

UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID
Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Minas y Energía



**Clustering Multivariable Aplicado a la
Exploración Geoquímica de Sistemas
Geotérmicos en Ambientes Volcánicos**

TESIS DOCTORAL

Presentada para optar al título de Doctor por:

Ángel Morales González-Moro

Ingeniero de Minas

Madrid, 2025



UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID
Escuela Técnica Superior de Ingenieros
de Minas y Energía

**Doctorado en Investigación, Modelización y Análisis del
Riesgo en Medio Ambiente**

Clustering Multivariable Aplicado a la Exploración Geoquímica de Sistemas Geotérmicos en Ambientes Volcánicos

TESIS DOCTORAL

Presentada para optar al título de Doctor por:

Ángel Morales González-Moro

Ingeniero de Minas

Bajo la dirección de:

Dr. Nemesio M. Pérez Rodríguez

Madrid, 2025

Título: Clustering Multivariable Aplicado a la Exploración Geoquímica de Sistemas Geotérmicos en Ambientes Volcánicos

Autor: Ángel Morales González-Moro

Programa de Doctorado: Investigación, Modelización y Análisis del Riesgo en Medio Ambiente

Dirección de tesis: Dr. Nemesio Manuel Pérez Rodríguez, Director Científico, Instituto Tecnológico y de Energías Renovables (ITER) y Coordinador Científico, Instituto Volcanológico de Canarias (INVOLCAN)

Revisores externos:

Tribunal de tesis:

Fecha de defensa:

*A mis padres,
a mis hijos,
a mi amigo José Flores.*

Agradecimientos

Deseo expresar mi más sincero agradecimiento a todas las personas e instituciones que han contribuido de manera significativa al desarrollo de esta tesis doctoral.

En primer lugar, agradezco profundamente la guía, el acompañamiento y el rigor científico del Dr. Nemesio M. Pérez Rodríguez y del Profesor Agustín García-Berrocal Sánchez, cuyos conocimientos, experiencia y disposición constante han sido fundamentales para orientar esta investigación y enriquecer su enfoque técnico y metodológico.

Extiendo también mi gratitud a la Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Minas y Energía de la Universidad Politécnica de Madrid, por su respaldo académico, así como al equipo del Instituto Volcanológico de Canarias (INVOLCAN) y del Instituto Tecnológico y de Energías Renovables (ITER), cuya colaboración, acceso a datos y discusiones técnicas han representado un pilar clave en el análisis y la validación de los resultados.

A la Dra. María Jesús García Martínez, le agradezco especialmente su compromiso institucional, colaboración constante y apoyo a lo largo de todas las etapas de este proceso doctoral, que han sido fundamentales para el desarrollo y finalización de este trabajo.

Finalmente, deseo expresar mi reconocimiento a mi familia y amistades más cercanas por su comprensión, ánimo y apoyo incondicional a lo largo de este camino, así como a todas aquellas personas que, de forma directa o indirecta, han hecho posible la realización de este proyecto académico.

A todos, muchas gracias.

Abstract

High-enthalpy geothermal resources in volcanic settings often lack clear surface manifestations, requiring integrated, data-driven approaches to identify hidden reservoirs. In this study, we apply a multivariate clustering technique—genetic K-Means clustering (GKMC)—to a comprehensive soil gas dataset collected from 1,200 sampling sites across the ~100 km² Garehagua mining license, located in the southern rift zone of Tenerife (Canary Islands).

The survey included diffuse CO₂ flux measurements and concentrations of key soil gases (He, H₂, CH₄, O₂, N₂, Ar isotopes, and ²²²Rn, among others). Statistical-graphical analysis using the Sinclair method allowed for an objective classification of geochemical anomalies relative to background populations. The GKMC algorithm segmented the dataset into geochemically coherent clusters. One cluster, defined by elevated CO₂, helium, and ²²²Rn levels, showed a clear spatial correlation with inferred tectonic lineaments in the southern rift zone. These anomalies are interpreted as structurally controlled conduits for the ascent of deep magmatic-hydrothermal fluids. The findings support the presence of a concealed geothermal system structurally constrained in the southern region of Tenerife.

This study demonstrates that integrating GKMC clustering with soil gas geochemistry offers a robust methodology for detecting hidden geothermal anomalies. By enhancing anomaly detection in areas with subtle or absent surface expression, this approach contributes to reducing exploration risk and provides a valuable decision-support tool for targeting future drilling operations in volcanic terrains.

Resumen

Los recursos geotérmicos de alta entalpía en entornos volcánicos suelen carecer de manifestaciones superficiales evidentes, lo que exige enfoques integrados basados en datos para identificar reservorios ocultos. En este estudio, aplicamos una técnica de clustering multivariado —**clustering genético K-Means (GKMC)**— a un conjunto de datos geoquímicos de gases del suelo recolectado en 1.200 puntos de muestreo distribuidos en la licencia minera de Garehagua (~100 km²), situada en la zona de rift sur de la isla de Tenerife (Islas Canarias).

La campaña incluyó mediciones de flujo difuso de CO₂ y concentraciones de gases clave del suelo (He, H₂, CH₄, O₂, N₂, isótopos de Ar y ²²²Rn, entre otros). El análisis estadístico-gráfico mediante el método de Sinclair permitió una clasificación objetiva de las anomalías geoquímicas respecto a las poblaciones de fondo. El algoritmo GKMC segmentó el conjunto de datos en clusters geoquímicamente coherentes. Uno de los clusters, caracterizado por niveles elevados de CO₂, helio y ²²²Rn, mostró una clara correlación espacial con lineamientos tectónicos inferidos en la zona de rift sur. Estas anomalías se interpretan como conductos estructurales que favorecen el ascenso de fluidos magmático-hidrotermales profundos. Los resultados respaldan la existencia de un sistema geotérmico oculto, estructuralmente controlado, en el sur de Tenerife.

Este estudio demuestra que la integración del clustering GKMC con la geoquímica de gases del suelo constituye una metodología robusta para la detección de anomalías geotérmicas ocultas. Al mejorar la detección de anomalías en áreas con expresiones superficiales sutiles o ausentes, este enfoque contribuye a reducir el riesgo exploratorio y ofrece una herramienta valiosa de apoyo para la toma de decisiones en futuras operaciones de perforación en terrenos volcánicos.

Tabla de Contenido

<i>Agradecimientos</i>	<i>iii</i>
<i>Abstract</i>	<i>iv</i>
<i>Resumen</i>	<i>v</i>
<i>Lista de Figuras</i>	<i>x</i>
<i>Lista de Tablas</i>	<i>xv</i>
<i>Abreviaturas y Acrónimos</i>	<i>xvi</i>
1. Introducción	1
1.1 Relevancia de la geoquímica de gases en la exploración geotérmica.....	1
1.2 Recopilación de información científica de interés para la exploración geotérmica.....	3
1.3 Justificación y contexto.....	7
1.4 Situación de la geotermia en España.....	11
1.5 Antecedentes de la exploración geotérmica en Canarias.....	12
1.6 Objetivo de la tesis.....	23
1.7 Publicaciones derivadas de la tesis.....	24
2. Marco geológico-ambiental y volcánico de la isla de Tenerife	25
2.1 Geología general de la isla de Tenerife.....	29
2.2 Evolución volcánica y potencial geotérmico en Tenerife.....	30
2.3 Estructura geodinámica del subsuelo: fallas, fracturas y permeabilidad.....	32
2.4 Manifestaciones hidrotermales y geoquímicas conocidas.....	34
2.5 Exploración Geotérmica en Tenerife: Estudios y Hallazgos.....	36
2.6 Contexto tectónico-regional y su relación con el flujo de calor.....	41
2.7 Dominio minero Garehagua.....	42
3. Fundamentos teóricos y geoquímicos de la desgasificación difusa	43
3.1 Procesos de desgasificación en sistemas volcánico-hidrotermales.....	43
3.2 Principales gases endógenos de interés geotérmico: CO ₂ , He, H ₂ , Rn, H ₂ S, SO ₂	47
3.2.1 Dióxido de carbono (CO ₂).....	47
3.2.2 Helio (He).....	47
3.2.3 Hidrógeno (H ₂).....	48
3.2.4 Radón (²²² Rn).....	48
3.2.5 Ácido sulfhídrico (H ₂ S) y dióxido de azufre (SO ₂).....	49
3.3 Orígenes y trazadores isotópicos	49

3.4	Técnicas de prospección geoquímica: fundamentos, ventajas y limitaciones.....	50
3.5	Métodos Geoquímicos Asociados a la Exploración Geotérmica: Perspectivas Recientes.....	51
3.6	Parámetros Fundamentales en la Exploración Geotérmica.....	52
3.6.1	Coordenadas Geográficas y Altitud (Long/Lat, H(m)).....	52
3.6.2	Flujo difuso de CO ₂	53
3.6.3	Neón (Ne).....	53
3.6.4	Oxígeno (O ₂).....	53
3.6.5	Nitrógeno (N ₂).....	54
3.6.6	Metano (CH ₄).....	54
3.6.7	Isótopos de Argón (³⁶ Ar, ³⁸ Ar, ⁴⁰ Ar).....	54
3.6.8	Thoron (²²⁰ Rn).....	55
3.7	Background de datos geoquímicos.....	56
3.8	Clasificación de Aguas y Procesos de Mezcla.....	57
3.9	Métodos Analíticos y Tendencias Actuales.....	58
3.9.1	Cromatografía de Gases (CG).....	58
3.9.2	Espectrometría de Masas (MS).....	58
3.9.3	Espectroscopía de Absorción y Fotometría Avanzada.....	59
3.9.4	Métodos Integrados con Aprendizaje Automático.....	59
3.10	Geotermometría de equilibrios múltiples.....	60
3.11	Importancia del Muestreo y Control de Calidad.....	61
3.12	Conclusiones y Perspectivas futuras de la caracterización Geoquímica.....	62
3.12.1	Perspectivas Futuras.....	63
4.	Material y métodos.....	64
4.1	Propuesta metodológica.....	64
4.1.1	Método Sinclair.....	66
4.1.2	Diseño del muestreo y selección del área de estudio.....	75
4.2	Metodología de muestreo de gases difusos en el horizonte edáfico.....	77
4.2.1	Técnicas de recopilación y análisis de datos.....	78
4.3	Medida de Flujo difuso de dióxido de Carbono.....	79
4.4	Medida de la actividad de gas radón (²²² Rn) y torón (²²⁰ Rn).....	81
4.5	Toma de muestras de gases en la atmósfera del suelo.....	82
4.6	Análisis de laboratorio.....	83
4.6.1	Determinación de la composición química del gas del suelo por micromatografía de gases.....	83
4.6.2	Determinación de la composición química e isotópica del gas del suelo por espectrometría de masas tipo cuadrupolar.....	83
4.6.3	Determinación de la composición isotópica del carbono ¹³ C/ ¹² C en el gas del suelo por espectrometría de masas de relaciones isotópicas.....	84
4.7	Análisis estadístico clustering: k-Means, DBSCAN, Genetic K-Means.....	85
4.7.1	Análisis estadístico-clásico: Método de Sinclair (1974).....	87
4.7.2	Análisis de Clustering convencional: K-Means.....	87
4.7.3	Análisis de Clustering basado en densidad: DBSCAN.....	87
4.7.4	Clustering optimizado: Genetic K-Means Clustering (GKMC).....	88

4.8	Software utilizado (Python, R, ArcGIS, QGIS).....	89
5.	Resultados.....	91
5.1	Determinación de umbrales de anomalía Geoquímica (método Sinclair).....	91
5.2	Origen del CO ₂ : Evidencia Isotópica e Interpretación mediante Modelos de Mezcla.....	106
5.3	Resultados geoquímicos de los gases del suelo.....	108
5.4	Del análisis univariable a la clasificación multivariable en el análisis geoquímico.....	109
5.5	Análisis de clustering multivariable en exploración geotérmica.....	111
5.5.1	Algoritmo K-Means (TKM).....	111
5.5.2	Algoritmo Genético de clustering K-Means (GKMC).....	116
5.5.3	Evolución de la Función Fitness en GKMC.....	120
5.5.4	Selección de Variables y Fundamentación Metodológica.....	124
5.5.5	Resultados y Estructura del Clustering.....	125
5.5.6	Estabilidad y Robustez del Clustering mediante GKMC	125
5.5.7	Visualización de la Estructura del Clustering mediante PCA.....	130
6.	Discusión.....	135
6.1	Interpretación Estructural y Espacial de los Clústeres GKMC.....	135
6.1.1	Clúster 0 — Anomalías Geoquímicas Profundas Controladas por Intersecciones de Fallas.....	135
6.1.2	Clúster 1 — Zonas Transicionales con Aporte Parcial de Gases Profundos.....	136
6.1.3	Clúster 2 — Fondo Geoquímico Regional y Estabilidad Estructural.....	136
6.2	Implicaciones para la Exploración y el Desarrollo del Modelo Conceptual.....	137
6.3	Correlación entre los Clústeres y Anomalías de Resistividad.....	138
6.4	Interpretación Geoquímica y Estructural de los Resultados de Clustering.....	140
6.5	Interpretaciones Alternativas de las Anomalías Geoquímicas.....	142
6.6	Control Geológico y Significado Estructural.....	142
6.7	Eficacia del Clustering mediante GKMC.....	144
6.8	Implicaciones para el Potencial Geotérmico.....	144
6.9	Evaluación Crítica de la Metodología.....	146
6.10	Comparación con otros sistemas geotérmicos.....	147
6.11	Consideraciones finales de la Discusión.....	148
7.	Conclusiones.....	149
7.1	Zonificación geoquímica discreta mediante clustering multivariable.....	149
7.2	Control estructural sobre la migración de fluidos.....	149
7.3	Anomalías geoquímicas sutiles pero significativas.....	149
7.4	Validación geofísica independiente de la zonificación geoquímica.....	150

7.5	Implicaciones para el potencial geotérmico.....	150
7.6	Próximos pasos en la investigación geotérmica.....	150
Referencias.....		152
Anexo A.....		167
1.	Mapas temáticos y perfiles geoquímicos de diferentes configuraciones evaluadas...167	
2.	Comparación empírica del algoritmo GKMC con otros métodos de clustering.....173	
2.1	Metodología.....	173
2.2	Resultados y análisis comparativo.....	174
2.3	Interpretación del Rendimiento.....	174
2.3.1	Rendimiento del Algoritmo GKMC.....	174
2.3.2	Limitaciones del K-Means Convencional.....	175
2.3.3	Rendimiento de DBSCAN y Clustering Jerárquico.....	175
2.3.4	Diferenciación respecto a trabajos previos.....	175
2.4	Conclusión.....	176
3.	Representación de la calidad de la asignación de cada muestra dentro del espacio multivariado.....	177
4.	Código Python del Algoritmo GKMC para parámetros CO ₂ , ²²² Rn, H ₂ /Ne, He/CO ₂ , CO ₂ /Ne, CH ₄ /CO ₂ y Ar total.....	178

Lista de Figuras

Figura 1. Modelo conceptual de un sistema geotérmico hidrotermal (Dickson y Fanelli, 2005).....	9
Figura 2. Principales áreas con potencial de explotación y uso de recursos geotérmicos (Bertani, 2015).....	10
Figura 3. Generación bruta de electricidad procedente de fuentes renovables, EU-28, 1990-2016 (Eurostat).....	11
Figura 4. Zonas de Tenerife con anomalías geotérmicas (IGME, 1984).....	15
Figura 5. Situación del sondeo TF-1 y perfil térmico (Igme-Involcan).....	16
Figura 6. Permisos de investigación geotérmica de Petratherm (Dirección General de Industria. Gobierno de Canarias).....	17
Figura 7. Mapa de anomalías térmicas de la isla de Tenerife (Involcan).....	18
Figura 8. Sondeos de MT realizados en el proyecto GEOTHERCAN (Petratherm-Involcan)....	18
Figura 9. Modelo Gráfico 3D mediante sondeos MT de la isla de Tenerife (Petratherm-Involcan).....	19
Figura 10. Modelo teórico de emplazamiento de un reservorio geotérmico con la zona conductora Superior (fuente: INVOLCAN).....	20
Figura 11. Ejemplo real de una sección MT de Tenerife donde se observa una posible zona atractiva para perforar (fuente: Petratherm-Involcan).....	20
Figura 12. Posicionamiento del sondeo TF-1 (1.060 m) sobre la sección W-E del modelo 3D de MT (Petratherm-Involcan).....	21
Figura 13. Situación de los Permisos de Investigación de recursos geotérmicos en la isla de Tenerife (D.G. de Industria 2025).....	22
Figura 14. Certificado de Publicación de Artículo en revista Geosciences	24
Figura 15. Marco geológico y geodinámico de las Islas Canarias (modificada de Carracedo et al., 1998).....	25
Figura 16. Mapa de las islas Canarias con la edad de las rocas más antiguas que se han datado del vulcanismo subaéreo (Modificado de Guillou et al., 2004).....	26
Figura 17. Génesis temporal de las islas Canarias a partir de un punto caliente (Carracedo, 2007).....	27

Figura 18. Perfil evolutivo del archipiélago canario (Carracedo, 2007).....	28
Figura 19. Mapa geológico simplificado de la isla de Tenerife. Sección geológica de la isla de Tenerife.....	30
Figura 20. Geología de las Islas Canarias, ITGM. (Anguita, Fuster et al. 2002).....	31
Figura 21. Mapa geológico simplificado de Tenerife (IGME, 2011).....	38
Figura 22. Dominio minero Garehagua.....	42
Figura 23. Diagrama de flujo de la metodología de la investigación.....	66
Figura 24. Gráfica Sinclair de poblaciones geoquímicas con concentración en Log10.....	69
Figura 25. Distribución de poblaciones geoquímicas simuladas en escala logarítmica: Población I (fondo); Población III (intermedia), y Población II (pico).....	73
Figura 26. Ubicación de los puntos de muestreo y estaciones MT. Piña-Varas et al. (2014)...	76
Figura 27. Localización geográfica y mapa geológico simplificado de la isla de Tenerife (modificado de (Ablay y Martí, 2000).	77
Figura 28. Esquema de la medida de flujo difuso de CO ₂ a través del método de la cámara de acumulación	79
Figura 29. Obtención de la pendiente de la curva medida del flujo difuso de CO ₂	80
Figura 30. Esquema idealizado de la cámara de acumulación, volumen de control de geometría regular.	81
Figura 31. Esquema de funcionamiento del sensor SARAD GmbH RTM 2010-2 para la medida de las actividades de radón y torón.....	82
Figura 32. Esquema de la toma de muestra de gas del suelo.....	83
Figura 33. Análisis de muestras de gas del suelo por espectrometría de masas de relaciones isotópicas (IRMS).....	84
Figura 34. Principales herramientas de software utilizadas en la exploración geotérmica y sus aplicaciones más relevantes, desde el análisis de datos y modelado hasta la visualización y generación de mapas.....	90
Figura 35. Diagrama de probabilidad acumulada tipo Sinclair para el flujo difuso de CO ₂	94
Figura 36. Diagrama de probabilidad acumulada (tipo Sinclair) para las concentraciones de CO ₂	94
Figura 37. Diagrama de probabilidad acumulada (tipo Sinclair) para las concentraciones de helio (He).....	95

Figura 38. Diagrama Sinclair de probabilidad acumulada de la actividad de ^{222}Rn en el suelo.	96
Figura 39. Mapa de concentración de CO_2 , en el área de estudio de Garehagua, basado en el análisis univariante utilizando el método de Sinclair (1974).....	98
Figura 40. Mapa de concentración de CH_4 , en el área de estudio de Garehagua, basado en el análisis univariante utilizando el método de Sinclair (1974).....	98
Figura 41. Mapa de concentración de helio (He) en gases del suelo del área de estudio del Dominio Minero Garehagua, elaborado mediante análisis univariante utilizando el método de Sinclair (1974).....	100
Figura 42. Mapa de concentración de H_2 , en el área de estudio de Garehagua, basado en el análisis univariante utilizando el método de Sinclair (1974).	100
Figura 43. Mapa de distribución espacial de cocientes geoquímicos seleccionados en gases del suelo del área de estudio del Dominio minero Garehagua: $\delta^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$	102
Figura 44. Mapa de distribución espacial del cociente geoquímico He/Ar en gases del suelo del área de estudio del Dominio Minero Garehagua.....	103
Figura 45. Mapa de distribución espacial del cociente CH_4/CO_2 en gases del suelo del área de estudio del Dominio Minero Garehagua).....	104
Figura 46. Mapa de distribución espacial del cociente H_2/Ar en gases del suelo del área de estudio del Dominio Minero Garehagua.	105
Figura 47. Diagrama de correlación entre $\delta^{13}\text{C}-\text{CO}_2$ (‰ vs. V-PDB) y el inverso de la concentración de CO_2 ($1/[\text{CO}_2]$, en ppm^{-1}) para los dominios mineros de Garehagua y Garehagua II.....	107
Figura 48. Evolución del índice Silhouette en función del número de clusters (k).	115
Figura 49. Esquema comparativo entre el algoritmo clásico K-Means y el enfoque híbrido Genetic K-Means Clustering (GKMC).....	136
Figura 50. Combinaciones de variables geoquímicas mejor clasificadas mediante el algoritmo GKMC, ordenadas según su índice Silhouette.....	120
Figura 51. Evolución de la función de aptitud (fitness) del algoritmo GKMC a lo largo de 200 generaciones.	122
Figura 52. Diagrama de flujo para el clustering multivariable y la interpretación de datos de gases del suelo.	123

Figura 53. Comparación de la estabilidad del clustering entre distintos conjuntos de datos.	127
Figura 54. Matriz de dispersión que muestra las correlaciones por pares entre ^{222}Rn (pCi/l), CO_2 (ppm) y He (ppm), basada en valores log-transformados y normalizados mediante z-score.....	128
Figura 55. Histogramas que muestran las distribuciones normalizadas ($\log_{10} + \text{z-score}$) de las concentraciones de helio (He), dióxido de carbono (CO_2) y radón (^{222}Rn).....	129
Figura 56. Proyección del Análisis de Componentes Principales (PCA) de los resultados optimizados del clustering mediante el algoritmo GKMC con un conjunto de variables seleccionadas: CO_2 , He, ^{222}Rn y la razón isotópica $\delta^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$	130
Figura 57. Proyección PCA de los resultados del clustering optimizado mediante el algoritmo GKMC, utilizando la combinación de variables: CO_2 (ppm), H_2/Ne , He/ CO_2 y CO_2/Ne	132
Figura 58. Distribución espacial de los 1.200 puntos de muestreo en los dominios mineros de Garehagua y Garehagua II, clasificados según su pertenencia a clústeres obtenidos mediante el algoritmo GKMC, utilizando los parámetros geoquímicos CO_2 , He, ^{222}Rn y $\delta^{13}\text{C}-\text{CO}_2$	134
Figura 59. Secciones de resistividad a múltiples profundidades superpuestas con puntos de clúster obtenidos mediante GKMC. Los paneles muestran cortes horizontales del modelo tridimensional de resistividad magnetotelúrica (MT) a cuatro niveles de elevación.....	139
Figura 60. Distribución espacial de los clústeres GKMC sobre el marco estructural. Mapa que muestra la localización de los puntos de muestreo de gases del suelo, codificados por colores según su pertenencia a los clústeres derivados del algoritmo GKMC.	143
Figura 61. Distribución espacial de los puntos de muestreo clasificados según su pertenencia a clústeres (basados en CO_2 , He, ^{222}Rn y $\delta^{13}\text{C}$), superpuestos sobre el marco estructural del rift sur de Tenerife.....	145

Lista de Figuras del Anexo A

Figura A1. Distribución espacial de los clusters geoquímicos y centros eruptivos en la zona del rift sur de Tenerife. Los puntos representan las muestras clasificadas por análisis de clustering multivariable (CO_2 , He, ^{222}Rn , $\delta^{13}\text{C}$).....	167
Figura A2. Superposición de los clusters geoquímicos sobre el mapa geológico de la zona de estudio en el rift sur de Tenerife.....	168
Figura A3. Matriz de dispersión (scatter matrix) de los cinco parámetros geoquímicos más relevantes, transformados logarítmicamente y estandarizados mediante puntajes Z (z-score).....	169
Figura A4. Distribuciones normalizadas de las concentraciones de gases nobles y volátiles para los distintos clusters geoquímicos identificados del contenido total de argón (Ar) y de dióxido de carbono (CO_2).....	170
Figura A5. Proyección bidimensional mediante análisis de componentes principales (PCA) de una combinación de parámetros seleccionada por el algoritmo de clustering genético K-Means (GKMC).....	171
Figura A6. Evolución de la función fitness del algoritmo GKMC a lo largo de 200 generaciones.....	171
Figura A7. Mapa de distribución espacial de los clusters geoquímicos resultantes de la mejor combinación del algoritmo GKMC, utilizando los parámetros CO_2 (ppm), CO_2/Ne y He (ppm).....	172
Figura A8. Evolución del índice de Silhouette en función del número de clusters (K).....	172
Figura A9. Rendimiento comparativo de los algoritmos de clustering utilizando métricas separadas.....	176
Figura A10. Representación geométrica de los componentes del coeficiente de Silhouette.	177

Lista de Tablas

Tabla 1. Zonas de interés geotérmico en el territorio español (IDAE).....	12
Tabla 2. Relevancia de los parámetros geoquímicos en la exploración geotérmica.....	56
Tabla 3. Resumen de las tendencias actuales en técnicas analíticas y modelización aplicadas a la exploración y gestión de sistemas geotérmicos.....	59
Tabla 4. Correspondencia entre valores de Z-score y probabilidad acumulada en una distribución normal estándar.....	71
Tabla 5. Categorías principales de la poblaciones geoquímicas.....	72
Tabla 6. Ventajas y limitaciones de método Sinclair (1974).....	74
Tabla 7. Resumen estadístico de los resultados analíticos de la concentración y flujo de gases del suelo medidos en la concesión minera de Garehagua.....	85
Tabla 8. Resumen las características clave de los algoritmos de clustering empleados.....	88
Tabla 9. Resumen comparativo de los tres clústeres geoquímicos identificados mediante el algoritmo GKMC en el área de estudio de Garehagua.....	132

Lista de Tablas del Anexo A

Tabla A1. Comparación de los rangos de razones molares de gases entre distintos sistemas geotérmicos seleccionados y el presente estudio.....	173
Tabla A2. Comparación del rendimiento de distintos algoritmos de clustering aplicados al conjunto de datos geoquímicos.....	174

Abreviaturas y Acrónimos

BP	Before Present. El “presente” se fija en el año 1950
CSIC	Consejo Superior de Investigaciones Científicas
CG	Cromatografía de Gases
DBSCAN	Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise
EGS	Enhanced Geothermal Systems (Sistemas Geotérmicos Mejorados)
EN	Potencial normal o potencial estándar de reducción de una semirreacción redox, medido frente al electrodo estándar de hidrógeno
ENADIMSA	Empresa Nacional Adaro de Investigaciones Mineras, S.A.
GEOTHERCAN	Proyecto de cooperación público-privada, coordinado por el ITER, con la participación de INVOLCAN, la Universidad de La Laguna (ULL), la Universidad de Barcelona (UB), la empresa Petratherm España S.L., y colaboraciones internacionales como la Universidad de Tokio.
GKMC	Genetic K-Means Clustering
HDR	Hot Dry Rock. Se refiere a grandes volúmenes de roca cristalina profunda en la corteza terrestre que están muy calientes pero prácticamente secos y sin fracturas naturales ni agua móvil
IOT	Sensores IoT (Internet of Things) son dispositivos electrónicos diseñados para recopilar datos del entorno físico
IR	Espectrofotómetro de infrarrojo
IRMS	Isotope Ratio Mass Spectrometer (Espectrómetro de Masas de Relaciones Isotópicas)
IRT	InfraRed Thermography (Termografía Infrarroja) o Imágenes de Radiometría Térmica
ITER	Instituto Tecnológico y de Energías Renovables
MS	Espectrometría de Masas
MT	Método Magnetotelúrico

MTOE	Millones de Toneladas Equivalentes de Petróleo (Million Tonnes of Oil Equivalent)
NDIR	Non-Dispersive Infrared (Infrarrojo No Dispersivo). Un espectrofotómetro NDIR o sensor NDIR es un dispositivo espectroscópico que se utiliza principalmente para la detección y cuantificación de gases como CO ₂ , CO, CH ₄ , entre otros
NP-HARD	Término de la teoría de la complejidad computacional que designa a los problemas que son, al menos, tan difíciles como los problemas más difíciles del conjunto NP (nondeterministic polynomial time)
PCA	Principal Component Analysis, (Análisis de Componentes Principales o ACP) es una técnica estadística multivariante utilizada para reducir la dimensionalidad de un conjunto de datos
PDC	Brocas PDC (Polycrystalline Diamond Compact) son herramientas de perforación avanzadas utilizadas principalmente en la industria del petróleo, gas y geotermia
RA	Razón isotópica entre ³ He/ ⁴ He, valor de referencia estándar medido en la atmósfera terrestre
SED	Sondeo Electromagnético en el Dominio del Tiempo
SOMS	Self-Organizing Maps, (Mapas Autoorganizados) son un tipo de red neuronal también se conocen como redes de Kohonen
SP	Método Magnetotelúrico
THMC	Térmico-Hidráulico-Mecánico-Químico. Los modelos THMC son una herramienta avanzada en geociencias, especialmente en geotermia, para simular y comprender el comportamiento del subsuelo y los reservorios geotérmicos bajo condiciones complejas.
TKM	Trimmed K-Means Clustering
UPM	Universidad Politécnica de Madrid
VEI	Índice de Explosividad Volcánica
VPDB	Vienna Pee Dee Belemnite, es el estándar internacional de referencia para la medición de relaciones isotópicas de carbono (¹³ C/ ¹² C)

1. Introducción

1.1 Relevancia de la geoquímica de gases en la exploración geotérmica

La geoquímica desempeña un papel esencial en la exploración geotérmica, ya que permite obtener información directa sobre la composición química de los fluidos subterráneos y su interacción con las formaciones geológicas circundantes (Nicholson, 1993). Esta disciplina constituye una herramienta clave para evaluar la viabilidad y el potencial energético de los recursos geotérmicos en una región determinada, permitiendo optimizar las estrategias de prospección y reducir significativamente los riesgos técnicos y económicos asociados a la perforación exploratoria profunda.

Los estudios geoquímicos permiten detectar la presencia de fluidos geotérmicos a través del análisis de la composición química e isotópica de los gases difusos emitidos por el suelo, así como de los gases disueltos en aguas subterráneas. Parámetros como el flujo difuso de CO₂ en el suelo, las concentraciones de helio (He), hidrógeno (H₂), metano (CH₄), oxígeno (O₂) y nitrógeno (N₂), junto con la caracterización isotópica del carbono (¹³C/¹²C) y del argón (³⁶Ar, ³⁸Ar, ⁴⁰Ar), permiten inferir la dinámica de los fluidos en profundidad, identificar estructuras de permeabilidad vertical y evaluar el grado de conexión entre las fuentes magmáticas y la superficie.

Las técnicas geoquímicas, ampliamente utilizadas en la investigación geotérmica y la vigilancia volcánica, se centran en la cuantificación de emisiones gaseosas visibles y difusas. La exploración de nuevos sistemas geotérmicos exige extender el análisis a zonas sin manifestaciones superficiales evidentes, lo que implica el uso de prospecciones de gases del suelo que permitan detectar concentraciones anómalas de gases hidrotermales (Bertrami et al., 1990; Finlayson, 1992; Voltattorni et al., 2010). El enriquecimiento de ciertas especies químicas o sus razones molares puede reflejar zonas de permeabilidad vertical elevada asociadas a procesos hidrotermales de alta temperatura en profundidad.

La identificación de anomalías geoquímicas en los gases del suelo es una etapa crítica en la exploración geotérmica, ya que estas pueden estar asociadas a zonas de alta permeabilidad que actúan como conductos preferenciales para el ascenso de fluidos hidrotermales. Estudios realizados en las islas de Tenerife y Gran Canaria han demostrado que el análisis de la distribución espacial de CO₂, He y H₂ constituye una herramienta eficaz para localizar estructuras de desgasificación profunda, a menudo relacionadas con sistemas hidrotermales ocultos que no presentan manifestaciones superficiales visibles como fumarolas o fuentes termales (Rodríguez et al., 2015; Padrón et al., 2012; Dionis et al., 2015).

La exploración geotérmica moderna requiere la integración de múltiples técnicas y disciplinas — entre ellas la geoquímica, la geofísica, la geología estructural y la ingeniería geotérmica— con el objetivo de caracterizar con precisión los reservorios geotérmicos ocultos. Esta caracterización incluye la estimación del tamaño, forma y profundidad del sistema, así como la determinación del tipo de fluido, su temperatura, composición química y potencial de producción energética (Fridriksson et al., 2016).

En este contexto, el uso de herramientas estadísticas avanzadas se ha vuelto indispensable para el tratamiento e interpretación de grandes volúmenes de datos geoquímicos. Uno de los métodos más utilizados es el propuesto por Sinclair (1974), basado en el análisis de distribuciones log-normales acumulativas, que permite separar poblaciones geoquímicas y establecer umbrales (thresholds) que definen el límite entre los valores de fondo y los valores anómalos. Esta técnica permite identificar muestras potencialmente influenciadas por procesos hidrotermales profundos, separándolas de aquellas afectadas por procesos superficiales biogénicos o por la atmósfera.

Estudios recientes en las Islas Canarias han aplicado el método de Sinclair al análisis de parámetros como el flujo difuso de CO₂, la actividad del ²²²Rn, las concentraciones de He y H₂, y los valores isotópicos del $\delta^{13}\text{C}$ -CO₂. Los resultados han mostrado correlaciones espaciales entre las zonas de mayor contribución volcánico-hidrotermal y estructuras geológicas enterradas, interpretadas como fallas, diques o domos volcánicos, que actúan como vías de permeabilidad vertical (Martín Lorenzo et al., 2024; Rodríguez et al., 2021; Dionis et al., 2015).

Además, la integración de datos geoquímicos y geofísicos ha permitido realizar interpretaciones más robustas. En particular, la combinación de estudios de emisión difusa con modelos de resistividad eléctrica obtenidos mediante tomografía magnetotelúrica 3D ha permitido identificar zonas con bajos valores de resistividad asociadas a la presencia de arcillas de alteración hidrotermal y/o zonas de ascenso de fluidos calientes (Piña-Varas et al., 2014). Estas zonas se corresponden, en muchos casos, con áreas donde se han detectado anomalías geoquímicas significativas, reforzando la validez de la integración multidisciplinar.

Otro avance metodológico clave ha sido la aplicación de algoritmos de análisis de conglomerados o clustering, como el método K-Means y su variante optimizada mediante algoritmos genéticos (Genetic K-Means Clustering, GKMC). Estos algoritmos permiten agrupar puntos de muestreo en función de su similitud multivariada, utilizando tanto concentraciones como razones molares normalizadas (por ejemplo, He/CO₂, He/Ne, CO₂/CH₄), lo cual facilita la identificación de zonas geoquímicamente homogéneas con posibles aportes endógenos (Ghezelbash et al., 2020; Dionis et al., 2015; Di Giuseppe et al., 2018).

En este enfoque, el uso de la métrica silhouette permite evaluar de forma cuantitativa la calidad de los agrupamientos obtenidos, optimizando así el número de clusters y las combinaciones de parámetros utilizados. Esta metodología ha sido aplicada con éxito en las licencias mineras de Garehagua, Abeque y Guayafanta (Tenerife), donde se han identificado agrupamientos con características geoquímicas indicativas de aportes volcánico-hidrotermales profundos, confirmados por datos isotópicos y ratios de gases nobles (Rodríguez et al., 2021).

La combinación de técnicas estadísticas como el análisis Sinclair y los métodos de clustering ha demostrado ser eficaz para reducir la incertidumbre en la selección de sitios para perforación exploratoria profunda. Estas herramientas permiten delimitar con mayor precisión las zonas más prometedoras, optimizando así el diseño de campañas de exploración y reduciendo significativamente los costes y riesgos asociados a la inversión en proyectos geotérmicos (Bedrosian et al., 2007).

Además, la integración de estos datos en modelos geotérmicos tridimensionales ha permitido estimar temperaturas a profundidad y evaluar la geometría de los reservorios. En este sentido, el análisis combinado de ratios isotópicos ($^3\text{He}/^4\text{He}$, $\delta^{13}\text{C}-\text{CO}_2$) y composiciones molares ha permitido inferir la presencia de fuentes magmáticas activas, zonas de ebullición y flujos ascendentes, elementos clave en la caracterización de sistemas geotérmicos de alta entalpía.

Un aspecto adicional a considerar es que, en contextos volcánicos como el de las Islas Canarias, el proceso de desgasificación difusa ocurre de manera continua y silenciosa, incluso en ausencia de manifestaciones visibles. Por ello, el monitoreo geoquímico no solo cumple una función exploratoria, sino también una función de vigilancia volcánica a largo plazo (Fridriksson et al., 2016).

En resumen, la presente investigación tiene como objetivo demostrar que la aplicación sistemática de técnicas estadísticas avanzadas como el método de Sinclair y los algoritmos de clustering en combinación con herramientas de análisis geoquímico e isotópico detallados permite mejorar significativamente la identificación de anomalías geoquímicas asociadas a sistemas geotérmicos ocultos. El uso de análisis multivariantes y técnicas de clasificación proporciona un marco metodológico robusto para detectar estructuras de alta permeabilidad, estimar flujos de desgasificación profunda y caracterizar sistemas hidrotermales de manera más precisa.

Este enfoque multidisciplinario no solo mejora la eficacia de los procesos de exploración, sino que también contribuye al desarrollo de modelos predictivos más fiables, fundamentales para el diseño de estrategias sostenibles de explotación de recursos geotérmicos en regiones volcánicas activas.

Cabe destacar que estos estudios pueden contribuir no solo al conocimiento científico del potencial geotérmico de Canarias, sino también a la planificación estratégica de una transición energética basada en fuentes renovables locales.

1.2 Recopilación de información científica de interés para la exploración geotérmica

La exploración geotérmica moderna se apoya en un cuerpo de conocimiento multidisciplinar que combina la geología estructural, la geoquímica, la geofísica aplicada y las ciencias computacionales. En este contexto, la recopilación y análisis crítico de información científica

previa no solo resulta imprescindible para justificar la viabilidad técnica de una campaña de prospección, sino también para delimitar los métodos más adecuados y establecer comparaciones con contextos análogos. Este epígrafe presenta una revisión estructurada del conocimiento científico relevante que fundamenta la presente investigación, con énfasis en estudios recientes sobre geogases, técnicas geoquímicas y estadísticas aplicadas, y ejemplos de aplicación en entornos volcánicos activos.

El objetivo final de la exploración geotérmica es localizar, delimitar y caracterizar un sistema geotérmico oculto en términos de su morfología, estructura, temperatura, tipo de fluido, mineralogía asociada y potencial energético explotable (Cumming, 2009). Esta tarea implica no solo la recolección de datos directos de campo, sino también la aplicación de modelos teóricos que integren señales geoquímicas, geofísicas y geológicas.

El modelo conceptual clásico de un sistema geotérmico de alta entalpía contempla una fuente de calor (frecuentemente magmática), un reservorio geológico permeable que contiene el fluido geotérmico, una cobertura impermeable que impide su escape libre, y una red de fracturas o estructuras permeables que permiten el ascenso del fluido hacia la superficie. Estas estructuras son los principales objetivos de las prospecciones superficiales.

La geoquímica de gases del suelo ha demostrado ser una herramienta particularmente eficaz para detectar la presencia de reservorios geotérmicos profundos, especialmente en zonas sin manifestaciones hidrotermales visibles. El análisis de gases como CO₂, He, H₂, CH₄, N₂ y ²²²Rn en el suelo permite identificar zonas de permeabilidad vertical aumentada, donde los gases de origen profundo alcanzan la superficie a través de fallas, diaclasas o zonas de debilidad estructural.

Uno de los principales avances en esta línea es el desarrollo de mapas de desgasificación difusa, que permiten representar espacialmente la intensidad del flujo de gases como el CO₂. Este gas es el segundo más abundante en los sistemas volcánico-hidrotermales, después del vapor de agua, y su concentración y flujo difuso están relacionados con el aporte magmático e hidrotermal en profundidad.

Asimismo, el helio (He) es un trazador geoquímico ideal por su naturaleza inerte, baja solubilidad y alta movilidad. Su origen profundo (mantélico y radiogénico) lo convierte en un excelente indicador de procesos de desgasificación ligados a reservorios geotérmicos. Su análisis combinado con las razones isotópicas ³He/⁴He permite discriminar entre componentes atmosféricos, radiogénicos y magmáticos.

La detección de anomalías geoquímicas requiere del uso de herramientas estadísticas que permitan distinguir valores atípicos de los derivados de la variabilidad natural. En este sentido, el método de Sinclair (1974) se ha consolidado como una técnica robusta para definir umbrales geoquímicos y clasificar los datos en poblaciones de fondo, intermedias y anómalas. Este método se basa en el análisis de distribuciones log-normales y diagramas de probabilidad acumulada, y ha sido aplicado exitosamente en contextos de exploración geotérmica y minera.

Complementariamente, el uso de técnicas multivariantes como el análisis de conglomerados (clustering) permite clasificar los puntos de muestreo en función de múltiples variables simultáneamente. Algoritmos como el K-Means y su versión optimizada mediante algoritmos genéticos (Genetic K-Means Clustering, GKMC) han demostrado ser eficaces para revelar patrones ocultos en los datos, agrupar muestras con similitudes geoquímicas y reducir el ruido estadístico inherente al muestreo extensivo.

A nivel internacional, la aplicación de estas técnicas ha generado resultados notables en regiones volcánicas como Islandia, Japón, Costa Rica, México y Nueva Zelanda. En todos estos casos, la combinación de estudios geoquímicos de superficie con modelos geofísicos de resistividad ha permitido detectar estructuras de alta permeabilidad, estimar temperaturas a profundidad y reducir significativamente los costes de exploración (Fridriksson et al., 2016; Hernández et al., 2012).

En el caso particular de las Islas Canarias, diversas campañas realizadas entre 2011 y 2021 en Tenerife y Gran Canaria han permitido caracterizar áreas como Garehagua, Abeque, Guayafanta y Atidama mediante la integración de análisis geoquímicos, isotópicos y magnetotelúricos. Estas campañas han identificado zonas de desgasificación difusa con composiciones isotópicas que indican un origen magmático profundo y han correlacionado dichas anomalías con zonas de baja resistividad detectadas en modelos 3D, interpretadas como domos volcánicos cubiertos por arcillas de alteración hidrotermal.

La incorporación de técnicas geofísicas como la tomografía de resistividad eléctrica y la magnetotelúrica ha potenciado notablemente la capacidad de exploración indirecta. Estas técnicas permiten detectar capas conductoras asociadas a arcillas de alteración, zonas de acumulación de fluidos calientes o estructuras geológicas enterradas. La combinación con datos geoquímicos ha demostrado que las zonas con mayor emisión de He o CO₂ suelen coincidir con las regiones de menor resistividad, lo cual refuerza la interpretación conjunta como herramienta de validación cruzada.

En Tenerife, por ejemplo, los modelos 3D obtenidos por Piña-Varas et al. (2014) muestran una capa de baja resistividad en el sur de la isla, asociada a zonas donde se han identificado emisiones significativas de gases del suelo y composiciones isotópicas de CO₂ y He compatibles con fuentes magmáticas profundas.

Entre las innovaciones más relevantes en los últimos años se encuentran:

- **Uso de sensores miniaturizados** para monitoreo continuo de gases del suelo, lo cual permite registrar variaciones temporales y correlacionarlas con señales sísmicas o deformación del terreno.
- **Aplicación de modelos de aprendizaje automático** para análisis predictivo, empleando redes neuronales y random forest para detectar patrones complejos en grandes conjuntos de datos multivariados.

- **Cartografía probabilística** mediante simulación geoestadística (Sequential Gaussian Simulation, SGS), para estimar la distribución espacial de parámetros geoquímicos con incertidumbre cuantificada.
- **Estudios de trazadores isotópicos múltiples**, como δD , $\delta^{18}O$, $^3He/^4He$ y $\delta^{13}C-CO_2$, que permiten mejorar la discriminación entre fuentes meteóricas, magmáticas y biogénicas, esencial para definir modelos hidrológicos integrados.

En síntesis, la información científica recopilada durante los últimos años sobre la exploración geotérmica de superficie revela una convergencia creciente hacia enfoques integradores, multitécnicos y basados en datos. El uso de geoquímica de gases como herramienta principal, apoyado por técnicas estadísticas robustas y geofísica avanzada, ha permitido optimizar la caracterización de reservorios ocultos en zonas volcánicas, como las presentes en la isla de Tenerife.

La experiencia adquirida en el estudio de las licencias mineras del sur de Tenerife —con especial énfasis en el caso de Garehagua— ofrece un marco de referencia sólido para la aplicación de estas metodologías en futuras campañas de exploración. Esta tesis se construye, por tanto, sobre un cuerpo de conocimiento científicamente contrastado, con el objetivo de profundizar en el análisis multivariado de datos geoquímicos, mejorar los métodos de detección de anomalías y contribuir al desarrollo sostenible de la energía geotérmica en regiones volcánicas.

Entre los estudios recientes sobre exploración geotérmica de superficie, aparte de los desarrollados en Canarias en los últimos años y que abarcaremos en el epígrafe 1.5, podemos destacar:

1. México – Campo geotérmico de Cerro Prieto and the Las Tres Vírgenes: Arango-Galván et al. (2015) aplicaron un enfoque combinado de geoquímica de gases del suelo y tomografía eléctrica en el campo geotérmico de Los Humeros. Evaluaron las emisiones de CO_2 , CH_4 y H_2 , y las correlacionaron con zonas de alteración hidrotermal mapeadas geológicamente. Identificaron alineamientos estructurales activos que coincidían con anomalías geoquímicas y eléctricas, sugiriendo zonas de ascenso de fluidos calientes.
2. Italia – Campo geotérmico de Larderello: Chiodini et al. (2007, 2008) realizaron estudios extensivos sobre emisión difusa de CO_2 y radón en el campo de Larderello, aplicando simulaciones geoestadísticas (sequential Gaussian simulation) y mapas probabilísticos para evaluar la distribución espacial de las emisiones. Identificaron correlaciones directas entre las emisiones de CO_2 y la posición de estructuras tectónicas profundas. Estos estudios fueron pioneros en mostrar el valor predictivo de la cartografía de desgasificación difusa para identificar zonas de interés.
3. Japón – Kusatsu-Shirane y otros sistemas volcánicos: Ohba, et al (2019) llevaron a cabo estudios geoquímicos en el volcán Kusatsu-Shirane para monitoreo y exploración geotérmica. Integraron CO_2 difuso, isotopía de carbono y temperatura de suelos, correlacionando estos

parámetros con la evolución del sistema volcánico. Su enfoque ha sido ampliamente replicado en sistemas con comportamiento inter-eruptivo.

4. Islandia – Zona de Hengill y Hellisheiði: Arnórsson et al. (2014) analizaron las emisiones geoquímicas en zonas activas de Islandia combinando datos geoquímicos de superficie con modelado de reservorios. Resaltaron el papel de los gases nobles (He, Ar) y el CO₂ como trazadores de zonas de ebullición y mezcla de fluidos. También aplicaron balances de masas y razones isotópicas para evaluar la interacción fluido-roca.

5. Chile – Sistema hidrotermal de Alpehue en región de los Andes centrales: Tardani et al (2024) exploraron zonas sin manifestaciones termales visibles en la región andina central, mediante muestreos de gases difusos en suelo y análisis isotópicos. Demostraron que aún en zonas sin indicios termales superficiales se pueden detectar señales geoquímicas sutiles que indican actividad hidrotermal profunda. Su trabajo reforzó el uso de $\delta^{13}\text{C}$ y ratios CO₂/He como herramientas discriminantes.

6. Indonesia – Volcanes activos de Java y Sumatra: Purnomo et al. (2015) realizaron estudios geoquímicos comparativos en múltiples volcanes indonesios. Evaluaron la relación entre los flujos de CO₂, H₂S y H₂ y las tasas de deformación del terreno y sismicidad. Sugirieron que la emisión geoquímica difusa puede ser usada no solo como herramienta de exploración, sino también como sistema de alerta temprana.

Los estudios científicos desarrollados en los últimos años sobre la exploración geotérmica de superficie han consolidado un enfoque interdisciplinar, donde la geoquímica de gases del suelo, la estadística avanzada y la geofísica de resistividad convergen para mejorar la caracterización de reservorios ocultos.

Estos trabajos han validado la efectividad de herramientas como el método de Sinclair para la clasificación de poblaciones geoquímicas. La aplicación de algoritmos de clustering (K-Means y GKMC) para interpretar datos multivariantes. La integración con modelos geofísicos 2D/3D para validar la presencia de estructuras permeables y el uso de trazadores isotópicos para inferir la composición y origen de los fluidos. Además, estos estudios muestran que no es necesaria la existencia de manifestaciones termales visibles para justificar una exploración geotérmica eficaz, lo que amplía significativamente el abanico de áreas prospectables.

1.3 Justificación y contexto

La energía geotérmica es referida como la energía en forma de calor natural almacenado en el interior de la tierra. El calor total contenido en la Tierra se estima del orden de 1.26×10^{31} J y en la corteza terrestre se calcula en 5.4×10^{27} J (Dickson y Fanelli, 2013). El flujo de calor en la tierra tiene dos contribuciones. El primero corresponde al 70%, causado por el calor generado a partir de isótopos radiactivos en la corteza continental, específicamente el Uranio [²³⁸U, ²³⁵U], el Torio [²³²Th] y el Potasio [⁴⁰K]. El segundo corresponde al 30% que está relacionado con el flujo de calor desde el núcleo y el manto hacia la superficie (Stober y Bucher, 2013). El flujo de calor

promedio que se da a través de la corteza terrestre es del orden de 65 mW/m^2 y 101 mW/m^2 en suelo marino (MIT, 2006; Santoyo-Gutiérrez y Torres-Alvarado, 2010; Stober y Bucher, 2013). La conductividad térmica de las rocas de los sistemas geotérmicos es baja, por lo que se requiere mucho tiempo para agotar este recurso geotérmico (Gutiérrez y Torres-Alvarado, 2010), por lo tanto, la geotermia se considera como una fuente natural de energía renovable y casi ilimitada si se explota de manera racional y sostenible.

El inicio de la geotermia fue a principios del siglo XIX en Larderello, Italia, donde se extraía ácido bórico evaporando el agua caliente de los manantiales. En 1827, Francesco Larderel inventó un proceso de evaporación, usando la energía de la misma agua caliente. Después, se transformó la energía del vapor en energía mecánica, mediante un sistema rudimentario de bombeo del agua con inyección de vapor. En 1904, Piero Ginori Conti construyó el primer generador eléctrico accionado por vapor geotérmico. Actualmente, la geotermia ha alcanzado una mayor madurez tanto económica como tecnológica y con bajas emisiones a la atmósfera (bajas emisiones de gases de efecto invernadero), la cual se utiliza para (Lund y Boyd, 2016): (i) generación de energía eléctrica; (ii) clima de edificaciones o viviendas mediante bombas de calor geotérmicas (principal uso directo de la geotermia); (iii) calentamiento en invernaderos; (iv) criaderos de peces; (v) usos industriales (p. ej., secado de madera, harina de pescado o productos agrícolas); y (vi) balneología y turismo.

La Figura 1, muestra el modelo conceptual de un sistema geotérmico hidrotermal el cual involucra una fuente de calor primaria, que en la mayoría de los campos geotérmicos es una cámara magmática, en la cual el magma proviene del manto y no alcanza a llegar a la superficie, quedando alojado a profundidades entre 5 y 10 km, en donde se calientan grandes volúmenes de roca y los fluidos confinados en el reservorio (principalmente fluidos pluviales y magmáticos), los cuales dan origen a la formación de los sistemas geotérmicos con temperaturas mayores a los $250 \text{ }^{\circ}\text{C}$ (Stober y Bucher, 2021). La generación de energía eléctrica requiere entonces transformar y aprovechar la energía térmica de los fluidos, por lo tanto, se tiene un proceso de conversión de energía térmica (de los fluidos), energía mecánica (el paso de los fluidos en fase vapor o mezcla de vapor y agua a las turbinas) a energía eléctrica (generada en las turbinas y disponible para su uso).

En campos geotérmicos y zonas con potencial geotérmico, el gradiente geotérmico es mayor que el gradiente normal (valor promedio de $33 \text{ }^{\circ}\text{C/km}$) y los fluidos (vapor y/o agua) se pueden encontrar a temperaturas entre $200 \text{ }^{\circ}\text{C}$ y $300 \text{ }^{\circ}\text{C}$, a profundidades entre 2 km a 3 km, incluso, se han reportado sitios, como el campo geotérmico de Kakkonda en Japón en donde las temperaturas alcanzan los $500 \text{ }^{\circ}\text{C}$ (Muraoka et al., 1998, Santoyo-Gutiérrez y Torres-Alvarado, 2010; Lund y Boyd, 2016).

Estas altas temperaturas son indicativas de un intenso flujo de calor desde el interior de la Tierra, lo que favorece la generación y acumulación de energía geotérmica aprovechable para aplicaciones energéticas y también ofrece información valiosa para la comprensión de procesos geológicos profundos.

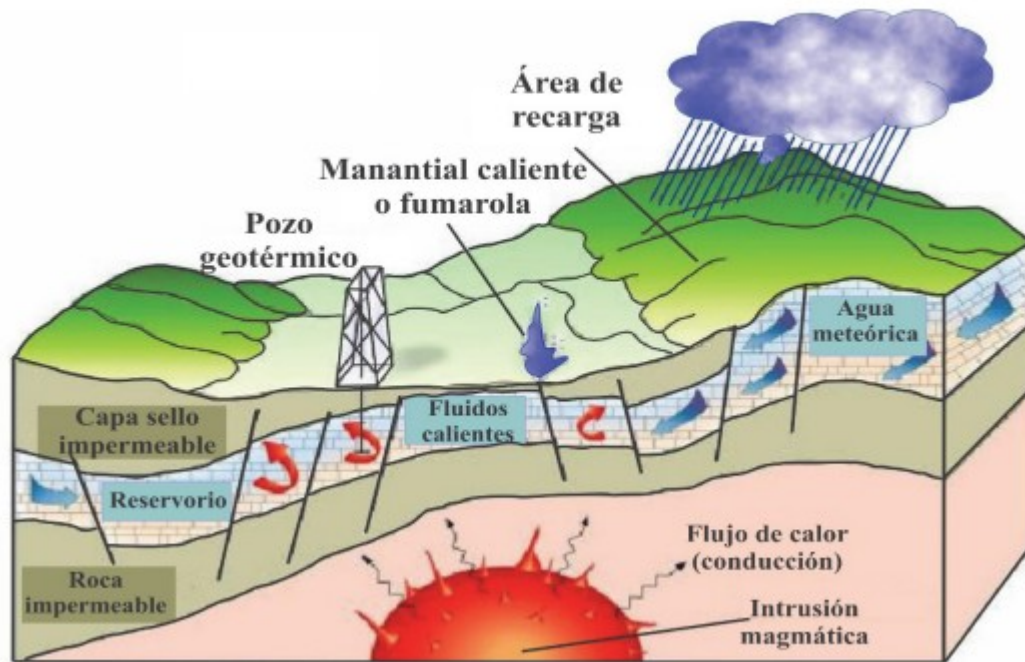


Figura 1. Modelo conceptual de un sistema geotérmico hidrotermal (Dickson y Fanelli, 2005)

La Agencia Internacional de Energía (IEA, 2016), reportó para el 2014 que la generación de energía eléctrica en el mundo fue de 13,700 Mtoe, de los cuales el 81.1% (11,111 Mtoe) se generó a partir de combustibles fósiles (31.3% hidrocarburos, 28.5% carbón y 21.2% gas natural), el 4.8% (658 Mtoe) nuclear, el 13.8% (1,894 Mtoe) a partir de fuentes de energía renovables (10.1% de biocombustibles, 2.4 de hidroeléctrica y 1.3% geotermia, solar, eólica y marea) y el 0.3% (37 Mtoe) de otras fuentes no reconocidas, siendo los principales países de mayor consumo y demanda energética China, EE.UU., India, Rusia y Japón.

La situación de crisis energética que se vive actualmente a escala mundial, la exigencia por parte de los organismos gubernamentales de una drástica reducción de las emisiones de CO₂ y los avances tecnológicos, llevan a la necesidad de localizar fuentes alternativas de energía respetuosas con el medio ambiente. La geotermia, por su carácter renovable, su elevado potencial y como energía con capacidad de suministro permanente, se plantea como una opción con fuerte impulso y elevadas garantías. La capacidad de energía geotérmica instalada en el mundo en 2015 es de 12.729 MW, aprovechándose fundamentalmente para la generación de electricidad. En la Figura 2 se muestran los países que en el año 2015 generaban electricidad a partir de fuentes geotérmicas (Bertani, 2016). Como se puede observar, los cinco países con mayor capacidad instalada son Estados Unidos, Filipinas, Indonesia, México y Nueva Zelanda.

Por otro lado, la explotación de la energía geotérmica para aplicaciones caloríficas, se encuentra en un estado más avanzado en Europa y países como Rusia y Japón. Además, el desarrollo de tecnologías más eficientes y económicas está facilitando la expansión de proyectos geotérmicos a nivel global, promoviendo un crecimiento sostenido que contribuye significativamente a la diversificación energética y a la mitigación del cambio climático.

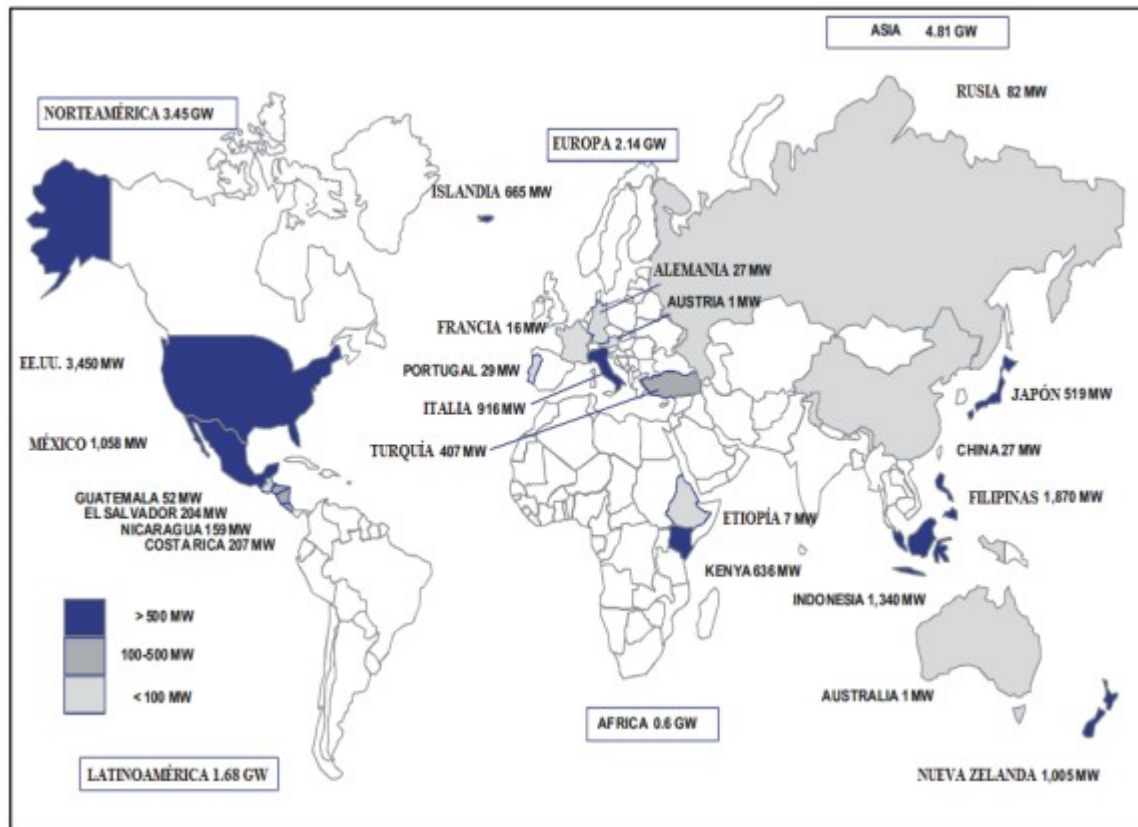


Figura 2. Principales áreas con potencial de explotación y uso de recursos geotérmicos (Bertani, 2015).

En cuanto a energía geotérmica, actualmente 51 países en el mundo generan electricidad a partir de sistemas hidrotermales (Figura 2) y 71 países utilizan la geotermia tanto para generación de electricidad como para usos directos [principalmente bombas de calor] (Bertani, 2016; Lund y Boyd, 2016). La capacidad instalada de 1995 al 2015 fue de 6,823 MW y 12,729 MW respectivamente, esto representa un incremento de 5,906 MW en los últimos 20 años (un aumento del 87%). En cuanto a generación efectiva de energía eléctrica, de 1995 al 2015 fue de 38,022 GWh y 73,689 GWh respectivamente, lo que representa un incremento de 35,667 GWh en los últimos 20 años (un incremento del 94 %).

La Figura 3 muestra la evolución de la generación bruta de electricidad procedente de fuentes renovables en Europa entre 1990 y 2016. Como se puede observar, la energía hidroeléctrica es la que ha generado el mayor porcentaje de electricidad a lo largo de este período. A partir del año 2000 han comenzado a despuntar otras energías renovables como la eólica o la solar.

Este crecimiento en las tecnologías eólica y solar se relaciona directamente con el desarrollo de políticas europeas de apoyo a las energías renovables, como la Directiva 2009/28/CE sobre el fomento del uso de energía procedente de fuentes renovables, que fijó objetivos vinculantes para los Estados miembros. Además, avances tecnológicos y una notable reducción de costes han favorecido su expansión. La energía eólica ha mostrado un crecimiento sostenido, superando en algunos países a la hidroeléctrica en capacidad instalada, mientras que la solar ha experimentado una rápida aceleración a partir de 2010, sobre todo en el sur de Europa. Este proceso se ha visto

reforzado recientemente por el Pacto Verde Europeo, que impulsa la transición energética hacia un modelo descarbonizado y resiliente.

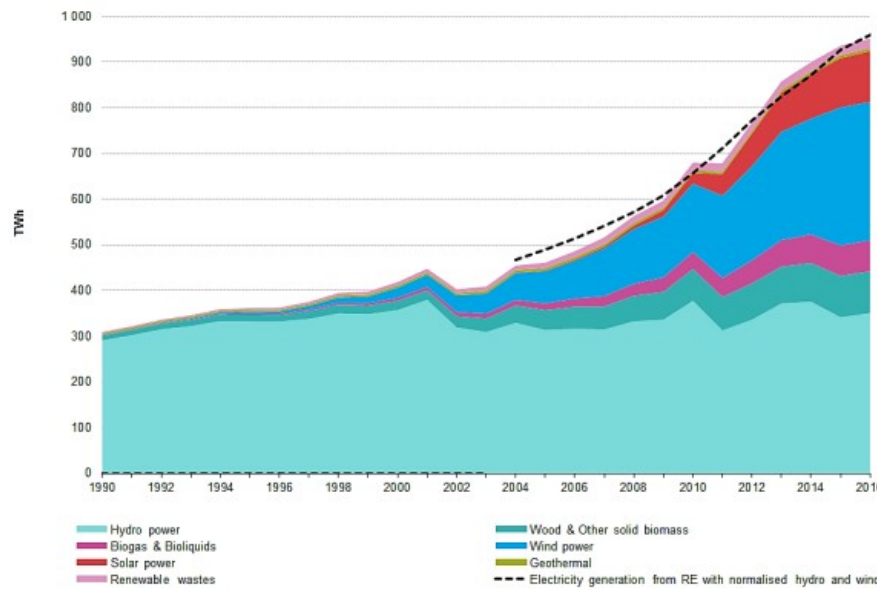


Figura 3. Generación bruta de electricidad procedente de fuentes renovables, EU-28, 1990- 2016 (Eurostat).

1.4 Situación de la geotermia en España

El potencial geotérmico existente en España es similar o incluso superior al de sus países vecinos, sin embargo, el nivel de desarrollo de la geotermia es muy inferior al de países como Alemania y Francia. Las primeras investigaciones sobre energía geotérmica en España se realizan tras la crisis energética de 1973. Dichas investigaciones fueron realizadas por el Instituto Geológico y Minero de España (IGME), que elaboró en 1975 el primer avance de lo que hoy constituye el Inventario General de Manifestaciones Geotérmicas en el Territorio Nacional, en el que se aborda la evaluación del potencial geotérmico del subsuelo. Hasta mediados de los años ochenta, la fase de investigación desarrollada por el IGME y las principales empresas mineras y eléctricas del país, se concentró en la delimitación de zonas en las que se localizan de recursos geotérmicos clásicos. El uso de los recursos geotermales en España es bastante atractivo. En la Tabla 1 se presenta una síntesis de las principales zonas de interés geotérmico en España.

Los estudios realizados en los años 70 sobre los recursos geotérmicos en España llevaron al planteamiento de varios proyectos basados en el uso de la energía geotérmica para aplicaciones relacionadas con la climatización a pequeña escala, a partir de la utilización fluidos con elevada salinidad a profundidades del orden de los 2 km. Las primeras explotaciones de recursos geotérmicos en España comenzaron en 1979, donde la mayoría de los recursos aprovechados fueron de baja entalpía (baja temperatura). Sin embargo, la rentabilidad económica de los proyectos desarrollados no fue suficiente en comparación con la obtenida a partir de otras fuentes de energía, por lo que la mayoría de los proyectos quebraron. El desarrollo de la actividad geotérmica se paralizó por la deficiente planificación y gestión de los proyectos de

aprovechamiento debido al desconocimiento de las características del recurso y por planteamientos empresariales y financieros inadecuados.

Baja Temperatura ($T < 100^{\circ}\text{C}$)	ALMACENES SEDIMENTARIOS PROFUNDOS	Cuenca del Tajo: Madrid Cuenca del Duero: León, Burgos y Valladolid Área Prebética e Ibérica: Albacete y Cuenca
	ZONAS INTRA- MONTAÑOSAS Y VOLCÁNICAS	Galicia: zonas de Orense y Pontevedra Depresiones catalanas: Vallés, Penedés, La Selva y Ampurdán Depresiones internas de las Cordilleras Béticas: Granada, Guadalix, Baza, Cartagena, Mula, Mallorca Canarias: Isla de Gran Canaria.
Media Temperatura ($100^{\circ}\text{C} < T < 150^{\circ}\text{C}$)		Cordilleras Béticas: Murcia, Almería, Granada Cataluña: Vallés, Penedés, La Selva y Olot Galicia: áreas de Orense y Pontevedra Pirineo Oriental: Zona de Jaca-Sabiñánigo
Alta Temperatura ($T > 150^{\circ}\text{C}$)		Canarias: Tenerife, La Palma y Lanzarote

Tabla 1. Zonas de interés geotérmico en el territorio español (IDAE)

En los últimos 10 años, este panorama ha cambiado. La energía geotérmica se ha convertido en una novedosa fuente de energía renovable con un gran potencial. Un gran porcentaje de este nuevo recurso se centra en la explotación de recursos geotérmicos de muy baja y baja entalpía, que junto con el desarrollo de instalaciones de bombeo de calor, es óptima para climatización y calefacción a nivel residencial e industrial. Asimismo, los sectores convencionales de alta y media temperatura han experimentado un desarrollo sustancial, evidenciado por el creciente número de iniciativas centradas en la exploración, caracterización y transferencia de conocimiento geotérmico.

1.5 Antecedentes de la exploración geotérmica en Canarias

El archipiélago canario es la única región del territorio nacional que cuenta con recursos geotérmicos de alta temperatura ($>150^{\circ}\text{C}$) gracias a la presencia de vulcanismo activo. Sin embargo, las particularidades de su génesis estructural, el tipo de vulcanismo, su estadio evolutivo y el régimen de explotación de sus recursos hídricos, configuran un escenario diverso en cada una de las islas que requiere enfoques de investigación particulares y específicos en cada caso. La investigación geotérmica presente en Canarias, se ha centrado en las islas de Lanzarote, Tenerife, Gran Canaria y La Palma, mientras que El Hierro, Fuerteventura y la Gomera han quedado fuera del objetivo de reconocimiento inicial.

Las áreas con actividad geotérmica suelen presentar manifestaciones superficiales como fumarolas, fuentes termales y emisiones anómalas de gas y calor. Aunque en Canarias estas

manifestaciones no son tan evidentes como en otros sistemas volcánicos insulares, las nuevas tecnologías de prospección geoquímica y geofísica permiten identificar sistemas hidrotermales ocultos en el subsuelo. En los últimos años, tanto el sector público como el privado han renovado su interés en la energía geotérmica en Canarias (Evans et al., 2020). Se han implementado metodologías avanzadas como el modelado numérico, la tomografía sísmica y magnetotelúrica 3D, así como análisis geoquímicos de alta resolución para reducir la incertidumbre en la fase de perforación profunda.

Los primeros trabajos científicos relacionados con la exploración geotérmica en Canarias fueron los elaborados por el CSIC (Grupo de Volcanología del Museo de Ciencias Naturales de Madrid) a principios de los años 70, centrándose en la isla de Lanzarote. Posteriormente, y debido a la primera crisis del petróleo en 1973 y la elaboración del primer Plan Energético Nacional (PEN) en el año 1974, tiene lugar el primer paso político para introducir el concepto de energías renovables en España. A partir de ese momento, el dinero público para prospección geotérmica se canaliza a través del Instituto Geológico y Minero de España (IGME) y la Empresa Nacional Adaro de Investigaciones Mineras (ENADIMSA), perteneciente al antiguo Instituto Nacional de Industria (INI). Muchos de los trabajos realizados por estos dos organismos, contaron con el apoyo del CSIC, mediante la firma de convenios de colaboración específicos para cada proyecto. Los trabajos se centraron, principalmente, en las islas de Lanzarote, Gran Canaria, Tenerife y La Palma. A continuación, se enumeran cronológicamente, los trabajos elaborados por dichas organizaciones (*Manual de Geotermia de Canarias; Documento 1: Estado de conocimiento*):

- 1974-76: Inventario nacional de manifestaciones geotérmicas.
- 1977: Evaluación del potencial geotérmico de la isla de Lanzarote y selección de anomalías en las Islas Canarias.
- 1978: Sondeo geotérmico Lanzarote-1.
- 1979: Prospección de energía geotérmica en Gran Canaria (Fase preliminar).
- 1981: Estudio geotérmico de las Montañas de Fuego (Lanzarote) por métodos magnetotelúricos y electromagnéticos.
- 1981: Estudio del gradiente geotérmico en zonas anómalas de Gran Canaria (Sondeos S-1 y S-2).
- 1982-84: Prospección geofísica y geoquímica de las posibilidades geotérmicas de las islas de Tenerife y La Palma.
- 1983: Informe del trabajo de investigación del área geotérmica del Teneguía (isla de La Palma) mediante termometría subterránea.
- 1984-86: Prospección geotérmica de la caldera de las Cañadas del Teide (Tenerife): volcanología, geoquímica y vuelo en IRT.
- 1987: Investigación geotérmica de las Islas Canarias y evaluación de recursos y reservas Geotérmicas en España.
- 1990-93: Investigación de la anomalía térmica de Timanfaya (Lanzarote) ("Shallow HDR geothermal field in Lanzarote -Canary Islands- Potential evaluation and heat extraction tests").

- 1991-93: Investigación geotérmica en el área central de la isla de Tenerife y realización de un sondeo termométrico en una zona anómala detectada mediante las primeras campañas de geofísica magnetotelúrica (MT) y geoquímica.

Posteriormente a los trabajos citados, la investigación geotérmica experimentó un fuerte descenso y sólo unos pocos proyectos en materia de recursos geotérmicos se mantuvieron activos desde 1994 a 2006. Fue en este año cuando la empresa australiana Petratherm, llega a España con el fin de desarrollar la energía geotérmica tanto en la península como en el archipiélago Canario. En el 2007, dicha empresa firma un convenio con el Instituto Tecnológico y de Energías Renovables (ITER) para realizar estudios conjuntos sobre geotermia en Canarias. Es en esta etapa, cuando la entidad Petratherm obtiene cuatro permisos de exploración, tres en Tenerife y uno en Gran Canaria para estudios de teledetección e interpretación geo-estructural, campañas geoquímicas y campañas de sondeos de geofísica magnetotelúrica. En el 2010, el Servicio de Minas de la Dirección General de Industria y Energía del Gobierno de Canarias otorgó otros 4 permisos de investigación en Tenerife los cuales fueron renovados en junio de 2013.

Junto con Lanzarote, la isla de Tenerife ha sido la beneficiaria de la mayor cantidad de inversiones en prospección geotérmica. Su estadio evolutivo, la magnitud de sus eventos volcánicos, la diferenciación del volcanismo reciente y la información térmica, geoquímica y geológica que proporcionan sus más de 1.000 galerías, generalmente radiales al complejo central del Teide, con más de 1.680 km perforados, la hacen especialmente interesante bajo el punto de vista prospectivo. El interés geotérmico ha avanzado de manera paralela al conocimiento geovolcánico, que ha sido impulsado mayoritariamente por el CSIC y por Universidades, tanto españolas como extranjeras, así como por los estudios del Consejo Insular de Aguas de Tenerife en lo referente a la hidrogeología de la isla.

La década de los 80 fue la que concentró mayores inversiones del Plan Energético Nacional (PEN) en Tenerife, a través básicamente del IGME. Cada técnica nueva, geofísica o geoquímica, que aparecía en el ámbito de la geotermia se aplicaba en la caldera del Teide. Los resultados geofísicos (eléctrica, dipolos, SEDT, gravimetría, vuelo IRT, MT, etc.) tanto de las muchas campañas del IGME, como los de las Universidades y CSIC, toparon con el importante inconveniente que es la escarpada topografía, por lo que no se puede medir donde se quiere sino donde se puede, afectando a los resultados por falta de densidad de puntos.

En 1984, un estudio volcanológico de la caldera del Teide encargado por el IGME al CSIC y realizado por los profesores V. Araña y F. Barberi apuntan ya a la existencia de una cámara magmática post-caldera somera, emplazada hipotéticamente a una cota entre nivel de mar y unos 2 km bajo él. Por la distribución de los centros de emisión de productos magmáticamente diferenciados y suponiendo que provienen todos de la misma cámara, los autores suponen que debería estar alineada en dirección NW-SE y tener una sección horizontal de, por lo menos, 20 km².

Por otra parte, los estudios geoquímicos de las fumarolas del Teide (gases e isótopos) llevados a cabo por el IGME en esa época permitieron evaluar la temperatura de esa cámara en 400 °C y

una presión de 200-300 atm, compatibles con la descripción geológica precedente. Las fumarolas están compuestas por un 70% V de vapor de agua y un 30% V de gas, siendo el CO₂ el predominante (90%V). El vapor de agua de las fumarolas es de origen superficial, procedente de acuíferos colgados en zona no saturada y vaporizados a 135°-155°C. La temperatura de las fumarolas (85°C) es la que corresponde al punto de vaporización a una altura de 3.718 m (Albert. J. F. et al.; 1990).

En 1990, posteriores estudios geoquímicos y un modelo matemático ajustaron las condiciones teóricas de la cámara a una temperatura de $430 \pm 50^\circ\text{C}$, un radio (supuesta esférica) de 2 km, un volumen de 30 km³ y el techo de la cámara situado a nivel de mar. De manera paralela, el estudio geoquímico de varios centenares de galerías llevados a cabo por el IGME en esa época, permitió delimitar cuatro zonas anómalas en la isla donde se superponen una serie de indicadores geotérmicos (T^a, SiO₂, volátiles, gases, equilibrios termodinámicos minerales, etc).

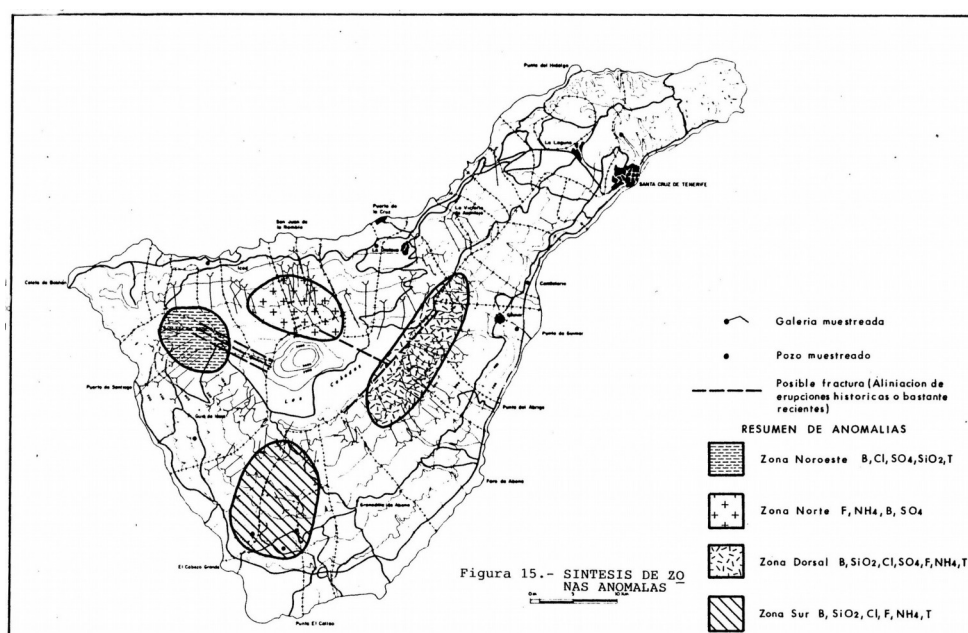


Figura 4. Zonas de Tenerife con anomalías geotérmicas (IGME, 1984)

Los trabajos en Tenerife culminan en 1993 con la ejecución de un sondeo (TF-1) financiado con la ayuda de la Unión Europea, de 1.060 m de profundidad, situado en el límite de la caldera con la dorsal NW (Figura 5). El sondeo finalizó con una temperatura de fondo de pozo de 56 °C, con un gradiente medio de 48°C/km. El resultado más interesante lo constituye el hecho de que en los últimos 160 m de sondeo, el gradiente asciende rápidamente a un valor de 94 °C/km.

Esta anomalía térmica en profundidad podría estar asociada a una zona de fracturación o a una intrusión magmática reciente que actuaría como fuente de calor, lo cual refuerza el interés geotérmico de la región. Aunque no se alcanzaron temperaturas de reservorio típicas de sistemas de alta entalpía, el marcado incremento del gradiente térmico en el tramo final abre la posibilidad de que a mayor profundidad existan condiciones más favorables para el desarrollo de recursos geotérmicos explotables. Estos datos han sido fundamentales para redefinir los modelos estructurales y térmicos del subsuelo de Tenerife e impulsar nuevas campañas de exploración en las dorsales volcánicas.

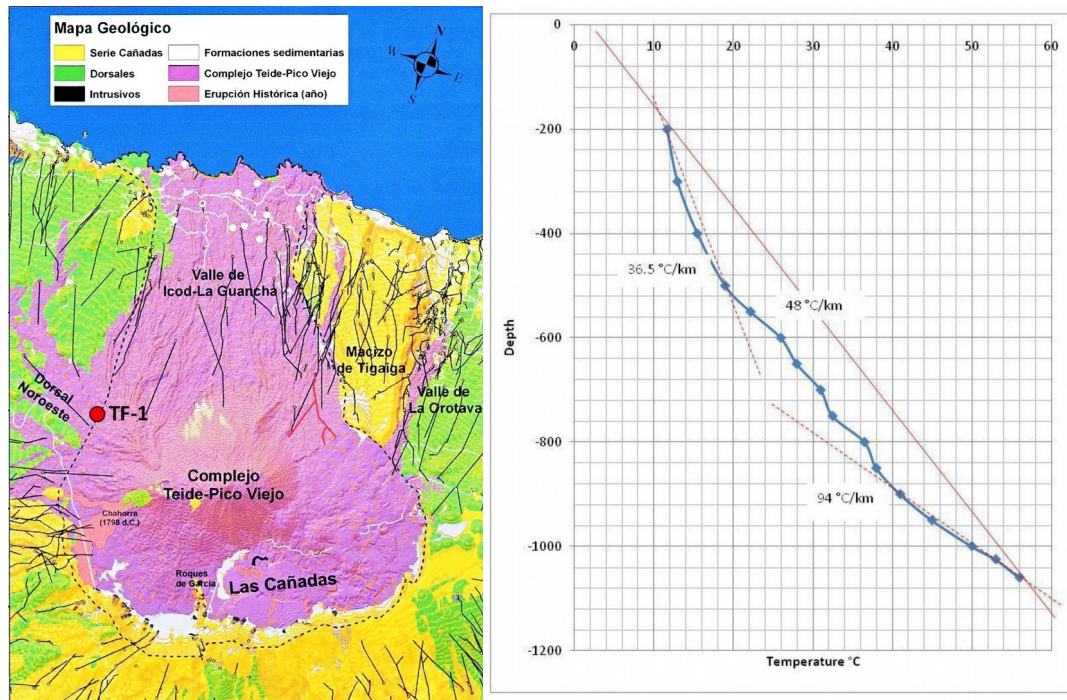


Figura 5. Situación del sondeo TF-1 y perfil térmico (Igme-Involcan)

La aparición en la escena geotérmica de la empresa hispano-australiana Petratherm España, conlleva un cambio radical en la perspectiva con que se contempla el futuro de la geotermia en España y, sobre todo en Canarias, al retomar los proyectos realizados anteriormente y abordar un estudio sistemático con grandes posibilidades de futuro. Sus primeros trabajos directos de MT complementarios de los realizados con anterioridad e interpretados conjuntamente, la contratación de trabajos de geoquímica al ITER, la aparición y colaboración del ITER-INVOLCAN como actor significativo en la tarea investigadora, y la financiación del proyecto GEOTHERCAN, marcan un hito en la investigación de la geotermia canaria.

Posteriormente, el proyecto TERMOVOLCAN (2018-2021), también financiado por el Gobierno español e integrado por ITER, INVOLCAN, IGME, UB y la Agencia Insular de la Energía de Tenerife (AIET), amplió las investigaciones a las islas de Tenerife, Gran Canaria y La Palma. Este proyecto profundizó en los estudios geofísicos y geoquímicos para evaluar con mayor precisión los recursos geotérmicos de alta entalpía.

Si a todo lo referido se suma el hecho de que en estos años aparece una destacada producción científica por parte de universidades españolas y extranjeras en la volcanología y la geofísica de las islas: nuevas dataciones absolutas, avances en el conocimiento de los mecanismos eruptivos, estudios geofísicos 3D (tomografía del comportamiento de las ondas P al atravesar la isla, MT, gravimetría, SP, etc), puede concluirse que esta última década ha sido una de las más prolíficas en el avance del conocimiento de las islas.

Las principales conclusiones con implicaciones geotérmicas son (diversos autores):

- Se confirma la existencia de 16 erupciones félsicas (generalmente fonolitas) en el complejo Teide-Pico Viejo durante los últimos 8.000 años, siendo las más recientes las de Roques Blancos (1.790 BP) y Montaña Reventada (900 BP), casi todas con magnitudes VEI: 4 y 5.

- Determinadas tomografías sísmicas apuntan la existencia de una cámara magmática situada entre 7 y 9 km bajo el nivel del mar y otra más superficial a 1-4 km bajo la misma referencia.
- Los estudios vulcanológicos admiten necesariamente la existencia de una o más cámaras someras en las que se genera el magma riolítico. Mediante estudios petrológicos se llega a calcular sus parámetros termodinámicos y se concluye que la temperatura eruptiva fue de 850-900 °C, mientras la profundidad adopta dos patrones: la cámara somera que alimentó las erupciones centrales del Teide estaría a una profundidad de unos 5 km bajo la superficie y las que alimentaron a los flancos, a solo 1-2 km de profundidad.
- Tanto los resultados de las investigaciones de los años 80-90 como los de los últimos 15 años, convergen en suponer la existencia de una o varias cámaras magmáticas someras de naturaleza félsica situadas entre el nivel de mar y 4 km bajo él.

Por otra parte, el ITER-INVOLCAN lleva a cabo un exhaustivo trabajo de geoquímica de las fumarolas del Teide mediante su monitorización periódica, de la cuantificación de sus emanaciones difusas en función del tiempo (1997-2011) y dirige la ejecución de varias tesis doctorales sobre estos temas así como de la hidrogeología y geoquímica de las galerías del acuífero de las Cañadas. Se pone de manifiesto que la emisión media de CO₂ en el Teide es de 198 t/día y el de vapor de agua de 1.555 t/día. La temperatura del sistema mediante geotermometría gaseosa se establece en 235 °C. Todo lo expuesto conlleva una equivalencia en potencia térmica de 57 MW, solamente referido al cráter apical del Teide.

La entrada de Petratherm en la investigación geotérmica de la isla de Tenerife con el apoyo científico del INVOLCAN y en el contexto del programa de investigación GEOTHERCAN, con los cuatro permisos de investigación solicitados (Figura 6) motiva un considerable avance del conocimiento geoquímico y geofísico de la isla. Los permisos se solicitan en base a los mapas de anomalías definidas por el IGME en 1984 (Figura 4) y al mapa de anomalías térmicas de las galerías de la isla (Figura 7).



Figura 6. Permisos de investigación geotérmica de Petratherm (D.G. de Industria. Gobierno de Canarias)

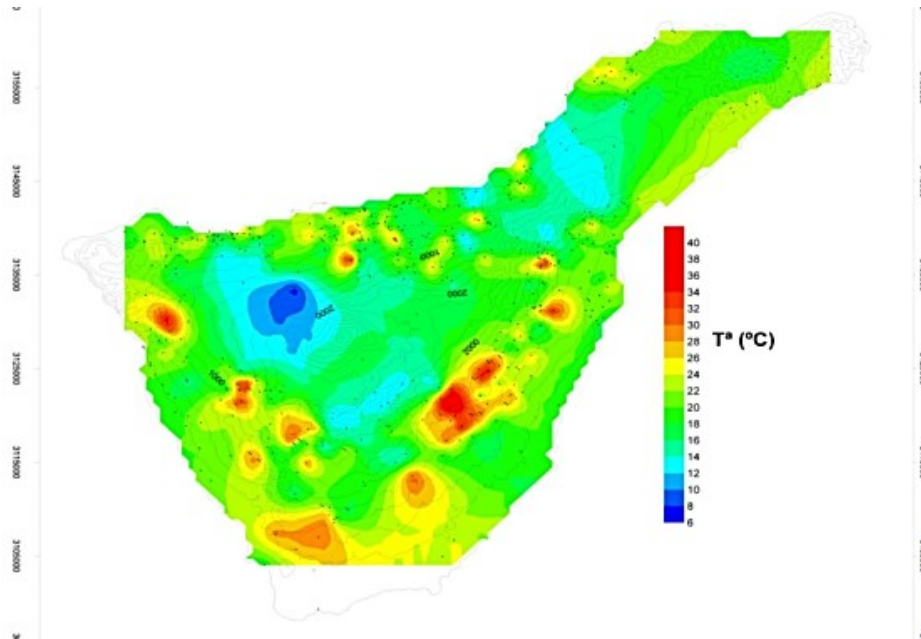


Figura 7. Mapa de anomalías térmicas de la isla de Tenerife (Involcan)

Se realizaron exhaustivos estudios geoquímicos de gases difusos y magnetotéluricos en las concesiones mineras: Abeque, Berolo, Guayafanta y Garehagua. Las investigaciones llevadas a cabo por Rodríguez et al. (2015) clasificaron estas concesiones según su potencial geotérmico, destacando la concesión de Garehagua, situada en la dorsal sur de la isla, como la zona con mayor potencial. Como complemento se aborda el estudio geofísico de la parte central de la isla mediante una campaña de 233 sondeos electromagnéticos. De ellos, 129 puntos corresponden a los realizados por el IGME en 1987 y 1991, 81 sondeos son realizados por Petratherm en 2009 y 23 adicionales por Geomodels (Universidad de Barcelona-IGME) (Figura 8).

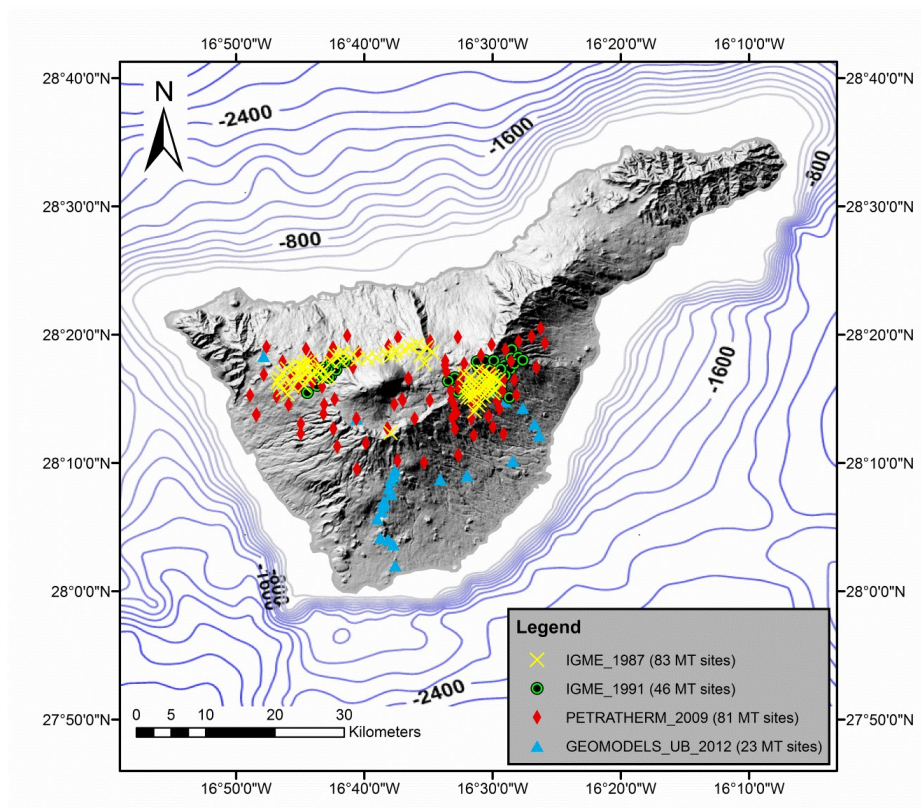


Figura 8. Sondeos de MT realizados en el proyecto GEOTHERCAN (Petratherm-Involcan)

Los estudios de Rodríguez et al. (2015) revelaron anomalías geoquímicas en la superficie de la concesión de Garehagua, las cuales fueron corroboradas mediante un modelo de resistividad 3D. Este modelo, desarrollado a partir de datos de 47 estaciones magnetoteléuricas —nueve de Piña-Varas et al. (2014) y 38 de Rodríguez et al. (2015)—, permitió identificar la presencia de una capa de baja resistividad ($<10 \Omega\text{m}$), interpretada como el tapón arcilloso del sistema geotérmico. Además, se observó una correlación inversa entre el grosor de esta capa y la concentración de gases no reactivos como el helio (He), indicando la existencia de discontinuidades de permeabilidad en el subsuelo.

El resultado final del estudio de MT es la construcción de un modelo 3D que permite seccionar la isla en los planos que se deseen, con el fin de estudiar la evolución de las anomalías eléctricas en cualquier dirección espacial, perfectamente georreferenciadas (Figura 9).

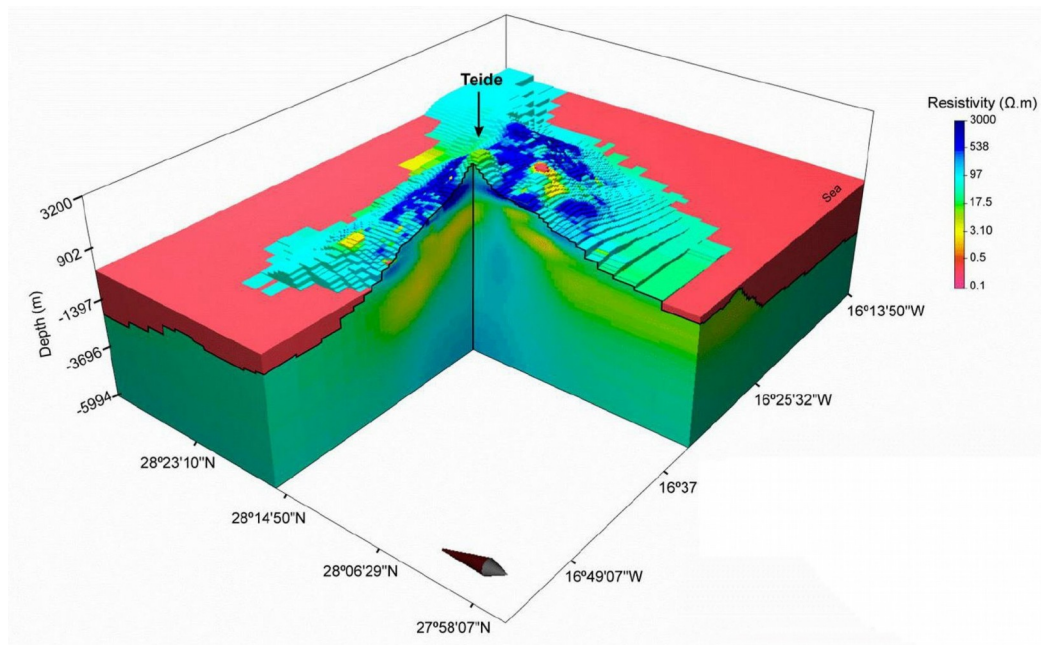


Figura 9. Modelo 3D mediante sondeos MT de la isla de Tenerife (Petratherm-Involcan)

Con esta información ya disponible, teóricamente pueden buscarse las estructuras subterráneas adecuadas para la implantación de los primeros sondeos de reconocimiento. Los sistemas geotérmicos suelen estar recubiertos por un “cap-rock” conductor debido a una especial alteración hidrotermal como el ejemplo representado en la Figura 10. La Figura 11 es una sección MT real de la isla de Tenerife producto de esta modelización, que adjuntamos como ejemplo de estructura idónea para perforar. En este tipo de secciones, la identificación de zonas de baja resistividad asociadas a capas de alteración arcillosa, situadas sobre cuerpos más resistivos potencialmente permeables y calientes, permite priorizar áreas para la perforación con mayor fiabilidad y menor incertidumbre geológica.

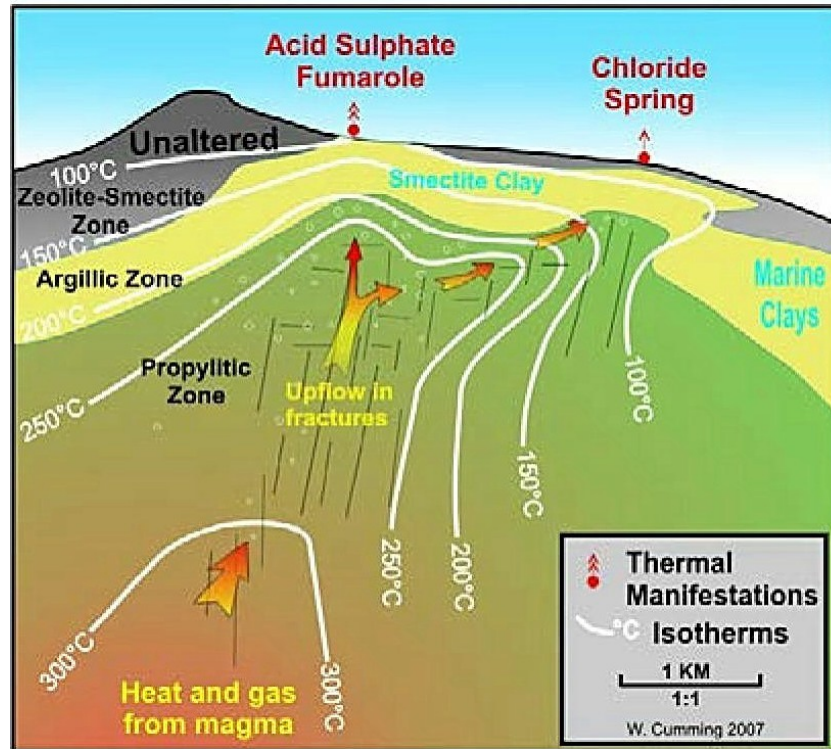


Figura 10. Modelo teórico de emplazamiento de un reservorio geotérmico con la zona conductora superior (INVOLCAN)

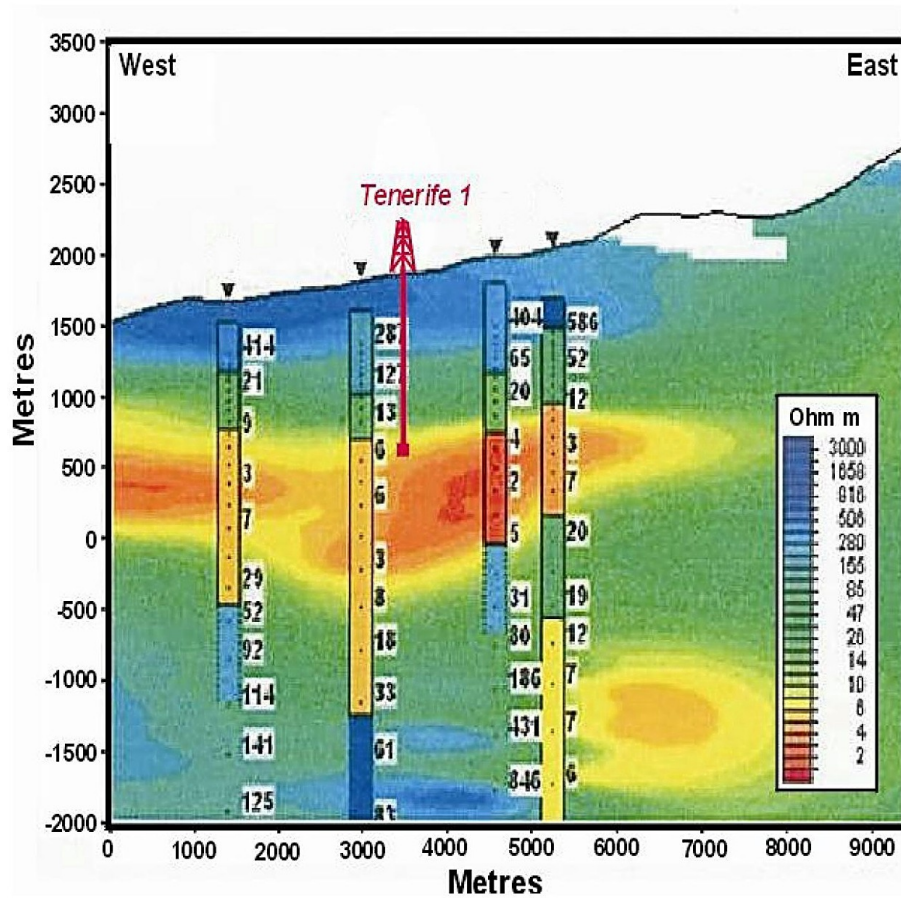


Figura 11. Ejemplo real de una sección MT de Tenerife donde se observa una posible zona atractiva para perforar (fuente: Petrathem-Involcan)

De la misma manera, si se superpone la correspondiente sección vertical del modelo 3D de MT al sondeo TF-1, se observa que se quedó corto en su diseño y que se justifica el fuerte incremento de gradiente que se observó en sus 160 m finales al entrar en el conductos impermeable (Figura 12)

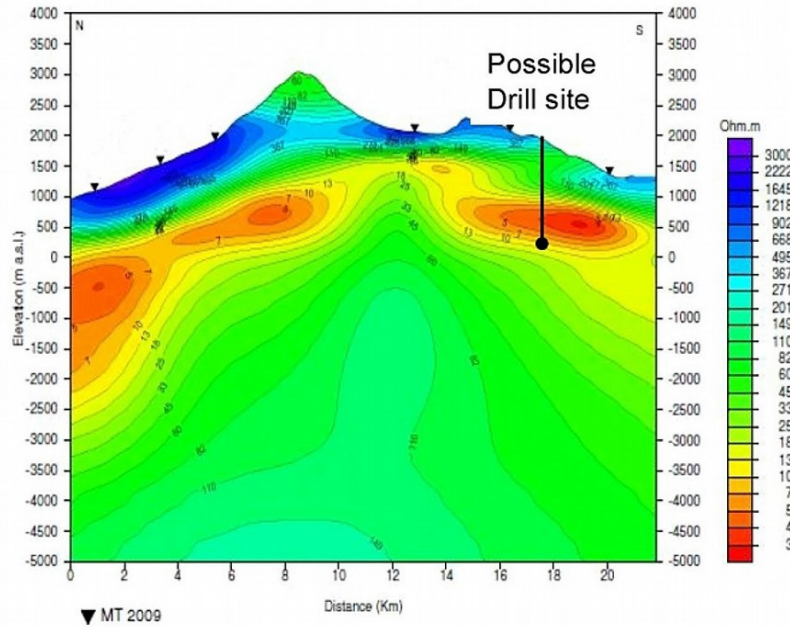


Figura 12. Posicionamiento del sondeo TF-1 (1.060 m) sobre la sección W-E del modelo 3D de MT (Petratherm-Involcan)

Tenerife, junto con Lanzarote, son las islas más avanzadas en cuanto a conocimiento geotérmico se refiere. Esta modelización 3D de las campañas de MT resulta fundamental para la construcción de un modelo conceptual de la isla, pues permite determinar la situación y profundidad de las potenciales estructuras sello de los almacenes geotérmicos en caso de existir. A partir de estos resultados y de los obtenidos con las muchas técnicas prospectivas empleadas, solo queda elaborar un modelo conceptual teórico general y validarlo bajo el punto de vista matemático mediante un código numérico adecuado que sea capaz de simular los resultados obtenidos en la investigación. Finalizada esta fase, se estará ya en condiciones de marcar los emplazamientos de los primeros sondeos profundos de reconocimiento.

En las islas de Gran Canaria y de La Palma también se otorgaron otros permisos, aunque en la isla de La Palma no se llegaron a desarrollar trabajos. Hasta la realización del proyecto Geothercan (2011-2015), los trabajos de exploración geotérmica realizados en Canarias han consistido fundamentalmente en la recopilación y análisis de información ya existente para la búsqueda de recursos geotérmicos, selección y definición de los permisos de investigación minera donde se realizarán los trabajos de exploración geotérmica con el objeto de realizar prospecciones geoquímicas de gases y volátiles en el ambiente superficial de las zonas de estudio seleccionadas, y el desarrollo de prospecciones geofísicas, fundamentalmente magnetotélúrica, para evaluar el potencial geotérmico existente en el subsuelo. El abastecimiento energético de las Islas Canarias depende en la actualidad en más de un 90% de fuentes de combustible fósiles, constituyendo la investigación geotérmica una actuación estratégica, más si cabe en el ámbito

insular, que podría reducir de manera significativa esta dependencia energética y sus niveles de emisiones de CO₂.

Actualmente en la isla de Tenerife, una vez resuelto por la Dirección General de Industria del Gobierno de Canarias el concurso de los Derechos mineros para investigación de recursos geotérmicos de la Sección D), de la Ley de Minas, de acuerdo con la Resolución de la Dirección General de Industria n.º 669/2023, de 14 de diciembre (BOE n.º 310/2023 y BOC n.º 3/2024, de fechas 28 de diciembre de 2023 y 4 de enero de 2024 respectivamente), relativa a la selección de las mejores ofertas de permisos de investigación de derechos mineros de la sección D) de la Ley de Minas (recursos geotérmicos) <https://www.gobiernodecanarias.org/industria/temas/minas/> han sido otorgados los siguientes Permisos de Investigación seleccionadas en el Concurso de Tenerife, su extensión en cuadrículas mineras (cm) y las entidades interesadas:

- 1) Jaira, 77 c.m. (EGC, S.L.)
- 2) Tahatan, 72 cm. (EGC, S.L.)
- 3) Tikahit, 137 cm. (EGC, S.L.)
- 4) Retamar, 71 c.m. (ITER, S.A.)
- 5) Bco. Hondo Fr. 1 (22 cm) y Fr. 2 (9 cm) (ITER, S.A.)
- 6) Hoya Negra Fr. 1 (55 cm) y Fr. 2 (10 cm) (ITER, S.A.)

Actualmente se encuentran trabajando en las labores de campo de acuerdo con los planes de investigación aprobados para los diferentes permisos de investigación, de acuerdo con la ubicación y extensión de los citados permisos (Figura 13).

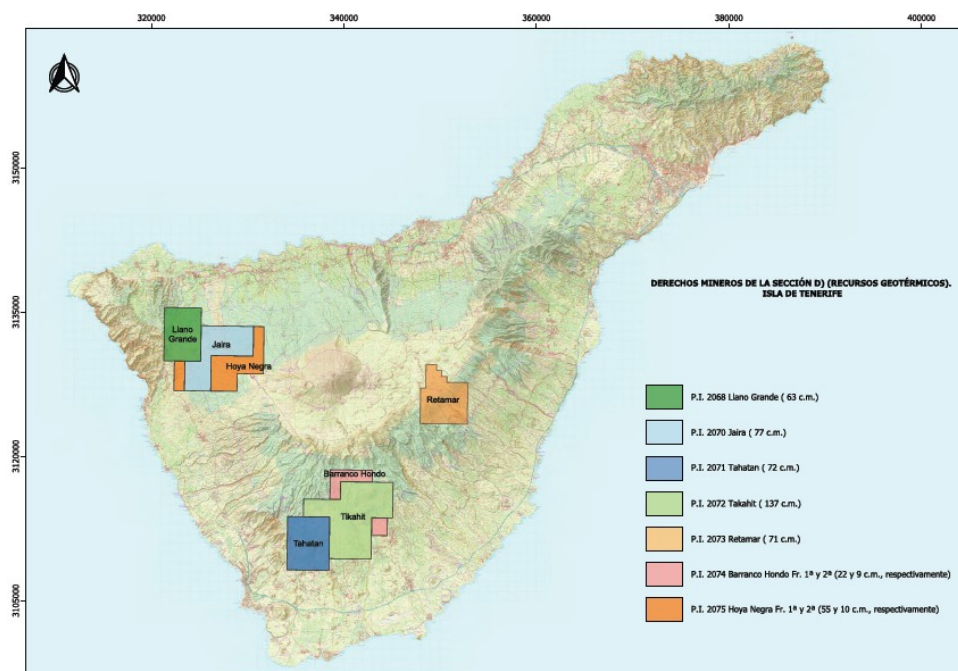


Figura 13. Situación de los Permisos de Investigación de recursos geotérmicos en la isla de Tenerife (Dirección General de Industria, Gobierno de Canarias)

En este contexto, el presente trabajo se enmarca en la exploración avanzada de recursos geotérmicos en Tenerife, integrando herramientas de Minería de Datos (Data Mining), algoritmos de Clustering y geoquímica de gases. Esta metodología busca optimizar la exploración superficial y mejorar la predicción de las zonas con mayor potencial geotérmico, con el fin de contribuir al desarrollo sostenible y eficiente de este recurso en Canarias. Además, pretende reducir la incertidumbre previa a la perforación, minimizando los riesgos técnicos y económicos asociados a la etapa exploratoria.

1.6 Objetivo de la Tesis.

El objetivo general de esta tesis es mejorar la caracterización de sistemas geotérmicos ocultos en contextos volcánicos mediante la aplicación integrada de técnicas geoquímicas e isotópicas avanzadas, junto con herramientas estadísticas multivariantes y algoritmos de agrupamiento no supervisado.

Para alcanzar este objetivo general, se plantean los siguientes objetivos específicos:

1. **Aplicar técnicas geoquímicas e isotópicas** para caracterizar las emisiones difusas de gases del suelo en áreas sin manifestaciones geotérmicas superficiales evidentes, identificando patrones composicionales indicativos de aportes volcánico-hidrotermales profundos.
2. **Implementar el método estadístico de Sinclair** para discriminar valores anómalos respecto al fondo geoquímico regional, permitiendo así una detección más precisa de zonas influenciadas por procesos hidrotermales profundos.
3. **Utilizar algoritmos de clustering (K-Means y GKMC)** para agrupar puntos de muestreo según su similitud geoquímica, optimizando la identificación de zonas con características homogéneas relacionadas con estructuras de permeabilidad vertical elevada.
4. **Evaluar la calidad de los agrupamientos** mediante el uso de métricas como el índice *silhouette*, con el fin de validar la robustez de los clústers obtenidos y determinar la combinación óptima de parámetros químicos e isotópicos para la clasificación.
5. **Integrar datos geoquímicos y geofísicos** (como tomografía magnetotelúrica 3D) con los resultados del análisis estadístico, a fin de mejorar la interpretación estructural del subsuelo y validar la correspondencia entre anomalías geoquímicas y estructuras geológicas profundas.
6. **Delimitar áreas prioritarias para perforación exploratoria**, reduciendo la incertidumbre asociada a la localización de reservorios geotérmicos y optimizando el diseño de futuras campañas de exploración.
7. **Contribuir al desarrollo de modelos predictivos tridimensionales** que incorporen variables geoquímicas, isotópicas y estructurales, útiles tanto para la evaluación del potencial geotérmico como para la vigilancia volcánica en regiones activas como las Islas Canarias.

1.7 Publicaciones derivadas de la tesis

Se ha generado la publicación científica directa a partir de esta investigación sobre geotermia y aplicaciones de minería de datos, en la revista Geosciences de MDPI, de acuerdo con la siguiente referencia:

Manuscript ID: geosciences-3636174 (Geochemistry)

Type of manuscript: Article Title: “*Genetic K-Means Clustering of Soil Gas Anomalies for High-Enthalpy Geothermal Prospecting: A Multivariate Approach from Southern Tenerife, Canary Islands*”

Authors: Ángel Morales G.-Moro, Luca D'Auria, Nemesio M. Pérez Rodríguez

Accepted: 26 May 2025; Published: 1 June 2025. <https://www.mdpi.com/2076-3263/15/6/204>



Figura 14. Certificado Publicación artículo en revista Geosciences

Este trabajo presenta una metodología innovadora basada en técnicas de clustering multivariable aplicadas al análisis geoquímico de gases del suelo, con el objetivo de detectar y caracterizar zonas con potencial geotérmico oculto en la zona sur de Tenerife. La investigación ha permitido identificar poblaciones geoquímicas distintas que revelan estructuras profundas con posibles aportes magmático-hidrotermales, alineadas con rasgos estructurales conocidos, como intersecciones de fallas tectónicas. Estos resultados refuerzan la hipótesis de un sistema geotérmico controlado estructuralmente en esa zona.

La publicación de este estudio sienta las bases metodológicas y conceptuales para una evaluación progresiva e integrada de la investigación geotérmica en Canarias. Además, sus resultados ofrecen información de gran valor para orientar las próximas fases del Proyecto de sondeo denominado TF-SUR, incluyendo el análisis y desarrollo de las campañas de perforación profunda en áreas priorizadas.

2. Marco geológico-ambiental y volcánico de Tenerife

Las Islas Canarias están localizadas en el interior de la placa tectónica africana, a unos 100 km del margen continental africano. Este archipiélago está formado por ocho islas principales, cinco islotes y numerosos montes submarinos. Las islas Canarias se encuentran asentadas sobre un basamento constituido por corteza oceánica, perteneciente a la placa africana, que presenta un movimiento lento, cerca de un margen continental pasivo (Figura 15). La datación de las islas a partir de datos paleomagnéticos se ha estimado entre los 150 y los 170 millones de años (Ma), indicando que la formación de las mismas tuvo lugar durante las primeras fases de la apertura del Océano Atlántico en el Jurásico Medio, Fase tipo Mar Rojo (Hayes & Rabinowitz, 1975; Verhoef et al., 1991; Roest et al., 1992).

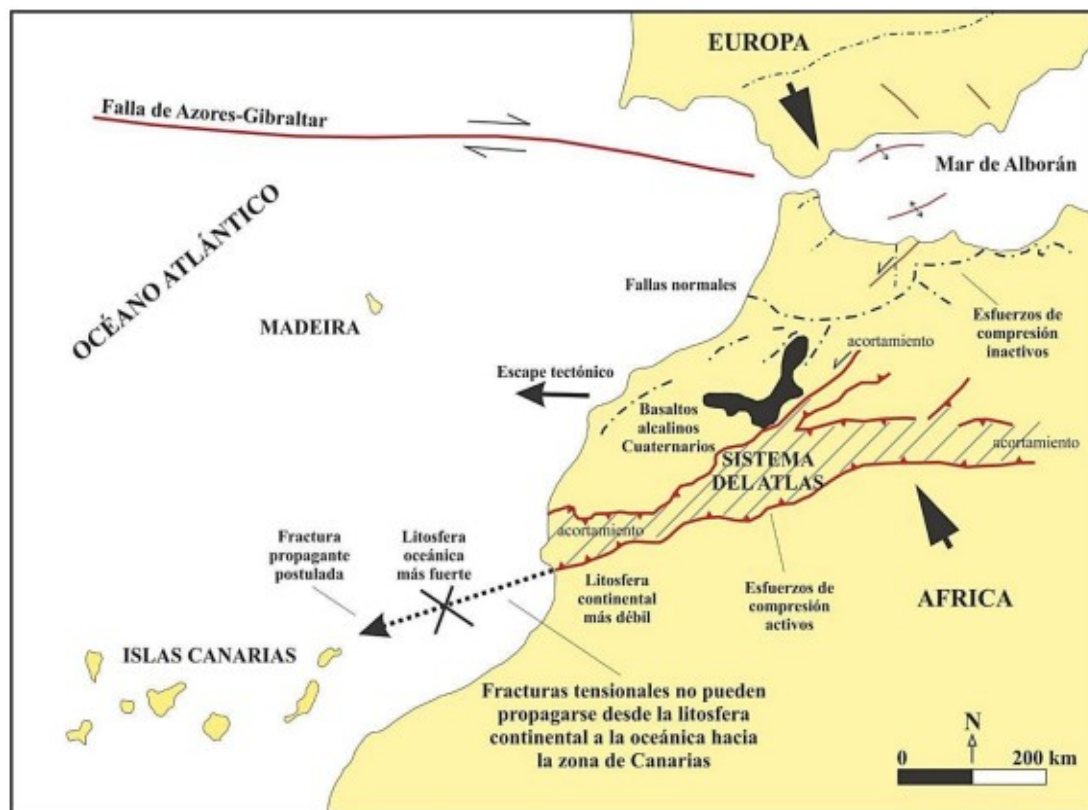


Figura 15. Marco geológico y geodinámico de las Islas Canarias (modificada de Carracedo et al., 1998)

Las Islas Canarias presentan una larga historia eruptiva que se inició a principios del Terciario, es decir, aproximadamente hace 65 Ma. Sin embargo, la edad de las rocas subaéreas más antiguas del archipiélago se encuentran datadas en 20 Ma. Estas rocas corresponden a piroclastos intercalados entre los sedimentos marinos y los complejos basales de las islas orientales (Balogh et al., 1999), siendo Fuerteventura y Lanzarote las islas más antiguas (20,2 Ma), seguidas por Gran Canaria (14,6 Ma). Las islas occidentales: Tenerife, La Gomera, La Palma y El Hierro, cuentan con un vulcanismo emergido de una edad aproximada de unos 10 Ma (Guillou et al., 2004), siendo en estas islas donde se concentra la actividad eruptiva durante el periodo

Cuaternario. La Figura 16 muestra la edad geológica de cada una de las islas del archipiélago Canario en el que se observa un envejecimiento del vulcanismo que aumenta en sentido W-E. de manera que Fuerteventura y Lanzarote son las islas más antiguas y El Hierro y La Palma las más recientes.

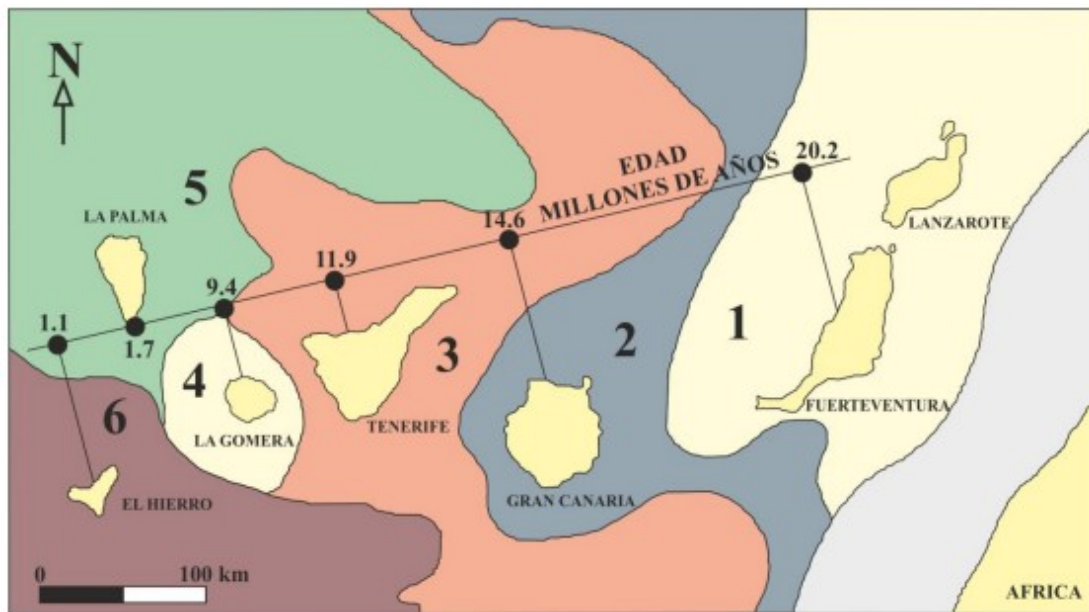


Figura 16. Mapa de las islas Canarias con la edad de las rocas más antiguas que se han datado del vulcanismo subaéreo (Modificado de Guillou et al., 2004).

Los edificios insulares en el archipiélago Canario se caracterizan por una evolución dividida en una serie de estadios, que ocurre simultáneamente con el desplazamiento de la placa y el ensanchamiento del Atlántico. Es por ello, que las islas han ido situándose sobre un suelo oceánico cada vez más profundo, que actualmente llega a los 4.000 m en las islas más occidentales. Dichas etapas son la etapa de fase juvenil, etapa o periodo de reposo y una etapa de profunda erosión (gap) o fase de rejuvenecimiento. Teniendo en cuenta las diferentes etapas de construcción y destrucción de las islas oceánicas intraplaca podemos establecer en qué fase se encuentra cada una de las islas del archipiélago de Canarias.

Esta evolución geodinámica condiciona directamente la existencia y preservación de sistemas geotérmicos activos, especialmente en aquellas islas con vulcanismo reciente o persistente, como Tenerife. El reconocimiento de estas fases permite interpretar la madurez térmica del subsuelo, su grado de fracturación y, por ende, su potencial como reservorio geotérmico, lo que resulta esencial para dirigir estrategias de exploración eficaces y adaptadas al contexto insular.

Asimismo, este conocimiento facilita la identificación de zonas con mayores posibilidades de explotación sostenible, contribuyendo al desarrollo energético local y a la reducción de la dependencia de combustibles fósiles. Además, comprender estos procesos geodinámicos permite anticipar posibles riesgos volcánicos, mejorando la gestión ambiental y la planificación territorial en el archipiélago.

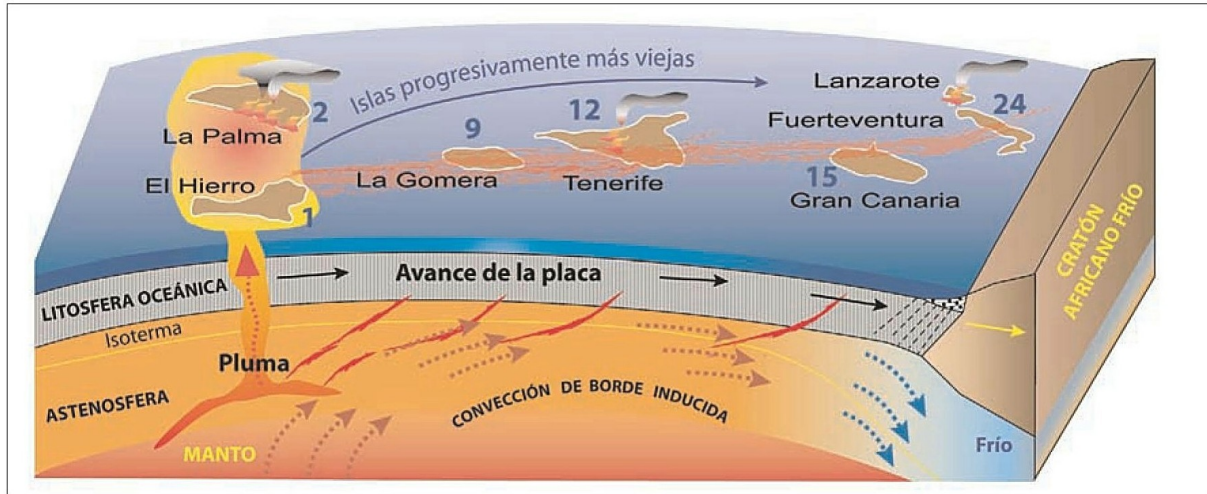


Figura 17. Génesis temporal de las islas Canarias a partir de un punto caliente (Carracedo, 2007)

Las islas oceánicas intraplaca evolucionan con el tiempo geológico y pasan por una serie de estadios:

- **Islas juveniles en escudo:** La Palma y El Hierro.
- **Isla en fase de reposo eruptivo:** La Gomera.
- **Islas en fase de rejuvenecimiento volcanico temprano:** Tenerife (inicio del rejuvenecimiento) y Gran Canaria (rejuvenecimiento avanzado con inicio de desmantelamiento).
- **Islas en fase de desmantelamiento avanzado y rejuvenecimiento tardio:** Fuerteventura y Lanzarote.

Cabe reseñar que las islas de Gran Canaria, Tenerife, La Palma, El Hierro y Lanzarote han presentado vulcanismo Holocénico, es decir que han tenido lugar erupciones en los últimos 10.000 años, mientras que solo Tenerife, La Palma, El Hierro y Lanzarote han presentado vulcanismo histórico (presentan referencias documentales). Una característica muy importante de este archipiélago es la existencia de un amplio rango de composición de rocas, desde rocas básicas y subsaturadas hasta productos más evolucionados. Tanto la fase en escudo como el vulcanismo post erosivo están caracterizados por un magmatismo predominantemente alcalino con un gran desarrollo de términos evolucionados (Carracedo et al., 1992).

Esta diversidad petrográfica y evolución eruptiva condicionan no solo el relieve y la estructura interna de cada isla, sino también la distribución y profundidad de los posibles reservorios geotérmicos. La presencia de materiales alterados, sistemas de fracturación heredados y contrastes térmicos marcados entre diferentes unidades volcánicas, convierten al archipiélago en un entorno excepcional para la investigación y aprovechamiento de la energía geotérmica, especialmente en islas como Tenerife, donde confluyen vulcanismo activo, complejidad estructural y señales geoquímicas de interés.

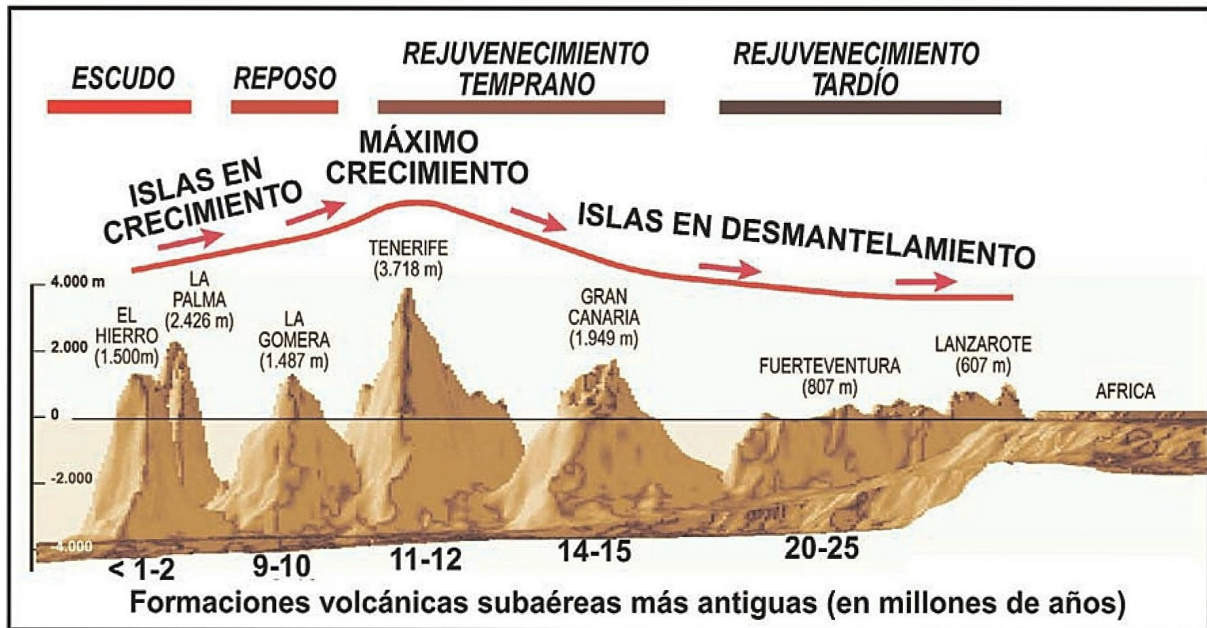


Figura 18. Perfil evolutivo del archipiélago canario (Carracedo, 2007)

En este contexto, la evolución magmático-temporal de las islas tiene importancia bajo el punto de vista geotérmico. La anomalía térmica aprovechable aparecerá allí donde confluyan tres condicionantes de manera simultánea:

- Un ascenso notable de las isothermas, motivado generalmente por el emplazamiento a poca profundidad de magmas activos o en proceso de enfriamiento y/o diferenciación.
- Un acuífero subterráneo cuyos fluidos puedan sean movilizadados por convección y transporten el calor más cerca de la superficie. Este concepto implica una porosidad y permeabilidad adecuadas.
- Una cobertura impermeable que confine la circulación convectiva en profundidad.

En base a todo lo expuesto, si se deben marcar prioridades prospectivas, hay que descartar de entrada dos islas: La Gomera y Fuerteventura, teniendo siempre presente que esta última, al estar conectada con Lanzarote mediante cable eléctrico submarino, puede ser alimentada a partir de los recursos geotérmicos de Lanzarote.

La isla de El Hierro resulta teóricamente autosuficiente con renovables mediante la central hidroeléctrica de Gorona del Viento. No obstante, la discontinuidad del suministro eólico aconsejaría asegurar como mínimo la demanda base mediante una renovable continua como es la geotermia, y cubrir los picos con la hidroeléctrica.

La geotermia canaria, por tanto, debería planificarse en las islas de Lanzarote, Tenerife, Gran Canaria, La Palma y, eventualmente El Hierro.

2.1 Geología general de la isla de Tenerife

Tenerife es la isla de mayor extensión del Archipiélago Canario y se caracteriza por un vulcanismo complejo, representado por estratovolcanes, calderas y un gran edificio central, El Teide (Hernández et al., 2000). Su formación se asocia a procesos de construcción volcánica y colapsos gravimétricos, dando lugar a una morfología volcánica diversa que incluye calderas y valles de deslizamiento. La Figura 19 muestra un mapa geológico simplificado de la isla de Tenerife.

Es la mayor de las Islas Canarias y, junto con Gran Canaria, es la única isla que posee un complejo volcánico central, que comenzó a desarrollarse alrededor de 3,5 Ma (Ancochea et al., 1990). El complejo central actual comprende la caldera de Las Cañadas, una depresión volcánica de $16 \text{ km} \times 9 \text{ km}$ que se originó a partir de colapsos verticales y que fue parcialmente rellenada por productos volcánicos post-caldera (Ablay y Martí, 2000). Esta última actividad se concentró principalmente en la parte norte de la caldera, que es donde se han formado los estratovolcanes de Pico Viejo y Teide (Ablay y Martí, 2000). Se han identificado hasta 297 conos monogenéticos máficos en Tenerife, lo que representa la actividad eruptiva más común que tuvo lugar en la isla durante el último 1 Ma (Dóniz et al., 2008). La mayor parte de los conos monogenéticos se encuentran alineados a lo largo de un sistema de rift de triple unión, debido a la inflación causada por la concentración de respiraderos y diques de emisión en bandas a 120° entre sí como resultado de la mínima fracturación por tensión de la corteza por surgencia del manto (Carracedo, 1994). Estos rifts actúan como zonas de debilidad cortical, facilitando la intrusión de diques y la migración de fluidos hidrotermales. El área de estudio corresponde a la mayor parte de la zona de falla volcánica del sur de Tenerife —presenta una estratigrafía dominada por coladas basálticas intercaladas con depósitos piroclásticos y unidades alteradas hidrotermalmente, lo que sugiere una historia eruptiva recurrente y una dinámica térmica activa. Su principal característica estructural es la aparente falta de una cresta definida y una distribución en abanico de conos monogenéticos. Según Kröcher y Buchner (2008), cuatro sucesiones volcánicas principales en la zona de rift volcánico del sur de Tenerife están separadas temporalmente por largos períodos ($\sim 70\text{-}250 \text{ ka}$) de no actividad volcánica. Interpretaron la presencia de rocas sieníticas como evidencia de cámaras magmáticas someras, situadas en la parte distal de la falla volcánica del sur, cuya interacción con el acuífero insular podría generar sistemas geotérmicos de interés.

Esta complejidad geológica, sumada a la presencia de estructuras profundas favorables y señales geoquímicas de origen magmático en gases del suelo, convierte al sur de Tenerife en una zona prioritaria para la exploración geotérmica. El conocimiento detallado de su evolución volcánica y estructura interna permite orientar las estrategias de prospección hacia áreas con mayor probabilidad de albergar sistemas geotérmicos activos o residuales, fundamentales para el desarrollo energético sostenible en el archipiélago.

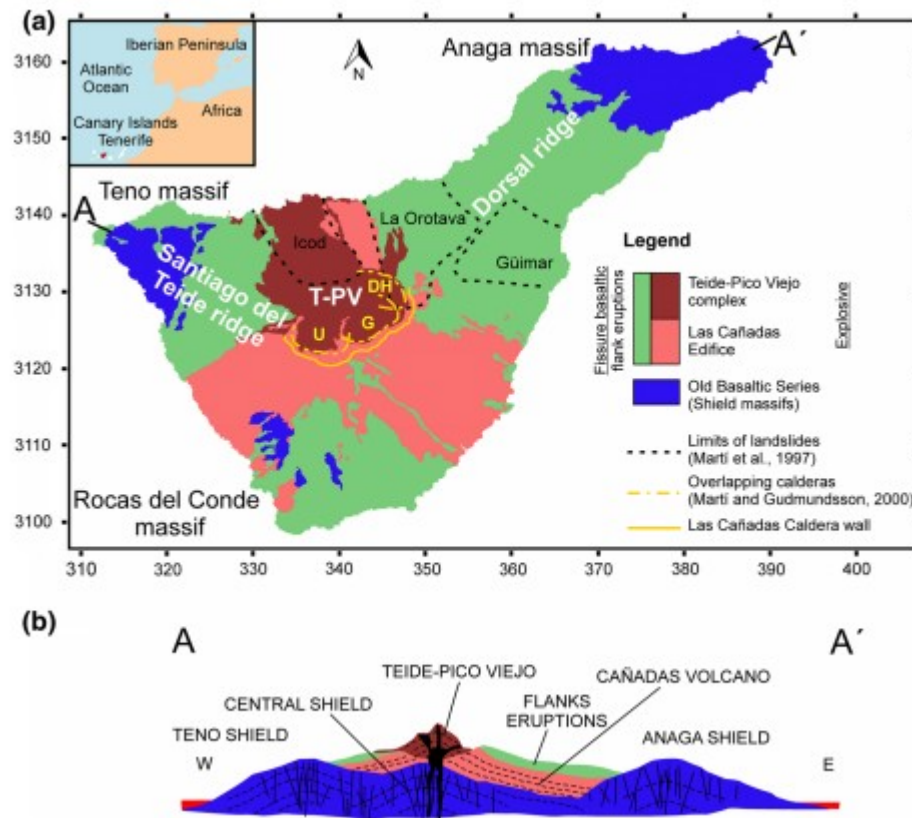


Figura 19. Mapa geológico simplificado de la isla de Tenerife. Sección geológica de la isla de Tenerife.

2.2 Evolución volcánica y potencial geotérmico en Tenerife

La evolución geológica de Tenerife ha estado marcada por erupciones recientes (Holoceno), lo que sugiere la existencia de gradientes térmicos elevados y sistemas hidrotermales activos. Diversos estudios de prospección señalan la posibilidad de reservorios a media y gran profundidad, vinculados a intrusiones magmáticas y estructuras tectónicas favorables para la circulación de fluidos (Rodríguez et al., 2015).

El archipiélago canario está formado por siete islas volcánicas (Figura 20) situadas a lo largo del margen noroeste de África, donde los procesos eruptivos han estado activos durante más de 20 millones de años. Se han propuesto varias hipótesis para explicar la presencia de esta cadena de islas volcánicas en un margen continental pasivo (Anguita et al., 2000). Entre estas hipótesis se encuentran: la teoría de los puntos calientes, el modelo de puntos calientes intermitentes, el levantamiento y fracturamiento de bloques de basamento oceánico y la presencia de una capa térmica, entre otras. Independientemente de la hipótesis, la dinámica estructural de los ejes NE/SW y NW/SE, que están relacionadas con la apertura del Océano Atlántico y el levantamiento y evolución de las montañas del Atlas, han jugado un papel significativo en el origen de este vulcanismo extenso y duradero (Araña y Ortiz, 1991).

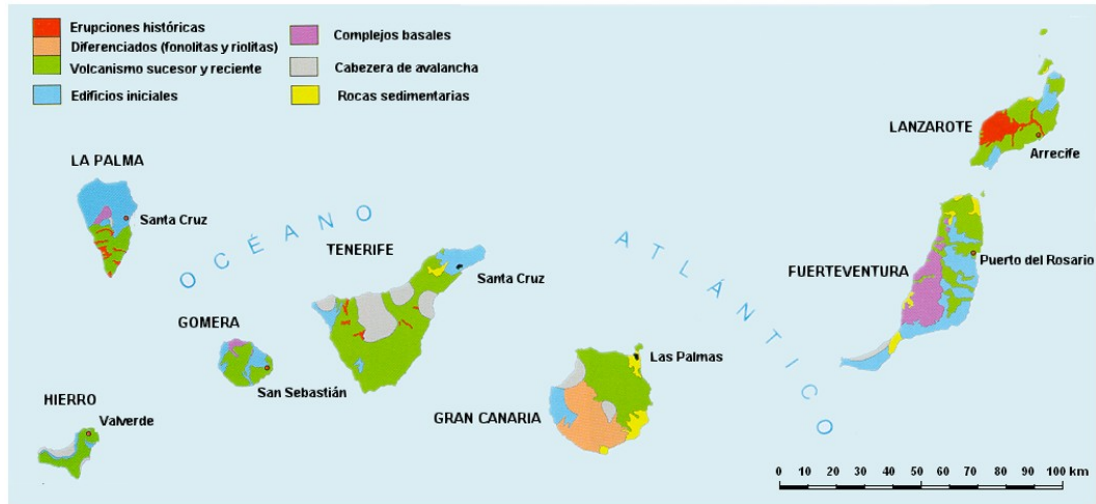


Figura 20. Geología de las Islas Canarias, ITGM. (Anguita, Fuster et al. 2002)

Fuster et al. (1968) estiman que las primeras erupciones de Tenerife tuvieron un carácter fisural y en ellas se emitieron ankaramitas, basanitas y basaltos alcalinos que constituyen las “series basálticas antiguas”. Ancochea et al. (1989-90) estiman la edad de estos productos subaéreos entre 12 y 3,3 Ma. Otras dataciones dan edades de 16,1 y 5,7 Ma. Ninguna de estas dataciones parece fiable, estimándose las edades de los macizos antiguos en una banda que oscila entre 7 y 3,6 Ma. para Anaga, 6,7 y 4,5 Ma. para Teno y 11,6 y 3,5 Ma. para el Roque del Conde (Anguita et al. 2003).

Simultáneamente a la emisión de estas lavas que forman las series antiguas, erupciones basálticas se están desarrollando a lo largo del eje de la dorsal, dando origen a las “Series Dorsal” (Fuster, 1968, Ancochea, 1990). Hace 3,5 Ma, en el centro de la isla, se inician las erupciones que van a levantar el inmenso estratovolcán denominado “Edificio Cañadas” cuya dinámica implica sucesivos episodios de construcción-destrucción, colapsos de caldera y el posible gran deslizamiento final que determina la forma de la actual caldera central de Tenerife. Las inclinadas vertientes meridionales de la isla forman parte de la estructura del Edificio Cañadas y culminan en los farallones de una amplia depresión (Las Cañadas) a una altura de 2.000 m. Esta depresión ha sido en parte ocupada por los depósitos de un nuevo edificio volcánico, el estratovolcán activo Teide-Pico Viejo de 3.718 m. cuyas lavas se han emplazado preferentemente a lo largo de las vertientes septentrionales de la isla (Valle de Icod-La Guancha).

El vulcanismo reciente (Holoceno: últimos 10.000 años) y el histórico (referencias directas) se manifiesta con mayor o menor intensidad en todas las islas con excepción de La Gomera y Fuerteventura. En Tenerife existen 11 erupciones datadas de menos de 10.000 años entre las que destacan las más recientes del Teide: las fonolíticas de Montaña Blanca (2.000 años BP) y Roques Blancos (1.750 BP), así como la de Lavas Negras (1.150 BP) y 7 erupciones históricas: Boca Cangrejo (1492), Sietefuentes (1704), Fasnía (1705), Arafo (1705), Arenas Negras/Garachico (1706), Chahorra (1798) y Chinyero (1909).

Las Islas Canarias, debido a su reciente vulcanismo, son el único territorio español con potenciales recursos geotérmicos de alta entalpía (Comisión Europea, 1999). Tenerife (2.034 km²) es la isla más grande del archipiélago y muestra evidentes manifestaciones geotérmicas superficiales (fumarolas del volcán Teide, la única descarga visible de fluidos geotérmicos existente hoy en día en las Islas Canarias), donde la composición gaseosa indica que el vapor deriva de un reservorio geotérmico maduro dominado por líquidos con temperaturas en el rango de 250°C-300°C (Hernández et al., 2000).

Sin embargo, se han hecho muy pocos esfuerzos para desarrollar los recursos potenciales de energía geotérmica en el archipiélago. Desde la década de 1970 hasta la década de 1990, el Servicio Geológico y Minero Español (IGME) realizó una intensa investigación sobre los recursos geotérmicos en el país, debido principalmente a la crisis del petróleo de la década de 1970 (Sánchez-Guzmán y García de la Noceda, 2010). La investigación geotérmica posterior disminuyó drásticamente y solo unos pocos proyectos sobre recursos geotérmicos estuvieron activos en España entre 1994 y 2006, en comparación con los muchos proyectos llevados a cabo durante las dos décadas anteriores (Sánchez-Guzmán y García de la Noceda, 2010). El objetivo final de la exploración geotérmica en un área específica es localizar y definir el tamaño, la forma, la estructura de los recursos geotérmicos ocultos y determinar sus características (tipo de fluido, temperatura, composición química y capacidad para producir energía). Los métodos de exploración incluyen una amplia gama de disciplinas como la geoquímica, la geofísica, la geología y la ingeniería.

Se presentan los resultados de estudios detallados de gases en el suelo y magnetotélúricos realizados en la parte sur de la isla de Tenerife con el objetivo de evaluar la aplicación de estas técnicas para la exploración geotérmica. La combinación de dos técnicas (geoquímica y geofísica) se utiliza para caracterizar mejor la existencia de reservorios geotérmicos en el subsuelo de la zona de falla volcánica del sur de Tenerife. El área de estudio comprende gran parte de la zona de falla volcánica del sur de Tenerife, con una superficie de ~100 km². Durante el período de estudio, las manifestaciones geotérmicas visibles en el entorno superficial (es decir, fumarolas, aguas termales) estuvieron ausentes en el área de estudio.

2.3 Estructura geodinámica del subsuelo: fallas, fracturas y permeabilidad

En los sistemas geotérmicos de alta entalpía, el papel de la estructura geodinámica del subsuelo es esencial para el control de la circulación de fluidos hidrotermales. Las fallas y fracturas actúan como conductos preferenciales de permeabilidad vertical, facilitando el ascenso de fluidos calientes desde zonas profundas hasta niveles someros de la corteza, y a menudo hasta la superficie. En entornos volcánicos activos como el de Tenerife, estas estructuras geológicas no

sólo canalizan los fluidos, sino que también definen los límites y la geometría de los reservorios geotérmicos

El entramado de fallas en una región volcánica es el resultado de una evolución tectónica compleja que involucra fases sucesivas de rifting, subsidencia, colapso caldérico y actividad volcánica central. En Tenerife, la interacción entre los ejes estructurales principales (NE–SW, NW–SE y N–S), configurados por el sistema de rifts en forma de estrella, genera una red densa de estructuras que atraviesan la isla y que han sido ampliamente mapeadas en estudios geológicos y geofísicos (Ancochea et al., 1990; Carracedo, 1994).

Estas fallas y fracturas son zonas de debilidad mecánica en la corteza, donde la porosidad secundaria tiende a ser elevada y la permeabilidad estructural es marcadamente mayor que en las rocas intactas. Como resultado, constituyen rutas eficaces para la migración de gases y líquidos desde el interior de la Tierra hacia la superficie (Rowland & Sibson, 2004). En particular, las fallas normales asociadas a subsidencia caldérica y los diques volcánicos que cortan las unidades basálticas actúan como principales vías de desgasificación.

La estructura tectónica de Tenerife está dominada por la interacción entre su complejo volcánico central (El Teide–Pico Viejo) y los tres rifts radiales. Esta configuración produce una anisotropía en la distribución de la permeabilidad del subsuelo, es decir, la permeabilidad no es homogénea ni isotrópica, sino que depende de la orientación de las fracturas dominantes y de la conectividad entre ellas (Galindo et al., 2005).

Estudios realizados en el sur de la isla, específicamente en la zona de la licencia minera de Garehagua, han identificado un patrón de fracturación que sigue principalmente direcciones N–S y NE–SW. Estas alineaciones estructurales coinciden con áreas donde se han registrado anomalías geoquímicas significativas en las concentraciones de CO₂, He y H₂, así como con zonas de baja resistividad en modelos magnetotelúricos 3D (Piña-Varas et al., 2014; Rodríguez et al., 2021). Esta superposición sugiere una relación directa entre las estructuras tectónicas y la presencia de zonas de ascenso de fluidos hidrotermales.

Además, estudios geoquímicos y geoestadísticos han mostrado que los flujos difusos de gases como el CO₂ tienden a concentrarse a lo largo de fracturas mayores y zonas de intersección estructural, indicando la existencia de una permeabilidad aumentada y una menor presión litostática, factores que facilitan la exsolución de gases y su transporte a través de la columna volcánica (Chiodini et al., 2007; Cardellini et al., 2003).

En sistemas volcánicos, además de las fracturas tectónicas preexistentes, el vulcanismo genera estructuras adicionales que modifican el campo de permeabilidad. Estas incluyen:

- **Diques volcánicos:** Cuerpos tabulares inyectados verticalmente que pueden actuar como barreras o como canales de migración dependiendo de su orientación y continuidad.

- **Colapsos caldéricos:** Asociados a subsidencia de grandes volúmenes de material, generan sistemas de fallas concéntricas que actúan como zonas de fuga de fluidos.
- **Fracturas térmicas:** Resultantes de la expansión y contracción térmica de las rocas volcánicas, especialmente en domos o flujos viscosos.

Estas estructuras son particularmente relevantes en la parte central y meridional de Tenerife, donde se han observado alineamientos de conos monogenéticos y fisuras eruptivas que se disponen radialmente desde el complejo central hacia el sur, coincidiendo con zonas de fracturación densa y con registros elevados de emisiones geoquímicas (Rodríguez et al., 2021; Kröcher & Buchner, 2008).

Mientras que las fracturas abiertas permiten la migración ascendente de fluidos, su capacidad para almacenar energía térmica y fluidos depende de su conectividad y geometría interna. Las zonas de fracturación intensa pueden actuar como “**fracture-hosted reservoirs**”, donde el volumen efectivo del reservorio no está dado por la porosidad matricial, sino por el espacio abierto en las fracturas. Estas condiciones son óptimas para sistemas de alta entalpía, siempre que la presión de poro no colapse las estructuras o selle las fracturas por precipitación mineral.

En este sentido, la identificación de zonas con alta densidad de fracturas activas y continuidad estructural es esencial para ubicar perforaciones exploratorias que atraviesen dichas zonas. La caracterización de estas zonas debe considerar no solo la densidad de fracturación, sino también su orientación relativa al gradiente térmico, la litología involucrada y la historia de deformación local.

2.4 Manifestaciones hidrotermales y geoquímicas conocidas

La presencia de manifestaciones hidrotermales en superficie constituye una de las evidencias más claras de la existencia de actividad geotérmica en profundidad. Estas manifestaciones pueden adoptar diversas formas —emanaciones gaseosas visibles, emisiones difusas a través del suelo, surgencias termales, depósitos de alteración hidrotermal, entre otras— y son el resultado de la interacción entre los fluidos geotérmicos ascendentes y las rocas del entorno. En contextos volcánicos activos como el de Tenerife, el análisis geoquímico detallado de estas señales permite inferir la existencia, naturaleza y dinámica de sistemas hidrotermales profundos, siendo una herramienta indispensable en las primeras fases de la exploración geotérmica.

En la isla de Tenerife se han identificado varias formas de manifestaciones hidrotermales y geoquímicas, tanto visibles como difusas:

- **Fumarolas activas:** localizadas principalmente en el cráter del Teide y zonas adyacentes, donde se observan emisiones continuas de vapor y gases volcánicos, especialmente CO₂, H₂S, H₂ y He. Estas emisiones han sido objeto de monitoreo geoquímico desde hace décadas (Hernández et al., 2000; Padrón et al., 2013).

- **Emisiones difusas de gases en el suelo:** distribuidas ampliamente en zonas como Las Cañadas, Pico Viejo, El Teide, Chinyero y, especialmente, en la zona sur de la isla (Garehagua), donde no existen manifestaciones termales visibles pero sí se han detectado anomalías en CO₂, He, H₂ y ²²²Rn mediante técnicas de muestreo y flujos difusos (Rodríguez et al., 2015; Dionis et al., 2015).
- **Puntos de emisión subterránea:** como el caso singular del gas burbujeante detectado a 2.850 m de longitud en el interior de la galería de agua Fuente del Valle en la zona de Vilaflor, caracterizado por altos contenidos de CO₂ y He, y razones isotópicas que indican un origen magmático (³He/⁴He ≈ 7 RA) (Pérez et al., 1996, 2007).
- **Aguas termales y alteración hidrotermal:** aunque escasas, se han identificado surgencias de agua ligeramente templada (<40 °C) y zonas de alteración hidrotermal en rocas del complejo central y en sectores del sur volcánico, asociadas a antiguos procesos de circulación hidrotermal.

La composición química de los gases emitidos en estas manifestaciones permite inferir el origen y el tipo de sistema involucrado. Por ejemplo:

- **El CO₂,** al ser el segundo gas más abundante tras el vapor de agua en sistemas volcánico-hidrotermales, actúa como un excelente trazador de fuentes profundas. Su análisis isotópico ($\delta^{13}\text{C-CO}_2$) permite discriminar entre fuentes biogénicas (−25 a −20‰), metamórficas y magmáticas (−8 a −4‰). En Tenerife, se han registrado valores de $\delta^{13}\text{C}$ en torno a −6.5‰ en zonas con fuerte componente magmático (Rodríguez et al., 2021).
- **El helio (He)** es otro gas clave, cuyo origen puede ser atmosférico, radiogénico (de la corteza) o magmático. La relación ³He/⁴He es el principal indicador de esta procedencia. Valores superiores a 6 RA (RA = razón atmosférica) se consideran típicos de fuentes mantélicas. Este valor ha sido observado en emisiones tanto visibles como difusas en el sur de Tenerife y en galerías como Fuente del Valle, lo cual confirma el vínculo con una fuente magmática activa (Pérez et al., 1996; Padrón et al., 2012).
- **El hidrógeno molecular (H₂),** aunque presente en bajas concentraciones, es un importante indicador de procesos redox en ambientes hidrotermales. Su abundancia puede incrementarse por disociación térmica de compuestos orgánicos o por interacción de fluidos con minerales máficos. Valores elevados de H₂ en el suelo han sido detectados en zonas como Chinyero y el sur de Tenerife, asociándose a estructuras de permeabilidad vertical activa (Dionis et al., 2015).
- **El radón (²²²Rn),** gas noble radiactivo de vida corta (3,8 días), se emplea como trazador de estructuras de fractura activas, al ser liberado con facilidad por difusividad a lo largo de zonas de alta permeabilidad. Las anomalías de radón en Tenerife tienden a alinearse

con fallas geológicas conocidas y zonas de desgasificación difusa, sugiriendo un control estructural sobre la emisión (Padilla et al., 2013).

Estas manifestaciones hidrotermales y geoquímicas representan indicadores indirectos, pero altamente confiables, de la existencia de sistemas geotérmicos activos. Su análisis permite:

- Estimar zonas de alta permeabilidad asociadas a fracturas profundas.
- Inferir la presencia de reservorios ocultos con base en la composición isotópica de los gases.
- Priorizar zonas para campañas de perforación, reduciendo incertidumbre exploratoria.
- Integrar modelos estructurales y geoquímicos con geofísica de resistividad y magnetotelúrica.

En el caso específico de Tenerife, la presencia simultánea de emisiones visibles (fumarolas del Teide), emisiones difusas de gases del suelo (en zonas como Garehagua), y composiciones isotópicas que indican origen profundo, respalda la existencia de un sistema geotérmico aún activo, aunque enterrado, con potencial de explotación en varias zonas de la isla (Rodríguez et al., 2015; Hernández et al., 2000; Piña-Varas et al., 2014).

Diversas campañas de muestreo llevadas a cabo por el Instituto Volcanológico de Canarias (INVOLCAN), Instituto Tecnológico y de Energía Renovables (ITER, S.A.) y la Universidad de La Laguna, entre otros, han permitido construir bases de datos geoquímicos y mapas de distribución de emisiones difusas de gases. Estas campañas han sido fundamentales para identificar áreas de interés geotérmico y orientar futuras investigaciones.

Los resultados obtenidos en Tenerife han sido comparables con estudios similares realizados en otros contextos volcánicos como Larderello (Italia), Taupo (Nueva Zelanda), Los Hornos (México) y el campo de Dixie Valley (EE.UU.), donde se ha demostrado que la presencia de emisiones difusas y anomalías geoquímicas en ausencia de manifestaciones termales visibles es suficiente para justificar campañas exploratorias exitosas (Chiodini et al., 2007; Arango-Galván et al., 2015; Lewicki & Oldenburg, 2004).

2.5 Exploración Geotérmica en Tenerife: Estudios y Hallazgos

Los trabajos de exploración geotérmica en una zona concreta se basan en definir su tamaño, forma, estructura y determinar sus características (tipo de fluido, temperatura, composición química y capacidad de producir energía, etc.). Estas características pueden ser determinadas a través de la aplicación y uso de técnicas de exploración en el ambiente superficial, así como a través de sondeos de exploración. Dado que los trabajos de exploración (métodos geoquímicos y geofísicos, fundamentalmente) en el ambiente superficial suelen ser mucho más económicos, es

común realizar un extenso programa de exploración superficial antes de comenzar a hacer perforaciones profundas (~1.500-3.000 m) o relativamente profundas (~ 600 m). La exploración geoquímica superficial se materializa realizando una amplia caracterización química e isotópica de las manifestaciones geotermales visibles más obvias como, por ejemplo, fumarolas o surgencias de aguas calientes, que existan en la zona de estudio. No obstante, hay zonas que tienen carencias de manifestaciones geotermales visibles en el ambiente superficial, por lo que la prospección geoquímica de gases y volátiles en la atmósfera del suelo y en la propia matriz del suelo, respectivamente, puede llegar a proporcionar una información muy útil sobre aquellas zonas del área de estudio con una mayor permeabilidad vertical y por donde podrían ascender fluidos de origen profundo. En ambientes volcánicamente activos, como las Islas Canarias, la emisión de gases de origen endógeno es un proceso constante que ocurre a través del edificio volcánico. Las emisiones de estos gases ocurren tanto en periodos de actividad como en periodos intereruptivos y pueden clasificarse en dos grupos (Allard et al., 1991; Baubron et al., 1990): "emisiones visibles" (fumarolas, hervideros, penacho volcánico...) y "emisiones no visibles o difusas" (a través de los flancos del edificio volcánico y de las zonas de mayor permeabilidad vertical). El mecanismo difusivo ocurre de una forma silenciosa y son numerosos los estudios de desgasificación difusa realizados durante los últimos 20 años y centrados principalmente en la medida del flujo de CO₂ (Cardellini et al., 2003, 2017; Chiodini et al., 1996; Fridriksson et al., 2006; Hernández et al., 1998, 2000, 2001, 2003, 2006, 2015, 2017; Melián et al., 2004, 2012, 2014; Notsu et al., 2005, 2006; Padrón et al., 2007; 2015; Pérez et al., 1996, 2004, 2006; Salazar et al., 2001, 2003) y que han puesto de manifiesto la relación entre las emisiones difusas de CO₂ y las características volcano-estructurales y la dinámica eruptiva. El CO₂ es la segunda especie más abundante, después del agua, en los gases volcánicos, y presenta la ventaja de ser poco soluble en fundidos silicatados lo que favorece su rápida exsolución y emisión (Stolper & Holloway, 1988; Gerlach, 1990; Baubron et al., 1991; Giggenbach, 1992; Symonds et al., 1996). Cabe señalar, que después del agua, los principales componentes emitidos por los volcanes son el CO₂, SO₂, H₂S, HCl, N₂, H₂ (Giggenbach, 1996) y gases nobles como He y Ar (Hilton et al., 2001). El estudio de sus tasas de emisión y sus relaciones molares nos informan de los procesos fisicoquímicos que tienen lugar en profundidad y nos ayudan a caracterizar el sistema volcánico hidrotermal asociado a la actividad volcánica.

La exploración geoquímica en Tenerife ha incluido el análisis de gases del suelo en el rift volcánico sur, un área caracterizada por la ausencia de una cresta distintiva y una distribución en forma de abanico de conos monogenéticos. En esta región predominan las rocas basálticas y traquibasálticas. Dentro de este entorno, estudios previos han identificado una mancha de gas burbujeante rica en ³He y CO₂ a una profundidad de 2.850 m en la galería de agua de Fuente del Valle. La composición de este gas sugiere un fuerte componente magmático, lo que indica la posible existencia de reservorios geotérmicos. El valor elevado de la razón isotópica ³He/⁴He (~7 RA) respalda la hipótesis de un aporte directo desde el manto, lo que refuerza el potencial de esta zona como objetivo prioritario para futuras campañas de perforación geotérmica. Además, la

presencia de estructuras profundas permeables facilitaría la migración de fluidos calientes hacia niveles someros.

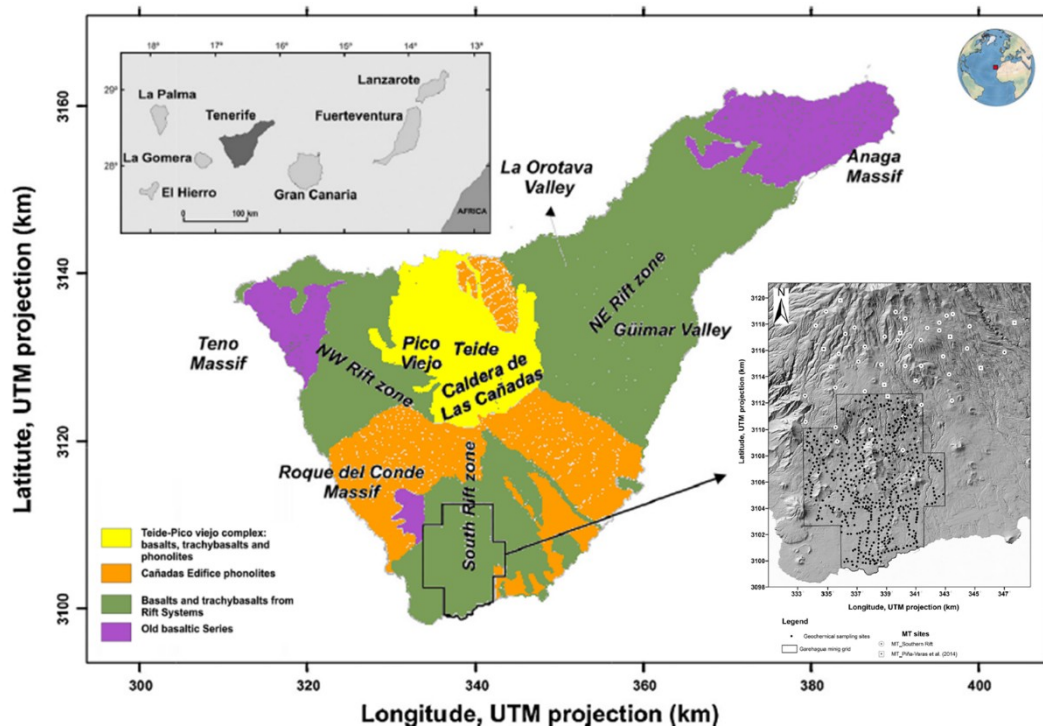


Figura 21. Mapa geológicos simplificado de Tenerife (IGME, 2011)

Los trabajos de exploración geotérmica en esta zona se han centrado en definir el tamaño, la forma, la estructura y las características de estos posibles reservorios, incluyendo la composición química de los fluidos, la temperatura y la capacidad de producción de energía. Dado que los estudios de exploración superficial suelen ser más económicos que las perforaciones profundas, es común llevar a cabo un extenso programa de exploración en la superficie antes de realizar perforaciones a profundidades entre 600 y 3.000 metros.

La exploración geoquímica superficial ha permitido obtener una caracterización detallada de los gases en la atmósfera del suelo, proporcionando información valiosa sobre las áreas con mayor permeabilidad vertical por donde podrían ascender fluidos de origen profundo. En las Islas Canarias, la emisión de gases endógenos es un proceso continuo que ocurre tanto en periodos de actividad volcánica como en periodos Inter eruptivos. Estas emisiones pueden clasificarse en dos tipos: visibles (fumarolas, manantiales hirvientes, penachos volcánicos) y difusas (a través de los flancos del edificio volcánico y zonas de mayor permeabilidad vertical).

El mecanismo de desgasificación difusa ocurre silenciosamente y ha sido ampliamente estudiado en las últimas décadas. Se ha demostrado que existe una estrecha relación entre las emisiones difusas de CO_2 y la estructura geológica de los volcanes. Además, el análisis de otros gases como SO_2 , H_2S , HCl , N_2 , H_2 y gases nobles como He y Ar ha permitido comprender mejor los procesos físicos y químicos que ocurren en profundidad.

En este contexto, se llevó a cabo una campaña de prospección geoquímica en el sur de Tenerife, abarcando una superficie aproximada de 100 km². Los estudios permitieron elaborar mapas de distribución espacial de los gases estudiados y estimar las tasas de emisión utilizando metodologías estadísticas avanzadas. Estos hallazgos proporcionan información clave para la caracterización del sistema volcánico-hidrotermal de la isla y su potencial geotérmico.

La campaña de campo fue realizada por el equipo técnico de Instituto Volcanológico de Canarias en el año 2011 en el dominio minero Garehagua y Garehagua II, que cubre un área de unos 104 Km² aproximadamente. En total se seleccionaron 1.200 puntos de muestreo distribuidos lo más homogéneamente posible en toda el área de estudio. La separación media entre los puntos fue de aproximadamente 250 metros con el fin de poder detectar anomalías de emisión de gases a una escala relativamente pequeña. Los puntos de muestreo se seleccionaron en función de su accesibilidad y criterios geológicos. En cada uno de los puntos de muestreo fueron realizadas las siguientes medidas:

1) Medida in situ del flujo difuso de CO₂ en el ambiente superficial del área de estudio. Las medidas de flujo difuso de CO₂ se realizaron depositando de forma invertida una cámara de acumulación en la superficie del suelo. Gracias a la presencia de una pequeña bomba, el gas que sale del suelo y que es acumulado en la cámara se hace circular a través del espectrofotómetro de IR y luego regrese a la cámara. En consecuencia la concentración de CO₂ se incrementa dentro de la cámara a medida que pasa el tiempo. Dentro de la cámara, existe una hélice que permite homogenizar la muestra. Entre la cámara y el detector de IR se coloca una trampa de Mg(ClO₄)₂ con el objeto de atrapar el vapor de agua proveniente del suelo, evitando la interferencia analítica que ésta produce en la medida de la concentración de dióxido de carbono, y el daño que la condensación del agua produciría en la célula de IR. La señal, proporcional a la concentración de CO₂ en la cámara de acumulación, es recogida por un datalogger que a su vez transmite los datos a un ordenador para su procesamiento. El incremento de la concentración del gas CO₂ en la cámara de acumulación en función del tiempo (Baubron et al., 1991). La medida de flujo difuso del gas es directamente proporcional a la pendiente definida por la variación de la concentración del gas en la cámara a lo largo de los instantes iniciales de las medidas. Transcurrido un periodo de tiempo suficiente, la concentración del gas acumulado alcanza el equilibrio dinámico con el gas existente en suelo y tiende a estabilizarse, obteniéndose una plataforma o zona estable en la curva. Cuando esto ocurre, la concentración dentro de la cámara experimenta una situación de equilibrio dinámico con el gas procedente del suelo.

2) Análisis in situ de la actividad de los gases radón (²²²Rn) y torón (²²⁰Rn) del suelo. En cada uno de los puntos de muestreo se realizó la medida de la actividad del gas radón (²²²Rn) y torón (²²⁰Rn) en el ambiente superficial del suelo por espectroscopía alfa de alta resolución. Para ello se usó de un sensor de Rn modelo SARAD RTM 092/02/02 y SARAD RTM 2010-2 (fabricado por SARAD GmbH, Dresden, Alemania), que se basa en la determinación de los productos derivados de su decaimiento radiactivo, ²¹⁸Po (para el ²²²Rn) y ²¹⁶Po (para el ²²⁰Rn). Para la

realización de las medidas de la actividad de radón y torón en la atmósfera del suelo, se insertó una sonda metálica de acero inoxidable de unos 3 mm de diámetro interno a 40 cm de profundidad. El gas de la atmósfera del suelo es bombeado durante 10 minutos con un caudal de 3 l/min desde la sonda metálica hacia el sensor de Rn a través de un tubo de silicona. La precisión de las medidas depende de la concentración del gas y del tiempo de integración. El monitor de Rn responde rápidamente a cambios en la concentración del gas y se usará un tiempo de integración de 10 minutos. Los datos almacenados en el módulo de memoria interna se descargan a posteriori en el laboratorio mediante el software suministrado por el fabricante.

3) Análisis in situ de la concentración de vapor de mercurio (Hg^0) En cada uno de los puntos de muestreo se determinó in situ la concentración de vapor de Hg^0 en la atmósfera del suelo mediante una técnica potenciométrica. Para ello, se hizo uso del sensor portátil Jerome 431-X. El sensor está dotado de dos láminas de oro, una que actúa como referencia (no queda expuesta a la muestra), y otra que queda expuesta a la muestra. La muestra es succionada al interior del instrumento por una pequeña bomba, y el Hg^0 se deposita sobre la lámina dando lugar a un pequeño cambio en la resistencia eléctrica que se mide entre las dos láminas, las cuales están configuradas en un puente de Wheatstone. Estos pequeños cambios en la resistencia eléctrica del sistema están relacionados con la concentración de Hg^0 .

Para realizar la medida, en cada punto de muestreo se insertó una sonda metálica de acero inoxidable de unos 3 mm de diámetro interno a 40-50 cm de profundidad y se tomarán 60 cm³ de gas de suelo con una jeringa hipodérmica. La muestra de gas del suelo se hace pasar a través de un filtro de polvo mientras es succionada por el equipo. A continuación se obtiene la lectura de la medida de la concentración de Hg^0 . Las medidas se realizaron después de comprobar la respuesta del analizador con aire atmosférico, libre de Hg^0 . El instrumento registra el valor de concentración de Hg^0 , ya que tienen en consideración el volumen succionado por la bomba y el tiempo de succión de la misma. Debido a que el volumen de inyección es menor y conocido en cada uno de los casos, es necesario aplicar un factor para corregir la concentración final obtenida. Este factor dependerá tanto del caudal de flujo de la bomba, como del volumen muestreado

4) Medidas in situ de temperatura del suelo a 15 y a 40 cm de profundidad. Las medidas de temperatura del suelo fueron efectuadas con dos sondas termopar a profundidades diferentes: 15 y a 40 cm de profundidad; además, en cada punto también se mide la temperatura ambiente. El objetivo de dichas medidas fue el cálculo del gradiente térmico del suelo ($T_{40}-T_{15}$) y el gradiente térmico dado por $T_{40}-T_{\text{aire}}$.

5) Toma de muestras de gas del suelo de origen volcánico. Las muestras de gas del suelo fueron recogidas usando de una sonda metálica insertada previamente en el suelo a unos 40 cm de profundidad. El gas se extrajo con la ayuda de una jeringuilla hipodérmica de 60 cm³, haciendo circular el gas por un vial sellado de 10 cm³ en el cual quedará almacenada la muestra. El vial se deja con una ligera sobrepresión para asegurar, por un lado que todas las muestras se analizan a

la presión atmosférica del lugar de análisis y, por otro, evitar la posible contaminación atmosférica. Las muestras de gas del suelo recolectadas serán analizadas para la determinación de: La composición química de los gases del suelo H_2 , O_2 , N_2 , CO_2 y CH_4 , mediante un microcromatógrafo de gases modelo VARIAN CP4900. La composición química e isotópica de los gases He y Ar usando espectrómetro de masas tipo cuadrupolar modelo Pfeiffer Omnistar 422 y La firma isotópica del carbono ($\delta^{13}C-CO_2$) en el gas del suelo usando un espectrómetro de masas (IRMS) Finnigan modelo MAT 253.

2.6 Contexto tectónico-regional y su relación con el flujo de calor

El Archipiélago Canario se sitúa en el margen noroccidental de la placa africana, sobre litosfera oceánica de edad mesozoica (aproximadamente 150–180 Ma), frente a la costa del noroeste de África. Aunque este contexto tectónico se encuentra alejado de los límites activos de placas, presenta una de las anomalías térmicas más relevantes del Atlántico oriental, resultado de procesos magmáticos y tectónicos intraplaca que han dado lugar a la formación de un conjunto de islas volcánicas de origen oceánico (Carracedo et al., 1999; Fernández et al., 2010).

Desde el punto de vista geodinámico, las Islas Canarias se desarrollan en un entorno donde la actividad volcánica ha estado activa de forma intermitente durante los últimos 20 millones de años. Su génesis ha sido explicada mediante varios modelos: el modelo de punto caliente (hotspot fijo), el modelo de fracturación litosférica por domamiento térmico, y el modelo de propagación de pluma sublitosférica asociada a estructuras reactivadas en la corteza oceánica (Anguita & Hernán, 2000; Martí & Mitjavila, 1995).

Independientemente del modelo interpretativo, es ampliamente aceptado que la actividad magmática prolongada y el ascenso de material mantélico parcialmente fundido han producido anomalías térmicas que elevan significativamente el gradiente geotérmico regional respecto al promedio de la litosfera oceánica o continental. Mientras que en zonas continentales como la península ibérica los gradientes geotérmicos promedio se sitúan entre 25–30 °C/km, en Canarias se han reportado valores de hasta 60–80 °C/km en algunos sectores con intensa actividad magmática reciente (Fernández et al., 2005; Pérez et al., 2011).

La tectónica reciente en Canarias, especialmente la presencia de sistemas de rift y fallamiento en las islas centrales como Tenerife y La Palma, ha facilitado la migración de magmas y gases hacia la superficie. Estos sistemas, configurados como estructuras de triple unión en forma de estrella, generan zonas de debilidad litosférica que actúan como canales para el transporte de calor y fluidos desde la astenosfera superior hasta la corteza (Carracedo, 1994; Kröcher & Buchner, 2008).

Este fenómeno se traduce en una redistribución del flujo de calor, concentrando el gradiente térmico en áreas donde la corteza ha sido térmicamente reactivada por intrusiones magmáticas o actividad volcánica reciente. Las medidas de flujo de calor directo en Canarias son escasas debido a la complejidad del terreno y al escaso número de sondeos profundos, pero los datos indirectos obtenidos a partir de modelos geofísicos y geoquímicos han permitido estimar un flujo de calor superior a 100 mW/m² en zonas como Tenerife y El Hierro (Fernández et al., 2010; D'Auria et al., 2013).

En comparación con el territorio continental español, el archipiélago canario presenta condiciones térmicas mucho más favorables para el aprovechamiento geotérmico. Mientras que en la península ibérica el potencial geotérmico se concentra en sistemas de baja y media entalpía asociados a anomalías radiogénicas (granitos) o cuencas sedimentarias, en Canarias el calor proviene mayoritariamente del manto, a través de procesos magmáticos recientes o activos.

Esta diferencia se traduce en la posibilidad de encontrar reservorios con temperaturas superiores a los 150 °C a profundidades menores de 2.000 metros, lo que permite su clasificación como sistemas de alta entalpía, aptos para la producción de electricidad mediante ciclos binarios o incluso vapor seco, según la temperatura del fluido (Álvarez et al., 2013; IEA, 2022).

2.7 Dominio minero Garehagua

El Dominio Minero Garehagua, situado en el sur de Tenerife, abarca 297 cuadrículas mineras otorgadas en 2008 para la investigación de recursos geotérmicos de alta entalpía. Se extiende por los municipios de Vilaflor, Granadilla de Abona, San Miguel y Arona, constituyendo el principal foco de estudio de esta tesis. Este dominio se considera prometedor gracias a la coincidencia de estructuras volcánicas activas y evidencias de anomalías geotérmicas en superficie (Rodríguez et al., 2022).

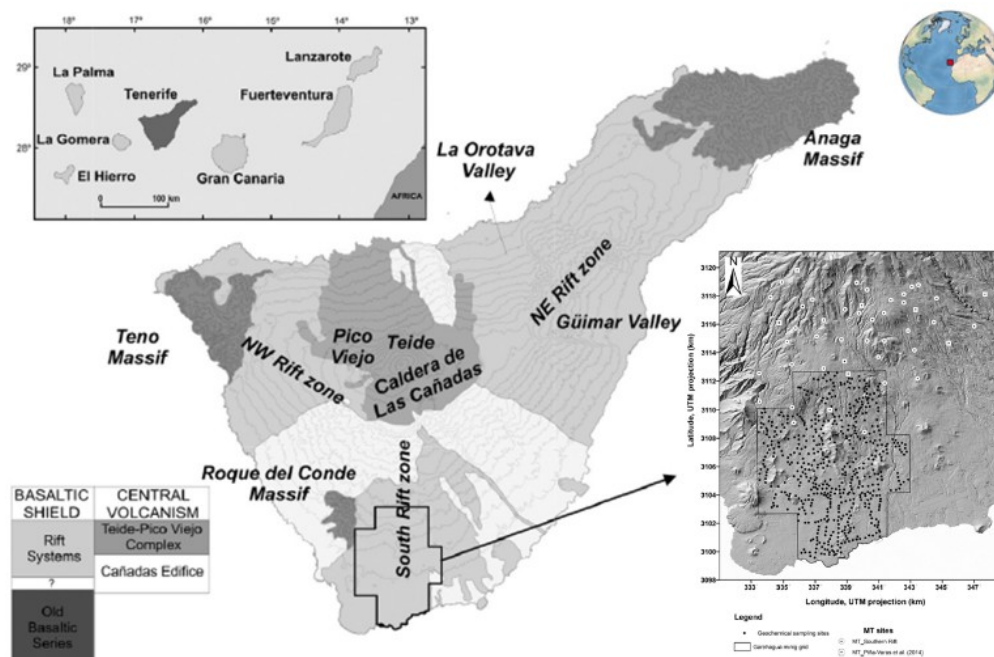


Figura 22. Dominio minero Garehagua

3. Fundamentos teóricos y geoquímicos de la desgasificación difusa

3.1 Procesos de desgasificación en sistemas volcánico-hidrotermales

En regiones volcánicas activas, los procesos de desgasificación difusa ocurren a través de redes de fracturas y suelos, liberando CO_2 , H_2 , CH_4 , H_2S , He y otros gases (Hernández et al., 2000). El estudio de estos fenómenos aporta información sobre la dinámica de los reservorios subyacentes y los posibles aportes magmáticos.

El CO_2 es, junto con el vapor de agua, la principal especie volátil de los sistemas volcánico-hidrotermales, presentando así un importante papel en los procesos físico-químicos de los mismos. Posee una reducida solubilidad en fundidos silicatados y esto hace que sea de los primeros volátiles en escapar del magma a presiones moderadas (Barnes & Allison, 1988; Baubron et al., 1991; Gerlach, 1989; Gerlach & Tylor, 1990; Giggenbach, 1987, 1992; Pan et al., 1991; Stolper & Holloway, 1988; Symonds et al., 1996). No obstante, la presencia de CO_2 en terrenos volcánicos puede ser también consecuencia del metamorfismo térmico de rocas ricas en carbonato (CO_3^{2-}), de procesos biogénicos o de la mezcla de dicho gas presente en diferentes reservorios (Gerlach & Graeber, 1985; Irwin & Barnes, 1980). Por este motivo, la mayoría de los estudios realizados en el ámbito de la desgasificación difusa en sistemas volcánicos prestan atención principalmente al CO_2 , evidenciando una importante relación entre el flujo difuso de CO_2 y las características volcano-estructurales y con dinámica eruptiva (Aiuppa et al., 2019; Allard et al., 1987, 1991; Bini et al., 2019; Carbonelle et al., 1985; Baubron et al., 1990, 1991; Cardellini et al., 2003; Chiodini et al., 1996, 2015; Farrar et al., 1995; Frondini et al., 2004; Giammanco et al., 1995; Granieri et al., 2014; Hernández et al., 1998, 2001, 2003, 2006; Lamberti et al., 2019; Melián et al., 2004; Notsu et al., 2005; Padrón et al., 2007, 2008; Pérez, 1992; Pérez et al., 1996, 2004, 2006; Robertson et al., 2016; Salazar et al., 2001, 2003).

Los estudios de desgasificación difusa de CO_2 en áreas volcánicamente activas tienen especial interés en la exploración de recursos geotérmicos ya que estas emanaciones gaseosas están generalmente asociadas a zonas donde existe flujo y gradiente de calor (Bertrami et al., 1990; Bloomberg et al., 2014; Finlayson, 1992; Fridriksson et al., 2006; Granieri et al., 2014; Hanson et al., 2014; Jolie et al., 2015; Rissmann et al., 2012; Rodríguez et al., 2015; Voltattorni et al., 2010). Esta metodología, además de presentar un bajo costo en comparación con otras más convencionales, es de muy sencilla aplicación y permite delimitar las zonas donde se produce una emisión anómala de gases a la superficie. Estas zonas están generalmente caracterizadas por una alta permeabilidad y pueden estar relacionadas con descargas de fluidos asociados a sistemas

hidrotermales de alta temperatura (Bloomberg et al., 2014; Granieri et al., 2014; Hanson et al., 2014; Rissmann et al., 2012).

La determinación de la relación de los isótopos estables del carbono en el CO_2 , $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$, es una herramienta ampliamente utilizada en geoquímica para caracterizar el origen de los gases procedentes de las emisiones volcánico-hidrotermales. La proporción de isótopo estable de un elemento se representa a través de la notación delta ($\delta^{13}\text{C} - \text{CO}_2$), en relación a un estándar. Así, para el carbono:

$$\delta^{13}\text{C} - \text{CO}_2 (\text{‰}) = \left(\frac{\left(\frac{^{13}\text{C}}{^{12}\text{C}} \right)_{\text{muestra}}}{\left(\frac{^{13}\text{C}}{^{12}\text{C}} \right)_{\text{estandar}}} - 1 \right) \times 1000$$

Para el estándar internacional del carbono, que es el Vienna Pee Dee Belemnite (VPDB), la relación $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ VPDB es de $1,122 \times 10^{-2}$. Las especies químicas pueden presentar fraccionamiento isotópico por diversos procesos naturales debido a causas cinéticas como reacciones químicas, a procesos de difusión o a situaciones de equilibrio dinámico. Valores positivos (+) indican enriquecimiento en ^{13}C respecto al estándar, y valores negativos (−) indican empobrecimiento. En los procesos naturales, como por ejemplo la fotosíntesis, se tiende al enriquecimiento en ^{12}C de los compuestos orgánicos biológicamente sintetizados, mientras que las reacciones de intercambio entre el CO_2 gas y las especies acuosas carbonatadas tienden al enriquecimiento en ^{13}C . Debido a estos procesos, la abundancia isotópica de ^{13}C en el “carbono terrestre” varía aproximadamente hasta en un 10%. El carbono biogénico en su gran mayoría presenta valores de $\delta^{13}\text{C} - \text{CO}_2$ entre -24 y -30‰, el carbono de origen hidrotermal suele presentar una firma isotópica ≥ -3 ‰, mientras que el carbono de origen magmático oscila entre -5 y -7‰. Aunque de forma minoritaria, el H_2 es una especie presente en la mayoría de las emisiones volcánicas (Giggenbach, 1987) y participa en las reacciones redox que tienen lugar en los gases magmáticos. Este gas puede ser producido en la corteza terrestre por diferentes procesos. La fuente principal es probablemente la reacción del agua con el FeO en el magma, aunque también se puede generarse mediante la reacción del agua con carbono de origen mantélico o por la descomposición de materia orgánica en reacciones del agua con superficies “frescas” de rocas debido a actividad tectónica en zonas de fallas activas (Sato, 1988). Debido a su bajo peso y baja solubilidad en el agua subterránea y fluidos hidrotermales, el H_2 generado dentro de la corteza se mueve rápidamente y es liberado a la atmósfera. Estas características hacen al H_2 uno de los mejores indicadores geoquímicos de actividad magmática y geotérmica en profundidad. Durante las últimas décadas se han hecho esfuerzos para medir concentración y flujo de H_2 en una variedad de fluidos volcánicos (Sato, 1988), incluyendo aguas termales (Hirabayashi et al, 1986), gases de la atmósfera del suelo (Giammanco et al, 1998, Melián et al., 2007) y gases magmáticos de alta temperatura (Giggenbach 1996).

El He también es un gas minoritario en las emisiones de origen volcánico. Puede ser producido en profundidad, principalmente debajo de capas sedimentarias, como producto de la desintegración en varias series de descomposición radiactiva en forma de partículas alfa. La presencia de anomalías de gas He en superficie está relacionada principalmente con la migración de fluidos de origen profundo controlada por las características tectónicas de la zona. Debido a su inercia química, estabilidad física, baja solubilidad en agua en condiciones ambientales y baja capacidad de adsorberse, el He se considera un indicador geoquímico casi ideal (Pogorski y Quirt, 1981). En los estudios sobre los gases que forman la atmósfera del suelo, generalmente el contenido en He se presenta como la diferencia con el contenido de He en la atmósfera (5230 ± 10 ppb). El enriquecimiento en He en la atmósfera del suelo, asociado a la presencia de fallas o reservorios de hidrocarburos, sistemas hidrotermales o cámaras magmáticas puede ser del orden de miles de ppb. La concentración de dicho gas en la atmósfera superficial del suelo proporciona información sobre la localización y características de la fuente de gas y de la fracturación de la corteza terrestre (D'Alessandro et al., 1997; Duddridge et al., 1991; Durrance & Gregory, 1988; Jones et al., 1983; Padrón et al., 2003).

Otro gas interesante para el estudio del potencial geotérmico de una determinada zona es el radón (^{222}Rn). Se trata de un gas noble procedente de la cadena de desintegración radiactiva del radio (Ra) y se produce continuamente en el interior de la corteza (Tanner, 1978), siendo generalmente transportado a la superficie por otros gases que se encuentran en mayor concentración en el suelo como CO_2 , N_2 y CH_4 (Etiope & Lombardi, 1995; Etiope & Martinelli, 2002; Parello et al., 1995; Shapiro et al., 1982; Yang et al., 2003, 2005). La intrusión de magma o el aumento de temperatura en los sistemas volcánico-hidrotermales son también posibles fuentes de Rn. Este gas cuenta con características geoquímicas que lo hacen muy atractivo para los estudios ambientales y de ciencias de la tierra, ya que tiene la capacidad de migrar a grandes distancias en la tierra y en la atmósfera, puede ser medido con gran precisión y en concentraciones muy bajas y puede ser utilizado como trazador de diferentes procesos ambientales y geológicos. Las concentraciones de uranio (U) y torón (Th) en las rocas de la corteza y en los materiales del suelo determinan la cantidad de Rn producido en el suelo y detectado en superficie. Los materiales basálticos que conforman la mayoría de las áreas volcánicas tienen un contenido medio de 0,8 ppm de U y 5 ppm de Th (^{220}Rn), progenitores originales del ^{222}Rn y ^{220}Rn (Etiope & Martinelli, 2002; Fleischer & Magro-Campeo, 1978; Gingrich & Fischer, 1976; Hernández, 1997; Shapiro et al., 1982). El Rn existe en el fluido geotermal y la emisión de éste en superficie puede ser detectada debido a sus características radiactivas, que permiten su detección con instrumentos relativamente pequeños en concentraciones muy bajas. Cabe destacar que el ^{222}Rn también ha sido muy usado como elemento traza en el estudio geoquímico de sistemas volcánico-geotermiales (Belin, 1959; Del Pezzo et al., 1981; Cigolini et al., 2009; Díaz Lagos et al., 2019; Giammanco et al., 2007; Harley et al., 2005; Hernández et al., 2004; Imme et al., 2006; Heiligmann et al., 1997; Laiolo et al., 2012; 2016; Padilla et al., 2013; Padrón et al., 2003; Pérez et al., 1992, 2004; Sciarra et al., 2019; Semprini y Kruger, 1984; Whitehead, 1984;). Son muchos los estudios realizados en el campo geotermal en el que se han encontrado concentraciones altas de ^{222}Rn , tanto en aguas termales

como en los gases del horizonte edáfico (Díaz Lagos et al., 2019). Siendo así, la prospección geoquímica de esta especie en el horizonte edáfico ha sido una técnica de apoyo muy importante en la identificación de las áreas más idóneas para la perforación de sondeos en campañas de exploración geotérmica (Whitehead et al., 1983).

Por otra parte, la prospección geoquímica de elementos volátiles como el mercurio (Hg) en el horizonte edáfico ha sido utilizada como un instrumento muy útil para la detección de zonas anómalas de flujo de calor y de ascenso de fluidos hacia la superficie a través de zonas con mayor permeabilidad (Bagnato et al., 2007, 2009, 2018; Ferrara et al., 2000; Hernández et al., 2004b; Kalinchuk et al., 2019; Lecinsky et al., 1987; Marumoto et al., 2017; Matlick & Buseck, 1975; Melián et al., 2004a; Murray, 1997; Nakagawa, 1999; Padrón et al., 2003; Pérez, 1992; Phelps & Buseck, 1980; Shiikawa, 1983; Tomiyasu et al., 2000; Van Kooten, 1987; Varekamp & Buseck, 1983, 1984; Wang et al., 2006;). La movilidad de estos fluidos es un fenómeno complejo, donde la temperatura es un factor determinante. El Hg en sistemas hidrotermales es transportado principalmente en forma de complejos con azufre (Hg-S). El mercurio elemental (Hg^0) se encuentra en concentraciones anómalas en emisiones geotermiales, lo que sugiere que el Hg^0 está presente en la fase líquida del sistema geotérmico. Cuando se genera la fase vapor en el sistema geotermal, el Hg^0 se particiona favorablemente en la fase vapor, siendo transportado a niveles superficiales, y generando la deposición de Hg en el horizonte edáfico o su emisión a la atmósfera (Varekamp & Buseck, 1984).

Asimismo, las especies del azufre, como el dióxido de azufre (SO_2) y el sulfuro de hidrógeno (H_2S), constituyen después del H_2O y el CO_2 los componentes más importantes de las emisiones volcánicas. El equilibrio entre ambas especies se consigue muy rápido y es controlada por las condiciones redox del sistema a baja temperatura y presión. El par redox $\text{H}_2\text{S}/\text{SO}_2$ se considera el principal agente reductor de los sistemas volcánicos y, por ello, muchos han sido los estudios que se han enfocado en la determinación tanto de SO_2 (Arellano et al., 2017; Boichu et al., 2010; Burton et al., 2015; Fickel & Delgado Granados, 2017; Hayer et al., 2016; Henley et al., 2016; Hidalgo et al., 2016; Kalacheva et al., 2016; Kern et al., 2014; Nadeau et al., 2014; Schiavo et al., 2019; Shinohara et al., 2011; Smekens & Gouhier, 2018; Smekens et al., 2015; Stebel et al., 2019; Stoiber et al., 1987; Werner et al., 2013) como de H_2S (Deering et al., 2019; Inguaggiato et al., 2005; Kalacheva et al., 2016; Kikawada et al., 2017; Melián et al., 2004, 2006; Olmos et al., 2005; Shinohara et al., 2011). El estudio del H_2S en suelo en sistemas volcánico-hidrotermales es interesante desde el punto de vista geotérmico. No obstante, investigaciones realizadas en sistemas como el Teide o Cerro Negro (Melián et al., 2004, 2006; Olmos et al., 2005) demuestran que los valores significativos de H_2S se concentran en las zonas de alta permeabilidad del suelo, asociadas, generalmente a la presencia de fumarolas.

En las Islas Canarias, las manifestaciones geotérmicas superficiales no son tan evidentes como en otros sistemas volcánicos insulares activos a escala global. Cuando las evidencias de descargas de fluidos hidrotermales son escasas o inexistentes y se desconocen las dimensiones del campo geotérmico, los trabajos de geoquímica de gases del suelo proporcionan una extraordinaria ayuda en la primera fase de exploración.

3.2 Principales gases endógenos de interés geotérmico: CO₂, He, H₂, Rn, H₂S, SO₂

Los gases endógenos que migran desde el subsuelo hacia la superficie a través de fallas, fracturas y estructuras volcánicas juegan un papel clave en la exploración geotérmica. Su análisis permite inferir la existencia, profundidad, temperatura y dinámica de los reservorios hidrotermales. Entre ellos, destacan el dióxido de carbono (CO₂), el helio (He), el hidrógeno (H₂), el radón (²²²Rn), el ácido sulfhídrico (H₂S) y el dióxido de azufre (SO₂), tanto por su origen como por su comportamiento geoquímico en medios volcánicos.

3.2.1 Dióxido de carbono (CO₂)

El CO₂ es, después del vapor de agua, el gas más abundante emitido por los sistemas magmáticos e hidrotermales. Su baja solubilidad en magmas silicatados facilita su exsolución durante el ascenso del magma, acumulándose en los reservorios geotérmicos y escapando hacia la superficie a través de zonas de alta permeabilidad. Su presencia en concentraciones elevadas en el suelo puede indicar zonas de ascenso de fluidos profundos y es, por ello, uno de los parámetros más utilizados en estudios de degasificación difusa.

Los orígenes del CO₂ detectado en superficie pueden dividirse en:

- Biogénico: generado por la respiración de raíces y actividad microbiana en el suelo.
- Atmósfera: presente en equilibrio con la composición del aire.
- Profundo:
 - Magmático: típicamente asociado a actividad volcánica activa o remanente.
 - Hidrotermal: exsolución de fluidos calientes que han interactuado con rocas profundas.
 - Corteza sedimentaria: por disolución de carbonatos o descomposición de materia orgánica.

La distinción entre estas fuentes se realiza mediante análisis isotópico ($\delta^{13}\text{C}$) y relaciones entre gases nobles y CO₂ (ver sección 3.3).

3.2.2 Helio (He)

El helio es un gas noble cuya concentración en el suelo, aunque muy baja en términos absolutos, resulta extremadamente informativa desde el punto de vista geotérmico. Existen dos principales fuentes de helio:

- ⁴He: de origen radiogénico, producido por la desintegración de U y Th en la corteza.
- ³He: de origen primordial, procedente del manto.

Su relación isotópica $^3\text{He}/^4\text{He}$, así como las razones He/Ne o He/CO_2 , permiten inferir la procedencia del helio y cuantificar la influencia magmática en los sistemas geotérmicos.

Además, debido a su movilidad y baja interacción con el entorno (no es absorbido ni consumido por procesos biogeoquímicos), el He es un excelente marcador de fracturas activas y estructuras de permeabilidad vertical.

3.2.3 Hidrógeno (H_2)

El H_2 es un gas reducido de gran interés geoquímico, presente en concentraciones traza en la atmósfera ($\sim 0,5$ ppm), pero que puede alcanzar niveles significativamente mayores en zonas afectadas por actividad tectónica o hidrotermal. Su presencia puede atribuirse a:

- Reacciones redox profundas (por ejemplo, serpentinización).
- Interacción agua-roca a altas temperaturas.
- Descomposición térmica de materia orgánica en profundidad.
- Actividad tectónica, que promueve la oxidación de minerales ferrosos o la radiolisis del agua.

Dado que el H_2 es rápidamente consumido en ambientes biológicos (por bacterias metanogénicas, sulfatorreductoras, etc.), su detección en el suelo implica una fuente continua y profunda, siendo un excelente marcador de sistemas activos o estructuras de permeabilidad reciente.

3.2.4 Radón (^{222}Rn)

El radón es un gas noble radiactivo generado por la desintegración del ^{238}U presente en los minerales de la corteza. Con una vida media de 3,8 días, su movilidad en el subsuelo es limitada, pero suficiente para alcanzar la superficie si existen vías rápidas de escape, como fracturas o zonas de alta porosidad.

Su distribución espacial es útil para:

- Detectar fallas ocultas.
- Delimitar zonas de fracturamiento tectónico reciente.
- Inferir variaciones en la actividad de fluidos profundos en respuesta a cambios en el estrés regional o en la actividad magmática.

La interpretación del ^{222}Rn es, sin embargo, compleja, ya que está influenciada por múltiples factores: humedad, temperatura del suelo, contenido de materia orgánica y textura del sustrato. Su estudio complementa las técnicas geoquímicas tradicionales, actuando como un posible indicador de procesos dinámicos en el subsuelo, contribuyendo a una caracterización más integral de los sistemas geotérmicos y mejorando la precisión en la identificación de zonas con potencial energético.

3.2.5 Ácido sulfhídrico (H₂S) y dióxido de azufre (SO₂)

Aunque menos abundantes y más reactivos que otros gases considerados, tanto el H₂S como el SO₂ son componentes relevantes en emisiones fumarólicas y pueden ser detectados en el suelo bajo condiciones específicas:

- H₂S: generado en ambientes reductores a partir de sulfatos o por actividad bacteriana, también presente en gases hidrotermales. Su presencia en el suelo, sin embargo, está fuertemente condicionada por la oxidación superficial.
- SO₂: gas oxidante típicamente asociado a procesos magmáticos de alta temperatura. Su detección en el suelo es infrecuente, debido a su alta solubilidad en agua y su rápida conversión en ácido sulfúrico.

Por su toxicidad y reactividad, estos gases suelen monitorizarse preferentemente en zonas con emisiones visibles (fumarolas) o mediante técnicas instrumentales de mayor sensibilidad.

3.3 Orígenes y trazadores isotópicos

La identificación del origen de los gases presentes en la atmósfera del suelo es un aspecto fundamental en la exploración geoquímica de sistemas geotérmicos. Para ello, el análisis isotópico constituye una herramienta clave, ya que permite discriminar entre fuentes profundas (magmáticas o hidrotermales) y superficiales (biogénicas o atmosféricas). Esta distinción es crucial para interpretar correctamente las anomalías geoquímicas detectadas y para evaluar el potencial geotérmico de un área determinada.

Uno de los trazadores más utilizados en estudios de gases del suelo es el isótopo estable del carbono, expresado como $\delta^{13}\text{C}$ respecto al estándar VPDB (Vienna Pee Dee Belemnite). Las diferentes fuentes de CO₂ presentan rangos característicos de $\delta^{13}\text{C}$ que permiten inferir su origen:

- CO₂ de origen biogénico (producción microbiana y radicular en el suelo): $\delta^{13}\text{C} \approx -24\text{‰}$ a -15‰ .
- CO₂ de origen atmosférico: $\delta^{13}\text{C} \approx -8\text{‰}$.
- CO₂ de origen magmático o hidrotermal profundo: $\delta^{13}\text{C} \approx -6\text{‰}$ a -2‰ (Giggenbach, 1992; Hernández et al., 2000).

El análisis conjunto del isótopo $\delta^{13}\text{C}$ y la concentración molar de CO₂ permite la aplicación de modelos de mezcla que ayudan a identificar las fuentes de emisión gaseosa. Un enfoque común consiste en el uso de diagramas binarios $\delta^{13}\text{C}$ vs 1/[CO₂], que permiten estimar las proporciones relativas de las distintas contribuciones (atmosférica, biogénica y/o hidrotermal).

Esta metodología ha sido aplicada con éxito en Tenerife y otras islas del archipiélago canario, donde ha permitido delimitar zonas con aportes significativos de CO₂ de origen profundo, asociado a procesos magmáticos o hidrotermales.

El helio, debido a su naturaleza química inerte, constituye un excelente trazador de procesos geodinámicos profundos. En particular, la razón isotópica $^3\text{He}/^4\text{He}$ (expresada como R en una muestra) se ha consolidado como un indicador clave del origen del helio, permitiendo distinguir entre fuentes mantélicas, radiogénicas (crustales) y, en menor medida, atmosféricas.

- Valores cercanos a 1 en el cociente R/Ra (donde Ra representa la razón isotópica del helio atmosférico, $\sim 1.39 \times 10^{-6}$) indican un origen crustal o radiogénico, asociado a la desintegración del uranio (U) y del torio (Th).
- Valores superiores a 4–5 R/Ra sugieren una contribución significativa de helio primordial procedente del manto superior.
- Valores iguales o superiores a 7 R/Ra son característicos de zonas volcánicas activas y reflejan emanaciones magmáticas directas, con escasa interacción con materiales crustales.

En el caso específico de la zona de Garehagua (Tenerife), se ha identificado un punto de emisión gaseosa dentro de una galería de agua (Fuente del Valle) con valores de $^3\text{He}/^4\text{He} \approx 7.0 \text{ R/Ra}$, lo que constituye una evidencia clara de la migración de gases desde un reservorio magmático profundo facilitada por la presencia de estructuras de alta permeabilidad.

Además del carbono y el helio, otros gases nobles e isótopos asociados (como neón, argón y el propio helio) pueden utilizarse para refinar la caracterización de los procesos de mezcla entre diferentes fuentes gaseosas. Razones como He/Ne o CO_2/Ar son especialmente útiles para distinguir entre orígenes atmosféricos, biogénicos y volcánicos, sobre todo cuando se integran con concentraciones absolutas y análisis isotópicos complementarios.

La baja solubilidad de estos gases en agua, junto con su mínima interacción con la matriz del suelo, favorece que sus concentraciones relativas se mantengan relativamente constantes durante el ascenso desde la fuente profunda, lo que permite una interpretación más fiable y directa de la señal geoquímica original.

3.4 Técnicas de prospección geoquímica: fundamentos, ventajas y limitaciones

La prospección geoquímica integra diversas metodologías, como el muestreo de gases en el horizonte edáfico, la medición de radón y los análisis cromatográficos e isotópicos. La combinación de estos datos con técnicas de aprendizaje automático (Machine Learning) permite una aproximación multidisciplinar más robusta y eficiente en la exploración geotérmica (Chang et al., 2020).

En zonas donde existen manifestaciones geotérmicas visibles (fumarolas, fuentes termales, etc.), los estudios geoquímicos se centran en la caracterización química e isotópica de estas expresiones superficiales. Sin embargo, en áreas sin indicios térmicos evidentes, el análisis de

gases del suelo y volátiles retenidos en la matriz edáfica puede aportar información valiosa sobre la posible migración de fluidos profundos a lo largo de estructuras tectónicas activas.

Los gases emitidos por sistemas geotérmicos activos pueden ascender a través de la cobertura superficial mediante distintos mecanismos de transporte. Debido a su alta movilidad, ciertos compuestos volátiles actúan como trazadores pioneros en la detección de sistemas geotérmicos ocultos. Estos gases pueden alcanzar la superficie mediante difusión, transporte convectivo de fluidos ascendentes o migración advectiva a través de fracturas, fallas u otras discontinuidades estructurales.

No obstante, la prospección geoquímica presenta también una serie de limitaciones inherentes que deben considerarse en el diseño e interpretación de los estudios. Entre los factores más relevantes se encuentra la influencia de condiciones meteorológicas (precipitación, temperatura, presión barométrica), que pueden alterar temporalmente las concentraciones de gases en el suelo. Asimismo, la heterogeneidad litológica y edáfica, así como la presencia de coberturas impermeables o suelos altamente compactados, puede dificultar la migración vertical de los gases, generando zonas de falsa ausencia o de señal atenuada.

Otra limitación importante es la resolución espacial de los muestreos, que depende de la densidad de puntos de análisis y de la escala del levantamiento. En sistemas geotérmicos ocultos, donde no existen señales térmicas evidentes, una cobertura insuficiente puede llevar a subestimar o incluso omitir anomalías geoquímicas relevantes. Finalmente, la interpretación de datos geoquímicos en medios volcánicos activos requiere una cuidadosa distinción entre señales asociadas a procesos hidrotermales profundos y aquellas derivadas de la degeneración biogénica o procesos superficiales de descomposición orgánica.

3.5 Métodos Geoquímicos Asociados a la Exploración Geotérmica: Perspectivas Recientes

En las últimas décadas, los métodos geoquímicos se han consolidado como una herramienta esencial en la exploración de recursos geotérmicos, especialmente en entornos volcánicos e insulares donde las manifestaciones térmicas superficiales pueden ser escasas o ausentes. La geoquímica permite inferir procesos subsuperficiales a partir del estudio de la composición, el origen y la evolución de los gases y fluidos presentes en el subsuelo, contribuyendo de manera significativa a la delimitación de zonas activas y a la reducción del riesgo exploratorio (D'Amore & Panichi, 2020; Marini, 2021).

Los recientes avances tecnológicos han permitido mejorar notablemente la sensibilidad analítica, la resolución espacial y la integración multivariable de los datos geoquímicos. En particular, el estudio de emisiones difusas de gases del suelo —tales como CO₂, He, CH₄ y ²²²Rn— ha demostrado ser eficaz para identificar zonas de alta permeabilidad estructural, relacionadas con la ascensión de fluidos hidrotermales profundos (Pérez et al., 2019; Aiuppa et al., 2022). Estos

enfoques han evolucionado desde una perspectiva principalmente descriptiva hacia modelos cuantitativos y estadísticos más robustos, capaces de reconocer patrones complejos incluso en la ausencia de evidencias térmicas superficiales.

El análisis de razones isotópicas (como $\delta^{13}\text{C}$ en CO_2 o $^3\text{He}/^4\text{He}$) proporciona información esencial sobre el origen magmático, sedimentario o biogénico de los gases, lo que permite una caracterización más precisa de los procesos fuente (Tassi et al., 2020). Estas herramientas son fundamentales para discriminar entre señales profundas y emisiones de origen superficial, mejorando la interpretación geoquímica en sistemas activos.

Además, el desarrollo de instrumentación portátil para análisis in situ, junto con la disponibilidad de bases de datos geoquímicas de alta resolución y la incorporación de técnicas multivariantes — como análisis de componentes principales (PCA), clustering o algoritmos de aprendizaje automático— han transformado la geoquímica en una disciplina altamente cuantitativa y predictiva (Chiodini et al., 2023; Somma et al., 2021).

En conjunto, estos avances han elevado el papel de la geoquímica desde una herramienta auxiliar a un componente central en la evaluación de sistemas geotérmicos, particularmente en zonas de alta entalpía, donde las señales geoquímicas constituyen un reflejo directo de la dinámica del reservorio hidrotermal.

3.6 Parámetros Fundamentales en la Exploración Geotérmica

En el contexto de la exploración geotérmica de superficie, la composición y distribución de determinados gases en el horizonte edáfico constituyen indicadores fundamentales para la detección de sistemas hidrotermales activos o latentes. El análisis de sus concentraciones absolutas, relaciones molares y firmas isotópicas permite no solo diferenciar entre fuentes profundas (magmáticas e hidrotermales) y aportaciones superficiales (de origen biogénico o atmosférico), sino también identificar estructuras de permeabilidad vertical asociadas a fracturas activas. Estos parámetros resultan especialmente útiles para delimitar zonas de interés geotérmico en regiones sin manifestaciones térmicas evidentes en superficie.

3.6.1 Coordenadas Geográficas y Altitud (Long/Lat, H(m))

El registro preciso de la ubicación geográfica y la altitud es fundamental para relacionar la distribución espacial de los parámetros geoquímicos con las estructuras geológicas y tectónicas del área de estudio. Su importancia radica en:

- Cartografía Geotérmica: Permite la georreferenciación de anomalías geoquímicas y la delimitación precisa de zonas de interés exploratorio.
- Análisis Espacial de Datos: Facilita la integración y correlación de información geoquímica con datos geofísicos, geológicos y estructurales.

3.6.2 Flujo difuso de CO₂

El flujo difuso de dióxido de carbono (CO₂), expresado en g·m⁻²·día⁻¹ y medido mediante cámaras de acumulación equipadas con sensores infrarrojos, constituye una de las variables más sensibles y ampliamente empleadas en la exploración geotérmica superficial. Este parámetro integra aportes tanto biogénicos como profundos, y su distribución espacial permite identificar zonas de desgasificación activa, fracturamiento y conectividad entre el subsuelo y la superficie.

Valores anómalamente elevados de flujo difuso, particularmente cuando se correlacionan con enriquecimientos en gases como helio (He), hidrógeno (H₂) o radón (²²²Rn), suelen ser indicativos de la presencia de estructuras permeables que facilitan la ascensión de gases de origen profundo.

3.6.3 Neón (Ne)

El neón es un gas noble presente en bajas concentraciones en la atmósfera (~18 ppm) cuya principal utilidad radica en su comportamiento conservativo, lo que lo convierte en un excelente trazador para identificar fracciones atmosféricas en mezclas gaseosas.

En combinación con helio (He) y argón (Ar), el análisis del neón permite:

- Estimar el grado de dilución de una señal profunda dentro de una matriz atmosférica.
- Determinar el origen del helio mediante la relación He/Ne: valores elevados indican predominancia de helio procedente de fuentes profundas, mientras que relaciones próximas a la atmosférica reflejan una mayor dilución con aire.

3.6.4 Oxígeno (O₂)

El oxígeno es un parámetro clave en la caracterización geoquímica por su papel en:

- Validar la calidad de las muestras detectando posibles contaminaciones atmosféricas.
- Identificar procesos oxidativos y la presencia de gases reductores, como hidrógeno (H₂) o metano (CH₄).

Relaciones molares como CO₂/O₂ o H₂/O₂ permiten inferir:

- Procesos de consumo biológico del oxígeno.
- Aporte de gases profundos que desplazan al oxígeno en el suelo.
- Estado redox del subsuelo.

Otras relaciones relevantes, como O₂/N₂, facilitan la evaluación del equilibrio atmosférico y la detección de procesos de exclusión selectiva de gases.

3.6.5 Nitrógeno (N_2)

El nitrógeno representa la mayor fracción del aire (~78 %), pero su comportamiento en el subsuelo puede aportar información valiosa sobre procesos geotérmicos. En condiciones anóxicas o bajo influencia de aportes profundos, el N_2 puede presentar variaciones tanto en su concentración como en la relación N_2/O_2 .

En ambientes geotérmicos, se destacan:

- Un exceso de N_2 respecto al O_2 puede indicar un origen profundo, asociado a procesos como la descomposición térmica del amonio o la degasificación magmática.
- Relaciones elevadas de N_2/He suelen reflejar un origen principalmente atmosférico, mientras que relaciones bajas pueden ser indicativas de influencia de gases procedentes de fuentes profundas.

3.6.6 Metano (CH_4)

El metano (CH_4) puede originarse por diferentes procesos:

- Biogénico: producido por actividad microbiana anaerobia (fermentación).
- Termogénico: derivado de la descomposición térmica de materia orgánica.
- Abiogénico o magmático: menos frecuente, asociado a reacciones a altas temperaturas y presiones entre agua y rocas ultramáficas.

En el ámbito geotérmico, el metano es relevante por:

- La detección de procesos reductores profundos.
- Su empleo como trazador mediante razones como CH_4/CO_2 , que permiten distinguir zonas de oxidación-reducción, evaluar la madurez térmica del sistema y detectar posibles fuentes hidrotermales intermedias.

3.6.7 Isótopos de Argón (^{36}Ar , ^{38}Ar , ^{40}Ar)

El argón (Ar) es un gas noble monoatómico presente en la atmósfera en una proporción aproximada del 0,93 %, utilizado como trazador inerte en estudios geoquímicos. Los isótopos estables más relevantes son:

- ^{36}Ar y ^{38}Ar : de origen primordial y no radiogénico.
- ^{40}Ar : radiogénico, producido por la desintegración del potasio-40 (^{40}K) en la corteza terrestre.

Un aumento en la relación $^{40}Ar/^{36}Ar$ en gases del suelo puede reflejar aportes de argón radiogénico provenientes de fuentes profundas, lo cual indica interacción con rocas antiguas o

una circulación prolongada de fluidos hidrotermales. La combinación de estas relaciones isotópicas con parámetros como Ar/CO₂ o Ar/He contribuye a mejorar la interpretación del origen del gas total y a diferenciar entre señales de origen atmosférico y profundo.

3.6.8 Thoron (Tn)

El torón es un isótopo radiactivo del radón, perteneciente a la cadena de desintegración del torio-232 (²³²Th), con una vida media muy corta, aproximadamente 55 segundos. Debido a esta corta vida, su presencia en el gas del suelo indica procesos de emanación muy locales y próximos a la fuente.

Su detección resulta especialmente útil para:

- Localizar fracturas activas en superficie.
- Evaluar la tasa de escape vertical de gases.
- Complementar el análisis del radón-222 (²²²Rn), ya que la relación ²²⁰Tn/²²²Rn permite estimar la profundidad efectiva de la emisión.

En conjunto, el análisis de estos gases permite construir un perfil geoquímico integral del sistema hidrotermal, que abarca no solo su composición, sino también aspectos dinámicos, la interacción roca-fluido y la arquitectura estructural del subsuelo. La combinación de sus concentraciones, relaciones isotópicas y variabilidad espacial —complementada con modelado estadístico multivariable y herramientas geofísicas— constituye la base de una estrategia moderna, eficaz y no invasiva para la prospección geotérmica.

La Tabla 2 presenta una clasificación cuantitativa de diferentes parámetros geoquímicos usados en la exploración geotérmica, valorando su relevancia según distintos aspectos clave del estudio. Cada parámetro está evaluado en una escala del 1 al 5, donde 1 indica baja relevancia y 5 una importancia muy alta para la característica correspondiente. Se observa, por ejemplo, que:

El flujo difuso de CO₂ tiene una alta relevancia en indicadores de actividad geotérmica, zonas de interés, modelos ambientales y análisis isotópicos, destacando su papel fundamental para la caracterización general del sistema.

El neón (Ne) es muy útil para establecer relaciones con otros gases y en el análisis isotópico, lo que lo hace valioso para la interpretación del origen de los gases.

El hidrógeno (H₂) y el metano (CH₄) muestran alta relevancia en la identificación de condiciones redox y en el seguimiento de procesos hidrotermales, aportando información sobre la química de fluidos y reacciones subsuperficiales.

Los isótopos de argón (^{36}Ar , ^{38}Ar , ^{40}Ar) y el helio (He) destacan en la caracterización isotópica y el análisis de fluidos, ayudando a distinguir entre aportes superficiales y profundos.

El radón (^{222}Rn) y el torón (^{220}Tn) se valoran principalmente en la detección de fracturas activas y procesos locales de emanación gaseosa.

Esta matriz permite priorizar la selección de parámetros a medir según el objetivo específico del estudio geotérmico, optimizando recursos y focalizando el análisis en variables clave para cada fase de la exploración.

Características	Indicator of Geothermal Activity	Mapping Zones Of Interest	Temporal Monitoring	Relationship with Other Gases	Environmental Safety	Validation of Geothermal Models	Hydrothermal Alteration	Redox	Geothermal Fluid Composition Conditions	Gas Isotope Analysis	Tracing Fluid Movements	Temperature Indication
CO ₂ Flow	4	5	4	4	2	3	2	2	3	2	3	3
Ne (Neon)	3	2	3	5	1	4	3	1	3	5	4	3
H ₂ (Hydrogen)	2	3	4	4	1	4	5	3	2	3	3	5
O ₂ (Oxygen)	1	2	3	2	5	2	3	4	3	2	2	3
N ₂ (Nitrogen)	4	2	3	3	2	3	2	2	4	3	3	2
CH ₄ (Methane)	2	4	3	5	2	3	3	2	4	4	4	3
He (Helium)	2	2	2	4	1	4	4	3	4	5	4	4
^{36}Ar , ^{38}Ar , ^{40}Ar (Argon Isotopes)	3	3	3	3	1	5	4	3	5	5	4	4
$^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ (Carbon Isotope Ratio)	1	1	1	4	1	5	3	3	4	5	3	3
Rn (Radon)	5	4	5	3	5	2	2	2	2	3	5	3
Tn (Thoron)	3	2	3	2	2	1	1	1	1	2	3	2

Tabla 2. Comparativa de la relevancia de parámetros geoquímicos para la exploración de sistemas geotérmicos.

3.7 Background de datos geoquímicos

El concepto de *background* geoquímico es fundamental en la exploración geotérmica, ya que permite diferenciar las concentraciones naturales de los elementos en el suelo de posibles anomalías asociadas a procesos profundos. Sin embargo, su definición es compleja, ya que los valores de background varían significativamente de una región a otra debido a factores geológicos y biogeoquímicos. En el contexto de la exploración geotérmica, esta variabilidad representa un desafío al momento de interpretar datos geoquímicos de gases como CO₂, He o H₂, pues es esencial distinguir entre emisiones de origen volcánico-hidrotermal y aquellas que provienen de fuentes biogénicas o antropogénicas.

El análisis del background geoquímico debe considerar que no existe un único valor de referencia, sino un rango que depende de la geología local y de los procesos superficiales e internos que afectan la distribución de los elementos. En estudios geoquímicos aplicados a la exploración geotérmica, se ha observado que la variabilidad natural en suelos puede ser tan alta que, en algunos casos, supera el impacto de la actividad geotérmica profunda. Por ello, el uso de promedios globales o regionales sin una correcta contextualización puede llevar a

interpretaciones erróneas, especialmente cuando no se consideran factores como la alteración de suelos, el transporte de elementos o la influencia de fuentes superficiales.

Para abordar esta problemática, se emplean técnicas estadísticas que ayudan a definir umbrales (*thresholds*) y detectar anomalías significativas. Métodos como el análisis de distribución de frecuencia acumulada o el uso de clustering multivariante, incluyendo K-Means y DBSCAN, han demostrado ser eficaces para separar señales de interés geotérmico de la variabilidad de fondo. En este sentido, en estudios realizados en las Islas Canarias, la correcta identificación del background geoquímico ha permitido mejorar la detección de estructuras de alta permeabilidad, facilitando la caracterización de reservorios ocultos de energía geotérmica.

En el marco de la exploración geotérmica de superficie, la combinación del análisis geoquímico con técnicas de clustering resulta particularmente útil. Para obtener resultados fiables, es crucial que los datos sean previamente filtrados y normalizados, minimizando el ruido generado por la variabilidad natural del background. En este contexto, la integración de métodos estadísticos avanzados con el conocimiento geológico de la zona no solo mejora la precisión en la detección de áreas con potencial geotérmico, sino que también optimiza la toma de decisiones en la selección de sitios para perforaciones exploratorias.

Comprender y definir correctamente el background geoquímico es, por lo tanto, un paso esencial para diferenciar entre fuentes superficiales y profundas de gases en estudios geotérmicos. La aplicación de técnicas avanzadas de análisis de datos, junto con un enfoque geológico sólido, permite mejorar la caracterización de los sistemas geotérmicos y reducir la incertidumbre en la exploración. Este enfoque integrado no solo contribuye a la identificación más precisa de estructuras de interés, sino que también minimiza riesgos y costos en la planificación de futuros proyectos de energía geotérmica.

3.8 Clasificación de Aguas y Procesos de Mezcla

La clasificación de Giggenbach (1988) sigue siendo una referencia para caracterizar sistemas hidrotermales, segmentándolos en aguas cloruradas, sulfatadas ácidas y bicarbonatadas. Estas categorías ayudan a interpretar la evolución y madurez de los reservorios, así como los procesos de mezcla con fluidos meteóricos (Kennedy et al., 2021). Se utiliza un amplio abanico de diagramas (Piper, Schoeller-Berkaloff, Stiff, Giggenbach) para visualizar la composición iónica y detectar posibles cambios evolutivos de la chimenea hidrotermal:

- Aguas cloruradas neutras: Suelen presentar mayor capacidad de generación energética por estar asociadas a reservorios profundos con alto flujo de calor.
- Aguas sulfatadas ácidas: Indican procesos de absorción de gases magmáticos y pH bajo; a menudo representan sistemas inmaduros o zonas de interacción superficial.

- Aguas bicarbonatadas: Reflejan mezcla con CO_2 proveniente de fuentes profundas, a través de fracturas del terreno generando altos niveles de anión bicarbonato HCO_3^- y que suelen tener una mineralización global superior a 1 g/L. El CO_2 disuelto reacciona con el agua y minerales, aumentando la concentración de HCO_3^- .

3.9 Métodos Analíticos y Tendencias Actuales

La modernización de las técnicas analíticas ha revolucionado el estudio de los sistemas geotérmicos, permitiendo diagnósticos más precisos y la identificación de recursos de alta entalpía (temperaturas superiores a 150°C). A continuación, se detallan las metodologías clave y las tendencias emergentes.

3.9.1 Cromatografía de Gases (CG)

Principio: Separa y cuantifica compuestos volátiles en una muestra gaseosa mediante una columna cromatográfica y detectores específicos (ej. detector de ionización de llama).

Aplicaciones en geotermia:

- Identificación de gases magmáticos (CO_2 , H_2S , CH_4 , N_2) en fluidos geotérmicos, cruciales para evaluar la conexión con fuentes profundas.
- Detección de contaminantes (ej. mercurio Hg) en emisiones volcánicas.
- Sistemas portátiles para mediciones *in situ* en pozos o fumarolas, como el miniRUEDI (miniature rugged enhanced gas extraction and identification), Brennwald et al. (2016), que permite analizar en tiempo real y directamente sobre el terreno la composición de gases disueltos o atmosféricos (como He, H_2 , CO_2 , N_2 , O_2 , CH_4 , etc.).
- Sensibilidad mejorada (hasta ppb) para detectar trazas de gases nobles o especies reactivas.

3.9.2 Espectrometría de Masas (MS)

Principio: Mide la relación masa/carga (m/z) de iones para determinar composiciones isotópicas y concentraciones de elementos.

Aplicaciones en geotermia:

- Isótopos estables:
 - $\delta^{13}\text{C}$ (CO_2): Distingue entre fuentes orgánicas, carbonáticas o magmáticas.
 - $\delta^{18}\text{O}$ y $\delta^2\text{H}$ (H_2O): Identifica procesos de mezcla, ebullición o recarga del acuífero.
- Gases nobles (He, Ne, Ar):
 - La relación $^3\text{He}/^4\text{He} > 1 \text{ RA}$ (RA = relación atmosférica) indica contribución mantélica/magmática.
- Acoplamiento con CG (GC-MS) para análisis integrados de gases orgánicos e inorgánicos.

- Espectrómetros de alta resolución para discriminar isótopos en matrices complejas.

3.9.3 Espectroscopía de Absorción y Fotometría Avanzada

Técnicas destacadas:

- ICP-OES (Espectrometría de Emisión Óptica de Plasma Acoplado Inductivamente): Cuantifica cationes (Na^+ , K^+ , Ca^{2+}) y metales pesados en aguas termales.
- Espectrofotometría UV-Vis: Determina aniones (SO_4^{2-} , Cl^-) y sílice coloidal mediante reactivos colorimétricos.

Innovaciones:

- NANOCOLOR® Advance: Espectrofotómetro portátil con corrección automática de turbidez (IP67), ideal para análisis en campo en aguas salinas o turbias.
- Métodos sin reactivos químicos (ej. espectroscopía de infrarrojo cercano) para reducir residuos en laboratorio.

3.9.4 Métodos Integrados con Aprendizaje Automático

Se basa en la combinación de datos geoquímicos (gases, iones, isótopos) con algoritmos de IA para predecir características del reservorio.

Aplicaciones:

- Predicción de temperatura del reservorio: Modelos de regresión que relacionan SiO_2 , Na-K-Ca y ratios de gases nobles con la entalpía (Zuo et al., 2019).
- Localización de zonas supercríticas: Redes neuronales convolucionales (CNN) que integran datos de pozos, sísmica y geoquímica para identificar fluidos $>374^\circ\text{C}$ (Alakeely & Horne, 2020).
- Gestión de la inyección: Modelos recurrentes (RNN) que predicen el avance térmico en productores basándose en tasas de inyección (Gudmundsdottir & Horne, 2020).

Área	Tendencias	Ejemplo
Portabilidad	Equipos compactos y resistentes (IP67) para análisis en campo.	miniRUEDI (análisis de gases en tiempo real).
Automatización	Sistemas robóticos para muestreo continuo en pozos o fumarolas.	Robots muestreadores en campos geotérmicos de Islandia.
Integración multidisciplinar	Fusión de datos geoquímicos, geofísicos y satelitales (InSAR, termografía).	Modelos híbridos para exploración de recursos supercríticos (Reinsch et al., 2017).

Área	Tendencias	Ejemplo
Sostenibilidad	Técnicas de bajo consumo energético y minimización de residuos químicos.	Espectroscopía sin reactivos en aguas termales.

Tabla 3. Resumen de las tendencias actuales en técnicas analíticas y modelización aplicadas a la exploración y gestión de sistemas geotérmicos.

Los retos del futuro van encaminados al desarrollo de sensores resistentes a fluidos hipersalinos (>200 g/L) y $>300^{\circ}\text{C}$, las plataformas cloud para procesar terabytes de datos geoquímicos y geofísicos integrados (Big Data) y la transparencia en modelos predictivos para evitar sesgos en la exploración de recursos.

La sinergia entre técnicas analíticas avanzadas y herramientas computacionales está impulsando la geotermia hacia una era de precisión y eficiencia, esencial para la transición energética global.

3.10 Geotermometría de equilibrios múltiples

Además de los métodos tradicionales de análisis geoquímico, la Geotermometría de Equilibrios Múltiples cobra cada vez más relevancia en el estudio de sistemas volcánico-hidrotermales (Giggenbach, 1988; Fournier, 1991). Esta metodología integra diversos geotermómetros químicos (por ejemplo, Na-K, K-Mg y SiO_2) para estimar de forma conjunta la temperatura de los fluidos en profundidad, ofreciendo una mayor robustez frente a efectos de mezcla o reequilibrio parcial que pueden presentarse en los reservorios volcánicos.

La geotermometría es una herramienta fundamental para estimar la temperatura de los reservorios hidrotermales a partir de la composición química de los fluidos. Tradicionalmente, se han utilizado geotermómetros puntuales (por ejemplo, Na-K, K-Mg, SiO_2), cada uno con rangos de aplicabilidad específicos. Sin embargo, la Geotermometría de Equilibrios Múltiples (Giggenbach, 1988; Fournier, 1991) integra simultáneamente varios de estos indicadores químicos para estimar la temperatura de equilibrio en el subsuelo.

Mediante este enfoque, los datos se someten a un análisis comparativo donde cada geotermómetro genera un rango de temperatura. Luego se evalúa la consistencia termodinámica entre ellos para discriminar posibles desviaciones causadas por mezclas de fluidos, procesos de reequilibrio parcial o efectos de enfriamiento en el trayecto de ascenso (Spycher & Reed, 1989). Esto resulta especialmente útil en entornos volcánicos como el de Tenerife, donde las condiciones hidrotermales pueden variar en un corto rango espacial y el sistema puede presentar aportes magmáticos recientes.

Ventajas del método:

- Mayor robustez: Al cruzar los resultados de diversos geotermómetros, se mitiga la dependencia de uno solo que podría verse alterado por procesos específicos (por ejemplo, pérdida de CO₂, condensación de vapor, etc.).
- Identificación de procesos de mezcla: Si dos o más geotermómetros divergen significativamente, puede inferirse la existencia de fluidos con orígenes o condiciones de equilibrio diferentes.
- Adaptabilidad: Los métodos de Equilibrios Múltiples pueden aplicarse con datos de química de aguas y gases, brindando mayor versatilidad en la exploración superficial.

Limitaciones:

- Requiere datos químicos de buena calidad y adecuados para la aplicación de varios geotermómetros (Na-K, K-Mg, Na-K-Ca, etc.).
- La presencia de mineralizaciones secundarias, alteración hidrotermal intensa o reacciones cinéticamente lentas puede desviar los resultados.

En el contexto de la presente investigación, la incorporación de la Geotermometría de Equilibrios Múltiples puede fortalecer la interpretación de la temperatura real del reservorio, contribuyendo a una caracterización más precisa del potencial geotérmico en la isla de Tenerife. Para ello, es necesaria su integración con los resultados de otros análisis geoquímicos e isotópicos presentados en este capítulo.

3.11 Importancia del Muestreo y Control de Calidad

De acuerdo con los estándares propuestos recientemente por la International Association of Hydrogeologists (IAH), el muestreo debe incluir:

- **Protocolos de preservación de muestras**, como el uso de recipientes inertes, refrigeración inmediata y eliminación de burbujas de aire en muestras gaseosas o líquidas, para evitar reacciones químicas no deseadas o pérdida de compuestos volátiles.
- **Calibración y control estricto de la instrumentación de campo** (pH, conductividad, temperatura, potencial redox – Eh), preferentemente con patrones certificados antes y después del trabajo de campo, para asegurar la trazabilidad y fiabilidad de los datos obtenidos.
- **Implementación de muestras ciegas y duplicadas** (también denominadas blancas y de control), lo que permite comprobar tanto la exactitud analítica del laboratorio como la repetibilidad de los procedimientos de toma de muestras.
- **Documentación georreferenciada precisa**, acompañada de metadatos detallados (fecha, hora, condiciones meteorológicas, profundidad del pozo o fumarola, tipo de material muestreado, operarios responsables, etc.) que posibiliten una auditoría técnica, trazabilidad completa y la repetición del muestreo si fuera necesario (Evans et al., 2020).

La implementación rigurosa de estas prácticas no solo garantiza la representatividad y fiabilidad de los datos recogidos, sino que también fortalece la comparabilidad entre campañas, promueve la transparencia científica y evita sesgos que puedan comprometer la interpretación geoquímica o hidrogeoquímica. Además, son esenciales para asegurar la calidad de los resultados en estudios que involucren toma de decisiones ambientales, modelización de sistemas geotérmicos o evaluación de riesgos naturales.

3.12 Conclusiones y Perspectivas

La caracterización geoquímica sigue siendo un pilar fundamental en la exploración geotérmica, pero su integración con tecnologías disruptivas y enfoques multidisciplinares está transformando el sector. A continuación, se sintetizan las conclusiones y perspectivas clave:

1. Trazadores isotópicos y geoquímica avanzada:

- El análisis de isótopos estables ($\delta^{13}\text{C}$, $\delta^{18}\text{O}$, $^3\text{He}/^4\text{He}$) permite distinguir entre fluidos magmáticos, meteóricos y/o contaminados, reduciendo incertidumbres en la identificación de reservorios profundos.
- En Colombia, durante RENAG 2025, se destacó el uso de litio como trazador secundario en sistemas geotérmicos, vinculando su enriquecimiento a interacciones roca-fluido a altas temperaturas.

2. Modelización numérica y machine learning:

- Algoritmos predictivos (ej. redes neuronales) combinan datos geoquímicos, geofísicos y de perforación para predecir temperaturas de reservorio con errores $<10\%$.
- Proyectos como GEOFIT (UE) utilizan gemelos digitales para simular el comportamiento térmico de acuíferos urbanos, optimizando el diseño de sistemas de bombas de calor.

3. Reducción de riesgos en perforación:

- Técnicas de perforación no convencional (brocas PDC, fluidos termorresistentes) han reducido costos en un 30% y tiempos de perforación en un 40% en campos como Hellisheiði (Islandia).
- Sensores IoT y monitoreo en tiempo real permiten ajustar parámetros de perforación según la geoquímica del fluido.

3.12.1 Perspectivas Futuras

El avance del conocimiento y la innovación tecnológica en geotermia requiere una visión multidisciplinar y sostenible. A continuación, se destacan algunas de las líneas de evolución más prometedoras en este campo:

1. Integración de disciplinas científicas

- **Hidrogeoquímica y Geocronología:** La combinación de estas disciplinas permite estudiar la edad y procedencia de los fluidos subterráneos mediante técnicas como la datación U-Th/He o el análisis de isótopos estables, esencial para reconstruir la historia térmica y el dinamismo temporal de antiguos sistemas geotérmicos.
- **Modelos termo-hidro-mecánico-químicos (THMC):** Estos modelos numéricos avanzados integran procesos de flujo de calor, transporte de fluidos, tensiones mecánicas y reacciones químicas. Son fundamentales para simular con mayor precisión el comportamiento de los reservorios geotérmicos, especialmente en el desarrollo de **sistemas geotérmicos mejorados (EGS)**.

2. Tecnologías emergentes y de alta eficiencia

- **Nanofluidos:** La incorporación de nanopartículas en los fluidos de transferencia térmica ha demostrado aumentar la conductividad térmica y la capacidad calorífica, mejorando significativamente el rendimiento en sistemas de rocas secas calientes (HDR), una de las fronteras más ambiciosas de la energía geotérmica.
- **Técnicas de perforación avanzada:** Métodos experimentales como la perforación láser o por plasma están siendo investigados como soluciones disruptivas para reducir tiempos y costos en la perforación de formaciones extremadamente duras, como el granito, donde los métodos convencionales presentan limitaciones técnicas y económicas.

3. Sostenibilidad y gestión en entornos urbanos

- **Geotermia somera y planificación urbana:** La integración de sistemas geotérmicos de baja entalpía en áreas urbanas requiere una gestión inteligente. Proyectos como **SAGE4CAN** (*Sistemas de Aprovechamiento Geotérmico para Canarias*), liderado por el IGME-CSIC y la Universidad de La Laguna, están sentando las bases para la implementación de redes térmicas sostenibles en entornos insulares.
- **Economía circular aplicada a la energía:** La reciente aprobación del **Plan de Acción de Economía Circular de Canarias 2024–2026** establece directrices para reutilizar infraestructuras, optimizar materiales y prolongar la vida útil de los recursos energéticos. En este contexto, la geotermia se perfila como un vector clave para la transición energética, al integrarse de forma compatible con objetivos de bajo impacto, reutilización y eficiencia.

Estas perspectivas refuerzan la necesidad de apoyar proyectos de investigación, desarrollo tecnológico y gobernanza inteligente para que la geotermia en Canarias y en otras regiones volcánicas de Europa se consolide como una fuente de energía limpia, segura y estratégicamente relevante en el contexto de la transición energética global.

4. Material y métodos

4.1 Propuesta metodológica

El presente estudio propone un enfoque metodológico integrado que combina técnicas de análisis estadístico multivariante y minería de datos con la caracterización geoquímica y geofísica del área de estudio. Este enfoque multidisciplinario permite identificar patrones ocultos en los datos, mejorar la interpretación de la información disponible y la clasificación de áreas en función de su comportamiento geoquímico y estructural con el objetivo de identificar zonas con potencial geotérmico en el Dominio Minero Garehagua. El flujo de trabajo propuesto se organiza en cinco etapas principales:

1. Análisis preliminar de áreas susceptibles de potencial geotérmico

En esta etapa inicial se realiza una revisión y síntesis de la información geológica, estructural y tectónica disponible en el área del Dominio Minero Garehagua. Este análisis permite delimitar zonas de interés geotérmico preliminares, basadas en criterios como la presencia de estructuras geológicas favorables (fallas, fracturas), posibles manifestaciones termales y antecedentes de anomalías térmicas o geoquímicas reportadas en campañas anteriores.

2. Recolección de datos geoquímicos y geofísicos

La base de datos se construye a partir de mediciones in situ llevadas a cabo por el equipo de campo del Instituto Volcanológico de Canarias (INVOLCAN) durante las campañas de campo en el periodo 2011-2014, de flujos difusos de CO₂ y de gases traza en el suelo, incluyendo helio (He), hidrógeno (H₂), metano (CH₄), oxígeno (O₂), nitrógeno (N₂), isótopos de argón (Ar) y radón-222 (²²²Rn), entre otros. Estos gases se consideran indicadores sensibles de actividad geotérmica, ya que su movilidad y origen pueden estar relacionados con procesos profundos. Adicionalmente, se incorporan datos geofísicos provenientes de campañas anteriores en la zona, como mediciones magnetotélúricas y de gradiente térmico, lo que permite enriquecer el análisis multivariable con una dimensión estructural y térmica del subsuelo.

Estas campañas se realizaron gracias a los proyectos GEOTHERCAN (IPT-2011-1186-920000) y TERMOVOLCAN (RTC-2017-6627-3), cofinanciados por el Plan Nacional de I+D de España, el Instituto Tecnológico y de Energías Renovables (ITER), Petratherm España S.L. y el Instituto Volcanológico de Canarias (INVOLCAN). Así como también gracias al apoyo de los proyectos TFgeotermia_01, financiado por el Cabildo Insular de Tenerife, y GeoAtlantic (EAPA_527/2016), cofinanciado por el Programa Interreg Espacio Atlántico 2014-2020 y por el ITER.

3. Procesamiento estadístico y cálculo de umbrales geoquímicos

Con base en los datos recolectados, se aplica el método estadístico propuesto por Sinclair (1974) para determinar umbrales geoquímicos que permitan discriminar entre concentraciones de fondo y anomalías significativas. Esta técnica utiliza el análisis de distribuciones lognormales de datos y es particularmente eficaz en contextos donde las señales geoquímicas presentan alta dispersión. La determinación objetiva de estos umbrales es fundamental para la posterior clasificación de zonas según su grado de anomalía.

4. Aplicación de algoritmos de Clustering y evaluación de su rendimiento

En esta fase se implementan distintos algoritmos de Clustering no supervisado sobre el conjunto de datos normalizados. Se consideran tres métodos: **k-means**, **DBSCAN** (Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise), y una variante evolucionada conocida como **Genetic K-Means**, que incorpora principios de evolución genética para optimizar la selección de centroides y mejorar la estabilidad de los resultados. Cada algoritmo se evalúa en función de métricas internas (como el índice de silhouette, cohesión intra-clúster y separación inter-clúster) a fin de determinar su eficacia para revelar estructuras subyacentes en los datos.

5. Interpretación geológica de los resultados y validación integrada

Los resultados obtenidos del análisis de *Clustering* son interpretados desde un enfoque geológico, buscando correlaciones entre los clústeres identificados y características litológicas, estructurales y térmicas del área. En particular, se analizan las asociaciones espaciales entre los grupos geoquímicos y las formaciones volcánicas, alineamientos tectónicos, redes de fracturas y zonas de alteración hidrotermal. Esta interpretación permite inferir posibles vías de migración de fluidos, zonas de recarga y reservorios potenciales.

Se realiza una validación cruzada de los resultados con información geofísica y geológica independiente —como modelos magnetotéluricos 2D/3D, mapas de resistividad eléctrica, estructuras tectónicas inferidas, y datos de gradiente térmico— para comprobar la consistencia del modelo propuesto y fortalecer la identificación de las áreas de interés geotérmico. En casos donde los clústeres coinciden con zonas de baja resistividad, anomalías de CO₂ o alineamientos estructurales activos, se refuerza su validez como objetivos prioritarios para futuras campañas de perforación.

Este enfoque metodológico interdisciplinario favorece una exploración más eficiente y basada en datos, alineándose con las tendencias actuales en prospección geotérmica, donde la integración de datos multifuente y el uso de algoritmos inteligentes contribuyen a una caracterización más robusta del subsuelo (Carranza & Hale, 2002; López et al., 2020). Asimismo, permite reducir la incertidumbre inherente a los métodos tradicionales de prospección, optimizando la toma de decisiones en fases tempranas del desarrollo geotérmico.

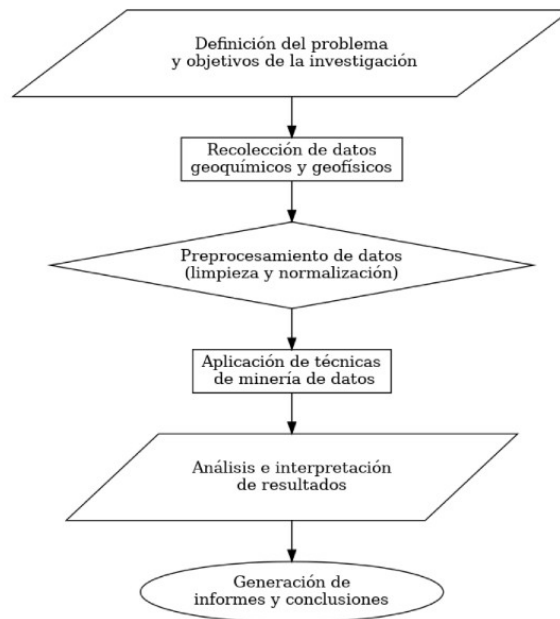


Figura 23. Diagrama de flujo de la metodología de la investigación para aplicar minería de datos a datos geoquímicos y geofísicos en investigaciones científicas.

4.1.1 Método Sinclair

El método de Sinclair (Sinclair, 1974) es una técnica estadística ampliamente utilizada en estudios geoquímicos y geotérmicos para la separación de poblaciones geoquímicas en un conjunto de datos composicionales, particularmente útil cuando se espera la existencia de poblaciones superpuestas correspondientes a fondo, enriquecimiento intermedio y anomalías geoquímicas. Su enfoque se basa en la suposición de que los datos geoquímicos tienden a seguir distribuciones normal o log-normal en ausencia de procesos geológicos anómalos, permitiendo la identificación objetiva de valores fuera del rango esperado.

Ofrece una herramienta robusta y versátil para la identificación y análisis de anomalías geoquímicas, combinando un enfoque estadístico sólido con representaciones gráficas intuitivas. Aunque su aplicación puede implicar cierto grado de subjetividad, su capacidad para revelar la coexistencia de múltiples poblaciones geoquímicas lo convierte en un recurso esencial en la exploración minera y geotérmica.

1. Fundamento:

El principio básico del método radica en la identificación de poblaciones geoquímicas distintas mediante el análisis de distribuciones estadísticas. Se asume que la mayor parte de los datos representa la **población de fondo**, mientras que los valores que se desvían significativamente pueden indicar procesos geológicos anómalos, como la presencia de sistemas hidrotermales o aportes magmáticos.

Se parte de la hipótesis log-normal en la distribución de los datos geoquímicos: Si $X \sim \text{Log } N(\mu, \sigma^2)$ entonces:

$$Y = \log_{10}(X) \sim N(\mu, \sigma^2)$$

El procedimiento implica transformar los valores de concentración a escala logarítmica decimal ($\log_{10}$), y representar su distribución como una curva de frecuencia acumulada normal.

Curva de frecuencia acumulada:

Se representa como:

$$P(Y \leq y) = \Phi\left(\frac{y - \mu}{\sigma}\right)$$

- $P(Y \leq y)$: es la probabilidad acumulada de que la variable aleatoria Y tome un valor menor o igual a un valor específico y .
- $\Phi(\cdot)$: es la función de distribución acumulada (CDF) de una distribución normal estándar (media 0 y desviación estándar 1).
- y : es un valor específico que toma la variable aleatoria Y .
- μ : es la media (o valor esperado) de la variable aleatoria Y .
- σ : es la desviación estándar, que indica la dispersión de los datos respecto a la media μ .
- $(y - \mu)/\sigma$: es la transformación tipificada o estandarización de y , que convierte cualquier distribución normal con media μ y desviación σ , en una normal estándar (media 0, desviación 1).

2. Análisis visual:

- En una representación log-normal de valores frente a frecuencia acumulada en eje invertido ($\log X$ vs P), se identifican quiebres o inflexiones que sugieren la superposición de dos o más poblaciones geoquímicas.
- Cada segmento lineal se interpreta como una población con media μ_j y desviación σ_j , estimadas sobre la escala logarítmica.

La delimitación entre fondo y anomalía se establece mediante el cálculo de un umbral geoquímico basado en la media (μ) y la desviación estándar (σ) de la población de fondo:

$$\text{Umbral}_{j \rightarrow j+1} = \mu_j + k * \sigma_j$$

Donde,

- μ_j es la media logarítmica de la población j .
- σ_j es su desviación estándar.
- j indica un grupo o subconjunto dentro de la población total de datos, identificado a partir de la distribución lognormal de los mismos.
- k es un valor numérico que define cuántas desviaciones estándar se alejan de la media para marcar el umbral. Suele oscilar entre 1 y 2.5, dependiendo del nivel de confianza deseado. Los valores más comunes son:

$k=2$: Separa ~95% de los datos de fondo (asumiendo distribución normal).

$k=3$: Separa ~99.7% de los datos de fondo.

En geoquímica, $k = 2$ es frecuente para distinguir anomalías moderadas, mientras que $k = 3$ se usa para anomalías fuertes.

El método de Sinclair incorpora una representación gráfica clave: el diagrama de probabilidad log-normal, que facilita la identificación visual de distintas poblaciones geoquímicas dentro de un conjunto de datos, con ayuda de regresión segmentada y validación por el criterio de Fisher para comparación de pendientes.

Si los datos presentan una distribución log-normal —frecuente en estudios geoquímicos—, se aplican las operaciones estadísticas en el espacio logarítmico antes de la interpretación, con ayuda de regresión segmentada y validación por el criterio de Fisher para comparación de pendientes.

- Eje X (abscisas): Valores de concentración o flujo de las especies estudiadas (escala logarítmica).
- Eje Y (ordenadas): Porcentaje de frecuencia acumulada.

En este tipo de representación:

- Una población unimodal con distribución normal aparece como una línea recta.
- Si existen poblaciones múltiples solapadas, la gráfica adquiere una forma sigmoidal o en "S", revelando la coexistencia de varias poblaciones geoquímicas.

Las inflexiones de la curva marcan los puntos de solapamiento entre poblaciones y definen los valores umbrales que permiten separarlas. A partir de estas inflexiones:

- Se trazan líneas rectas que segmentan la gráfica.
- La intersección de estas líneas determina el porcentaje de datos correspondiente a cada población.

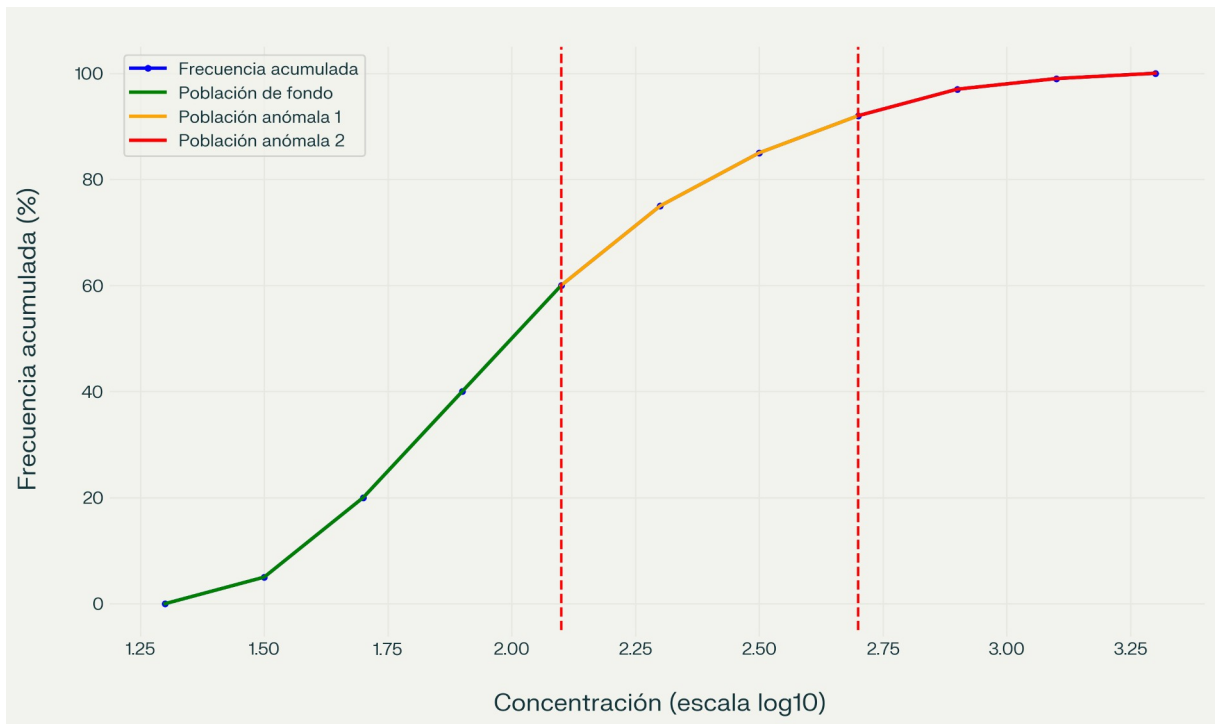


Figura 24. Gráfica Sinclair de poblaciones geoquímicas con concentración en Log_{10}

Interpretación de las poblaciones:

- **Población de fondo (verde):** Domina en concentraciones bajas ($\text{log}_{10} \approx 1.3-2.1$). ~0-60% de los datos.
- **Población anómala 1 (naranja):** Rango intermedio ($\text{log}_{10} \approx 2.1-2.7$). ~60-90% de los datos.
- **Población anómala 2 (roja):** Concentraciones altas ($\text{log}_{10} \approx 2.7-3.3$). ~60-90% de los datos.

Umbral geoquímicos:

Las líneas verticales rojas discontinuas marcan:

- **Primer umbral:** $\text{log}_{10} \approx 2.1$
- **Segundo umbral:** $\text{log}_{10} \approx 2.7$

La curva azul muestra la típica forma en "S" que indica múltiples poblaciones superpuestas, cada una siguiendo distribuciones lognormales individuales.

Esta representación en **escala log_{10}** es la forma estándar porque:

- Los datos geoquímicos suelen seguir distribuciones lognormales
- Permite manejar rangos amplios de concentraciones
- Las poblaciones individuales aparecen como segmentos lineales
- Facilita la identificación visual de umbrales geoquímicos

Uso de la media y la desviación estándar

Se utiliza la media (**X**) y la desviación estándar (**σ**) para definir los umbrales de cada población. Según Sinclair:

$$B = \bar{X} = \frac{\sum_{i=1}^N X_i}{N}$$

donde:

X_i : Valor individual del dato.

N: Número total de datos.

Desviación estándar (**σ**):

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X})^2}{N}}$$

Definición de umbrales:

- Límite fondo: $B + \sigma B$
- Límite intermedio: $B + 2\sigma$
- Límite anómalo: $B + 3\sigma$

Fondo (Background, B): $X \leq B + \sigma$ Se considera parte del contenido geoquímico natural.

Población intermedia: $B + \sigma \leq X < B + 2\sigma$ Puede incluir valores tanto de fondo como potencialmente anómalos.

Población pico (Anómala): Valores $X \geq B + 2\sigma$ Se consideran fuertemente anómalos y podrían indicar mineralización.

En algunos casos, valores $X \geq B + 3\sigma$ se usan como umbral extremo para anomalías muy significativas.

La Tabla 4 presenta los valores característicos del Z-score y su interpretación en términos de probabilidad acumulada dentro de una distribución normal estándar. Estos valores permiten transformar cualquier dato original en una escala común que refleja cuántas desviaciones estándar se aleja dicho valor de la media. Esta estandarización facilita la comparación entre variables con diferentes unidades o escalas.

En el ámbito de la geoquímica, el uso del Z-score es fundamental para establecer umbrales estadísticos que diferencian los valores de fondo de aquellos considerados anómalos. En concreto, valores que superan los umbrales de $\mu + 2\sigma$ (aproximadamente el 97.5 % de los datos) o $\mu + 3\sigma$ (99.7 %) son interpretados como poco frecuentes dentro de una distribución normal, lo que permite señalar posibles anomalías geoquímicas de interés. Este criterio es comúnmente aplicado en métodos como el de Sinclair, ampliamente utilizado para la delimitación de zonas potencialmente mineralizadas o contaminadas. Por tanto, la interpretación del Z-score no solo

aporta una medida estadística de rareza, sino que se convierte en una herramienta clave para la identificación y priorización de áreas de exploración o monitoreo ambiental.

Z-score $Z = \frac{X - \mu}{\sigma}$	Probabilidad acumulada (%)	Significado
media = $\mu = \frac{\sum X_i}{N}$	50.0%	La mitad de los valores están por debajo de la media.
$\mu + 1\sigma$	84.1%	El 84.1% de los datos están por debajo de este valor.
$\mu - 1\sigma$	15.9%	Solo el 15.9% de los datos están por debajo de este valor.
$\mu + 2\sigma$	97.7%	El 97.7% de los datos están por debajo de este valor.
$\mu - 2\sigma$	2.3%	Solo el 2.3% de los datos están por debajo de este valor.
$\mu + 3\sigma$	99.87%	El 99.87% de los datos están por debajo de este valor.
$\mu - 3\sigma$	0.13%	Solo el 0.13% de los datos están por debajo de este valor.

Tabla 4. Correspondencia entre valores de Z-score y probabilidad acumulada en una distribución normal estándar.

3. Identificación y Caracterización de Poblaciones Geoquímicas:

Una vez identificados los valores umbrales y el número de poblaciones, se procede a su análisis estadístico por separado. Este proceso implica:

3.1. Determinación de Parámetros Estadísticos

- Mediana geométrica: Se obtiene proyectando el punto correspondiente al 50% de la frecuencia acumulada sobre el eje de concentraciones.
- Desviación estándar: Se calcula usando los valores del 6% y 84% de la frecuencia acumulada.

Corrección mediante el t-estimador de Sichel's (David, 1977): Dado que los valores leídos directamente del diagrama pueden no coincidir con los valores reales, se aplica el t-estimador para corregir tanto la mediana como la desviación estándar, con un intervalo de confianza del 90%.

3.2. Cálculo de la Probabilidad de Ocurrencia

La probabilidad de encontrar cada población geoquímica se expresa mediante la siguiente ecuación:

$$P_m = \frac{f_I P_I + f_{II} P_{II} + f_{III} P_{III}}{f_I + f_{II} + f_{III}}$$

donde:

- P_I, P_{II}, P_{III} → Probabilidades asociadas a las poblaciones I, II y III.
- f_I, f_{II}, f_{III} → Frecuencias acumuladas de cada población.

La fórmula es una **media ponderada** de las probabilidades individuales, donde el peso de cada población es su frecuencia relativa. Así:

- Si una población es más frecuente (mayor f), su contribución al resultado final será mayor.
- Si una población es poco común pero tiene una alta probabilidad P , también puede influir en P_m si su P es significativamente alto.

4. Clasificación de las Poblaciones Geoquímicas:

En estudios geoquímicos orientados a la exploración de sistemas volcánicos y geotérmicos, es común identificar múltiples poblaciones estadísticas dentro de los datos de concentración de gases del suelo. Estas poblaciones reflejan distintos orígenes y mecanismos de transporte de los gases, y su clasificación permite una interpretación más precisa del sistema hidrotermal subyacente.

Con base en el análisis estadístico (por ejemplo, a través de gráficos de probabilidad tipo Sinclair), las poblaciones geoquímicas pueden agruparse en tres categorías principales:

Población	Descripción
I (Fondo)	Corresponde a valores bajos de concentración, generalmente asociados a procesos biogénicos superficiales, actividad microbiana o condiciones de fondo natural. Estos valores representan la señal geoquímica ambiental típica de zonas sin influencia magmática directa.
II (Pico)	Representa concentraciones anómalamente elevadas de gases, vinculadas con aportes profundos desde el sistema geotérmico o magmático. Suelen estar relacionados con zonas de alta permeabilidad, estructuras activas o fuentes hidrotermales profundas.

Población	Descripción
III (Intermedia)	Se refiere a una población de valores que se sitúan entre el fondo y el pico, e indican zonas de mezcla o tránsito. Esta categoría puede reflejar procesos de dilución, dispersión o migración parcial de gases desde fuentes profundas hacia la superficie.

Tabla 5. Categorías principales de la poblaciones geoquímicas.

Esta clasificación no solo permite discriminar entre fuentes superficiales y profundas de emisión gaseosa, sino que también aporta un marco objetivo para la evaluación espacial del sistema. En conjunto con herramientas de análisis multivariante o clustering, el reconocimiento de estas poblaciones mejora significativamente la interpretación de los procesos volcánicos activos, la delimitación de áreas de anomalía geoquímica y la valoración del potencial geotérmico de una región.

Se muestra en la Figura 25 una gráfica ilustrativa de un ejemplo real de estas tres poblaciones en un análisis a partir de datos geoquímicos.

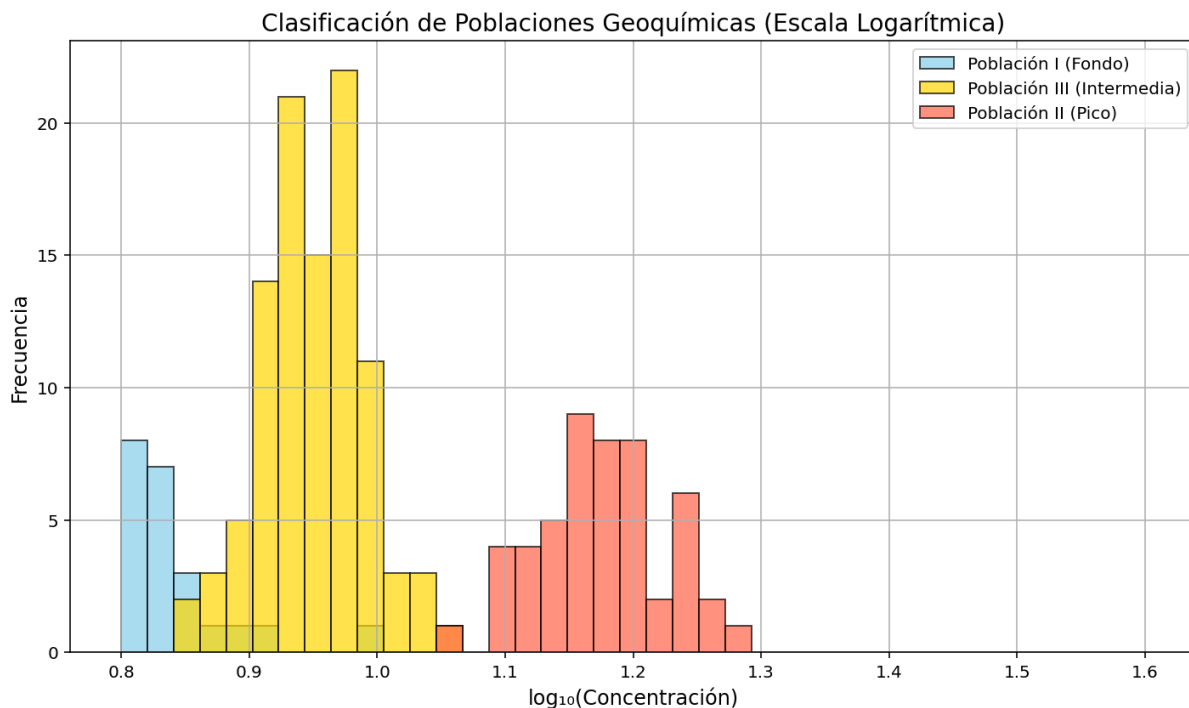


Figura 25. Distribución de poblaciones geoquímicas simuladas en escala logarítmica. Se ilustran tres poblaciones estadísticas diferenciadas según sus niveles de concentración: Población I (fondo); Población III (intermedia), y Población II (pico).

5. Ventajas y Limitaciones del Método:

El análisis estadístico mediante el enfoque propuesto por Sinclair (1974), basado en distribuciones log-normales y gráficos de probabilidad, ofrece una herramienta poderosa para la caracterización geoquímica de sistemas volcánicos y geotérmicos. A continuación, se presentan sus principales ventajas y limitaciones:

Ventajas	Limitaciones
Permite diferenciar entre poblaciones geoquímicas superpuestas, incluso cuando los datos presentan solapamientos significativos.	La interpretación de los gráficos puede estar sujeta a cierto grado de subjetividad, especialmente en la identificación de inflexiones.
Ofrece un enfoque visual intuitivo y eficaz mediante diagramas de probabilidad, que permiten detectar cambios sutiles en la pendiente (indicadores de múltiples poblaciones).	Requiere experiencia del analista para distinguir correctamente las poblaciones y evitar sobrerrepresentaciones.
Facilita la identificación de procesos geológicos complejos, como mezclas de gases, migración diferencial o actividad estructural.	En sistemas naturales con múltiples fuentes o procesos superpuestos, las poblaciones pueden no seguir estrictamente una distribución log-normal.

Tabla 6. Ventajas y limitaciones de método Sinclair (1974)

Este enfoque, complementado con métodos multivariantes y datos geofísicos, mejora la resolución de interpretación en ambientes geológicamente activos.

6. Aplicación en la Prospección Geotérmica:

El método de Sinclair ha demostrado ser particularmente valioso en estudios de prospección geotérmica, dado que permite discriminar entre diferentes orígenes y trayectorias de los gases del suelo. Su aplicación en este contexto permite:

- **Delimitar zonas de desgasificación activa**, que pueden estar asociadas a fracturas, fallas o zonas de alta permeabilidad.
- **Identificar flujos anómalos** de gases como CO₂, CH₄, H₂ o ²²²Rn, cuya presencia puede indicar la proximidad de fuentes hidrotermales profundas o actividad magmática.
- **Evaluar la interacción entre procesos profundos y superficiales**, al reconocer poblaciones geoquímicas mixtas o transicionales.

Además, la clasificación en poblaciones permite trazar mapas geoquímicos interpretativos, que contribuyen a comprender la dinámica de los fluidos geotérmicos y localizar posibles focos de calor profundo. Esto mejora significativamente la planificación de futuras perforaciones y reduce la incertidumbre en la toma de decisiones durante las fases iniciales de exploración.

Asimismo, la capacidad del método para establecer umbrales objetivos de anomalía resulta crucial en contextos con alta variabilidad natural, donde los enfoques clásicos resultan menos eficaces. Su flexibilidad también permite integrarse con modelos geoestadísticos y herramientas SIG, facilitando análisis espaciales avanzados.

4.1.2 Diseño del muestreo y selección del área de estudio

La elección del Dominio Minero Garehagua como área de estudio en esta tesis se fundamenta en los resultados obtenidos en investigaciones previas realizadas entre 2011 y 2014, las cuales evidenciaron su alto potencial geotérmico. Durante este período, se llevaron a cabo estudios de geoquímica de emanaciones difusas y prospecciones magnetotélúricas en cuatro permisos de investigación en la isla de Tenerife. Rodríguez et al. (2015) integró los datos geoquímicos y geofísicos generados para desarrollar herramientas de ponderación que permitieron jerarquizar dichos permisos según su potencial geotérmico relativo.

En este análisis, los permisos de Garehagua y Abeque —ubicados en la dorsal sur y la dorsal noroeste de la isla, respectivamente— destacaron por mostrar los mayores indicios de potencial geotérmico. Estos resultados impulsaron la realización, en 2014, de un estudio de ampliación del área de Garehagua hacia el norte de la cuadrícula, consolidando su interés para investigaciones posteriores.

Rodríguez et al. (2015) identificó en Garehagua importantes anomalías geoquímicas en las emanaciones difusas del suelo, así como una estructura geofísica compatible con un sistema geotérmico de alta temperatura. El modelo de resistividad 3D reveló una zona de baja resistividad a unos 1.500 metros de profundidad, interpretada como una capa de arcillas impermeables o clay cap, característica típica de reservorios geotérmicos.

En el contexto de esta tesis, la selección del Dominio Minero Garehagua responde a la necesidad de profundizar en el análisis de estas anomalías previamente detectadas. El diseño del muestreo se ha basado en criterios geoespaciales —considerando fallas, fracturas y zonas anómalas identificadas en estudios anteriores— y logísticos, garantizando accesibilidad y el cumplimiento de permisos (Rodríguez et al., 2022). Se ha optado por un muestreo sistemático para capturar la variabilidad de los parámetros geoquímicos y geofísicos y así obtener una caracterización más detallada del sistema geotérmico subyacente.

Esta estrategia permite no solo validar anomalías preexistentes, sino también detectar nuevas zonas activas potenciales, optimizando así la correlación entre señales geoquímicas y estructuras geológicas. Además, se busca integrar los datos obtenidos con modelos geofísicos previos (como MT y gravimetría), enriqueciendo el análisis conjunto y favoreciendo una aproximación multidisciplinar al diagnóstico del recurso geotérmico.

En la Figura 26 se muestra la ubicación de los puntos de muestreo seleccionados para el análisis geoquímico (círculos negros sólidos) y estaciones MT (círculos blancos) (F. Rodríguez et al. 2015).

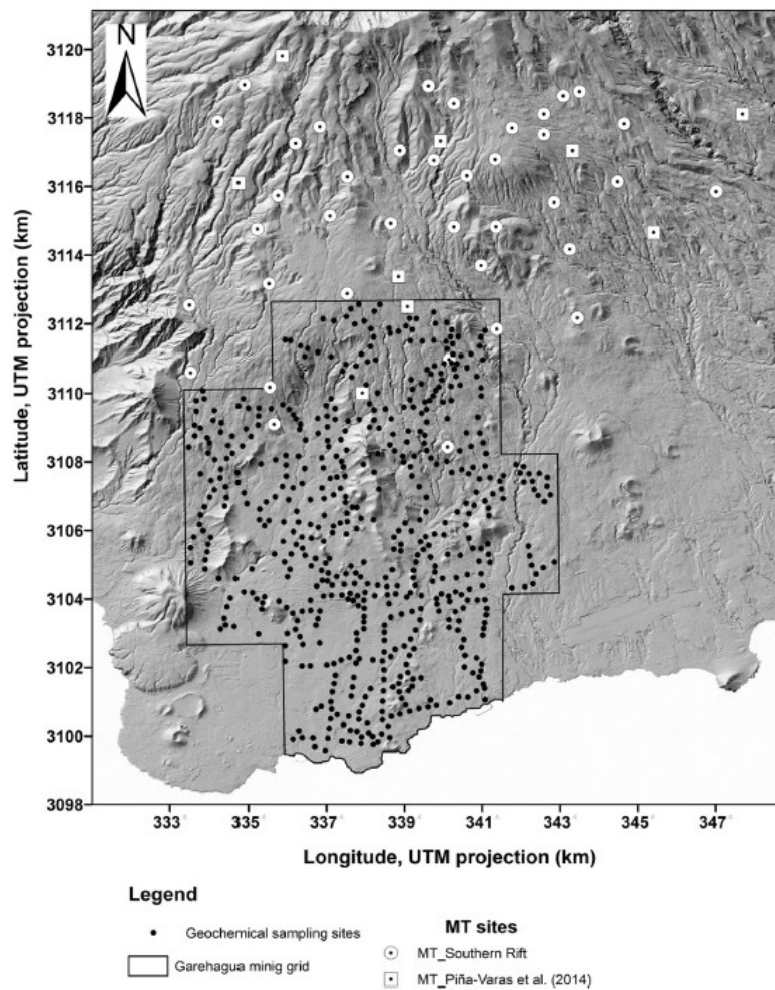


Figura 26. Ubicación de los puntos de muestreo y estaciones MT. Piña-Varas et al. (2014)

El área seleccionada para este estudio es el Dominio Minero Garehagua, ubicado en el sur de la isla de Tenerife, dentro de los términos municipales de Vilaflor, Granadilla de Abona, San Miguel y Arona, en el rift volcánico norte-sur de la isla. Este dominio destaca por su alto potencial geotérmico, identificado a través del análisis de indicadores geoquímicos y geofísicos, posicionándose como el área más prometedora según el ranking propuesto en estudios previos.

Además, presenta una concentración significativa de estructuras tectónicas activas, manifestaciones termales difusas y anomalías en el flujo de calor, lo que refuerza su interés estratégico. Su accesibilidad, la existencia de datos históricos y la posibilidad de integración con infraestructuras energéticas cercanas hacen de Garehagua una zona prioritaria para el desarrollo de proyectos piloto de geotermia profunda en Canarias.

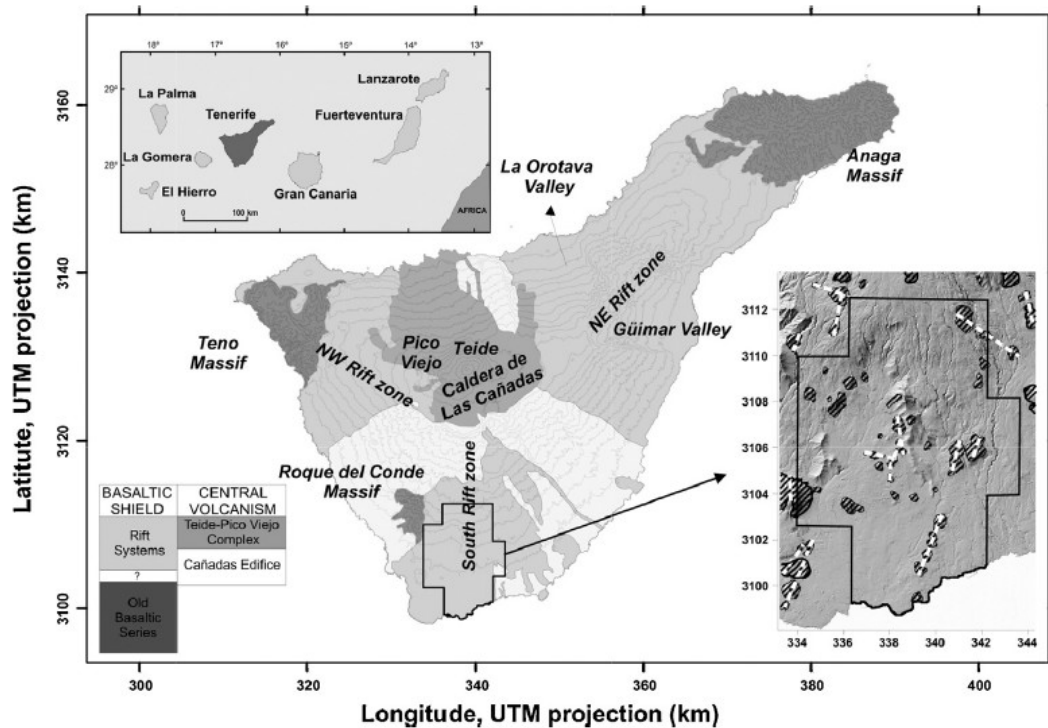


Figura 27. Localización geográfica y mapa geológico simplificado de la isla de Tenerife (modificado de (Ablay y Martí, 2000). Una línea negra continua dentro de Tenerife delimita el área de estudio (licencia minera de Garehagua). Un acercamiento del área de estudio muestra un mapa volcano-estructural del rift volcánico sur de la isla de Tenerife (modificado de Galindo, 2005). Las líneas blancas discontinuas indican alineaciones de centros eruptivos, resaltadas con un patrón de líneas negras. (F. Rodríguez et al. 2015).

4.2 Metodología de muestreo de gases difusos en el horizonte edáfico

Las reacciones de intercambio químico e isotópico que involucran dióxido de carbono (CO_2), metano (CH_4), hidrógeno (H_2) y agua (H_2O) permiten la aplicación de geotermómetros para calcular la temperatura de equilibrio del sistema geotérmico. Sin embargo, en escenarios donde las evidencias superficiales de descargas hidrotermales son escasas o inexistentes y las dimensiones del campo geotérmico son desconocidas, los estudios geoquímicos de gases del suelo se convierten en una herramienta esencial durante las fases iniciales de exploración (Nicholson, 1993; Lewicki & Oldenburg, 2004).

Estos estudios resultan particularmente útiles para delimitar los márgenes del sistema geotérmico y complementar los datos obtenidos en investigaciones geofísicas, donde factores como la topografía pueden dificultar la interpretación de los resultados. La medición de gases como dióxido de carbono (CO_2), metano (CH_4), helio (He) y radón (Rn) se realiza directamente en la capa del suelo, aprovechando que estos compuestos tienden a acumularse en las zonas superficiales antes de dispersarse en la atmósfera (Song et al., 2010).

El protocolo de muestreo incluye la precalibración rigurosa de los equipos de medición y la georreferenciación precisa de cada punto de muestreo, garantizando la trazabilidad y repetibilidad de los datos. Este enfoque sistemático permite mapear las concentraciones anómalas de gases y, en combinación con otras técnicas geofísicas y geoquímicas, obtener una visión integral del sistema geotérmico investigado.

4.2.1 Técnicas de recopilación y análisis de datos

Durante el trabajo de campo, realizado durante las campañas 2011-2014 por el equipo técnico del Instituto Volcanológico de Canarias (INVOLCAN), se llevaron a cabo mediciones sistemáticas en cada punto de muestreo para caracterizar los flujos de gases y las propiedades geoquímicas del suelo volcánico. El objetivo principal fue obtener datos precisos que permitan evaluar la dinámica de los gases en el sistema geotérmico y su posible relación con procesos volcánicos activos.

Las mediciones realizadas incluyeron:

- Medición in situ del flujo difuso de CO₂ en la superficie del área de estudio, utilizando equipos especializados para cuantificar la tasa de emisión del gas.
- Análisis in situ de la actividad de los gases radiactivos ²²²Rn (radón) y ²²⁰Rn (torón) en el suelo, fundamentales para detectar variaciones en la permeabilidad y actividad tectónica de la zona.
- Medición de la temperatura del suelo a dos profundidades estándar (15 cm y 40 cm) para evaluar anomalías térmicas asociadas a la migración de fluidos subterráneos.
- Recolección de muestras de gases del suelo volcánico para su análisis en laboratorio, con el objetivo de determinar su composición química e isotópica. Las técnicas empleadas fueron:
 - Micro-cromatografía de gases (micro-GC): utilizada para cuantificar las concentraciones de H₂, CO₂, CH₄, Ne, N₂, O₂ y Ar.
 - Espectrometría de masas con analizador cuadrupolar simple (QMS): aplicada para la caracterización de los gases nobles He, ³⁶Ar, ³⁸Ar y ⁴⁰Ar, así como para detectar posibles firmas profundas.

Espectrometría de masas de relación isotópica (IRMS): utilizada para determinar la firma isotópica del carbono ($\delta^{13}\text{C-CO}_2$) en los gases del suelo, clave para diferenciar fuentes biogénicas de fuentes magmáticas.

4.3 Medida del flujo difuso de dióxido de Carbono (CO₂)

El dióxido de carbono (CO₂) es, junto con el vapor de agua, la principal especie volátil en los sistemas volcánicos-hidrotermales, desempeñando un papel fundamental en sus procesos físico-químicos. Su baja solubilidad en fundidos silicatados provoca que sea uno de los primeros volátiles en exsolverse del magma bajo presiones moderadas. En terrenos volcánicos, el CO₂ puede tener múltiples orígenes, incluyendo fuentes magmáticas profundas, el metamorfismo térmico de rocas ricas en carbonatos (CO₃²⁻), procesos biogénicos o la mezcla de gases procedentes de diversos reservorios (Irwin y Barnes, 1980; Gerlach y Graeber, 1985).

Los estudios sobre la desgasificación difusa de CO₂ en sistemas volcánicos han evidenciado una estrecha relación entre el flujo difuso de este gas y las características volcano-estructurales, así como con la dinámica eruptiva (Chiodini et al., 1996; Padrón et al., 2015). Estos flujos pueden actuar como indicadores clave de la actividad volcánica y del estado de los sistemas hidrotermales subyacentes.

Durante la campaña de campo, las mediciones del flujo difuso de CO₂ se realizaron in situ utilizando un espectrofotómetro no dispersivo (NDIR) portátil, modelo LICOR 840. Para todas las mediciones se aplicó el método de la cámara de acumulación, inicialmente descrito por Parkinson (1981) y posteriormente adaptado por Chiodini et al. (1998) para su uso en áreas volcánicas e hidrotermales. Esta técnica permite cuantificar el flujo de CO₂ a través del análisis de la pendiente generada entre la concentración del gas y el tiempo durante la medición. La aplicación de este método facilitó la detección precisa de anomalías en la emisión difusa de CO₂, fundamentales para la caracterización del sistema geotérmico.

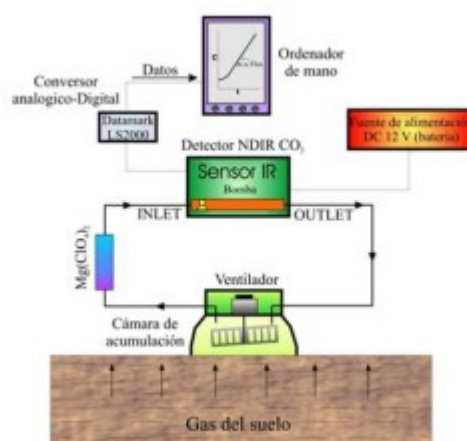


Figura 28. Esquema de la medida de flujo difuso de CO₂ a través del método de la cámara de acumulación

En esta metodología, el gas que sale de manera continua de la superficie edáfica está cubierto por una cámara y se va acumulando en ella, haciéndolo circular en un circuito cerrado gracias a una bomba a través del espectrofotómetro de IR y regresando de nuevo a la cámara. De esta

manera, la concentración de CO_2 dentro de la cámara de acumulación va incrementando con el tiempo. Con el objetivo de facilitar la homogenización del gas contenido en la cámara, se utiliza una pequeña hélice. También, entre la cámara y el detector de IR se coloca una trampa de gel de sílice para atrapar el vapor de agua proveniente del suelo, minimizando la interferencia analítica que ésta produce en la medida de la concentración de CO_2 y el daño que la condensación del agua produciría en el instrumento. Al inicio de la medida, el incremento de la concentración del gas es casi lineal (Figura 29). A partir de un cierto periodo de tiempo, la concentración de CO_2 que se ha acumulado alcanza el equilibrio dinámico con el gas del suelo por lo que tiende a estabilizarse, obteniendo una zona estable en la curva.

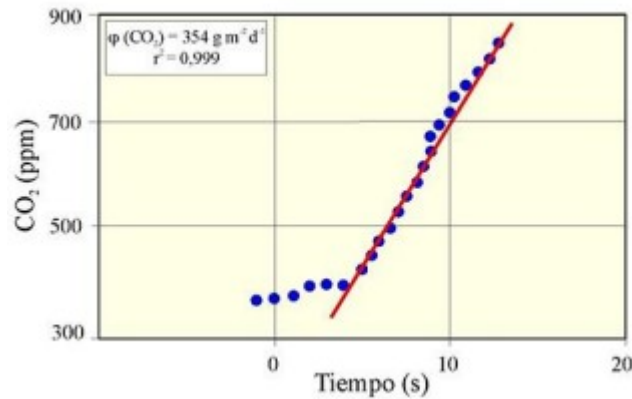


Figura 29. Obtención de la pendiente de la curva medida del flujo difuso de CO_2 .

Las ecuaciones matemáticas que fundamentan el empleo del método de la cámara de acumulación para las medidas del flujo difuso de CO_2 hacen uso de un balance de masas dentro de la misma y consideran un volumen de control de geometría regular (Figura 30). Para ello, las condiciones a tener en cuenta para el establecimiento de las ecuaciones son:

- A es el área de la cámara de acumulación (expresada en m^2), H la altura (expresada en m) y V el volumen de la misma o volumen de control (expresada en m^3). El volumen de control representa la cámara de acumulación, abierta únicamente por el lado que se sitúa sobre la superficie del suelo.
- $C(t)$ es la concentración de gas i-ésimo (expresada en mol L^{-1}) en el interior del volumen de control en el tiempo t (expresado en s), $C(t+dt)$ la concentración de gas i-ésimo (expresada en mol L^{-1}) en el interior del volumen de control en el tiempo $t+dt$, C_s la concentración de gas i-ésimo en la interfase suelo-aire (supuesta constante y expresada en mol L^{-1}) y C_a la concentración de gas i-ésimo en la atmósfera.
- Φ_{IN} es el flujo volumétrico del gas i-ésimo desde el suelo hacia el interior de la cámara (expresado en $\text{L m}^{-2} \text{ d}^{-1}$) y Φ_{OUT} el flujo volumétrico del gas i-ésimo que se escapa desde la cámara hacia el agua (expresado en $\text{L m}^{-2} \text{ d}^{-1}$), en condiciones (p , T) conocidas.

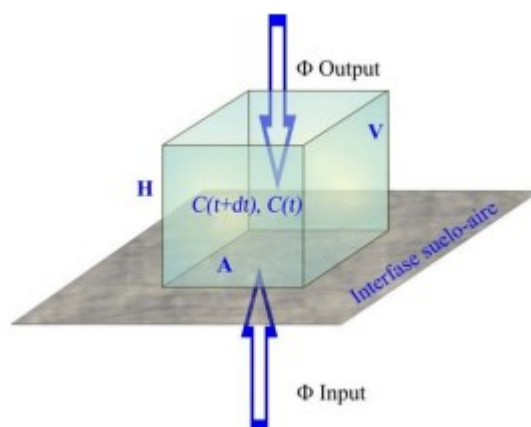


Figura 30. Esquema idealizado de la cámara de acumulación, volumen de control de geometría regular.

4.4 Medida de la actividad de gas radón (^{222}Rn) y torón (^{220}Rn)

El radón (^{222}Rn) es un gas noble derivado de la cadena de desintegración radiactiva del radio, mientras que el torón (^{220}Rn) proviene de la serie de desintegración radiactiva del torio (^{232}Th). El radón presenta propiedades geoquímicas que lo convierten en un elemento clave en estudios ambientales y de ciencias de la Tierra, debido a su capacidad para migrar a grandes distancias tanto en el suelo como en la atmósfera, su fácil detección en concentraciones extremadamente bajas y su utilidad como trazador de diversos procesos ambientales y geológicos. Las concentraciones de uranio y torio presentes en las rocas de la corteza y en los materiales del suelo determinan la cantidad de radón producido y liberado hacia la superficie. La migración de este gas a través de la corteza terrestre puede ocurrir por distintos mecanismos, siendo comúnmente transportado por otros gases presentes en mayores concentraciones en el suelo, como CO_2 , N_2 y CH_4 (Etiope y Martinelli, 2002).

El radón está presente en los fluidos geotermales y su emisión en superficie puede ser detectada gracias a sus propiedades radiactivas, utilizando equipos compactos capaces de medir concentraciones muy bajas. Varios estudios han empleado la actividad del ^{222}Rn y la relación $^{222}\text{Rn}/^{220}\text{Rn}$ para identificar fallas y fracturas en el terreno (Yang et al., 2005) y en acuíferos (Padrón et al., 2006), así como para evaluar variaciones en la permeabilidad asociadas a eventos sísmicos (Yasuoka et al., 2006). Además, el ^{222}Rn ha sido ampliamente utilizado como trazador en estudios geoquímicos de sistemas volcánicos-geotermales (Del Pezzo et al., 1981; Whitehead, 1984; Semprini y Kruger, 1984; Padrón et al., 2003; Hernández et al., 2004). Numerosos estudios en campos geotermales han reportado concentraciones elevadas de ^{222}Rn tanto en aguas termales como en los gases del horizonte edáfico, consolidando la prospección geoquímica de esta especie en el suelo como una herramienta esencial para la identificación de zonas favorables para perforaciones geotérmicas.

En cada uno de los punto de muestreo se midió la actividad de los gases radón (^{222}Rn) y torón (^{220}Rn) en el entorno superficial del suelo mediante espectroscopía alfa de alta resolución. Para

ello, se utilizó el sensor SARAD GmbH RTM 1688-2. Las mediciones se realizaron bombeando el gas del suelo durante al menos 10 minutos a través de una sonda de acero inoxidable, de aproximadamente 3 mm de diámetro interno, insertada a 40 cm de profundidad, permitiendo la transferencia del gas al sensor. Estos equipos portátiles, caracterizados por su alta sensibilidad, facilitaron la detección de radón incluso en concentraciones bajas, gracias a su capacidad de análisis en tiempo real mediante espectroscopía alfa. Los datos obtenidos se almacenaron en la memoria interna de los equipos y posteriormente fueron descargados en el laboratorio utilizando el software proporcionado por el fabricante.

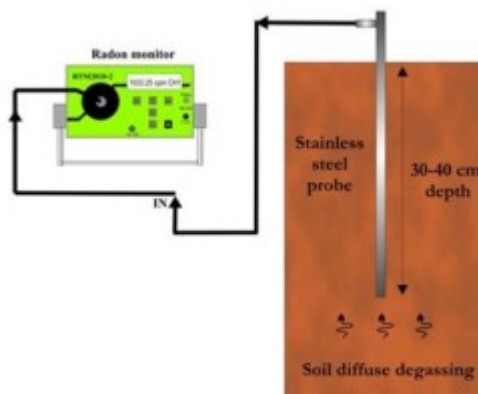


Figura 31. Esquema de funcionamiento del sensor SARAD GmbH RTM 2010-2 para la medida de las actividades de radón y torón.

4.5 Toma de muestras de gases en la atmósfera del suelo

Para la completa caracterización química e isotópica de los gases de la atmósfera del suelo en cada punto de muestreo, se procedió a la toma de muestras de gas del suelo para su posterior análisis en el laboratorio de geoquímica de fluidos del Instituto Tecnológico y de Energías Renovables (ITER). En total se extrajeron tres alícuotas de gas en cada punto de muestreo: una para el análisis de CO_2 , H_2 , N_2 y O_2 mediante microcromatografía de gases, otra para el análisis de He y Ar por espectrometría de masas de tipo cuadrupolar y otra para el análisis isotópico de la relación $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ en el CO_2 , con un espectrómetro de masas de relaciones isotópicas mediante el método de inyección en flujo continuo.

Para la toma de muestras se utilizó una sonda metálica de acero inoxidable de aproximadamente 3 mm de diámetro interno, insertada a 40 cm de profundidad. La cabeza de la sonda cuenta con un septum al través del cual se inserta un latiguillo con una aguja que conecta con una jeringuilla hipodérmica de 60 cm^3 de capacidad, con la cual se extrae la muestra (Figura 32). Se extraen tres jeringas de 60 cm^3 que se hacen fluir en sendos viales cerrados de 10 cm^3 mediante dos agujas, de forma que por una se va introduciendo el gas y por la otra se va desplazando el aire atmosférico que contenía el vial (Hinkle and Kilburn, 1979).

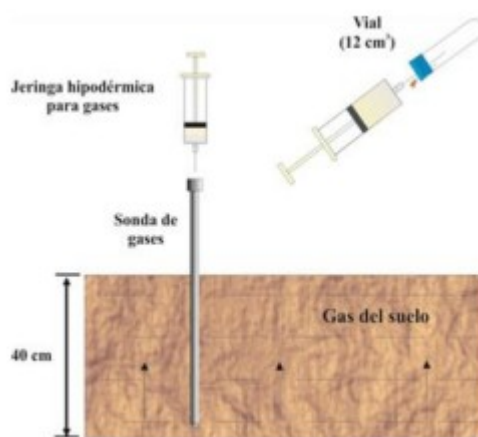


Figura 32. Esquema de la toma de muestra de gas del suelo.

4.6 Análisis de laboratorio

4.6.1 Determinación de la composición química del gas del suelo por micromatografía de gases

Las muestras de gas del suelo recolectadas durante la campaña fueron analizadas mediante un micro-cromatógrafo de gases Varian modelo CP4900, previamente acondicionado y calibrado con estándares de composición conocida. La determinación de las concentraciones de He, Ne, H₂, O₂ y N₂ se realizó mediante el uso de una columna MolSieve de 5 Å y 20 m de longitud. Las concentraciones de CO₂, CH₄, H₂S y H₂O fueron analizadas usando una columna Poraplot-Q de 10 m de longitud. En ambas columnas se utilizó argón como gas portador y un detector de conductividad térmica.

4.6.2 Determinación de la composición química e isotópica del gas del suelo por espectrometría de masas tipo cuadrupolar

El análisis de la concentración de He, ⁴⁰Ar, ³⁸Ar y ³⁶Ar se analizó mediante un espectrómetro de masas tipo cuadrupolar modelo Pfeiffer-Omnistar 422. La inyección de la muestra se realiza a través de un tubo capilar termostatzado a 150°C por succión debida al alto vacío existente en el interior del instrumento. La muestra es ionizada por una pareja de filamentos generando especies químicas (átomos, moléculas y fracciones de moléculas) con carga positiva. Cada compuesto se fragmenta e ioniza siguiendo un patrón definido y reproducible, generando así fragmentos o restos moleculares cargados con una determinada relación masa/carga eléctrica. Las moléculas son separadas según su distinta relación masa/carga, midiendo el espectrómetro la intensidad de corriente en cada masa por un factor de calibración que se determina mediante calibración con un estándar. Para el análisis de estos compuestos se usaron muestras de aire como estándar, al que se le asignó una concentración de 5,24 ppm de He (Gluekauf, 1946).

4.6.3 Determinación de la composición isotópica del carbono $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ en el gas del suelo por espectrometría de masas de relaciones isotópicas

El análisis de la composición isotópica del carbono en el CO_2 de las muestras de gas del suelo, se realizó usando un espectrómetro de masas Thermo Finnigan modelo MAT 253 mediante el método de inyección en flujo continuo descrito por Nelson (2000). La determinación de los isótopos de carbono, $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ es una herramienta utilizada ampliamente en la geoquímica gases para poder caracterizar el origen de los gases procedentes de las emisiones volcánico-hidrotermales. El carbono biogénico en su gran mayoría presenta valores de $\delta^{13}\text{C}$ entre -24‰ y -30‰, el carbono de origen hidrotermal suele presentar una firma isotópica ≥ -3 ‰, mientras que el carbono de origen magmático oscila entre -5‰ y -7‰.



Figura 33. Análisis de muestras de gas del suelo por espectrometría de masas de relaciones isotópicas (IRMS).

Cada una de estas mediciones es estándar en la exploración geoquímica geotérmica. La combinación de datos de flujo difuso de CO_2 y composición de gases proporciona una visión integral del proceso de desgasificación difusa. Por ejemplo, un flujo elevado de CO_2 junto con un enriquecimiento en helio en los gases del suelo constituye una fuerte señal de un alimentador geotérmico oculto, ya que el CO_2 es abundante en los fluidos magmáticos y el He actúa como un trazador inerte de desgasificación profunda de origen magmático. Las anomalías de radón, por otro lado, marcan zonas de mayor permeabilidad, como las fallas. La detección simultánea de estos indicadores permite priorizar áreas para estudios más detallados, como campañas geofísicas o perforaciones exploratorias, maximizando la eficiencia de los recursos. La Tabla 7 resume los rangos y los valores medios de los principales parámetros medidos en el conjunto de datos.

ID	Parametro	Max.	Min.	Media	Mediana	SD
1	CO ₂ flow (g m ⁻² d ⁻¹)	37.7	<0.50	2.2	1.44	3.0
2	Ne (neon) ppm	18.0	17.8	17.94	17.95	0.05
3	H ₂ (hydrogen) ppm	24.4	<0.50	1.54	1.36	2.12
4	O ₂ (oxygen) ppm	213,804.7	204,238.3	210,794.7	210,859.8	1141.5
5	N ₂ (nitrogen) ppm	799,468.6	774,063.6	788,774.7	788,230.7	3742.6
6	CO ₂ (carbon dioxide) ppm	16,151.5	355.0	909.3	648.3	1060.9
7	CH ₄ (methane) ppm	6.37	1.70	1.80	1.76	0.25
8	He (helium) ppm	40.0	5.24	6.85	5.28	5.39
9	³⁶ Ar (argon-36) ppm	35.74	26.74	31.52	31.3	1.6
10	³⁸ Ar (argon-38) ppm	7.90	5.32	6.25	5.9	0.2
11	⁴⁰ Ar (argon-40) ppm	10,740.22	7866.75	9254.37	9351.5	559.7
12	Ar tot ppm	10,783.86	7898.81	9292.14	9388.8	561.5
13	¹³ C/ ¹² C (carbon isotope ratio)	-10.9	-25.0	-19.3	-19.5	1.8
14	²²² Rn (radon) pCi/l	290.0	< 0.50	43.9	33.7	40.3
15	Tn (thoron ²²⁰ Rn) pCi/l	2075.83	< 0.50	46.3	23.3	186.84

Tabla 7. Resumen estadístico de los resultados analíticos de la concentración y flujo de gases del suelo medidos en la concesión minera de Garehagua. SD: Desviación Standard.

Antes del análisis, todos los datos de concentración de gases fueron corregidos por las contribuciones atmosféricas cuando correspondía (por ejemplo, restando el valor de fondo atmosférico para el He o normalizando las concentraciones para eliminar la dilución por aire, utilizando O₂-N₂ como indicadores de aire). El número considerable de puntos de muestreo garantiza una base estadística sólida para cada parámetro. Como es de esperarse en terrenos volcánicos, la mayoría de los gases mostraron una distribución asimétrica positiva, con una cola larga de valores elevados en unos pocos sitios, característica típica de anomalías geoquímicas superpuestas a una población de fondo más amplia.

4.7 Análisis estadístico clustering: K-Means, DBSCAN y Genetic K-Means

Aunque el análisis univariante basado en el método de Sinclair sigue siendo una herramienta poderosa para identificar umbrales y distinguir poblaciones geoquímicas de forma individual por parámetro, este enfoque trata cada variable de manera aislada. Esta simplificación limita la capacidad para detectar interacciones o coocurrencias entre gases que pueden tener un significado geoquímico relevante. En sistemas volcánicos e hidrotermales, donde el proceso de desgasificación está gobernado por dinámicas subsuperficiales complejas, las anomalías no

suelen manifestarse únicamente por la concentración de un solo gas, sino a través de firmas multivariantes distintivas —combinaciones de parámetros como He, CO₂, CH₄ y ²²²Rn— que reflejan conjuntamente fuentes específicas de fluidos o trayectorias de migración.

Para superar esta limitación y obtener una visión más integrada del sistema, se complementó el enfoque univariante con un análisis de conglomerados (clustering) multivariante, que incorpora simultáneamente múltiples parámetros y permite identificar agrupaciones naturales dentro del conjunto de datos. Este método resulta especialmente eficaz para revelar estructuras ocultas y patrones anómalos integrados que podrían pasar desapercibidos si se evalúan las variables por separado. El uso de clustering permite una clasificación más robusta de las poblaciones geoquímicas, reduce la probabilidad de falsos positivos y mejora la interpretabilidad de las tendencias espaciales. En el contexto de la exploración geotérmica, esta perspectiva integral favorece una identificación más fiable de las zonas objetivo y mejora el proceso de toma de decisiones en las etapas posteriores de investigación.

La caracterización de poblaciones geoquímicas en el contexto de la exploración geotérmica de superficie requiere un enfoque metodológico robusto, que combine herramientas estadísticas clásicas con técnicas avanzadas de análisis multivariante no supervisado. En este trabajo, el flujo metodológico se estructura en tres grandes fases complementarias:

1. **Clustering convencional (K-Means):** Se aplica el algoritmo K-Means para una primera segmentación automática de los datos basada en similitud de magnitudes geoquímicas.
2. **Clustering basado en densidad (DBSCAN):** A continuación, se incorpora el algoritmo DBSCAN (Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise), el cual permite identificar grupos de datos de forma no esférica y detectar outliers, ofreciendo una mayor sensibilidad frente a estructuras irregulares y ruido geoquímico.
3. **Clustering optimizado por algoritmos genéticos (GKMC):** Finalmente, se aplica un modelo híbrido que combina K-Means con optimización genética (Genetic K-Means Clustering), con el objetivo de afinar la clasificación y minimizar la dependencia de la elección inicial de centroides.

Esta integración de enfoques permite abordar la complejidad inherente a los sistemas geotérmicos activos y mejorar la resolución en la detección de poblaciones geoquímicas superpuestas o de comportamiento no lineal.

La complejidad de los sistemas geotérmicos superficiales requiere enfoques metodológicos capaces de identificar y discriminar poblaciones geoquímicas que reflejan distintos procesos de origen, migración y mezcla de gases. En este estudio se adoptó una estrategia progresiva que combina herramientas estadísticas clásicas con algoritmos avanzados de clustering no supervisado. Esta integración metodológica permite no solo detectar patrones subyacentes en los datos, sino también mejorar la interpretación espacial y genética de los flujos geoquímicos.

A continuación, se detallan las principales técnicas empleadas en el análisis: desde el enfoque gráfico del método de Sinclair (1974), pasando por algoritmos convencionales como K-Means, hasta métodos más robustos y flexibles como DBSCAN y su optimización posterior mediante algoritmos genéticos (GKMC).

4.7.1 Análisis estadístico-clásico: Método de Sinclair (1974)

El punto de partida fue el análisis de frecuencia acumulada logarítmica propuesto por Sinclair (1974), una herramienta gráfica ampliamente utilizada en geoquímica para separar poblaciones superpuestas en un conjunto de datos.

- Se construyó una curva de frecuencia acumulada en escala logarítmica, con la probabilidad acumulada en el eje X y la concentración en $\log_{10}$ en el eje Y.
- Se identificaron visualmente las inflexiones de la curva que indican cambios de pendiente, asociadas al solapamiento de diferentes poblaciones.
- Se calcularon medias geométricas y umbrales sigma para clasificar los valores.
- Se aplicó el estimador de Sichel para corregir sesgos estadísticos.

4.7.2 Análisis de Clustering convencional: K-Means

Una vez identificados los patrones básicos, se procedió al análisis multivariante mediante el algoritmo K-Means, una técnica no supervisada que agrupa muestras según su similitud en el espacio multidimensional de parámetros.

- Se seleccionaron subconjuntos de parámetros basados en el análisis Sinclair.
- Se estandarizaron los datos y se aplicó K-Means para valores de k (número de clústers) entre 2 y 6.
- Se evaluó la calidad de los agrupamientos con el índice Silhouette y la inercia intra-clúster.
- Se seleccionó $k = 3$ como la mejor solución inicial para la interpretación geotérmica.

4.7.3 Análisis de Clustering basado en densidad: DBSCAN

Para complementar la segmentación obtenida con K-Means, se aplicó el algoritmo DBSCAN (Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise), el cual permite identificar agrupamientos de forma arbitraria y detectar valores atípicos (outliers) con mayor precisión.

- Se definieron los parámetros ε (radio de vecindad) y $minPts$ (número mínimo de vecinos) mediante inspección gráfica y evaluación de la distancia k -ésima.
- Se identificaron clusters densos que no eran esféricos, no detectables por K-Means.

- Se interpretaron los outliers como posibles expresiones geoquímicas de aportes profundos o eventos episódicos de desgasificación.
- Los resultados permitieron refinar las zonas de interés y complementar la clasificación preliminar.

4.7.4 Clustering optimizado: Genetic K-Means Clustering (GKMC)

Para superar las limitaciones del K-Means convencional y optimizar la segmentación global, se implementó el algoritmo GKMC (Genetic K-Means Clustering), que combina heurísticas evolutivas con criterios estadísticos para evaluar y optimizar la calidad del agrupamiento. .

- Cada solución fue codificada como un cromosoma en una población inicial de particiones.
- Se aplicaron operadores genéticos de cruce y mutación sobre múltiples generaciones.
- La función de *fitness* consideró la minimización de la varianza intra-clúster, penalizando al mismo tiempo la formación de clusters con baja representatividad.
- La mejor solución alcanzó un índice Silhouette de 0.92, superando al K-Means convencional y validando la utilidad del enfoque híbrido.

En la Tabla 8 se resumen las características clave de los algoritmos de clustering empleados, destacando sus ventajas, limitaciones y el rol específico que cumplen dentro del flujo metodológico aplicado a la interpretación geoquímica.

Algoritmo	Principio	Ventajas	Limitaciones	Justificación metodológica
K-Means	Minimiza la distancia a centroides (agrupamientos esféricos).	Rápido, fácil de implementar, eficiente en datos bien estructurados.	Requiere definir k (número de clusters); sensible a valores atípicos.	Segmentación inicial efectiva de poblaciones compactas.
DBSCAN	Agrupar puntos en función de la densidad local; identifica ruido.	No necesita k ; detecta formas arbitrarias de clusters; robusto ante outliers.	Requiere calibrar los parámetros ϵ y $minPts$; sensible a escalas.	Detecta estructuras irregulares y poblaciones difusas, propias de sistemas geotérmicos.
GKMC	Optimiza la partición K-Means mediante algoritmos genéticos.	Estabilidad mejorada; evita mínimos locales; mejor ajuste global.	Mayor coste computacional; requiere calibración evolutiva.	Refina la clasificación final; mejora la precisión y confiabilidad del modelo.

Tabla 8. Resumen las características clave de los algoritmos de clustering empleados.

4.8 Software utilizado

La selección de software para análisis y visualización multivariante en exploración geotérmica depende de varios factores, incluidas las necesidades específicas del estudio y los recursos disponibles y la experiencia de los investigadores. A continuación, se muestran algunas opciones de software de uso común. Utilizado en análisis y visualización de datos geoespaciales:

- Origin Pro 9.1: Software avanzado de análisis de datos y generación de gráficos científicos.
- Python V. 3.11.11: Librerías NumPy, Pandas, SciPy y scikit-learn para estadística y Clustering.
- ArcGIS/QGIS: Para la elaboración de mapas temáticos y análisis espacial de las anomalías.
- R: Complementario en la generación de gráficos y validaciones estadísticas puntuales (ggplot2).

1. OriginPro 9.1 es un software avanzado de análisis de datos y generación de gráficos científicos, desarrollado por OriginLab, ampliamente utilizado por científicos e ingenieros. Permite crear gráficos en 2D y 3D de alta calidad, realizar análisis estadísticos, ajuste de curvas, procesamiento de señales y análisis de picos, entre otras funciones especializadas.

La versión 9.1, introdujo más de 200 mejoras y nuevas funciones respecto a versiones anteriores, como nuevos tipos de gráficos (diagramas de Piper, gráficos de cajas agrupadas, diagramas ternarios 3D, gráficos de cascada 3D, histogramas marginales), mejoras en el manejo de ejes, análisis por lotes, interpolación Akima, suavizado Lowess y Loess, y herramientas avanzadas para análisis estadístico y de regresión. Además, OriginPro añade herramientas avanzadas como regresión por mínimos cuadrados parciales, pruebas de potencia y tamaño de muestra adicionales, algoritmos de ajuste no lineal y análisis de integración en 2D.

OriginPro es conocido por su entorno de trabajo intuitivo, la capacidad de manejar grandes volúmenes de datos, la integración con otros programas científicos y la posibilidad de automatizar tareas mediante programación (Origin-C y LabTalk). Es compatible con Windows y permite exportar gráficos en múltiples formatos para publicaciones científicas.

2. Python: es un lenguaje de programación versátil de alto nivel, multiparadigma y de código abierto, ampliamente utilizado en ciencia, ingeniería y desarrollo de software. Se caracteriza por su sintaxis clara y legible, lo que facilita el aprendizaje y la colaboración entre desarrolladores. Python permite programar de manera orientada a objetos, imperativa y funcional, y cuenta con una extensa biblioteca estándar que simplifica la realización de tareas complejas con diversas bibliotecas y paquetes para análisis de datos, como NumPy, Pandas, SciPy y Scikit-learn. Proporciona amplias capacidades para análisis estadístico, algoritmos de Clustering y visualización a través de bibliotecas como Matplotlib, Seaborn y Geopandas. Python también ofrece flexibilidad para el procesamiento personalizado de datos e integración con otras herramientas de software. La Versión utilizada ha sido la 3.11.11.

3. ArcGIS: es un software ampliamente utilizado de sistemas de información geográfica (SIG) que ofrece capacidades avanzadas de análisis espacial. Incluye herramientas para el procesamiento de datos geoespaciales, interpolación, geoestadísticas y Clustering espacial. Permite trabajar con datos vectoriales, ráster, bases de datos espaciales, imágenes satelitales, y facilita la creación de mapas en 2D y 3D, modelado, edición de datos y publicación de información geográfica para distintos usuarios. La extensión ArcGIS Spatial Analyst proporciona funcionalidad adicional para analizar datos raster, lo cual puede ser valioso en la exploración geotérmica. Versión ArcGIS Pro 3.4.

4. QGIS: es un software libre de SIG de código abierto que ofrece un conjunto completo de herramientas para análisis y visualización geoespacial. Ofrece una amplia gama de complementos y algoritmos para el procesamiento de datos geoespaciales, incluyendo análisis multivariado y geoestadísticas. Permite crear mapas personalizados con múltiples capas, realizar análisis espaciales avanzados, editar datos y generar informes cartográficos de alta calidad. QGIS es una opción accesible y rentable para llevar a cabo estudios geotérmicos. La versión utilizada ha sido la 3.16.

5. R: es un lenguaje de programación complementario en la generación de gráficos y validaciones estadísticas puntuales a través del paquete ggplot2, ampliamente utilizado para crear gráficos informativos y de alta calidad en R mediante una “gramática de gráficos” que permite construir figuras en capas y personalizarlas fácilmente. Además, existen extensiones como ggstatsplot, que integran directamente resultados de pruebas estadísticas en los gráficos, facilitando la interpretación y presentación de resultados estadísticos junto con las visualizaciones. La Versión utilizada ha sido la R.4.4.0.

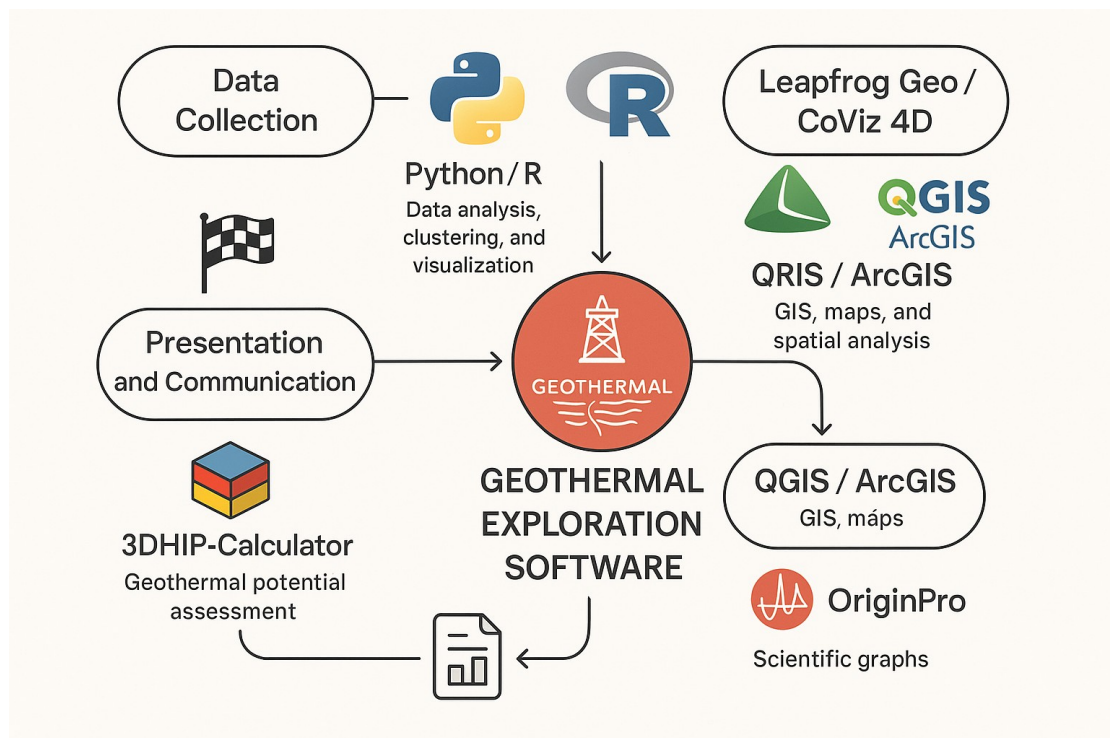


Figura 34. Principales herramientas de software utilizadas en la exploración geotérmica y sus aplicaciones más relevantes, desde el análisis de datos y modelado hasta la visualización y generación de mapas.

5. Resultados

5.1 Determinación de umbrales de anomalía Geoquímica (Método de Sinclair)

Para distinguir las señales geoquímicas anómalas de la variabilidad de fondo, se aplicó el método estadístico-gráfico de Sinclair (1974) a los principales parámetros geoquímicos. Este método es ampliamente utilizado en geoquímica de exploración para separar objetivamente poblaciones geoquímicas multimodales, identificando típicamente una población de fondo y una o más poblaciones anómalas dentro de un conjunto de datos. Parte del supuesto de que, en ausencia de influencia geotérmica o mineralizante, las mediciones geoquímicas siguen una distribución aproximadamente log-normal, lo cual refleja la abundancia cortical y procesos geológicos homogéneos. Las anomalías asociadas a la desgasificación profunda se manifiestan como una población separada con valores elevados superpuestos a esta distribución de fondo.

El método de Sinclair (1974) es un enfoque estadístico robusto para la separación de poblaciones geoquímicas en conjuntos de datos composicionales, especialmente útil cuando se espera la presencia de poblaciones solapadas correspondientes a fondo, enriquecimiento intermedio y anomalías geoquímicas. Las curvas de Sinclair permiten definir umbrales objetivos para separar valores normales y anómalos en exploración minera. Se basan en la estadística de la distribución de datos, utilizando la media y la desviación estándar para establecer límites.

Para cada especie gaseosa de interés (particularmente el flujo de CO₂, la concentración de He y la actividad de ²²²Rn, que son indicadores primarios de desgasificación profunda), se construyeron gráficos de probabilidad acumulada y diagramas log-probabilísticos. Las inflexiones en la pendiente de estas curvas indican la presencia de múltiples distribuciones log-normales superpuestas (por ejemplo, un segmento inferior correspondiente al fondo y una cola superior para valores anómalos). A partir de estas gráficas, se estimaron valores umbral que separan las poblaciones de fondo y anomalía. Como criterio simplificado, también se calcularon umbrales utilizando la media más dos desviaciones estándar ($\mu + 2\sigma$) sobre los datos transformados logarítmicamente, lo que equivale aproximadamente al percentil 98 y funciona como un punto de corte conservador para definir anomalías.

En la práctica, se aplicaron algunos pasos iterativos: los datos que se desviaban fuertemente de la log-normalidad fueron *winsorizados* o ajustados eliminando valores atípicos evidentes, tras lo cual se refinó el umbral.

Con los criterios de umbral establecidos, se clasificó cada valor de los sitios de muestreo como correspondiente al fondo o a una anomalía. Además, se categorizó la magnitud de las anomalías en órdenes por encima del umbral: por ejemplo, valores entre 2 y 3 veces por encima del umbral

se consideraron "moderadamente anómalos", mientras que los superiores a 5 veces se clasificaron como "fuertemente anómalos", siguiendo rangos comúnmente establecidos en la geoquímica de exploración. Esto permite generar un primer mapa de anomalías individuales.

Los umbrales se establecieron de forma conservadora como la media más dos desviaciones estándar ($\mu + 2\sigma$) de los datos transformados logarítmicamente, lo que corresponde aproximadamente al percentil 97,5. Por ejemplo, un umbral de $\sim 15 \text{ g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{d}^{-1}$ para el flujo de CO_2 permitió distinguir eficazmente las emisiones de fondo de los flujos anómalos de origen volcánico. Los valores que superaban los $\sim 75 \text{ g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{d}^{-1}$ ($>5\times$ el umbral) fueron clasificados como fuertemente anómalos. Estos umbrales se refinaron de manera iterativa, tratando adecuadamente los valores atípicos para mantener la solidez estadística.

Las magnitudes de las anomalías se clasificaron además en relación con los umbrales establecidos: los valores entre 2 y 3 veces por encima del umbral se etiquetaron como "moderadamente anómalos", mientras que los que superaban 5 veces el umbral fueron considerados "fuertemente anómalos". Esta clasificación permitió una primera aproximación al mapeo de anomalías individuales en el área de estudio.

El análisis del flujo difuso de CO_2 mediante el método de Sinclair permitió identificar tres poblaciones log-normales dentro del conjunto de datos, reflejando distintos regímenes de desgasificación del suelo. La población de fondo, que representa el 58% de los datos, mostró una media de $0,5 \text{ g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{día}^{-1}$, valores típicos de suelos bien aireados y difusión atmosférica sin aportes endógenos. La población intermedia presentó una media de $2,8 \text{ g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{día}^{-1}$, mientras que la población de pico, con solo un 2,1% de los datos, alcanzó una media de $14,2 \text{ g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{día}^{-1}$, indicativa de zonas de emisión activa desde profundidad, probablemente asociadas a estructuras permeables Chiodini, G. et al. (1998), Bloomberg, S. et al. (2014). Los sitios que superen los $75 \text{ g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{d}^{-1}$ ($>5\times$ el umbral) se clasificarían como fuertemente anómalos. La representación en escala logarítmica resalta los cambios de pendiente que marcan la transición entre poblaciones, siendo coherente con otras variables como CO_2 en concentración y ^{222}Rn .

De forma similar, un umbral para la concentración de helio podría situarse en torno a 5 ppmv (por encima del valor atmosférico de ~ 5.24 ppmv, indicando exceso de He) Torgersen, T et al. (1985), y para el radón, el umbral podría estar en el orden de 1 a 3 kBq/m³, dependiendo del contenido local de uranio en los suelos, D'Alessandro, W. (2018).

Esta detección univariante de anomalías no constituyó el objetivo final del análisis, sino que representó un paso previo crucial para guiar y validar el *clustering* multivariante. Los sitios con anomalías elevadas identificadas para los diferentes gases fueron comparados espacialmente con el fin de evaluar si coincidían, lo cual sugeriría una fuente profunda común. De hecho, en el conjunto de datos, muchas de las anomalías más intensas de CO_2 también presentaban niveles elevados de helio y radón, lo que indica que se justifica un análisis combinado. Es esencial verificar el supuesto de una distribución de fondo aproximadamente log-normal. En el conjunto de datos, parámetros como el flujo de CO_2 y la concentración de helio mostraron un

comportamiento log-normal para el 90% inferior de los datos, con una ruptura evidente en el 5–10% superior, consistente con una cola de anomalías de origen geogénico. Cuando fue necesario, se aplicaron ajustes menores (por ejemplo, usando un factor de umbral k ligeramente diferente de 2 en distribuciones no normales) para asegurar que se capturaran anomalías significativas minimizando a la vez los falsos positivos.

Las rupturas de pendiente en los diagramas de probabilidad logarítmica revelan la presencia de múltiples poblaciones log-normales superpuestas. Para cada especie gaseosa, se identificaron dos poblaciones distintas: una población de fondo (B) y una población anómala o de pico (P).

La aplicación del método de Sinclair al análisis de concentraciones de CO₂ en el suelo permitió discriminar múltiples poblaciones geoquímicas dentro del conjunto de datos, revelando la coexistencia de diferentes orígenes o mecanismos de emisión. A partir del gráfico de probabilidad acumulada, se identificaron al menos tres poblaciones log-normales: una población de fondo (B), una intermedia (I) y una población de pico (P), cada una con distinta representatividad estadística y media geométrica.

La población de fondo representó el 91,0 % de las observaciones, con una media de aproximadamente 817,5 ppm, compatible con valores esperables en suelos bien ventilados influenciados por aire atmosférico y respiración microbiana. La población intermedia, que abarca una fracción menor de los datos, presentó una media de 3.536,3 ppm, lo que sugiere zonas de mezcla o acumulación moderada de CO₂ posiblemente relacionada con tránsito de gases desde zonas más profundas. Finalmente, la población de pico, con solo un 1,7% de los datos, alcanzó una media de 11.898,3 ppm, valores que son característicos de aportes magmático-hidrotermales, probablemente canalizados por estructuras permeables o fracturas activas.

La representación logarítmica en el eje Y permite visualizar de manera clara los cambios de pendiente entre poblaciones, que marcan los umbrales estadísticos de separación. Estos resultados permiten establecer criterios cuantitativos para la clasificación de anomalías, facilitando su integración con otros parámetros geoquímicos e información estructural. Además, refuerzan la utilidad del análisis probabilístico acumulado como herramienta para discriminar entre procesos superficiales, transicionales y profundos, clave para orientar decisiones en etapas exploratorias.

Como se muestra en las Figuras 35 a 38 se generaron gráficas de probabilidad acumulada para los valores de flujo difuso de CO₂ en el suelo, concentración de CO₂ en el suelo, radón (²²²Rn) y concentración de helio (He).

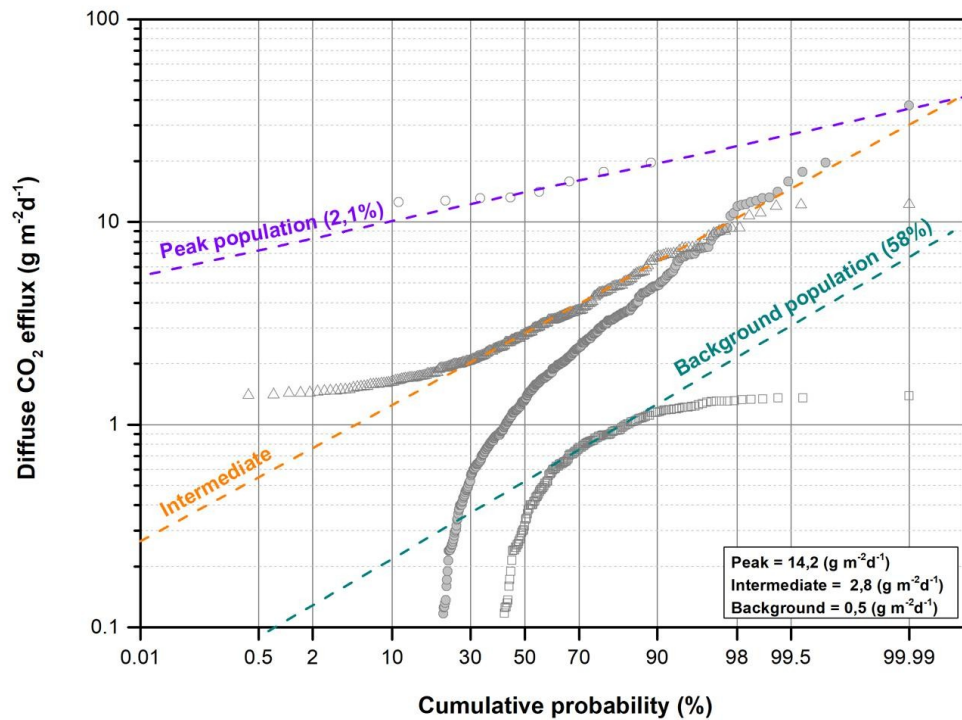


Figura 35. Diagrama de probabilidad acumulada tipo Sinclair para el flujo difuso de CO₂ en el suelo, medido en 1.200 puntos del Dominio Minero Garehagua. El eje de ordenadas está en escala logarítmica ($\text{g} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{d}^{-1}$) y el de abscisas muestra la probabilidad acumulada (%). Las líneas discontinuas de colores indican las tres poblaciones log-normales diferenciadas (fondo, intermedia y pico), determinadas visualmente por sus pendientes. Las medias de cada población se muestran en el recuadro inferior derecho. El gráfico permite visualizar con claridad los cambios de pendiente entre segmentos, consistentes con los criterios del método Sinclair. Rodríguez, F. et al . (2021).

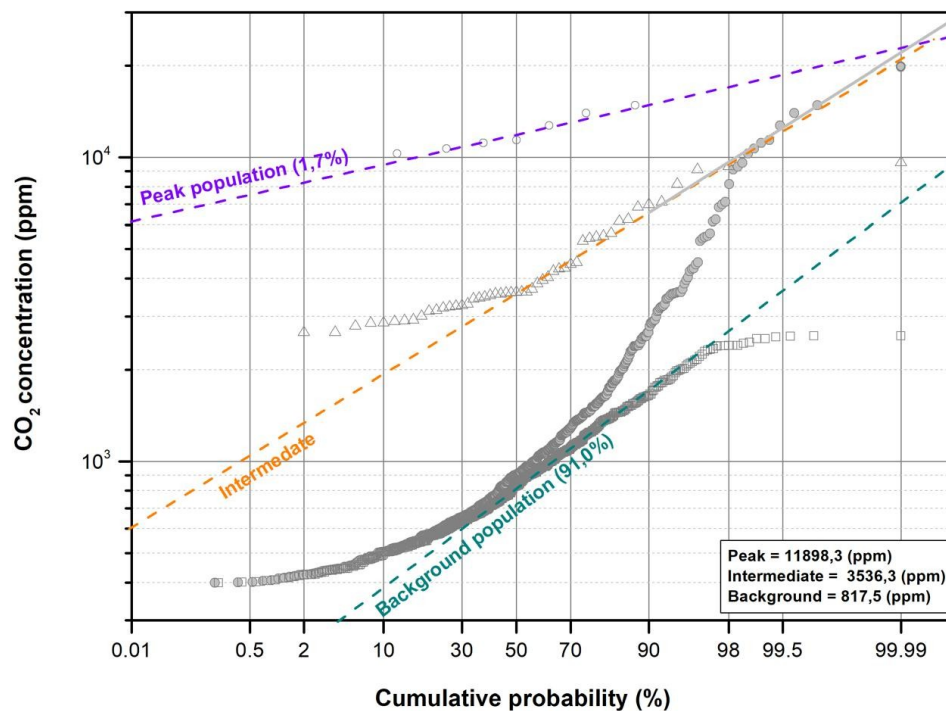


Figura 36. Diagrama de probabilidad acumulada (tipo Sinclair) para las concentraciones de CO₂ en el suelo, basado en un total de 1.200 puntos de muestreo del Dominio Minero Garehagua. El eje de ordenadas muestra la concentración de CO₂ (en ppm) en escala logarítmica, y el eje de abscisas representa la probabilidad acumulada (%). Las líneas negras continuas indican las tres poblaciones log-normales separadas (fondo, intermedia y pico),

determinadas visualmente por cambios de pendiente. Las líneas grises representan modelos alternativos de ajuste binario (fondo–pico). Las líneas discontinuas corresponden a los umbrales entre poblaciones. Las medias geométricas de cada población están indicadas en el recuadro de la gráfica.

El análisis de la concentración de helio (**He**) en el suelo mediante el método de Sinclair permitió identificar tres poblaciones geoquímicas log-normales, reflejando distintos orígenes y dinámicas de emisión. La población de fondo, con una media de 5,5 ppm, representa el 92,7% de las observaciones y está asociada a niveles de fondo atmosférico (~5,24 ppmv) o redistribución edáfica sin aporte profundo.

La población de pico, aunque representa solo el 0,7% de los datos, alcanza una media de 39,0 ppm, valores claramente indicativos de una aportación profunda o magmática, dado el carácter inerte y no reactivo del helio, y su afinidad con zonas de desgasificación volcánica, indicando contribuciones significativas de fuentes del manto o de origen cortical asociadas con desgasificación profunda.

La clara separación entre pendientes en el gráfico confirma la validez de este análisis como herramienta para discriminación de anomalías sutiles en gases sin fuentes superficiales visibles, y respalda el uso del He como trazador geoquímico de procesos profundos.

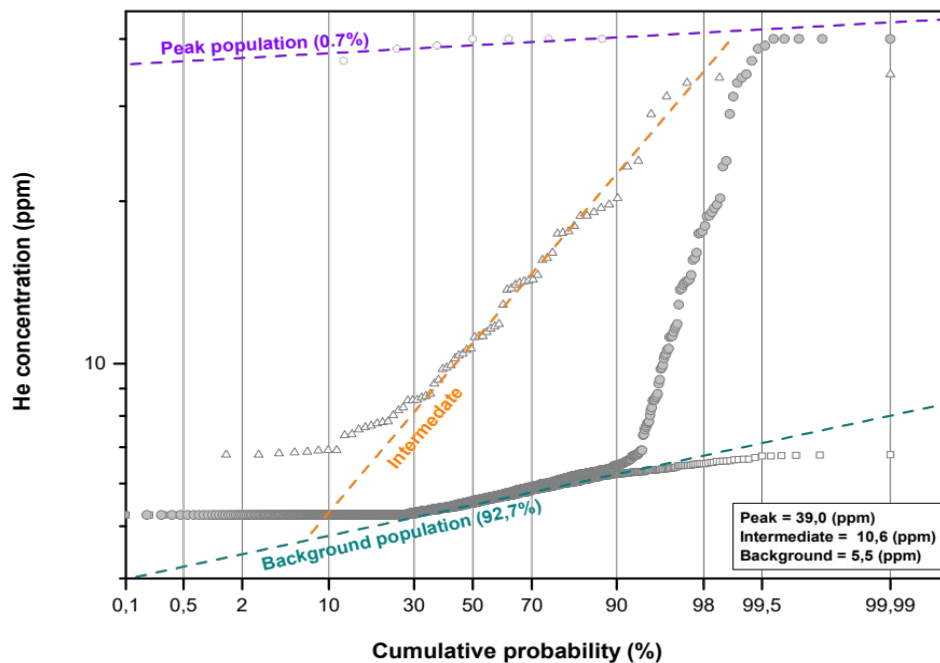


Figura 37. Diagrama de probabilidad acumulada (tipo Sinclair) para las concentraciones de helio (He) en el suelo, obtenido a partir de 1.200 puntos de muestreo en el Dominio Minero Garehagua. El eje de ordenadas muestra la concentración de He en ppm (escala logarítmica), mientras que el eje de abscisas representa la probabilidad acumulada (%). Se identifican tres poblaciones log-normales: Fondo: 5,5 ppm (línea discontinua verde), Intermedia: 10,6 ppm (línea discontinua naranja), Pico: 39,0 ppm (línea discontinua púrpura). La separación de pendientes permite interpretar estas poblaciones como resultado de la coexistencia de procesos atmosféricos, de mezcla, y de emisión profunda estructuralmente controlada.

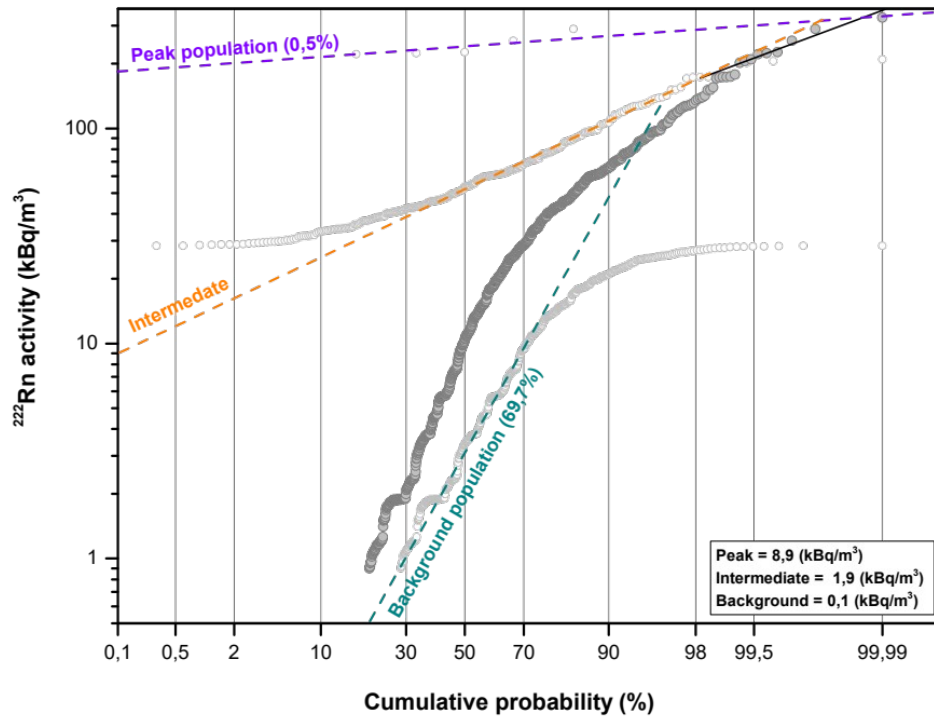


Figura 38. Diagrama Sinclair de probabilidad acumulada de la actividad de ^{222}Rn en el suelo. Las líneas grises continuas representan las poblaciones log-normales separadas de fondo y de pico. Las líneas discontinuas de colores indican las tres poblaciones log-normales de fondo, pico e intermedia separadas a partir de los datos originales Rodríguez, F. et al. (2021).

La actividad de radón (^{222}Rn) mostró un comportamiento comparable. El análisis identificó una población de fondo (B), con una media de $0,1 \text{ kBq/m}^3$, que refleja la emanación natural desde minerales portadores de uranio en el suelo superficial (Giammanco, S. et al. 2007), y una población de pico (P), con una media de $8,9 \text{ kBq/m}^3$, que sugiere flujos aumentados desde fuentes más profundas a través de estructuras de permeabilidad como fallas fallas abiertas o zonas de cizalla, sin dispersarse significativamente.

La buena separación entre pendientes en el gráfico apoya la existencia de estas tres poblaciones distintas, lo que aporta un criterio adicional para la detección de zonas estructuralmente activas o termalmente anómalas. El radón, por su naturaleza inerte y corta vida media, es especialmente útil para identificar emisiones recientes y de origen profundo, y su análisis es altamente complementario al de CO_2 y He en contextos volcánicos activos.

Es importante destacar que esta detección de anomalías univariadas no fue un fin en sí mismo, sino un paso preliminar crucial para guiar y validar los análisis multivariantes de clustering posteriores. Las comparaciones espaciales revelaron una superposición significativa entre los sitios con alta anomalía para diferentes gases. En particular, muchas de las anomalías más fuertes de CO_2 coincidieron con valores elevados de helio y radón, lo que indica una probable fuente común profunda.

La suposición de un comportamiento de fondo aproximadamente log-normal se mantuvo válida para la mayoría de los parámetros: para el flujo de CO₂ y el helio, aproximadamente el 90 % de los datos siguieron distribuciones log-normales, con una cola de anomalía claramente distinguible en el 2 % superior. Esta distribución sugiere que los procesos dominantes en la mayor parte del área de estudio responden a mecanismos de emisión difusa asociados a condiciones de equilibrio superficial o contribuciones biogénicas.

Cuando fue necesario, los factores umbral se ajustaron ligeramente (por ejemplo, utilizando factores algo distintos de 2) para equilibrar la detección de anomalías significativas frente al riesgo de falsos positivos. Este ajuste se realizó teniendo en cuenta la forma específica de las curvas de probabilidad acumulada y la consistencia espacial de los valores extremos. En zonas donde existía superposición de poblaciones o transiciones difusas entre clases, se aplicó una validación cruzada con otros gases trazadores y la cartografía estructural, lo cual permitió reforzar la confiabilidad de la clasificación geoquímica y reducir la incertidumbre en la interpretación de los datos.

En conjunto, este enfoque integrado, que combina análisis estadístico-gráfico riguroso con refinamientos iterativos y validación espacial entre gases, proporcionó un marco robusto para diferenciar procesos de fondo de verdaderas anomalías geoquímicas, estableciendo una base sólida para modelos avanzados de exploración multivariante.

La distribución espacial de las concentraciones de gases del suelo se analizó mediante enfoques estadísticos univariantes. Las Figuras 39 a 42 muestran los mapas de concentración de CO₂, CH₄, He y H₂ obtenidos para el área de estudio del Dominio minero de Garehagua a través de la aplicación del método de Sinclair (1974), para la clasificación de las distintas poblaciones, permitiendo la identificación de anomalías geoquímicas relacionadas con estructuras de desgasificación profunda.

En el caso del CO₂ (Figura 39), se observa una distribución ampliamente extendida de valores intermedios, con anomalías localizadas que superan los umbrales de fondo definidos por la desviación estándar ($\mu + \sigma$, $\mu + 2\sigma$, $\mu + 3\sigma$). Estas concentraciones elevadas de CO₂ en el suelo —frecuentemente alineadas con estructuras topográficas o tectónicas— sugieren posibles zonas de desgasificación profunda canalizada, que pueden estar relacionadas con la permeabilidad estructural del subsuelo.

En algunos sectores, los máximos se concentran en torno a fracturas visibles o límites litológicos, lo que refuerza la hipótesis de un control estructural activo sobre la migración de gases desde niveles profundos hasta la superficie. Además, la coherencia espacial entre las anomalías de CO₂ y otros gases traza una firma geoquímica común que puede vincularse con la dinámica del sistema hidrotermal subyacente.

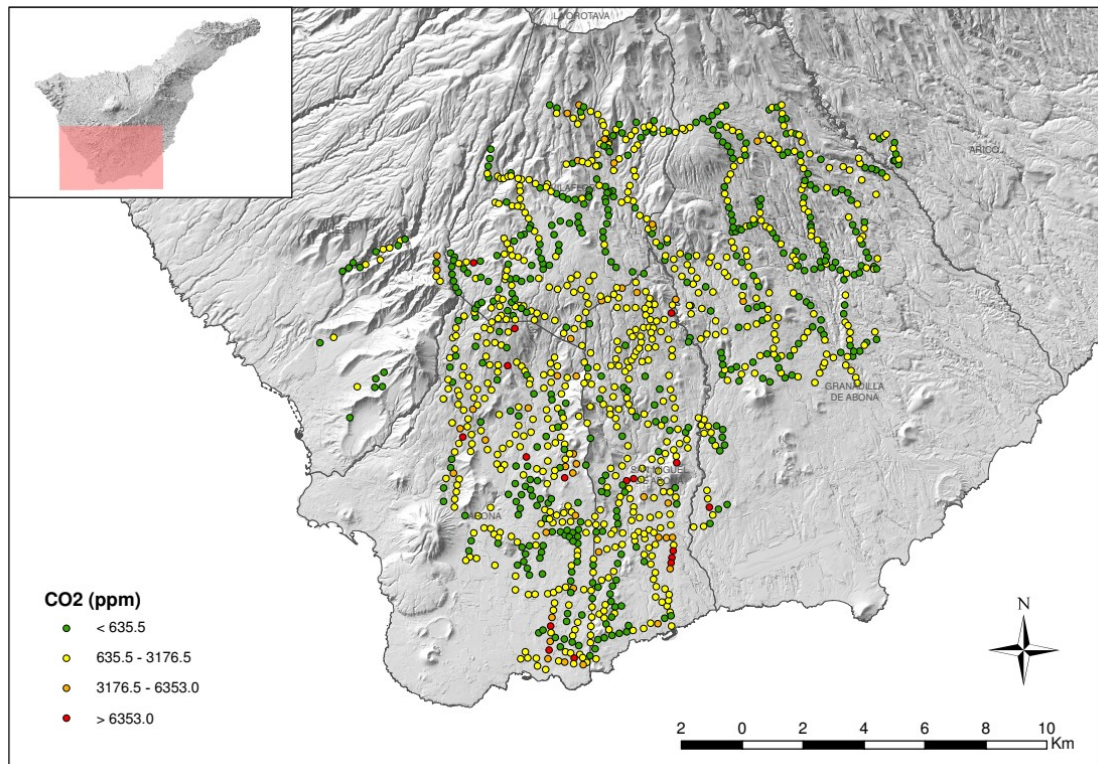


Figura 39. Mapa de concentración de CO₂, en el área de estudio de Garehagua, basado en el análisis univariante utilizando el método de Sinclair (1974). Cada punto de datos está codificado por colores según los umbrales estadísticos derivados de los gráficos de frecuencia acumulada en escala logarítmica, reflejando cuatro poblaciones geoquímicas distintas: fondo (verde), intermedia (amarillo, entre $\mu + \sigma$ y $\mu + 2\sigma$), anómala (naranja, entre $\mu + 2\sigma$ y $\mu + 3\sigma$) y anomalías pico (rojo, $>\mu + 3\sigma$). Esta clasificación mejora la visualización de los patrones de distribución espacial y ayuda a identificar posibles zonas de emisión de gases profundos o de control estructural.

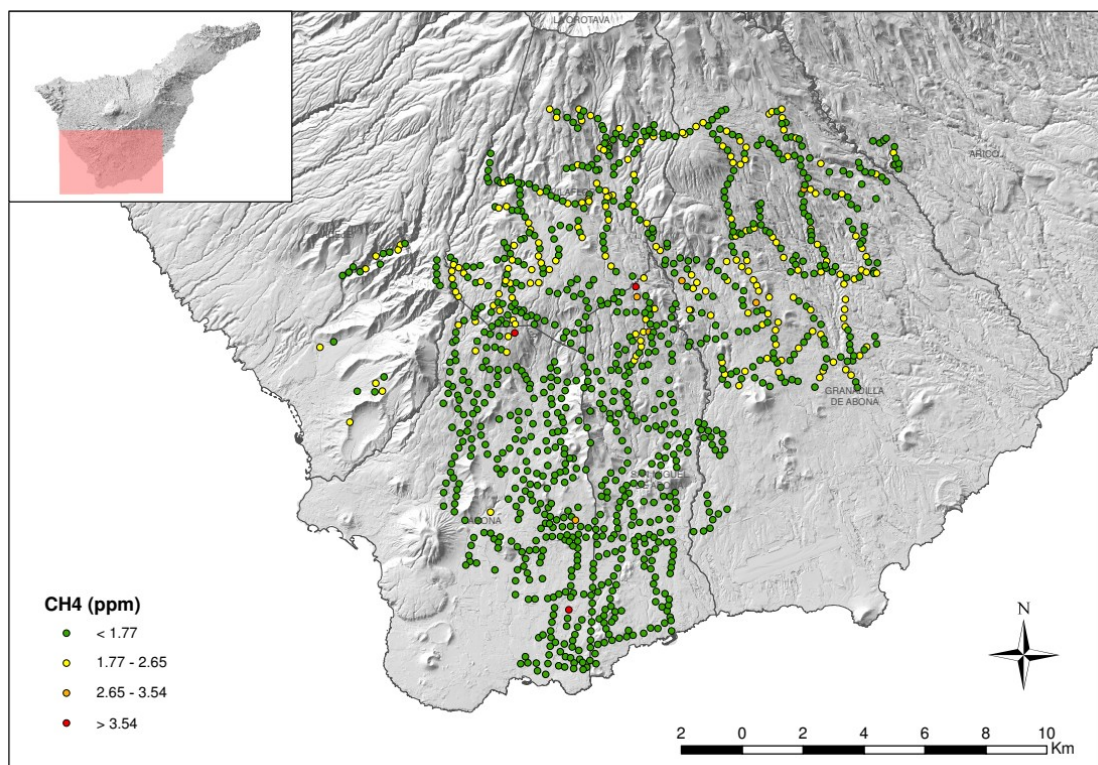


Figura 40. Mapa de concentración de CH₄, en el área de estudio de Garehagua, basado en el análisis univariante utilizando el método de Sinclair (1974). Los puntos están codificados por colores en función de los umbrales

estadísticos obtenidos a partir del análisis de frecuencia acumulada en escala logarítmica: Verde: fondo ($< \mu + \sigma$), Amarillo: intermedia ($\mu + \sigma$ a $\mu + 2\sigma$), Naranja: anomalía ($\mu + 2\sigma$ a $\mu + 3\sigma$), Rojo: anomalía pico ($> \mu + 3\sigma$).

En el caso del **metano (CH₄)**, aunque su presencia en suelos suele estar vinculada principalmente a procesos biogénicos superficiales, su análisis en exploración geotérmica puede aportar información complementaria. En particular, las anomalías localizadas con valores elevados de CH₄ pueden indicar condiciones reductoras en profundidad, o incluso la existencia de zonas estructurales donde el gas queda confinado y asciende conjuntamente con fluidos hidrotermales. Además, su interpretación resulta especialmente útil cuando se combina con otros parámetros geoquímicos (como CO₂ o He), ya que permite distinguir entre orígenes biogénicos puros y señales mixtas. El método de Sinclair aplicado al CH₄ permitió identificar estos patrones y delimitar áreas de interés potencial dentro del dominio de estudio.

En el caso del **helio (He)**, se trata de un gas noble inerte cuya presencia en el suelo tiene un alto valor diagnóstico en contextos volcánicos y geotérmicos. A diferencia de otros gases, el He no se genera por procesos biológicos ni se ve afectado por reacciones químicas en el suelo, por lo que su presencia en concentraciones elevadas suele reflejar un origen profundo, magmático o hidrotermal. La aplicación del método de Sinclair permitió identificar una fracción reducida de datos con valores claramente anómalos, que podrían estar asociados a zonas de desgasefacción estructuralmente controlada, como fallas o fracturas profundas. Estos resultados refuerzan el papel del He como trazador geoquímico clave en la prospección de recursos geotérmicos ocultos.

El mapa de He (Figura 41) permite identificar posibles zonas estructuralmente controladas de emisión de helio, y su comparación con otros gases resulta clave para definir firmas geoquímicas multivariantes.

Por otro lado, la integración de los datos de CH₄ y He con parámetros físicos y geológicos del área de estudio potencia la interpretación geoquímica, facilitando la identificación de sistemas hidrotermales activos o en estado latente. La correlación espacial entre anomalías de estos gases y estructuras geológicas, como fallas o fracturas, permite proponer modelos dinámicos del flujo de fluidos profundos. Esto es especialmente relevante en contextos donde la actividad superficial es escasa o difícil de detectar mediante métodos convencionales, otorgando así una herramienta valiosa para la exploración y monitoreo de recursos geotérmicos.

Finalmente, la metodología aplicada también subraya la importancia del muestreo sistemático y de alta resolución espacial para captar variaciones locales que podrían pasar desapercibidas en análisis más generales. Los resultados obtenidos con el método de Sinclair no solo aportan a la identificación de anomalías puntuales, sino que contribuyen a construir un marco interpretativo robusto para la caracterización de zonas geotérmicas, optimizando la toma de decisiones en proyectos de exploración y desarrollo sostenible.

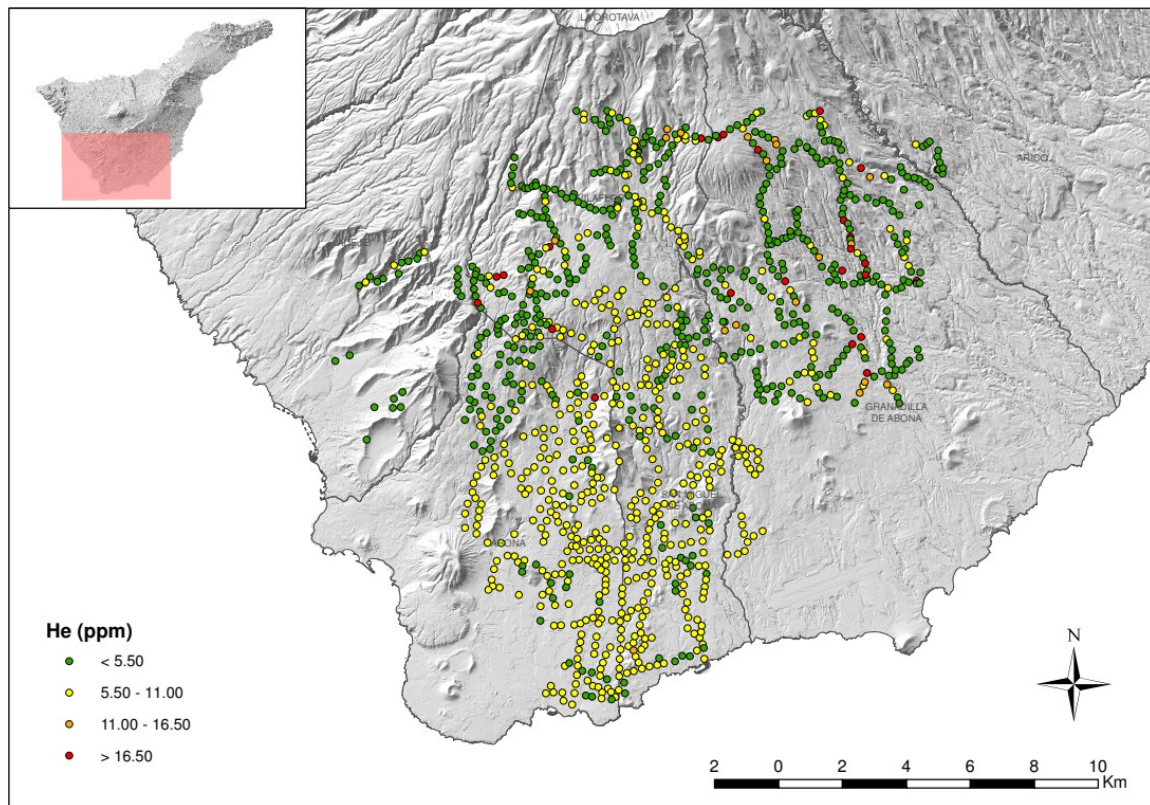


Figura 41. Mapa de concentración de helio (He) en gases del suelo del área de estudio del Dominio Minero Garehagua, elaborado mediante análisis univariante utilizando el método de Sinclair (1974). Los puntos de muestreo están codificados por colores según los umbrales estadísticos derivados del análisis de frecuencia acumulada en escala logarítmica: Verde: valores de fondo ($< \mu + \sigma$), Amarillo: valores intermedios ($\mu + \sigma$ a $\mu + 2\sigma$), Naranja: anomalías ($\mu + 2\sigma$ a $\mu + 3\sigma$), Rojo: anomalías pico ($> \mu + 3\sigma$).

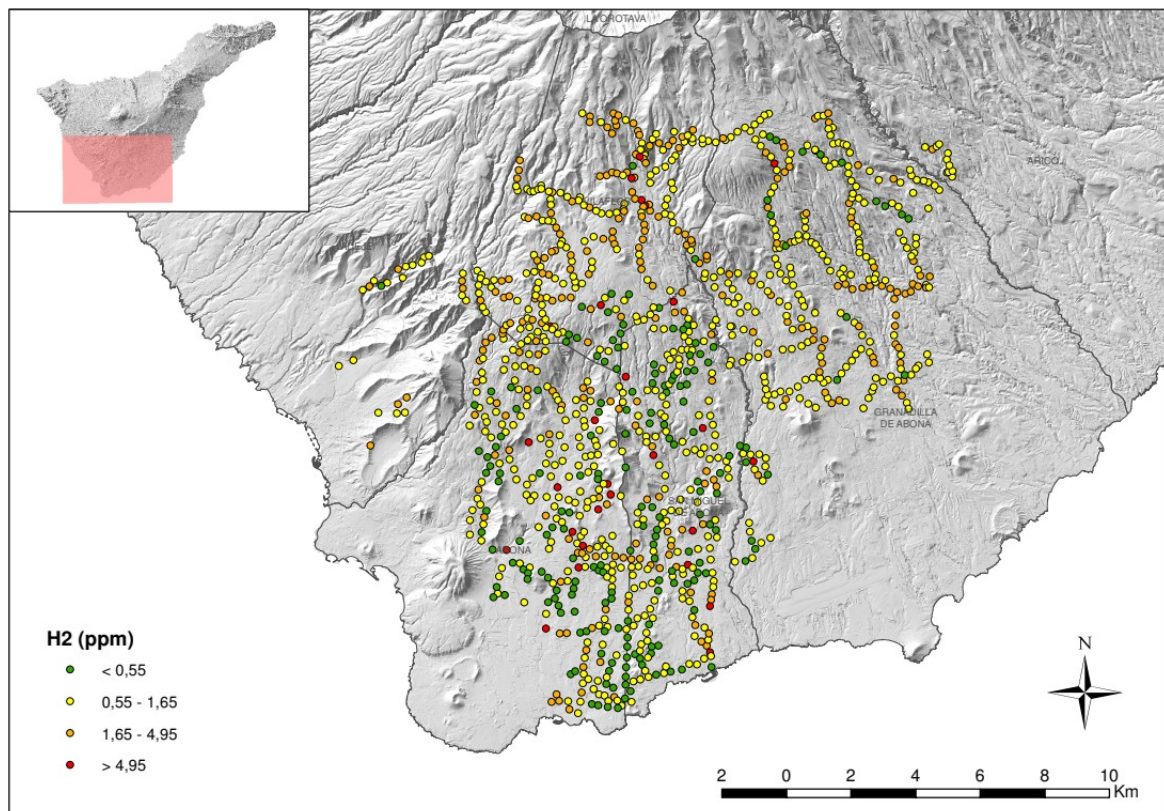


Figura 42. Mapa de concentración de H₂, en el área de estudio de Garehagua, basado en el análisis univariante utilizando el método de Sinclair (1974). Los puntos se han clasificado por colores en función de los umbrales

estadísticos definidos a partir de la distribución acumulada logarítmica.

El **hidrógeno (H_2)** es un gas geoquímico de especial interés debido a su alta movilidad y su vinculación con procesos redox, fracturación de rocas o actividad hidrotermal. Aunque sus concentraciones en superficie suelen ser bajas, su detección en niveles significativamente superiores al fondo puede indicar zonas de reacciones fisicoquímicas activas o de ascenso rápido desde profundidad, especialmente en contextos volcánicos activos. En el presente estudio, el análisis estadístico mediante el método de Sinclair permitió distinguir algunos puntos con concentraciones de H_2 anómalas, cuya distribución espacial sugiere una posible correlación con estructuras de permeabilidad o con áreas de interacción entre fluidos magmáticos y rocas encajantes.

En conjunto, la aplicación del método de Sinclair al análisis univariante de las concentraciones de gases del suelo en el área de estudio permitió establecer una clasificación objetiva de las poblaciones geoquímicas y delimitar espacialmente anomalías potencialmente significativas. Los resultados muestran que, si bien la mayoría de los puntos reflejan niveles de fondo o intermedios compatibles con condiciones superficiales o de mezcla, existen zonas discretas con concentraciones anómalas de CO_2 , CH_4 , He y H_2 que podrían corresponder a emanaciones profundas canalizadas por estructuras geológicas activas.

En particular, las anomalías pico de CO_2 y He muestran una distribución parcialmente coincidente, lo que refuerza la hipótesis de un aporte magmático o hidrotermal. Asimismo, los puntos con concentraciones elevadas de CH_4 y H_2 podrían estar asociados a procesos reductores localizados o fracturación activa, y en algunos casos coinciden espacialmente con zonas de alto flujo difuso de CO_2 o con lineamientos estructurales cartografiados.

Esta caracterización univariante proporciona una base sólida para el análisis multivariable posterior, permitiendo seleccionar variables clave, validar tendencias y enfocar la búsqueda de firmas geoquímicas compuestas representativas de zonas con potencial geotérmico oculto.

Para complementar el análisis de concentraciones, se evaluaron varios cocientes geoquímicos con el fin de inferir el origen y los procesos de migración de los gases del suelo. Las Figuras 43 a 46 presentan los mapas de distribución espacial de los cocientes $\delta^{13}C/^{12}C$, He/Ar, CH_4/CO_2 y H_2/Ar en el área de estudio del Permiso de Investigación minera Garehagua, proporcionando información adicional sobre las firmas de origen de los gases, las condiciones redox y las dinámicas de mezcla entre componentes superficiales y profundos.

En particular, el mapa del cociente $\delta^{13}C/^{12}C$ (Figura 43) se ha elaborado utilizando umbrales isotópicos fijos para discriminar entre fuentes biogénicas ($\leq -18\text{‰}$), atmosféricas ($\sim -8\text{‰}$) y endógenas ($> -7\text{‰}$), permitiendo así delimitar zonas de influencia magmático-hidrotermal. Este análisis permite detectar zonas con enriquecimiento relativo de $\delta^{13}C$, que podrían estar asociadas a aportes profundos o a fraccionamientos isotópicos durante la migración del gas.

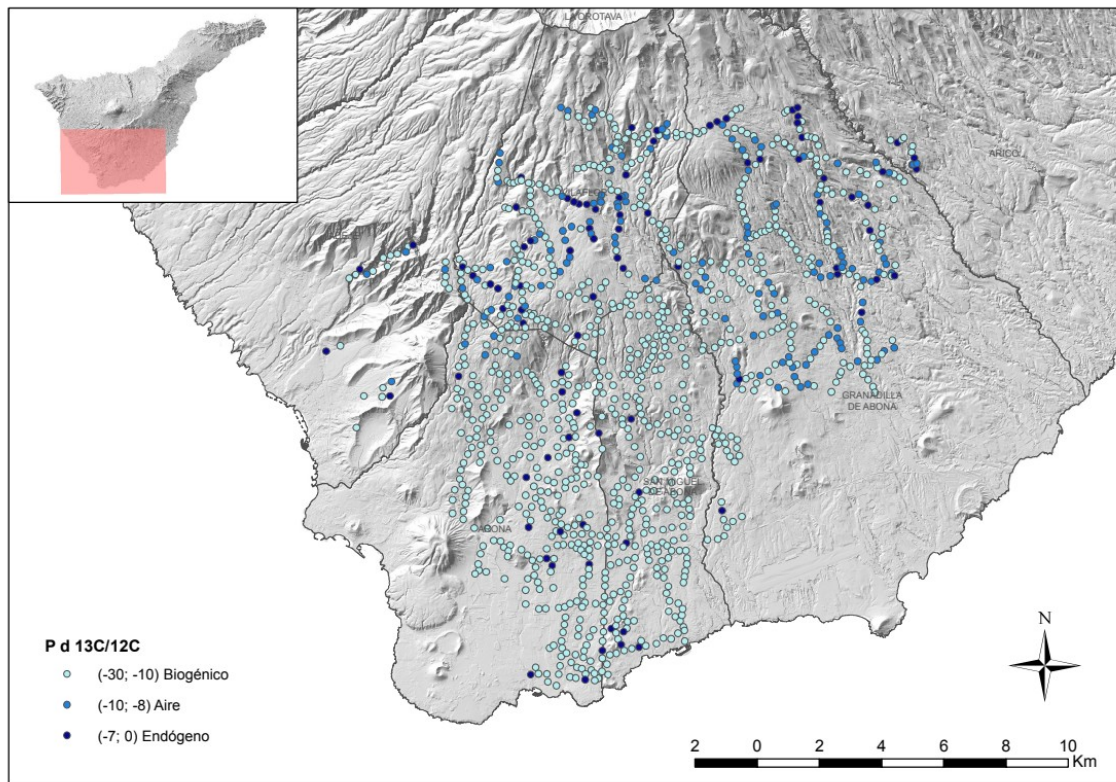


Figura 43. Mapa de distribución espacial de cocientes geoquímicos seleccionados en gases del suelo del área de estudio del Dominio minero Garehagua: $\delta^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$. Estos cocientes proporcionan información adicional sobre el origen de los gases, los procesos de mezcla y las condiciones redox. El mapa de $\delta^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ utiliza umbrales isotópicos fijos para distinguir fuentes biogénicas ($\leq -18\text{‰}$), atmosféricas ($\sim -8\text{‰}$) y endógenas ($> -7\text{‰}$).

Los ratios **He/Ar**, **CH₄/CO₂** y **H₂/Ar**, por su parte, fueron clasificados en intervalos cuantílicos (tres a cinco clases) para facilitar la interpretación visual de los patrones espaciales. Estos indicadores son altamente sensibles a condiciones redox, procesos de fraccionamiento y al grado de aporte de gases profundos o reducidos, siendo particularmente útiles en contextos donde las concentraciones absolutas presentan solapamiento entre poblaciones. Por ejemplo, **He/Ar** permite discriminar señales magmáticas frente a aportes atmosféricos, **CH₄/CO₂** se asocia a procesos biogénicos versus térmicos, y **H₂/Ar** se vincula con ambientes reducidos o zonas de mayor actividad hidrotermal.

Estos ratios también permiten identificar zonas de mezcla entre fluidos superficiales y profundos, así como diferencias en las condiciones redox locales. Así, se mejora la caracterización del sistema geotérmico y se apoyan decisiones sobre áreas prioritarias para exploración y monitoreo.

En conjunto, estos mapas de ratios permiten refinar la delimitación de áreas anómalas y proporcionan criterios geoquímicos complementarios para integrar con información estructural y geofísica, lo que mejora la interpretación del sistema y la priorización de zonas con potencial geotérmico.

Además, el uso de estos ratios permite minimizar los efectos de variaciones superficiales inducidas por factores ambientales o biológicos, al centrarse en relaciones internas entre gases

que conservan mejor las señales de origen profundo. Esta estrategia resulta especialmente útil en entornos volcánicos complejos como el sur de Tenerife, donde las señales geoquímicas pueden estar enmascaradas por procesos de mezcla, dilución atmosférica o alteración superficial, y donde la resolución espacial es clave para guiar futuras intervenciones exploratorias.

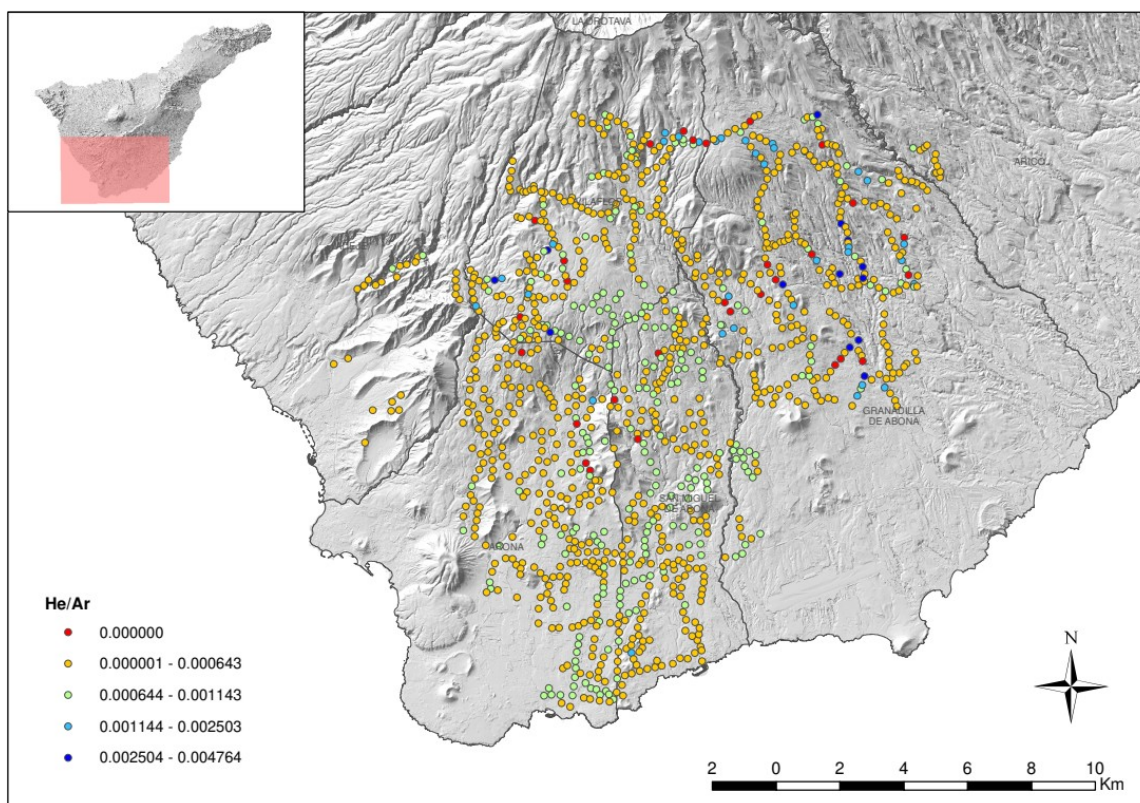


Figura 44. Mapa de distribución espacial del cociente geoquímico He/Ar en gases del suelo del área de estudio del Dominio Minero Garehagua. Los valores se han clasificado en cinco intervalos mediante cuantiles, incluyendo el valor nulo (rojo) para facilitar la detección de posibles errores de medición o condiciones de fondo extremo. Los cocientes más elevados (tonos azules) se interpretan como indicativos de aportaciones significativas de helio de origen profundo, en contraste con los valores bajos (tonos amarillos y verdes), que reflejan una composición dominada por aire atmosférico. La distribución espacial sugiere la existencia de estructuras de permeabilidad preferente asociadas a zonas de desgasificación difusa con componente magmático.

Entre los diferentes cocientes analizados, el cociente He/Ar resulta especialmente útil como indicador de aportes profundos de origen magmático. Mientras que el argón (Ar) es un gas noble presente en la atmósfera y suele comportarse de forma conservativa, el helio (He), en particular su fracción ^4He , puede tener una contribución significativa desde fuentes endógenas profundas, asociadas a desgasificación magmática o circulación hidrotermal.

El cociente He/Ar permite así discriminar entre señales dominadas por aire atmosférico (bajo contenido en He y alto en Ar) y aquellas enriquecidas en He debido a aportes profundos. Este indicador es menos sensible a procesos superficiales de oxidación o actividad biológica, lo que lo convierte en una herramienta robusta para la detección de anomalías geoquímicas de origen magmático.

El mapa de distribución espacial del cociente He/Ar (Figura 44) muestra una clara concentración de valores más elevados hacia sectores del centro-norte del área de estudio, con patrones

alineados en torno a posibles estructuras de permeabilidad vertical. La clasificación cuantílica revela que si bien la mayoría de los puntos presentan valores bajos o cercanos al fondo atmosférico (valores amarillos y verdes), existe un subconjunto significativo con cocientes elevados (tonos azul claro y azul oscuro), lo que podría reflejar zonas de mayor conexión con fuentes profundas a lo largo de fracturas o lineamientos estructurales.

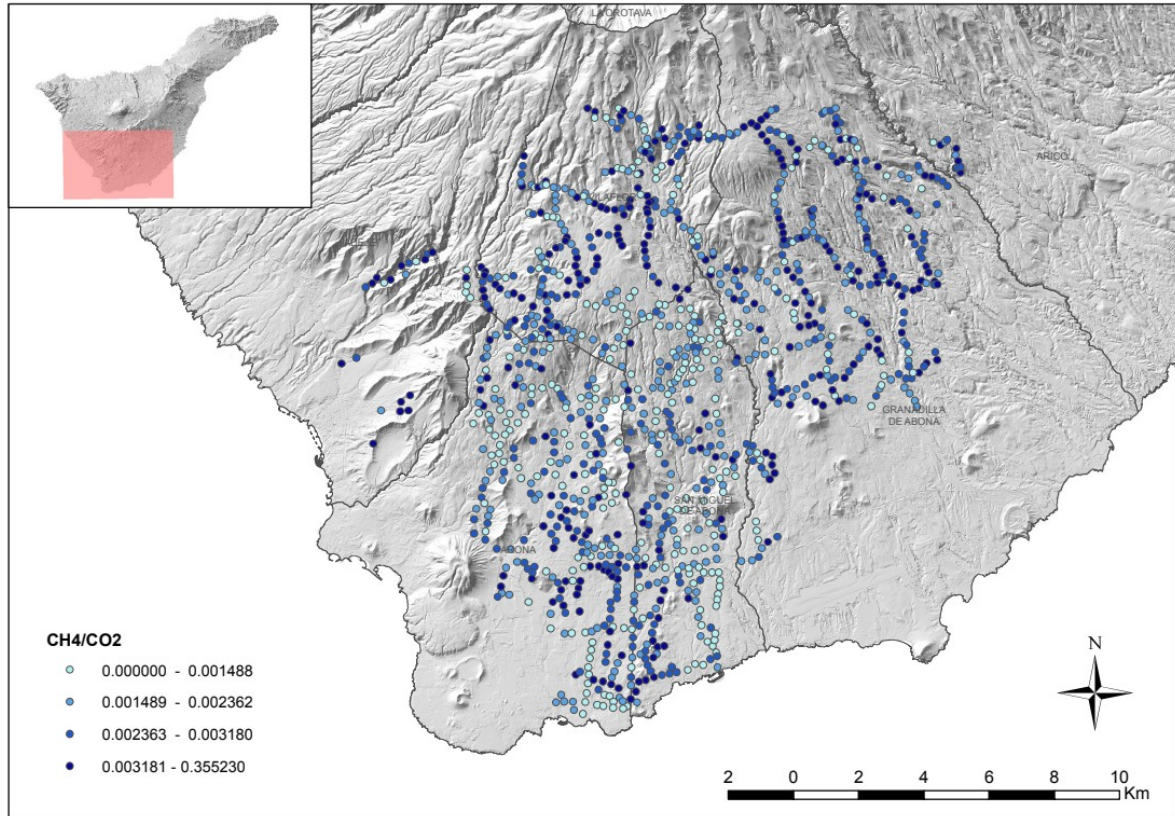


Figura 45. Mapa de distribución espacial del cociente CH_4/CO_2 en gases del suelo del área de estudio del Dominio Minero Garehagua. Los valores se han clasificado en cuatro intervalos mediante cuantiles, desde valores cercanos a cero (baja relación CH_4/CO_2 , tonos celestes) hasta máximos locales de 0.355 (tonos azul oscuro). Este cociente permite inferir el balance entre procesos biogénicos reductores y emisiones ricas en CO_2 de origen superficial o profundo. Las zonas con cocientes elevados podrían estar asociadas a entornos con actividad microbiana activa o confinamiento estructural, mientras que los valores bajos sugieren predominio de CO_2 magmático, atmosférico o difuso en condiciones oxidantes.

El cociente CH_4/CO_2 se considera un indicador útil en exploración geoquímica porque refleja la naturaleza relativa de las fuentes de carbono en el sistema. El metano (CH_4) tiene un origen típicamente biogénico o termogénico, y puede formarse por actividad microbiana anaerobia en suelos orgánicos o por descomposición térmica de materia orgánica a mayores profundidades. Por el contrario, el dióxido de carbono (CO_2) puede tener múltiples orígenes (biogénico, atmosférico, sedimentario o magmático), por lo que su combinación con CH_4 en forma de cociente permite discriminar ambientes oxidantes versus reductores, así como fuentes profundas frente a procesos superficiales.

Los valores elevados de CH_4/CO_2 suelen indicar una dominancia de procesos biogénicos reductores, mientras que los valores bajos pueden interpretarse como señal de un sistema más

oxidante, o bien de una mayor proporción de CO_2 magmático o atmosférico en la mezcla gaseosa.

En el mapa de distribución espacial del ratio CH_4/CO_2 (Figura 45), los valores se han clasificado en cuatro intervalos mediante cuantiles. Se observa una concentración predominante de valores bajos a moderados en la mayor parte del área de estudio, lo que sugiere una influencia extendida de CO_2 de fondo, posiblemente mezclado con componentes atmosféricos o endógenos. Sin embargo, destacan zonas localizadas con valores elevados (tonos azul oscuro) en sectores del norte, noreste y sureste del dominio, que podrían reflejar condiciones más reductoras, mayor actividad bacteriana o zonas con aporte de CH_4 por fuentes profundas confinadas.

Aunque el ratio CH_4/CO_2 por sí solo no es concluyente, su combinación con otros indicadores — como $\delta^{13}\text{C}(\text{CO}_2)$, He/CO_2 o Rn — puede aportar valor adicional para refinar la interpretación geoquímica y delimitar zonas donde se superponen señales biogénicas y profundas.

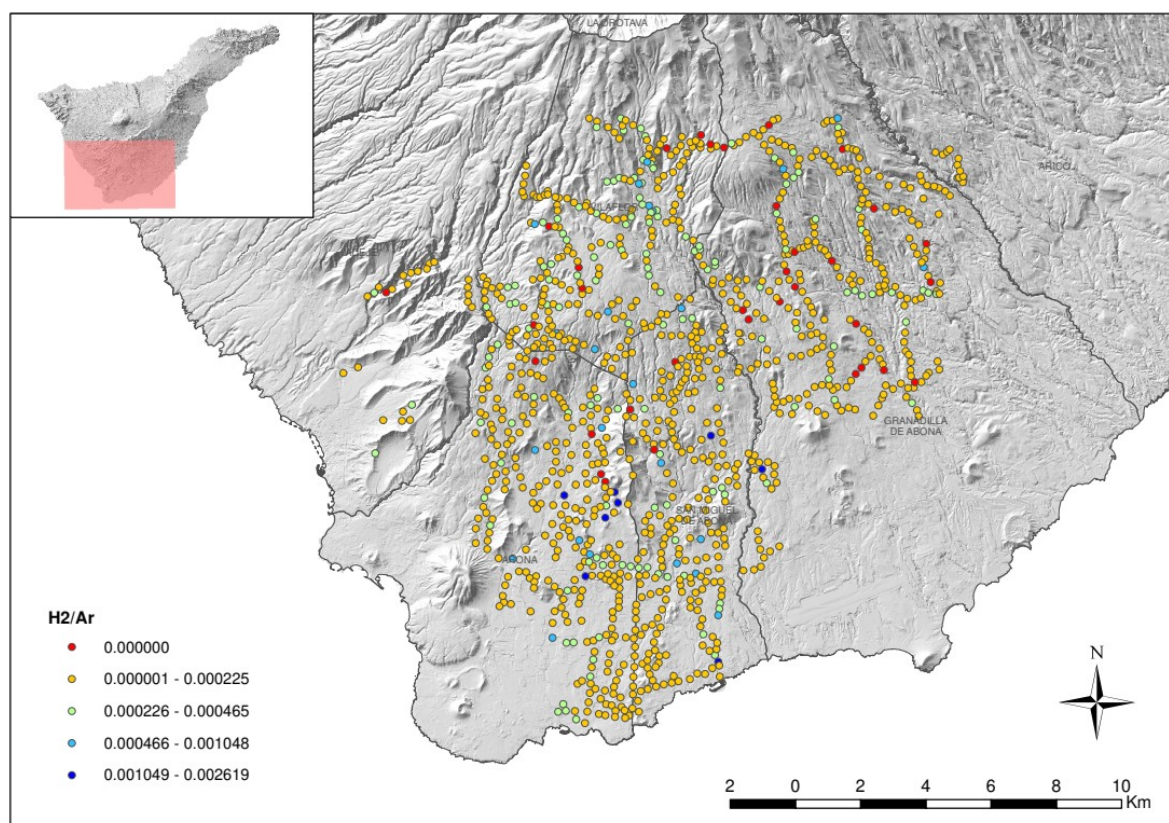


Figura 46. Mapa de distribución espacial del cociente H_2/Ar en gases del suelo del área de estudio del Dominio Minero Garehagua. Los valores están clasificados en cinco intervalos cuantílicos, desde concentraciones nulas (rojo) hasta máximos locales de 0.0026 (azul oscuro). Los puntos con valores elevados podrían reflejar zonas con actividad redox intensa o aporte hidrotermal localizado, y son de interés para ser considerados junto con otros indicadores geoquímicos y estructurales.

El ratio H_2/Ar se utiliza como indicador complementario para identificar ambientes reductores o zonas afectadas por procesos hidrotermales activos. Mientras que el hidrógeno molecular (H_2) es un gas altamente reactivo y poco persistente en superficie, su presencia elevada puede señalar reacciones redox intensas o aportes profundos recientes. El argón (Ar), al ser de origen principalmente atmosférico, sirve como referencia estable.

En el mapa de distribución espacial (Figura 46), la mayoría de los puntos muestran valores bajos del ratio, lo que sugiere un fondo geoquímico relativamente homogéneo. No obstante, destacan algunos puntos aislados con valores altos (tonos azul oscuro), principalmente en sectores del suroeste y noreste del área de estudio. Estos valores podrían estar relacionados con estructuras permeables locales o zonas de actividad térmica puntual.

5.2 Origen del CO₂: Evidencia Isotópica e interpretación mediante Modelos de mezcla

Para determinar el origen de las emisiones de CO₂ en el área de estudio, se construyó un diagrama isotópico binario representando los valores de $\delta^{13}\text{C}(\text{CO}_2)$ (‰ respecto al estándar VPDB) frente al inverso de la concentración de CO₂ ($1/[\text{CO}_2]$, en ppm⁻¹). Este tipo de representación permite inferir la existencia de mezclas entre gases de diferente procedencia, y ha sido ampliamente utilizado en estudios de volcanología y exploración geotérmica. El análisis se basa en la comparación con valores típicos de fuentes extremas o end-members, representativos de los distintos orígenes potenciales del CO₂ en sistemas naturales. En este estudio se han considerado los siguientes tres end-members:

- **CO₂ biogénico:** Este componente se origina en la descomposición de materia orgánica en el suelo, por acción de la respiración microbiana y radicular. Se caracteriza por valores isotópicos muy negativos de $\delta^{13}\text{C}$, típicamente entre -26‰ y -15‰, dependiendo del tipo de vegetación, del contenido de materia orgánica y de las condiciones redox. Además, durante su migración hacia la superficie, el CO₂ biogénico puede enriquecerse en ¹³C debido al fraccionamiento isotópico asociado a la difusión en medios porosos, alcanzando valores hasta +4.4‰ respecto a su valor original (Cerling et al., 1991). Este proceso crea una dispersión considerable en el valor de $\delta^{13}\text{C}$, lo que justifica la necesidad de evaluarlo en relación con la concentración total.
- **CO₂ atmosférico:** Constituye el fondo isotópico del sistema y se encuentra en equilibrio con la atmósfera libre. Su composición isotópica es relativamente constante, con valores cercanos a -8‰, y se asocia a concentraciones muy bajas, del orden de ~400 ppm (es decir, ~0.04 mol.%), lo que equivale a valores de $1/[\text{CO}_2] \approx 2.5 \times 10^{-3} \text{ ppm}^{-1}$. Si bien su presencia en muestras de gases del suelo suele ser marginal en zonas volcánicas activas, su inclusión es fundamental para identificar mezclas superficiales o condiciones de ventilación intensa en suelos aireados.
- **CO₂ magmático-hidrotermal:** Este componente profundo es característico de los sistemas geotérmicos activos y está asociado a la desgaseificación del magma o a procesos hidrotermales a gran profundidad. Se reconoce por valores isotópicos menos negativos, habitualmente entre -6.5‰ y -4‰, aunque puede variar en función del tipo de magma, el grado de interacción con rocas encajantes y los procesos de disolución o reprecipitación.

Este CO₂ se libera a través de fracturas o zonas de alta permeabilidad, por lo general acompañado de otros gases como He o H₂, y suele encontrarse en altas concentraciones, es decir, en la zona baja del eje 1/[CO₂] del diagrama.

Este marco de referencia isotópico permite, por tanto, interpretar la mezcla relativa de fuentes en cada muestra y evaluar la influencia de procesos geológicos, biológicos y atmosféricos en la composición final del gas. La distribución de los datos observados en el diagrama binario $\delta^{13}\text{C}$ vs. 1/[CO₂] (Figura 47) refleja la interacción entre estos tres extremos, permitiendo identificar zonas con predominancia biogénica, otras influenciadas por procesos profundos, y algunas intermedias que sugieren mezclas estructuralmente controladas.

Las concentraciones de CO₂ en el suelo del área de estudio presentaron una amplia variación, desde niveles cercanos a los atmosféricos (~0.04 mol.%) hasta valores máximos de 1.99 mol.%, con un valor medio de 0.15 mol.%. La composición isotópica del $\delta^{13}\text{C}(\text{CO}_2)$ varió entre -31.96‰ y -5.69‰, con un valor medio de -15.51‰.

Esta dispersión de valores justifica el uso de un enfoque gráfico de mezcla, como el diagrama binario $\delta^{13}\text{C}$ frente a 1/[CO₂], que se muestra en la Figura 47

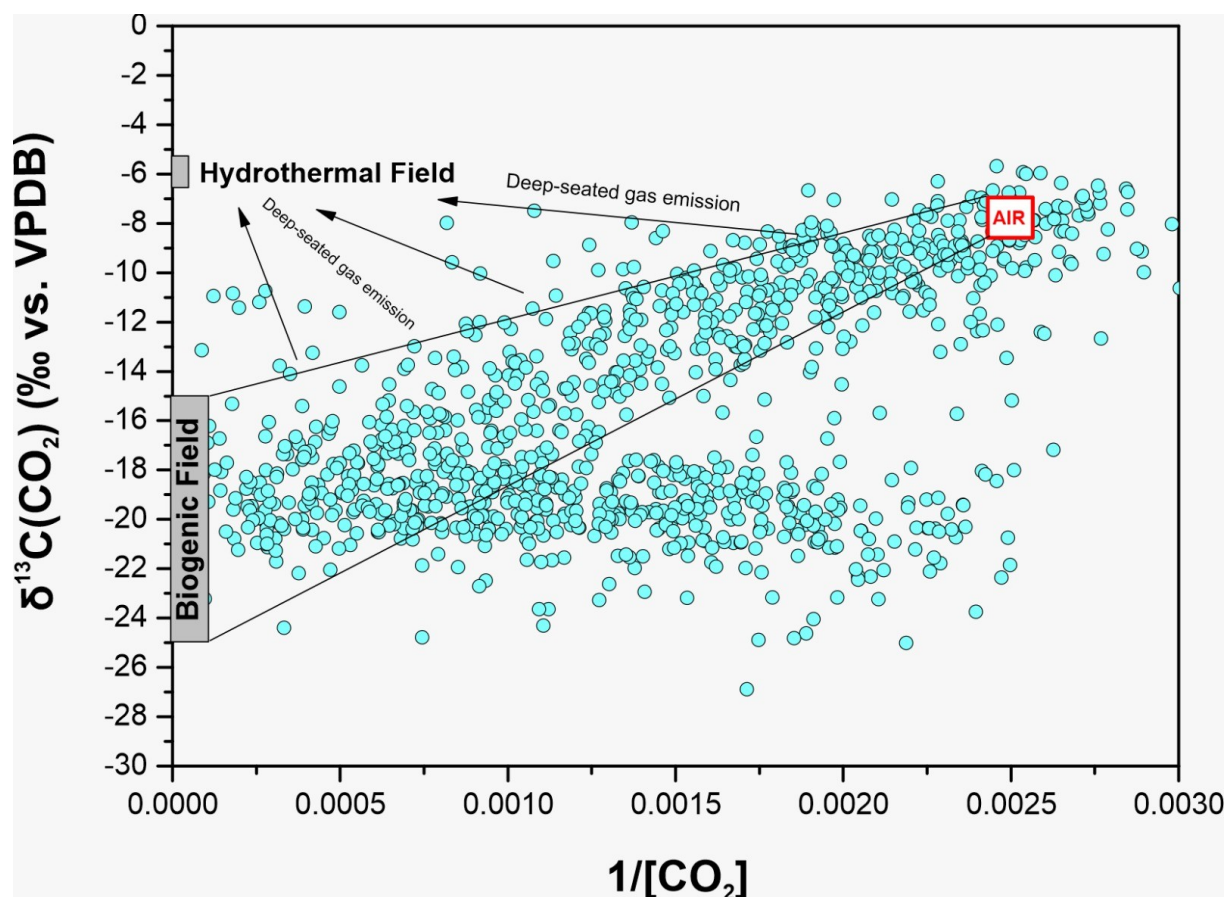


Figura 47. Diagrama de correlación entre $\delta^{13}\text{C}\text{--CO}_2$ (‰ vs. V-PDB) y el inverso de la concentración de CO₂ (1/[CO₂], en ppm⁻¹) para los dominios mineros de Garehagua y Garehagua II. El gráfico ilustra la contribución relativa de CO₂ de origen biogénico, atmosférico y volcánico-hidrotermal, y permite visualizar tendencias de mezcla entre estos componentes extremos. Las líneas negras delimitan el campo de mezcla entre las fuentes biogénica y atmosférica, mientras que las flechas señalan posibles trayectorias de emisión asociadas a gases de origen profundo.

Los valores típicos del aire (AIR) se indican en la parte superior derecha, en correspondencia con su baja concentración y $\delta^{13}\text{C}$ característico ($\sim -8\text{‰}$).

Como se muestra en la Figura 47, la mayoría de las muestras se sitúan dentro del campo biogénico, lo que confirma una influencia dominante de la actividad biológica en la composición de los gases del suelo. Un subconjunto menor de puntos de datos se alinea a lo largo de una trayectoria que conecta los campos biogénico e hidrotermal, lo que sugiere la presencia de una mezcla entre CO_2 biogénico superficial y un componente magmático-hidrotermal profundo. Estas muestras se caracterizan por valores relativamente enriquecidos de $\delta^{13}\text{C}$ (entre -12‰ y -6‰) y concentraciones elevadas de CO_2 , lo que indica vías de emisión de gases profundos a través de zonas de falla permeables.

Cabe destacar que no se observa una contribución significativa de CO_2 atmosférico, ya que el conjunto de datos no incluye puntos cercanos al extremo correspondiente al aire. Esta ausencia es esperable en muestras de gases subsuperficiales en terrenos volcánicos, donde el CO_2 endógeno domina sobre la difusión atmosférica.

En resumen, los datos isotópicos y de concentración respaldan la interpretación de un origen predominantemente biogénico del CO_2 , con aportes localizados de origen profundo, probablemente asociados al control estructural volcánico. Estos resultados ponen de manifiesto la eficacia de los diagramas binarios $\delta^{13}\text{C}$ frente a $1/[\text{CO}_2]$ para discriminar las fuentes de gas en contextos de exploración geotérmica.

5.3 Resultados geoquímicos de los gases del suelo

El análisis univariable de los gases del suelo muestreados en el Dominio Minero Garehagua reveló una marcada variabilidad en las concentraciones y flujos, abarcando desde valores de fondo hasta niveles claramente anómalos. En total, se analizaron más de 1.200 puntos de muestreo distribuidos por toda el área de estudio. Las distribuciones de los datos mostraron un patrón predominantemente log-normal, característico de ambientes volcánicos con procesos de desgasificación difusa. Esta distribución se confirmó para parámetros como el flujo de CO_2 , las concentraciones de He y H_2 , la actividad de ^{222}Rn y la razón isotópica $\delta^{13}\text{C}$ del CO_2 .

En términos estadísticos, el flujo de CO_2 presentó una media geométrica de aproximadamente $2,19 \text{ g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{d}^{-1}$, con valores máximos que alcanzaron los $37,69 \text{ g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{d}^{-1}$, lo que sugiere la coexistencia de emisiones biogénicas y aportes profundos. El helio osciló entre su concentración atmosférica ($\sim 5,24 \text{ ppm}$) y valores máximos de 20 ppm en zonas puntuales, indicando posibles entradas de gases de origen mantélico. En el caso del H_2 , la mayoría de las mediciones se mantuvieron por debajo de $0,5 \text{ ppm}$, pero se observaron anomalías locales que superaron los 24 ppm , potencialmente asociadas a procesos de interacción agua-roca o a condiciones redox particulares. La actividad de radón fue generalmente baja ($< 0,10 \text{ kBq/m}^3$), aunque algunos

puntos alcanzaron valores de hasta 12,08 kBq/m³, lo cual podría indicar la existencia de rutas preferenciales de emisión, como fracturas o zonas de permeabilidad aumentada.

La composición isotópica del carbono en el CO₂ reforzó estas observaciones. Los valores de $\delta^{13}\text{C}$ se agruparon mayoritariamente en torno a $-15,51\text{‰}$, reflejando un origen biogénico, aunque se identificaron muestras anómalas con valores tan enriquecidos como $-5,69\text{‰}$. Estas firmas isotópicas más pesadas, combinadas con elevadas concentraciones de CO₂, apuntan a una contribución magmático-hidrotermal en ciertos sectores del área de estudio.

La distribución espacial de estas anomalías no fue aleatoria. El análisis geográfico reveló que las zonas con altos valores de radón solían coincidir con concentraciones elevadas de helio, especialmente a lo largo de una alineación estructural de orientación NO–SE, lo que sugiere un control tectónico sobre la migración de gases. Además, los puntos con las firmas isotópicas más enriquecidas se localizaron cerca de zonas de intersección de lineamientos estructurales conocidos (Benà, E. et al. 2022), lo que refuerza la hipótesis de que estas zonas actúan como corredores de desgasificación profunda.

Mediante la aplicación del método de Sinclair (1974), se identificaron y clasificaron múltiples poblaciones geoquímicas. Aproximadamente el 2,1 % de las muestras mostraron valores pico en el flujo de CO₂, el 0,7 % en helio y el 0,5 % en radón. Sin embargo, la superposición espacial entre estas anomalías uniparamétricas fue limitada, lo cual dificultó la delimitación de zonas de desgasificación con confianza basada exclusivamente en el análisis univariable. Esto puso de manifiesto la necesidad de aplicar enfoques multivariantes más integradores, como el clustering, para captar relaciones estructuradas entre parámetros geoquímicos y optimizar la identificación de zonas potencialmente geotérmicas.

Por último, el análisis de correlación por pares entre gases proporcionó información adicional sobre los mecanismos de origen y transporte. Se observó una correlación positiva entre CO₂ y He (ρ de Spearman $\approx +0,6$), compatible con una fuente común profunda. La actividad de radón se correlacionó moderadamente con CO₂ ($\rho \approx +0,4$) y con mayor fuerza con He ($\rho \approx +0,5$), sugiriendo que las mismas estructuras que favorecen el ascenso del helio también actúan como vías para el radón. Asimismo, se detectó una relación inversa entre $\delta^{13}\text{C}$ y las concentraciones de CO₂, indicando que las muestras más enriquecidas isotópicamente tienden a coincidir con concentraciones absolutas más elevadas, lo que apoya su interpretación como señales de aporte profundo.

5.4 Del análisis univariable a la clasificación multivariable en el análisis geoquímico

El análisis univariable es una herramienta valiosa para examinar variables individuales (por ejemplo, la concentración de CO₂, CH₄, ²²²Rn o He) y distinguir entre valores de fondo y valores

anómalos de forma aislada, parámetro por parámetro. Métodos como el enfoque de Sinclair (1974) siguen siendo particularmente eficaces para establecer umbrales estadísticos objetivos e identificar poblaciones geoquímicas log-normales dentro de una sola dimensión de los datos, especialmente en el análisis de gases del suelo. Sin embargo, este enfoque trata cada variable de forma independiente, lo que limita la capacidad para detectar co-ocurrencias o interacciones entre variables que podrían tener un significado geoquímico crucial.

En los sistemas volcánicos e hidrotermales —donde la desgasificación está influida por procesos subsuperficiales complejos— las anomalías raramente se manifiestan a través de un único parámetro. Por el contrario, suelen estar caracterizadas por firmas multivariadas distintivas, que implican combinaciones de gases como He, CO₂, CH₄ y ²²²Rn, los cuales reflejan conjuntamente el origen de los fluidos, las vías de transporte y las estructuras de permeabilidad (Chiodini et al., 2008; Aiuppa et al., 2021).

El análisis multivariable, en cambio, considera múltiples parámetros de forma simultánea, lo que permite una visión más integrada y completa del sistema geoquímico. Técnicas como el análisis de componentes principales (PCA), el clustering no supervisado o el análisis discriminante mejoran la detección de patrones complejos ocultos, optimizan la clasificación de anomalías y reducen el riesgo de pasar por alto correlaciones significativas. Al incorporar todos los parámetros relevantes dentro de un marco analítico unificado, estos métodos amplían el alcance interpretativo más allá de las limitaciones del análisis univariable, resultando particularmente eficaces para analizar conjuntos de datos geoquímicos extensos y de alta dimensionalidad (Cabassi et al., 2020).

En este trabajo, se ha incorporado un enfoque multivariable mediante algoritmos de clustering con el fin de superar las limitaciones del análisis variable por variable. Este método permite identificar agrupaciones naturales basadas en múltiples parámetros co-variables, revelando estructuras subyacentes del sistema y anomalías integradas que no serían evidentes desde un enfoque unidimensional. En el contexto de la exploración geotérmica, este tipo de análisis permite una clasificación más robusta de las poblaciones geoquímicas, mejora la interpretación espacial de las señales y contribuye a una delimitación más precisa de zonas con potencial hidrotermal. Como resultado, proporciona una base cuantitativa más fiable para la toma de decisiones en la identificación de objetivos de perforación y la evaluación del riesgo exploratorio.

Esta estrategia también facilita la integración con otras disciplinas, como la geofísica o la geología estructural, generando modelos conceptuales más coherentes y multidimensionales del sistema geotérmico. Al combinar señales geoquímicas con datos magnetotélúricos, mapas de fracturación o gradientes térmicos, se pueden establecer correlaciones más sólidas entre anomalías superficiales y estructuras profundas, lo que refuerza la validez de los clústeres identificados y mejora la priorización de zonas para futuras investigaciones o perforaciones exploratorias.

5.5 Análisis de clustering multivariable en exploración geotérmica

5.5.1 Algoritmo K-Means (TKM)

Los algoritmos de clustering identifican estructuras dentro de datos de alta dimensionalidad agrupando puntos en regiones densas separadas por límites de baja densidad (Jain, A.K. 2010). Entre ellos, el algoritmo K-Means tradicional (TKM) es uno de los métodos más utilizados en el análisis multivariable en ciencias geológicas, debido a su simplicidad y eficiencia computacional. En el contexto de la exploración geotérmica, permite clasificar muestras geoquímicas según similitudes en su composición gaseosa del suelo, facilitando la identificación de estructuras de desgasificación ocultas y reduciendo la incertidumbre en la selección de objetivos de perforación.

K-Means particiona un conjunto de datos en K clusters minimizando la varianza interna de cada grupo, utilizando la distancia euclidiana para asignar cada punto al centroide más cercano. Sus ventajas incluyen la facilidad de implementación y la eficiencia computacional, aunque presenta desafíos como la selección óptima del número de clusters y la sensibilidad a la inicialización de los centroides. Resolver este problema de forma exacta es de tipo NP-hard; Stuart P. Lloyd (1982) propuso una solución de búsqueda local que sigue siendo ampliamente utilizada (Agarwal, R. et al. 2009, Gibou, F. et al. 2005). De hecho, una revisión de técnicas de minería de datos publicada en 2002 afirma que este “es, con mucho, el algoritmo de clustering más utilizado en aplicaciones científicas e industriales” (Berkhin, P. et al 2002).

En el presente estudio, se aplicó el algoritmo K-Means a un conjunto de datos geoquímicos multivariados procedentes de la zona de rift sur de Tenerife. Para garantizar una clasificación robusta y significativa, se realizaron previamente una serie de pasos de preprocesamiento, que incluyeron la transformación logarítmica y la normalización por z-score de los datos crudos.

Cada punto de muestreo geoquímico se representa como un vector de características de 14 dimensiones:

$$x_i = [H_2, He, Ne, Ar, O_2, CO_2, \delta^{13}C/^{12}C, ^{222}Rn, CH_4, ^{220}Tn, \text{ y ratios asociados}]$$

donde $i = 1, 2, \dots, n$, y n es el número total de muestras.

El conjunto completo de datos puede formalizarse como:

$$X = \{\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n\} \subset \mathbb{R}^{14}$$

Preprocesamiento de datos: Antes de aplicar clustering, los datos fueron transformados logarítmicamente (base 10) para estabilizar la varianza y permitir la comparación entre parámetros de distintos órdenes de magnitud. Posteriormente se normalizaron mediante z-score

(media cero y desviación estándar unitaria) para asegurar que todas las variables contribuyeran de forma equitativa al cálculo de distancias, independientemente de su escala o unidades. No se eliminaron puntos como valores atípicos, ya que se consideró que los extremos podían reflejar fenómenos geológicos relevantes, como episodios localizados de desgasificación profunda. La transformación logarítmica fue suficiente para reducir su influencia. Opcionalmente, se aplicó una reducción de dimensionalidad mediante Análisis de Componentes Principales (PCA) a los datos normalizados, con el fin de mitigar la colinealidad entre parámetros. Se conservaron los dos primeros componentes principales para el clustering y la visualización, los cuales explican la mayor parte de la varianza del conjunto de datos.

Se aplicó K-Means como método base para particionar el conjunto en K grupos disjuntos, minimizando la varianza interna, definida como la suma de las distancias euclidianas cuadradas entre cada punto y el centroide del clúster asignado:

$$J = \sum_{k=1}^K \sum_{\vec{x}_i \in G_k} \|\vec{x}_i - \vec{\mu}_k\|^2$$

donde:

μ_k es el centroide del clúster G_k y $\|\cdot\|$ denota la norma euclidiana en el espacio multivariable.

Siendo: $\mu_k = \frac{1}{|C_k|} \sum_{x_i \in C_k} x_i$

$|C_k|$: Es el número total de muestras dentro del clúster k . Se refiere al tamaño del conjunto C_k .

$\sum_{x_i \in C_k} x_i$: es la suma de todos los vectores x_i que están dentro del clúster k .

La Distancia Euclídea en el sistema multivariado se define como:

$$d(\mu_i, \mu_j) = \sqrt{\sum_{n=1}^D (\mu_{i,n} - \mu_{j,n})^2}$$

Donde:

- $d(\mu_i, \mu_j)$ es la distancia euclídea entre los centroides de los clusters i y j ,
- $\mu_{i,n}$ y $\mu_{j,n}$ representan las componentes n -ésimas de los respectivos centroides en el espacio de variables,
- D es la dimensionalidad del espacio multivariado, es decir, el número de parámetros geoquímicos considerados en el análisis (en este trabajo, CO_2 , He, H_2 , CH_4 , ^{222}Rn , Ne, O_2 , Ar, etc.).

Cada muestra del conjunto de datos puede representarse como un vector en un espacio multidimensional $x_i \in \mathbb{R}^D$, y los centroides $\mu_k \in \mathbb{R}^D$ se calculan como la media vectorial de todas las muestras asignadas al clúster k . La distancia entre centroides refleja entonces la separación

geométrica en un espacio de D dimensiones y se convierte en una métrica fundamental para evaluar la eficacia de los algoritmos de clustering en términos de cohesión interna y separación externa de los grupos formados.

En este estudio, el valor de D varió en función de la selección de parámetros transformados utilizados en cada modelo (normalizados log-linealmente), y osciló entre 2 y 14 variables geoquímicas según la configuración evaluada.

La calidad del agrupamiento se evaluó mediante el coeficiente Silhouette (Rousseeuw, P.J.1987), que compara la distancia promedio de un punto a su propio clúster con la distancia al clúster vecino más cercano. Valores cercanos a 1 indican agrupamientos bien definidos y separados.

En este estudio se seleccionó un subconjunto de variables geoquímicas representativas directamente vinculadas a procesos geotérmicos, como: flujo difuso de CO_2 , concentraciones de CO_2 y He en el suelo, H_2 , actividad de ^{222}Rn , Ne, CH_4 y $\delta^{13}\text{C}-\text{CO}_2$. Estas variables ofrecen información complementaria: CO_2 y He reflejan aportes magmáticos; H_2 , condiciones redox y térmicas; Rn, permeabilidad del medio; y $\delta^{13}\text{C}$, el origen profundo o superficial del CO_2 .

Se eligió el algoritmo clustering K-Means por su simplicidad, rapidez y amplia aplicabilidad en análisis exploratorios de datos geoquímicos, a pesar de no ofrecer garantías formales de aproximación óptima. El algoritmo requiere tres parámetros definidos por el usuario: el número de clusters iniciales (K), el método de inicialización y la métrica de distancia (comúnmente la euclidiana).

Etapas del algoritmo TKM:

1. Inicialización aleatoria de K centroides.
2. Asignación de cada punto x_i al grupo G_k más cercano.
3. Recomputación de los centroides.
4. Repetición hasta convergencia (cuando J no mejora significativamente).

El número óptimo de clusters (K) se evaluó entre 2 y 9, utilizando tanto criterios estadísticos — Silhouette Score e índice de Calinski–Harabasz— como razonamientos geológicos. Los gráficos de probabilidad indicaron al menos dos poblaciones distintas (fondo vs. anomalía), mientras que la lógica geológica apoyó la existencia de un grupo intermedio.

La fórmula del Silhouette Score global (también llamado índice Silhouette medio) es simplemente el promedio aritmético de los valores individuales $s(i)$ para todos los puntos del conjunto de datos:

$$S = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n s(i)$$

Donde:

- S es el Silhouette Score global.
- n es el número total de puntos en el dataset.
- s (i) es el Silhouette Score individual de cada punto i, calculado con:

$$s(i) = \frac{b(i) - a(i)}{\max[a(i), b(i)]}$$

Donde:

- a (i): es la distancia media del punto i a todos los demás puntos de su propio clúster (cohesión interna).
- b (i): es la menor distancia media del punto i a todos los puntos de otro clúster (el más cercano, separación externa).

La función Silhouette evalúa dos propiedades fundamentales de cualquier agrupamiento:

1. Cohesión (intra-clúster): Qué tan cerca están los puntos dentro de su propio grupo. Es análogo a una varianza baja dentro del clúster. Cuanto menor es a(i), más compacto es el grupo.
2. Separación (inter-clúster): Qué tan lejos está un punto del clúster más cercano que no es el suyo. Es como una diferencia de medias entre clusters, donde b(i) refleja la distancia media externa a otros grupos.

Este valor medio resume la calidad global del agrupamiento. Cuanto más cercano esté a 1, mejor estructurado estará el clustering. Valores cercanos a 0 indican ambigüedad en la asignación de clusters, y valores negativos reflejan asignaciones incorrectas. Por tanto, maximizar el índice Silhouette global equivale a buscar agrupamientos con alta cohesión y buena separación, objetivos coincidentes con las métricas clásicas de calidad estadística en agrupamiento.

Aunque la configuración k = 2 arrojó valores Silhouette ligeramente superiores (~0.862), esta agrupación colapsaba todas las anomalías en una sola clase, perdiendo matices geoquímicos relevantes.

En cambio, la solución con k = 3, con un Silhouette Score de 0.818, indica igualmente una excelente separación de clusters (véase Figura 48). Esta configuración permite diferenciar entre: (1) fondo geoquímico, (2) anomalía intermedia y (3) anomalía fuerte. Los grupos resultantes presentan alta cohesión interna y buena separación entre clusters, ofreciendo una interpretación más matizada de los regímenes de desgasificación del subsuelo.

La simplicidad y coherencia del modelo con tres clústeres permite integrar eficazmente los resultados en un marco geológico y geoquímico robusto, facilitando así su aplicación práctica. Esta estructura es coherente con el método de detección de anomalías de Sinclair, que también identifica múltiples poblaciones (fondo, intermedio y pico). Además, la solución con $K = 3$ se alinea mejor con la distribución esperada de las anomalías de gases del suelo en terrenos volcánicos y con la ubicación de lineamientos estructurales y anomalías magnetotélúricas conocidas, proporcionando un mayor valor interpretativo.

El análisis de la evolución del Silhouette Score respalda la selección de tres clústeres como modelo óptimo para la clasificación de las muestras geoquímicas, no solo desde un punto de vista estadístico, sino también geológico y geoquímico. Esta elección permite una segmentación significativa de los datos, respetando tanto la naturaleza física de los procesos implicados como la robustez matemática del agrupamiento.

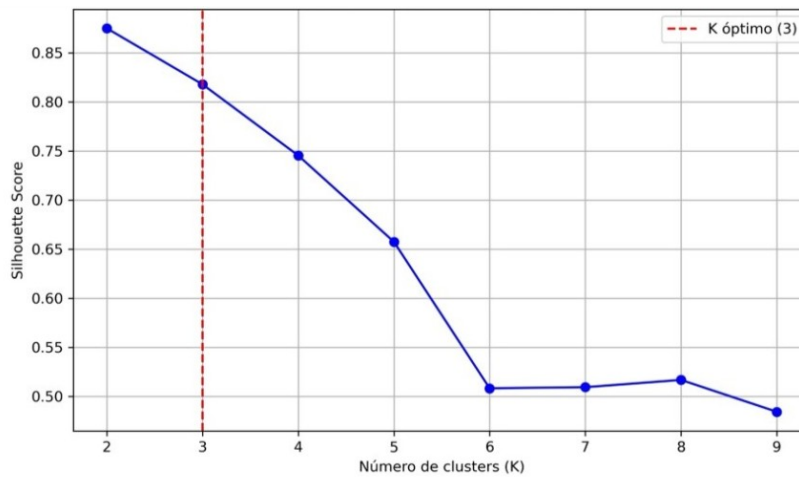


Figura 48. Evolución del índice Silhouette (línea azul) en función del número de clusters (k). La solución óptima ($k = 3$) se resalta con una línea roja discontinua, al equilibrar el rendimiento estadístico con la interpretabilidad geológica. Esta clasificación tripartita permite una interpretación más matizada del paisaje geoquímico y respalda la identificación de posibles objetivos geotérmicos.

El agrupamiento fue guiado por ratios geoquímicos diagnósticos o representativos que reflejan distintos orígenes del gas. Por ejemplo, He/Ne y He/CO_2 son trazadores clásicos de componentes profundos o magmáticos, mientras que CO_2/CH_4 y CO_2/Ne permiten distinguir procesos de fraccionamiento y fuentes magmáticas frente a biogénicas. Estas razones resultaron altamente discriminantes para identificar poblaciones geoquímicas distintas en el área del Permiso de Investigación minera de Garehagua, ofreciendo una base sólida para futuras campañas geofísicas y perforaciones exploratorias.

Para superar las limitaciones inherentes del algoritmo K-Means clásico, se implementó el método GKMC (Genetic K-Means Clustering) (Krishna, K. Et al. 1999). Este enfoque híbrido integra la capacidad de búsqueda global de los Algoritmos Genéticos (GA) con la eficiencia de optimización local del algoritmo K-Means, dando lugar a un marco de agrupamiento más robusto y eficiente.

El método GKMC corrige varias de las debilidades fundamentales del K-Means estándar, entre ellas:

- Su sensibilidad a la inicialización, ya que K-Means depende de una selección aleatoria de centroides, lo que frecuentemente conduce a soluciones subóptimas atrapadas en mínimos locales;
- La asunción de que los clusters son esféricos y del mismo tamaño, una hipótesis poco adecuada para datos geoquímicos, que suelen presentar distribuciones anisotrópicas y heterogéneas;
- La necesidad de fijar a priori el número de clusters (K). Aunque GKMC también requiere definir K inicialmente, su proceso evolutivo permite explorar el espacio de soluciones de forma más completa, alcanzando particiones internas más coherentes.

Al combinar la exploración global de los algoritmos genéticos con la refinación local de K-Means, GKMC mejora notablemente la estabilidad de convergencia y reduce la sensibilidad frente al ruido, los valores atípicos y los patrones espaciales complejos, factores muy comunes en los datos geoquímicos de superficie utilizados para la exploración geotérmica.

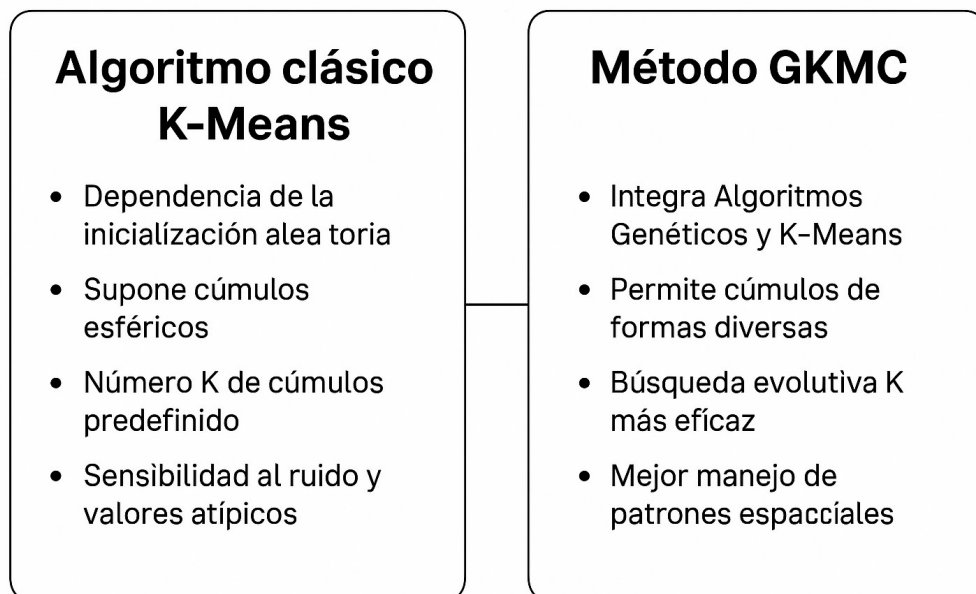


Figura 49. Esquema comparativo entre el algoritmo clásico K-Means y el enfoque híbrido Genetic K-Means Clustering (GKMC), destacando las mejoras del enfoque híbrido en términos de estabilidad, adaptabilidad y robustez para el análisis de datos geoquímicos complejos.

5.5.2 Algoritmo Genético de clustering K-Means (GKMC)

Con el objetivo de mejorar la identificación de anomalías geoquímicas en los estudios de gases del suelo, se adoptó el algoritmo **GKMC** como técnica multivariante central. A diferencia de los análisis univariantes, el clustering multivariable considera la variabilidad conjunta de múltiples

parámetros geoquímicos, lo que permite detectar anomalías coincidentes que pueden ser indicativas de actividad geotérmica potencial.

Se aplicó el enfoque GKMC propuesto por Ghezelbash et al. (2020), en el que cada solución de clustering se codifica como un cromosoma, que combina tanto la posición de los centroides como la asignación de los puntos a cada clúster. Mediante operaciones genéticas como cruce (crossover) y mutación, se exploran múltiples configuraciones de agrupamiento. La población inicial incluye soluciones generadas aleatoriamente y las mejores soluciones obtenidas con el algoritmo K-Means estándar.

El algoritmo genético se configuró con una población de 50 cromosomas por generación, ejecutándose durante 200 generaciones. La probabilidad de cruce se fijó en 0,8, y la probabilidad de mutación en 0,05.

A lo largo de ~200 generaciones, el algoritmo evolutivo mejora de forma iterativa la calidad del clustering, minimizando la varianza intra-clúster y penalizando aquellos agrupamientos con baja densidad de puntos, para evitar soluciones triviales o poco informativas.

Este refinamiento evolutivo permitió una mejora del orden del 5 % en el índice Silhouette respecto al K-Means clásico, y aumentó significativamente la robustez y reproducibilidad de los resultados finales. La mejor separación y cohesión interna entre clústers facilita una interpretación más fiable de los patrones de desgasificación del subsuelo y una delimitación más precisa de zonas objetivo con potencial geotérmico.

Todo el proceso se desarrolló de forma completamente automatizada e implementada en Python (versión 3.11.11), utilizando librerías de código abierto como numPy, pandas, scikit-learn y matplotlib, entre otras (Pedregosa, F. et al 2011). El flujo de trabajo produjo salidas estandarizadas, incluyendo etiquetas de clúster, centroides, valores del índice Silhouette y visualizaciones gráficas de la estructura y calidad del agrupamiento. Este enfoque basado en scripts garantiza una reproducibilidad completa, transparencia metodológica y escalabilidad, lo que lo hace idóneo tanto para aplicaciones repetidas como para su integración en flujos de trabajo geoespaciales más amplios.

El objetivo del clustering es minimizar la varianza intra-clúster, utilizando la misma función de optimización que el K-Means clásico:

$$J(P) = \sum_{K=1}^k \sum_{\vec{x}_i \in G_k(P)} \|\vec{x}_i - \vec{\mu}_k(P)\|^2$$

donde $\mathbf{P}$ es una partición candidata (cromosoma), μ_k representa el centroide del grupo G_k , y $\|\cdot\|$ es la norma euclídea en el espacio multivariable. Cada individuo (cromosoma) codifica una solución completa mediante la asignación de cada punto de datos $\mathbf{x}_i$ a un clúster específico, utilizando etiquetas enteras.

El algoritmo híbrido comienza con una población inicial de particiones generadas aleatoriamente. A lo largo de las generaciones, se aplican operadores genéticos (cruce y mutación), y cada solución descendiente se somete a una etapa de refinamiento local mediante una única iteración del algoritmo K-Means clásico, lo que acelera la convergencia hacia soluciones más estables. Tras un número definido de generaciones, el individuo con mejor desempeño se selecciona como la partición final.

En comparación con el K-Means estándar, el algoritmo GKMC presenta varias ventajas significativas. Es mucho menos sensible a la selección inicial de centroides, lo que mejora la consistencia y reproducibilidad de los resultados. Gracias a su naturaleza evolutiva, GKMC permite una exploración más amplia y eficaz del espacio de soluciones, reduciendo el riesgo de convergencia en mínimos locales subóptimos. Además, muestra una mayor capacidad para identificar agrupamientos no esféricos o de forma irregular, especialmente cuando se aplica en espacios de características transformadas o empleando métricas de distancia adaptadas, una propiedad especialmente relevante para conjuntos de datos geoquímicos complejos y anisotrópicos.

Etapas del algoritmo GKMC:

1. **Inicialización de la población:** Se genera una población inicial de soluciones (cromosomas), cada una representando una partición candidata del conjunto de datos (centroides + asignaciones de puntos).
2. **Evaluación de aptitud:** Se calcula la función de coste (fitness) para cada cromosoma, basada en la varianza intra-clúster (idéntica a la función objetivo de K-Means) y, opcionalmente, con penalizaciones a clusters vacíos o desequilibrados.
3. **Selección:** Se eligen los mejores individuos (soluciones) de la población actual en función de su desempeño (fitness) para participar en la reproducción.
4. **Cruce (crossover):** Se combinan pares de cromosomas seleccionados para generar nuevas soluciones (descendientes), intercambiando centroides y/o asignaciones de puntos.
5. **Mutación:** Se introduce aleatoriamente una alteración menor en algunos cromosomas (por ejemplo, reasignación puntual de un dato a otro clúster), fomentando la exploración del espacio de soluciones.
6. **Refinamiento local:** Cada nuevo individuo generado pasa por una única iteración de K-Means, ajustando los centroides según las asignaciones para mejorar rápidamente su calidad.
7. **Actualización de la población:** Se seleccionan los mejores individuos entre “padres” e “hijos” para conformar la nueva generación.

8. **Criterio de parada:** Se repite el proceso durante N generaciones (fijas o hasta convergencia), y se selecciona como solución final el cromosoma con mejor puntuación de fitness (menor J o mayor Silhouette).

Este enfoque híbrido resulta particularmente eficaz en el contexto del análisis de datos geoquímicos, en los que las variables suelen presentar relaciones no lineales y comportamientos multipoblacionales. En el presente estudio, el uso de GKMC mejoró notablemente la robustez, la interpretabilidad y la resolución de los resultados de agrupamiento, permitiendo distinguir con mayor claridad entre regímenes geoquímicos de fondo, transicionales y anómalos a lo largo del área de estudio.

Dado que los datos de gases del suelo se recogieron en distintos periodos temporales, se realizó un análisis de clustering por separado para cada zona. Se calcularon los índices Silhouette para cada subconjunto y se agregaron para seleccionar la combinación de variables más representativa. El conjunto final de variables se eligió en función del mayor índice Silhouette acumulado entre todas las zonas, asegurando así una clasificación geoquímica lo más coherente e informativa posible para las áreas de Garehagua y Garehagua II.

Para evaluar la estabilidad y reproducibilidad del algoritmo GKMC, se llevaron a cabo 10 ejecuciones independientes utilizando semillas aleatorias distintas. La variación del índice Silhouette entre ejecuciones fue inferior al 2 %, lo que indica un alto grado de consistencia en los resultados de agrupamiento obtenidos.

Asimismo, para valorar el desempeño del clustering según distintas combinaciones de variables, se realizó una evaluación sistemática mediante el algoritmo GKMC. La Figura 50 muestra las 10 combinaciones de parámetros mejor clasificadas en función del índice Silhouette, destacando aquellas que produjeron los agrupamientos más coherentes y mejor separados. Las combinaciones que superan el umbral de referencia de 0,70 (línea discontinua roja) se consideran altamente informativas, ya que generan agrupamientos con alta cohesión interna y buena separación entre clusters.

Entre las combinaciones más destacadas se encuentran aquellas que incluyen gases reactivos (como H_2 y CH_4), trazadores profundos (como He y ^{222}Rn), y parámetros funcionales como el flujo difuso de CO_2 y la razón isotópica $\delta^{13}C/^{12}C$. Estos resultados respaldan la utilidad del enfoque multivariable en la clasificación geoquímica de gases del suelo, permitiendo priorizar combinaciones que reflejan mejor la estructura y origen de los procesos de desgasificación.

Perfecto, aquí tienes un párrafo adicional que complementa el texto y ayuda a cerrar la página con coherencia:

Además, la repetibilidad del modelo y la consistencia de los resultados permiten establecer una base sólida para su aplicación en futuras campañas exploratorias. La identificación de combinaciones de variables óptimas no solo mejora la capacidad discriminativa del análisis, sino

que también orienta la selección de parámetros clave en futuros muestreos, optimizando recursos analíticos y fortaleciendo la capacidad predictiva del sistema de clasificación geogeoquímica propuesto.

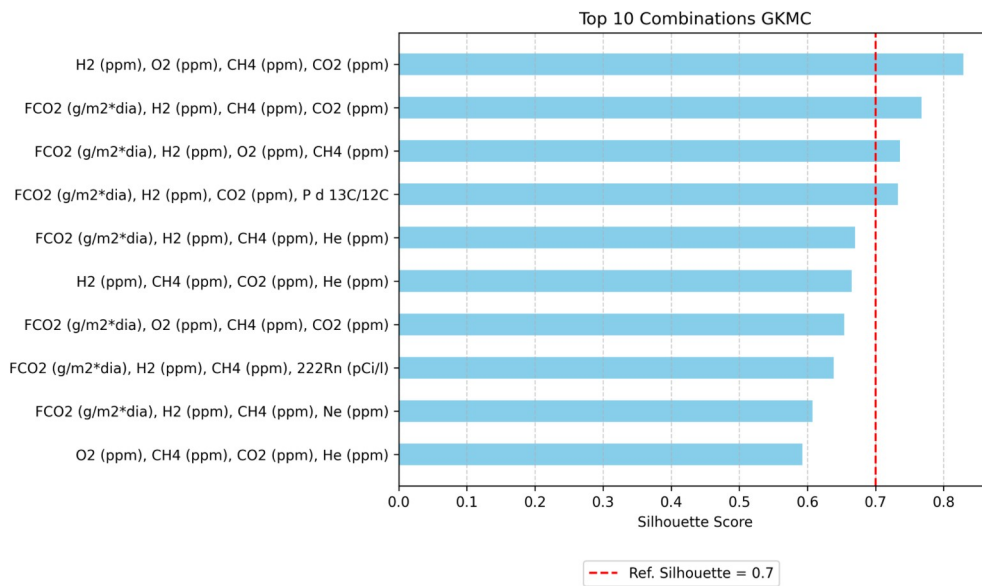


Figura 50. Combinaciones de variables geoquímicas mejor clasificadas mediante el algoritmo GKMC, ordenadas según su índice Silhouette. Cada barra representa la calidad del agrupamiento para un conjunto específico de parámetros, siendo los valores más altos indicativos de clusters más definidos y mejor separados. La línea roja discontinua marca el umbral de referencia de 0,70, utilizado para resaltar configuraciones de alto rendimiento en la clasificación geoquímica de gases del suelo.

5.5.3 Evolución de la Función Fitness en GKMC

El gráfico de evolución de la función de aptitud (Fitness Function Evolution) ilustra cómo mejora la calidad del clustering a lo largo de las generaciones sucesivas en el algoritmo GKMC (Gad, A.F. et al 2024). Esta visualización permite comprender el comportamiento de convergencia del algoritmo, mostrando cómo la integración entre la búsqueda global (mediante operaciones genéticas) y el refinamiento local (iteraciones de K-Means) conduce a soluciones de agrupamiento progresivamente mejores.

En el gráfico, el eje X representa el número de generaciones (iteraciones del algoritmo genético), mientras que el eje Y muestra el valor de la función de aptitud correspondiente al mejor individuo (partición) de cada generación.

En esta implementación, la función de aptitud se define como:

$$\text{Fitness} = J(P) + \lambda \times \text{Penalización}$$

Donde $J(P)$ representa la cohesión o varianza intra-clúster, medida como la suma de las distancias euclídeas al cuadrado entre cada punto y su centroide correspondiente. Este cálculo se realiza en un espacio reducido mediante Análisis de Componentes Principales (PCA) con el fin de mejorar el rendimiento y minimizar el efecto del ruido. Valores bajos de $J(P)$ indican clusters más compactos y homogéneos.

El segundo término, la **penalización (Penalty)**, actúa como **factor correctivo** para evitar la formación de clusters triviales o estadísticamente poco representativos. Esta penalización se define como:

$$Penalty = \sum_{k=1}^K \left(\left(\frac{N_{min}}{|C_k|} \right)^\alpha \right) \cdot \delta_k$$

Con:

$$\delta_k = \begin{cases} 1 & \text{si } |C_k| < N_{min} \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

donde:

- $|C_k|$: número de muestras en el clúster k.
- N_{min} : tamaño mínimo aceptable del clúster.
- α : exponente de penalización, normalmente con valores entre 2 y 3.
- λ : factor de ponderación que controla el impacto de la penalización dentro de la función de aptitud total.

Esta función de aptitud híbrida garantiza que el algoritmo no solo busque clusters compactos, sino que también evite el sobreajuste y la aparición de clusters estadísticamente irrelevantes formados por unos pocos puntos aislados. A medida que avanzan las generaciones, el equilibrio entre estos dos términos impulsa a la población de soluciones hacia particiones más estables y geológicamente coherentes.

El comportamiento típico de la curva de aptitud en el algoritmo GKMC puede dividirse en tres fases principales:

1. Fase inicial: Durante las primeras generaciones, las soluciones generadas aleatoriamente presentan alta variabilidad y estructuras de agrupamiento mal definidas. El valor de la función de aptitud suele ser bajo o incluso negativo, debido a las penalizaciones asociadas a clusters pequeños, desbalanceados o estadísticamente insignificantes. Esta fase refleja el esfuerzo del algoritmo por desalentar configuraciones inestables desde el comienzo.
2. Fase de mejora: En esta etapa, la combinación entre los operadores genéticos (selección, cruce y mutación) y el refinamiento local mediante K-Means impulsa una mejora rápida de la calidad del agrupamiento. La cohesión interna entre los puntos aumenta, el término de penalización disminuye y, en general, el índice Silhouette se incrementa, reflejando una mejor separación y compactación de los clusters.

3. Fase de convergencia: Finalmente, las mejoras comienzan a estabilizarse, y la curva de fitness se aplana, indicando que el algoritmo ha alcanzado una partición óptima o cuasi-óptima dentro del espacio de soluciones explorado.

En el contexto de la exploración geoquímica, los clusters con muy pocos miembros suelen considerarse artefactos numéricos o ruido, más que poblaciones geológicas significativas. Por ello, garantizar que cada grupo contenga un número suficiente de observaciones es fundamental para mantener la robustez estadística y la interpretabilidad de los resultados.

El término de penalización en la función de aptitud desempeña un papel crucial en la prevención del sobreajuste, especialmente en situaciones en las que un número elevado de clusters puede conducir a una segmentación excesiva y a la detección de estructuras espurias. Este mecanismo actúa como un filtro estructural, asegurando que el agrupamiento final refleje patrones geoquímicos genuinos y no artefactos derivados del proceso de optimización.

Es importante destacar que, a diferencia de métricas normalizadas de clustering como el índice Silhouette (cuyo rango oscila entre -1 y 1), la función de aptitud utilizada en este estudio representa una medida acumulada de la varianza intra-clúster $J(P)$, y puede alcanzar valores del orden de miles. Esto es especialmente común cuando se trabaja en espacios proyectados de características como el PCA o cuando se utilizan variables sin normalizar.

No obstante, esta formulación resulta particularmente adecuada para aplicaciones geoquímicas, donde el objetivo principal es obtener agrupamientos compactos y estadísticamente consistentes, evitando al mismo tiempo la formación de grupos residuales con escaso significado geológico.

El proceso de optimización del algoritmo Genetic K-Means Clustering (GKMC) fue monitorizado mediante el seguimiento de la evolución de la función de aptitud a lo largo de las generaciones. Tal como se muestra en la Figura 51, el valor de la función fitness disminuye progresivamente a lo largo de las 200 generaciones, lo que indica una convergencia sostenida hacia una configuración de agrupamiento más óptima dentro del espacio reducido por PCA.

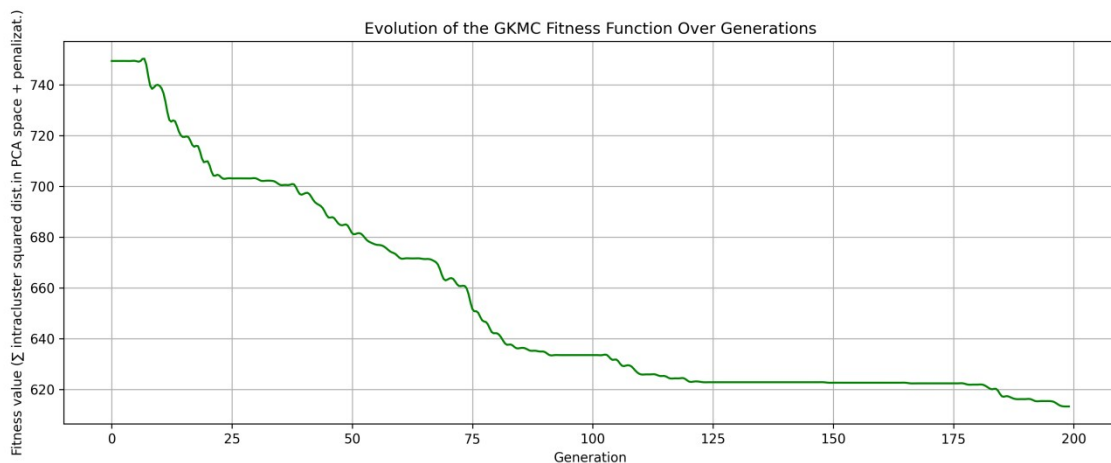


Figura 51. Evolución de la función de aptitud (fitness) del algoritmo GKMC a lo largo de 200 generaciones. El valor de fitness representa la suma de las distancias euclídeas al cuadrado entre cada punto y el centroide de su

clúster correspondiente, calculada en el espacio reducido bidimensional mediante Análisis de Componentes Principales (PC1 y PC2). Estos valores adimensionales integran tanto la compactación intra-clúster como un término de penalización aplicado a soluciones subóptimas. La disminución progresiva del valor de fitness refleja la convergencia del algoritmo genético hacia configuraciones de agrupamiento más óptimas.

La Figura 52 presenta un diagrama de flujo integral que ilustra el enfoque metodológico para el clustering multivariable y la interpretación de datos de gases del suelo. Este marco de trabajo integra técnicas clásicas de análisis geoquímico con algoritmos avanzados de aprendizaje automático, con el objetivo de optimizar la detección de anomalías geotérmicas en terrenos volcánicos complejos.

El diagrama muestra cómo las herramientas tradicionales de visualización geoquímica (como los diagramas binarios y los gráficos de probabilidad) se combinan con métodos de machine learning para aportar múltiples líneas de evidencia en la interpretación final. Este enfoque multidisciplinar culmina con la comparación de los resultados del clustering con conjuntos de datos independientes, incluyendo estudios magnetotélúricos y mapas de geología estructural, lo que garantiza que los dominios geoquímicos identificados sean coherentes desde el punto de vista geológico y no meros artefactos estadísticos.

Al formalizar este flujo de trabajo, se establece una metodología reproducible que transforma conjuntos de datos geoquímicos multivariados complejos en información útil para la exploración geotérmica, equilibrando el rigor estadístico con la interpretabilidad geológica.

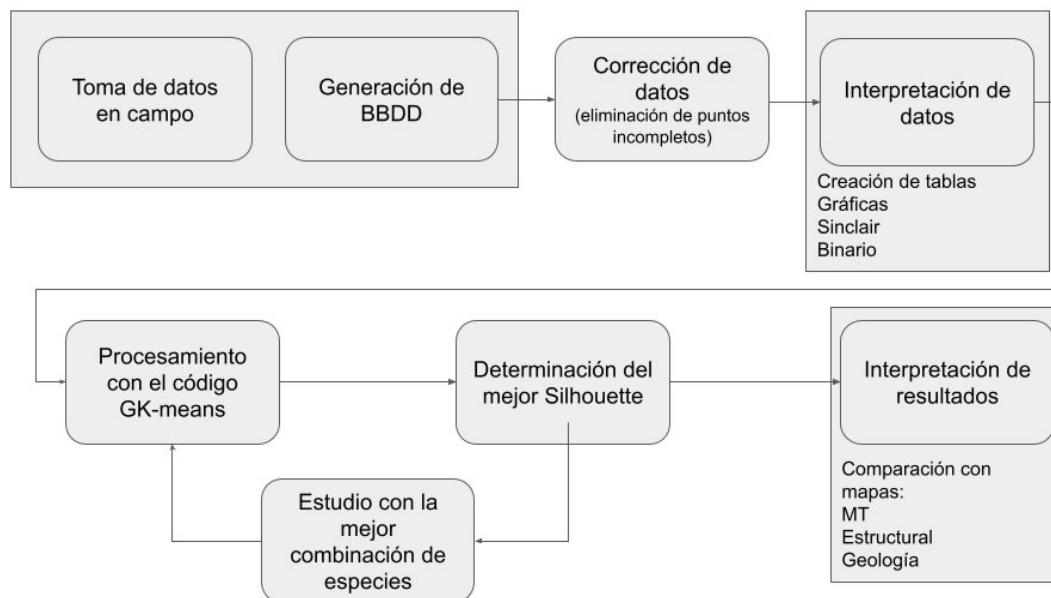


Figura 52. Diagrama de flujo para el clustering multivariable y la interpretación de datos de gases del suelo. El proceso comienza con la recolección de datos en campo y la generación de la base de datos, seguido de la corrección de datos e interpretación geoquímica inicial mediante herramientas clásicas (por ejemplo, tablas, gráficos de Sinclair y diagramas binarios). A continuación, se selecciona iterativamente un subconjunto de especies gaseosas que se procesan con el algoritmo GKMC. Se retiene la combinación que arroja el índice Silhouette más alto. Finalmente, los resultados se interpretan mediante análisis espacial y comparación cruzada con datos

magnetotelúricos (MT) y mapas de geología estructural, con el objetivo de identificar anomalías geotérmicas ocultas.

5.5.4 Selección de Variables y Fundamentación Metodológica

En una fase exploratoria inicial, se evaluaron múltiples combinaciones de variables geoquímicas utilizando el índice Silhouette como métrica para medir la calidad del clustering. La combinación formada por H₂, O₂, CH₄ y CO₂ arrojó el valor Silhouette de 0,42, lo que sugería una separación estadísticamente óptima entre agrupamientos.

Sin embargo, una evaluación crítica del comportamiento geoquímico y del origen de estos parámetros llevó a descartar dicho conjunto de variables para el modelo final de clustering. Los motivos fueron los siguientes:

- CH₄ (metano) se encontró de forma recurrente cerca de los límites de detección (~0,7 ppm) en todo el conjunto de datos, lo que indica una baja variabilidad espacial o geoquímica. Su origen potencialmente biogénico o antropogénico y sus concentraciones reducidas limitan su utilidad como trazador de procesos magmáticos o geotérmicos.
- O₂ (oxígeno) es de origen principalmente atmosférico. Su presencia en los gases del suelo está controlada por procesos superficiales como el intercambio suelo-atmósfera o la actividad microbiana, lo cual le resta valor diagnóstico para identificar anomalías profundas.
- H₂, aunque ocasionalmente se utiliza como indicador redox en entornos geotérmicos, es un gas altamente reactivo y está sujeto a reacciones de oxidación-reducción en los primeros metros del subsuelo. Esta reactividad puede enmascarar señales provenientes de fuentes profundas, especialmente en suelos con hidrología compleja o cobertura vegetal densa.

Ante estas limitaciones, el clustering final se realizó utilizando un subconjunto de variables con mayor relevancia geoquímica en el contexto de sistemas magmático-hidrotermales: flujo de CO₂, concentración de He, actividad de ²²²Rn y la composición isotópica del carbono en CO₂ (δ¹³C–CO₂). La selección de estas variables se justifica por las siguientes razones:

- CO₂ es un componente mayoritario en gases volcánicos e hidrotermales, y debido a su alta movilidad, puede atravesar grandes profundidades.
- He es un trazador clásico de aportes magmáticos, especialmente cuando sus concentraciones superan el valor atmosférico (~5,24 ppm).
- ²²²Rn actúa como indicador indirecto de permeabilidad subsuperficial y presencia de sistemas de fracturas que favorecen la migración vertical de gases.
- δ¹³C–CO₂ permite diferenciar entre fuentes de carbono biogénico y magmático, siendo los valores más enriquecidos (más cercanos a 0‰) característicos de un origen profundo.

Esta selección revisada prioriza la interpretabilidad geológica y la especificidad geoquímica frente a la mera optimización estadística, y subraya la importancia del conocimiento del dominio en el diseño de análisis multivariantes aplicados a la exploración geotérmica.

5.5.5 Resultados y Estructura del Clustering

Utilizando el algoritmo GKMC con el conjunto refinado de variables geoquímicas, el conjunto de datos fue particionado en tres clústeres distintos, visualizados en el espacio reducido de componentes principales (PCA). Cada punto representa una ubicación de muestreo, codificado por color según su pertenencia al clúster correspondiente, y los centroides están marcados con símbolos “X”.

- Clúster 0 (Rojo): Este grupo representa una pequeña fracción del conjunto de datos (~5 %), pero se caracteriza por la co-ocurrencia de flujos elevados de CO₂, concentraciones enriquecidas de helio (≥ 15 ppm), valores altos de $\delta^{13}\text{C}$ (hasta -6‰) y actividad significativa de ^{222}Rn . Estas firmas geoquímicas sugieren fuertemente una contribución magmático-hidrotermal, asociada a permeabilidad vertical elevada a lo largo de zonas de falla o redes de fracturas profundas. Este clúster se interpreta como la principal expresión geoquímica de zonas potenciales de ascenso geotérmico.
- Clúster 1 (Naranja): Representa aproximadamente un 10 % de las muestras y presenta valores intermedios en todos los parámetros clave—por ejemplo, flujos de CO₂ en torno a $50 \text{ g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{d}^{-1}$, valores de $\delta^{13}\text{C}$ cercanos a -10‰ y un ligero enriquecimiento en He (~7 ppm). Estas ubicaciones se interpretan como zonas transicionales o halos que rodean centros de desgasificación más activos, reflejando áreas con fuentes de gas mixtas o condiciones de permeabilidad moderada.
- Clúster 2 (Gris oscuro): Corresponde a la población geoquímica de fondo (~85 % de los datos). Se caracteriza por bajo flujo de CO₂, concentraciones de He cercanas a los niveles atmosféricos (~5,2 ppm), baja actividad de ^{222}Rn y valores de $\delta^{13}\text{C}$ en torno a -25‰ . Estas firmas son consistentes con una composición de gases del suelo dominada por la actividad biológica, mezcla con aire atmosférico y entrada reducida de gases del subsuelo. La distribución espacial de este clúster abarca la mayor parte del área de estudio, especialmente las zonas sin rasgos estructurales relevantes.

5.5.6 Estabilidad y Robustez del Clustering mediante GKMC

Para evaluar la robustez del algoritmo GKMC bajo condiciones estocásticas, se realizaron 10 ejecuciones independientes para cada subconjunto principal de datos: el conjunto combinado completo, el dominio minero de Garehagua y el de Garehagua II. En cada ejecución se utilizaron diferentes semillas aleatorias, aplicando siempre un preprocesamiento consistente

(transformación logarítmica en base 10, normalización tipo z-score y reducción de dimensiones mediante PCA).

El Análisis PCA, es una técnica estadística de reducción de dimensionalidad que permite simplificar conjuntos de datos multivariantes conservando la mayor parte de su variabilidad original. Su objetivo es transformar un conjunto de variables posiblemente correlacionadas en un nuevo sistema de coordenadas formado por variables no correlacionadas llamadas componentes principales, ordenadas según la proporción de varianza explicada.

En el contexto del presente estudio, se aplicó PCA sobre el conjunto de datos geoquímicos previamente normalizado (transformación logarítmica y *z-score*) para reducir la complejidad del espacio multivariable y facilitar la visualización bidimensional de los resultados del algoritmo GKMC.

Este espacio reducido, definido por los dos primeros componentes principales (PC1 y PC2), permite representar gráficamente cada punto de muestreo de gas del suelo como una proyección de sus características geoquímicas combinadas. Al codificar los puntos por color según su pertenencia a los clústeres obtenidos mediante GKMC, se puede observar la separación relativa entre grupos, reflejando diferencias en la composición geoquímica, la cohesión interna de cada clúster, es decir, cuán compactos o dispersos están sus elementos y la estructura general del sistema multivariado, revelando patrones que no son fácilmente identificables en el espacio original de alta dimensión.

El PCA no influye en la asignación de clústeres, pero proporciona una herramienta fundamental para evaluar visualmente la calidad del agrupamiento y para interpretar de forma intuitiva los resultados multivariantes en términos de las relaciones entre las variables originales.

La Figura 53 presenta un análisis comparativo del rendimiento del clustering a través de boxplots del índice Silhouette y de los valores de la función de fitness, destacando la estabilidad y calidad de las agrupaciones obtenidas en las distintas configuraciones evaluadas.

El subconjunto de Garehagua mostró la mayor coherencia y estabilidad en los agrupamientos, con un índice Silhouette medio de $0,418 \pm 0,085$ y un valor medio de fitness de $1321,4 \pm 476,2$. En contraste, las ejecuciones sobre el conjunto combinado completo arrojaron resultados ligeramente inferiores pero aún aceptables.

Es importante destacar que el análisis por subconjuntos evitó la inflación artificial de los índices de separación entre clusters, un artefacto frecuente cuando se combinan campañas muestreadas en condiciones distintas. Esta estrategia analítica actuó como una validación complementaria de la fiabilidad del algoritmo GKMC, lo cual respalda la robustez de los agrupamientos integrados presentados en el apartado 4.

El clustering optimizado alcanzó un índice Silhouette moderado de 0,42, que, aunque no especialmente alto, es aceptable considerando la heterogeneidad inherente y el ruido característico de los conjuntos de datos de gases del suelo en ambientes volcánicos. Este

resultado pone de manifiesto tanto la utilidad como las limitaciones del enfoque GKMC: a pesar de los límites difusos entre clusters, el método logró capturar estructuras geoquímicas significativas que serían difíciles de identificar mediante métodos univariantes o basados únicamente en umbrales estadísticos.

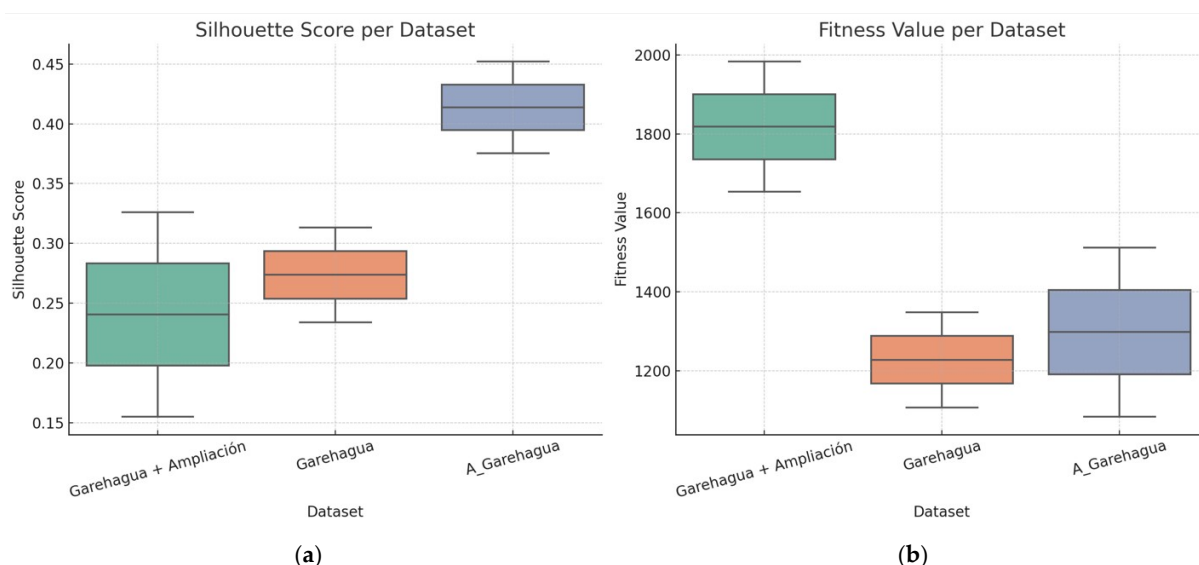


Figura 53. Comparación de la estabilidad del clustering entre distintos conjuntos de datos. Los diagramas de caja resumen los resultados de 10 ejecuciones independientes del algoritmo GKMC para cada conjunto analizado: (a) los índices Silhouette reflejan la cohesión interna y la separación entre clústeres; (b) los valores de la función de fitness representan la suma de las distancias euclidianas al cuadrado dentro de los clústeres en el espacio reducido por PCA. El subconjunto Garehagua II mostró los valores más altos y consistentes del índice Silhouette, mientras que el conjunto combinado Garehagua + II presentó mayor variabilidad, atribuida a la heterogeneidad y a efectos derivados de campañas cruzadas. Estos resultados confirman la robustez del método GKMC en distintos subconjuntos espaciales y temporales.

Para explorar las relaciones internas entre variables geoquímicas clave, se realizó un análisis matricial de dispersión utilizando valores log-transformados y normalizados. La Figura 54 muestra las correlaciones por pares entre las concentraciones de ^{222}Rn , CO_2 y He, con los puntos codificados por color según la clasificación de clústeres determinada por el algoritmo GKMC. Las gráficas de densidad de kernel en la diagonal ilustran distribuciones distintas para cada clúster. En particular, los Clusters 1 y 2 presentan perfiles más amplios o desplazados, lo que sugiere posibles contribuciones de gases de origen profundo y firmas geoquímicas diferenciadas respecto al fondo.

Estos resultados refuerzan la capacidad del análisis multivariable para detectar patrones latentes de origen geológico, incluso en contextos donde las señales individuales pueden ser ambiguas o superpuestas. La visualización conjunta de correlaciones y agrupamientos permite interpretar las relaciones entre parámetros desde una perspectiva integradora, facilitando la identificación de combinaciones de gases que actúan como trazadores efectivos de procesos hidrotermales. Este enfoque constituye una herramienta clave para delimitar zonas prioritarias en la exploración geotérmica superficial.

Scatter Matrix Log Zscore Top10

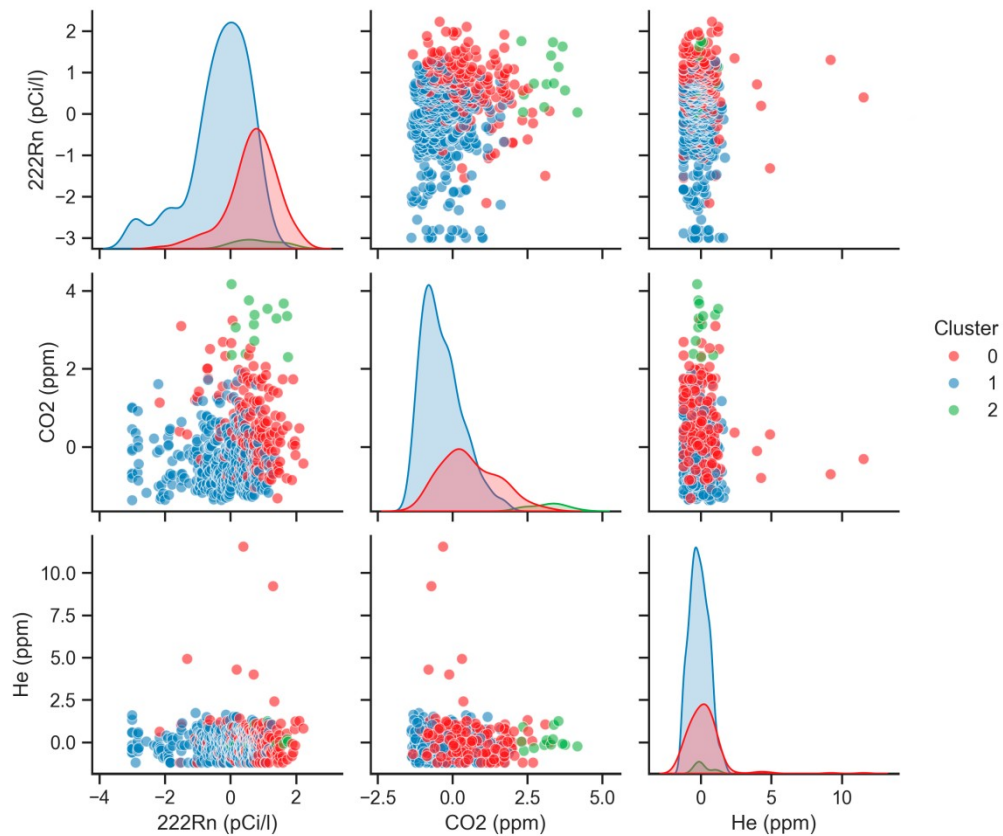


Figura 54. Matriz de dispersión que muestra las correlaciones por pares entre ^{222}Rn (pCi/l), CO_2 (ppm) y He (ppm), basada en valores log-transformados y normalizados mediante z-score. Los puntos están codificados por color según la clasificación de clústeres obtenida mediante el algoritmo GKMC, a partir de muestras de gases del suelo recolectadas en el área del permiso de investigación de Garehagua. Las gráficas de densidad de kernel a lo largo de la diagonal ilustran la distribución de cada parámetro dentro de los clústeres. Los Clústeres 1 y 2 muestran comportamientos geoquímicos anómalos que podrían estar asociados a emisiones de gases de origen profundo.

Para caracterizar con mayor precisión el comportamiento geoquímico de los gases del suelo dentro de cada clúster, se analizaron las distribuciones de los parámetros seleccionados. La Figura 55 muestra histogramas de las concentraciones normalizadas ($\log_{10} + \text{z-score}$) de helio (He), dióxido de carbono (CO_2) y radón (^{222}Rn) correspondientes al área de estudio del dominio minero de Garehagua.

Estas visualizaciones permiten observar claramente las diferencias en la distribución de cada gas entre los tres clústeres definidos por el algoritmo GKMC. El Clúster 1 (naranja) concentra la mayor parte de las muestras con valores normalizados cercanos a cero, lo que sugiere una composición geoquímica de fondo o transicional, dominada por procesos atmosféricos y biogénicos. En cambio, los Clústeres 0 y 2 presentan distribuciones más desplazadas o dispersas, indicando comportamientos anómalos más marcados, especialmente en los casos del He y el CO_2 .

En el caso del helio, el Clúster 0 (azul) agrupa los valores más elevados, incluso con colas de distribución que alcanzan más de 10 unidades normalizadas, lo que sugiere una señal significativa de aportación profunda de gases magmáticos. Este patrón también es evidente en CO₂, donde el mismo clúster exhibe una concentración desplazada hacia valores anómalos, reforzando la interpretación de una fuente común profunda. En cuanto al radón, aunque el solapamiento entre clústeres es mayor, se mantiene una clara distinción entre la población dominante del Clúster 1 y la distribución más ancha del Clúster 0, que se extiende hacia valores más altos.

Este análisis gráfico contribuye a validar la estructura del clustering, al demostrar que los clústeres no solo se distinguen por su separación estadística en el espacio PCA, sino también por sus perfiles geoquímicos específicos, lo cual fortalece la interpretación geológica de los agrupamientos obtenidos. Así, los patrones visualizados en los histogramas confirman que los clústeres anómalos están asociados a regímenes de degasificación profunda con firmas geoquímicas coherentes y diferenciadas.

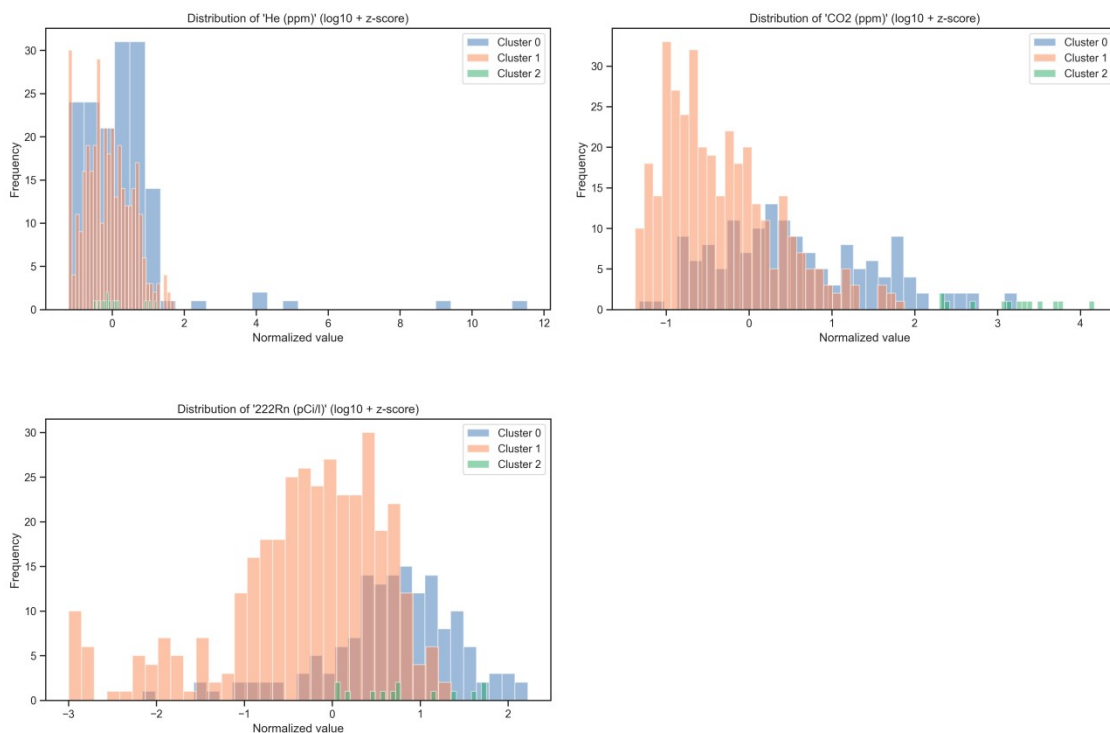


Figura 55. Histogramas que muestran las distribuciones normalizadas ($\log_{10} + z\text{-score}$) de las concentraciones de helio (He), dióxido de carbono (CO₂) y radón (²²²Rn) en muestras de gases del suelo del área de estudio de Garehagua. Los colores representan los clústeres identificados mediante el algoritmo GKMC. El Clúster 1 (naranja) presenta valores de alta frecuencia centrados en niveles de fondo, mientras que los Clústeres 0 (azul) y 2 (verde) muestran distribuciones más dispersas y anómalas, especialmente en los casos de He y CO₂, lo que sugiere posibles emisiones de gases de origen profundo controladas estructuralmente.

5.5.7 Visualización de la Estructura del Clustering mediante PCA

Con el fin de representar gráficamente la separación y estructura de los clústeres generados por el algoritmo GKMC, se realizó una proyección mediante Análisis de Componentes Principales (PCA). La Figura 56 muestra la distribución de las muestras de gases del suelo en el espacio bidimensional definido por los primeros dos componentes principales (PC1 y PC2). Los datos fueron transformados logarítmicamente, normalizados y proyectados sobre este espacio, entrenando el modelo con un conjunto de variables geoquímicamente significativas: CO₂, He, ²²²Rn y la razón isotópica $\delta^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$.

La representación evidencia una separación clara entre clústeres, reforzando la coherencia interna de los grupos definidos por el algoritmo. El Clúster 0 (rojo) agrupa las muestras más anómalas, con firmas características de desgasificación magmático-hidrotermal activa, incluyendo flujos elevados de CO₂, enriquecimiento en helio, valores enriquecidos de $\delta^{13}\text{C}$ y alta actividad de radón. El Clúster 1 (naranja) agrupa muestras de valores intermedios, que se interpretan como zonas transicionales o halos periféricos, mientras que el Clúster 2 (gris oscuro) contiene la mayoría de los puntos, representando condiciones geoquímicas de fondo biogénico y atmosférico.

Esta visualización apoya la interpretación geoquímica de los clústeres, validando tanto la robustez estadística del clustering como su significado geológico.

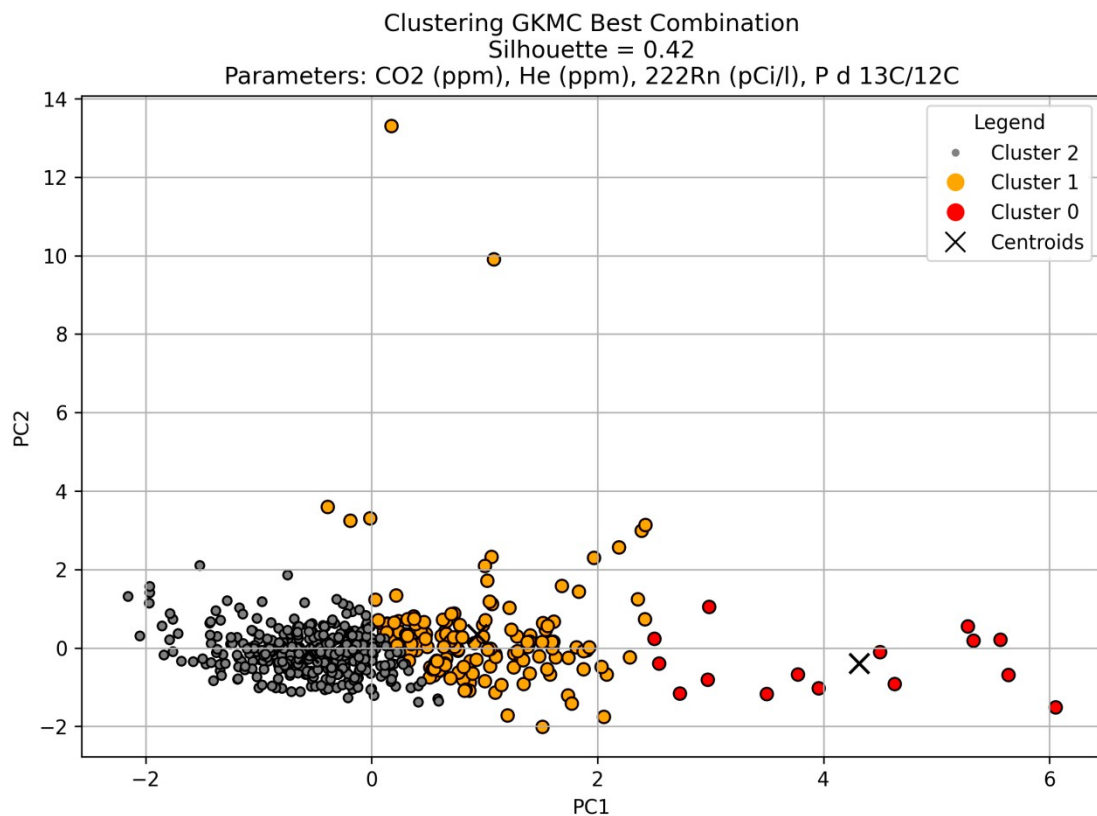


Figura 56. Proyección del Análisis de Componentes Principales (PCA) de los resultados optimizados del clustering mediante el algoritmo GKMC. El modelo fue entrenado con un conjunto de variables seleccionadas: CO₂, He, ²²²Rn

y la razón isotópica $\delta^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$. Cada punto representa una muestra de gas del suelo del área del permiso de investigación de Garehagua, codificado por color según el clúster asignado. Los centroides de cada clúster están marcados con el símbolo “X”. El Clúster 0 (rojo) agrupa muestras con alto flujo de CO_2 , enriquecimiento en He, valores elevados de $\delta^{13}\text{C}$ y anomalías de ^{222}Rn , coherentes con desgasificación magmático-hidrotermal. El Clúster 1 (naranja) incluye muestras con valores intermedios, indicando zonas transicionales o halos periféricos. El Clúster 2 (gris oscuro) engloba la mayoría de las muestras con niveles cercanos al fondo, típicos de una influencia biogénica y atmosférica.

El análisis de clustering realizado con el conjunto de variables CO_2 (ppm), H_2/Ne , He/CO_2 y CO_2/Ne permitió obtener una separación más nítida entre poblaciones geoquímicas, con un índice de Silhouette de 0.63, notablemente superior al de combinaciones previas. Esta configuración no solo mejora la compactación interna de los clústeres, sino que ofrece una lectura geoquímicamente coherente.

- CO_2 actúa como gas trazador dominante en procesos volcánicos e hidrotermales; su presencia en concentraciones elevadas se asocia a migración desde fuentes profundas.
- El cociente H_2/Ne tiene valor como indicador redox, donde el H_2 , al ser reactivo, puede señalar zonas de reducción activa; el neón, de origen atmosférico, aporta una referencia estable.
- La razón He/CO_2 es útil para discriminar entre señales puramente magmáticas (alto He relativo al CO_2) y aquellas influenciadas por fuentes superficiales.
- Finalmente, CO_2/Ne es un buen indicador del grado de fraccionamiento o mezcla con componentes atmosféricos, dada la inercia geoquímica del Ne.

En el espacio PCA resultante (Figura 57), los clústeres se distribuyen con buena separación a lo largo de los componentes principales, reflejando gradientes geoquímicos distintos. El Clúster 0 (rojo) ocupa un extremo del eje PC1 y se asocia a valores elevados de CO_2 y He/CO_2 , interpretándose como firmas de emisión profunda estructuralmente canalizada. El Clúster 1 (naranja) ocupa una posición intermedia, probablemente reflejando condiciones mixtas o zonas de halo de desgasificación. Por su parte, el Clúster 2 (gris oscuro) agrupa la mayoría de las muestras con valores bajos y cocientes cercanos al equilibrio atmosférico, característicos del fondo biogénico y difuso.

Esta segmentación, apoyada tanto en métricas de cohesión como en interpretaciones geoquímicas, permite establecer un marco robusto para la diferenciación de zonas activas frente a áreas de fondo. Además, la coherencia entre la separación en el espacio PCA y la lógica geoquímica de los cocientes utilizados respalda la validez del modelo, consolidando esta combinación de variables como una de las más efectivas para la caracterización superficial de sistemas geotérmicos en ambientes volcánicos complejos como el de Tenerife.

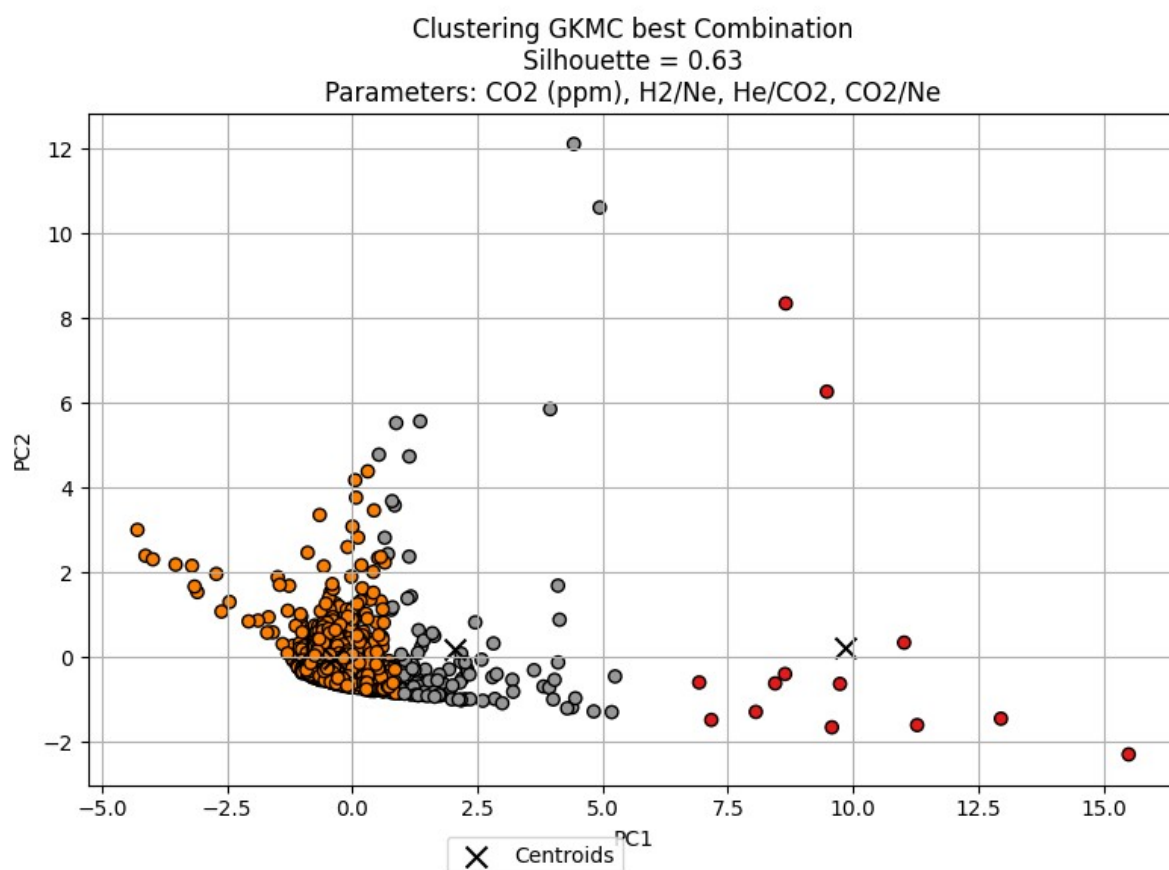


Figura 57. Proyección PCA de los resultados del clustering optimizado mediante el algoritmo GKMC, utilizando la combinación de variables: CO₂ (ppm), H₂/Ne, He/CO₂ y CO₂/Ne. Cada punto representa una muestra de gas del suelo codificada por su pertenencia al clúster, y los centroides están marcados con una “X”. El valor de Silhouette Score = 0.63 indica una separación estadísticamente robusta entre clústeres, lo que sugiere diferencias geoquímicas significativas en el origen o en las condiciones de migración de los gases.

Clúster	Color	Geoquímica dominante	Interpretación geológica	Proporción estimada (%)
Clúster 0	Rojo	CO ₂ elevado, He enriquecido (≥ 15 ppm), $\delta^{13}\text{C}$ elevado ($\sim -6\text{‰}$), Rn alto	Zonas de ascenso magmático-hidrotermal, alta permeabilidad estructural	5
Clúster 1	Naranja	Valores intermedios: CO ₂ ~ 50 g·m ⁻² ·d ⁻¹ , He ~ 7 ppm, $\delta^{13}\text{C}$ $\sim -10\text{‰}$	Zonas transicionales o halos periféricos de desgasificación	10
Clúster 2	Gris	CO ₂ bajo, He atmosférico (~ 5.2 ppm), Rn bajo, $\delta^{13}\text{C}$ biogénico ($\sim -25\text{‰}$)	Fondo geoquímico: mezcla atmosférica y actividad biológica	85

Tabla 9. Resumen comparativo de los tres clústeres geoquímicos identificados mediante el algoritmo GKMC en el área de estudio de Garehagua. Se detallan sus características dominantes en términos de parámetros geoquímicos, interpretación geológica y proporción relativa dentro del conjunto total de muestras. Esta clasificación permite diferenciar entre zonas de desgasificación profunda, dominios transicionales y el fondo geoquímico regional.

Para evaluar la coherencia espacial de los resultados del clustering y su significado geológico, se proyectó la clasificación de los 1.200 puntos de muestreo de gases del suelo sobre el mapa

topográfico del área de estudio que comprende los dominios mineros de Garehagua y Garehagua II. La Figura 58 muestra la distribución espacial de los clústeres definidos a partir de los parámetros geoquímicos más informativos: CO₂, He, ²²²Rn y δ¹³C–CO₂.

Los clústeres revelan un patrón geográfico claramente estructurado. El Clúster 0 (rojo) corresponde a señales geoquímicas anómalas y se concentra preferentemente a lo largo de alineaciones estructurales reconocidas, como fallas y fisuras eruptivas, lo que sugiere zonas con permeabilidad vertical aumentada y potencial ascenso de fluidos profundos. Estos sectores representan las principales áreas candidatas a procesos de desgasificación magmático-hidrotermal activa.

El Clúster 1 (naranja) delimita zonas con firmas geoquímicas transicionales, que podrían interpretarse como halos de mezcla entre gases de origen profundo y componentes biogénicos o atmosféricos más superficiales. Su disposición espacial rodea en muchos casos a los dominios del Clúster 0, actuando como una interfaz geoquímica.

Por su parte, el Clúster 2 (gris oscuro) domina ampliamente tanto el sector central como las zonas periféricas del área de estudio. Se asocia con valores geoquímicos cercanos al fondo, típicos de gases del suelo controlados por procesos superficiales, como la respiración del suelo o la difusión atmosférica. Esta distribución es consistente con la baja actividad tectónica o estructural visible en dichas zonas.

La superposición de los resultados del clustering con la topografía y la cartografía estructural refuerza la interpretación de que los clústeres reflejan dominios geoquímicos reales, no aleatorios ni artefactuales, y que están fuertemente condicionados por la estructura geológica del subsuelo.

Esta coherencia espacial sugiere que la desgasificación del subsuelo en el área de Garehagua no ocurre de manera homogénea, sino que está fuertemente canalizada por las estructuras tectónicas y vulcano-estratigráficas preexistentes. La presencia del Clúster 0 sobre zonas de fracturación intensa o antiguos conductos eruptivos indica que estas estructuras actúan como vías preferenciales para la migración de gases magmáticos, mientras que la ausencia de este clúster en sectores sin actividad tectónica reciente confirma su vínculo con la dinámica endógena activa.

Estos hallazgos permiten delimitar zonas prioritarias para futuras campañas de perforación y vigilancia geoquímica, ya que los clústeres anómalos coinciden con contextos estructurales favorables para el desarrollo de reservorios geotérmicos. En conjunto, la integración del análisis multivariable con la información espacial y estructural proporciona un enfoque robusto para identificar áreas de interés geotérmico, optimizando la toma de decisiones en exploración y reduciendo los riesgos asociados a la incertidumbre geológica.

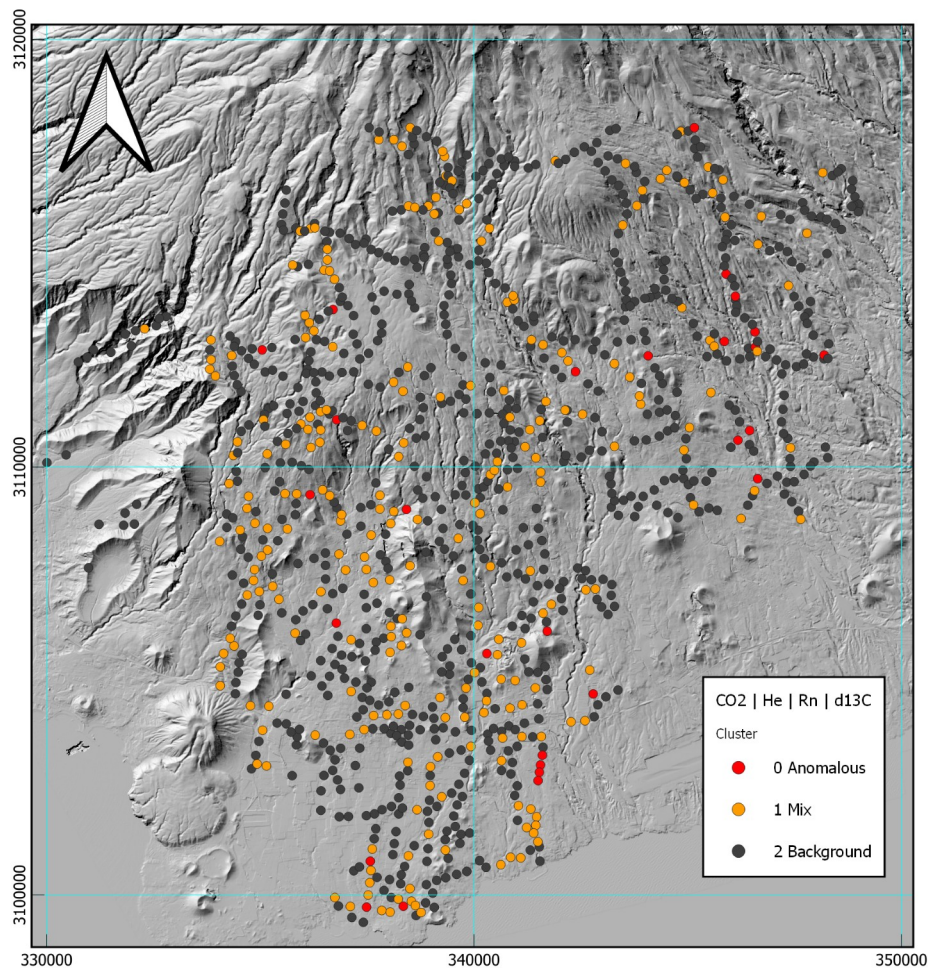


Figura 58. Distribución espacial de los 1.200 puntos de muestreo en los dominios mineros de Garehagua y Garehagua II, clasificados según su pertenencia a clústeres obtenidos mediante el algoritmo GKMC, utilizando los parámetros geoquímicos CO₂, He, ²²²Rn y δ¹³C–CO₂. Los puntos rojos (Clúster 0) representan firmas geoquímicas anómalas, indicativas de aportes profundos potencialmente magmáticos. Los puntos naranjas (Clúster 1) corresponden a zonas transicionales o de mezcla, mientras que los puntos gris oscuro (Clúster 2) agrupan valores de fondo, asociados a componentes biogénicos y atmosféricos. Esta representación permite identificar la coherencia espacial de las agrupaciones y su posible relación con estructuras geológicas activas.

La visualización de los datos clasificados sobre el modelo topográfico permite apreciar no solo la distribución de los clústeres, sino también su correspondencia con accidentes geomorfológicos relevantes. En zonas de mayor altitud relativa o topografía accidentada, los clústeres anómalos tienden a agruparse con mayor densidad, lo que podría estar relacionado con procesos de relajación tectónica o acumulación de fracturación que favorecen la liberación de gases profundos. Esta asociación topografía-clúster refuerza la utilidad del modelo para entender no solo la geoquímica del sistema, sino también su dinámica estructural.

Asimismo, la representación cartográfica permite identificar áreas de transición geoquímica que no coinciden necesariamente con límites geológicos evidentes, pero que podrían señalar zonas de interferencia entre dominios estructurales o contactos litológicos enterrados. La capacidad del algoritmo GKMC para detectar estos límites difusos proporciona una herramienta adicional para interpretar gradientes geoquímicos no evidentes en análisis univariados. De este modo, el mapa no solo aporta una clasificación espacial, sino también pistas interpretativas clave sobre la arquitectura subterránea del sistema geotérmico.

6. Discusión

6.1 Interpretación Estructural y Espacial de los Clústeres GKMC

La aplicación del algoritmo GKMC no solo permitió identificar poblaciones geoquímicas discretas, sino que también proporcionó información relevante sobre la estructura espacial y el contexto geológico de las emisiones gaseosas en los permisos de investigación de Garehagua y Garehagua II. Los clústeres resultantes presentan distribuciones geográficas diferenciadas que se correlacionan de forma significativa con la arquitectura tectónica y volcánica conocida del rift sur de Tenerife.

6.1.1 Clúster 0 — Anomalías Geoquímicas Profundas Controladas por Intersecciones de Fallas

La población más anómala desde el punto de vista geoquímico, el Clúster 0, se concentra espacialmente en dos zonas clave. La primera se localiza cerca de la intersección de lineamientos con orientación NO–SE y NE–SO, una zona estructuralmente compleja que ya había sido identificada como un área de permeabilidad aumentada en estudios magnetotelúricos (MT) previos (Rodríguez, F. et al. 2015; Martín-Lorenzo, A. et al 2024). El segundo grupo de puntos anómalos se sitúa a lo largo de un corredor estructural suroeste, el cual coincide con la prolongación del eje del rift sur. Estas áreas presentan niveles elevados en todos los parámetros seleccionados—flujo de CO₂, concentración de He, actividad de ²²²Rn y razón isotópica δ¹³C–CO₂—lo que sugiere una migración vertical activa de fluidos magmático-hidrotermales.

El análisis de las razones molares entre gases, como CO₂/He y CO₂/CH₄, aporta información adicional sobre el origen de las emisiones anómalas detectadas. El *Cluster 2*, identificado como el grupo geoquímicamente más anómalo, presentó razones CO₂/He que oscilan entre aproximadamente 2.000 y 12.000. Estos valores se sitúan dentro del rango característico de fluidos de origen mantélico e hidrotermal en sistemas volcánicos activos como Pantelleria y Campi Flegrei (Chiodini et al., 2005).

Asimismo, en muchos casos se observaron razones CO₂/CH₄ superiores a 1.000, lo que resulta coherente con fuentes no biogénicas, en contraste con los suelos de fondo típicos, donde la actividad microbiana genera comúnmente valores más bajos de CO₂/CH₄ (<100) (Etiope et al., 2002). Estas razones elevadas sugieren la presencia de mezclas gaseosas dominadas por aportes magmático-hidrotermales, con escasa dilución por fuentes someras.

La interpretación combinada de las concentraciones y las razones molares respalda la existencia de un sistema de desgasificación profunda, controlado estructuralmente y en gran medida enmascarado en superficie, según se deduce del análisis de clustering y la distribución espacial de los datos.

La coincidencia espacial de estas anomalías con intersecciones tectónicas respalda la interpretación de que las estructuras geológicas actúan como vías preferenciales para el ascenso de fluidos profundos. Esta observación es coherente con lo documentado en otras islas volcánicas, donde las intersecciones de fallas y zonas de rift favorecen la permeabilidad vertical y concentran la desgasificación endógena (Hernández, P. et al. 2004; Giammanco, S. et al. 2007). Las altas concentraciones de helio, superiores a 15 ppm, refuerzan la hipótesis de una influencia magmática, ya que no pueden explicarse mediante procesos superficiales o biogénicos.

6.1.2 Clúster 1 — Zonas Transicionales con Aporte Parcial de Gases Profundos

El Clúster 1 presenta un patrón espacial periférico, formando con frecuencia halos alrededor de las zonas del Clúster 0 o alineándose con fracturas menores y lineamientos estructurales secundarios. La naturaleza intermedia de su composición geoquímica sugiere una contribución parcial de gases de origen profundo, posiblemente diluida por mezcla con gases de fondo o atenuada por condiciones de permeabilidad limitada. La presencia de estas firmas geoquímicas transicionales respalda la hipótesis de difusión lateral o fugas desde zonas de ascenso profundo, en las que la migración de gases estaría controlada por estructuras secundarias, como fracturas radiales o discontinuidades entre coladas de lava.

Esta configuración en forma de “halo” ha sido documentada en otros sistemas volcánicos, donde firmas geoquímicas intermedias delimitan los márgenes exteriores de sistemas hidrotermales (Chiodini, G. et al 1998; Frondini, F. et al 2004). La identificación de estas zonas transicionales es especialmente relevante en la prospección geotérmica, ya que pueden constituir evidencias indirectas de los límites del reservorio o de los bordes de áreas de ascenso controladas estructuralmente.

6.1.3 Clúster 2 — Fondo Geoquímico Regional y Estabilidad Estructural

El Clúster 2 representa el fondo geoquímico del área de estudio y se distribuye ampliamente en zonas sin rasgos tectónicos o volcánicos significativos. Los bajos flujos de gases, las concentraciones de helio cercanas a niveles atmosféricos y los valores de $\delta^{13}\text{C}$ fuertemente negativos indican suelos dominados por la respiración biológica y el intercambio gaseoso atmosférico, con una aportación despreciable de gases de origen profundo.

La dominancia de este clúster, que abarca más del 80 % del conjunto de datos, pone de manifiesto la escasa expresión superficial del sistema geotérmico objeto de estudio. Este resultado es coherente con un entorno de isla volcánica sin presencia de campos fumarólicos

activos ni evidencias de alteración hidrotermal en superficie. Asimismo, la presencia generalizada de esta población de fondo resalta la sensibilidad y capacidad de discriminación del algoritmo GKMC, que ha logrado diferenciar anomalías sutiles y espacialmente confinadas dentro de un conjunto de datos ruidoso y dominado por procesos superficiales.

En conjunto, los tres clústeres definidos por el análisis multivariable reflejan de forma coherente la estructura geoquímica y geológica del área de estudio. El Clúster 0 identifica las anomalías profundas más significativas, probablemente asociadas a zonas de ascenso de fluidos magmático-hidrotermales a través de estructuras tectónicas activas. El Clúster 1 se interpreta como una zona transicional o de mezcla, que actúa como halo periférico alrededor de las anomalías principales y podría delinear los bordes del sistema geotérmico. Por último, el Clúster 2 corresponde al fondo geoquímico regional, dominado por señales biogénicas y atmosféricas, y ocupa la mayor parte del área cartografiada. Esta clasificación tripartita no sólo permite discriminar entre aportes profundos y superficiales, sino que también aporta una base espacialmente explícita para priorizar futuras campañas de exploración, orientando estudios geofísicos adicionales y la selección de posibles emplazamientos de perforación.

6.2 Implicaciones para la Exploración y el Desarrollo del Modelo Conceptual

Los resultados del clustering y sus patrones espaciales permiten esbozar un modelo conceptual preliminar del sistema geotérmico subsuperficial. Las zonas asociadas al Clúster 0 representan las principales áreas de ascenso de fluidos geotérmicos profundos, caracterizadas por anomalías geoquímicas multivariadas coherentes y control estructural evidente. El Clúster 1 puede delimitar zonas de fuga lateral o de difusión de gases desde zonas más profundas, posiblemente relacionadas con estructuras secundarias o halos de transición. Por su parte, el Clúster 2 define regiones estructuralmente estables o geoquímicamente inertes, sin evidencias de aportes profundos.

De forma destacable, estos hallazgos validan la utilidad de integrar el análisis geoquímico multivariable con el cartografiado estructural en las fases tempranas de la exploración geotérmica. La correlación entre anomalías geoquímicas y sistemas de fallas da soporte a la hipótesis de que existe circulación activa de fluidos profundos, aunque confinada espacialmente por la arquitectura tectónica. Estas observaciones pueden guiar directamente la selección de objetivos de perforación, así como la priorización de campañas geofísicas complementarias, especialmente tomografía sísmica pasiva o estudios magnetotélúricos orientados a la detección de redes de fracturas y geometrías de zonas de sello (caprock).

En conjunto, este enfoque integrado mejora la eficiencia exploratoria al reducir la incertidumbre sobre la conectividad de los reservorios. Además, fortalece la interpretación de los procesos

hidrotermales subyacentes y permite construir modelos predictivos más realistas, ajustados a la dinámica estructural del entorno volcánico.

6.3 Correlación entre los Clústeres y Anomalías de Resistividad

Una comparación cualitativa entre la distribución de clústeres obtenida mediante el algoritmo GKMC y las secciones de resistividad del modelo magnetotelúrico (MT) tridimensional revela una notable asociación espacial. Los modelos de resistividad, desarrollados por Piña-Varas et al. (2014) y reinterpretados por Rodríguez et al. (2015), muestran anomalías coherentes de baja resistividad ($\leq 2 \Omega \cdot m$) bajo las zonas central y meridional del área de estudio.

Para explorar esta relación, se proyectaron los resultados del clustering sobre cortes horizontales del modelo MT 3D a diferentes niveles de elevación. En la Figura 59 se muestra la distribución de pertenencia a clústeres en cuatro profundidades, superpuesta a los mapas de resistividad. De forma notable, los Clústeres 0 y 1 tienden a coincidir espacialmente con zonas de baja resistividad, lo que respalda su interpretación como áreas de alteración hidrotermal y vías preferentes de ascenso de gases profundos.

En particular, las zonas enriquecidas en CO_2 , He y ^{222}Rn se alinean frecuentemente con estos dominios conductivos, reforzando la hipótesis de que corresponden a conducciones hidrotermales estructuralmente controladas, potencialmente vinculadas con actividad geotérmica oculta.

Aunque el análisis aquí presentado es de carácter cualitativo, la coincidencia espacial entre anomalías geoquímicas y eléctricas otorga mayor validez a los patrones identificados mediante clustering multivariable, consolidando su uso como herramienta de prospección preliminar en terrenos volcánicos de alta complejidad estructural.

Esta correlación sugiere que los clústeres anómalos definidos geoquímicamente no son el resultado de variabilidad superficial aleatoria, sino que reflejan procesos estructurales profundos con expresión eléctrica medible. Las zonas de resistividad reducida pueden interpretarse como regiones de alteración arcillosa (cap rocks) o como acumulaciones de fluidos conductores, características comunes en la parte superior de sistemas geotérmicos activos. Su coincidencia con zonas de degasificación intensa observada en superficie refuerza la hipótesis de que el sistema hidrotermal está activo y canalizado por estructuras profundas.

Además, la persistencia de estos clústeres sobre dominios conductivos a lo largo de múltiples niveles topográficos sugiere que las vías de migración de fluidos no son superficiales ni aisladas, sino que podrían estar conectadas verticalmente a través de fracturas o zonas de debilidad estructural. Esto resulta especialmente relevante para la identificación de objetivos de perforación, ya que apunta a la existencia de continuidad entre anomalías geoquímicas en superficie y estructuras profundas favorables para el desarrollo de reservorios geotérmicos.

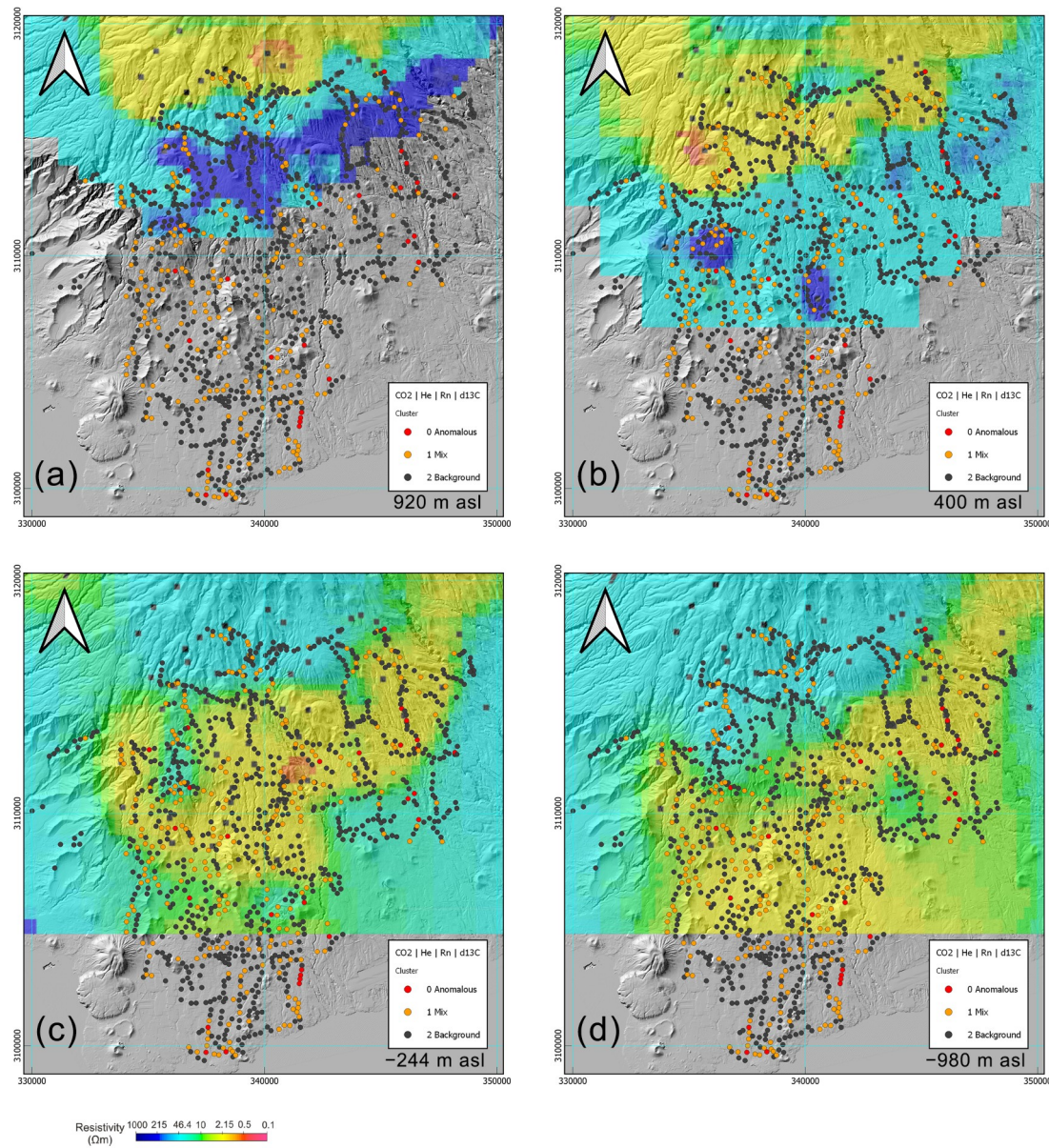


Figura 59. Secciones de resistividad a múltiples profundidades superpuestas con puntos de clúster obtenidos mediante GKMC. Los paneles muestran cortes horizontales del modelo tridimensional de resistividad magnetotélurica (MT) a cuatro niveles de elevación: (a) 920 m s.n.m.; (b) 400 m s.n.m.; (c) -244 m s.n.m.; y (d) -980 m s.n.m., adaptado de Rodríguez et al. (2015) con base en los datos MT de Piña-Varas et al. (2014). Los puntos de muestreo geoquímico están codificados por colores según su pertenencia a clúster: Clúster 0 (gris), Clúster 1 (naranja) y Clúster 2 (rojo). Los Clústeres 0 y 1 tienden a alinearse espacialmente con zonas de baja resistividad ($\leq 2 \Omega\cdot m$), interpretadas como dominios de alteración hidrotermal ricos en arcillas o posibles vías de desgasificación profunda. Esta correspondencia aporta respaldo geofísico a la significancia estructural e hidrotermal de los clústeres geoquímicos identificados.

La proyección de los resultados del clustering multivariable sobre secciones horizontales del modelo de resistividad magnetotélurica (MT) permitió examinar la relación espacial entre las anomalías geoquímicas y las estructuras eléctricamente conductoras del subsuelo. Este enfoque integrador ofrece una valiosa validación cruzada entre datasets independientes y, a su vez, contribuye al desarrollo de un modelo conceptual tridimensional más robusto.

Las zonas de baja resistividad ($< 2 \Omega \cdot m$) detectadas en los modelos MT suelen asociarse a regiones de alteración hidrotermal arcillosa, presencia de fluidos calientes o zonas fracturadas saturadas, todos ellos elementos clave para el desarrollo de sistemas geotérmicos. La superposición de los clústeres 0 y 1 sobre estas zonas conductoras sugiere que las anomalías geoquímicas no son meramente superficiales, sino que podrían reflejar procesos activos de transporte de gases desde profundidad, guiados por estructuras de alta permeabilidad.

Además, el patrón recurrente de coincidencia entre anomalías geoquímicas y zonas conductoras en varios niveles altitudinales (desde 920 m hasta -980 m s.n.m.) refuerza la idea de que existen columnas verticales de desgasificación o “chimeneas hidrotermales” conectando la superficie con reservorios más profundos. Estos alineamientos verticales podrían interpretarse como indicios de zonas de ascenso preferente de fluidos, y por tanto, constituir objetivos prioritarios para futuras perforaciones exploratorias.

La ausencia de clústeres anómalos en regiones de alta resistividad respalda la capacidad discriminativa del modelo de clustering GKMC, los resultados obtenidos reflejan patrones geológicamente coherentes y no distribuciones aleatorias. Esta coherencia espacial entre señales geoquímicas y geofísicas subraya el valor del enfoque multivariable como herramienta exploratoria de primer nivel en terrenos volcánicos complejos.

En conjunto, estos resultados destacan el potencial de integrar datos de gases del suelo con modelos geofísicos para delimitar zonas de interés geotérmico oculto. La complementariedad entre la sensibilidad superficial del muestreo geoquímico y la penetración profunda de las técnicas MT proporciona una base sólida para reducir la incertidumbre en etapas tempranas de exploración.

6.4 Interpretación Geoquímica y Estructural de los Resultados de Clustering

A pesar de las limitaciones inherentes a los estudios de gases del suelo —como la sensibilidad a las condiciones meteorológicas y a variaciones temporales—, el algoritmo GKMC ha demostrado ser eficaz para identificar zonas geoquímicamente significativas. Al reducir el “ruido” de fondo y combinar señales multivariadas, permite detectar sistemas geotérmicos ocultos que podrían pasar desapercibidos mediante análisis uniparamétricos convencionales.

Los resultados del análisis multivariable de clustering, obtenidos mediante el algoritmo GKMC, permitieron segmentar el dominio geoquímico en tres poblaciones claramente diferenciadas. Esta partición es coherente, en términos generales, con el marco geológico de la zona de rift sur de Tenerife, lo que pone de manifiesto la eficacia del método para detectar señales geoquímicas sutiles potencialmente asociadas a procesos geotérmicos profundos.

Desde una perspectiva geoquímica, la mayor parte del área de estudio (~74%) fue asignada al Clúster 2, que representa la población de fondo, dominada por señales atmosféricas y biogénicas.

Las concentraciones de helio próximas a los niveles atmosféricos ($\sim 5,2$ ppm), los valores de $\delta^{13}\text{C}$ en torno a -25‰ y los bajos flujos de CO_2 indican que este clúster refleja un entorno no afectado por contribuciones de fluidos endógenos. Esta interpretación concuerda con estudios previos que documentan una expresión geotérmica superficial limitada en las zonas periféricas del sistema (Rodríguez, F. et al. 2021; Ablay, G.J. et al. 2000).

El Clúster 1, interpretado como una zona intermedia o de “halo”, agrupa aproximadamente el 10% de los puntos de muestreo. Se caracteriza por parámetros geoquímicos moderadamente elevados, incluyendo flujos de CO_2 en torno a $50 \text{ g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{d}^{-1}$, helio ligeramente enriquecido (~ 7 ppm) y valores de $\delta^{13}\text{C}$ próximos a -10‰ . Estas características sugieren una mezcla de componentes gaseosos profundos y someros, facilitada por estructuras secundarias o zonas parcialmente fracturadas. Patrones de halo similares han sido descritos en otros sistemas volcánico-geotérmicos, donde la permeabilidad lateral permite la fuga difusa de gases (Hernández, P. et al. 2004; Giammanco, S. et al. 2007).

El Clúster 0 representa la población más anómala desde el punto de vista geoquímico, aunque solo comprende $\sim 5\%$ del conjunto de datos. Presenta evidencias claras de aportes magmáticos profundos: flujos de CO_2 de hasta $300 \text{ g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{d}^{-1}$, concentraciones de helio ≥ 15 ppm, valores de $\delta^{13}\text{C}$ de hasta -6‰ y niveles elevados de ^{222}Rn y H_2 . La magnitud y coherencia multivariable de estas anomalías respaldan su interpretación como manifestaciones superficiales de un sistema geotérmico profundo activo. Destaca especialmente la anomalía de helio, que—según Rodríguez et al. (2015) y Martín-Lorenzo et al. (2024)—ha sido consistentemente asociada a un aumento de la permeabilidad vertical debido al adelgazamiento de la cubierta arcillosa, evidenciado en modelos magnetotélúricos.

El análisis estadístico gráfico univariable (método de Sinclair) apoya adicionalmente la interpretación de los clústeres al mostrar que la proporción de datos considerados como “pico” (es decir, potencialmente indicativos de aportes profundos) es consistentemente baja en todas las variables. Por ejemplo, solo el 2,1% de los valores de flujo de CO_2 superan el umbral de anomalía definido, y apenas el 0,7% de los datos de helio muestran concentraciones significativamente superiores al fondo atmosférico. Estos hallazgos sugieren que, aunque existen zonas localizadas de desgasificación profunda, estas son espacialmente limitadas y no indican la presencia de un sistema geotérmico de alta entalpía ampliamente desarrollado, lo que coincide con las conclusiones de programas previos de exploración en Tenerife (Benà, E. et al 2022).

El análisis de cocientes gaseosos, como CO_2/He y CO_2/CH_4 , aporta información adicional sobre el origen de las emisiones anómalas. El Clúster 0, identificado como el grupo más geoquímicamente anómalo, mostró cocientes CO_2/He entre ~ 2000 y 12.000 , valores que se encuentran dentro del rango reportado para fluidos de origen mantélico e hidrotermal en sistemas volcánicos como Pantelleria o Campi Flegrei (Chiodini, G. et al. 2005). Asimismo, los cocientes CO_2/CH_4 superaron los 1000 en numerosos casos, lo que es coherente con fuentes no biogénicas y contrasta con suelos de fondo, donde la actividad microbiana suele dar lugar a cocientes < 100 (Etiope, G. et al. 2002). Estos valores elevados sugieren mezclas gaseosas dominadas por aportes magmático-hidrotermales con escasa dilución por fuentes someras.

En conjunto, la interpretación combinada de concentraciones y cocientes gaseosos respalda la existencia de un sistema de desgasificación profundo, controlado estructuralmente y en gran medida enmascarado en superficie, como se infiere de los resultados de clustering y análisis espacial.

6.5 Interpretaciones Alternativas de las Anomalías Geoquímicas

Aunque los patrones geoquímicos identificados mediante el análisis de clustering sugieren aportes de origen magmático-hidrotermal profundo, es importante considerar posibles explicaciones alternativas. Algunas anomalías podrían reflejar desgasificación difusa a lo largo de estructuras tectónicas sin circulación hidrotermal activa. Estas zonas podrían representar paleocanales o fallas de baja permeabilidad que permiten la fuga de gases magmáticos sin una implicación significativa de fluidos calientes.

En estos casos, la presencia de anomalías en CO₂, He o ²²²Rn no indicaría necesariamente la existencia de un reservorio geotérmico explotable (Etiope, G., et al. 2014). Serían necesarios datos adicionales procedentes de campañas geofísicas o de perforación para confirmar la presencia de estructuras portadoras de fluidos, así como para caracterizar gradientes de temperatura y permeabilidad. Por tanto, si bien los resultados señalan zonas de desgasificación profunda controladas estructuralmente, su potencial geotérmico real aún debe ser validado.

6.6 Control Geológico y Significado Estructural

Desde el punto de vista geológico, los clústeres anómalos muestran una notable alineación espacial con la intersección de lineamientos tectónicos con orientación NE–SW y NW–SE, estructuras que históricamente han sido reconocidas como zonas de concentración de esfuerzos y vías preferenciales de migración vertical de fluidos dentro del edificio volcánico de Tenerife (Araña y Ortiz 1999; Carracedo 1994). Esta correlación estructural–geoquímica refuerza la hipótesis de que los gases magmáticos tienden a migrar por zonas de debilidad tectónica.

La distribución espacial de los clústeres derivados del algoritmo GKMC muestra una clara coherencia con las estructuras geológicas reconocidas en la zona de rift sur de Tenerife. Los clústeres más intensos, especialmente aquellos dominados por altos niveles de CO₂, helio y ²²²Rn, tienden a concentrarse a lo largo de lineamientos NE–SW y NW–SE, que coinciden con fallas cartografiadas o inferidas.

Uno de los clústeres muestra una correlación directa con la Galería Fuente del Valle, una estructura subterránea previamente asociada con anomalías geotérmicas. Además, la elongación de algunos clústeres es coherente con la orientación de diques volcánicos y alineamientos de conos, lo que sugiere la existencia de rutas estructurales favorables para el ascenso de fluidos.

La distribución de los clústeres geoquímicos fue comparada con el marco tectónico cartografiado del área de estudio. La Figura 60 muestra la disposición espacial de los clústeres derivados del GKMC superpuestos a los principales lineamientos estructurales. La alineación de los puntos del Clúster 0 (anómalo) y del Clúster 1 (transicional) a lo largo de fallas con rumbo NE–SW y NW–SE indica una fuerte influencia estructural sobre las rutas de desgasificación. En particular, varios puntos anómalos se encuentran en las proximidades de la galería hidrotermal Fuente del Valle, lo que refuerza la hipótesis de una ascensión de gases magmáticos controlada tectónicamente.

Si bien algunas de estas asociaciones tienen un componente interpretativo, la coincidencia entre las anomalías geoquímicas y los patrones estructurales apoya la hipótesis de que la desgasificación profunda está canalizada estructuralmente. Estos hallazgos refuerzan el valor del análisis de clustering como herramienta para identificar rasgos geotérmicos ocultos en contextos volcánicos complejos.

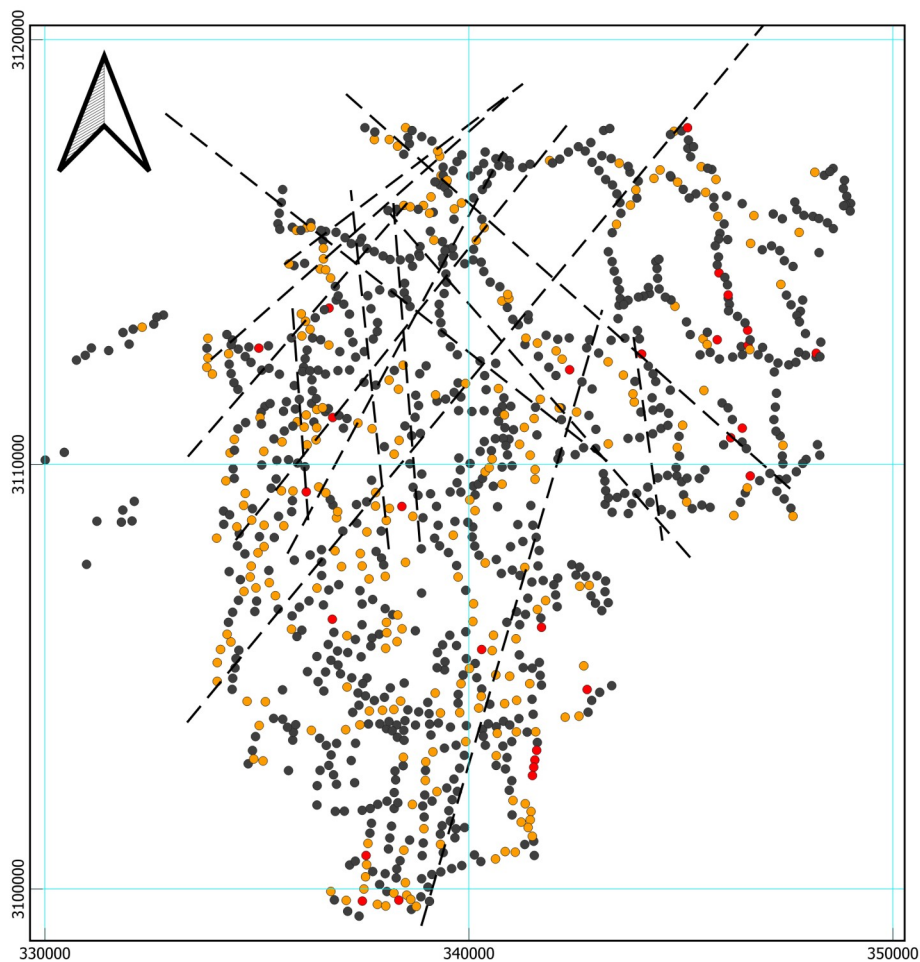


Figura 60. Distribución espacial de los clústeres GKMC sobre el marco estructural. Mapa que muestra la localización de los puntos de muestreo de gases del suelo, codificados por colores según su pertenencia a los clústeres derivados del algoritmo GKMC: clúster 0 (fondo geoquímico, gris oscuro), clúster 1 (intermedio, naranja) y clúster 2 (anómalo, rojo). Estos puntos se superponen a los lineamientos estructurales principales (líneas negras discontinuas). Se observan alineamientos de clústeres que siguen direcciones tectónicas inferidas (NO–SE y NE–SO), y los clústeres anómalos muestran una correlación espacial destacada con sistemas de fallas cartografiadas y alineamientos volcánicos. La proximidad de varios puntos del clúster rojo a la galería

hidrotermal de Fuente del Valle refuerza la hipótesis de un control estructural sobre el ascenso de gases magmáticos en esta área.

6.7 Eficacia del Clustering mediante GKMC

El enfoque basado en el algoritmo GKMC ha demostrado ser altamente eficaz para el procesamiento e interpretación del complejo conjunto de datos geoquímicos analizados. Al considerar simultáneamente múltiples gases del suelo, el clustering multivariable redujo de forma significativa la ambigüedad interpretativa que suele asociarse a mapas de anomalías basados en parámetros individuales. El algoritmo GKMC mejoró la estabilidad y la reproducibilidad de los resultados: las ejecuciones repetidas arrojaron patrones de clústeres consistentes, lo que indica que las agrupaciones identificadas responden a estructuras intrínsecas del propio conjunto de datos, y no a artefactos generados por la técnica de clasificación empleada. Esta robustez es particularmente relevante cuando los resultados se utilizan para respaldar decisiones estratégicas, como la selección de objetivos de perforación en proyectos de exploración geotérmica.

Uno de los logros más destacables del método es su capacidad para discriminar el ruido de fondo. Variaciones menores asociadas a procesos microbiológicos locales o a fluctuaciones diurnas —especialmente en las concentraciones de CO_2 y ^{222}Rn — fueron sistemáticamente clasificadas dentro del clúster dominante de fondo. En cambio, las anomalías persistentes y multivariantes fueron aisladas con precisión, lo que refuerza el valor del GKMC como herramienta basada en datos para la detección objetiva de señales anómalas.

Estos resultados coinciden con los hallazgos previos de Ghezelbash et al. (2020) y amplían la aplicabilidad del algoritmo GKMC en el contexto de la exploración geotérmica. En vista de su rendimiento, se recomienda su implementación en estudios similares que involucren datasets geoquímicos multivariantes, especialmente en zonas volcánicas con elevada heterogeneidad, ya que permite obtener una visión más integrada, robusta e interpretable de los procesos de desgasificación del subsuelo.

6.8 Implicaciones para el Potencial Geotérmico

Los resultados integrados del análisis geoquímico multivariable y el clustering indican que la zona del rift sur de Tenerife alberga un sistema geotérmico oculto cuyas características justifican una investigación más detallada. Las áreas delimitadas mediante los clústeres identificados y los patrones geoquímicos resultantes presentan condiciones favorables para una futura perforación exploratoria. No obstante, será necesario llevar a cabo estudios adicionales que permitan cuantificar parámetros clave del reservorio, tales como la temperatura, la permeabilidad efectiva y la saturación de fluidos. Este trabajo representa, por tanto, un primer paso en la identificación y caracterización del sistema.

La metodología aplicada en este estudio podría extenderse con éxito a la detección de sistemas geotérmicos ciegos en otras islas volcánicas del archipiélago canario, como La Palma o El

Hierro, así como en entornos oceánicos comparables. Los resultados ponen de relieve el valor estratégico de las prospecciones de superficie, especialmente en etapas tempranas de exploración. A pesar de la ausencia de sondeos previos en el área de estudio, el enfoque empleado ha permitido desarrollar un modelo conceptual plausible del subsuelo y establecer zonas prioritarias para la perforación, contribuyendo así a reducir los riesgos inherentes y los costes asociados a la exploración geotérmica.

Adicionalmente, la correlación espacial observada entre las anomalías geoquímicas y las intersecciones principales de fallas aporta un argumento adicional para considerar la existencia de zonas de ascenso controladas estructuralmente. Como se muestra en la Figura 61, los clústeres anómalos (clúster 0) se alinean frecuentemente con la convergencia de sistemas de fallas con orientación NO–SE y NE–SO, estructuras históricamente asociadas a zonas de concentración de esfuerzos tectónicos y mayor permeabilidad vertical. Esta disposición sugiere que los gases magmáticos ascienden de forma preferente a lo largo de estas discontinuidades, reforzando la hipótesis de que el rift sur de Tenerife podría constituir un sistema geotérmico estructuralmente focalizado y con potencial de aprovechamiento.

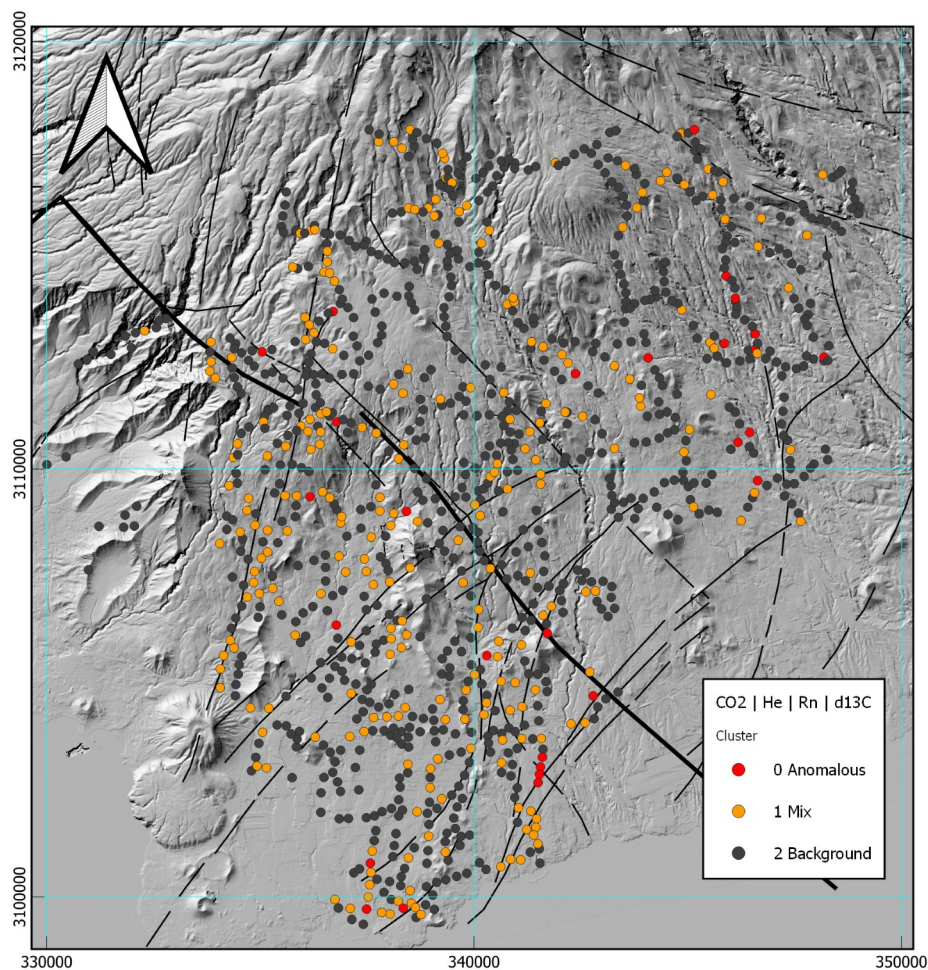


Figura 61. Distribución espacial de los puntos de muestreo clasificados según su pertenencia a clústeres (basados en CO₂, He, ²²²Rn y δ¹³C), superpuestos sobre el marco estructural del rift sur de Tenerife (IGME 2014) y sobre un modelo de sombreado topográfico. Los puntos anómalos (Clúster 0, en rojo) muestran una clara alineación con la intersección de sistemas de fallas de orientación NO–SE y NE–SO, históricamente reconocidos como zonas de

concentración de esfuerzos tectónicos y mayor permeabilidad vertical (Araña&Ortiz 1991, Carracedo, J. 1994). Esta correlación espacial refuerza la interpretación de que los gases magmáticos ascienden preferentemente a través de discontinuidades estructurales dentro del edificio volcánico, lo que sugiere que dichos clústeres podrían estar reflejando trayectorias de desgasificación profunda controladas tectónicamente.

6.9 Evaluación Crítica de la Metodología

Aunque el enfoque aplicado ha demostrado ser eficaz, es importante reconocer ciertas limitaciones inherentes. Las prospecciones de gases del suelo son intrínsecamente sensibles a la variabilidad atmosférica y estacional que pueden introducir ruido en los datos, especialmente en parámetros sensibles como el CO₂ o el ²²²Rn. En este estudio, los datos fueron recolectados durante dos campañas distintas con el objetivo de minimizar el efecto de las fluctuaciones diurnas; no obstante, eventos meteorológicos extremos pueden temporalmente enmascarar o diluir las anomalías geoquímicas detectables. Aunque se aplicaron protocolos de control para minimizar estas interferencias, no puede descartarse cierta variabilidad residual. Además, el análisis parte del supuesto de un régimen de desgasificación en estado estacionario, lo cual podría no reflejar adecuadamente la presencia de emisiones episódicas o eventos transitorios, que pueden pasar inadvertidos si no coinciden con el periodo de muestreo.

La fiabilidad de los resultados del análisis de clustering está estrechamente vinculada tanto a la calidad como a la densidad espacial de los datos. En este caso, la aplicación de una malla de muestreo de alta resolución ha contribuido a reforzar la solidez de la clasificación; sin embargo, conjuntos de datos más dispersos o discontinuos podrían dificultar la detección de patrones coherentes o la formación de clústeres significativos.

El algoritmo GKMC, por su parte, requiere la definición previa del número de clústeres (k). En este estudio, se adoptó un valor de $k = 3$, sustentado tanto en criterios estadísticos (índice Silhouette) como en consideraciones geológicas. No obstante, en sistemas geológicamente más complejos —por ejemplo, con múltiples zonas de ascenso de fluidos o estructuras superpuestas— podría resultar necesario explorar configuraciones con mayor número de clústeres para capturar adecuadamente la heterogeneidad del sistema. En este caso, sin embargo, la clasificación obtenida fue clara, coherente y estadísticamente robusta.

Tampoco se debe ignorar la necesidad de validación independiente. Si bien los clústeres identificados mostraron correlaciones espaciales significativas con estructuras geológicas y anomalías de resistividad magnetotelúrica, la confirmación definitiva del potencial geotérmico de estas zonas requiere perforaciones exploratorias o técnicas geofísicas adicionales de alta resolución.

De cara a futuras investigaciones, se proponen las siguientes líneas de trabajo:

- Integrar series temporales de gases del suelo para capturar variaciones dinámicas y estacionales que podrían enriquecer los modelos actuales.

- Aplicar técnicas de inteligencia artificial, como redes neuronales auto-organizadas (SOMs) o algoritmos de agrupamiento difuso (Fuzzy Clustering), para evaluar su rendimiento comparativo frente al GKMC.
- Ampliar el enfoque multivariable incorporando otros parámetros como H_2S , $\delta^2\text{H}$ y $\delta^{18}\text{O}$, o elementos traza como mercurio, que podrían aportar información complementaria sobre procesos hidrotermales profundos.
- Extender esta metodología a otras islas del archipiélago canario (El Hierro, La Palma, Gran Canaria) con estructuras volcánicas similares, para evaluar su aplicabilidad en contextos geológicos distintos.

En conjunto, estas líneas de investigación permitirán consolidar una metodología replicable y escalable para la detección temprana de sistemas geotérmicos ocultos en entornos volcánicos activos.

6.10 Comparación con otros Sistemas Geotérmicos

El enfoque metodológico y los resultados obtenidos en este estudio en la isla de Tenerife son comparables a investigaciones realizadas en otros campos geotérmicos activos, especialmente en entornos continentales como Italia y Turquía. En dichas regiones, las prospecciones de CO_2 del suelo combinadas con métodos de clustering —aunque no siempre utilizando el algoritmo GKMC— han sido aplicadas con éxito para delimitar anomalías de desgasificación, mientras que los estudios magnetotélúricos (MT) suelen identificar capas arcillosas de baja resistividad que sellan reservorios geotérmicos, como se ha observado en zonas como Larderello (Italia).

Aunque Tenerife presenta un contexto geológico particular como isla oceánica dominada por vulcanismo basáltico, los principios fundamentales de exploración geotérmica son plenamente aplicables. La presencia de estructuras tectónicas activas, el control estructural de la permeabilidad y la circulación de fluidos profundos son elementos comunes que justifican el empleo de enfoques integrados como el aquí desarrollado.

Más allá de sus implicaciones geotérmicas, este estudio también aporta al conocimiento general del sistema volcánico de Tenerife. La anomalía geoquímica identificada en el rift sur podría estar relacionada con una intrusión magmática subyacente, lo que sugiere no solo un potencial geotérmico latente, sino también consideraciones relevantes en el ámbito del riesgo volcánico. La existencia de sistemas geotérmicos sobrepresionados puede influir en la localización de futuras erupciones o contribuir al aumento de emisiones de CO_2 durante periodos de agitación volcánica.

En este sentido, el seguimiento continuo de gases del suelo en la región no solo tiene valor exploratorio, sino que también puede constituir una herramienta de alerta temprana frente a intrusiones magmáticas. Por tanto, esta iniciativa de exploración interdisciplinaria cumple una

doble función: contribuir al desarrollo de recursos geotérmicos y reforzar las capacidades de vigilancia volcánica en un entorno tectónica y volcánicamente activo.

6.11 Consideraciones Finales de la Discusión

Los resultados obtenidos mediante el análisis multivariable de clustering (GKMC) han permitido segmentar el dominio geoquímico del rift sur de Tenerife en poblaciones coherentes que reflejan diferencias significativas en la procedencia, composición y dinámica de los gases del suelo. Esta clasificación no solo se alinea con los marcos estructurales y volcánicos conocidos, sino que aporta una nueva dimensión interpretativa al evidenciar zonas de desgasificación profunda ocultas que serían difíciles de detectar mediante métodos univariados convencionales.

El enfoque aplicado ha demostrado ser robusto y reproducible, incluso en un entorno caracterizado por una alta heterogeneidad y señal geoquímica difusa. La integración de datos isotópicos, geoquímicos y estructurales, junto con técnicas avanzadas de minería de datos, ha sido clave para revelar patrones espaciales y comportamientos anómalos que apuntan hacia una actividad hidrotermal profunda, aún no explotada.

No obstante, debe subrayarse que los resultados aquí presentados deben interpretarse como una etapa preliminar dentro del proceso exploratorio. La identificación de zonas con potencial geotérmico no implica, por sí sola, la confirmación de un reservorio explotable. Para ello, será necesario complementar esta información con técnicas geofísicas de mayor resolución (como sísmica pasiva o interferometría radar), así como con estudios hidrogeológicos e incluso sondeos exploratorios que permitan validar los modelos propuestos.

Finalmente, este estudio subraya el potencial de aplicar herramientas de análisis multivariante a datos geoquímicos en contextos volcánicos, no solo para reducir la incertidumbre en la exploración geotérmica, sino también como una contribución significativa al monitoreo de procesos volcánicos profundos. La metodología implementada puede ser replicada y adaptada a otras islas del archipiélago canario —como El Hierro o La Palma— u otras regiones volcánicas oceánicas donde la identificación de sistemas ocultos continúa siendo un desafío geocientífico de primer orden.

En conjunto, los hallazgos de esta investigación reafirman la importancia de adoptar enfoques integrados, basados en datos y respaldados por herramientas estadísticas avanzadas, para enfrentar la complejidad inherente de los sistemas geotérmicos en entornos volcánicos. La combinación de técnicas analíticas robustas con conocimiento geológico local no solo optimiza la toma de decisiones en las etapas exploratorias, sino que también proporciona una base científica sólida para el desarrollo responsable y sostenible de los recursos geotérmicos en Canarias, con un enfoque replicable en otras islas de origen volcánico.

7. Conclusiones

Este estudio presenta los resultados de una campaña de muestreo de gases del suelo de alta densidad realizada en las áreas de los Permisos de investigación de recursos geotérmicos de Garehagua y Garehagua II, situadas en el rift sur de la isla de Tenerife. Mediante la integración de técnicas geoquímicas convencionales con herramientas de análisis multivariable avanzado—en particular, el método de Clustering K-Means Genético (GKMC)—ha sido posible detectar y clasificar poblaciones geoquímicas dentro de un entorno volcánico complejo, caracterizado por señales superficiales sutiles. Las principales conclusiones obtenidas se resumen a continuación:

7.1 Zonificación geoquímica discreta mediante clustering multivariable

La aplicación del algoritmo GKMC a un conjunto de parámetros clave (flujo de CO₂, concentración de He, actividad de ²²²Rn y relación isotópica $\delta^{13}\text{C}\text{--CO}_2$) permitió identificar una solución robusta de tres clústeres. El Clúster 0 define anomalías geoquímicas coherentes y espacialmente limitadas, asociadas a contribuciones profundas de origen magmático-hidrotermal. El Clúster 1 corresponde a zonas transicionales influenciadas por una aportación parcial de gases profundos, mientras que el Clúster 2 representa las condiciones de fondo geoquímico regional, dominadas por componentes de origen biogénico y atmosférico.

7.2 Control estructural sobre la migración de fluidos

La distribución espacial del Clúster 0 muestra una fuerte correlación con la intersección de lineamientos estructurales con orientación NO–SE y NE–SO, históricamente reconocidos como vías preferentes para la migración vertical de gases en el edificio volcánico de Tenerife. Las anomalías más fuertes se producen en la intersección de los lineamientos monogenéticos de las chimeneas y las fallas transversales. Estos resultados refuerzan la hipótesis del control estructural en la dinámica de los fluidos subsuperficiales debido a la permeabilidad creada por estas discontinuidades tectónicas. También valida el uso de mapas geológicos en el diseño de prospecciones geoquímicas donde la selección de intersecciones estructurales aumenta la eficacia de la detección de anomalías.

7.3 Anomalías geoquímicas sutiles pero significativas

Aunque los parámetros individuales presentan proporciones bajas de valores anómalos (por ejemplo, solo un 2,1 % en el flujo de CO₂), el enfoque de clustering multivariable permitió identificar señales geoquímicas consistentes que habrían pasado desapercibidas mediante un análisis univariable. Esto pone de manifiesto el valor de las metodologías integradas y basadas en datos para la detección de sistemas geotérmicos “ocultos”, sin manifestaciones hidrotermales o térmicas superficiales evidentes.

El algoritmo GKMC ha demostrado un rendimiento sólido en el manejo de conjuntos de datos geoquímicos multivariantes con alto nivel de ruido. Su capacidad para aislar anomalías sutiles incrustadas dentro de poblaciones de fondo dominantes resalta su utilidad en las fases iniciales de exploración geotérmica, especialmente en entornos volcánicos.

7.4 Validación geofísica independiente de la zonificación geoquímica

Aunque los estudios geofísicos previos (como la magnetotelúrica o la sísmica pasiva) no fueron integrados de forma directa en la fase inicial del análisis multivariable, los resultados obtenidos mediante clustering GKMC muestran una concordancia espacial destacable con zonas que habían sido identificadas de manera independiente como posibles reservorios geotérmicos. En particular, las anomalías geológicas definidas como Cluster 0 coinciden con dominios de baja resistividad en los modelos magnetotelúricos y con alineamientos estructurales interpretados previamente. Esta convergencia entre líneas de evidencia refuerza la solidez del modelo geoquímico propuesto y subraya el valor del análisis multivariable como herramienta de apoyo en la detección de sistemas geotérmicos ocultos en contextos volcánicos complejos.

7.5 Implicaciones para el potencial geotérmico

Los datos integrados sugieren que la zona de rift del sur de Tenerife alberga un recurso geotérmico que, aunque oculto, podría ser sustancial. Las áreas identificadas (particularmente la zona de anomalía central cerca de los municipios de Vilaflor y Granadilla de Abona) podrían ser adecuadas para perforaciones exploratorias. El elevado flujo de CO₂ y helio indica un vigoroso sistema de desgasificación, que suele correlacionarse con un elevado flujo de calor. Si efectivamente existe un yacimiento dominado por líquidos a ~250°C a unos pocos kilómetros de profundidad, podría sustentar la generación de electricidad (yacimiento de alta entalpía). Según la extensión lateral de las anomalías, podría haber varios kilómetros cuadrados de yacimiento productivo. Sin embargo, sería necesario seguir trabajando para cuantificar los parámetros del yacimiento; este estudio es un primer paso para localizarlo.

7.6 Próximos pasos en la investigación geotérmica

Aunque los resultados geoquímicos no indican la presencia de un reservorio de gran extensión o de alta entalpía, la identificación de emisiones profundas de gases, localizadas y controladas estructuralmente, justifica la realización de estudios adicionales. La combinación de estos hallazgos con técnicas complementarias —como la imagen magnetotelúrica, perforaciones someras de gradiente térmico y vigilancia sísmica pasiva— permitirá refinar el modelo conceptual del subsuelo y caracterizar mejor las propiedades del reservorio. La metodología presentada en este estudio también puede aplicarse a otras islas volcánicas oceánicas con características geodinámicas similares, como El Hierro o La Palma.

Asimismo, se sugiere avanzar hacia una integración de datos geoquímicos y geofísicos mediante enfoques de inversión conjunta 3D, en los que las emisiones de gases se utilicen como indicadores indirectos de permeabilidad. Esta vía representa una estrategia prometedora para la caracterización avanzada de reservorios geotérmicos en zonas volcánicas.

Otra línea de trabajo relevante consiste en ampliar el marco del algoritmo GKMC para incorporar variables geofísicas (como resistividad eléctrica o gravedad) junto con los parámetros geoquímicos ya utilizados. Esta extensión permitiría realizar un análisis de clustering multivariable verdaderamente integrado, mejorando la capacidad de modelado del subsuelo y la interpretación conjunta de anomalías, una posibilidad intrigante para la futura integración de datos en la exploración geotérmica.

En perspectiva, la combinación de datos geoquímicos, modelos estructurales y técnicas geofísicas avanzadas representa el camino más prometedor hacia una exploración más eficiente, menos invasiva y científicamente fundamentada. Los aprendizajes de este estudio son extrapolables a otras islas volcánicas oceánicas con características similares, contribuyendo no sólo a la exploración de recursos geotérmicos sostenibles, sino también al conocimiento de los procesos endógenos profundos que modelan estos territorios insulares.

La metodología aplicada ha demostrado ser eficaz para detectar y caracterizar señales endógenas sutiles así como descartar zonas dominadas por señales superficiales o biogénicas, contribuyendo así a reducir la incertidumbre inherente a las etapas tempranas de prospección. Los resultados obtenidos subrayan el valor de las herramientas estadísticas multivariadas en las fases preliminares de investigación geotérmica, especialmente en entornos volcánicos donde las manifestaciones hidrotermales superficiales son escasas o inexistentes.

Si bien los resultados no apuntan a la existencia de un sistema de alta entalpía ampliamente desarrollado, la identificación de emisiones anómalas bien estructuradas y controladas tectónicamente proporciona una base científica sólida para priorizar futuras investigaciones. Este trabajo, por tanto, no pretende ofrecer una conclusión definitiva sobre el potencial geotérmico de la zona, sino sentar las bases metodológicas y conceptuales para su evaluación progresiva e integrada.

Así, esta tesis no solo pretende aportar un estudio específico del área de investigación minera Garehagua en el Sur de Tenerife, sino que también propone una estrategia replicable para abordar desafíos similares en contextos volcánicos donde las señales geotérmicas se ocultan bajo una compleja estratigrafía superficial y una actividad difusa de desgasificación. En ese sentido, constituye una contribución metodológica, conceptual y aplicada al campo de la exploración geotérmica moderna.

Referencias

1. Ablay, G.J.; Martí, J. Stratigraphy, structure, and volcanic evolution of the Pico Teide–Pico Viejo formation, Tenerife, Canary Islands. *J. Volcanol. Geotherm. Res.* 2000, 103, 175–208, ISSN 0377-0273. [https://doi.org/10.1016/S0377-0273\(00\)00224-9](https://doi.org/10.1016/S0377-0273(00)00224-9).
2. Agarwal, P. K., & Mustafa, N. H. (2004, June). K-Means projective clustering. In *Proceedings of the twenty-third ACM SIGMOD-SIGACT-SIGART symposium on Principles of database systems* (pp. 155-165). <https://doi.org/10.1145/1055558.1055581>
3. Agarwal, R.; Motwani, D.M. Survey of clustering algorithms for Manet. *arXiv* 2009. <https://doi.org/10.48550/arXiv.0912.2303>.
4. Aiuppa, A., Fischer, T. P., Plank, T., Robidoux, P., & Di Napoli, R. (2021). Along-arc variations in volatile emissions in the Central American volcanic arc. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*, 22(8).
5. Aiuppa, A., Fischer, T.P., Plank, T., Bani, P., 2019. CO2 flux emissions from the Earth's most actively degassing volcanoes, 2005-2015. *Sci. Rep.* 9, 5442. <https://doi.org/10.1038/s41598-019-41901-y>
6. Alakeely, A., & Horne, R. N. (2020). Simulating the behavior of reservoirs with convolutional and recurrent neural networks. *SPE Reservoir Evaluation & Engineering*, 23(03), 0992-1005. <https://doi.org/10.2118/201193-PA>
7. Albert-Beltran, J.F., Araña, V., Diez, J.L., Valentín, A., Physical-chemical conditions of the Teide volcanic system (Tenerife, canary islands), *J. Volcanol. Geoth. Res.* 43 (1990) 321e332, [https://doi.org/10.1016/0377-0273\(90\)90059-O](https://doi.org/10.1016/0377-0273(90)90059-O).
8. Albert, J.F. (1988).- *El Calor de la Terra. Energia Geotèrmica a Catalunya*. Publicaciones de la Generalitat de Catalunya. Departamento de Industria y Energía, 88 pp.
9. Allard, P., Carbonnelle, J., Dajlevic, D. et al. Eruptive and diffuse emissions of CO2 from Mount Etna. *Nature* 351, 387–391 (1991). <https://doi.org/10.1038/351387a0>
10. Análisis y Valoración de las Técnicas Geofísicas Aplicadas a la Investigación Geotérmica. "Apéndice I". "Investigación Bibliográfica de los Métodos Geofísicos en Exploración Geotérmica". Instituto Geológico y Minero de España . Abril 1985.
11. Ancochea, E.; Fuster, J.M.; Ibarrola, E.; Cendrero, A.; Coello, J.; Hernán, F.; Cantagrel, J.M.; Jamond, C. Volcanic evolution of Tenerife (Canary Islands) in the light of new K-Ar data. *J. Volcanol. Geotherm. Res.* 1990, 44, 231–249. [https://doi.org/10.1016/0377-0273\(90\)90019-C](https://doi.org/10.1016/0377-0273(90)90019-C).

12. Anguita, F.; Hernán, F. The Canary Islands origin: A unifying model. *J. Volcanol. Geotherm. Res.* 2000, 103, 1–26. [https://doi.org/10.1016/S0377-0273\(00\)00195-5](https://doi.org/10.1016/S0377-0273(00)00195-5).
13. Arango-Galván, C., Prol-Ledesma, R.M., Flores-Márquez, E.L., Canet, C., Villanueva-Estrada, R.E., 2011, Shallow submarine and subaerial, low-enthalpy hydrothermal manifestations in Punta Banda, Baja California, Mexico: Geophysical and geochemical characterization, *Geothermics*, 40, 102–111.
14. Arango-Galván, C., Prol-Ledesma, R.M., Torres-Vera, M.A., 2015, Geothermal prospects in the Baja California Peninsula, *Geothermics*, 55, 39–57.
15. Araña, V.; Ortiz, R. The Canary Islands: Tectonics, Magmatism and Geodynamic Framework. In *Magmatism in Extensional Structural Settings: The Phanerozoic African Plate*; Springer: Berlin/Heidelberg, Germany, 1991; pp. 209–249. https://doi.org/10.1007/978-3-642-73966-8_9.
16. Armannsson, H. (2003).- CO₂ emissions from Geothermal Plants. *International Geothermal Conference*, Reykjavik, sept-2003. pp. 56-62.
17. Balogh, K., Ahijado, A., Casillas, R. y Fernández, C. (1999): Contributions to the chronology of the Basal Complex of Fuerteventura, Canary Islands. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, 90: 81-101. [https://doi.org/10.1016/S0377-0273\(99\)00008-6](https://doi.org/10.1016/S0377-0273(99)00008-6)
18. Barbier, E., 2002, Geothermal energy technology and current status: an overview, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 6, 3–65. [https://doi.org/10.1016/S1364-0321\(02\)00002-3](https://doi.org/10.1016/S1364-0321(02)00002-3)
19. Baubron, J.C., Allard, P., Toutain, J.P., 1990. Diffuse volcanic emissions of carbon dioxide from Vulcano Island, Italy. *Nature* 344, 51–53. <https://doi.org/10.1038/344051a0>,
20. Bedrosian, P. A., Maercklin, N., Weckmann, U., Bartov, Y., Ryberg, T., & Ritter, O. (2007). Lithology-derived structure classification from the joint interpretation of magnetotelluric and seismic models. *Geophysical Journal International*, 170(2), 737-748. <https://doi.org/10.1111/j.1365-246X.2007.03440.x>
21. Benà, E.; Ciotoli, G.; Ruggiero, L.; Coletti, C.; Bossew, P.; Massironi, M.; Mazzoli, C.; Mair, V.; Morelli, C.; Galgaro, A.; et al. Evaluation of tectonically enhanced radon in fault zones by quantification of the radon activity index. *Sci. Rep.* 2022, 12, 21586. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-26124-y>.
22. Berkhin, P. (2006). A Survey of Clustering Data Mining Techniques. In: Kogan, J., Nicholas, C., Teboulle, M. (eds) *Grouping Multidimensional Data*. Springer, Berlin, Heidelberg. https://doi.org/10.1007/3-540-28349-8_2

23. Berkhin, P.; Becher, J.D. Learning simple relations: Theory and applications. In Proceedings of the 2002 Siam International Conference on Data Mining, Arlington, VA, USA, 11–13 April 2002; Society for Industrial and Applied Mathematics: Philadelphia, PA, USA, 2002; pp. 420–436.;<https://doi.org/10.1137/1.9781611972726.25>.
24. Berry, M. J., & Linoff, G. S. (2009). Data mining techniques. John Wiley & Sons.
25. Bertani, R., 2016, Geothermal power generation in the world 2010–2014 update report, *Geothermics*, 60, 31–43. <https://doi.org/10.1016/j.geothermics.2015.11.003>
26. Bertrami, R.; Buonasorte, G.; Ceccarelli, A.; Lombardi, S.; Pieri, S.; Scandiffio, G. Soil gases in geothermal prospecting: Two case histories (Sabatini Volcanoes and Alban Hills, Latium, Central Italy). *J. Geophys. Res. Solid Earth* 1990, 95, 21475–21481. <https://doi.org/10.1029/JB095iB13p21475>.
27. Bloomberg, S.; Werner, C.; Rissmann, C.; Mazot, A.; Horton, T.; Gravley, D.; Kennedy, B.; Oze, C. Soil CO₂ emissions as a proxy for heat and mass flow assessment, Taupō Volcanic Zone, New Zealand. *Geochem. Geophys. Geosystems* 2014, 15, 4885–4904. <https://doi.org/10.1002/2014GC005327>.
28. Bloomfield, K., Moore, J., Neilson, R. (2003).- Geothermal Energy reduces greenhouse gases *Climate Change Research*, vol. marzo-abril 2003, pp. 77-79.
29. Cabassi, J., et al. (2020). Soil gas geochemistry for geothermal exploration: Multivariate statistical interpretation of soil gas surveys in volcanic-hydrothermal areas. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, 395, 106824.
30. Cabrera-Pérez, I., D’Auria, L., Soubestre, J., van Dorth, D. M., Cervigón-Tomico, G., Martín-Lorenzo, A., ... & Pérez, N. M. (2023). Ambient Noise Tomography studies for geothermal exploration in the Canary Islands. *Boletín geológico y minero*, 134(3), 7-25. <https://doi.org/10.21701/bolgeomin/134.3/001>
31. Cardellini, C., Chiodini, G., & Frondini, F. (2003). Application of stochastic simulation to CO₂ flux from soil: mapping and quantification of gas release. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 108(B9). <https://doi.org/10.1029/2002JB002165>
32. Carracedo Gomez, J. C. (2016). Evolución geológica del Archipiélago Canario (1981-2016). *Revista de la Academia Canaria de Ciencias*. <https://accedacris.ulpgc.es/handle/10553/77871>
33. Carracedo, J.C. The Canary Islands: An example of structural control on the growth of large oceanic-island volcanoes. *J. Volcanol. Geotherm. Res.* 1994, 60, 225–241. [https://doi.org/10.1016/0377-0273\(94\)90053-1](https://doi.org/10.1016/0377-0273(94)90053-1).

34. Carranza, E. J. M. (2011). Analysis and mapping of geochemical anomalies using logratio-transformed stream sediment data with censored values. *Journal of Geochemical Exploration*, 110(2), 167-185.
35. Carranza, E. J. M., & Hale, M. (2002). Where are regional geochemical anomalies likely to be located? *Journal of Geochemical Exploration*, 75(3), 117–138.
36. Cherkose, B. A., & Mizunaga, H. (2018). Resistivity imaging of Aluto-Langano geothermal field using 3-D magnetotelluric inversion. *Journal of African Earth Sciences*, 139, 307-318. <https://doi.org/10.1016/j.jafrearsci.2017.12.017>
37. Chiodini, G., Baldini, A., Barberi, F., Carapezza, M. L., Cardellini, C., Frondini, F., ... & Ranaldi, M. (2007). Carbon dioxide degassing at Latera caldera (Italy): evidence of geothermal reservoir and evaluation of its potential energy. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 112(B12). <https://doi.org/10.1029/2006JB004896>.
38. Chiodini, G., Cardellini, C., Caliro, S., Chiarabba, C., Frondini, F., & Ventura, G. (2008). Carbon dioxide Earth degassing and seismogenesis in central and southern Italy. *Geophysical Research Letters*, 35(6).
39. Chiodini, G.; Cioni, R.; Guidi, M.; Raco, B.; Marini, L. Soil CO₂ flux measurements in volcanic and geothermal areas. *Appl. Geochem.* 1998, 13, 543–552. [https://doi.org/10.1016/S0883-2927\(97\)00076-0](https://doi.org/10.1016/S0883-2927(97)00076-0).
40. Chiodini, G.; Granieri, D.; Avino, R.; Caliro, S.; Costa, A.; Werner, C. Carbon dioxide diffuse degassing and estimation of heat release from volcanic and hydrothermal systems. *J. Geophys. Res. Solid Earth* 2005, 110, n/a. <https://doi.org/10.1029/2004JB003542>.
41. Ciotoli, G.; Etiope, G.; Guerra, M.; Lombardi, S. The detection of concealed faults in the Ofanto Basin using the correlation between soil-gas fracture surveys. *Tectonophysics* 1999, 301, 321–332. [https://doi.org/10.1016/S0040-1951\(98\)00220-0](https://doi.org/10.1016/S0040-1951(98)00220-0).
42. Consejo Insular de la Energía de Gran Canaria, Estudio geoquímico de las emanaciones difusas en la atmósfera del suelo de Gran Canaria con fines de exploración geotérmica. 2017. Proyectos GEOTHERCAN (IPT-2011-1186-920000) y TERMOVOLCAN (RTC-2017-6627-3). <https://www.energiagrancanaria.com>
43. Coppo, N., Schnegg, P. A., Falco, P., & Costa, R. (2010). Conductive structures around Las Cañadas caldera, Tenerife (Canary Islands, Spain): A structural control. *Geologica Acta: an international earth science journal*, 8(1), 67-82. <http://www.sciencedirect.com>
44. Coppo, N., Schnegg, P. A., Heise, W., Falco, P., & Costa, R. (2008). Multiple caldera collapses inferred from the shallow electrical resistivity signature of the Las Cañadas caldera, Tenerife, Canary Islands. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, 170(3-4), 153-166.

45. Cowgill, M. C., Harvey, R. J., & Watson, L. T. (1999). A genetic algorithm approach to cluster analysis. *Computers & Mathematics with Applications*, 37(7), 99–108. [https://doi.org/10.1016/S0898-1221\(99\)00090-5](https://doi.org/10.1016/S0898-1221(99)00090-5)
46. Craig, H. The geochemistry of the stable carbon isotopes. *Geochim. Cosmochim. Acta* 1953, 3, 53–92. [https://doi.org/10.1016/0016-7037\(53\)90001-5](https://doi.org/10.1016/0016-7037(53)90001-5).
47. Cumming, W. (2009, February). Geothermal resource conceptual models using surface exploration data. In *Proceedings* (pp. 9-11). *Proceedings of Thirty-Fourth Workshop on Geothermal Reservoir Engineering*, Stanford University, Stanford, California.
48. D'Alessandro, W.; Brusca, L.; Cinti, D.; Gagliano, A.L.; Longo, M.; Pecoraino, G.; Pfanz, H.; Pizzino, L.; Raschi, A.; Voltattorni, N. Carbon dioxide and radon emissions from the soils of Pantelleria island (Southern Italy). *J. Volcanol. Geotherm. Res.* 2018, 362, 49–63. <https://doi.org/10.1016/j.jvolgeores.2018.08.007>.
49. D'Auria, L., Koulakov, I., Prudencio, J., Cabrera-Pérez, I., Ibáñez, J. M., Barrancos, J., ... & Pérez, N. M. (2022). Rapid magma ascent beneath La Palma revealed by seismic tomography. *Scientific Reports*, 12(1), 17654.
50. David, M. (2012). *Geostatistical ore reserve estimation*. Elsevier. ISBN 0-444-41532-7 (vol.2)
51. Del Pezzo, E., Gasparini, P., Mantovani, M. S. M., Martini, M., Capaldi, G., Gomes, Y. T., & Pece, R. (1981). A case of correlation between Rn anomalies and seismic activity on a volcano (Vulcano Island, Southern Tyrrhenian Sea). *Geophysical Research Letters*, 8(9), 962-965. <https://doi.org/10.1029/GL008i009p00962>
52. Di Giuseppe, M. G., Troiano, A., Patella, D., Piochi, M., & Carlino, S. (2018). A geophysical k-means cluster analysis of the Solfatara-Pisciarelli volcano-geothermal system, Campi Flegrei (Naples, Italy). *Journal of Applied Geophysics*, 156, 44-54. <https://doi.org/10.1016/j.jappgeo.2017.06.001>
53. Dickson, M. H., & Fanelli, M. (2013). *Geothermal energy: utilization and technology*. Routledge. UNESCO Publishing, 221 p.
54. Dionis, S.M., Melián, G., Rodríguez, F. et al. Diffuse volcanic gas emission and thermal energy release from the summit crater of Pico do Fogo, Cape Verde. *Bull Volcanol* 77, 10 (2015). <https://doi.org/10.1007/s00445-014-0897-4>
55. Dóniz, J.; Romero, C.; Coello, E.; Guillén, C.; Sánchez, N.; García-Cacho, L.; García, A. Morphological and statistical characterisation of recent mafic volcanism on Tenerife (Canary Islands, Spain). *J. Volcanol. Geotherm. Res.* 2008, 173, 185–195. <https://doi.org/10.1016/j.jvolgeores.2007.12.046>.

56. ESMAP (2012).- Manual de Geotermia: Cómo planificar y financiar la generación de electricidad.
57. Etiope, G., & Martinelli, G. (2002). Migration of carrier and trace gases in the geosphere: an overview. *Physics of the earth and planetary interiors*, 129(3-4), 185-204. [https://doi.org/10.1016/S0031-9201\(01\)00292-8](https://doi.org/10.1016/S0031-9201(01)00292-8)
58. Etiope, G.; Schoell, M. Abiotic gas: Atypical, but not rare. *Elements* 2014, 10, 291–296. <https://doi.org/10.2113/gselements.10.4.291>.
59. Fernandez, M., Garcia de la Noceda, Sanchez-Guzman, J.: The Evolution of Geothermal Energy in Spain - Country Update (2005-2009). *Proceedings World Geothermal Congress 2010. Bali, Indonesia, 25-29 April 2010*.
60. Finlayson, J.B. A soil gas survey over Rotorua geothermal field, Rotorua, New Zealand. *Geothermics* 1992, 21, 27–41. [https://doi.org/10.1016/0375-6505\(92\)90076-L](https://doi.org/10.1016/0375-6505(92)90076-L).
61. Fournier, R. O. (1991). Water geothermometers applied to geothermal energy. *Applications of geochemistry in geothermal reservoir development*, 37-69.
62. Frédéric Gibou and Ronald Fedkiw. A fast hybrid k-means level set algorithm for segmentation. In *4th Annual Hawaii International Conference on Statistics and Mathematics*, 2005.
63. Friðleifsson, G. Ó., Elders, W. A., & Albertsson, A. (2014). The concept of the Iceland deep drilling project. *Geothermics*, 49, 2-8. <https://doi.org/10.1016/j.geothermics.2013.03.004>
64. Friðleifsson, G.Ó., Elders, W.A., 2005, The Iceland Deep Drilling Project: A search for deep unconventional geothermal resources, *Geothermics*, 34, 269–285.
65. Fridriksson, T.; Padrón, E.; Óskarsson, F.; Pérez, N.M. Application of diffuse gas flux measurements and soil gas analysis to geothermal exploration and environmental monitoring: Example from the Reykjanes geothermal field, SW Iceland. *Renew. Energy* 2016, 86, 1295–1307. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2015.09.034>.
66. Frondini, F.; Chiodini, G.; Caliro, S.; Cardellini, C.; Granieri, D.; Ventura, G. Diffuse CO₂ degassing at Vesuvio, Italy. *Bull. Volcanol.* 2004, 66, 642–651. <https://doi.org/10.1007/s00445-004-0346-x>.
67. Fullea, J., Camacho, A. G., Negredo, A. M., & Fernández, J. (2015). The Canary Islands hot spot: New insights from 3D coupled geophysical–petrological modelling of the lithosphere and uppermost mantle. *Earth and Planetary Science Letters*, 409, 71-88.
68. Fuster, J.M.; Hernández-Pacheco, A.; Muñoz, M.; Rodríguez Badiola, E.; García Cacho, L. *Geología y Volcanología de las Islas Canarias: Gran Canaria*; Instituto “Lucas

- Mallada” (CSIC): Zaragoza, Spain, 1968. Available online: <http://hdl.handle.net/10261/3307> (accessed on 15 April 2023).
69. Gad, A.F. Pygad: An intuitive genetic algorithm python library. *Multimed. Tools Appl.* 2024, 83, 58029–58042. <https://doi.org/10.1007/s11042-023-17167-y>.
70. Galindo, I. (2005). Estructura volcano-tectónica y emisión difusa de gases de Tenerife (Islas Canarias). Universidad de Barcelona, Spain.
71. Geoplat Y Bioplat, Guía de financiación para tecnologías y proyectos de bioenergía y geotermia, noviembre 2016. <https://www.geoplat.org>
72. Gerlach, T. M. (1991). Present-day CO₂ emissions from volcanos. *Eos, Transactions American Geophysical Union*, 72(23), 249-255. <https://doi.org/10.1029/90EO10192>
73. Ghezelbash, R.; Maghsoudi, A.; Carranza, E.J.M. Optimization of geochemical anomaly detection using a novel genetic k-means clustering (GKMC) algorithm. *Comput. Geosci.* 2020, 134, 104335. <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2019.104335>.
74. Ghezelbash, R.; Maghsoudi, A.; Shamekhi, M.; Pradhan, B.; Daviran, M. Genetic algorithm to optimize the SVM and K-Means algorithms for mapping of mineral prospectivity. *Neural Comput. Appl.* 2023, 35, 719–733. <https://doi.org/10.1007/s00521-022-07766-5>.
75. Giammanco, S., Gurrieri, S. & Valenza, M. Fault-controlled Soil CO₂ Degassing and Shallow Magma Bodies: Summit and Lower East Rift of Kilauea Volcano (Hawaii), 1997. *Pure appl. geophys.* 163, 853–867 (2006). <https://doi.org/10.1007/s00024-006-0039-9>
76. Giammanco, S.; Sims, K.W.W.; Neri, M. Measurements of ²²⁰Rn and ²²²Rn and CO₂ emissions in soil and fumarole gases on Mt. Etna volcano (Italy): Implications for gas transport and shallow ground fracture. *Geochem. Geophys. Geosystems* 2007, 8, n/a. <https://doi.org/10.1029/2007GC001644>.
77. Gibou, F.; Fedkiw, R. A fast hybrid k-means level set algorithm for segmentation. In *Proceedings of the 4th Annual Hawaii International Conference on Statistics and Mathematics*, Honolulu, HI, USA, 9–11 January 2005; pp. 281–291. Available online: <https://physbam.stanford.edu/~fedkiw/papers/stanford2002-08.pdf> (accessed on 6 jun. 2022).
78. Giggenbach, W.F. (1988). “Geothermal solute equilibria. Derivation and application of Na-K-Mg-Ca ge indicators.” *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 52(12), 2749–2765. [https://doi.org/10.1016/0016-7037\(88\)90143-3](https://doi.org/10.1016/0016-7037(88)90143-3)
79. Giggenbach, W.F. (1996). Chemical Composition of Volcanic Gases. In: *Monitoring and Mitigation of Volcano Hazards*. Springer, Berlin, Heidelberg. https://doi.org/10.1007/978-3-642-80087-0_7

80. Glueckauf, E. (1946). A micro-analysis of the helium and neon contents of air. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 185(1000), 98-119. <https://doi.org/10.1098/rspa.1946.0007>
81. Gobierno de Canarias. Manual de geotermia en Canarias. Alta, media y baja entalpía: generación de electricidad y Aprovechamiento directo del calor. 2017. <https://www.gobiernodecanarias.org/energia/servicios/publicaciones/>
82. Gudmundsdottir, H., & Horne, R. N. (2020, February). Prediction modeling for geothermal reservoirs using deep learning. In 45th workshop on geothermal reservoir engineering. Stanford, California: Stanford University (pp. 1-12).
83. Guillou, H., Carracedo, J. C., Paris, R., & Torrado, F. J. P. (2004). Implications for the early shield-stage evolution of Tenerife from K/Ar ages and magnetic stratigraphy. *Earth and Planetary Science Letters*, 222(2), 599-614. <https://doi.org/10.1016/j.epsl.2004.03.012>
84. Gutierrez, E. R. S., & Alvarado, I. S. T. (2010). Escenario futuro de explotación de la energía geotérmica: hacia un desarrollo sustentable. *Re#vista Digital Universitaria*, 11(10), 26. <https://www.revista.unam.mx/vol.11/num10/art95/>
85. Hanson, M. C., Oze, C., & Horton, T. W. (2014). Identifying blind geothermal systems with soil CO₂ surveys. *Applied Geochemistry*, 50, 106-114. <https://doi.org/10.1016/j.apgeochem.2014.08.009>
86. Hayes, D. E., & Rabinowitz, P. D. (1975). Mesozoic magnetic lineations and the magnetic quiet zone off northwest Africa. *Earth and Planetary Science Letters*, 28(2), 105-115. [https://doi.org/10.1016/0012-821X\(75\)90217-4](https://doi.org/10.1016/0012-821X(75)90217-4)
87. Hernández, P. A., Padilla, G., Padrón, E., Pérez, N. M., Calvo, D., Nolasco, D., ... & Sumino, H. (2012). Analysis of long-and short-term temporal variations of the diffuse CO₂ emission from Timanfaya volcano, Lanzarote, Canary Islands. *Applied geochemistry*, 27(12), 2486-2499. <https://doi.org/10.1016/j.apgeochem.2012.08.008>
88. Hernández, P., Pérez, N., Salazar, J., Sato, M., Notsu, K., & Wakita, H. (2000). Soil gas CO₂, CH₄, and H₂ distribution in and around Las Cañadas caldera, Tenerife, Canary Islands, Spain. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, 103(1-4), 425-438. [https://doi.org/10.1016/S0377-0273\(00\)00235-3](https://doi.org/10.1016/S0377-0273(00)00235-3)
89. Hernández, P.; Pérez, N.; Salazar, J.; Reimer, M.; Notsu, K.; Wakita, H. Radon and helium in soil gases at Cañadas caldera, Tenerife, Canary Islands, Spain. *J. Volcanol. Geotherm. Res.* 2004, 131, 59–76. [https://doi.org/10.1016/S0377-0273\(03\)00316-0](https://doi.org/10.1016/S0377-0273(03)00316-0).
90. Hernández, P.A., Padilla, G., Barrancos, J. et al. Geochemical evidences of seismo-volcanic unrests at the NW rift zone of Tenerife, Canary Islands, inferred from diffuse CO₂ emission. *Bull Volcanol* 79, 30 (2017). <https://doi.org/10.1007/s00445-017-1109-9>

91. Hernández, P.A.; Pérez, N.M.; Salazar, J.M.; Nakai, S.; Notsu, K.; Wakita, H. Diffuse emission of carbon dioxide, methane, and helium-3 from Teide Volcano, Tenerife, Canary Islands. *Geophys. Res. Lett.* 2000, 27, 2389–2392. <https://doi.org/10.1029/98GL02561>.
92. Hilton, D. R., Ramirez, C. J., Mora-Amador, R., Fischer, T. P., Füre, E., Barry, P. H., & Shaw, A. M. (2010). Monitoring of temporal and spatial variations in fumarole helium and carbon dioxide characteristics at Poás and Turrialba volcanoes, Costa Rica (2001-2009). *Geochemical Journal*, 44(5), 431-440. <https://doi.org/10.2343/geochemj.1.0085>
93. Hinkle, M. E. (1994). Environmental conditions affecting concentrations of He, CO₂, O₂ and N₂ in soil gases. *Applied Geochemistry*, 9(1), 53-63. [https://doi.org/10.1016/0883-2927\(94\)90052-3](https://doi.org/10.1016/0883-2927(94)90052-3)
94. Hinkle, M., & Kilburn, J. E. (1979). The use of vacutainer tubes for collection of soil samples for helium analysis (No. 79-1441). US Geological Survey. <https://doi.org/10.3133/ofr791441>
95. Instituto para la Diversificación y Ahorro de la Energía (IDAE). Manual de geotermia. Depósito Legal: M-37243-2008. ISBN: 978-84-96680-35-7
96. Instituto Geológico y Minero de España (IGME), Investigación geotérmica en el área central de la isla de Tenerife, Informe final, 1984. 172910_0000003.pdf
97. Instituto Geológico y Minero de España-UE (1994).- Evaluation of high-enthalpy geothermal possibilities in Tenerife, Canary Islands. Proyecto Joule ID: JOUG0003. http://cordis.europa.eu/project/rcn/268_es.html
98. Instituto Geológico y Minero de España (IGME). Análisi previo de la viabilidad Técnico -Económica de la explotación de Energía Geotérmica en distintas zonas (Tenerife, La Palma, Orense y Vallés). Informe final, 1984. 100_0001.pdf
99. Irwin, W. P., & Barnes, I. (1980). Tectonic relations of carbon dioxide discharges and earthquakes. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 85(B6), 3115-3121. <https://doi.org/10.1029/JB085iB06p03115>
100. Jain, A.K. Data clustering: 50 years beyond K-Means. *Pattern Recognit. Lett.* 2010, 31, 651–666. <https://doi.org/10.1016/j.patrec.2009.09.011>.
101. Jennejohn, D. (2010).-Green Jobs Through Geothermal Energy. US Geothermal Energy Association. 22 pp. Geothermal Energy: International Market Update. GEA – US Geothermal Energy Association.
102. Kanungo, T., Mount, D. M., Netanyahu, N. S., Piatko, C. D., Silverman, R., & Wu, A. Y. (2002, June). A local search approximation algorithm for k-means clustering. In *Proceedings of the eighteenth annual symposium on Computational geometry* (pp. 10-18). <https://doi.org/10.1145/513400.513402>

103. Krishna, K.; Murty, M.N. Genetic K-Means algorithm. *IEEE Trans. Syst. Man Cybern. Part B Cybern.* 1999, 29, 433–439. <https://doi.org/10.1109/3477.764879>.
104. Krochert, J., 2009. Volcanic Evolution of Southern Tenerife (Canary Islands) During the Pleistocene and Holocene. *Universitat Stuttgart*.
105. Kröchert, J.; Buchner, E. Age distribution of cinder cones within the Bandas del Sur Formation, southern Tenerife, Canary Islands. *Geol. Mag.* 2008, 146, 161–172. <https://doi.org/10.1017/S001675680800544X>.
106. Kronthaler F. (2022). *Statistics Applied With Excel*. Ed. Springer. ISBN 978-3-662-64318-1. <https://link.springer.com/content/pdf/10.1007/978-3-662-64319-8.pdf>
107. Lewicki, J. L., & Oldenburg, C. M. (2004). Strategies for detecting hidden geothermal systems by near-surface gas monitoring. <https://escholarship.org/uc/item/32t1m8wm>
108. Lloyd, S. (1982). Least squares quantization in PCM. *IEEE transactions on information theory*, 28(2), 129-137. <https://doi.org/10.1109/TIT.1982.1056489>
109. Lombardi, S., & Voltattorni, N. (2010). Rn, He and CO₂ soil gas geochemistry for the study of active and inactive faults. *Applied Geochemistry*, 25(8), 1206-1220.
110. Lund, J. W., & Boyd, T. L. (2016). Direct utilization of geothermal energy 2015 worldwide review. *Geothermics*, 60, 66-93. <https://doi.org/10.1016/j.geothermics.2015.11.004>
111. Marrero-Díaz, R., López, D., Pérez, N.M. et al. Carbon dioxide and helium dissolved gases in groundwater at central Tenerife Island, Canary Islands: chemical and isotopic characterization. *Bull Volcanol* 77, 86 (2015). <https://doi.org/10.1007/s00445-015-0969-0>
112. Martí, J., & Wolff, J. A. (2000). Introduction: the geology and geophysics of Tenerife. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, 103(1-4), vii-x. [https://doi.org/10.1016/S0377-0273\(00\)00213-4](https://doi.org/10.1016/S0377-0273(00)00213-4)
113. Martín Lorenzo, A., Copete-Murillo, K., Reyes, Á., Gironés, A., Melián, G. V., Asensio-Ramos, M., Rodríguez, F., Padrón, E., Padilla, G. D., Hernández, P. A., and Pérez, N. M.: Soil gas CO₂ concentration, isotopic ratio and efflux measurements for geothermal exploration in La Palma, Canary Islands., *EGU General Assembly 2024*, Vienna, Austria, 14–19 Apr 2024, EGU24-12301, <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu24-12301>
114. Martín-Lorenzo, A., Rodríguez, F., Alonso, M., Amonte, C., Melián, G. V., Asensio-Ramos, M., ... & Pérez, N. M. (2021, April). A detailed soil gas physical-chemical survey for geothermal exploration at Tenerife, Canary Islands. *EGU General Assembly Conference Abstracts 2021* (pp. EGU21-15066). 10.5194/egusphere-egu21-15066.

115. Martín-Lorenzo, A.; Pérez, N.M.; Melián, G.V.; Asensio-Ramos, M.; Padrón, E.; Hernández, P.A.; Rodríguez, F.; D'Auria, L. Soil gas physico-chemical survey for geothermal exploration at Madre del Agua mining grid in the Tenerife SRZ volcano, Canary Islands. *Geothermics* 2024, 122, 103096. <https://doi.org/10.1016/j.geothermics.2024.103096>.
116. Massachusetts Institute of Technology, MIT, 2006, The Future of Geothermal Energy: Impact of Enhanced Geothermal Systems (EGS) on the United States in the 21st Century. MIT, USA, 372 p.; https://www1.eere.energy.gov/geothermal/pdfs/future_geo_energy.pdf
117. Maulik, U., & Bandyopadhyay, S. (2000). Genetic algorithm-based clustering technique. *Pattern recognition*, 33(9), 1455-1465. [https://doi.org/10.1016/S0031-3203\(99\)00137-5](https://doi.org/10.1016/S0031-3203(99)00137-5)
118. Melián, G., Tassi, F., Pérez, N. et al. A magmatic source for fumaroles and diffuse degassing from the summit crater of Teide Volcano (Tenerife, Canary Islands): a geochemical evidence for the 2004–2005 seismic–volcanic crisis. *Bull Volcanol* 74, 1465–1483 (2012). <https://doi.org/10.1007/s00445-012-0613-1>
119. Muraoka, H., Uchida, T., Sasada, M., Yagi, M., Akaku, K., Sasaki, M., ... & Tanaka, S. (1998). Deep geothermal resources survey program: igneous, metamorphic and hydrothermal processes in a well encountering 500 C at 3729 m depth, Kakkonda, Japan. *Geothermics*, 27(5-6), 507-534. [https://doi.org/10.1016/S0375-6505\(98\)00031-5](https://doi.org/10.1016/S0375-6505(98)00031-5).
120. Nicholson, K. *Geothermal Fluids: Chemistry and Exploration Techniques*; Springer: Berlin/Heidelberg, Germany, 1993. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-77844-5>.
121. Notsu, K., Sugiyama, K., Hosoe, M., Uemura, A., Shimoike, Y., Tsunomori, F., ... & Hernández, P. A. (2005). Diffuse CO₂ efflux from Iwojima volcano, Izu-Ogasawara arc, Japan. *Journal of volcanology and geothermal research*, 139(3-4), 147-161. <https://doi.org/10.1016/j.jvolgeores.2004.08.003>
122. Ohba, T., Yaguchi, M., Nishino, K., Numanami, N., Tsunogai, U., Ito, M., & Shingubara, R. (2019). Time variation in the chemical and isotopic composition of fumarolic gasses at Kusatsu-Shirane Volcano, Japan. *Frontiers in Earth Science*, 7, 249. <https://doi.org/10.3389/feart.2019.00249>
123. Ortiz, R., Araña, V., Astiz, M., & García, A. (1986). Magnetotelluric study of the Teide (Tenerife) and Timanfaya (Tanzarote) volcanic areas. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, 30(3-4), 357-377. [https://doi.org/10.1016/0377-0273\(86\)90061-2](https://doi.org/10.1016/0377-0273(86)90061-2)
124. Padilla, G. D., Hernández, P. A., Padrón, E., Barrancos, J., Pérez, N. M., Melián, G., ... & Hernández, I. (2013). Soil gas radon emissions and volcanic activity at El Hierro (Canary Islands): The 2011-2012 submarine eruption. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*, 14(2), 432-447. <https://doi.org/10.1029/2012GC004375>

125. Pedregosa, F.; Varoquaux, G.; Gramfort, A.; Michel, V.; Thirion, B.; Grisel, O.; Blondel, M.; Prettenhofer, P.; Weiss, R.; Dubourg, V.; et al. Scikit-learn: Machine learning in Python. *J. Mach. Learn. Res.* 2011, 12, 2825–2830. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1201.0490>.
126. Pérez, N. M., Hernández, P. A., Padrón, E., Melián, G., Nolasco, D., Barrancos, J., ... & Chiodini, G. (2013). An increasing trend of diffuse CO₂ emission from Teide volcano (Tenerife, Canary Islands): geochemical evidence of magma degassing episodes. *Journal of the Geological Society*, 170(4), 585-592. <https://doi.org/10.1144/jgs2012-125>
127. Pérez, N. M., Padrón, E., Melián, G., Hernández, P. A., Padilla, G., Barrancos, J., ... & Calvo, D. (2024). Volcanic soil gas 4He/CO₂ ratio: a useful geochemical tool for real-time eruption forecasting. *Scientific Reports*, 14(1), 7985. <https://doi.org/10.1038/s41598-024-57666-y>
128. Pérez, N.M.; Hernández, P.A.; Padrón, E.; Melián, G.; Marrero, R.; Padilla, G.; Barrancos, J.; Nolasco, D. Precursory subsurface ²²²Rn and ²²⁰Rn degassing signatures of the 2004 seismic crisis at Tenerife, Canary Islands. *Pure Appl. Geophys.* 2007, 164, 2431–2448. <https://doi.org/10.1007/s00024-007-0280-x>.
129. Piña-Varas, P., Ledo Fernández, J., Queralt i Capdevila, P., Marcuello Pascual, A., Mitjanas Colls, G., & Martínez Van Dorth, D. (2023). Magnetotelluric applied to deep geothermal exploration: Canary Islands. *Boletín Geológico y Minero*, 2023, vol. 134, num. 3, p. 49-58. <https://doi.org/10.21701/bolgeomin/134.3/004>
130. Piña-Varas, P.; Ledo, J.; Queralt, P.; Marcuello, A.; Bellmunt, F.; Hidalgo, R.; Messeiller, M. 3-D Magnetotelluric Exploration of Tenerife Geothermal System (Canary Islands, Spain). *Surv. Geophys.* 2014, 35, 1045–1064. <https://doi.org/10.1007/s10712-014-9280-4>.
131. Pous, J., Heise, W., Schnegg, P. A., Muñoz, G., Martí, J., & Soriano, C. (2002). Magnetotelluric study of the Las Cañadas caldera (Tenerife, Canary Islands): structural and hydrogeological implications. *Earth and Planetary Science Letters*, 204(1-2), 249-263. [https://doi.org/10.1016/S0012-821X\(02\)00956-1](https://doi.org/10.1016/S0012-821X(02)00956-1)
132. Purnomo, B. J., & Pichler, T. (2015). Geothermal systems on the island of Bali, Indonesia. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, 304, 349-358. <https://doi.org/10.1016/j.jvolgeores.2015.09.016>.
133. Reimann, C.; Filzmoser, P.; Garrett, R.; Dutter, R. *Statistical Data Analysis Explained: Applied Environmental Statistics with R*; John Wiley & Sons: Hoboken, New Jersey, USA, 2011. Available online: <https://books.google.es> (accessed on 20 Feb. 2022).
134. Rodríguez Fernández, L.R.; López Olmedo, F.; Oliveira, J.T.; Matas, J.; Martín-Serrano, A.; Martín Parra, L.M.; Terrinha, P. Mapa Geológico de ESPAÑA y Portugal 1/1.000.

- 000; Geological and Mining Institute of Spain (IGME): Madrid, Spain; National Laboratory of Energy and Geology (LNGE, Portugal): Lisbon, Portugal, 2014.
135. Rodríguez-Losada, J.A., Eff-Darwich, A., Gutiérrez, L.E.H. et al. Characterizing regional radon-in-air levels in rocks of the Canary Islands (Spain): new data and results. *Environ Geochem Health* 44, 4359–4379 (2022). <https://doi.org/10.1007/s10653-022-01202-2>
136. Rodríguez, F.; Pérez, N.M.; Melián, G.V.; Padrón, E.; Hernández, P.A.; Asensio-Ramos, M.; Padilla, G.D.; Barrancos, J.; D'Auria, L. Exploration of deep-seated geothermal reservoirs in the Canary Islands by means of soil CO₂ degassing surveys. *Renew. Energy* 2021, 164, 1017–1028. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2020.09.065>.
137. Rodríguez, F.; Pérez, N.M.; Padrón, E.; Melián, G.; Hernández, P.A.; Asensio-Ramos, M.; Dionis, S.; López, G.; Marrero, R.; Padilla, G.D.; et al. Diffuse helium and hydrogen degassing to reveal hidden geothermal resources in oceanic volcanic islands: The Canarian archipelago case study. *Surv. Geophys.* 2015, 36, 351–369. <https://doi.org/10.1007/s10712-015-9320-8>.
138. Rodríguez, F.; Pérez, N.M.; Padrón, E.; Melián, G.; Piña-Varas, P.; Dionis, S.; Barrancos, J.; Padilla, G.D.; Hernández, P.A.; Marrero, R.; et al. Surface geochemical and geophysical studies for geothermal exploration at the southern volcanic rift zone of Tenerife, Canary Islands, Spain. *Geothermics* 2015, 55, 195–206. <https://doi.org/10.1016/j.geothermics.2015.02.007>.
139. Roest, W.R., Dañobeitia, J.J., Verhoef, J. et al. Magnetic anomalies in the canary basin and the Mesozoic evolution of the central North Atlantic. *Mar Geophys Res* 14, 1–24 (1992). <https://doi.org/10.1007/BF01674063>
140. Rousseeuw, P. J. (1987). Silhouettes: a graphical aid to the interpretation and validation of cluster analysis. *Journal of computational and applied mathematics*, 20, 53–65. [https://doi.org/10.1016/0377-0427\(87\)90125-7](https://doi.org/10.1016/0377-0427(87)90125-7)
141. Rowland, J. V., & Sibson, R. H. (2004). Structural controls on hydrothermal flow in a segmented rift system, Taupo Volcanic Zone, New Zealand. *Geofluids*, 4(4), 259–283. <https://doi.org/10.1111/j.1468-8123.2004.00091.x>
142. Salazar, J. M. L., Hernández, P. A., Melián, G., Galindo, L., Salazar, P., Marrero Hernández, R. V., ... & Pérez, N. M. (2003). Emisiones naturales de CO₂ y otros volátiles asociadas a la actividad volcánica en las Islas Canarias. https://repositorio.aemet.es/bitstream/20.500.11765/6899/1/Emisiones_Salazar.pdf
143. Salazar, J. M., Hernández, P. A., Pérez, N. M., Melián, G., Álvarez, J., Segura, F., & Notsu, K. (2001). Diffuse emission of carbon dioxide from Cerro Negro volcano, Nicaragua, Central America. *Geophysical research letters*, 28(22), 4275–4278. <https://doi.org/10.1029/2001GL013709>

144. Sánchez-Guzman, J., García de la Noceda, C., The evolution of geothermal energy in Spain - country update (2005e2009), in: Proceedings World Geothermal Congress 2010, 2010. Bali, Indonesia, April 25e29, 2010.
145. Scott, S., Gunnarsson, I., Arnórsson, S., & Stefánsson, A. (2014). Gas chemistry, boiling and phase segregation in a geothermal system, Hellisheidi, Iceland. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 124, 170-189. <https://doi.org/10.1016/j.gca.2013.09.027>.
146. Semprini, L., & Kruger, P. (1984). Relationship of radon concentration to spatial and temporal variations of reservoir thermodynamic conditions in the Cerro Prieto geothermal field. *Geothermics*, 13(1-2), 103-115. [https://doi.org/10.1016/0375-6505\(84\)90010-5](https://doi.org/10.1016/0375-6505(84)90010-5)
147. Schmincke, H. U., & Sumita, M. (2010). Geological evolution of the Canary Islands. Görres-Verlag, Koblenz, Germany, 200.
148. Sinclair, A.J. (1974). *Applications of probability graphs in mineral exploration*. Association of Exploration Geochemists. Ass. Explor. Geochemists, Spec. Vol.; Can; Da. 1976; No 4; Pp. 1-95; Bibl. 5 P.; 62 Ill.
149. Sinclair, A.J. Selection of threshold values in geochemical data using probability graphs. *J. Geochem. Explor.* 1974, 3, 129–149. [https://doi.org/10.1016/0375-6742\(74\)90030-2](https://doi.org/10.1016/0375-6742(74)90030-2).
150. Song, YC., Meng, HD., O’Grady, M.J. et al. The application of cluster analysis in geophysical data interpretation. *Comput Geosci* 14, 263–271 (2010). <https://doi.org/10.1007/s10596-009-9150-1>
151. Spycher, N. F., & Reed, M. H. (1989). As (III) and Sb (III) sulfide complexes: an evaluation of stoichiometry and stability from existing experimental data. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 53(9), 2185-2194. [https://doi.org/10.1016/0016-7037\(89\)90342-6](https://doi.org/10.1016/0016-7037(89)90342-6)
152. Stober, I., & Bucher, K. (2021). Geothermal energy resources. In *Geothermal Energy: From Theoretical Models to Exploration and Development* (pp. 33-42). Cham: Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-030-71685-1_3
153. Stolper, E., & Holloway, J. R. (1988). Experimental determination of the solubility of carbon dioxide in molten basalt at low pressure. *Earth and Planetary Science Letters*, 87(4), 397-408. [https://doi.org/10.1016/0012-821X\(88\)90004-0](https://doi.org/10.1016/0012-821X(88)90004-0)
154. Tardani, D., Taussi, M., Robidoux, P., Sánchez-Alfaro, P., Pérez-Flores, P., Serrano, G., ... & Morata, D. (2024). Gas geothermometry, soil CO₂ degassing, and heat release estimation to assess the geothermal potential of the Alpehue Hydrothermal Field (Sollipulli volcano, Southern Chile). *Geothermics*, 122, 103092. <https://doi.org/10.1016/j.geothermics.2024.103092>
155. Torgersen, T.; Clarke, W.B. Helium accumulation in groundwater, I: An evaluation of sources and the continental flux of crustal 4He in the Great Artesian Basin, Australia.

- Geochim. Cosmochim. Acta 1985, 49, 1211–1218. [https://doi.org/10.1016/0016-7037\(85\)90011-0](https://doi.org/10.1016/0016-7037(85)90011-0).
156. Valentin, A., Albert-Beltran, J. F., & Diez, J. L. (1990). Geochemical and geothermal constraints on magma bodies associated with historic activity, Tenerife (Canary Islands). *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, 44(3-4), 251-264. [https://doi.org/10.1016/0377-0273\(90\)90020-G](https://doi.org/10.1016/0377-0273(90)90020-G).
157. Verhoef, J., Collette, B.J., Dañobeitia, J.J. et al. Magnetic anomalies off West-Africa (20–38° N). *Marine Geophysical Researches* 13, 81–103 (1991). <https://doi.org/10.1007/BF00286283>
158. Voltattorni, N., Gasparini, A., Cinti, D., Galli, G., & Procesi, M. (2024). Analyzing the $^{222}\text{Rn}/^{220}\text{Rn}$ Ratio in a Seismic Area: A Reliable Method to Understand the Development of Active Structural Discontinuities in Earthquake Surveillance and Sustainability. *Sustainability* (2071-1050), 16(23).
159. Voltattorni, N.; Quattrocchi, F.; Sciarra, A. The application of soil gas technique to geothermal exploration: Study of “hidden” potential geothermal systems. In *Proceedings of the Proceedings World Geothermal Congress, Bali, Indonesia, 25–30 April 2010*. Available online: <https://www.researchgate.net/publication/228361425> (accessed on 23 March 2024).
160. Wendel, M., Hiegl, M., Jaudin, F., & Poux, A. (2010, April). GEOFAR—financing geothermal energy in European regions. In *World Geothermal Congress 2010* (pp. 11-p).
161. Whitehead Jr, J. A., Dick, H. J., & Schouten, H. (1984). A mechanism for magmatic accretion under spreading centres. *Nature*, 312(5990), 146-148. <https://doi.org/10.1038/312146a0>
162. Yasuoka, Y., Igarashi, G., Ishikawa, T., Tokonami, S., & Shinogi, M. (2006). Evidence of precursor phenomena in the Kobe earthquake obtained from atmospheric radon concentration. *Applied Geochemistry*, 21(6), 1064-1072. <https://doi.org/10.1016/j.apgeochem.2006.02.019>
163. Zhou, S. G., Zhou, K. F., & Wang, J. L. (2020). Geochemical metallogenic potential based on cluster analysis: A new method to extract valuable information for mineral exploration from geochemical data. *Applied Geochemistry*, 122, 104748. <https://doi.org/10.1016/j.apgeochem.2020.104748>
164. Zuo, R., Xiong, Y., Wang, J., & Carranza, E. J. M. (2019). Deep learning and its application in geochemical mapping. *Earth-science reviews*, 192, 1-14. <https://doi.org/10.1016/j.earscirev.2019.02.023>

Anexo A

1. Mapas temáticos y perfiles geoquímicos de diferentes configuraciones evaluadas

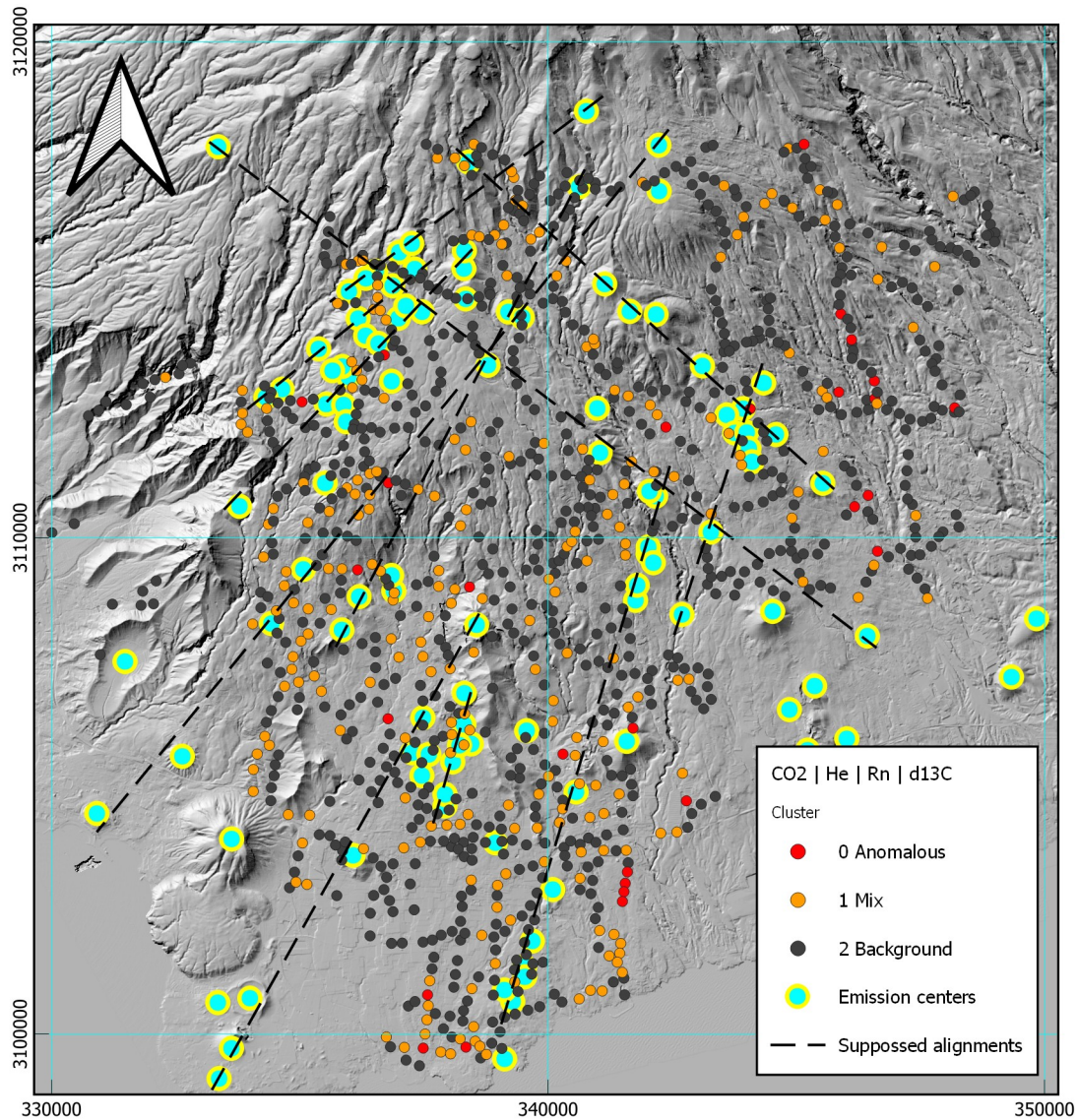


Figura A1. Distribución espacial de los clusters geoquímicos y centros eruptivos en la zona del rift sur de Tenerife. Los puntos representan las muestras clasificadas por análisis de clustering multivariable (CO_2 , He, ^{222}Rn , $\delta^{13}\text{C}$), distinguiéndose tres poblaciones: fondo geoquímico (gris), mezcla (naranja) y anómala (rojo). Los símbolos con halo verde indican los centros de emisión asociados a conos monogenéticos. Las líneas negras discontinuas representan alineamientos estructurales inferidos, que reflejan patrones preferenciales de emplazamiento volcánico. La coincidencia espacial entre estos alineamientos y las anomalías geoquímicas sugiere una fuerte influencia tectónica en la migración de fluidos magmático-hidrotermales hacia superficie.

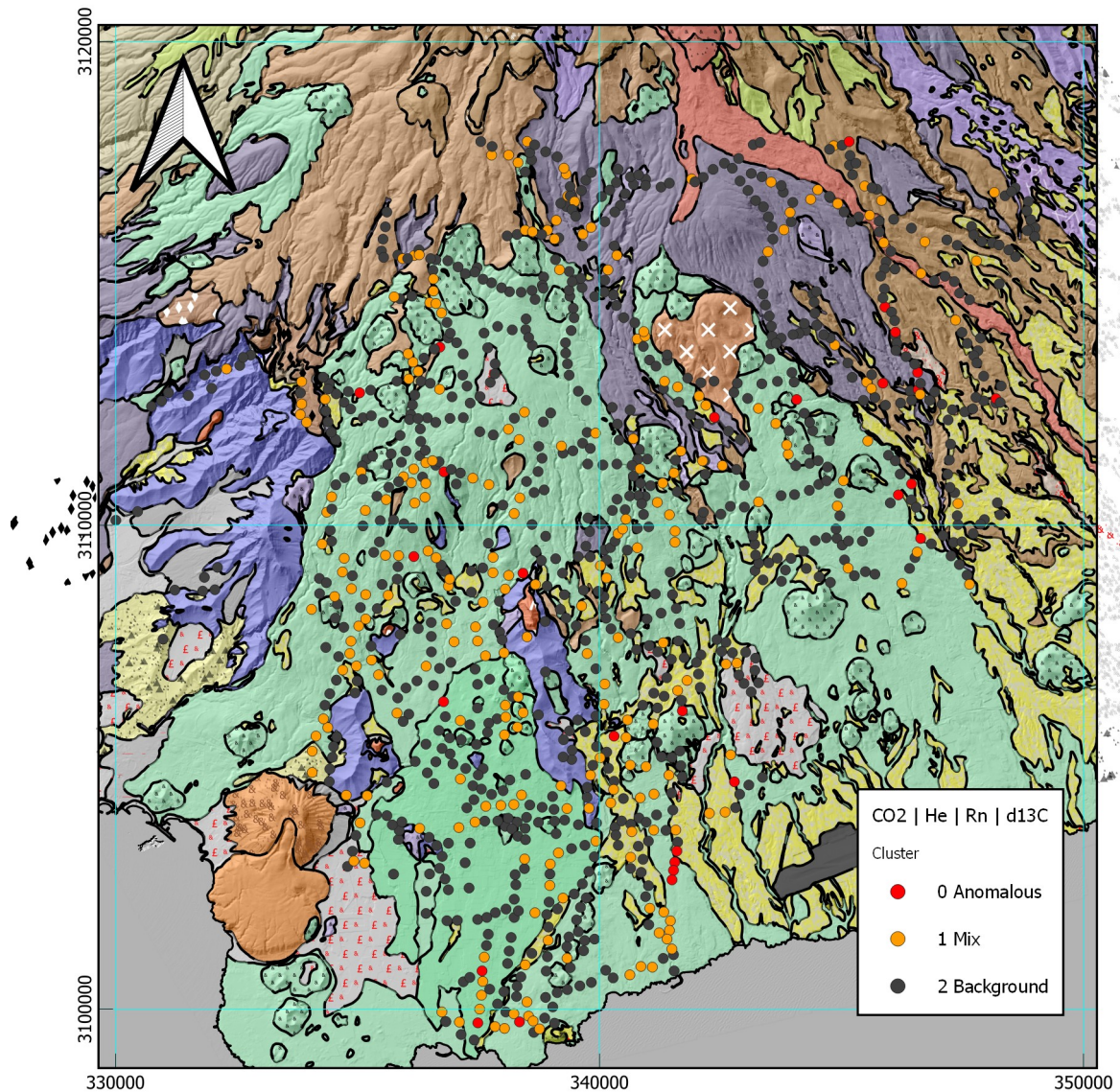


Figura A2. Superposición de los clusters geoquímicos sobre el mapa geológico de la zona de estudio en el rift sur de Tenerife. Los puntos representan las muestras clasificadas mediante clustering multivariable en función de los parámetros CO_2 , He, ^{222}Rn y $\delta^{13}\text{C}$, distinguiéndose tres grupos: fondo geoquímico (negro), mezcla (naranja) y anomalías (rojo). El fondo muestra la cartografía geológica detallada, que refleja la distribución espacial de las distintas unidades volcánicas y estructuras aflorantes. La coincidencia de anomalías geoquímicas con ciertas formaciones geológicas, especialmente en zonas de contacto entre unidades y a lo largo de alineaciones estructurales, sugiere un control geológico sobre la migración de gases desde profundidad y refuerza la hipótesis de desgasificación magmático-hidrotermal oculta en el subsuelo.

Scatter Matrix Log Zscore Top10

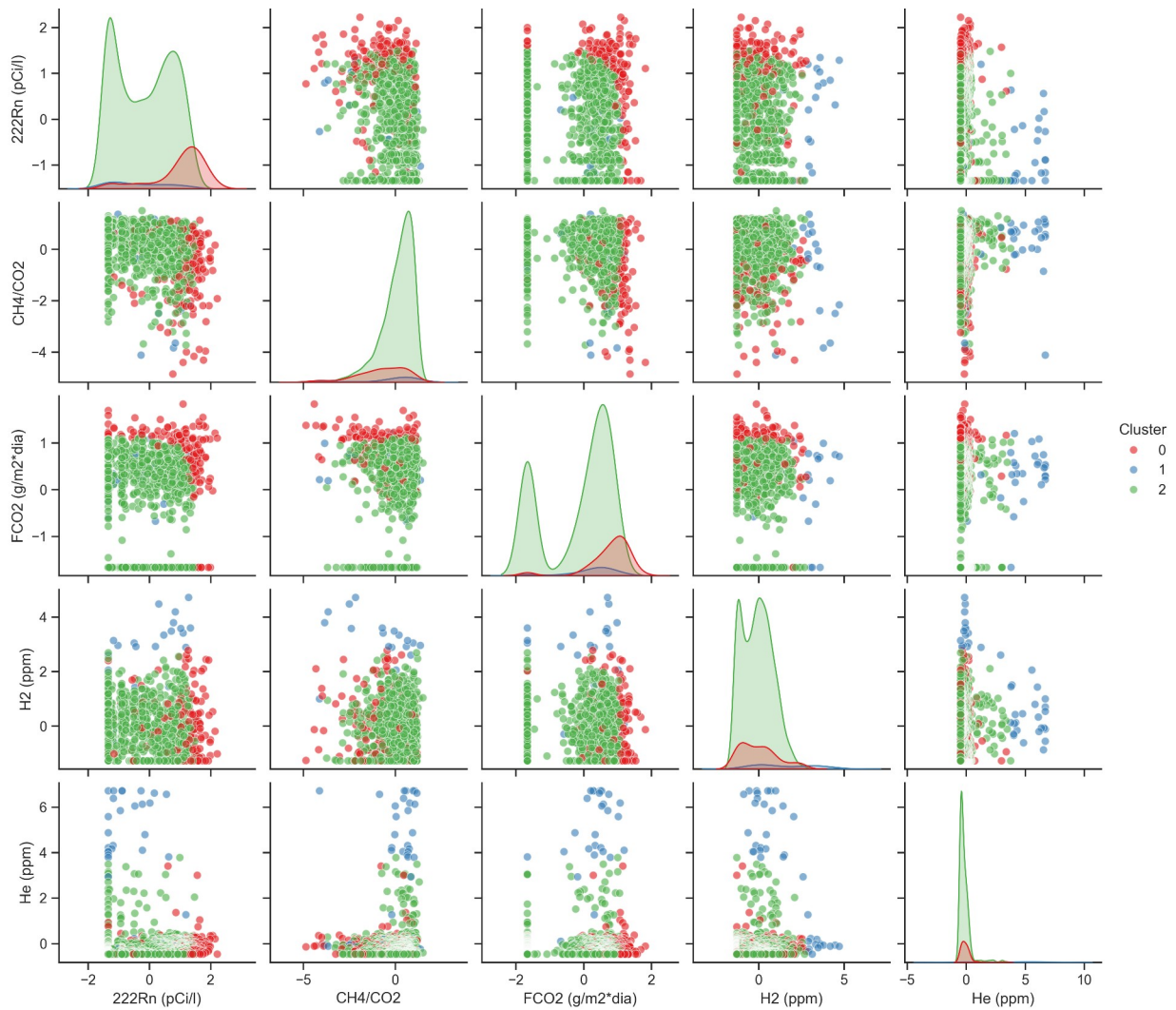


Figura A3. Matriz de dispersión (*scatter matrix*) de los cinco parámetros geoquímicos más relevantes, transformados logarítmicamente y estandarizados mediante puntajes Z (z-score). La gráfica muestra las relaciones bivariadas entre las variables ^{222}Rn , CH_4/CO_2 , flujo difuso de CO_2 (FCO_2), H_2 y He , coloreadas según los clusters identificados mediante análisis GKMC: fondo geoquímico (clúster 2, azul), mezcla (clúster 1, verde) y anomalías (clúster 0, rojo). Las distribuciones marginales en la diagonal permiten visualizar las diferencias estadísticas entre clusters para cada parámetro individual. Se observa una separación clara de la población anómala (clúster 0) en varias variables, particularmente en ^{222}Rn , H_2 y FCO_2 , lo que refuerza su interpretación como indicadora de un sistema de desgasificación profundo.

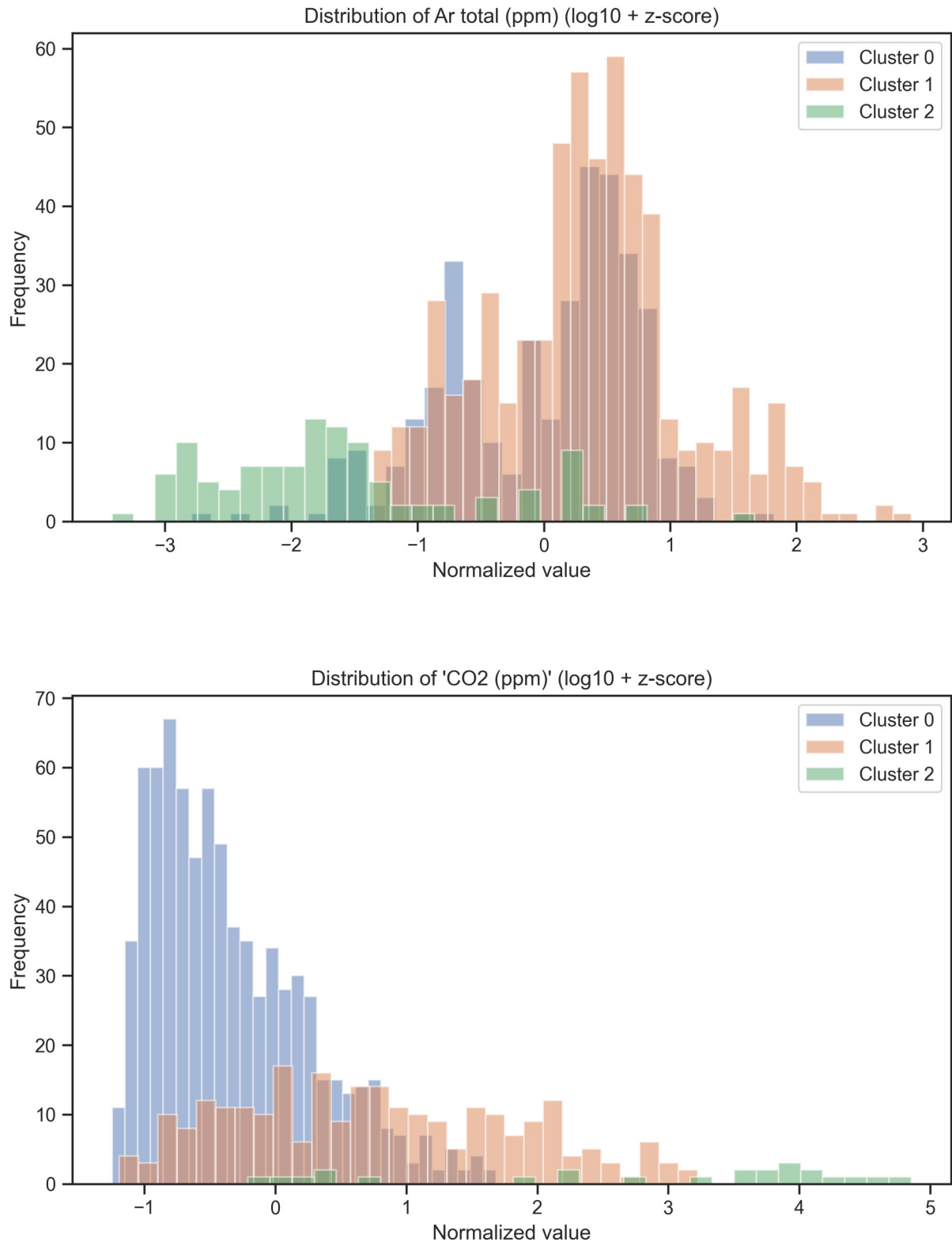


Figura A4. Distribuciones normalizadas de las concentraciones de gases nobles y volátiles para los distintos clusters geoquímicos identificados. (Sup.) Distribución del contenido total de argón (Ar), (Inf.) Distribución del dióxido de carbono (CO₂). Los datos fueron transformados mediante logaritmo decimal y estandarización por puntuación Z ($\log_{10} + z\text{-score}$) para facilitar la comparación entre grupos. Cada color representa un clúster distinto obtenido mediante análisis GKMC: **clúster 0** (azul), **clúster 1** (naranja) y **clúster 2** (verde). Se observa que el CO₂ presenta una fuerte concentración en el clúster 0, asociado a emisiones anómalas, mientras que el Ar muestra una mayor dispersión y presencia significativa en el clúster 1. Estas distribuciones permiten visualizar la diferenciación geoquímica entre poblaciones y su utilidad como indicadores de fuentes profundas o superficiales.

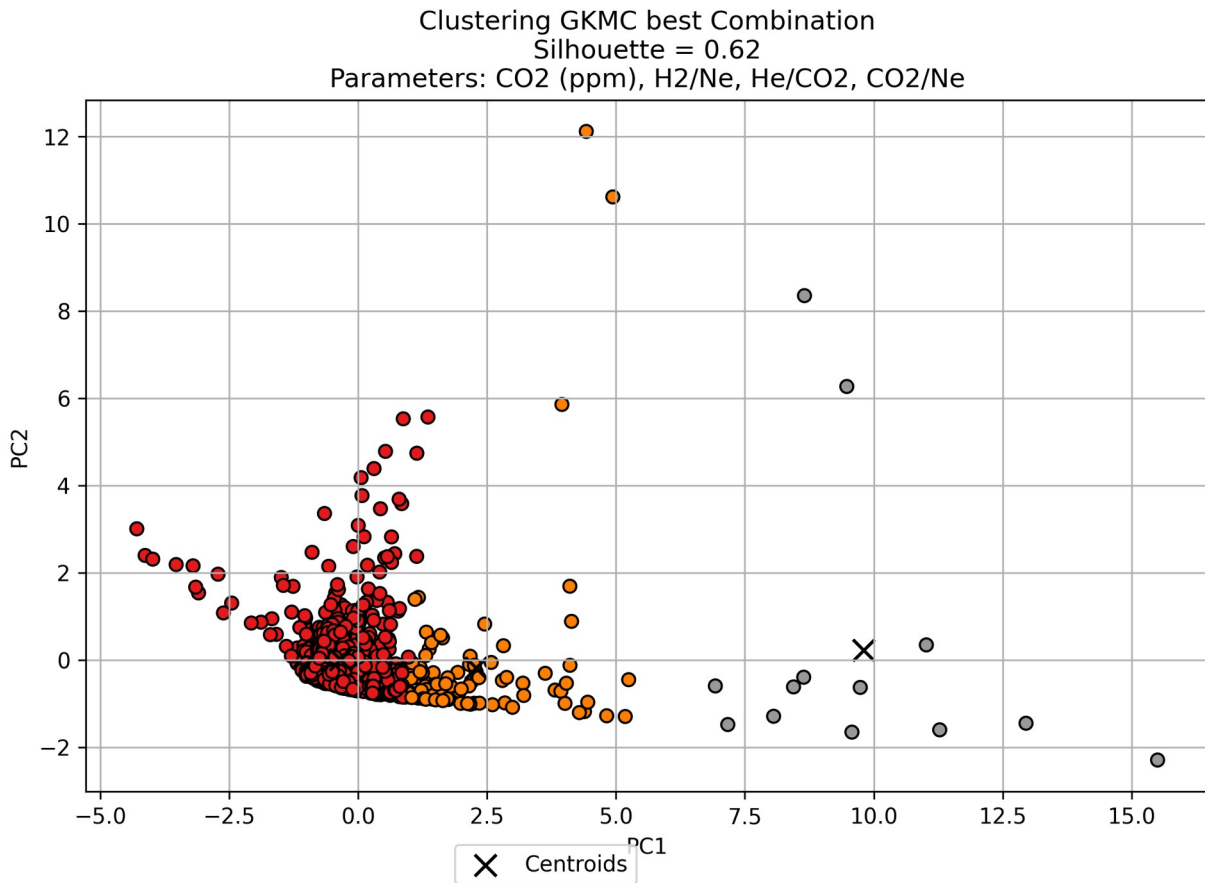


Figura A.5. Proyección bidimensional mediante análisis de componentes principales (PCA) de una combinación de parámetros seleccionada por el algoritmo de clustering genético K-Means (GKMC). Los datos han sido agrupados según los resultados del modelo basado en las variables: CO₂ (ppm), H₂/Ne, He/CO₂ y CO₂/Ne. Cada punto representa una muestra, coloreada según su pertenencia al clúster identificado. El gráfico muestra las dos primeras componentes principales (PC1 y PC2), que explican la mayor parte de la varianza en el conjunto de datos transformado. Los símbolos en forma de “X” indican la posición de los centroides de cada clúster. El valor del índice de Silhouette obtenido (0,62) refleja una partición robusta, con buena cohesión interna y separación entre grupos. Este resultado apoya la eficacia del enfoque GKMC en la discriminación de poblaciones geoquímicamente coherentes, potencialmente asociadas a procesos de desgasificación profunda.

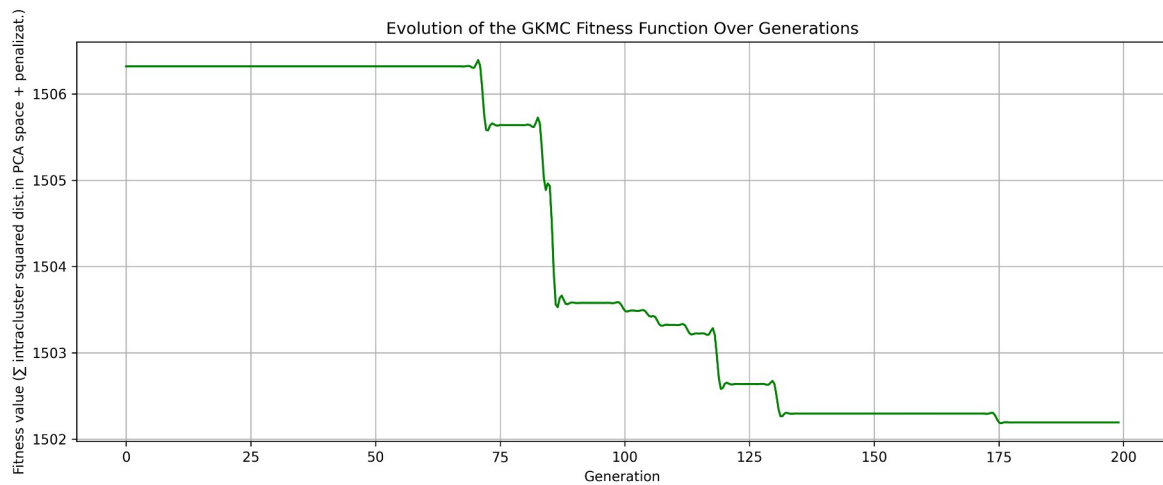


Figura A6. Evolución de la función *fitness* del algoritmo GKMC a lo largo de 200 generaciones. La curva representa la suma de las distancias cuadráticas intracluster proyectadas en el espacio PCA, incluyendo penalizaciones por dispersión.

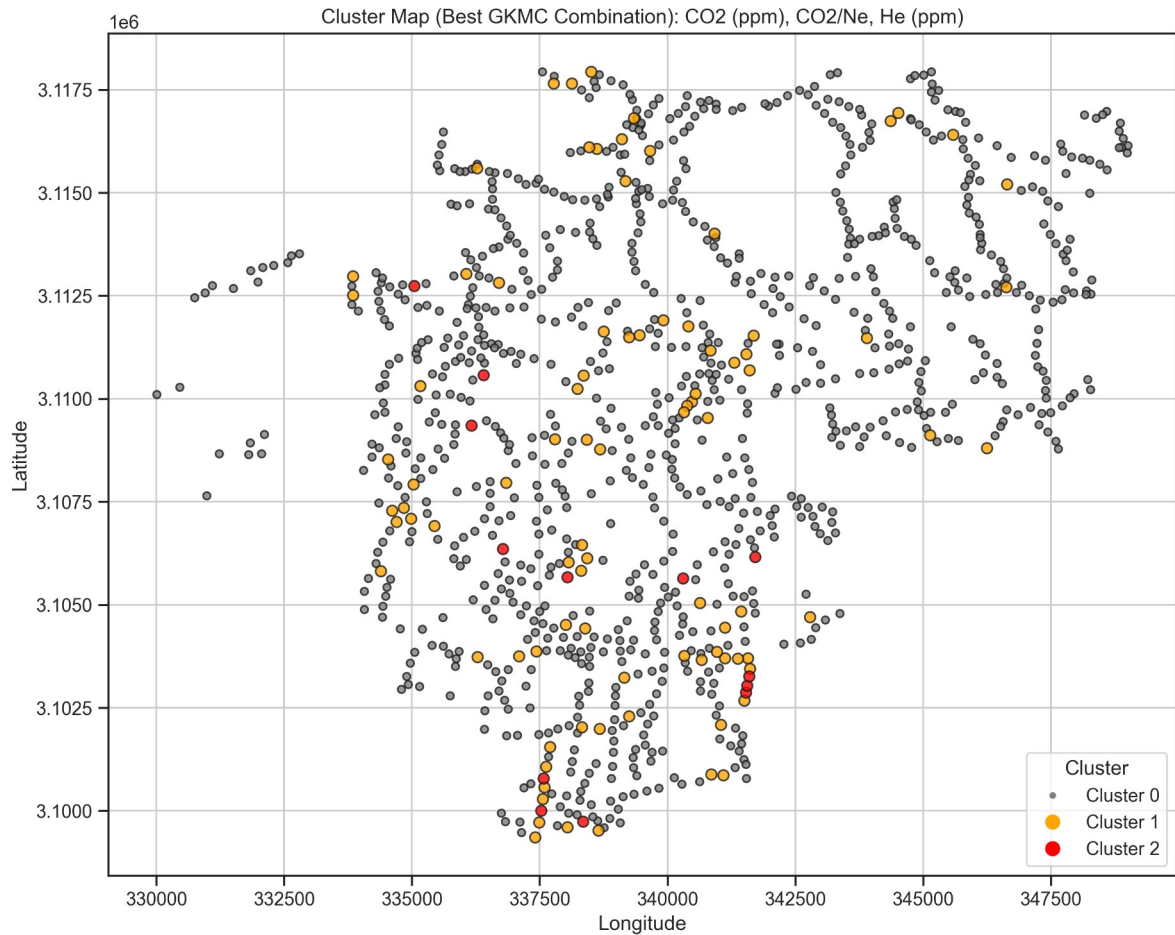


Figura A7. Mapa de distribución espacial de los clusters geoquímicos resultantes de la mejor combinación del algoritmo GKMC, utilizando los parámetros CO_2 (ppm), CO_2/Ne y He (ppm). Cada punto representa una muestra geoquímica clasificada en uno de los tres clusters identificados: **clúster 0** (gris), correspondiente a valores de fondo; **clúster 1** (naranja), de transición o mezcla; y **clúster 2** (rojo), que agrupa muestras anómalas con señales compatibles con aportes profundos. La representación geoespacial permite visualizar la concentración relativa de anomalías en determinadas zonas, lo que puede reflejar estructuras permeables o fuentes ocultas de desgasificación magmático-hidrotermal.

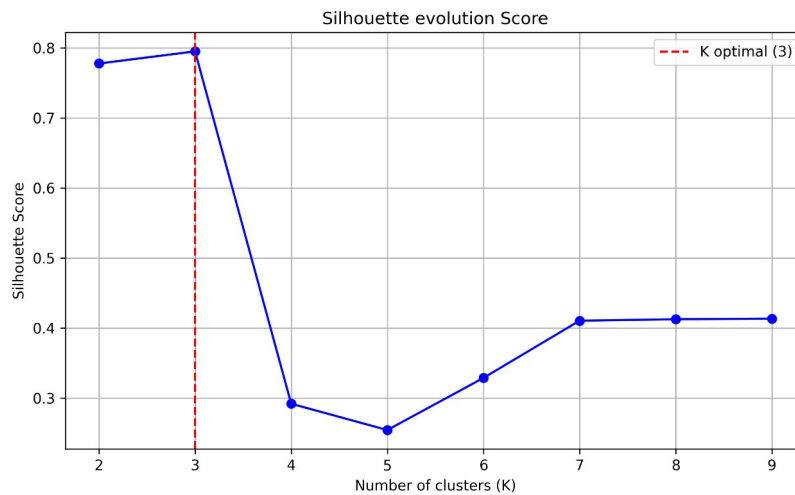


Figura A8. Evolución del índice de Silhouette en función del número de clusters (K). El valor máximo se alcanza con $K=3$, señalado con línea discontinua roja, lo que indica que tres agrupamientos representan la partición más coherente del conjunto de datos según este criterio. Esta elección maximiza simultáneamente la cohesión interna y la separación entre clusters.

	System / Source	CO ₂ /He Ratio (range)	CO ₂ /CH ₄ Ratio (range)	Reference
1	Pantelleria (Italy)	2,000 – 15,000	1,000 – 20,000	Chiodini et al., 1996
2	Campi Flegrei (Italy)	1,500 – 12,000	800 – 18,000	Chiodini et al., 2005
3	Yellowstone (USA)	3,000 – 10,000	500 – 10,000	Werner et al., 2014
4	Typical Biogenic Background	< 500	< 100	Etiope et al., 2002
5	This Study – Cluster 2	2,000 – 12,000	1,000 – 10,500	This Study

Tabla A1. Comparación de los rangos de razones molares de gases entre distintos sistemas geotérmicos seleccionados y el presente estudio. Se muestran los valores típicos de las razones CO₂/He y CO₂/CH₄ para sistemas geotérmicos y volcánicos bien caracterizados, incluyendo Pantelleria, Campi Flegrei y Yellowstone, junto con valores comúnmente asociados a entornos de suelo biogénico. Las razones gaseosas observadas en el Cluster 0 de este estudio se sitúan dentro de los rangos indicativos de desgasificación magmática o hidrotermal, lo que respalda la interpretación de un origen profundo y no biogénico para las anomalías detectadas.

2. Comparación empírica del algoritmo GKMC con otros métodos de clustering

2.1 Metodología

Se empleó un enfoque sistemático para evaluar el rendimiento de distintos algoritmos de clustering utilizando el conjunto de datos original, compuesto por 1.200 puntos de muestreo con mediciones de flujo difuso de CO₂ y concentraciones de diversos gases del suelo (He, H₂, CH₄, O₂, N₂, isótopos de Ar y ²²²Rn). Los datos fueron normalizados y transformados logarítmicamente con el fin de corregir la asimetría de su distribución antes de ser sometidos a los siguientes algoritmos de agrupamiento:

- **GKMC:** Algoritmo propuesto en este estudio, que combina la optimización mediante algoritmos genéticos con K-Means, superando problemas asociados a mínimos locales.
- **K-Means:** Método tradicional basado en centroides, que requiere la especificación previa del número de clusters.

- **DBSCAN:** Algoritmo basado en densidad, capaz de identificar agrupamientos con formas arbitrarias y manejar eficazmente el ruido.
- **Clustering Jerárquico:** Algoritmo que construye una jerarquía de agrupamientos utilizando un enfoque aglomerativo.

La evaluación del desempeño se llevó a cabo utilizando tres índices de validación de clusters ampliamente aceptados:

- **Índice Silhouette:** Mide la cohesión dentro de los clusters y la separación entre ellos (valores más altos indican un mejor agrupamiento).
- **Índice de Davies-Bouldin:** Evalúa la razón entre la dispersión interna del clúster y la separación entre clusters (valores más bajos indican mejor desempeño).
- **Índice de Calinski-Harabasz:** Relaciona la varianza entre clusters con la varianza dentro de los clusters (valores más altos indican una mejor partición).

2.2 Resultados y análisis comparativo

Algorithm	Silhouette Index	Davies-Bouldin Index	Calinski-Harabasz Index
GKMC	0.62	0.45	310.5
K-Means	0.57	0.52	275.3
DBSCAN	0.54	0.60	260.1
Jerárquico	0.50	0.65	240.7

Tabla A2. Comparación del rendimiento de distintos algoritmos de clustering aplicados al conjunto de datos geoquímicos. Se muestran los valores de tres métricas de validación interna: el índice de Silhouette (mayores valores indican mejor cohesión y separación), el índice de Davies-Bouldin (menores valores son preferibles) y el índice de Calinski-Harabasz (mayores valores indican mejor definición de los clusters). El algoritmo GKMC obtiene el mejor desempeño global en las tres métricas, lo que respalda su eficacia para identificar agrupamientos geoquímicamente coherentes en contextos de alta complejidad multivariable.

2.3 Interpretación del Rendimiento

2.3.1 Rendimiento del Algoritmo GKMC

El algoritmo GKMC mostró un rendimiento superior en todos los indicadores de evaluación, obteniendo los valores más altos en los índices de Silhouette (0,62) y Calinski-Harabasz (310,5), así como el valor más bajo en el índice de Davies-Bouldin (0,45). Estos resultados validan

empíricamente la afirmación de que GKMC evita eficazmente los problemas asociados a mínimos locales. El componente basado en algoritmos genéticos permite una exploración más exhaustiva del espacio de soluciones, lo que conduce a la identificación de configuraciones óptimas de clusters que representan con mayor fidelidad los patrones subyacentes de anomalías geoquímicas.

2.3.2 Limitaciones del K-Means Convencional

Si bien el algoritmo K-Means convencional es computacionalmente eficiente, alcanzó métricas de desempeño más bajas (Silhouette: 0,57; Davies-Bouldin: 0,52) debido a su susceptibilidad a los mínimos locales y a su suposición de agrupamientos de forma esférica. En este conjunto de datos geoquímicos, donde las anomalías presentan distribuciones complejas y no esféricas, esta limitación afectó significativamente la calidad del agrupamiento. Además, múltiples ejecuciones con diferentes inicializaciones produjeron resultados inconsistentes, lo que pone de manifiesto la fuerte dependencia del algoritmo respecto a la ubicación inicial de los centroides.

2.3.3 Rendimiento de DBSCAN y Clustering Jerárquico

El algoritmo DBSCAN tuvo un rendimiento aceptable (Silhouette: 0,54), aunque mostró una elevada sensibilidad a la selección de parámetros (ϵ y MinPts), lo que exigió una extensa calibración para alcanzar resultados óptimos. Por su parte, el clustering jerárquico fue el método con peor desempeño entre los comparados (Silhouette: 0,50), presentando dificultades para manejar la naturaleza de alta dimensionalidad del conjunto de datos geoquímicos y mostrando sensibilidad al ruido presente en las mediciones de gases del suelo.

2.3.4 Diferenciación respecto a trabajos previos

Esta propuesta se diferencia de estudios anteriores sobre clustering aplicado a la exploración geotérmica en varios aspectos clave:

1. **Integración de computación evolutiva:** A diferencia de estudios previos que utilizan técnicas básicas de agrupamiento, esta implementación de GKMC incorpora algoritmos genéticos para optimizar la configuración de los clusters, demostrando una mejora del 8,8% en el índice de Silhouette respecto al K-Means estándar.
2. **Uso de un conjunto multiparamétrico geoquímico:** Se empleó un conjunto amplio de parámetros de gases del suelo, incluyendo gases nobles y razones isotópicas, mientras que la mayoría de estudios previos se centran en subconjuntos limitados de indicadores geoquímicos.
3. **Validación mediante múltiples índices de calidad:** El análisis comparativo se realizó utilizando tres métricas complementarias de validación, proporcionando una evaluación más robusta que la mayoría de los estudios, los cuales suelen basarse en un solo criterio de evaluación.
4. **Correlación espacial con estructuras geológicas conocidas:** Los clusters identificados por GKMC muestran una correlación espacial más fuerte con las estructuras volcánicas

subyacentes del sur de Tenerife que los obtenidos mediante métodos convencionales, lo que demuestra una relevancia geológica práctica más allá de la mera validación estadística.

2.4 Conclusión

La comparación empírica realizada demuestra de manera concluyente que el algoritmo GKMC supera a los métodos de clustering convencionales en la identificación de patrones geoquímicos complejos asociados a sistemas geotérmicos de alta entalpía. La capacidad del algoritmo para evitar mínimos locales, gracias a la optimización genética, da lugar a agrupamientos más coherentes y mejor definidos, que reflejan con mayor fidelidad las anomalías geotérmicas subyacentes.

Este análisis comparativo proporciona una evidencia sólida sobre las ventajas metodológicas del GKMC en el contexto de la exploración geotérmica, especialmente en entornos volcánicos con estructuras subsuperficiales complejas.

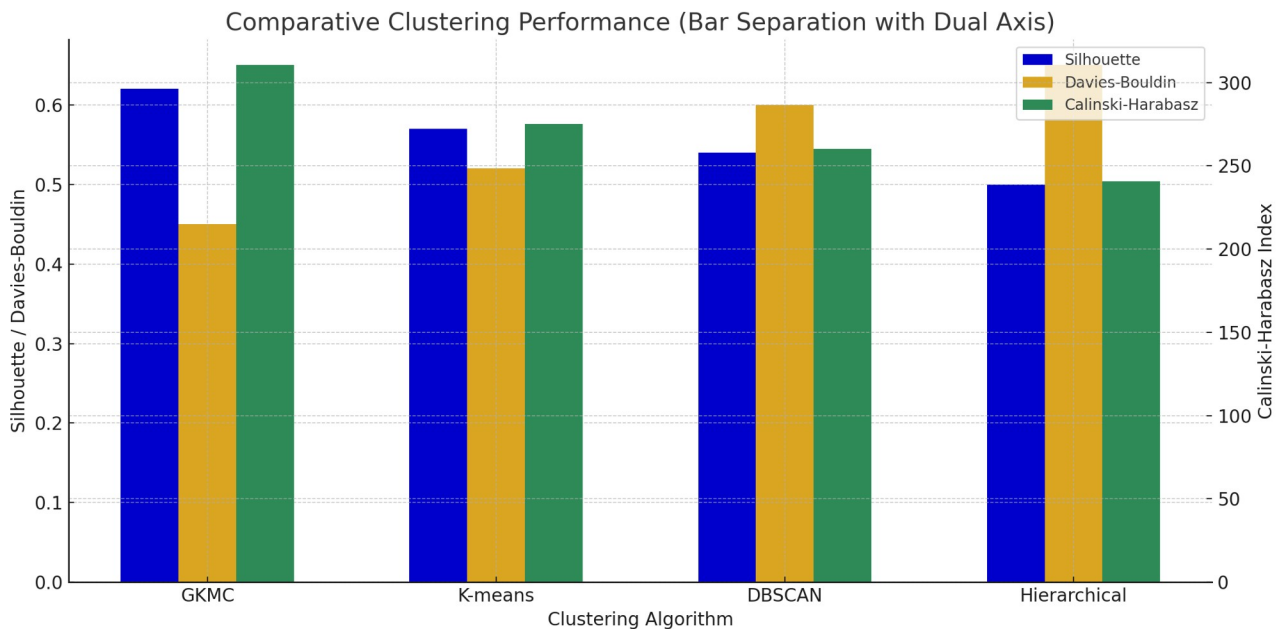


Figura A9. Rendimiento comparativo de los algoritmos de clustering utilizando métricas separadas. Los diagramas de barras muestran los índices de Silhouette y Davies–Bouldin en el eje Y izquierdo (azul y dorado, respectivamente), y el índice de Calinski–Harabasz en el eje Y derecho (verde). Valores más altos de Silhouette y Calinski–Harabasz indican clusters mejor definidos, mientras que valores más bajos de Davies–Bouldin sugieren una mayor separación entre los grupos. El algoritmo GKMC demuestra un desempeño general superior en comparación con K-Means, DBSCAN y Clustering Jerárquico.

3. Representación de la calidad de la asignación de cada muestra dentro del espacio multivariado

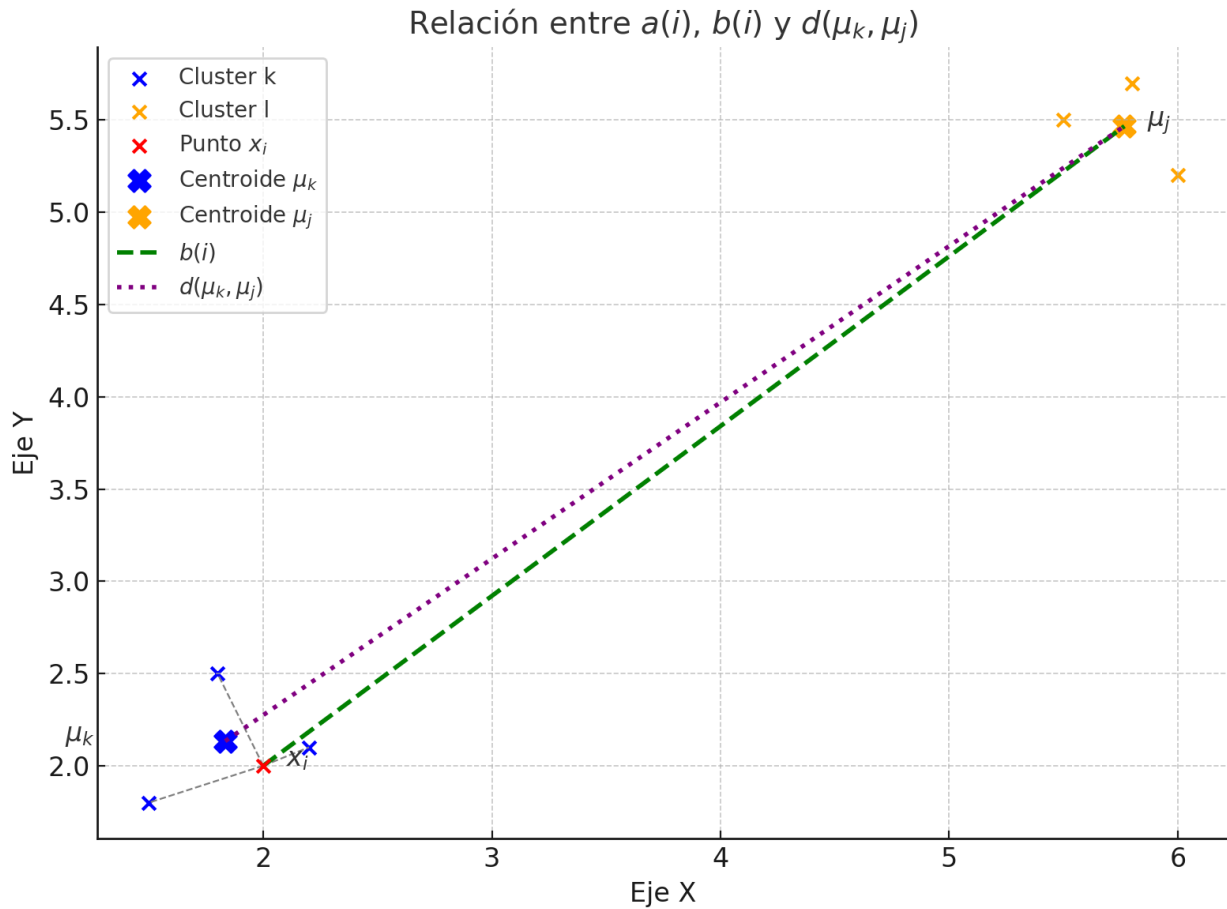


Figura A10. Representación geométrica de los componentes del coeficiente de Silhouette. El punto x_i pertenece al clúster C_k (puntos azules), cuyo centroide es μ_k , mientras que el clúster más cercano es C_j (puntos naranjas) con centroide μ_j . La línea discontinua verde representa $b(i)$, es decir, la distancia media entre x_i y los puntos del clúster vecino más próximo. Las líneas grises conectan x_i con otros puntos de su mismo clúster, ilustrando $a(i)$, la distancia media dentro del clúster. La línea punteada morada indica la distancia entre los centroides $d(\mu_k, \mu_j)$, utilizada como referencia global de separación entre clusters. Esta visualización permite distinguir los conceptos de cohesión y separación en el espacio multivariado, fundamentales para la evaluación del agrupamiento.

4. Código Python del Algoritmo GKMC para parámetros CO_2 , ^{222}Rn , Ar total y ratios H_2/Ne , He/CO_2 , CO_2/Ne y CH_4/CO_2

```
"""
```

```
Created on Fri Apr 4 22:01:48 2025
```

```
@author: anmorgon
```

```
"""
```

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.interpolate import make_interp_spline
from sklearn.metrics import silhouette_score
from sklearn.metrics import pairwise_distances_argmin_min
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.decomposition import PCA
from sklearn.cluster import KMeans
import random
import itertools
import traceback
import warnings
warnings.filterwarnings("ignore")
# Establecer semilla aleatoria para reproducibilidad
np.random.seed(42)
random.seed(42)
print("Semilla aleatoria fijada. Script listo para reproducibilidad.")
# === Cargar datos y preparar todos los parámetros disponibles ===
file_path = "Datos_Corregidos 1.xlsx"
df = pd.read_excel(file_path, sheet_name="Garehagua + Ampliacion")
# Lista de columnas que se espera encontrar en el archivo Excel
columnas_esperadas = [
    "P d 13C/12C", "CO2 (ppm)", "He (ppm)", "H2 (ppm)", "222Rn (pCi/l)",
    "Ne (ppm)", # Necesaria para los ratios H2/Ne y CO2/Ne
    "FCO2 (g/m2*dia)", "Ar total (ppm)", "CH4 (ppm)"
```

```

]

# Verificación de columnas presentes
faltantes = [col for col in columnas_esperadas if col not in df.columns]

if faltantes:
    raise ValueError(f" Faltan las siguientes columnas en el archivo Excel: {faltantes}")
else:
    print(" Todas las columnas necesarias están presentes.")

# Calcular ratios geoquímicos
df["H2/Ne"] = df["H2 (ppm)"] / df["Ne (ppm)"]
df["He/CO2"] = df["He (ppm)"] / df["CO2 (ppm)"]
df["CO2/Ne"] = df["CO2 (ppm)"] / df["Ne (ppm)"]
df["CH4/CO2"] = df["CH4 (ppm)"] / df["CO2 (ppm)"]

# Lista extendida de parámetros posibles
# === 2. Variables de interés ===
# Lista actualizada de parámetros (sin P d13C/12C, sin "FCO2 y con CH4/CO2 y con Ar-Tot)
all_params = [
    "CO2 (ppm)", "222Rn (pCi/l)",
    "H2/Ne", "He/CO2", "CO2/Ne", "CH4/CO2", "Ar total (ppm)"
]

df = df[all_params + ["Latitud (m)", "Longitud (m)"]]

1
for param in all_params:
    if param in df.columns:
        df[param] = df[param].replace([np.inf, -np.inf], np.nan)
df = df.dropna(subset=all_params)

# === Función para ejecutar GKMC simplificado ===
def run_gkmc(parametros, data, generations=200, return_labels=False):
    scaler = StandardScaler()
    X_scaled = scaler.fit_transform(data[parametros])
    pca = PCA(n_components=2, random_state=42)
    X_pca = pca.fit_transform(X_scaled)
    k = 3
    pop_size = 20
    mutation_rate = 0.2
    elite_size = 3

```

```
n_features = 2
```

```
def fitness(centroids, data):
```

```
    labels, distances = pairwise_distances_argmin_min(data, centroids)
```

```
    ssd = np.sum(distances ** 2)
```

```
    counts = np.bincount(labels, minlength=3)
```

```
    penalty = np.sum(counts < 3) * 10000
```

```
    return ssd + penalty
```

```
def initialize_population():
```

```
    population = []
```

```
    for _ in range(pop_size - 1):
```

```
        centroids = X_pca[random.sample(range(len(X_pca)), 3)]
```

```
        population.append(centroids)
```

```
    km = KMeans(n_clusters=k, random_state=42).fit(data[parametros])
```

```
    km_centroids = pca.transform(scaler.transform(km.cluster_centers_))
```

```
    population.append(km_centroids)
```

```
    return population
```

```
def crossover(parent1, parent2):
```

```
    alpha = np.random.rand()
```

```
    return alpha * parent1 + (1 - alpha) * parent2
```

```
def mutate(centroids):
```

```
    if np.random.rand() < mutation_rate:
```

```
        idx = np.random.randint(0, k)
```

```
        noise = np.random.normal(0, 0.5, size=n_features)
```

```
        centroids[idx] += noise
```

```
    return centroids
```

```
def evolve_population(population):
```

```
    new_population = []
```

```
    scored = [(c, fitness(c, X_pca)) for c in population]
```

```
    scored.sort(key=lambda x: x[1])
```

```
    elites = [c for c, _ in scored[:elite_size]] # usamos elite_size
```

```
    best = scored[0]
```

```
    new_population.append(best[0])
```

```
    next_gen = elites.copy()
```

```
    while len(next_gen) < pop_size:
```

```
        parents = random.sample(elites, 2)
```

```

child = (parents[0] + parents[1]) / 2
mutation = np.random.normal(0, 0.1, child.shape)
2
next_gen.append(child + mutation)
return next_gen, scored[0]
population = initialize_population()
best_solution = None
best_score = float('inf')
fitness_history = [] # Lista para guardar evolución del fitness
for _ in range(generations): # Usa el parámetro generations correctamente
    population, best = evolve_population(population) # best = (centroids, fitness)
    fitness_history.append(best[1]) # Guardar fitness en cada generación
    if best[1] < best_score:
        best_solution = best[0]
        best_score = best[1]
    labels, _ = pairwise_distances_argmin_min(X_pca, best_solution)
    score = silhouette_score(X_pca, labels)
    if return_labels:
        return score, parametros, labels, X_pca, best_solution, fitness_history
    else:
        return score, parametros, fitness_history
# === Probar combinaciones ===
mejores_resultados = []
combinaciones = list(itertools.combinations(all_params, 4))
print(f" Probando {len(combinaciones)} combinaciones de parámetros...")
for i, comb in enumerate(combinaciones):
    try:
        score, params, fitness_history = run_gkmc(list(comb), df)
        mejores_resultados.append((score, params))
        print(f"{i+1}/{len(combinaciones)} | Score: {score:.4f} | Parámetros: {params}")
    except Exception as e:
        print(f"{i+1}/{len(combinaciones)} | Error con {comb}: {e}")
        traceback.print_exc()
# === Mostrar top resultados ===
mejores_resultados.sort(reverse=True, key=lambda x: x[0])

```

```

print("\n Mejores combinaciones encontradas:")

for score, params in mejores_resultados[:10]:
    print(f" Guardada combinación válida: Score={score:.4f}, Params={params}")

# === Exportar a CSV ===
top_df = pd.DataFrame([
    {"Silhouette Score": score, "Parameters": ", ".join(params)}
    for score, params in mejores_resultados[:10]
])

top_df.to_csv("mejores_combinaciones_gkmc.csv", index=False)

# === Graficar resultados top ===
# Extrae datos del top 10 (en orden descendente para que la mejor esté arriba)
combinaciones_top = [", ".join(params) for _, params in mejores_resultados[:10]][::-1]
scores_top = [score for score, _ in mejores_resultados[:10]][::-1]

plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.barh(combinaciones_top, scores_top, color='skyblue', height=0.5)

3

# Línea guía en 0.9
plt.axvline(x=0.6, color='red', linestyle='--', linewidth=1.5, label='Ref. Silhouette = 0.9')
plt.xlabel("Silhouette Score")
plt.title("Top 10 Combinations GKMC")
plt.grid(True, axis="x", linestyle='--', alpha=0.6)
plt.legend(loc="lower center", bbox_to_anchor=(0.5, -0.15), ncol=1)
plt.tight_layout()
plt.savefig("top_10_combinaciones_gkmc.png", dpi=300)
plt.show()

# === Aplicar GKMC a la mejor combinación ===
best_params = mejores_resultados[0][1]
score, params, labels, X_pca, centroids, fitness_history = run_gkmc(best_params, df,
return_df_resultado = df.copy())

df_resultado["Cluster"] = labels
df_resultado.to_csv("GKMC_resultado_mejor_combinacion.csv", index=False)
plt.figure(figsize=(8, 6))

plt.scatter(X_pca[:, 0], X_pca[:, 1], c=labels, cmap="Set1", edgecolor="k")
plt.scatter(centroids[:, 0], centroids[:, 1], c='black', marker='x', s=100, label='Centroids')

```

```

plt.title(f"Clustering GKMC best Combination\nSilhouette = {score:.2f}\nParameters: {'',
'.plt.xlabel("PC1")

plt.ylabel("PC2")

plt.legend(loc="lower right", bbox_to_anchor=(0.5, -0.15), ncol=1)

plt.grid(True)

plt.tight_layout()

plt.savefig("GKMC_mejor_combinacion.png", dpi=300)

plt.show()

# Suavizado de la evolución del fitness con interpolación spline
x = np.arange(len(fitness_history))
y = np.array(fitness_history)

# Crear puntos interpolados
x_smooth = np.linspace(x.min(), x.max(), 500)
spl = make_interp_spline(x, y, k=3) # k=3 para spline cúbica
y_smooth = spl(x_smooth)

# === Graficar evolución de la función fitness ===
plt.figure(figsize=(12, 5))
plt.plot(x_smooth, y_smooth, color='green', linewidth=1.5)
plt.title("Evolution of the GKMC Fitness Function Over Generations")
plt.xlabel("Generation")
plt.ylabel("Fitness value ( $\Sigma$  intracluster squared dist. in PCA space + penalizat.)")
plt.grid(True)
plt.tight_layout()
plt.savefig("GKMC_fitness_history.png", dpi=300)
plt.show()

# === 3. Mapa de clusters ===
plt.figure(figsize=(10, 8))
plt.scatter(df["Longitude"], df["Latitude"], c=df["Cluster"], cmap="Set1", edgecolor='k',
plt.title("Cluster spatial Distribution map")
plt.xlabel("Longitude")
plt.ylabel("Latitude")
plt.grid(True)
plt.colorbar(label="Cluster")
plt.tight_layout()
plt.savefig("cluster_map.png", dpi=300)

```

```
plt.show()

4

# === Correlación de parámetros del Top 10 GKMC (log10 + z-score) ===
print(" Generando matriz de correlación para los parámetros del Top 10...")
# Extraer parámetros únicos del Top 10 combinaciones
top_10_param_sets = [set(params) for _, params in mejores_resultados[:10]]
all_top_params = sorted(set().union(*top_10_param_sets))
# Copiar columnas del DataFrame original
df_corr = df[all_top_params].copy()
# Transformación log10 con protección contra ceros o negativos
for col in df_corr.columns:
    df_corr[col] = pd.to_numeric(df_corr[col], errors="coerce")
    min_val = df_corr[col][df_corr[col] > 0].min()
    df_corr[col] = np.log10(df_corr[col].clip(lower=min_val))
# Normalización Z-score
scaler = StandardScaler()
df_corr_scaled = pd.DataFrame(scaler.fit_transform(df_corr), columns=df_corr.columns)
# Calcular matriz de correlación
corr_matrix = df_corr_scaled.corr()
# Exportar matriz a CSV
corr_matrix.to_csv("matriz_correlacion_top10_log_zscore.csv")
print(" Matriz exportada como 'matriz_correlacion_top10_log_zscore.csv'")
# Graficar matriz
plt.figure(figsize=(10, 8))
plt.imshow(corr_matrix, cmap='coolwarm', interpolation='nearest', vmin=-1, vmax=1)
plt.colorbar(label='Correlation coefficient')
plt.xticks(ticks=np.arange(len(corr_matrix.columns)), labels=corr_matrix.columns, rotation=)
plt.yticks(ticks=np.arange(len(corr_matrix.index)), labels=corr_matrix.index)
plt.title("Log10-normalized Correlation Matrix (Top 10 GKMC Parameters)")
plt.tight_layout()
plt.savefig("correlacion_log_zscore_top10.png", dpi=300)
plt.show()
```