sistemas geotérmicos del mundo con la siguiente distribución: 1) México: Los Humeros, Los Azufres y Cerro Prieto, k=500 registros; 2) Islandia: Hellisheidi, Bakki, Nesjavellir, Krafla y Námafjall, k=47 registros; 3) Italia: Larderello, k=30 registros; 4) Filipinas: Palinpinon, k=9 registros; 5) Japón: Takigami, k=6 registros; 6) El Salvador: Berlín, k=6 registros; y 7) Kenia: Olkaria, k=3 registros. Con esta distribución la base de datos original BDGGeoM₁ quedo conformada por un total de n=601 registros.

Después de aplicar los criterios de depuración descritos en la sección 6.3.1, la base de datos BDGGeoM, quedó reducida a 536 registros con la siguiente re-distribución: 1) México: Los Humeros, Los Azufres y Cerro Prieto, k=438 registros; 2) Islandia: Hellisheidi, Bakki, Nesjavellir, Krafla y Námafjall, k=46 registros; 3) Italia: Larderello, k=30 registros; 4) Filipinas: Palinpinon, k=8 registros; 5) Japón: Takigami, k=6 registros; 6) El Salvador: Berlín, k=6 registros; y 7) Kenia: Olkaria, k=2 registros. Con esta distribución la base de datos original BDGGeoM₁ quedo conformada por un total de n=536 registros.

Esta nueva base de datos quedó definida como BDGGeoM₂, la cual es incluida en el Anexo 1.

Tabla 12. Distribución estadística de las variables de entrada y salida usadas para el entrenamiento de la RNA

Parámetro estadístico	MM_CO ₂	MM_H ₂ S	MM_CH ₄	MM_H ₂	BHT
Media	893	49	5	18	289
Error típico	8.1	2.0	0.4542	1.7047	2
Mediana	924	39	0.9509	8.0510	296
Moda	975	7.1	0.1	2.9	340
Desviación estándar	188	47	11	39	48
Curtosis	51	9	7	61	-0.4
Coefficiente de asimetría	1.9	2.4	2.8	6.8	-0.5
Rango	3205	357	57	477	268
Mínimo	311	0.1	5.92x10 ⁻⁵	0.9	116
Máximo	994	357	57	477	384
Suma	478815	26121	2674	9575	155005
n	536	536	536	536	536
Nivel de confianza (95.0%)	16	4	0.9	3	4

MM: concentración del gas en las unidades mmol/mol base seca

6.3.2 Etapa 2: Selección de arquitecturas básicas de RNA.

En total se entrenaron 127 arquitecturas, de las cuales 118 fueron evaluadas inicialmente usando simulaciones con 10 iteraciones para una selección preliminar de la arquitectura con los mejores parámetros estadísticos (ver Tabla 13). Las 5 arquitecturas con los mejores valores de r y menores valores de RMSE, o con las diferencias estadísticas pequeñas entre el target (BHT_m) y la predicción de simulación (BHT_{RNA}), fueron evaluadas nuevamente, incrementando en las simulaciones, el número de iteraciones a N=1000.

Así mismo, se evaluaron las mismas 5 arquitecturas que mostraron los mejores resultados, pero cambiando la variable target de salida a \sqrt{BHT} , de igual forma con simulaciones utilizando el mismo número de iteraciones (N=1000).

Este proceso de selección se llevó a cabo en las siguientes fases:

Primera fase. Las funciones de activación *tansig* (capa oculta)-*purelin* (capa de salida) con 10 iteraciones de ajuste permitieron la obtención de los siguientes resultados al correlacionar linealmente las temperaturas predichas (BHT_{RNA}) con las medidas (BHT_m): (i) las arquitecturas generadas con sistemas binarios de gases produjeron un entrenamiento poco aceptable con valores máximos de r de hasta 0.6316, y valores de RMSE entre 31 y 90; (ii) las arquitecturas obtenidas usando sistemas ternarios de gases generaron valores máximos de r de hasta 0.7721, y valores de RMSE entre 31 y 52; y (iii) las arquitecturas obtenidas usando sistemas multicomponentes de gases generaron valores de r de hasta 0.7640, y valores de RMSE entre 31 y 39. Evidentemente, las mejores arquitecturas fueron obtenidas con un sistema multicomponente de gases con transformación logarítmica fundamentada por los valores más altos de r y los valores más pequeños de RMSE.

Segunda fase. El entrenamiento con N=1000 de las mejores arquitecturas RNA que derivaron de la etapa anterior permitieron la obtención de los siguientes resultados al correlacionar linealmente las temperaturas predichas (BHT_{RNA}) con las medidas (BHT_m): (i) las mejores arquitecturas generadas usando como variable de salida BHT en °C produjeron valores máximos de r de hasta 0.7899 y valores de RMSE entre 30 y 37; y (ii) las arquitecturas generadas usando como variable de salida \sqrt{BHT} produjeron valores de r de hasta 0.7904 y valores de RMSE de alrededor de 29.

Tercera fase. Con estos resultados, se seleccionaron las dos mejores arquitecturas, a las que denominamos RNA₁ y RNA₂. Estas arquitecturas demostraron tener los valores más grandes de r (0.7899 y 0.7904 respectivamente) y los valores más pequeños de RMSE (31 y 29 respectivamente).

En todos los casos de correlación se fundamentaron con base en la teoría de probabilidades de la correlación lineal (según Bevington & Robinson, 2002), la cual establece que sus coeficientes sean estadísticamente significativos y adecuados en todos los casos de evaluación de la RNA's, considerando que el tamaño de la muestra estadística ($n=536$) es lo suficientemente grande con un intervalo de confianza del 95% ó 99%.

Como puede observarse, en general los resultados obtenidos sugieren que el error de aprendizaje de la RNA generalmente decrece al incrementar tanto el número de iteraciones como el número de neuronas en la capa oculta. Por esta razón, se justificó el uso del parámetro estadístico RMSE como criterio determinante para optimizar el número de iteraciones y evitar el sobre-ajuste de las redes neuronales evaluadas (Hernández-Pérez et al., 2004).

6.3.3 Etapa 3: Desarrollo de ecuaciones geotermométricas de gases.

Como puede observarse en la Tabla 13, los dos mejores modelos RNA correspondieron a un sistema multi-componente de 15 neuronas en la capa oculta (al que denominaremos RNA₁ con parámetros estadísticos de evaluación: RMSE = 31 y $r = 0.7899$) y un segundo modelo con 10 neuronas en la capa oculta (denominado RNA₂ con parámetros estadísticos de evaluación RMSE = 29, $r = 0.7904$). Estos resultados son presentados en la Fig. 13, en donde se muestra una comparación entre los valores medidos (BHT_m) contra los simulados (BHT_{RNA}) para ambos modelos de RNA desarrollados. La evaluación final de las dos redes (RNA₁ y RNA₂) se completó o confirmó a través de un análisis en los parámetros de regresión lineal (BHT_{RNA1} = 0.66 BHT_m + 98; BHT_{RNA2} = 0.67 BHT_m + 5.5), ecuaciones que condujeron a la obtención de coeficiente de correlación r de 0.7899 y 0.7904 para la RNA₁ y RNA₂, respectivamente. Considerando la ecuación de la recta $y = ax + b$, los valores ideales para el intercepto y la pendiente serían $a=0$ y $b=1$, respectivamente.

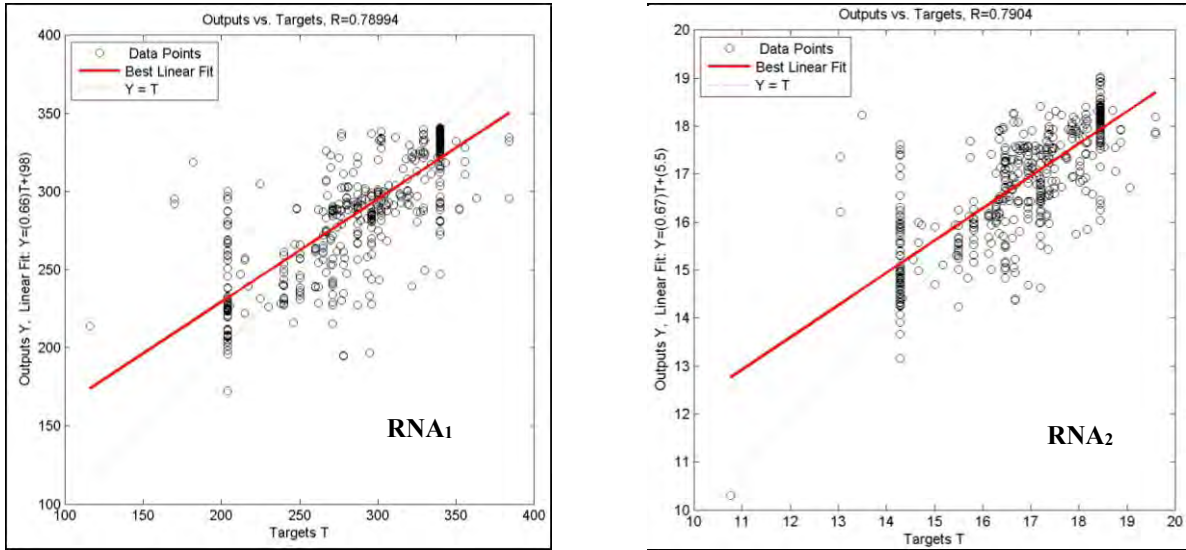


Fig. 11 Comparación entre los valores medidos en campo y los calculados con los modelos de red neuronal artificial. N=536.

Los pesos y bias producto de los entrenamientos de las RNAs fueron interpretados como los coeficientes estadísticos IW , LW , b_1 y b_2 de las nuevas ecuaciones geotermométricas (ver las Tabla 14 y 15, respectivamente). Estos coeficientes fueron usados finalmente para derivar las 2 nuevas ecuaciones geotermométricas de gases:

$$BHT_{RNA_1} = \sum_{j=1}^s \left[LW(j) \cdot \left(\frac{2}{1 + \exp\left(-2\left(\sum_{k=1}^K (IW(j,k) \cdot \ln(k)) + b_{1(j)}\right)\right)} - 1 \right) \right] + b_2 \quad (60)$$

donde k = número de neuronas en la capa de entrada, s = número de neuronas en la capa oculta, j = número de neuronas en la capa de salida, b_1 = sesgo de las neuronas en la capa oculta, b_2 = sesgo de las neurona en la capa de salida, IW = pesos de las neuronas de la capa de entrada, LW = pesos de las neuronas en la capa oculta. Estas 2 nuevas ecuaciones geotermométricas de gases fueron finalmente usadas para validar los modelos RNA con los datos de la BDGGeoM₂.

Tabla 13. Análisis de las diversas arquitecturas

n	Variables de entrada	Arquitectura número de neuronas en: capa entrada- capa oculta- capa salida	RMSE	r	Ecuación de ajuste
<i>Sistemas binarios (# Arquitecturas: 27)</i>					
1	CO ₂ / H ₂ S	1 - 01 - 1	33.4226	0.57751	y=0.31BHT+200
		1 - 05 - 1	36.5348	0.59213	y=0.38BHT+180
		1 - 10 - 1	36.4948	0.58222	y=0.37BHT+180
		1 - 15 - 1	53.3116	0.44346	y=0.31BHT+210
		1 - 20 - 1	89.5277	0.15768	y=0.14BHT+250
		1 - 25 - 1	31.2236	0.09356	y=0.087BHT+260
2	log (CO ₂ / H ₂ S)	1 - 01 - 1	32.8987	0.59458	y=0.33BHT+190
		1 - 05 - 1	32.2835	0.63164	y=0.4BHT+170
		1 - 10 - 1	34.5958	0.61454	y=0.37BHT+180
		1 - 15 - 1	33.7189	0.62319	y=0.4BHT+170
		1 - 20 - 1	36.8690	0.59617	y=0.41BHT+170
		1 - 25 - 1	35.0997	0.62466	y=0.42BHT+170
		1 - 30 - 1	50.2572	0.55546	y=0.43BHT+170
3	CO ₂ H ₂ S	2 - 01 - 1	48.8292	1.6006 x 10 ⁻²⁶	y=-4.3x10 ⁻⁵ BHT+290
		2 - 05 - 1	40.7397	0.55787	y=0.32BHT+200
		2 - 10 - 1	41.2236	0.55605	y=0.29BHT+210
		2 - 15 - 1	42.3235	0.54839	y=0.30BHT+200
		2 - 20 - 1	40.6693	0.55659	y=0.28BHT+210
		2 - 25 - 1	40.8917	0.56106	y=0.30BHT+200
		2 - 30 - 1	41.6214	0.56461	y=0.30BHT+200
		4	H ₂ S/H ₂	1 - 01 - 1 1 - 05 - 1 1 - 10 - 1 1 - 15 - 1 1 - 20 - 1 1 - 25 - 1 1 - 30 - 1	
<i>Sistemas ternarios (# Arquitecturas: 77)</i>					
5	CO ₂ H ₂ S CH ₄	3 - 01 - 1	43.7249	0.57212	y=0.33BHT+190
		3 - 05 - 1	39.6921	0.64256	y=0.41BHT+170
		3 - 10 - 1	38.5167	0.69163	y=0.48BHT+150
		3 - 15 - 1	38.5555	0.70075	y=0.52BHT+140
		3 - 20 - 1	40.9784	0.62326	y=0.4BHT+170
		3 - 25 - 1	37.1020	0.72917	y=0.56BHT+130
		3 - 30 - 1	40.4080	0.70239	y=0.52BHT+140
6	log CO ₂ log H ₂ S log CH ₄	3 - 01 - 1	42.7839	0.59969	y=0.36BHT+180
		3 - 05 - 1	40.0001	0.64842	y=0.37BHT+180
		3 - 10 - 1	41.2156	0.6764	y=0.49BHT+150
		3 - 15 - 1	40.3747	0.70581	y=0.51BHT+140
		3 - 20 - 1	38.5497	0.74683	y=0.6BHT+120
		3 - 25 - 1	39.6377	0.71593	y=0.54BHT+130
		3 - 30 - 1	41.3004	0.65018	y=0.39BHT+170

continúa...

n	VARIABLES de entrada	Arquitectura número de neuronas en: capa entrada- capa oculta- capa salida	RMSE	r	Ecuación de ajuste
7	CO ₂ H ₂ S H ₂	3 - 01 - 1	37.1654	0.61550	y=0.37BHT+180
		3 - 05 - 1	36.3724	0.62384	y=0.38BHT+180
		3 - 10 - 1	35.6723	0.68708	y=0.48BHT+150
		3 - 15 - 1	37.8779	0.61964	y=0.37BHT+190
		3 - 20 - 1	35.4778	0.69144	y=0.46BhT+160
		3 - 25 - 1	34.6595	0.68959	y=0.47BHT+150
		3 - 30 - 1	33.7956	0.72163	y=0.55BHT+130
8	log CO ₂ log H ₂ S log H ₂	3 - 01 - 1	48.8365	0.01003	y=0.00014BHT+290
		3 - 05 - 1	37.7210	0.62106	y=0.29BHT+200
		3 - 10 - 1	36.0903	0.67289	y=0.45BHT+160
		3 - 15 - 1	38.1626	0.61779	y=0.35BHT+190
		3 - 20 - 1	34.2793	0.69436	y=0.50BhT+150
		3 - 25 - 1	32.4590	0.72713	y=0.51BHT+140
		3 - 30 - 1	38.3121	0.61876	y=0.36BHT+190
9	log H ₂ S/CO ₂ log CH ₄ /CO ₂ log H ₂ /CO ₂	3 - 01 - 1	41.2408	0.51724	y=0.26BHT+220
		3 - 05 - 1	33.7107	0.65267	y=0.40BHT+180
		3 - 10 - 1	35.0823	0.67078	y=0.45BHT+160
		3 - 15 - 1	35.6776	0.71175	y=0.49BHT+150
		3 - 20 - 1	32.5433	0.74456	y=0.56BHT+130
		3 - 25 - 1	32.9923	0.75078	y=0.58BhT+120
		3 - 30 - 1	52.0234	0.61931	y=0.47BHT+150
10	log CO ₂ /H ₂ log H ₂ S/H ₂ log CH ₄ /H ₂	3 - 01 - 1	33.9196	0.64637	y=0.4BHT+170
		3 - 05 - 1	34.2269	0.68874	y=0.48BHT+150
		3 - 10 - 1	33.7815	0.70570	y=0.49BHT+150
		3 - 15 - 1	34.9135	0.70387	y=0.5BHT+140
		3 - 20 - 1	31.6584	0.73203	y=0.51BHT+140
		3 - 25 - 1	35.1904	0.70947	y=0.52BHT+140
		3 - 30 - 1	30.7811	0.76152	y=0.55BHT+130
11	logCO ₂ /H ₂ S, logCH ₄ /H ₂ S, logH ₂ /H ₂ S	3 - 01 - 1	33.9123	0.64602	y=0.4BHT+170
		3 - 05 - 1	32.232	0.67594	y=0.43BHT+160
		3 - 10 - 1	35.0427	0.71239	y=0.54BHT+130
		3 - 15 - 1	32.3243	0.74415	y=0.55BHT+130
		3 - 20 - 1	34.2252	0.71572	y=0.53BHT+130
		3 - 25 - 1	32.1267	0.77217	y=0.66BhT+110
		3 - 30 - 1	32.3054	0.72469	y=0.5BHT+140
12	logCO ₂ /CH ₄ logH ₂ S/CH ₄ logH ₂ /CH ₄	3 - 01 - 1	33.9193	0.64602	y=0.4BHT+170
		3 - 05 - 1	31.9228	0.67594	y=0.43BHT+160
		3 - 10 - 1	43.3453	0.71239	y=0.54BHT+130
		3 - 15 - 1	34.2515	0.74415	y=0.55BHT+130
		3 - 20 - 1	33.4060	0.71572	y=0.53BHT+130
		3 - 25 - 1	37.2851	0.77217	y=0.66BHT+110
		3 - 30 - 1	31.3383	0.72469	y=0.5BHT+140
13	CO ₂ CH ₄ H ₂	3 - 01 - 1	40.4672	0.51773	y=0.28BHT+210
		3 - 05 - 1	37.2083	0.58897	y=0.35BHT+190
		3 - 10 - 1	32.5157	0.72164	y=0.50BHT+150
		3 - 15 - 1	36.6837	0.64364	y=0.43BHT+160
		3 - 20 - 1	34.6468	0.66248	y=0.43BHT+160
		3 - 25 - 1	36.2109	0.65205	y=0.43BHT+170

continua...

n	Variables de entrada	Arquitectura número de neuronas en: capa entrada- capa oculta- capa salida	RMSE	r	Ecuación de ajuste
14	logCO ₂	3 - 01 - 1	47.1927	0.13064	y=0.018BHT+280
	logCH ₄	3 - 05 - 1	43.8801	0.51557	y=0.29BHT+200
	logH ₂	3 - 10 - 1	40.7754	0.58785	y=0.36BHT+190
		3 - 15 - 1	35.2445	0.65368	y=0.43BHT+170
		3 - 20 - 1	35.1370	0.68573	y=0.45BHT+160
		3 - 25 - 1	37.5875	0.71513	y=0.55BHT+130
	3 - 30 - 1	41.5331	0.59369	y=0.35BHT+190	
15	H ₂ S/CO ₂	3 - 01 - 1	47.4233	8.89x10 ⁻²⁷	y=4x10 ⁻¹⁶ BHT+190
	CH ₄ /CO ₂	3 - 05 - 1	34.7742	0.63753	y=0.40BHT+180
	H ₂ /CO ₂	3 - 10 - 1	33.1338	0.68385	y=0.45BHT+160
		3 - 15 - 1	32.7545	0.66944	y=0.44BHT+160
		3 - 20 - 1	32.7490	0.66130	y=0.44BHT+160
		3 - 25 - 1	32.3242	0.67148	y=0.44BHT+160
	3 - 30 - 1	36.2861	0.53050	y=0.39BHT+180	
<i>Sistemas multicomponente (# Arquitecturas: 23)</i>					
16	CO ₂	4 - 01 - 1	38.5786	0.57725	y=0.34BHT+190
	H ₂ S	4 - 05 - 1	34.9060	0.65876	y=0.43BHT+170
		4 - 10 - 1	34.5661	0.66809	y=0.43BHT+160
	CH ₄	4 - 15 - 1	31.0625	0.70984	y=0.51BHT+140
		4 - 20 - 1	31.6152	0.73393	y=0.52BHT+140
	H ₂	4 - 25 - 1	34.3958	0.67493	y=0.46BHT+160
		4 - 30 - 1	31.8651	0.72615	y=0.49BHT+150
17	logCO ₂	4 - 01 - 1	35.413	0.59913	y=0.36BHT+190
	logH ₂ S	4 - 05 - 1	34.1623	0.65359	y=0.39BHT+180
	logCH ₄	4 - 10 - 1	34.4380	0.70751	y=0.52BHT+140
	logH ₂	4 - 15 - 1	33.5310	0.76403	y=0.62BHT+110
		4 - 20 - 1	36.5156	0.63233	y=0.43BHT+170
		4 - 25 - 1	31.9453	0.73643	y=0.54BHT+130
	4 - 30 - 1	36.2298	0.69740	y=0.56BHT+120	
18	logCO ₂	4 - 01 - 1	35.0592	0.65837	y=0.4BHT+170
	logH ₂ S	4 - 05 - 1	30.0589	0.73484	y=0.52BHT+140
	logCH ₄	4 - 10 - 1	31.8503	0.76052	y=0.58BHT+120
	logH ₂	4 - 15 - 1	30.7603	0.78994	y=0.66BHT+98
		4 - 20 - 1	36.6820	0.54505	y=0.4BHT+180
1000 iteraciones					
19	logCO ₂	4 - 01 - 1			
	logH ₂ S	4 - 05 - 1		0.78041	y=0.63782BHT+6.0
	logCH ₄	4 - 10 - 1	29.1237	0.79040	y=0.67BHT+5.5
	logH ₂	4 - 15 - 1		0.73347	y=0.58BHT+7.2
con salida \sqrt{BHT}					
1000 iteraciones					

Análisis de sensibilidad. Tal y como se mencionó anteriormente en la sección 6.2.3, la influencia de las variables de entrada en el entrenamiento de la RNA fue evaluada mediante un análisis de sensibilidad propuesto por Garson, 1991 a través de la Ec. 59.

La Tabla 16 resume los resultados de la contribución relativa de las variables de entrada sobre la salida de la RNA. Los resultados revelan que el CO₂ es la variable de entrada más importante en ambos modelos de RNA (32% y 48%), mientras que la variable con la menor contribución relativa es el CH₄ para el primer modelo y el H₂ para el segundo. Los resultados encontrados a partir de este análisis de sensibilidad identificaron al CO₂ como el gas con mayor influencia en la estimación de la temperatura de reservorio, siendo este gas el componente principal de la fase gaseosa del fluido geotérmico.

Tabla 14. Coeficientes de pesos y bias obtenidos mediante el modelo RNA₁

No. de neuronas	Pesos				Capa de salida (j=1) LW	Sesgo	
	Capa oculta (s=15; K=4) IW					b ₁	b ₂
	CO ₂ (k=1)	H ₂ S (k=2)	CH ₄ (k=3)	H ₂ (k=4)			
1	-1.3592	2.3262	0.3294	0.1526		61.7176	
2	7.9511	13.4346	10.1931	-0.1779	-53.4843	-7.9578	
3	56.1103	0.0834	-2.1178	-30.7479	14.8400	14.6882	
4	-1.5856	-46.8598	-2.2710	0.9640	-42.5133	-44.2120	
5	24.4204	18.6823	1.6183	-0.1438	-20.3289	23.9037	
6	-11.0534	-2.3145	-6.8363	2.1880	-28.9757	-19.9573	
7	1.1609	-1.5210	1.0567	29.8231	9.5935	-11.0320	
8	-27.4353	-7.4129	-3.2256	31.5709	-29.2081	7.4050	
9	26.9184	34.5255	3.5138	5.8403	-13.2317	-31.8202	
10	27.4374	2.0117	0.5523	-3.2029	19.6353	-26.5680	
11	-13.4734	-27.6139	-5.4066	9.6847	26.7410	-19.5814	
12	-5.6762	-4.9314	12.8601	2.5658	-46.2446	-27.5088	
13	-1.4421	8.0753	19.2418	-22.2685	-10.0139	-1.5910	
14	8.2136	10.5057	-11.0473	26.1104	-41.3006	-20.1909	
15	-4.9329	-3.2123	11.1459	-5.5234	14.6110	-6.8113	

6.3.4 Etapa 4: Análisis comparativo entre las eficiencias de predicción de los nuevos geotermómetros RNA y 18 geotermómetros reportados en la literatura mundial.

Los modelos RNA obtenidos (Ec. 60) fueron aplicados a datos geoquímicos externos (diferentes a los considerados en el entrenamiento) usando para ello una nueva base de datos, externa, denominada BDGGeoM_{ext}. Al igual que las otras 2 bases de datos, en la nueva BDGGeoM_{ext} se disponen datos de temperatura medida y composición química de la fase gaseosa. De tal forma que la disponibilidad de los datos de composición y temperatura medida permiten la aplicación de las nuevas ecuaciones geotermométricas de gases y la evaluación de su eficiencia de predicción en función de la exactitud (al compararse las predicciones de las RNA versus las temperaturas medidas).

Tabla 15. Coeficientes de pesos y bias obtenidos mediante el modelo RNA₂

No. de neuronas	Pesos					Capa de salida (j=1) LW	Sesgo	
	Capa oculta (s=10; K=4) IW						b ₁	b ₂
	CO ₂ (k=1)	H ₂ S (k=2)	CH ₄ (k=3)	H ₂ (k=4)				
1	-7.9790	-6.3772	-11.6240	2.6377	-3.1823	-12.3439	13.9970	
2	-7.6343	-14.0475	1.0076	-0.0298	1.1886	5.8733		
3	22.5458	20.6008	86.8244	-7.0108	-0.3185	-40.7826		
4	101.5989	-14.1976	-52.3691	45.1480	0.1915	-48.6878		
5	-20.3001	-1.2805	-0.1665	-0.3282	-3.0557	14.8151		
6	-34.4874	4.6363	-1.4498	-3.7342	1.2172	19.5219		
7	-13.7378	-2.5792	-12.2722	-5.0896	3.4948	-1.7547		
8	-26.1192	-19.3488	14.8827	-17.0184	-3.6853	-10.2430		
9	15.8324	-14.7982	5.4467	45.7071	1.1168	-4.3163		
10	35.5572	-1.8678	-0.2167	1.9550	-2.5819	-25.0055		
11	-7.9790	-6.3772	-11.6240	2.6377	-3.1823	-12.3439		
12	-7.6343	-14.0475	1.0076	-0.0298	1.1886	5.8733		
13	22.5458	20.6008	86.8244	-7.0108	-0.3185	-40.7826		
14	101.5989	-14.1976	-52.3691	45.1480	0.1915	-48.6878		
15	-20.3001	-1.2805	-0.1665	-0.3282	-3.0557	14.8151		

Para la serie de datos del campo geotérmico de Berlín, el modelo RNA₁ predijo temperaturas de fondo en el rango de 317°C- 344 °C con un valor promedio de BHT_{RNA1}= 333±7 °C, mientras que el modelo RNA₂ estima temperaturas de fondo en el rango de 294°C-332 °C con un valor promedio de BHT_{RNA2}= 336±8 °C. En el caso de los datos del campo geotérmico de Krafla, el modelo RNA₁ predice temperaturas de fondo en el rango de 279 °C-233 °C con un valor promedio de BHT_{RNA1}=311±15 °C, mientras que el modelo RNA₂ predijo temperaturas de fondo en el rango de 258 °C-336 °C con un valor promedio de BHT_{RNA2}= 319±22 °C.

Tabla 16. Porcentaje de contribución de los gases (entradas) sobre la temperatura estimada por medio de las RNA (salida).

Gas	Contribución (%) RNA ₁	Gas	Contribución (%) RNA ₂
CO ₂	31.61	CO ₂	47.91
H ₂ S	28.44	H ₂ S	17.76
H ₂	22.83	H ₂	14.35
CH ₄	17.12	CH ₄	19.98

De esta forma, los resultados de la prueba de exactitud mostraron una concordancia aceptable entre la temperatura medida (BHT_m) y las temperaturas simuladas por ambos modelos RNA (BHT_{RNA}). Los RMSE obtenidos se mantuvieron en ~ 50 para el modelo RNA_1 y $\sim 56\%$ para el modelo RNA_2 como se puede ver en la Tabla 17. Estos errores se consideran aceptables si consideramos que las actuales ecuaciones disponibles en la literatura proveen errores de hasta $101^\circ C$, como se puede apreciar en la misma tabla.

La evaluación estadística del parámetro U muestra que el modelo RNA_1 presenta una mejor eficiencia de predicción que los geotermómetros: A98bMK, AG85eMK, G91aMM, AG85cMK y B06PM. Mientras que el modelo RNA_2 presenta una mejor eficiencia de predicción que los geotermómetros: AG85gMK, RNA_1 , A98bMK, AG85eMK, G91aMM, AG85cMK y B06PM.

A partir de estos resultados, las ventajas de los modelos RNA desarrollados incluyen los siguientes: (1) usar herramientas de inteligencia artificial para resolver problemas multivariados complejos, en este caso la correlación de la composición química de los gases geotérmicos con la temperatura de fondo del reservorio, sin tener condicionamiento sobre la naturaleza de los mecanismos geoquímicos existentes; (2) solución al problema multivariado complejo de la temperatura y las reacciones de sistemas gaseosos sin considerar la no linealidad e iteraciones entre las variables de entrada y salida; y (3) la obtención de predicciones aceptables y rápidas de BHT usando la composición química de los gases.

Tabla 17. Temperaturas estimadas con las dos nuevas ecuaciones geotermométricas y estimación de errores

No.	Geotermómetro	MAPE	RMSE	Theil's U	
				RNA ₁	RNA ₂
1	AG85fMK	5.6684	29.2296	1.9033	1.7152
2	AG85dMK	7.3345	29.5388	1.8833	1.6972
3	AG85bMK	5.7843	31.6273	1.759	1.5851
4	AG85hMK	9.3643	31.7759	1.7507	1.5777
5	A87aMK	12.2181	38.1733	1.4573	1.3133
6	AG85aMK	14.0300	39.4493	1.4102	1.2708
7	A98aMK	15.2179	43.2181	1.2872	1.16
8	DP80PM	10.2348	44.0903	1.2618	1.1371
9	A87bMK	15.8918	45.1868	1.2311	1.1095
10	A98cMK	18.5837	47.9387	1.1605	1.0458
11	ANN2	13.1730	50.1353	1.1096	1
12	AG85gMK	22.5975	54.9704	1.012	0.912
13	ANN	14.8913	55.6332	1	0.9011
14	A98bMK	25.2565	61.1199	0.9102	0.8202
15	AG85eMK	31.8743	70.9758	0.7838	0.7063
16	G91aMM	16.7854	76.4771	0.7274	0.6555
17	AG85cMK	49.8247	96.6165	0.5758	0.5189
18	B06PM	25.7317	101.3539	0.5489	0.4946

6.4 Conclusiones

Se creó una base de datos con información de la composición química de la fase gaseosa de fluidos geotérmicos producidos por pozos productores de diversos campos geotérmicos del mundo. A partir de la experiencia adquirida en este tipo de estudios, se encontró que existe una gran variedad de unidades de concentración de los gases en la literatura disponible. Esto demuestra que no hay uniformidad en los reportes de las mediciones, por lo cual sería conveniente que se logaran estandarizar las unidades.

Se realizó, por primera vez, una evaluación geoquimiométrica integral de los geotermómetros de gases existentes en la literatura, principalmente las ecuaciones geotermométricas simples que correlacionan la concentración de especies gaseosas con la temperatura. La evaluación no consideró los geotermómetros complejos que además de correlacionar la temperatura con la concentración de especies gaseosas, lo hacen con otras variables geoquímicas que aparecen como variables independientes (p. ej. Fracción vapor, coeficientes de partición, presión).

Asimismo, existe gran diferencia entre diversas mediciones de las concentraciones de los gases en un mismo pozo, probablemente debida a errores en las mediciones, fenómenos naturales como eventos sísmicos, cambios en la producción, entre otros.

Se desarrolló una metodología geoquimiométrica para la generación de dos nuevas ecuaciones geotermométricas (RNA_1 y RNA_2) basadas en los logaritmos (base diez) de las concentraciones de los gases CO_2 , H_2S , CH_4 y H_2 y tomando como referencia a la temperatura medida (BHT). El número de neuronas en la capa oculta y los datos geoquímicos usados para el entrenamiento de la red neuronal fueron ajustados para desarrollar los modelos de predicción RNA con el valor más bajo de RMSE y el valor más alto de r . Estas ecuaciones si bien no muestran la mejor predicción sí predicen una temperatura más cercana a la temperatura medida que varios geotermómetros de gases existentes.

Se desarrollaron dos programas en FORTRAN® que calculan las temperaturas predichas por las ecuaciones geotermométricas propuestas con exactitud aceptable. La BHT calculada por ambos modelos fue estadísticamente comparada con mediciones de campo. A partir de este análisis, se observó que las predicciones obtenidas con el modelo RNA_2 generaron los resultados con el menor error en comparación con aquellos resultados inferidos por el modelo RNA_1 .

Se probó que las redes neuronales artificiales proveen una herramienta útil para la solución de problemas multivariados y no lineales que puede ser aplicada en las ciencias de la Tierra. Pueden ser usadas como una herramienta confiable para el estudio de la predicción de temperaturas de fondo a partir de la composición química de los gases geotérmicos. Sin embargo, la capacidad de predicción de las redes neuronales podría ser mejorada al usar un mayor número de: mediciones de campo, combinaciones de variables de entrada, número de iteraciones y número de neuronas en la capa oculta.

De igual manera, en esta investigación se mostró la gran variabilidad que existe entre las temperaturas predichas por los geotermómetros de gases existentes y las temperaturas medidas en los pozos.

RECOMENDACIONES:

- Se recomienda un análisis de componentes principales (PCA) a partir de una matriz de correlaciones y un análisis geoquimiométrico para identificar las mejores relaciones existentes entre los gases y así lograr modelos óptimos de RNA que logren disminuir las diferencias entre BHT_m y BHT_{RNA} .
- Aplicar una metodología similar para enfrentar el reto científico de evaluar las otras herramientas geotermométricas de gases con más variables independientes, como lo son el coeficiente de partición, la fracción vapor, la presión, entre otros.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Ahmed, M., Akram, W., Ahmed, N., Tasneem, M.A., Rafiq, M., and Latif, Z., 2002, Assessment of reservoir temperatures of thermal springs of the northern areas of Pakistan by chemical and isotope geothermometry: *Geothermics*, v. 31, p. 613–631.

Allen, D.M., Grasby, S.E., and Voormeij, D.A., 2006, Determining the circulation depth of thermal springs in the southern Rocky Mountain Trench, south-eastern British Columbia, Canada using geothermometry and borehole temperature logs: *Hydrogeology Journal*, v. 14, p. 159–172.

Angel, S. M., Garvis, D. G., Sharma, S. K., & Seki, A. (1989). Field applications of fiber-optic sensors. Part I: Temperature measurements in a geothermal well. *Applied Spectroscopy*, 43(3), 430-435.

Aragón, A., Moya, S., García, A. (2008) Inflow performance relationships in geothermal and petroleum reservoir engineering: A review of the state of the art. *Geothermics*, vol. 37, pp. 635-650.

Arnórsson, S., Fridriksson, T., & Gunnarsson, I. (1998). Gas chemistry of the Krafla geothermal field, Iceland. In *Intl Symp Water-Rock Interaction, Auckland, New Zealand* (pp. 613-616).

Arnórsson, S., & Gunnlaugsson, E. (1985). New gas geothermometers for geothermal exploration—calibration and application. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 49(6), 1307-1325.

Arnórsson, S., Gunnlaugsson, E., Svavarsson, H., 1983. The chemistry of geothermal waters in Iceland. III. Chemical geothermometry in geothermal investigations. *Geochim. Cosmochim. Acta* 47, 567–577.

Bertani, R. (2016). Geothermal power generation in the world 2010–2014 update report. *Geothermics*, 60, 31-43.

Bertrami, R., Cioni, R., Corazza, E., D’Amore, F., & Marini, L. (1985). Carbon monoxide in geothermal gases. Reservoir temperature calculations at Larderello (Italy). *Geotherm. Res. Counc. Trans*, 9, 299-303.

Bird, D. K., Schiffman, P., Elders, W. A., Williams, A. E., & McDowell, S. D. (1984). Calc-silicate mineralization in active geothermal systems. *Economic geology*, 79(4), 671-695.

Bird, D. K., & Spieler, A. R. (2004). Epidote in geothermal systems. *Reviews in Mineralogy and Geochemistry*, 56(1), 235-300.

Blamey, N. J. (2006, January). H₂S concentrations in geothermal and hydrothermal fluids—a new gas geothermometer. In *PROCEEDINGS, Thirty-First Workshop on Geothermal Reservoir Engineering. Stanford University, Stanford, California* (pp. 403-407).

Brown, G. (2009). Temperaturas de fondo de pozo obtenidas con fibra óptica. *Oilfield Review*, 2009(20), 4.

Browne, P. (1984). *Lectures on geothermal geology and petrology* (No. 2). Reykjavik: UNU Geothermal Training Programme, National Energy Authority.

Bruhn, D., Manzella, A., Vuataz, F., Faulds, J., Moeck, I., & Erbas, K. (2010). Exploration methods. *Geothermal Energy Systems: Exploration, Development, and Utilization*, 37-112. Huenges, E., & Ledru, P. (Eds.). (2011). *Geothermal energy systems: exploration, development, and utilization*. John Wiley & Sons.

Can, I., 2002. A new improved Na/K geothermometers by artificial neural networks. *Geothermics* 31, 751–760.

Castillo, D., & De la Cruz, V. (1992). Reconocimiento estructural y volcanológico en la zona termal del Domo San Pedro Lagunillas, Nayarit, México. *Geofísica Internacional*, 31(4).

Cataldi, R., Hodgson, S. F., & Lund, J. W. (1999). *Stories from a heated earth: our geothermal heritage* (Vol. 19). Geothermal Resources Council.

Danielsen, P. E. (2008). High Temperature Geothermal Logging for Temperature and Pressure. In *Conference, ARGeo C-2, Entebbe, Uganda*.

Díaz-González, L., Santoyo, E., and Reyes-Reyes, J., 2008, Tres nuevos geotermómetros mejorados de Na/K usando herramientas computacionales y geoquimiométricas: aplicación

a la predicción de temperaturas de sistemas geotérmicos: *Revista Mexicana de Ciencias Geológicas*, v. 25, p. 465–482.

Dotsika, E., Leontiadis, I., Poutoukis, D., Cioni, R., and Raco, B., 2006, Fluid geochemistry of the Chios geothermal area, Chios Island, Greece: *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, v. 154, p. 237–250.

D'Amore, F., Arnórsson, S., & Geothermometry, S. A. (2000). Isotopic and Chemical Techniques in Geothermal Exploration. *Development and Use: Sampling Methods, Data Handling, Interpretation, International Atomic Energy Agency, Vienna, Austria*, 152-199.

D'Amore, F., & Panichi, C. (1980). Evaluation of deep temperatures of hydrothermal systems by a new gas geothermometer. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 44(3), 549-556.

Ellis, A. J. (1957) Chemical equilibrium in magmatic gas. *Am. J. Sci.* 255,416-431.

D'Amore, F., Celati, R. and Calore, C. (1982) Fluid geochemistry applications in reservoir engineering (vapor-dominated systems). *Proc. 8th Workshop Geothermal Reservoir Engineering*, pp. 296-307, Stanford, CA.

D'Amore, F., & Truesdell, A. H. (1985). *Calculation of geothermal reservoir temperatures and steam fractions from gas compositions* (No. DOE/RA/50294-T2). Geological Survey, Menlo Park, CA (USA); Istituto Internazionale per le Ricerche Geotermiche, Pisa (Italy).

Espinosa-Paredes, G., Garcia, A., Santoyo, E., & Hernandez, I. (2001). TEMLOPI/V. 2: a computer program for estimation of fully transient temperatures in geothermal wells during circulation and shut-in. *Computers & geosciences*, 27(3), 327-344.

Flores-Armenta, M. (2013) Evolución de la geotermia en el servicio público Mexicano. *Memorias del Foro Internacional de Energía Geotérmica*, organizado por la Secretaría de Energía, México, D.F., Octubre 28 y 29, 2013, 58-63.

Fouillac, C., Michard, G., 1981. Sodium/lithium ratio in water applied to geothermometry of geothermal reservoirs. *Geothermics* 10, 55–70.

Fournier, R.O., 1977. Chemical geothermometers and mixing models for geothermal systems. *Geothermics* 5, 41–50.

Fournier, R.O., 1979. A revised equation for the Na/K geothermometer. *Geotherm. Res. Coun. Trans.* 3, 221–224.

Fournier, R.O., 1991. Water geothermometers applied to geothermal energy. In: D'Amore, F. (Ed.), *Applications of Geochemistry in Geothermal Reservoir Development*. UNITAR/UNDP Centre on Small Energy Resources, Rome, Italy, pp. 37–69.

Fournier, R.O., Potter II, R.W., 1982. A revised and expanded silica (quartz) geothermometer. *Geotherm. Res. Coun. Bull.* 11, 3–12.

Fournier, R. O., & Rowe, J. J. (1966). Estimation of underground temperatures from the silica content of water from hot springs and wet-steam wells. *American Journal of Science*, 264(9), 685-697.

Fournier, R.O., Truesdell, A.H., 1973. An empirical Na–K–Ca geothermometer for natural waters. *Geochim. Cosmochim. Acta* 37, 1255–1275.

García, A., Santoyo, E., Espinosa, G., Hernández, I., & Gutierrez, H. (1998). Estimation of temperatures in geothermal wells during circulation and shut-in in the presence of lost circulation. *Transport in Porous Media*, 33(1-2), 103-127.

García-López, C. G., Pandarinath, K., & Santoyo, E. (2014). Solute and gas geothermometry of geothermal wells: a geochemometrics study for evaluating the effectiveness of geothermometers to predict deep reservoir temperatures. *International Geology Review*, 56(16), 2015-2049.

Garg, S. K., & Combs, J. (2011). A Reexamination of USGS volumetric “Heat in Place” method. In *Proceedings*.

Gehring, M., Loksha, V. (2012) *Geothermal handbook: planning and financing power generation*. Technical Report 002/12, The World Bank Group, Energy Sector Management Assistance Program (ESMAP), 164 p.

Giggenbach, W.F., 1988. Geothermal solute equilibria. Derivation of Na–K–Mg–Ca geothermometers. *Geochim. Cosmochim. Acta* 52, 2749–2765.

Giggenbach, W. F. (1991). Chemical techniques in geothermal exploration. *Application of geochemistry in geothermal reservoir development*, 11, 9-144.

Goldstein, B. Hiriart, G., Tester, J. Gutiérrez-Negrin, L., Bertani, R., Bromley, C., Huenges, E., Ragnarsson, A., Mongillo, M., Lund, J.W., Rybach, L., Zui, V., Muraoka, H. (2013)

Geothermal energy, nature, use, and expectations. M. Kaltschmitt et al. (Eds.), *Renewable Energy Systems*, DOI 10.1007/978-1-4614-5820-3, Springer Science+Business Media New York, 772-782.

González-Partida, E., Carrillo-Chávez, A., Levresse, G., Tello-Hinojosa, E., Venegas-Salgado, S., Ramírez-ilva, G., Pal-Verma, M., Tritlla, J., and Camprubí, A., 2005, Hydrogeochemical and isotopic fluid evolution of the Los Azufres geothermal field, Central Mexico: *Applied Geochemistry*, v. 20, p. 23–39.

González-Partida, E., Levresse, G., and Santoyo, E., 2003, Paleo-fluid and actual-fluid in Los Azufres geothermal field, central Mexico: *Journal of Geochemical Exploration*, v. 78–79C, p. 67–70.

González-Partida, E., Tello, E., Verma, M.P. (2000) Análisis geoquímico e isotópico de aguas geotérmicas y manantiales para definir el estado de equilibrio agua-roca del reservorio de Los Azufres, Michoacán, México. *Ingeniería Hidráulica en México*, vol. 15(3), pp. 89-99. Verma et al., 2006

Gutiérrez-Negrín, L. (2015). Mexico: Update of the Country Update, and IRENA's Remap. *IGA News*, 100, 17-19.

Güileç, N. (1994). Geochemistry of thermal waters and its relation to the volcanism in the Kizilcahamam (Ankara) area, Turkey. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, 59, 295-312.

Gutiérrez-Negrín, L.C.A., Maya-González R., Quijano, J.L. (2010) Current Status of Geothermics in Mexico. *Proc. World Geothermal Congress 2010, Bali, Indonesia*, 11 p. Flores-Armenta, 2013.

Harvey, C., & Browne, P. (2000, May). Mixed-layer clays in geothermal systems and their effectiveness as mineral geothermometers. In *Proceedings World Geothermal Congress* (pp. 1201-1204).

Izquierdo, G., Arellano, V. M., & Aragón, A. (2008). Características mineralógicas y microtermométricas del yacimiento geotérmico de Los Humeros, Pue., México. *GEOTERMIA*, 2.

Kailasa Pandarinath (2011) Solute geothermometry of springs and wells of the Los Azufres and Las Tres Vírgenes geothermal fields, Mexico, *International Geology Review*, 53:9, 1032-1058, DOI: 10.1080/00206810903442014

Karingithi, C. W., Anorsson, S., & Gronvold, K. (2009). Chemical geothermometers for geothermal exploration. *Short Course IV on Exploration for Geothermal Resources: United Nations University, Geothermal Training Program, Lake Vaivasha, Kenya*, 1-22.

Kharaka, Y.K., Mariner, R.H., 1989. Chemical geothermometers and their application to formation waters from sedimentary basins. In: Naeser, N.D., McCulloh, T.H. (Eds.), *Thermal History of Sedimentary Basins*. Springer-Verlag, New York, NY, USA, pp. 99–117.

Kruger, P., Semprini, L., Nieva, D., Verma, S., Barragán, R., Molinar, R., Aragón, A., Ortiz, J., Miranda, C., Garfias, A., and Gallardo, M., 1985, Analysis of reservoir conditions during production startup at the Los Azufres geothermal field: *Geothermal Resources Council Transactions*, v. 9, p. 527–532.

Lambrakis, N., & Kallergis, G. (2005). Contribution to the study of Greek thermal springs: hydrogeological and hydrochemical characteristics and origin of thermal waters. *Hydrogeology Journal*, 13(3), 506-521.

Lund, J. W., & Boyd, T. L. (2016). Direct utilization of geothermal energy 2015 worldwide review. *Geothermics*, 60, 66-93.

Nehring, N. L., & D'Amore, F. (1984). Gas chemistry and thermometry of the Cerro Prieto, Mexico, geothermal field. *Geothermics*, 13(1), 75-89.

Nicholson, K. (2012). *Geothermal fluids: chemistry and exploration techniques*. Springer Science & Business Media.

Nieva, D., Nieva, R., 1987. Developments in geothermal energy in Mexico. Part twelve: a cationic geothermometer for prospecting of geothermal resources. *Heat Recov. Syst.* 7, 243–258.

Nieva, D., Verma, M.P., Santoyo, E., Portugal, E., and Campos, A., 1997, Geochemical exploration of the Chipilapa geothermal field, El Salvador: *Geothermics*, v. 26, no. 5/6, p. 589–612.

Ordaz Méndez, C.A., Flores Armenta, M., y Ramírez Silva, G., 2011. Potencial geotérmico de la República Mexicana. *Geotermia* 24-1: 50-58. Rybach, L. (2014) Geothermal power growth 1995–2013 — A comparison with other renewables. *Energies* 7: 4802-4812.

Palabiyik, Y., and Serpen, U., 2008, Geochemical assessment of Simav geothermal field, Turkey: *Revista Mexicana de Ciencias Geológicas*, v. 25, no. 3, p. 408–425.

Ping, Z., & Ármannsson, H. (1996). Gas geothermometry in selected Icelandic geothermal fields with comparative examples from Kenya. *Geothermics*, 25(3), 307-347.

Portugal, E., Birkle, P., Barragán, R., Arellano, G., Tello, E., and Tello, M., 2000, Hydrochemical isotopic and hydrogeological conceptual model of the Las Tres Vírgenes geothermal field, California Sur, México: *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, v. 101, p. 223–244.

Powell, T., & Cumming, W. (2010, February). Spreadsheets for geothermal water and gas geochemistry. In *PROCEEDINGS, Thirty-Fifth Workshop on Geothermal Reservoir Engineering*, Stanford University, Stanford, California (p. 10).

Quinto, A., Santoyo, E., Torres, V., González, E., and Castillo, D., 1995, Estudio geoquímico ambiental de los efluentes naturales producidos en la zona geotérmica de Acapulco, Puebla: *Ingeniería Hidráulica en México*, v. X, no. 3, p. 21–27.

Reed, M., & Spycher, N. (1984). Calculation of pH and mineral equilibria in hydrothermal waters with application to geothermometry and studies of boiling and dilution. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 48(7), 1479-1492.

Santoyo, E., & Barragán-Reyes, R. M. (2010). Energía geotérmica. *Revista de la Academia Mexicana de Ciencias*, 61, 40-51.

Santoyo, E., Guevara, M., Pérez-Zárate, D. (n.d.) Estrategía de transición para promover el uso de tecnologías y combustibles más limpios en el tema de energía geotérmica. Obtenida el 15 de mayo de 2016 de <http://www.conuee.gob.mx/pdfs/GEO.pdf>

Santoyo, E., Verma, S.P., 1993. Evaluación de errores en el uso de los geotermómetros de SiO₂ y Na/K para la determinación de temperaturas en sistemas geotérmicos. *Geofís. Int.* 32, 287–298.

Santoyo, E., Verma, S. P., Nieva, D., & Portugal, E. (1991). Variability in the gas phase composition of fluids discharged from Los Azufres geothermal field, Mexico. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, 47(1), 161-181.

Siebe, C., Goff, F., Armienta, M.A., Counce, D., Poreda, R., and Chipera, S., 2007, Geology and hydrogeochemistry of the Jungapeo CO₂-rich thermal springs, State of Michoacán, Mexico: *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, v. 163, p. 1–33.

Simmons, S. F., & Browne, P. R. L. (1998). Illite, illite-smectite and smectite occurrences in the Broadlands-Ohaaki geothermal system and their implications for clay mineral geothermometry. *Water rock interaction*, 9, 691-694.

Simmons, S. F., Stewart, M. K., Robinson, B. W., & Glover, R. B. (1994). The chemical and isotopic compositions of thermal waters at Waimangu, New Zealand. *Geothermics*, 23(5), 539-553.

Spycher, N., Peiffer, L., Sonnenthal, E. L., Saldi, G., Reed, M. H., & Kennedy, B. M. (2014). Integrated multicomponent solute geothermometry. *Geothermics*, 51, 113-123.

Steingrímsson, B. (2013). Geothermal well logging: Temperature and pressure logs. *Short Course V on Conceptual Modeling of Geothermal Systems*.

Suárez, M.C., Tello, M., Samaniego, F. (2000) Geochemical evolution of the Los Azufres, Mexico, geothermal reservoir, part II: non-condensable gases. En: Proceedings of the World Geothermal Congress, Beppu-Morioka, Japón, pp. 2527-2532.

Supranto, S., Budianto, T., Djoko, W., & Idrus, A. (1996). Proposed empirical gas geothermometer using multidimensional approach. In *Proceedings, Twenty First Workshop on Geothermal Reservoir Engineering: Stanford, California, Stanford University* (pp. 195-199).

Tonani, F. (1973) Equilibria that control the hydrogen content of geothermal gases. Philips Petroleum Co., Unpublished report (reportado en: Carapezza, M., Nuccio, P. M., and Valenza, M. (1980), *Bull. Volcanol.* 44,547-564).

Torres, V., Arellano, V., Barragán, R.M., González, E., Herrera, J.J., Santoyo, E., Venegas, S. (1993) *Geotermia en México*, México. Programa Universitario de Energía, Coordinación de la Investigación Científica, UNAM (ISBN-968-36-3444-3), 161 p.

Truesdell, A.H., 1976. GEOTHERM, a geothermometric computer program for hot spring systems. In: Proceedings of Second U.N. Symposium on the Development and Use of Geothermal Resources 1975, San Francisco, CA, USA, pp. 831–836. Tonani, 1980

Verma, M.P., 2000. Revised quartz solubility temperature dependence equation along the water–vapor saturation curve. In: Proceedings of the 2000 World Geothermal Congress. Kyushu, Tohoku, Japan, pp. 1927–1932.

Verma, S.P., 2002, Optimisation of the exploration and evaluation of geothermal resources, in Chandrasekharam, D., and Bundschuh, J., eds., Geothermal energy resources for developing countries: Rotterdam, The Netherlands, Swets & Zeitlinger B. V., A. A. Balkema Publishers, p. 195–224.

Verma, S. P., Pandarinath, K., & Santoyo, E. (2008). SolGeo: A new computer program for solute geothermometers and its application to Mexican geothermal fields. *Geothermics*, 37(6), 597-621.

Verma, S.P., Pandarinath, K., Santoyo, E., González-Partida, E., Torres-Alvarado, I.S., and Tello-Hinojosa, E., 2006c, Fluid chemistry and temperature prior to exploitation at the Las Tres Vírgenes geothermal field, Mexico: *Geothermics*, v. 35, p. 156–180.

Verma, S.P., Santoyo, E., 1997. New improved equations for Na/K, Na/Li and SiO₂ geothermometers by outlier detection and rejection. *J. Volcanol. Geotherm. Res.* 79, 9–23.

Wong-Loya, J. A., Andaverde, J., & Santoyo, E. (2012). A new practical method for the determination of static formation temperatures in geothermal and petroleum wells using a numerical method based on rational polynomial functions. *Journal of Geophysics and Engineering*, 9(6), 711.