



**UNIVERSITÉ
DE GENÈVE**

FACULTÉ DES SCIENCES
Département des sciences
de la Terre



Master in Earth Sciences

by

MIRANDA MURUZÁBAL Martín

Thermodynamic and empirically-based machine learning thermobarometry with application to Mt. Etna



Under the supervision of:
Professor CARICCHI Luca

Signature of the supervisor-s

Université de Genève
10/06/2024

STATEMENT

I certify that all statements in this text, that are not the result of my personal reflection, are attributed to the appropriate literature and that any passage copied from another source is placed in quotes.

DISCLAIMER

The information contained in this report is part of an academic exercise and represents the work of the author and neither the ELSTE nor the University of Geneva. The author and the ELSTE disclaim any liability in connection with the use of this information.

COPYRIGHT

Quotations from this memoire are permitted only if they serve as a comment, reference or demonstration to the user. The quote must imperatively mention the source and the author's name. The Swiss federal law on copyright and Neighbouring Rights (LDA) are applicable.

ABSTRACT

Geo-Thermobarometry constitutes a fundamental discipline for deciphering the architecture of plumbing systems and the magmatic process occurring within them. Machine learning (ML) thermobarometers, developed over the last years, have shown to be a robust alternative to classical approaches based on thermodynamic principles. The recent emergence of this field means it is still under development. In this context, one of the current major limitations in ML thermobarometry concerns the fact that the experimental dataset used in the calibration process is not homogeneously distributed in the P-T-X space. This results in some areas containing very few experiments which decreases the accuracy of the model. To address this limitation, artificial clinopyroxene compositions have been calculated using the MAgEMin phase equilibrium calculator, based on three whole-rock compositions from Mt. Etna. These compositions were later used to train a ML thermobarometer. The accuracy of this ML thermobarometer has been tested with equilibrium experiments from Mt. Etna, and the results reveal that its performance does not improve upon current experimentally-based ML thermobarometers, making it unsuitable for application to natural samples.

Additionally, another effort to improve the performance of ML thermobarometers has been conducted. This involved trying different methods of expressing the compositional information of clinopyroxenes used as input in ML models (i.e., oxides, oxides with Fe^{2+} / Fe^{3+} , cations and components). The results indicate that ML thermobarometers based on clinopyroxene should be calibrated with major element oxides, with iron expressed as FeO, as used in previous studies.

Following this methodological research, ML thermobarometry calibrated on experiments has been applied to Mt. Etna. First, it was tested within a general framework of its recent volcanic activity. In this context, ML thermobarometry estimates of recent eruptions reveal that the crystallization of the erupted clinopyroxenes is generally restricted to the upper crust (< 5 kbar). This suggests that magma formed in the mantle ascended rapidly to the upper crust without crystallizing on its way. More specifically, ML thermobarometry and unsupervised

ML have been applied to the 1669 eruption of Mt. Etna. This event is significant in Etna's recent activity as it marks a change in the petrology of the erupted products, the eruptive regime, and the mechanism of magma intrusion along the volcano flanks. Moreover, its large erupted volumes and the low elevation of the vent made this eruption the most destructive in historical times, now considered the worst-case scenario. The obtained results for this event suggest that the 1669 eruption was triggered by an injection of mafic magma, which ascended adiabatically and started crystallizing after crossing the volatile exsolution depth. This mafic magma erupted first, followed by more evolved magmas that were stored and undergoing crystallization in a shallow reservoir between 3-8 km below sea level.

The research conducted here provides valuable insights into ML thermobarometry, contributing to the development and progress of this field. Additionally, the successful application of ML thermobarometry to Mt. Etna opens up numerous possibilities to explore the processes and eruptive cycles governing Etnean volcanism.

RÉSUMÉ

La géothermobarométrie constitue une discipline fondamentale pour déchiffrer l'architecture des systèmes magmatiques et les processus qui s'y produisent. Les thermobaromètres utilisant l'apprentissage automatique (AA), développés au cours des dernières années, se sont révélés être une alternative robuste aux approches classiques basées sur les principes thermodynamiques. L'émergence récente de ce domaine signifie qu'il est encore en développement. Dans ce contexte, l'une des principales limitations actuelles de la thermobarométrie AA concerne le fait que le jeu de données expérimental utilisé dans le processus de calibration n'est pas distribué de manière homogène dans l'espace P-T-X. Cela se traduit par des zones contenant très peu d'expériences, ce qui diminue la précision du modèle.

Pour pallier cette limitation, des compositions artificielles de clinopyroxène ont été calculées en utilisant le calculateur d'équilibre de phase MAGEMin, basé sur trois compositions de roche totale du mont Etna. Ces compositions ont ensuite été utilisées pour entraîner un thermobaromètre AA. La précision de ce thermobaromètre AA a été testée avec des expériences d'équilibre du Mont Etna, et les résultats révèlent que ses performances n'améliorent pas celles des thermobaromètres AA actuels basés sur des expériences, ce qui le rend inadapté pour une application à des échantillons naturels.

De plus, un autre effort pour améliorer les performances des thermobaromètres AA a été réalisé. Cela impliquait d'essayer différentes possibilités d'expression des informations de composition des clinopyroxènes utilisées comme entrée dans les modèles AA (par exemple, oxydes, oxydes avec Fe^{2+} / Fe^{3+} , cations et composants du clinopyroxène). Les résultats indiquent que les thermobaromètres AA basés sur le clinopyroxène devraient être calibrés avec les oxydes des éléments majeurs, avec le fer exprimé sous forme de FeO, comme utilisé dans les études précédentes.

Suite à cette recherche méthodologique, la thermobarométrie AA calibrée sur des expériences a été appliquée au mont Etna. Tout d'abord, elle a été testée dans un cadre général de l'activité volcanique récente. Dans ce contexte, les estimations de la thermobarométrie

AA révèlent que la cristallisation des clinopyroxènes éruptés est généralement limitée à la croûte supérieure (< 5 kbar). Cela suggère que le magma formé dans le manteau est monté rapidement jusqu'à la croûte supérieure sans cristalliser en cours de route.

Plus précisément, la thermobarométrie AA et le AA non supervisé ont été appliqués à l'éruption de 1669 du mont Etna. Cet événement est significatif dans l'activité récente de l'Etna car il marque un changement dans la pétrologie des produits éruptifs, le régime éruptif et le mécanisme d'intrusion du magma le long des flancs du volcan. De plus, ses volumes éruptifs importants et la basse élévation du point d'éruption ont fait de cette éruption la plus destructrice des temps historiques, désormais considérée comme le pire scénario. Les résultats obtenus pour cet événement suggèrent que l'éruption de 1669 a été déclenchée par une injection de magma mafique, qui est montée adiabatiquement et a commencé à cristalliser après avoir franchi la profondeur d'exsolution des volatils. Ce magma mafique a érupté en premier, suivi par des magmas plus évolués qui étaient stockés et cristallisaient dans un réservoir peu profond (environ 3-8 km sous le niveau de la mer).

Les recherches menées ici fournissent des informations précieuses sur la thermobarométrie AA, contribuant au développement et à l'avancement de ce domaine. De plus, l'application réussie de la thermobarométrie ML au mont Etna ouvre de nombreuses possibilités pour explorer les processus et les cycles éruptifs qui régissent le volcanisme de l'Etna.