



## EVALUACIÓN DE TÉCNICAS DE ENTRENAMIENTO DE REDES NEURONALES PARA ESTUDIOS GEOTERMOMÉTRICOS DE SISTEMAS GEOTÉRMICOS

### EVALUATION OF TRAINING TECHNIQUES OF ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS FOR GEOTHERMOMETRIC STUDIES OF GEOTHERMAL SYSTEMS

L. Díaz-González<sup>1\*</sup>, C.A. Hidalgo-Dávila<sup>2</sup>, E. Santoyo<sup>3</sup> y J. Hermosillo-Valadez<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Computación, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Chamilpa, Cuernavaca, Mor., 62209, México.

<sup>2</sup>Programa de Licenciatura en Ciencias (Área Computación), Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Chamilpa, Cuernavaca, Mor., 62209, México.

<sup>3</sup>Departamento de Sistemas Energéticos, Centro de Investigación en Energía, Universidad Nacional Autónoma de México, Priv. Xochicalco s/n, Col. Centro, Apdo. 34, Temixco 62580, México.

Recibido 2 de Diciembre de 2011; Aceptado 12 de Diciembre de 2012

#### Resumen

En este trabajo se reportan los resultados de un análisis multivariado usando redes neuronales artificiales para determinar la contribución relativa de la composición catiónica de fluidos (Na, K, Mg, Ca y Li) en la estimación de la temperatura de fondo de pozos geotérmicos. En este estudio se utilizó una base de datos de composición de 219 muestras de fluidos geotérmicos y mediciones de temperatura de fondo medidas en pozos productores de diversas partes del mundo. Se evaluaron las arquitecturas neuronales usando diferentes técnicas numéricas de entrenamiento, funciones de activación logísticas y lineales, diferentes combinaciones de las entradas, 20 neuronas como máximo en la capa oculta y la temperatura como salida. Los resultados obtenidos de este estudio mostraron que la relación  $\log(\text{Na}/\text{K})$  presentó la más alta contribución relativa (69% al 75%), mientras que las variables  $\log(\text{Mg}/\text{Na}^2)$  y  $\log(\text{Ca}/\text{Na}^2)$  mostraron una menor contribución (3-13% y 12-22%, respectivamente). Las variables  $\log(\text{Na}/\text{Li})$ ,  $\log(\text{Li}/\sqrt{\text{Mg}})$  y Li obtuvieron un 3%. Detalles de la metodología y los resultados de validación son reportados en este trabajo.

**Palabras clave:** geotermómetros, energía geotérmica, Levenberg-Marquardt, inteligencia artificial, equilibrio químico y termodinámico.

#### Abstract

A multivariate analysis using artificial neural networks for determining the relative contribution of the cationic composition of fluids (Na, K, Mg, Ca and Li) for the estimation of downhole temperatures of geothermal wells is here reported. Neural architectures were evaluated using different numerical techniques of training, activation function logistic and linear, several combinations of inputs, at most 20 neurons in the hidden layer and the measured temperatures as the targets. The obtained results in this paper shows that the relation  $\log(\text{Na}/\text{k})$  obtained the highest relative contribution (69% al 75%), whereas other variables such as,  $\log(\text{Mg}/\text{Na}^2)$  and  $\log(\text{Ca}/\text{Na}^2)$ , showed a less contribution (3-13% and 12-22%, respectively).  $\log(\text{Na}/\text{Li})$ ,  $\log(\text{Li}/\sqrt{\text{Mg}})$  and Li obtained 3% variables had a relative contribution = 3%. The details of the methodology and the validation results are reported in this paper.

**Keywords:** geothermometers, geothermal energy, Levenberg-Marquardt, artificial intelligence, chemical and thermodynamic equilibrium.

\*Autora para la correspondencia. E-mail: ldg@uaem.mx  
Tel. (01-777) 3297000 ext. 3682

## 1 Introducción

El consumo creciente de energía eléctrica a nivel mundial ha impulsado el desarrollo de fuentes alternas de energía, entre las cuales destaca la energía geotérmica. La principal limitante de la geotermia, es el alto costo que representan los estudios de exploración y la infraestructura tecnológica, para garantizar una explotación segura, óptima y rentable de sus recursos (Santoyo y Barragán, 2010).

La estimación de temperaturas de fondo de pozos son invaluable en la perforación, construcción y explotación de sistemas geoenergéticos (p.ej., Martínez-Méndez y col., 2005; Álvarez del Castillo y col., 2010). Estas temperaturas también permiten conocer la mejor aproximación posible de la temperatura estática de formación o también conocidas como temperaturas no-perturbadas o estabilizadas, las cuales son sujetas a interferencias durante la perforación de pozos geotérmicos (p.ej., Olea-González y col., 2007; Espinosa-Paredes y Espinosa-Martínez, 2009) o pozos marinos (p.ej., Espinosa-Paredes y col., 2009).

Las herramientas más económicas y usadas para estimar las temperaturas de fondo son los geotermómetros químicos, los cuales se pueden clasificar en tres tipos principales: la geotermometría de solutos, gases e isótopos. En este trabajo se aborda el estudio de la geotermometría de solutos. Los geotermómetros de solutos estiman la temperatura de fondo a partir de la composición química de los fluidos geotérmicos que emergen en manantiales hidrotermales, sin la necesidad de perforar un pozo. En general los geotermómetros son ecuaciones empíricas propuestas a partir de mediciones *in situ* de fluidos geotérmicos y temperaturas de fondo. Este tipo de temperaturas son medidas en el fondo del pozo productor, mediante sondas analógicas, digitales o de fibra óptica (Bassam y col., 2010; Espinoza-Ojeda y col., 2011).

Las herramientas geotermométricas tienen fundamentos termodinámicos y geoquímicos basados en los procesos de interacción agua roca que dominan los sistemas geotérmicos. Estos procesos dan lugar a que algunos minerales presentes en la roca, se solubilizan hasta alcanzar un estado de equilibrio químico, dependiendo de las condiciones de temperatura y de presión que prevalecen en el yacimiento (Nieva y Nieva, 1987; D'Amore y Arnórsson, 2000). Actualmente existen reportados en la literatura aproximadamente 39 geotermómetros de solutos (p.ej., Fournier 1979; Fournier y Potter

II, 1982; Nieva y Nieva, 1987; Giggenbach, 1988; Arnórsson, 2000; Bayram, 2001; Can, 2002) basados en los elementos (y relaciones de ellos): Na/K, K-Mg, Li-Mg, Na-Li, Na/K-Ca, Na/K, Mg, Na/K-Ca-Mg y  $SiO_2$ . Dentro de la gama de geotermómetros de Na/K se reportan al menos cinco trabajos (Bayram, 2001; Can, 2002; Díaz-González y col., 2008; Serpen y col., 2009, Santoyo y Díaz-González., 2010) que usaron la técnica computacional basada en Redes Neuronales Artificiales (RNA). Las RNA han demostrado ser efectivas: (i) para encontrar la solución de problemas numéricos complejos desde el punto de vista físico conceptual y matemático; y (ii) para reemplazar trabajos experimentales que suelen ser muy difíciles de llevar a cabo, tanto técnica como económicamente (Díaz-González y Santoyo, 2008; Díaz-González y col., 2008). En estos trabajos previos, los autores han considerado únicamente como variable de entrada a la relación  $\log(Na/K)$  en las diferentes arquitecturas de RNA propuestas.

La estimación de la temperatura en un pozo es una tarea geoquímica de alta relevancia en la evaluación de los proyectos geotermoeléctricos y su viabilidad. Si bien los geotermómetros químicos basados en solutos actualmente proporcionan una lectura confiable, el conocimiento de los factores que afectan la precisión en la estimación de la temperatura de fondo sigue siendo un problema abierto y un reto científico por alcanzar para la industria geotérmica y su comunidad geocientífica. Un conocimiento más profundo de estos factores podría dar indicios sobre nuevas posibilidades de mejorar la precisión de los instrumentos, toda vez que se podrían explorar técnicas más sofisticadas de procesamiento de información, utilizando herramientas y tecnologías de cómputo más poderosas disponibles hoy en día. La hipótesis del presente trabajo es que uno de estos factores radica en la información adicional contenida en otros elementos químicos, cuya contribución a la estimación de la temperatura de fondo no se ha considerado hasta ahora en la literatura.

Ante este planteamiento, el objetivo del presente trabajo es proponer un método de solución al problema de determinar la contribución de algunos elementos catiónicos químicos presentes en los fluidos geotérmicos producidos en manantiales hidrotermales y reportar nuestros hallazgos. En este sentido, nuestra propuesta es exploratoria, por lo que consideramos que nuestros resultados permiten sentar un precedente importante sobre la naturaleza multicomponente de

los fluidos geotérmicos y sus implicaciones en el desarrollo de nuevas herramientas geotermométricas y la estimación de temperaturas de fondo, y con ello en el ámbito de la investigación en este campo.

En el presente trabajo se propone un análisis estadístico multivariado basado en la metodología computacional RNA para determinar la contribución de otros elementos químicos en la estimación final de la temperatura de fondo. Se usó una base de datos geoquímicos mundial con 708 muestras de fluidos y temperaturas de fondo medidas en pozos geotérmicos de diferentes partes del mundo. El presente estudio multivariado se desarrolló usando las siguientes variables tomadas de la composición química: Na, K, Mg, Ca y Li. Las cuales fueron seleccionadas debido a su alta disponibilidad en la base de datos y además por ser los elementos más usados como indicadores de la temperatura en los geotermómetros catiónicos.

En este trabajo se evaluaron más de 60 arquitecturas de RNA con los siguientes elementos de configuración: (i) usando diferentes técnicas de entrenamiento (tales como, Levenberg-Marquardt, Quasi-Newton y gradiente descendente); (ii) usando diferentes combinaciones de las variables de entrada antes mencionadas; (iii) usando funciones de activación del tipo sigmoidal (logística y tangente hiperbólica) en la capa oculta y, en la capa de salida también se probaron las funciones sigmoideas (logística y tangente hiperbólica) y además la función lineal; y, (iv) usando entre 1 y 20 neuronas en la capa oculta. Cabe mencionar que en la literatura se reportan diversas técnicas para diseñar arquitecturas de RNA usando algoritmos evolutivos (p.ej., Yao, 1999; Stanley y Miikkulainen, 2002; Landassuri-Moreno y Bullinaria, 2009). En un trabajo futuro nos proponemos emplear alguna de éstas técnicas de adaptación para optimizar las arquitecturas neuronales evaluadas en el presente trabajo.

## 2 Antecedentes

Los geotermómetros de solutos son ampliamente usados para estimar la temperatura de fondo en la etapa de exploración de yacimientos geoenergéticos, específicamente en este trabajo se estudiaron los pozos geotérmicos. A la fecha existen reportados al menos cinco de estas herramientas que han sido propuestas usando la técnica computacional basada en RNA. Esta

metodología requiere de un algoritmo de optimización para minimizar el error entre la temperatura estimada y la medida, para ello existe una amplia gama de técnicas numéricas de entrenamiento. Las cuales requieren para su funcionamiento, de un conjunto de patrones de entrenamiento constituido por los valores de entrada y salida de la RNA. Los geotermómetros generalmente han sido propuestos a partir de bases de datos compiladas con muestras de fluidos geotérmicos y mediciones de la temperatura medida en pozos productores.

### 2.1 Geotermómetros de solutos

Los geotermómetros de solutos estiman la temperatura de fondo considerando exclusivamente la composición química de la fase líquida de las descargas del fluido geotérmico en la superficie, ya sea de manifestaciones hidrotermales o de pozos productores (Giggenbach, 1988). Existen reportados en la literatura aproximadamente 39 geotermómetros de solutos basados en diferentes cationes, tales como Na-K, K-Mg, Li-Mg, Na-Li, Na-K-Ca, Na-K-Mg, Na-K-Ca-Mg, así como los correspondientes al contenido de sílice ( $\text{SiO}_2$ ). En la Tabla 1 se muestran todos estos geotermómetros, con sus respectivas ecuaciones y referencias.

El 44% ( $n=17$ ) de estos geotermómetros corresponden a la relación  $\log(\text{Na}/\text{K})$ , de los cuales el 41% ( $n=7$ ) fueron desarrollados usando la técnica computacional de RNA (Bayram, 2001; Can, 2002; Díaz-González y col., 2008; Serpen y col., 2009; Santoyo y Díaz-González, 2010).

En este trabajo pretendemos explotar las capacidades de cómputo de las RNA para determinar la contribución de otros elementos químicos en la estimación final de la temperatura de fondo, proporcionando no sólo como entrada el  $\log(\text{Na}/\text{K})$  sino también otros elementos catiónicos (tales como Mg, Ca y Li) presentes en la composición química de las muestras de fluido compiladas en nuestra base de datos. El objetivo de este trabajo es estimar la contribución relativa de cada variable de entrada de la RNA a la estimación final de la temperatura.

### 2.2 Redes Neuronales Artificiales

Una RNA se compone de un determinado número de neuronas artificiales interconectadas masivamente mediante canales de información denominados conexiones, formando una estructura paralela

Tabla 1. Geotermómetros catiónicos reportados en la literatura (Tabla modificada de Verma y col., 2008).

Geotermómetro	Ecuación	Referencia
Na-K	$777/[\log(\text{Na}/\text{K}) + 0.700]-273.15$	Fournier-Truesdell (1973)
Na-K	$855.6/[\log(\text{Na}/\text{K}) + 0.8573]-273.15$	Truesdell (1976)
Na-K	$1217(\pm 93.9)/[\log(\text{Na}/\text{K}) + 1.483]-273.15$	Fournier (1979)
Na-K	$833/[\log(\text{Na}/\text{K}) + 0.780]-273.15$	Tonani (1980)
Na-K	$933/[\log(\text{Na}/\text{K}) + 0.993]-273.15$	Arnórsson (1983)
Na-K	$1319/[\log(\text{Na}/\text{K}) + 1.699]-273.15$	Arnórsson (1983)
Na-K	$1178/[\log([\text{Na}]/[\text{K}]) + 1.239]-273.15$	Nieva-Nieva (1987)
Na-K	$1390/[\log(\text{Na}/\text{K}) + 1.75]-273.15$	Giggenbach (1988)
Na-K	$1289(\pm 76)/[\log(\text{Na}/\text{K}) + 0.615]-273.15$	Verma y Santoyo (1997)
Na-K	$733.6-770.551[\log([\text{Na}]/[\text{K}])] + 378.189[\log([\text{Na}]/[\text{K}])]^2 - 95.753[\log([\text{Na}]/[\text{K}])]^3 + 9.544[\log([\text{Na}]/[\text{K}])]^2$	Arnórsson (2000)
Na-K	$2.0446 / (\log(\text{Na}/\text{K}) + 126.01) - 273.15$	Bayram (2001)
Na-K	$1052 / (1 + e^{(1.714(\log(\text{Na}/\text{K}) + 0.252)})) + 76$	Can (2001)
Na-K	$883/(\log(\text{Na}/\text{K}) + 0.908) - 273.15$	Díaz-González y col. (2008)
Na-K	$1273.2 (\tanh(-0.4144\log(\text{Na}/\text{K}) - 0.5642)) + 1156.9$	Díaz-González y col. (2008)
Na-K	$883(\pm 15) / (\log(\text{Na} / \text{K}) + 0.894(\pm 0.032)) - 273.15$	Díaz-González y col. (2008)
K-Mg	$4410/[14.0-\log(\text{K}^2/\text{Mg})]-273.15$	Giggenbach (1988)
K-Mg	$2330/[7.35-\log(\text{K}^2/\text{Mg})]-273.15$	Fournier (1991)
K-Mg	$1077/[4.033 + \log(\text{K}^2/\text{Mg})]-273.15$	Fournier (1991)
Li-Mg	$2200/[5.47-\log(\text{Li}/(\sqrt{\text{Mg}}))]-273.15$	Kharaka y Mariner (1989)
Li-Mg	$1910/[4.63-\log(\text{Li}/(\sqrt{\text{Mg}}))]-273.15$	Kharaka y Mariner (1989)
Na-Li	$1000(\pm 47)/[\log([\text{Na}]/[\text{Li}]) + 0.38(\pm 0.11)]-273.15$	Fouillac y Michard (1981)
Na-Li	$1195(\pm 75)/[\text{Log}([\text{Na}]/[\text{Li}]) - 0.19(\pm 0.25)]-273.15$	Fouillac y Michard (1981)
Na-Li	$1590/[\log(\text{Na}/\text{Li}) + 0.779]-273.15$	Kharaka y Mariner (1989)
Na-Li	$1049(\pm 44)/[\log([\text{Na}]/[\text{Li}]) + 0.44(\pm 0.10)]-273.15$	Verma y Santoyo (1997)
Na-Li	$1267(\pm 35)/[\log([\text{Na}]/[\text{Li}]) + 0.07(\pm 0.10)]-273.15$	Verma y Santoyo (1997)
Na-K-Ca	$\{1647/[\log([\text{Na}]/[\text{K}]) + \beta(\log((\sqrt{[\text{Ca}]/[\text{Na}]})/[\text{Na}]) + 2.06) + 2.47]] - 273.15$	Fournier-Truesdell (1973)
Na-K-Ca	$1120/[\log(\text{Na}/\text{K}) + \beta(\log(\sqrt{[\text{Ca}]/\text{Na}}) + 2.06) + 1.32] - 273.15$	Kharaka y Mariner (1989)
Na-K-Mg	$11140/[6 \log([\text{Na}]/[\text{K}]) + \log([\text{Mg}]/[\text{Na}]^2) + 18.30] - 273.15$	Nieva-Nieva (1987)
Na-K-Ca-Mg	$\{16000/[3 \log([\text{Na}]/[\text{K}]) + 3 \log([\text{Ca}]/[\text{Na}]^2) - \log([\text{Mg}]/([\text{Na}]^2)) + 44.67] - 273.15$	Nieva-Nieva (1987)
Na-K-Ca-Mg	$\{10080/[5 \log([\text{Na}]/[\text{K}]) + 2 \log([\text{Ca}]/[\text{Na}]^2) - \log([\text{Mg}]/([\text{Na}]^2)) + 16.65] - 273.15$	Nieva-Nieva (1987)
Sílice	$[1309/(5.19-\log(\text{S}))]-273.15$	Fournier (1977)
Sílice	$[1522/(5.75-\log(\text{S}))]-273.15$	Fournier (1977)
Sílice	$-42.198(\pm 1.345) + 0.28831(\pm 0.01337)\text{S} - 3.6686 \times 10^{-4}(\pm 3.152 \times 10^{-5})\text{S}^2 + 3.1665 \times 10^{-7}(\pm 2.421 \times 10^{-7})\text{S}^3 + 77.034(\pm 1.216)\log \text{S}$	Fournier y Potter (1982)
Sílice	$-44.119(\pm 0.438) + 0.24469(\pm 0.00573)\text{S} - \{1.7414 \times 10^{-4}(\pm 1.365 \times 10^{-5})\}\text{S}^2 + 79.305(\pm 0.427)\log \text{S}$	Verma y Santoyo (1997)
Sílice	$[140.82(\pm 0.00)] + [0.23517(\pm 0.00179)]\text{S}$	Verma y Santoyo (1997)

Sílice  $-55.3 + 0.3659S - 5.3954 \times 10^{-4}S^2 + 5.5132 \times 10^{-7}S^3$  Arnórsson (2000)  
 $+ 74.360 \log S$

Sílice  $[1175.7(\pm 31.7)]/[4.88(\pm 0.08) - \log S] - 273.15$  Verma (2000)

\*Las unidades de concentración de Na y K citadas entre paréntesis deben estar en mg/kg (ppm) y aquellas entre corchetes en unidades molares. En el caso del geotermómetro de Na-K-Ca:

$\beta$ , 4/3 para  $t < 100$ ;  $\beta$ , 1/3 para  $t > 100$ ;  $\beta$ , 1/3 para  $t < 100$  y  $\log(\sqrt{C}a/Na) < 0$

En el caso del geotermómetro de Sílice: S es la concentración de óxido de sílice, SiO<sub>2</sub>.

Consultar el trabajo de Verma y col. (2008) para más detalles sobre las condiciones de aplicabilidad de los geotermómetros.

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, y es precisamente esta funcionalidad la que buscamos explotar en nuestro trabajo.

McCulloch y Pitts (1943) desarrollaron el primer modelo de una neurona artificial. En la Fig. 1a 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  $\theta$  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  $\theta$  y de una función de activación  $\phi$  (que limita la amplitud de la salida neuronal).

Las neuronas se organizan en capas de entrada, ocultas y de salida para formar una RNA (ver Fig. 1b). 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 y col, 2008). En la literatura se reporta (p.ej., Singh y Chandra, 2003) que ciertas RNA son consideradas como aproximadores universales de funciones continuas.

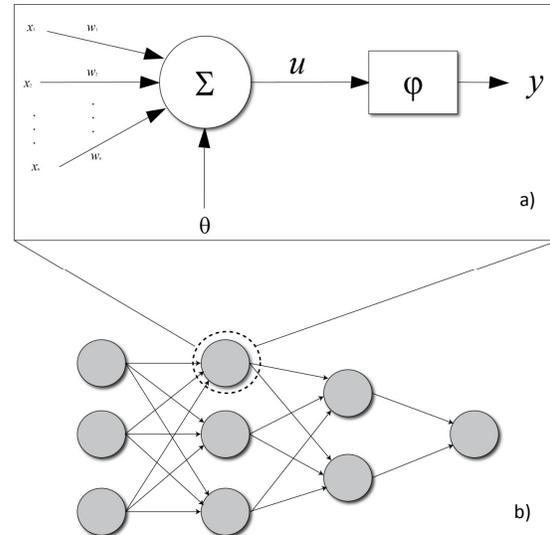


Fig. 1. a) Modelo de una neurona artificial propuesto por McCulloch y Pitts (1943); b) Esquema general de una red neuronal artificial.

Dichas RNA poseen las siguientes características: tienen conexiones hacia adelante, tiene una sola capa oculta en donde se usan funciones sigmoideales y tienen una capa de salida con funciones de activación lineal. Chandra y 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.

En el presente trabajo, usamos las funciones de activación logística y tangente hiperbólica en la capa oculta. En tanto que en la capa de salida probamos con la función logística, tangente hiperbólica y lineal.

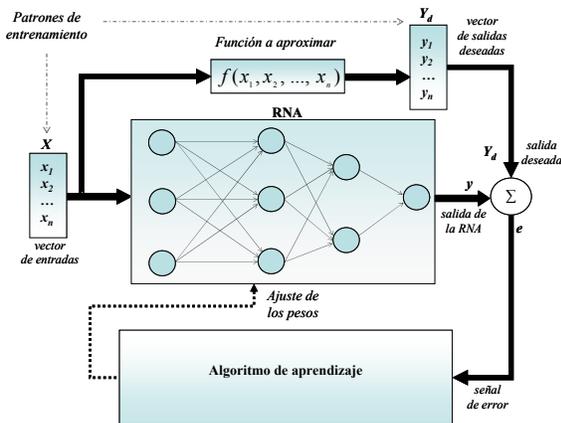


Fig. 2. Diagrama representativo del entrenamiento supervisado de una red neuronal.

### 2.2.1 Técnicas numéricas para el entrenamiento supervisado

En este trabajo usamos el entrenamiento supervisado (ver Fig. 2) usando el módulo *Neural Networks Toolbox* del software matemático MATLAB. Un algoritmo de entrenamiento supervisado es una técnica numérica de optimización que se aplica para ajustar los pesos sinápticos de la RNA en función de la diferencia entre la salida deseada y la salida calculada por la RNA. Este proceso requiere un conjunto de patrones de entrenamiento, los cuales son propagados de manera aleatoria y durante un tiempo también aleatorio, a través de la RNA para generar una salida. La salida deseada se compara con la salida de la RNA para calcular una señal de error, la cual es minimizada por el algoritmo de aprendizaje mediante el ajuste de los pesos sinápticos durante un tiempo de simulación.

El algoritmo de entrenamiento más reconocido como un método efectivo para el entrenamiento de RNA es el *backpropagation*. No obstante, también se reporta en la literatura que este algoritmo presenta dificultades con los mínimos locales, es decir, puede quedar “atrapado” en una solución no óptima. Por lo tanto, no converge en un número razonable de iteraciones a un mínimo global (Wang y col, 2004). Este algoritmo de entrenamiento ajusta los pesos de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$w_{(t+1)} = w_{(t)} + \Delta w_{(t)} \quad (1)$$

donde  $\Delta w_{(t)}$  es la corrección hecha a los pesos actuales  $w_{(t)}$ . Existen diferentes algoritmos que son utilizados para calcular  $\Delta w_{(t)}$ , algunos de los más importantes son listados en la Tabla 2.

En el presente trabajo se evaluaron diferentes técnicas numéricas de entrenamiento, tales como: *Levenberg-Marquardt*, *BFGS Quasi-Newton*, *Batch Gradient Descent*, *Fletcher-Powell Conjugate Gradient*, *Variable Learning Rate Backpropagation*, *Resilient Backpropagation*, *Scaled Conjugate Gradient* y *Automated Regularization*. Dado que un algoritmo de entrenamiento supervisado requiere de un conjunto de patrones de entrada y salida, se usó una amplia base de datos la cual fue compilada a partir de artículos publicados en revistas internacionales y arbitradas.

## 3 Metodología de desarrollo

La Fig. 3 muestra en forma esquemática la metodología de desarrollo del presente estudio, la cual se compone de 9 pasos. A continuación se explica detalladamente cada paso:

Tabla 2. Variantes del algoritmo de entrenamiento *backpropagation*.

Algoritmo	$\Delta w_{(t)}$	Comentarios
Gradiente descendiente	$= -\eta g(t) = -\eta \frac{dE}{dw_{it}}$	$g$ es el vector de gradiente, $\eta$ es el factor de convergencia.
Método de Newton	$= -H^{-1}g(t)$ $= -\left[\frac{d^2E}{dw_{it}^2}\right]^{-1} \left(\frac{dE}{dw_{it}}\right)$	$H$ es la matriz de Hessian.
Gradiente conjugado	$= \eta p(t)$ , donde $p(t+1) = -g(t+1) + \beta p(t)$	

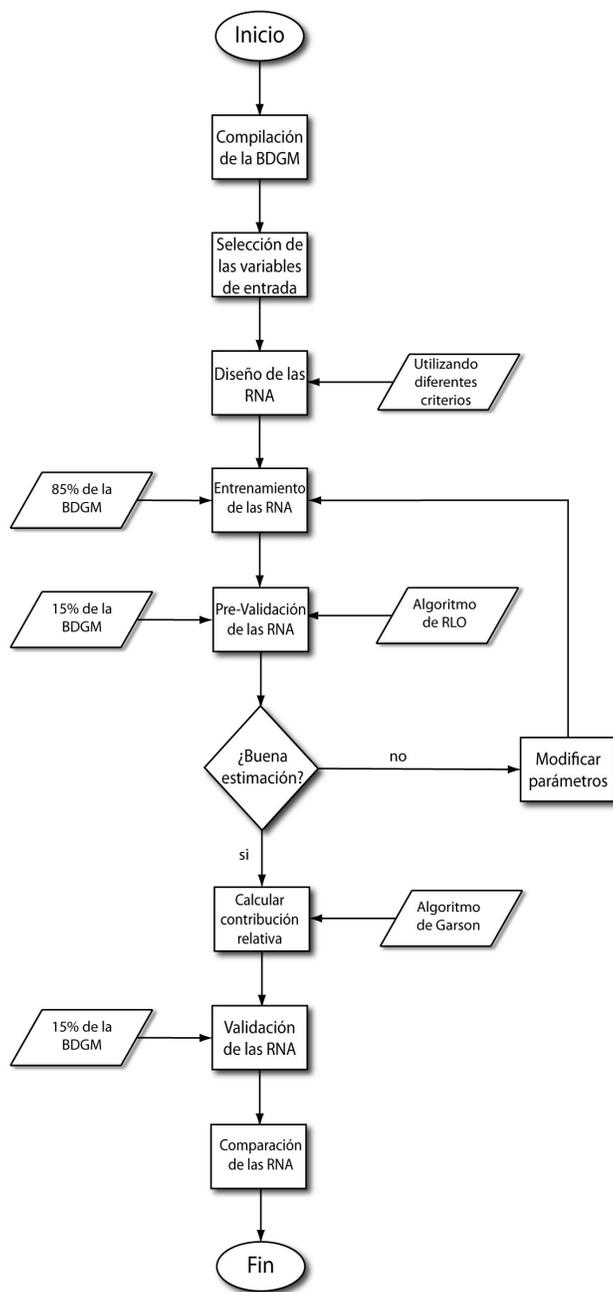


Fig. 3. Diagrama de flujo de la metodología del presente trabajo.

**i. Compilación de la base de datos**

La base de datos geoquímicos mundial (BDGM) contiene 708 muestras de fluidos geotérmicos y temperaturas de fondo medidas en pozos geotérmicos de diferentes partes del mundo. La BDGM fue diseñada en un formato matricial de 96 columnas que contienen la composición química de los principales componentes (aniones y cationes) presentes en los fluidos (en mg/kg o mg/l, unidades comúnmente usadas, ver Nicholson, 1993). Las muestras compiladas en la BDGM corresponden a pozos productores para los cuales se disponía la temperatura de fondo medida y la composición química de fluidos. Las muestras de manifestaciones hidrotermales fueron descartadas por estar sujetas a problemas de mezcla de fluidos, dilución y contaminación.

**ii. Determinación de las variables de entrada**

En el presente trabajo se seleccionaron las siguientes 6 variables: Na, K, Mg, Ca y Li, las cuales fueron seleccionadas debido a: (i) la disponibilidad en la BDGM; (ii) al uso de estos cationes en el desarrollo de los geotermómetros de solutos existentes. Por otro lado, se determinó usar como variable de entrada a la transformada  $\log$  de la relación  $Na/K$  en vez de dos variables separadas, debido a que está ampliamente reportado que esta variable compuesta presenta una alta correlación con el inverso de la temperatura absoluta ( $1/T_K$ ) en Kelvin. En este estudio se usaron 219 registros, a pesar de la magnitud de la BDGM; únicamente estos registros contenían la composición de las variables seleccionadas.

**iii. Combinación de las variables seleccionadas**

En este trabajo probamos una amplia combinación de las variables seleccionadas (Na, K, Mg, Ca y Li) para entrenar las RNA. La literatura reporta (p.ej., Fournier 1979; Giggenbach 1988; Arnórsson 2000) que el fundamento termodinámico y geoquímico de los geotermómetros de solutos está basado en los procesos de interacción de agua-roca que dominan los sistemas geotérmicos. Es por ello que se realizó una revisión bibliográfica de los artículos que reportan los geotermómetros catiónicos más conocidos y a partir de este estudio se determinó usar las transformadas  $\log$  de algunas relaciones de elementos que han sido

empleadas como indicadores de la temperatura por diversos autores, tales como:

- Kharaka y Mariner (1989):  $\log(Li/\sqrt{Mg})$
- Fouillac y Michard (1981), Kharaka y Mariner (1989), Verma y Santoyo (1997):  $\log(Na/Li)$
- Fournier y Truesdell (1973), Kharaka y Mariner (1989):  $\log(\sqrt{Ca}/Na)$
- Nieva y Nieva (1987):  $\log(Mg/Na^2)$  y  $\log(Ca/Na^2)$

Las RNA fueron entrenadas usando 7 combinaciones diferentes de entradas, cada combinación se compone de un número determinado de entradas. Una sola combinación de entradas sirve para entrenar una o más RNA. En la Tabla 3 se presentan las 7 combinaciones de entradas que usamos.

En general, las RNA pueden presentar problemas de saturación en el entrenamiento relacionado directamente con las magnitudes relativas de diferentes entradas y salidas. Con la finalidad de evitar este problema de saturación, la mayoría de las entradas de las RNA están normalizadas geoquímicamente usando el elemento químico mayoritario y calculando la transformada logarítmica de estas relaciones catiónicas. Además, la transformación logarítmica aplicada a la relación de las composiciones catiónicas obedece a recomendaciones previas de expertos (p. ej., Aitchison, 1986) para manejar correctamente -hablando estadísticamente- los datos composicionales.

Asimismo, como salida de las RNA, usamos el inverso de la temperatura absoluta en grados Kelvin ( $1/T_K$ ), dado que la composición química de los fluidos se correlaciona con esta variable. Dicha correlación se fundamenta teóricamente en los procesos geoquímicos y termodinámicos que dominan en los sistemas geotérmicos. Cabe destacar que al calcular el inverso de la temperatura absoluta obtenemos valores pequeños de la temperatura, en este caso, nuestros valores se encuentran entre 0.0029 y 0.0100. Generalmente, la temperatura es reportada en grados Celsius, nuestra base de datos contiene temperaturas entre 100°C y 350°C.

Tabla 3. Lista de 7 combinaciones de variables de entrada usadas para el entrenamiento de las redes neuronales.

Combinación	Entrada:			
	[1]	[2]	[3]	[4]
1	$\log(\frac{Na}{K})$	$\log(\frac{Ca}{Na^2})$	$\log(\frac{Mg}{Na^2})$	
2	$\log(\frac{\sqrt{Ca}}{Na})$			
3	$\log(\frac{\sqrt{Ca}}{Na})$	$\log(\frac{Na}{K})$		
4	$\log(\frac{Na}{K})$	$\log(\frac{Mg}{Na^2})$		
5	$\log(\frac{Na}{K})$	$\log(\frac{Ca}{Na^2})$	$\log(\frac{Mg}{Na^2})$	$Li$
6	$\log(\frac{Na}{K})$	$\log(\frac{Ca}{Na^2})$	$\log(\frac{Mg}{Na^2})$	$\log(\frac{Na}{Li})$
7	$\log(\frac{Na}{K})$	$\log(\frac{Ca}{Na^2})$	$\log(\frac{Mg}{Na^2})$	$\log(\frac{Li}{\sqrt{Mg}})$

Finalmente, cabe mencionar que usamos una combinación de entradas (la combinación No. 5; ver Tabla 3), que incluye el Litio sin normalizar geoquímicamente. Decidimos usar esta entrada dado que este elemento se encuentra reportado en concentraciones pequeñas, por lo tanto esta variable no contribuye a una posible saturación de las RNA.

Es importante destacar que desde el punto de vista computacional, autores como Dash y Lui (1997), Whiteson y col. (2005), Landassuri-Moreno y Bullinaria (2009) reportan que la selección de variables de entrada es una tarea que puede realizarse usando metodologías especializadas de optimización. Sin embargo, desde el punto de vista geoquímico, decidimos usar este conjunto variables que han sido usadas con éxito en geotermometría de solutos. Las variables de entrada que propusimos han mostrado una fuerte correlación entre la composición química de los fluidos geotérmicos y la temperatura de fondo.

#### iv. Diseño de las RNA

Una vez que determinamos las diferentes combinaciones de variables de entrada, establecimos ciertos criterios de diseño de las RNA, a fin de que cada una presentara diferente configuración. A continuación se presentan los criterios que establecimos para el diseño: (i) evaluar arquitecturas tipo perceptrón con una

capa oculta y con conexiones hacia adelante; (ii) entrenar las RNA usando las 7 diferentes combinaciones de entradas antes mencionadas; (iii) usar como máximo 20 neuronas en la capa oculta, debido a que algunos algoritmos de entrenamiento como Levenberg-Marquardt presentan un bajo desempeño en RNA muy grandes; (iv) usar funciones de activación sigmoidales (tales como: logística y tangente hiperbólica) en la capa oculta; y, (v) usar funciones sigmoidales (logística y tangente hiperbólica) y lineales en la capa de salida; (v) usar como salida de las RNA al inverso de la temperatura absoluta,  $1/T_K$ .

#### v. Entrenamiento de las RNA

El entrenamiento de las RNA se realizó en el módulo *Neural Networks Toolbox* del software matemático MATLAB usando el 85% de los patrones de entrenamiento (n=186) y las siguientes técnicas numéricas disponibles en MATLAB: *trainlm* (Levenberg-Marquardt), *trainbfg* (BFGS Quasi-Newton), *traingd* (Batch Gradient Descent), *traincgf* (Fletcher-Powell Conjugate Gradient), *trainrp* (Resilient Backpropagation), *traingdx* (Variable Learning Rate Backpropagation), *trainscg* (Scaled Conjugate Gradient) y *trainbr* (Automated Regularization).

#### vi. Pre-validación de las RNA

El 15% de la BDGM (n=33) fue usado para

simular cada RNA, cabe mencionar que el proceso de simulación de una RNA consiste en aplicar la ecuación general de la RNA, usando como coeficientes los valores de los pesos entrenados para calcular la salida de la RNA, la temperatura estimada.

El algoritmo de Regresión Lineal Ordinaria (RLO; Bevington y Robinson, 2003) fue usado como un criterio estadístico para comparar los resultados iniciales. La RLO proporciona 3 parámetros de regresión: coeficientes  $a$  y  $b$  (en este trabajo definidos como pendiente e intercepto, respectivamente) y el parámetro de regresión lineal  $r$ .

Una vez obtenida la temperatura estimada se comparó con la temperatura medida a través del algoritmo de RLO, usando como variables, *dependiente*  $y$ , a la temperatura estimada e *independiente*  $x$ , a la temperatura medida. Cada RNA fue pre-validada usando los parámetros de regresión obtenidos. En esta evaluación, teóricamente si la pendiente se aproxima a 1 y el intercepto se aproxima a 0, y el coeficiente de correlación  $r$  es cercano a 1, significa que la temperatura estimada por la RNA se acerca a la temperatura medida. De esta forma, entre más cercanos sean estos valores, mejor es la predicción de la RNA. Establecimos como criterio principal de selección, el coeficiente de correlación lineal  $r \geq 0.8$ , seleccionando así 5 RNA.

Cabe mencionar que este criterio fue establecido de acuerdo a Bevington y Robinson (2003), quienes establecen que la probabilidad de no correlación  $Pc(r; n)$  está dada por el coeficiente de correlación  $r$  y el número de datos a correlacionar  $n$ . En este caso, tenemos  $n = 33$  datos de validación y considerando un coeficiente de correlación  $r = 0.8$ , obtenemos una probabilidad de no correlación de  $2.3 \times 10^{-8}$ , la cual es sumamente baja. Por lo tanto, una correlación lineal de  $r = 0.8$  se puede considerar estadísticamente válida.

#### vii. Cálculo de la contribución relativa de las variables de entrada

Se calculó la contribución relativa ( $CR$ ) de las 5 RNA seleccionadas. La  $CR$  es el porcentaje de aportación de cada entrada a la salida de la RNA. Por lo tanto, es un valor que se calcula para cada entrada en particular. La  $CR$  de

cada variable de entrada fue calculada mediante el algoritmo de Garson (1991) descrito en la siguiente ecuación:

$$CR_p = \frac{\sum_{j=1}^n \frac{|w_{jp}| |v_j|}{\sum_{k=1}^I |w_{jk}|}}{\sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^n \frac{|w_{jp}| |v_j|}{\sum_{k=1}^I |w_{jk}|}} \quad (2)$$

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  $j$ .

#### viii. Validación de las RNA

La validación consistió en comparar las estimaciones de las 5 RNA seleccionadas, usando el 15% de la BDGM. Este estudio comparativo se basa en el cálculo del porcentaje de desviación ( $\%DEV$ ), que existe entre los valores de temperatura medidas ( $t_m$ ) y las temperaturas estimadas ( $t_g$ ) mediante las 5 herramientas geotermométricas desarrolladas en este trabajo. El parámetro  $\%DEV$  se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$\%DEV = [(t_g - t_m)/t_m] * 100 \quad (3)$$

El  $\%DEV$  fue usado como parámetro para evaluar el grado de exactitud de la temperatura estimada por las RNA, suponiendo que la temperatura que ha sido medida con sensores analógicos y digitales, es la temperatura que más se aproxima a la temperatura estable de fondo de un pozo geotérmico.

## 4 Resultados y discusión

En este trabajo se entrenaron al menos 60 arquitecturas de RNA, usando como variables de entrada 7

diferentes combinaciones (ver Tabla 3). En la Tabla 4 se presenta la configuración de las 5 mejores arquitecturas neuronales, las cuales fueron seleccionadas de acuerdo al criterio  $r \geq 0.8$  de coeficiente de correlación lineal, obtenido entre la temperatura estimada por las RNA y la temperatura medida. De estas 5 RNA finales, 4 de ellas fueron diseñadas con una neurona en la capa oculta y una RNA con cinco neuronas.

Las 5 RNA seleccionadas fueron entrenadas con las siguientes combinaciones de entradas: (i) 2 RNA con la combinación 1,  $\log(Na/K)$ ,  $\log(Ca/Na^2)$  y  $\log(Mg/Na^2)$ ; (ii) 1 RNA con la combinación 5, que incluye las 3 entradas de la combinación 1 y el Litio; (iii) 1 RNA con la combinación 6, que incluye la combinación 1 y el  $\log(Na/Li)$ ; y, (iv) 1 RNA con la combinación 7, que incluye la combinación 1 y el  $\log(Li/\sqrt{Mg})$ ). Como podemos apreciar, las 3 entradas de la combinación 1 están presentes en todas las RNA finales, lo cual puede sugerir que estas variables tienen cierta relevancia en la estimación de la temperatura de fondo.

Evaluamos las siguientes técnicas de entrenamiento: *Levenberg-Marquardt*, *BFGS Quasi-Newton*, *Batch Gradient Descent*, (*Fletcher-Powell Conjugate Gradient*), *Resilient Backpropagation*, *Variable Learning Rate Backpropagation*, *Scaled Conjugate Gradient* y *Automated Regularization*. De todas estas técnicas de entrenamiento, el algoritmo de *Levenberg – Marquardt* es el que presentó el mejor desempeño en el aprendizaje. Las 5 RNA seleccionadas fueron entrenadas con esta técnica de

aprendizaje. Asimismo, las 5 RNA fueron diseñadas con funciones de activación tangente hiperbólica en la capa oculta y lineal en la capa de salida.

Asimismo, se puede apreciar que las RNA4 y RNA5 (ver Tabla 4) presentan los mismos parámetros de regresión lineal: pendiente ( $a=0.82$ ), intercepto ( $b=0.001$ ) y coeficiente de correlación lineal ( $r=0.815$ ). Mientras tanto, las RNA1, RNA2 y RNA3 presentaron diferentes valores para los parámetros  $a$  (0.82, 1.2 y 0.95),  $b$  (0.00097, 0.00048 y 0.00046) y  $r$  (0.81, 0.80 y 0.82). Teóricamente si la pendiente se aproxima a 1, el intercepto se aproxima a 0, y el coeficiente de correlación es cercano a 1, significa que la temperatura estimada por la RNA se acerca a la temperatura medida.

#### 4.1 Contribución relativa de las entradas

En la Tabla 5 se presenta la contribución relativa de las entradas de las 5 RNA seleccionadas. Cada entrada presenta el siguiente intervalo de valores: (i) el  $\log(Na/K)$  del 69% al 75%; (ii) el  $\log(Ca/Na^2)$  del 3% al 13%; (iii) el  $\log(Mg/Na^2)$  del 12% al 22%; (iv) el  $Li$ , el  $\log(Na/Li)$  y el  $\log(Li/\sqrt{Mg})$  presentaron el 3%. Cabe destacar que la contribución relativa de la variable Litio no presenta diferencias respecto a las transformadas  $\log$ :  $\log(Na/Li)$  y  $\log(Li/\sqrt{Mg})$ . Asimismo, los resultados obtenidos en este trabajo, muestran que el  $\log$  de la relación  $Na/K$  presenta de manera sistemática la más alta contribución en todas las arquitecturas neuronales. En la Fig. 4 se presentan estos resultados de manera gráfica.

Tabla 4. Configuración de las arquitecturas neuronales seleccionadas.

RNA	CONF.	Entrada:				Parametros RLO		
		[1]	[2]	[3]	[4]	a	b	r
RNA1	3-1-1	$\log(\frac{Na}{K})$	$\log(\frac{Ca}{Na^2})$	$\log(\frac{Mg}{Na^2})$		0.82	0.00097	0.81
RNA2	3-5-1	$\log(\frac{Na}{K})$	$\log(\frac{Ca}{Na^2})$	$\log(\frac{Mg}{Na^2})$		1.2	0.00048	0.80
RNA3	4-1-1	$\log(\frac{Na}{K})$	$\log(\frac{Ca}{Na^2})$	$\log(\frac{Mg}{Na^2})$	$Li$	0.95	0.00046	0.82
RNA4	4-1-1	$\log(\frac{Na}{K})$	$\log(\frac{Ca}{Na^2})$	$\log(\frac{Mg}{Na^2})$	$\log(\frac{Na}{Li})$	0.82	0.001	0.815
RNA5	4-1-1	$\log(\frac{Na}{K})$	$\log(\frac{Ca}{Na^2})$	$\log(\frac{Mg}{Na^2})$	$\log(\frac{Li}{\sqrt{Mg}})$	0.82	0.001	0.815

Todas estas arquitecturas neuronales fueron entrenadas con el algoritmo  $lm$  (Levenberg-Marquardt)

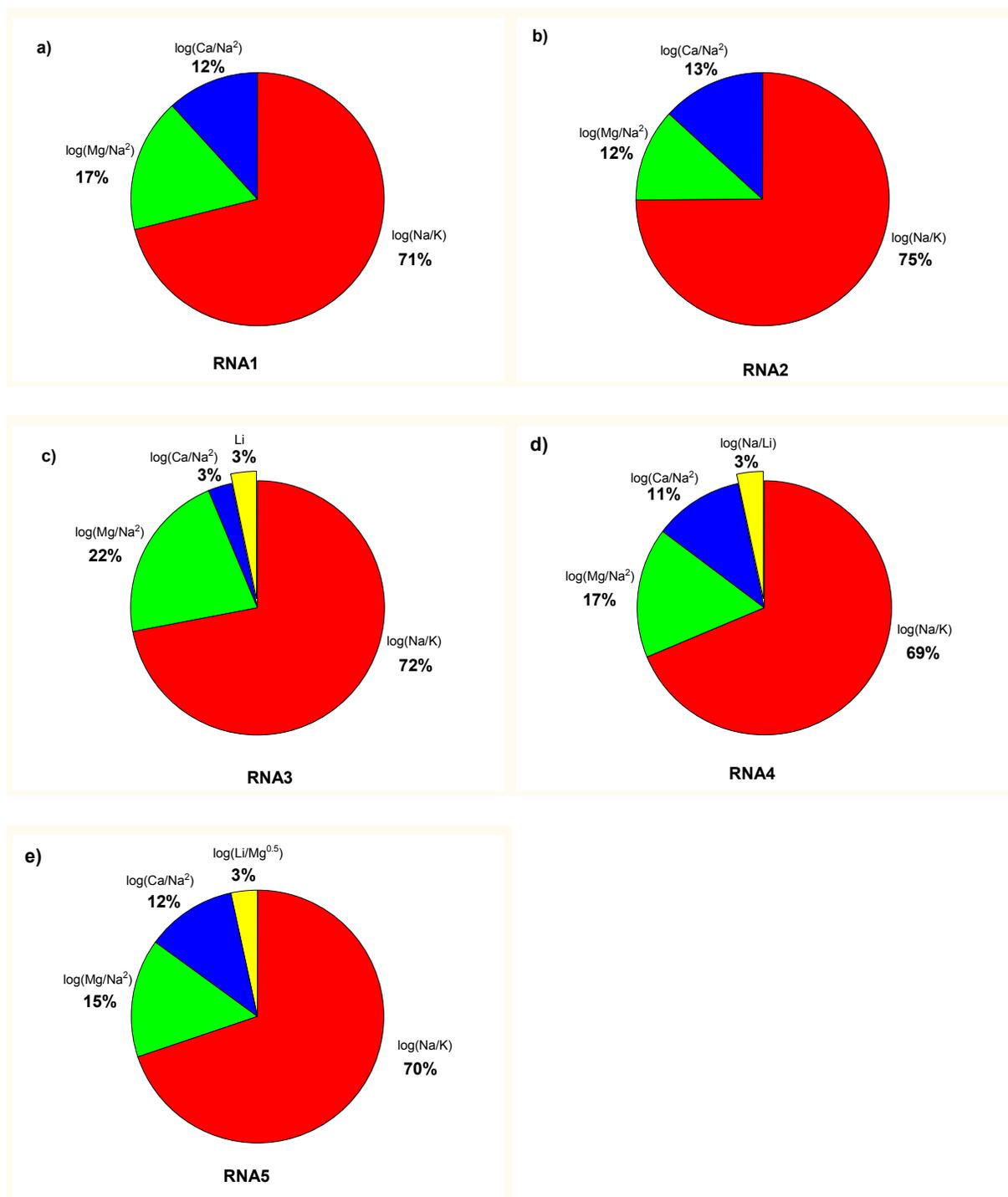


Fig. 4. Gráficas de la contribución relativa de cada entrada de las redes neuronales.

Tabla 5. Contribución relativa de cada entrada de las 5 mejores redes neuronales.

RNA	Contribución relativa de las entradas			
	[1]	[2]	[3]	[4]
RNA1	71%	12%	17%	
RNA2	75%	13%	12%	
RNA3	72%	3%	22%	3%
RNA4	69%	11%	17%	3%
RNA5	70%	12%	15%	3%

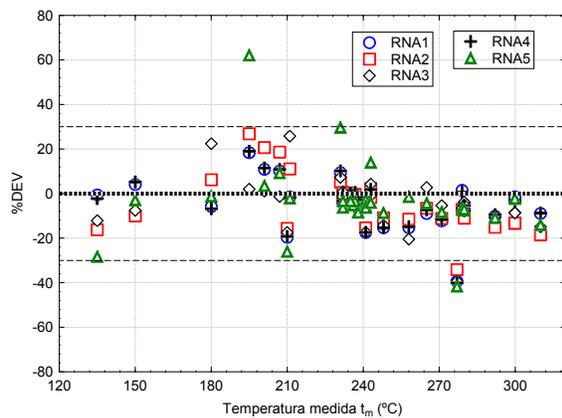


Fig. 5. Gráfica del porcentaje de desviación de las redes neuronales.

#### 4.2 Validación de las RNA

En la Fig. 5 se presentan los resultados del  $\%DEV$  (ver ecuación 3) de las 5 RNA finales. Este parámetro estadístico fue usado como un criterio de validación a fin de cuantificar el grado de exactitud presente en la estimación de temperaturas realizada por cada una de las RNA finales. Cabe destacar que en este proceso de validación usamos un conjunto de 33 muestras seleccionadas aleatoriamente de la base de datos, mismas que no participaron en el entrenamiento de las RNA, para evitar un sesgo estadístico. El  $0\%DEV$ , representado como una línea punteada en la Fig. 5, denota a los valores reales de temperatura medida; por tanto, la herramienta geotermométrica más realista en sus predicciones es aquella que obtiene valores más cercanos a esta línea. Las RNA exhibieron en su mayoría un  $\%DEV$  del  $-30$  al  $30$ .

## Conclusiones

En el presente estudio se realizó un análisis multivariado usando la técnica computacional de RNA y una amplia base de datos geoquímicos ( $n=219$ ), con la finalidad de conocer la contribución relativa de ciertos cationes en la estimación de la temperatura de fondo en pozos geotérmicos. Como entradas de las RNA, usamos las transformadas logarítmicas de diversas relaciones de los elementos *Na*, *K*, *Mg*, *Ca* y *Li*, y como salida usamos el inverso de la temperatura absoluta. Decidimos usar este conjunto variables, desde un punto de vista geoquímico, dado que han sido usadas con éxito en geotermometría para estimar la temperatura de fondo.

Las 5 mejores RNA seleccionadas presentaron las siguientes características de diseño: (i) 4 de ellas con una sola neurona en la capa oculta y una RNA con 5 neuronas en dicha capa; (ii) las 5 RNA seleccionadas usaron la función de activación tangente hiperbólica en la capa oculta y la función lineal en la capa de salida; y, (iii) las 5 RNA seleccionadas se entrenaron con el algoritmo *Levenberg – Marquardt*. Estos resultados sobre el diseño de las RNA, nos ayudarán en un futuro a implementar una metodología evolutiva para obtener una RNA óptima.

Después de probar un número significativo de técnicas de entrenamiento, concluimos que el algoritmo de optimización *Levenberg – Marquardt* es el algoritmo más rápido, dado que converge con menos iteraciones que cualquier otro algoritmo probado. Asimismo, podemos destacar que nuestros resultados de entrenamiento fueron más consistentes usando este algoritmo que usando otros algoritmos, con los cuales observamos que los parámetros de pesos y bias presentaban cierta oscilación. Por otro lado, la literatura reporta que este algoritmo de optimización es ineficiente para entrenar grandes RNA, debido a su alto costo computacional. Así que, consideramos que este algoritmo presentó el mejor desempeño, dado que nuestras RNA finales tienen pocas entradas (3 y 4) y pocas neuronas en la capa oculta, con lo cual se obtiene un número mediano de parámetros ajustables; por ejemplo, la RNA final más robusta tiene 26 parámetros considerando pesos y bias.

Finalmente, consideramos que los resultados obtenidos en el presente estudio multivariado podrían ser de utilidad para el desarrollo futuro de una herramienta geotermométrica multicomponente más

exacta, dado que obtuvimos la contribución relativa de cada entrada de las RNA finales. Con ello, podemos concluir que la entrada del Litio, no presenta diferencias respecto a las entradas basadas en las transformadas logarítmicas:  $\log(Na/Li)$  y  $\log(Li/\sqrt{Mg})$ . Asimismo, se concluye que el  $\log$  de la relación  $Na/K$  presenta la más alta contribución en todas las arquitecturas neuronales. Con ello se demuestra que la variable  $\log(Na/K)$  es el indicador más importantes de la geotermometría de solutos. En tanto que, el  $\log(Mg/Na^2)$  y el  $\log(Ca/Na^2)$  es el segundo y tercer indicador en importancia, respectivamente. Por último, se destaca que el Litio es el indicador con menos relevancia en la estimación de la temperatura de fondo.

### Agradecimientos

El primer autor agradece al proyecto PROMEP *Estadística Computacional para el tratamiento de datos experimentales* (PROMEP/103-5/10/7332). El segundo autor agradece a dicho proyecto PROMEP la beca para realizar su tesis de licenciatura. El tercer autor agradece también el apoyo del proyecto DGAPA-PAPIIT IN 116511. Asimismo, se agradecen los valiosos comentarios sugeridos por el Dr. Gilberto Espinosa-Paredes y por los 4 árbitros anónimos, que amablemente contribuyeron a mejorar el presente trabajo.

### Nomenclatura

$\phi(u)$	función de activación de una red neuronal
$w_{(t)}$	peso sináptico en el instante de tiempo $t$
$\Delta w_{(t)}$	Variación del peso sináptico en el instante de tiempo $t$
$CR_p$	Contribución relativa de la entrada $p$ de una red neuronal
$p$	$p$ -ésima entrada de la red neuronal
$n$	número de las neuronas ocultas
$j$	$j$ -ésima neurona oculta
$I$	número de entradas de la red neuronal
$w_{jp}$	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 $j$
%DEV	porcentaje de desviación entre $t_g$ y $t_m$
$t_g$	es la temperatura estimada por la RNA
$t_m$	es la temperatura medida

### Referencias

- Álvarez del Castillo A., Santoyo E., García-Valladares O., Sánchez-Upton P. (2010). Evaluación estadística de correlaciones de fracción volumétrica de vapor para la modelación numérica de flujo bifásico en pozos geotérmicos. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* 9, 285-311.
- Aitchison, J. (1986). *The Statistical Analysis of Compositional Data*. London, Chapman and Hall.
- Arnórsson, S. (1983). Chemical equilibria in Icelandic geothermal systems-Implications for chemical geothermometry investigations. *Geothermics* 12, 119-128.
- Arnórsson, S. (Ed.). (2000). Isotopic and Chemical Techniques in Geothermal Exploration, Development and Use: Sampling Methods, Data Handling, Interpretation. *International Atomic Energy Agency 351*, Vienna, Austria, 351.
- Bassam, A., Santoyo, E., Andaverde, J., Hernández, J.A. y Espinoza-Ojeda, O.M. (2010) Estimation of static formation temperatures in geothermal wells by using an artificial neural network approach. *Computers & Geosciences* 36, 1191-1199.
- Bayram, A.F. (2001). Application of an artificial neural network model to a Na-K geothermometer. *Journal of Volcanology and Geothermal Research* 12, 75-81.
- Bevington, P.R. y Robinson, D.K. (2003). *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*. McGraw-Hill, Boston, MA, USA.
- Can, I. (2002). A new improved Na/K geothermometer by artificial neural Networks. *Geothermics* 31, 751-760.
- D'Amore, F. y Arnórsson, S. (2000). Geothermometry. En: *Isotopic and Chemical Techniques in Geothermal Exploration, Development and Use: Sampling Methods, Data Handling, Interpretation*, (S., Arnórsson, ed.), Pp. 152-199. International Atomic Energy Agency, Vienna, Austria.

- Díaz-González L., Santoyo E. y Reyes J. (2008). Tres nuevos geotermómetros mejorados de Na/K usando herramientas computacionales y geoquimométricas: aplicación a la predicción de temperaturas de sistemas geotérmicos. *Revista Mexicana de Ciencias Geológicas* 25, 465-482.
- Díaz-González L. y Santoyo E. (2008). A new precise calibration of the Na/K geothermometer using a world database of geothermal fluids and improved geochemometric techniques. Presentación Julio. Vancouver, Canada: *18th Annual V.M. Goldschmidt Conference, Geochimica et Cosmochi Acta 72 Supplement 1, A215*.
- Espinoza-Ojeda, O.M., Santoyo E. y Andaverde, J. (2011). A new look at the statistical assessment of approximate and rigorous methods for the estimation of stabilized formation temperatures in geothermal and petroleum wells. *Journal of Geophysics and Engineering* 8, 233-258.
- Espinosa-Paredes, G. y Espinosa-Martínez, E.G. (2009). A feedback based inverse head transfer method to estimate unperturbed temperatures in wellbores. *Energy Conversion and Management* 50, 140-148.
- Espinosa-Paredes, G., Morales-Díaz A., Ulea-González, U., Ambríz-García, J.J. (2009). Application of a proportional integral control for the estimation of static formation temperatures in oil wells. *Marine and Petrology Geology* 26, 259-268.
- Fouillac, C. y 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. En: *Applications of Geochemistry in Geothermal Reservoir Development*, (F. D'Amore, ed.), Pp. 37-69. UNITAR/UNDP Centre on Small Energy Resources, Rome, Italy.
- Fournier, R.O. y Potter II, R.W. (1982). A revised and expanded silica (quartz) geothermometer. *Geotherm. Res. Coun. Bull.* 11, 3-12.
- Fournier, R.O. y Truesdell, A.H., (1973). An empirical Na-K-Ca geothermometer for natural waters. *Geochim. Cosmochim. Acta* 37, 1255-1275.
- Garson G.D. (1991). Interpreting neural-network connection weights. *AI Expert* 6, 47-51.
- Giggenbach, W.F. (1988). Geothermal solute equilibria. Derivation of Na-K-Mg-Ca geothermometers. *Geochim. Cosmochim. Acta* 52, 2749-2765.
- Kharaka, Y.K. y Mariner, R.H. (1989). Chemical geothermometers and their application to formation waters from sedimentary basins. En: *Thermal History of Sedimentary Basins*, ( N.D. Naeser y T.H., McCulloh, eds), Pp. 99-117. Springer-Verlag, New York, NY, USA.
- Landassuri-Moreno, V. y Bullinaria, J. A. (2009) Neural Network Ensembles for Time Series Forecasting. July. Montreal, QC, Canada: *Conference. GECCO '09 Genetic and Evolutionary Computation Conference*.
- Martínez-Méndez E.J., Vázquez-Rodríguez R., Torijano-Cabrera E., Hernández-Escoto H. (2005). Análisis en pequeña escala longitudinal del proceso de transporte de calor en una región semiporosa de un pozo geotérmico. *Revista Mexicana de Ingeniería Química*, 5, 59-70.
- Mcculloch, W. y Pitts, W. (1943). A Logical Calculus of the Ideas Immanent in Nervous Activity. *Bulletin of Mathematical Biophysics* 5, 115-133.
- Nicholson, K. (1993). *Geothermal Fluids: Chemistry and Exploration Techniques*. Springer-Verlag, New York, NY, USA.
- Nieva, D. y 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.
- Olea-González U., Vázquez-Rodríguez A., García-Gutiérrez A., Anguiano-Rojas P. (2007). Estimación de temperaturas de formación en yacimientos: Método inverso. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* 6, 65-74.

- Santoyo E. y Barragán-Reyes R.M. (2010). Energía geotérmica. *Revista de la Academia Mexicana de Ciencias* 61, 40-51.
- Santoyo E. y Díaz-González L. (2010). A new improved proposal of the Na/K geothermometer to estimate deep equilibrium temperatures and their uncertainties in geothermal systems. April. Bali, Indonesia: *Proceedings of the World Geothermal Congress*.
- Serpen G., Palabiyik Y. y Serpen U. (2009). An artificial neural network model for Na/K geothermometer. February. Stanford University, Stanford, CA, USA: *Proceedings of the Thirty-fourth Workshop on Geothermal Reservoir Engineering*.
- Stanley, K. O. y Miikkulainen R. (2002) Evolving Neural Networks through Augmenting Topologies. *Evolutionary Computation* 10, 99-127.
- Truesdell, A.H. (1976). GEOTHERM, a geothermometric computer program for hot spring systems. San Francisco, CA, USA: *Symposium on the Development and Use of Geothermal Resources 1975*.
- Tonani, F. (1980). Some remarks on the application of geochemical techniques in geothermal exploration. Strasbourg, France: *Proceedings of 2nd Symposium Advances in European Geothermal Research*.
- Verma, M.P. (2000). Revised quartz solubility temperature dependence equation along the water-vapor saturation curve. Kyushu, Tohoku, Japan: *Proceedings of the 2000 World Geothermal Congress*.
- Verma, S.P. y Santoyo, E. (1997). New improved equations for Na/K, Na/Li and SiO<sub>2</sub> geothermometers by outlier detection and rejection. *Journal of Volcanology and Geothermal Research* 79, 9-24.
- Verma, S.P., Pandarinath, K. y Santoyo, E. (2008). SolGeo: A new computer program for solute geothermometers and its application to Mexican geothermal fields. *Geothermics* 37, 597-621.
- Wang, X., Tang, Z., Tamura, H., Ishii, M. y Sun, W. (2004). An improved backpropagation algorithm to avoid the local minima problem. *Neurocomputing* 56, 455-460.
- Yao, X. (1999) Evolving Artificial Neural Networks. *Proceeding of the IEEE* 87, 1423-1447.