



Πολυτεχνείο Κρήτης

ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΟΡΥΚΤΩΝ ΠΟΡΩΝ

**Γεωστατιστική Ανάλυση Δεδομένων
Συγκέντρωσης Τοξικών Βαρέων Μετάλλων
στο Έδαφος**

Συγγραφέας: Αστέριος Παγώνης

Αρ. Μητρώου: 2010020042

Εξεταστική Επιτροπή:

Καθ. Χριστόπουλος Διονύσιος

Καθ. Γαλετάκης Μιχαήλ

Δρ. Βαρουχάκης Εμμανουήλ

10 Ιανουαρίου 2018, Χανιά

Περίληψη

Τα βαρέα μέταλλα παρουσιάζουν σημαντικό περιβαλλοντικό ενδιαφέρον κυρίως λόγω της υψηλής τοξικότητάς τους, καθώς επίσης και οικονομικό ενδιαφέρον αφού η χρήση τους είναι απαραίτητη σε ένα μεγάλο εύρος βιομηχανιών. Σημαντικές είναι και οι επιπτώσεις τους στην ανθρώπινη υγεία, γεγονός που καθιστά την μελέτη τους ακόμη πιο σημαντική. Εμφανίσεις βαρέων μετάλλων υπάρχουν σε διάφορες χώρες του κόσμου. Έτσι, ο υπολογισμός των συγκεντρώσεων, των κατανομών και της χαρτογράφησης τέτοιων εμφανίσεων συνιστά πεδίο με εξαιρετικό ερευνητικό ενδιαφέρον και απασχολεί ήδη μεγάλο αριθμό ερευνητικών μελετών.

Η παρούσα διπλωματική εργασία έχει ως στόχο την εκτίμηση των κατανομών των συγκεντρώσεων σε μια περιοχή μελέτης στα Ελβετικά Όρη Jura με τη χρήση γεωστατιστικών μεθόδων. Τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν για την εκπόνηση της διπλωματικής και αναφέρονται ως Jura Data Set, αποτελούνται από ένα σύνολο μετρήσεων των συγκεντρώσεων επτά βαρέων τοξικών μετάλλων σε μια περιοχή μελέτης, οι οποίες συλλέχθηκαν από το Ελβετικό Κρατικό Ινστιτούτο Τεχνολογίας της Λωζάνης.

Η γεωστατιστική ανάλυση των δεδομένων πραγματοποιήθηκε με χρήση της γλώσσας προγραμματισμού R. Στο περιβάλλον αυτής της γλώσσας αναπτύχθηκε υπολογιστικός κώδικας με χρήση των κατάλληλων εντολών και συναρτήσεων. Η ανάπτυξη του κατάλληλου κώδικα για την επεξεργασία των δεδομένων περιλάμβανε ως προαπαιτούμενο την χρήση ειδικών πακέτων εντολών και συναρτήσεων της σουίτας RGeostats.

Κατά την εκπόνηση της παρούσας μελέτης, ως πρώτο στάδιο της επεξεργασίας των δεδομένων καθορίστηκε ο υπολογισμός των ιστογραμμάτων καθώς και ο έλεγχος της χωρικής εξάρτησης των δεδομένων μέσω υπολογισμού του εμπειρικού βαριογράμματος για καθένα από αυτά. Εν συνεχεία πραγματοποιήθηκε έλεγχος για την ύπαρξη πιθανών τάσεων καθώς και ανισοτροπίας στα δεδομένα του κάθε βαρέως μετάλλου. Αυτό έγινε μέσω σύγκρισης του τετραγωνικού σφάλματος των τριών θεωρητικών μοντέλων (Σφαιρικό, Εκθετικό, Γκαουσιανό). Η διαδικασία αυτή οδήγησε στην επιλογή του πλέον κατάλληλου θεωρητικού προτύπου, με σκοπό την αποτελεσματική προσαρμογή του εμπειρικού βαριογράμματος.

Ως τελευταίο στάδιο της επεξεργασίας προσδιορίστηκε η εφαρμογή της στοχαστικής μεθόδου χωρικής παρεμβολής Κανονικού Kriging (Ordinary Kriging) για την εκτίμηση της κατανομής της συγκέντρωσης κάθε βαρέως μετάλλου, εντός των ορίων της περιοχής μελέτης. Σε αυτό το στάδιο της γεωστατιστικής ανάλυσης κατασκευάστηκαν χάρτες βασισμένοι στις εκτιμήσεις των συγκεντρώσεων σε σημεία του κανάβου μελέτης, ενώ μέσω της διασταυρωτικής επιβεβαίωσης (Cross Validation) αξιολογήθηκε η ακρίβεια των χωρικών μοντέλων.

Κατά την επεξεργασία του συνόλου των δεδομένων παρατηρήθηκε ότι μόνο εκείνα του Χρωμίου και του Νικελίου συμπίπτουν σε ικανοποιητικό βαθμό με την κανονική κατανομή. Έτσι λοιπόν εφαρμόστηκε λογαριθμικός μετασχηματισμός για το σύνολο των υπόλοιπων στοιχείων και με την βοήθεια των ιστογραμμάτων καθώς και των διαγραμμάτων κανονικής πιθανότητας, έγινε σύγκριση μεταξύ της αρχικής και της μετασχηματισμένης μορφής των δεδομένων ώστε να επιλέχθει η καταλληλότερη μορφή των δεδομένων, για καθένα από τα βαρέα μέταλλα.

Στο κυρίως σώμα της διπλωματικής εργασίας παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της επεξεργασίας των δεδομένων Χρωμίου και Ψευδαργύρου, αφού κατά την επεξεργασία διαπιστώθηκε ότι συμβάδιζαν σε μεγαλύτερο βαθμό με την κανονική κατανομή. Η χωρική ανάλυση της κατανομής των υπόλοιπων μετάλλων παρατίθεται στα Παραρτήματα Α και Β.

Κατά την διερεύνηση για την ύπαρξη τάσεων διαπιστώθηκε χαμηλή συσχέτιση μεταξύ των πραγματικών τιμών και των αποτελεσμάτων που προέκυψαν από την διασταυρωτική επιβεβαίωση, με αποτέλεσμα που υποδεικνύει ότι δεν υπάρχουν ισχυρές τάσεις, ενώ παράλληλα δεν διαπιστώθηκε ύπαρξη ανισοτροπίας στα δεδομένα τόσο του Χρωμίου όσο και του Ψευδάργυρου. Στα εμπειρικά βαριογράμματα που υπολογίστηκαν έγινε προσαρμογή του Εκθετικού θεωρητικού προτύπου και για τα δύο μέταλλα, μετά από τον υπολογισμό των τετραγωνικών σφαλμάτων. Αντίστοιχα το Εκθετικό μοντέλο χρησιμοποιήθηκε στην μέθοδο Kriging για την χωρική παρεμβολή των συγκεντρώσεων και των δύο μετάλλων, ώστε να παραχθούν εκτιμώμενοι χάρτες των συγκεντρώσεων καθώς και χάρτες που απεικονίζουν την αβεβαιότητα των εκτιμήσεων.

Αφιέρωση

Στην οικογένειά μου και στους φίλους μου.

Ευχαριστίες

Η παρούσα διπλωματική εργασία εκπονήθηκε στα πλαίσια του Προπτυχιακού Προγράμματος του Τμήματος Μηχανικών Ορυκτών Πόρων του Πολυτεχνείου Κρήτης υπό την επίβλεψη του Καθηγητή κ. Διονύσιου Χριστόπουλου. Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον κύριο Χριστόπουλο για την εμπιστοσύνη που μου έδειξε στην εκπόνηση της παρούσας διπλωματικής εργασίας, την συνεχή καθοδήγηση καθώς και τον χρόνο που μου αφιέρωσε. Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω τα υπόλοιπα μέλη της τριμελούς επιτροπής, τον Καθηγητή κ. Μιχαήλ Γαλετάκη για τη συνδρομή του καθώς και τον Δρ. Εμμανουήλ Βαρουχάκη του Τμήματος Μηχανικών Περιβάλλοντος.

Εν συνεχεία, θα ήθελα να εκφράσω τις ευχαριστίες μου στα μέλη του Εργαστηρίου Γεωστατιστικής, τον Δρ. Ανδρέα Παυλίδη, την κα. Βασιλική Άγου και την κα. Παναγιώτα Γκάφα, για την βοήθεια που μου προσέφεραν από την πρώτη στιγμή, κατά την διάρκεια εκπόνησης αυτής της διπλωματικής εργασίας.

Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένειά μου για την αμέριστη συμπαράσταση που μου προσέφερε όλα αυτά χρόνια, καθώς και τους φίλους μου.

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή	1
1.1	Σκοπός της διπλωματικής εργασίας	1
1.2	Βαρέα μέταλλα	2
1.2.1	Γενικά	2
1.2.2	Περιβαλλοντικό αποτύπωμα-ρύπανση	3
1.2.3	Επιπτώσεις εξόρυξης και επεξεργασίας μεταλλευμάτων	5
1.2.4	Επιβάρυνση του ανθρώπινου οργανισμού	5
1.3	Γεωγραφικές Πληροφορίες - Τύποι Πετρωμάτων Jura Mountains	6
1.3.1	Τοποθεσία	6
1.3.2	Τύποι Πετρωμάτων	7
2	Θεωρητικό υπόβαθρο	9
2.1	Γεωστατιστική και Τυχαία Πεδία	9
2.2	Συνοπτική θεωρία Τυχαίων Πεδίων	10
2.2.1	Τυχαία μεταβλητή	10
2.2.2	Τυχαίο Πεδίο	10
2.2.3	Στατιστική ομοιογένεια	11
2.2.4	Στατιστική ισοτροπία	12
2.2.5	Μέση τιμή, διασπορά και τυπική απόκλιση	13
2.3	Συνδιασπορά	14
2.3.1	Γενικά για τη συνδιασπορά	14
2.3.2	Μοντέλα συνδιασποράς	14
2.3.3	Παράμετροι συνδιασποράς και κριτήρια αποδοχής	16
2.4	Χωρική εξάρτηση	17

2.4.1	Υπολογισμός βαριογράμματος	18
2.4.2	Μοντέλα βαριογράμματος	19
2.4.3	Κριτήρια αποδοχής	20
2.5	Εκτίμηση με τη μέθοδο kriging	21
2.5.1	Γενικά	21
2.5.2	Είδη kriging	23
2.6	Απλό kriging (simple kriging)	23
2.6.1	Εκτίμηση	23
2.6.2	Γραμμικά βάρη	24
2.6.3	Σφάλματα	25
2.7	Κανονικό kriging (ordinary kriging)	25
2.7.1	Γραμμικά βάρη	26
2.7.2	Σφάλματα	27
2.7.3	Επιλογή της γειτονιάς συσχέτισης	27
2.8	Επιβεβαίωση των χωρικών μοντέλων	27
2.8.1	Σφάλματα αξιολόγησης	28
3	Γεωστατιστική Ανάλυση Δεδομένων	30
3.1	Στατιστική Ανάλυση Δεδομένων	31
3.2	Χωρική εξάρτηση δεδομένων	35
3.2.1	Εμπειρικό Βαριόγραμμα	36
3.2.2	Ανισοτροπία	46
3.3	Επιβεβαίωση Χωρικού Μοντέλου	48
3.4	Μέθοδος χωρικής παρεμβολής	50
3.4.1	Επιλογή Γειτονιάς Συσχέτισης	50
3.4.2	Εκτίμηση Συγκεντρώσεων στην Περιοχή Μελέτης	51
3.5	Συμπεράσματα	55
A'	Διαγράμματα Νικελίου (Ni)	57
B'	Διαγράμματα Μολύβδου (Pb), Χαλκού (Cu), Κοβαλτίου (Co), Καδμίου (Cd)	61
Γ'	Κώδικας R	78

Κατάλογος Σχημάτων

1.1	Αναπαράσταση οργάνωσης της εργασίας τήξης γύρω από μια υψικάμνο, στην Πάνορμο (Κονοφάγος, 1980).	4
1.2	Google Earth map, τα όρη Jura.	7
2.1	Βαριόγραμμα, όπου με κόκκινη γραμμή συμβολίζεται το φαινόμενο πυρήνα (Nugget Effect).	18
3.1	Ιστόγραμμα των δεδομένων του Χρωμίου πριν την εφαρμογή μετασχηματισμού.	33
3.2	Ιστόγραμμα των δεδομένων του Ψευδαργύρου πριν την εφαρμογή μετασχηματισμού.	33
3.3	Ιστόγραμμα των δεδομένων του Χρωμίου μετά την εφαρμογή μετασχηματισμού.	34
3.4	Ιστόγραμμα των δεδομένων του Ψευδαργύρου μετά την εφαρμογή μετασχηματισμού.	35
3.5	Γράφημα με τις θέσεις λήψης εδαφικών δειγμάτων στην περιοχή μελέτης.	36
3.6	Διαγράμματα κανονικής πιθανότητας για τις συγκεντρώσεις των μετάλλων Χρωμίου (μη λογαριθμημένα δεδομένα) και Ψευδαργύρου (λογαριθμημένα δεδομένα), με σκοπό να εξετασθεί αν τα δεδομένα ακολουθούν την κανονική κατανομή. Οι κύκλοι που απεικονίζονται στον άξονα Y αντιστοιχούν στις τιμές των δεδομένων, ενώ στον άξονα X απεικονίζονται οι θεωρητικές τιμές της κατανομής. Η ευθεία γραμμή σε καθένα από τα διαγράμματα περιγράφει την κανονική κατανομή.	37
3.7	Εμπειρικό βαριόγραμμα των δεδομένων του Χρωμίου.	39
3.8	Εμπειρικό βαριόγραμμα των δεδομένων του Ψευδαργύρου.	39

3.9	Απεικονίσεις των δοκιμών για το Χρώμιο, όπως αυτές προέκυψαν μετά την προσαρμογή του θεωρητικού Εκθετικού μοντέλου.	41
3.10	Απεικονίσεις των δοκιμών για το Χρώμιο, όπως αυτές προέκυψαν μετά την προσαρμογή του θεωρητικού Σφαιρικού μοντέλου.	42
3.11	Απεικονίσεις των δοκιμών για το Χρώμιο, όπως αυτές προέκυψαν μετά την προσαρμογή του θεωρητικού Γκαουσιανού μοντέλου.	42
3.12	Απεικονίσεις των δοκιμών για τον Ψευδάργυρο, όπως αυτές προέκυψαν μετά την προσαρμογή του θεωρητικού Εκθετικού μοντέλου.	44
3.13	Απεικονίσεις των δοκιμών για τον Ψευδάργυρο, όπως αυτές προέκυψαν μετά την προσαρμογή του θεωρητικού Σφαιρικού μοντέλου.	45
3.14	Απεικονίσεις των δοκιμών για τον Ψευδάργυρο, όπως αυτές προέκυψαν μετά την προσαρμογή του θεωρητικού Γκαουσιανού μοντέλου.	45
3.15	Διάγραμμα με τα κατευθυντικά βαριογράμματα που υπολογίστηκαν για τον έλεγχο της ανισοτροπίας στο σύνολο δεδομένων του Χρωμίου, στις κατευθύνσεις 0°, 45°, 90° και 135°.	47
3.16	Διάγραμμα με τα κατευθυντικά βαριογράμματα που υπολογίστηκαν για τον έλεγχο της ανισοτροπίας στο σύνολο δεδομένων του Ψευδαργύρου, στις κατευθύνσεις 0°, 45°, 90° και 135°.	47
3.17	Χάρτης του Kriging με τις εκτιμήσεις των συγκεντρώσεων (σε ppm) για το σύνολο δεδομένων του Χρωμίου (Cr), χρησιμοποιώντας τετραγωνικό πλέγμα με κελιά μεγέθους 50×52 μέτρων.	52
3.18	Χάρτης του Kriging με τις εκτιμήσεις των συγκεντρώσεων για το σύνολο δεδομένων του Ψευδαργύρου (Zn), σε ppm, χρησιμοποιώντας τετραγωνικό πλέγμα με κελιά μεγέθους 26×27 μέτρων.	52
3.19	Χάρτης με τα σφάλματα των εκτιμήσεων του Kriging για το σύνολο δεδομένων του Χρωμίου (Cr), σε ppm.	54
3.20	Χάρτης με τα σφάλματα των εκτιμήσεων του Kriging για το σύνολο δεδομένων του Ψευδαργύρου (Zn), σε ppm.	54
A'1	Ιστόγραμμα των δεδομένων του Νικελίου χωρίς την εφαρμογή μετασχηματισμού.	57

A'.2	Διάγραμμα κανονικής πιθανότητας της συγκέντρωσης για το Νικέλιο, με σκοπό να εξετασθεί αν τα δεδομένα ακολουθούν την κανονική κατανομή. Οι κύκλοι που απεικονίζονται στον άξονα Υ αντιστοιχούν στις τιμές των δεδομένων, ενώ στον άξονα Χ απεικονίζονται οι θεωρητικές τιμές της κατανομής. Η ευθεία γραμμή περιγράφει την κανονική κατανομή.	58
A'.3	Εμπειρικό βαριόγραμμα για το σύνολο των δεδομένων του Νικελίου. .	58
A'.4	Διάγραμμα με τα κατευθυντικά βαριογράμματα που υπολογίστηκαν για τον έλεγχο της ανισοτροπίας, για το σύνολο των δεδομένων του Νικελίου, στις κατευθύνσεις 0°, 45°, 90° και 135°.	59
A'.5	Απεικόνιση της δοκιμής του Εκθετικού θεωρητικού μοντέλου για το σύνολο δεδομένων του Νικελίου, το οποίο επιλέχθηκε μετά από σύγκριση των τετραγωνικών σφαλμάτων που προέκυψαν μετά την προσαρμογή των θεωρητικών μοντέλων (Εκθετικό, Σφαιρικό, Γκαουσιανό).	59
A'.6	Χάρτης του Kriging με τις εκτιμήσεις των συγκεντρώσεων για το σύνολο των δεδομένων του Νικελίου.	60
A'.7	Χάρτης με τα σφάλματα των εκτιμήσεων του Kriging για το σύνολο των δεδομένων του Νικελίου.	60
B'.1	Ιστόγραμμα των δεδομένων του Μολύβδου, μετά την εφαρμογή μετασχηματισμού με λογάριθμο.	62
B'.2	Διάγραμμα κανονικής πιθανότητας της συγκέντρωσης για τον Μόλυβδο, με σκοπό να εξετασθεί αν τα δεδομένα ακολουθούν την κανονική κατανομή. Οι κύκλοι που απεικονίζονται στον άξονα Υ αντιστοιχούν στις τιμές των δεδομένων, ενώ στον άξονα Χ απεικονίζονται οι θεωρητικές τιμές της κατανομής. Η ευθεία γραμμή περιγράφει την κανονική κατανομή.	63
B'.3	Εμπειρικό βαριόγραμμα για το σύνολο των δεδομένων του Μολύβδου. .	63
B'.4	Διάγραμμα με τα κατευθυντικά βαριογράμματα που υπολογίστηκαν για τον έλεγχο της ανισοτροπίας, για το σύνολο των δεδομένων του Μολύβδου, στις κατευθύνσεις 0°, 45°, 90° και 135°.	64

B'.5	Απεικόνιση της δοκιμής του Εκθετικού θεωρητικού μοντέλου για το σύνολο δεδομένων του Μολύβδου, το οποίο επιλέχθηκε μετά από σύγκριση των τετραγωνικών σφαλμάτων που προέκυψαν μετά την προσαρμογή των θεωρητικών μοντέλων (Εκθετικό, Σφαιρικό, Γκαουσιανό).	64
B'.6	Χάρτης του Kriging με τις εκτιμήσεις των συγκεντρώσεων για το σύνολο των δεδομένων του Μολύβδου.	65
B'.7	Χάρτης με τα σφάλματα των εκτιμήσεων του Kriging για το σύνολο των δεδομένων του Μολύβδου.	65
B'.8	Ιστόγραμμα των δεδομένων του Χαλκού, μετά την εφαρμογή μετασχηματισμού με λογάριθμο.	66
B'.9	Διάγραμμα κανονικής πιθανότητας της συγκέντρωσης για τον Χαλκό, με σκοπό να εξετασθεί αν τα δεδομένα ακολουθούν την κανονική κατανομή. Οι κύκλοι που απεικονίζονται στον άξονα Y αντιστοιχούν στις τιμές των δεδομένων, ενώ στον άξονα X απεικονίζονται οι θεωρητικές τιμές της κατανομής. Η ευθεία γραμμή περιγράφει την κανονική κατανομή.	67
B'.10	Εμπειρικό βαριόγραμμα για το σύνολο των δεδομένων του Χαλκού.	67
B'.11	Διάγραμμα με τα κατευθυντικά βαριογράμματα που υπολογίστηκαν για τον έλεγχο της ανισοτροπίας, για το σύνολο των δεδομένων του Χαλκού, στις κατευθύνσεις 0°, 45°, 90° και 135°.	68
B'.12	Απεικόνιση της δοκιμής του Εκθετικού θεωρητικού μοντέλου για το σύνολο δεδομένων του Χαλκού, το οποίο επιλέχθηκε μετά από σύγκριση των τετραγωνικών σφαλμάτων που προέκυψαν μετά την προσαρμογή των θεωρητικών μοντέλων (Εκθετικό, Σφαιρικό, Γκαουσιανό).	68
B'.13	Χάρτης του Kriging με τις εκτιμήσεις των συγκεντρώσεων για το σύνολο των δεδομένων του Χαλκού.	69
B'.14	Χάρτης με τα σφάλματα των εκτιμήσεων του Kriging για το σύνολο των δεδομένων του Χαλκού.	69
B'.15	Ιστόγραμμα των δεδομένων του Κοβαλτίου, μετά την εφαρμογή μετασχηματισμού με λογάριθμο.	70

B'.16 Διάγραμμα κανονικής πιθανότητας της συγκέντρωσης για το Κοβάλτιο, με σκοπό να εξετασθεί αν τα δεδομένα ακολουθούν την κανονική κατανομή. Οι κύκλοι που απεικονίζονται στον άξονα Y αντιστοιχούν στις τιμές των δεδομένων, ενώ στον άξονα X απεικονίζονται οι θεωρητικές τιμές της κατανομής. Η ευθεία γραμμή περιγράφει την κανονική κατανομή.	71
B'.17 Εμπειρικό βαριόγραμμα για το σύνολο των δεδομένων του Κοβαλτίου.	71
B'.18 Διάγραμμα με τα κατευθυντικά βαριογράμματα που υπολογίστηκαν για τον έλεγχο της ανισοτροπίας, για το σύνολο των δεδομένων του Κοβαλτίου, στις κατευθύνσεις 0°, 45°, 90° και 135°.	72
B'.19 Απεικόνιση της δοκιμής του Σφαιρικού θεωρητικού μοντέλου για το σύνολο δεδομένων του Κοβαλτίου, το οποίο επιλέχθηκε μετά από σύγκριση των τετραγωνικών σφαλμάτων που προέκυψαν μετά την προσαρμογή των θεωρητικών μοντέλων (Εκθετικό, Σφαιρικό, Γκαουσιανό).	72
B'.20 Χάρτης του Kriging με τις εκτιμήσεις των συγκεντρώσεων για το σύνολο των δεδομένων του Κοβαλτίου.	73
B'.21 Χάρτης με τα σφάλματα των εκτιμήσεων του Kriging για το σύνολο των δεδομένων του Κοβαλτίου.	73
B'.22 Ιστόγραμμα των δεδομένων του Καδμίου, μετά την εφαρμογή μετασχηματισμού με λογάριθμο.	74
B'.23 Διάγραμμα κανονικής πιθανότητας της συγκέντρωσης για το Κάδμιο, με σκοπό να εξετασθεί αν τα δεδομένα ακολουθούν την κανονική κατανομή. Οι κύκλοι που απεικονίζονται στον άξονα Y αντιστοιχούν στις τιμές των δεδομένων, ενώ στον άξονα X απεικονίζονται οι θεωρητικές τιμές της κατανομής. Η ευθεία γραμμή περιγράφει την κανονική κατανομή.	75
B'.24 Εμπειρικό βαριόγραμμα για το σύνολο των δεδομένων του Καδμίου.	75
B'.25 Διάγραμμα με τα κατευθυντικά βαριογράμματα που υπολογίστηκαν για τον έλεγχο της ανισοτροπίας, για το σύνολο των δεδομένων του Καδμίου, στις κατευθύνσεις 0°, 45°, 90° και 135°.	76

B'.26 Απεικόνιση της δοκιμής του Σφαιρικού θεωρητικού μοντέλου για το σύνολο δεδομένων του Καδμίου, το οποίο επιλέχθηκε μετά από σύγκριση των τετραγωνικών σφαλμάτων που προέκυψαν μετά την προσαρμογή των θεωρητικών μοντέλων (Εκθετικό, Σφαιρικό, Γκαουσιανό).	76
B'.27 Χάρτης του Kriging με τις εκτιμήσεις των συγκεντρώσεων για το σύνολο των δεδομένων του Καδμίου.	77
B'.28 Χάρτης με τα σφάλματα των εκτιμήσεων του Kriging για το σύνολο των δεδομένων του Καδμίου.	77

Κατάλογος Πινάκων

3.1	Στατιστικά στοιχεία των συγκεντρώσεων βαρέων μετάλλων (σε ppm), όπου Μ.Τ. Μέση Τιμή, Δ. Διάμεσος, Τ.Α. Τυπική Απόκλιση, Ε. Ελάχιστο και Μ. Μέγιστο.	32
3.2	Μετρήσεις επιβεβαίωσης (Validation Measures) της τάσης, καθώς οι συντελεστές των εξισώσεων αυτής, για τα σύνολα δεδομένων Χρωμίου και Ψευδαργύρου, όπου ρ: ο Συντελεστής Συσχέτισης Pearson (Pearson[Pleaseinsertintopreamble]s Correlation Coefficient), ME: το Μέσο Σφάλμα, MAE: το Μέσο Απόλυτο Σφάλμα, MaxAE: το Μέγιστο Απόλυτο Σφάλμα και RMSE: το Μέσο Τετραγωνικό Σφάλμα.	38
3.3	Τιμές των τετραγωνικών σφαλμάτων με σκοπό την επιλογή του κατάλληλου θεωρητικού μοντέλου για τα δεδομένα του Χρωμίου.	41
3.4	Παράμετροι που προέκυψαν από την προσαρμογή του εκθετικού θεωρητικού μοντέλου στο εμπειρικό βαριόγραμμα, όπως υπολογίστηκε για τα δεδομένα του Χρωμίου.	43
3.5	Τιμές των τετραγωνικών σφαλμάτων με σκοπό την επιλογή του κατάλληλου θεωρητικού μοντέλου για τα δεδομένα του Ψευδαργύρου.	44
3.6	Παράμετροι που προέκυψαν από την προσαρμογή του Εκθετικού θεωρητικού μοντέλου στο εμπειρικό βαριόγραμμα, όπως υπολογίστηκε για τα δεδομένα του Ψευδαργύρου.	46
3.7	Τιμές του φαινομένου πυρήνα (Nugget Effect) ως παράμετρο της προσαρμογής του εκθετικού θεωρητικού μοντέλου στα κατευθυντικά βαριόγραμμα, για το σύνολο δεδομένων του Χρωμίου.	48

3.8	Τιμές του φαινομένου πυρήνα (Nugget Effect) ως παράμετρο της προσαρμογής του εκθετικού θεωρητικού μοντέλου στα κατευθυντικά βαριογράμματα, για το σύνολο δεδομένων του Ψευδαργύρου.	48
3.9	Τιμές των μηκών συσχέτισης ως παράμετρο της προσαρμογής του εκθετικού θεωρητικού μοντέλου στα κατευθυντικά βαριογράμματα καθώς και τις τιμές της ανισοτροπίας για τα σύνολα δεδομένων του Χρωμίου και Ψευδαργύρου.	48
3.10	Τιμές των μεγεθών που χρησιμοποιήθηκαν για την επαλήθευση της μεθόδου του βαριογράμματος. Παρουσιάζονται οι τιμές για τις εξής παραμέτρους: το Μέσο Τετραγωνικό Σφάλμα (RMSE), το Μέσο Σφάλμα (ME), το Μέσο Απόλυτο Σφάλμα (MAE) και ο Συντελεστής Συσχέτισης Pearson (Pearson's Correlation Coefficient) (ρ).	50

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

1.1 Σκοπός της διπλωματικής εργασίας

Η παρούσα διπλωματική εργασία εκπονήθηκε με σκοπό να εξετάσει μέσω της γεωστατιστικής ανάλυσης την κατανομή των συγκεντρώσεων επτά διαφορετικών βαρέων μετάλλων (Cr, Zn, Pb, Ni, Cu, Co, Cd) σε μια περιοχή μελέτης. Τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν είναι μέρος του Jura Data Set, ενός συνόλου μετρήσεων που συλλέχθηκαν από το Ελβετικό Κρατικό Ινστιτούτο Τεχνολογίας της Λωζάνης και αντιπροσωπεύουν τις συγκεντρώσεις επτά βαρέων μετάλλων σε 359 διαφορετικές θέσεις λήψης εδαφικών δειγμάτων.

Τα βαρέα μέταλλα παρουσιάζουν σημαντικό περιβαλλοντικό ενδιαφέρον λόγω των προβλημάτων που δημιουργούν, καθώς και οικονομικό ενδιαφέρον λόγω της ευρείας χρήσης τους. Καθίσταται σημαντική η μελέτη τους ώστε να υπάρχει επαρκής πληροφόρηση σχετικά με τις επιπτώσεις τους, τόσο στο περιβάλλον όσο και στον ανθρώπινο οργανισμό και στις ανθρώπινες δραστηριότητες γενικότερα. Έτσι, η επιστήμη της γεωστατιστικής παίζει κυρίαρχο ρόλο στην μελέτη των βαρέων μετάλλων, καθώς είναι δυνατό να γίνει εκτίμηση της κατανομής των περιεκτικότητων τους καθώς και άλλων σημαντικών παραμέτρων, σε μία περιοχή μελέτης. Η γνώση τέτοιων πληροφοριών μπορεί να συνδράμει καθοριστικά στην λήψη αποφάσεων, είτε για την

αντιμετώπιση της περιβαλλοντικής ρύπανσης, είτε για την αξιολόγηση κοιτασμάτων με οικονομικό ενδιαφέρον.

1.2 Βαρέα μέταλλα

1.2.1 Γενικά

Ως τοξικά βαρέα μέταλλα αναφέρονται εκείνα τα οποία βρίσκονται σε μορφή ιόντων και χαρακτηρίζονται ως τοξικά για τους ζωντανούς οργανισμούς. Η τοξικότητα που προκαλείται από την λήψη βαρέων μετάλλων μέσω της διόδου του στόματος ή από την εισπνοή ειδικότερα του μολύβδου και του υδραργύρου, αναφέρεται ως δηλητηρίαση από βαρέα μέταλλα[1].

Τοξικό βαρύ μέταλλο είναι οποιοδήποτε σχετικά πυκνό μέταλλο ή μεταλλοειδές που σημειώνεται για την πιθανή τοξικότητά του, ιδιαίτερα σε περιβαλλοντικά πλαίσια. Ο όρος έχει ιδιαίτερη εφαρμογή στο κάδμιο, τον υδράργυρο, το μόλυβδο και το αρσενικό, τα οποία εμφανίζονται στην κατάλογο της Παγκόσμιας Οργάνωσης Υγείας, για τα 10 χημικά που εγκυμονούν σοβαρούς κινδύνους για τη δημόσια υγεία.

Η λίστα των μετάλλων ρυπαντών της Υπηρεσίας Προστασίας του Περιβάλλοντος των Ηνωμένων Πολιτειών Αμερικής περιλαμβάνει 13 μέταλλα (Ag, As, Be, Cd, Cr, Cu, Hg, Ni, Pb, Sb, Se, Tl, Zn), τα οποία προέρχονται από φυσικές και ανθρωπογενείς πηγές. Η φυσική προέλευσή τους είναι το μητρικό υλικό και τα μεταλλικά ορυκτά, ενώ οι ανθρωπογενείς πηγές τους περιλαμβάνουν τη γεωργία, τη μεταλλουργία, την παραγωγή ενέργειας καθώς και την διάθεση αποβλήτων.

Τα τοξικά βαρέα μέταλλα βρίσκονται φυσικά στη γη και συγκεντρώνονται ως αποτέλεσμα ανθρώπινων δραστηριοτήτων. Εισβάλλουν στους ιστούς των φυτών, των ζώων και των ανθρώπων μέσω της εισπνοής και της διατροφής. Οι τοξικές επιπτώσεις του αρσενικού, του υδραργύρου και του μολύβδου ήταν γνωστές στους αρχαίους, αλλά μελέτες της τοξικότητας ορισμένων βαρέων μετάλλων χρονολογούνται από το

1868. Στους ανθρώπους, η δηλητηρίαση από βαρέα μέταλλα συνήθως αντιμετωπίζεται με τη χορήγηση χηλικών παραγόντων. Ορισμένα από αυτά που θεωρούνται ως τοξικά βαρέα μέταλλα είναι απαραίτητα, σε μορφή ιχνοστοιχείων, για την ανθρώπινη υγεία.

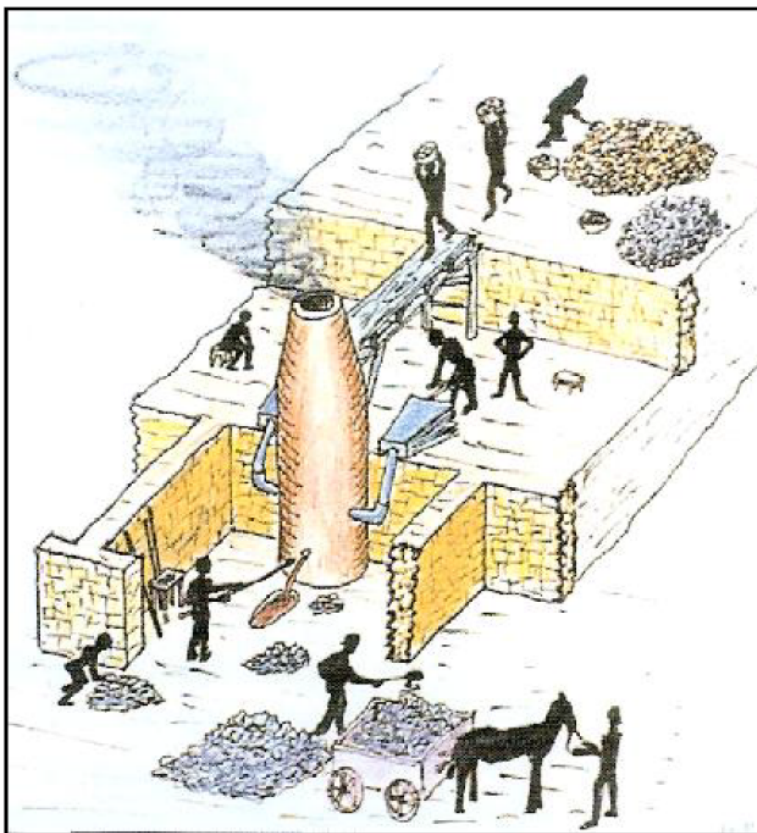
1.2.2 Περιβαλλοντικό αποτύπωμα-ρύπανση

Με την εξέλιξη του ανθρώπου (αστικοποίηση, εκβιομηχάνιση), στο σχετικά πρόσφατο γεωλογικό παρελθόν, υπήρξαν ανθρωπογενείς επιπτώσεις στο περιβάλλον, οι οποίες έχουν αυξηθεί δραματικά, επιπλέον λόγω της αύξησης του πληθυσμού της Γης. Έτσι, εξαιτίας της ανθρώπινης δραστηριότητας έχει ρυπανθεί το άλλοτε παρθένο φυσικό περιβάλλον. Η ρύπανση του εδάφους ξεκινά από την προσπάθεια του ανθρώπου να εξορύσσει μεταλλεύματα, ήδη από την εποχή του χαλκού, μετά το 2500 π.Χ.

Τα βαρέα μέταλλα σχετίζονται με πλήθος ανθρώπινων δραστηριοτήτων. Η χρήση τους στη χημική βιομηχανία είναι δεδομένη: βιομηχανίες παραγωγής χρωμάτων, φωτογραφικών υλικών, ηλεκτρονικού υλικού, παρασιτοκτόνων, συσσωρευτών, πυρομαχικών, μεταλλουργία κ.λπ. χρησιμοποιούν σε διάφορες ποσότητες και αναλογίες ενώσεις που περιέχουν βαρέα μέταλλα, είτε ως πρώτη ύλη είτε ως καταλύτες[11].

Έτσι, στις ανθρώπινες δραστηριότητες, που έχουν ως αποτέλεσμα τη μόλυνση του εδαφικού περιβάλλοντος περιλαμβάνονται:

1. Εξόρυξη ορυκτών και επεξεργασία.
2. Τήξη και εμπλουτισμός μεταλλευμάτων (βλ. Σχήμα 1.1).
3. Παραγωγή ηλεκτρικού ρεύματος-ορυκτά καύσιμα, πυρηνική ενέργεια.
4. Βιομηχανικές και κατασκευαστικές δραστηριότητες, χημικές βιομηχανίες, κατασκευή αγωγών, κεραμική και βιομηχανία γυαλιού, παρασκευή χρωμάτων και λιπασμάτων.
5. Ρύποι από μεταφορά σε μεγάλη απόσταση.



Σχήμα 1.1: Αναπαράσταση οργάνωσης της εργασίας τήξης γύρω από μια υψικάμνο, στην Πάνορμο (Κονοφάγος, 1980).

6. Γεωργικές πρακτικές εφαρμογές με βάση ορυκτά λιπάσματα, εφαρμογή φυτοφαρμάκων και ζιζανιοκτόνων.
7. Διάθεση αποβλήτων και απορριμμάτων των νοικοκυριών, καύση των απορριμμάτων.
8. Χρήση χάλκινων αγωγών από βιομηχανίες για την ψύξη μηχανημάτων με αποτέλεσμα λόγω διάβρωσης ποσότητες χαλκού να οδηγούνται στη θάλασσα.

1.2.3 Επιπτώσεις εξόρυξης και επεξεργασίας μεταλλευμάτων

Η εξόρυξη των μεταλλευμάτων και εν συνεχεία ο διαχωρισμός και εξευγενισμός των διαφόρων συστατικών τους, είναι μία από τις σοβαρότερες πηγές μόλυνσης των εδαφών, των υδάτων και γενικότερα της βιόσφαιρας. Μετά την εξόρυξή τους τα μεταλλεύματα μεταφέρονται σε εργοστάσια μεταλλουργίας.

Η πυρομεταλλουργική επεξεργασία, συνεπάγεται υψηλές θερμοκρασίες, κάτι που έχει ως επακόλουθο την εκπομπή μεγάλων ποσοτήτων δυνητικά επιβλαβών στοιχείων. Οι εκπομπές των μεταλλουργικών εργοστασίων μπορεί να είναι υπό μορφή αερίων, όπως το διοξείδιο του θείου, τα αερολύματα (όπως PbO, CdO) καθώς και μεγαλύτερα σωματίδια. Επίσης στην μεταλλουργία χρησιμοποιούνται πολλά από αυτά τα μέταλλα για την παρασκευή κραμάτων, που έχουν ως βασικό προϊόν τον χάλυβα, ο οποίος συμβάλλει στην απελευθέρωση πολλών στοιχείων στην ατμόσφαιρα[1].

1.2.4 Επιβάρυνση του ανθρώπινου οργανισμού

Τα βαρέα μέταλλα αποτελούν κίνδυνο για την δημόσια υγεία, στις βιομηχανικές χώρες και όχι μόνο. Ο γενικός πληθυσμός εκτίθεται σε ιχνοστοιχεία βαρέων μετάλλων μέσω του πόσιμου νερού, των τροφίμων και την εισπνοής του αέρα. Η απορρόφηση των ιχνοστοιχείων στον ανθρώπινο οργανισμό πραγματοποιείται μέσω του γαστρεντερικού σωλήνα, του αναπνευστικού συστήματος καθώς και του δέρματος.

Η σχέση μεταξύ των οργανισμών και του οικοσυστήματος, καθώς και η αλληλεπίδραση των ασθενειών που εκδηλώνονται, με γεωλογικούς παράγοντες, παρουσιάζει μεγάλο ενδιαφέρον. Η γεωγραφική κατανομή των ιχνοστοιχείων και των μετάλλων στην φύση μπορεί να εξηγήσει τη φυσική ανεπάρκεια ή την τοξικότητα, στις οποίες αποδίδονται διάφορα προβλήματα υγείας στον ανθρώπινο οργανισμό. Οι ποσότητες των ιχνοστοιχείων πρέπει να βρίσκονται σε ισορροπία. Τα μέταλλα που είναι απαραίτητα για την ζωή δύνανται να προκαλέσουν σημαντικά προβλήματα στην ανθρώπινη υγεία, εάν η έκθεση του οργανισμού σε αυτά είναι υπερβολική.

1.3 Γεωγραφικές Πληροφορίες - Τύποι Πετρωμάτων Jura Mountains

1.3.1 Τοποθεσία

Τα Όρη Jura είναι ένα σύστημα οροσειρών το οποίο εκτείνεται για περίπου 370χλμ. στην Κεντρική Ευρώπη, στα βορειοδυτικά της Ελβετίας και στα ανατολικά της Γαλλίας μπροστά στο δυτικό αλπικό τόξο. Βρίσκονται κυρίως στην Ελβετία, αλλά ένα μεγάλο μέρος του δυτικού τομέα βρίσκεται στην Γαλλία. Στην Ελβετία, το μεγαλύτερο εύρος τους περιλαμβάνεται στα καντόνια της Βασιλείας, της Jura, της Βέρνης, του Neuchatel και του Vaud.

Οι υψηλότερες κορυφές των Jura, βρίσκονται στον νότο, στην ευρύτερη περιοχή της Γενεύης και περιλαμβάνουν το Crêt de la Neige (1.718 μέτρα) και το Le Reculet (1.733 μέτρα), τόσο στη Γαλλία όσο και στο όρος Tendre και La Dôle, και τα δύο πάνω από 1.680 μέτρα (βλ. Σχήμα 1.2).

Στον νότο, τα βουνά Jura συνδέονται με το Αλπικό μέτωπο, ωστόσο, στα βορειοανατολικά χωρίζονται από την Αλπική αλυσίδα από την λεκάνη Molasse η οποία έχει πλάτος έως 50χλμ. κοντά στον ανατολικό όριο των Jura και βορειοδυτικά της Ζυρίχης.

Ο σχηματισμός τους ξεκίνησε την Καινοζωική Εποχή (τα τελευταία 65 εκατομμύρια χρόνια) ως μέρος των ίδιων μετακινήσεων της Γης που σχημάτισαν τις Άλπεις. Η κύρια παραμορφωτική ώθηση συνέβη από τα νοτιοανατολικά και έγινε κατά την διάρκεια της Πελοκεντρικής Εποχής (περίπου 5,3 έως 2,6 εκατομμύρια χρόνια πριν). Συνεπώς η διαδικασία σχηματισμού τους πραγματοποιήθηκε σε τουλάχιστον δύο ξεχωριστές φάσεις: η πρώτη σχημάτισε την εξωτερική Γαλλική αλυσίδα κορυφογραμμών και η δεύτερη σχημάτισε τις γειτονικές, υψηλότερες εσωτερικές οροσειρές. Γεωλογικά, τα όρη Jura είναι μέρος του Αλπικού συστήματος.

Κυρίαρχο ρόλο στην στρωματογραφία των βουνών Jura κατέχει ο ασβεστόλιθος, ο οποίος εναλλάσσεται με μαλακότερα στρώματα μαργών που περιέχουν ποικίλες



Σχήμα 1.2: Google Earth map, τα όρη Jura.

ποσότητες αργίλου και λάσπης κάτι που έχει ως αποτέλεσμα μεγάλη διαπερατότητα και ως επακόλουθο την ανεπάρκεια επιφανειακών υδάτων. Επίσης απαντώνται ακανόνιστα μπλοκ γνευσίων, γρανιτών και άλλων κρυσταλλικών σχηματισμών.

1.3.2 Τύποι Πετρωμάτων

Οι κύριοι τύποι πετρωμάτων που επικρατούν στα Ελβετικά όρη Jura και την λεκάνη Molasse είναι:

1. Κρυσταλλικά πετρώματα κυρίως Παλαιοζωικής εποχής. Πιο συγκεκριμένα απαντώνται Γρανίτες, οι οποίοι συμμετέχουν στα χαμηλότερα επίπεδα των σχηματισμών, αλλά η ακριβής θέση τους είναι δύσκολο να προσδιοριστεί.
2. Πετρώματα που κατατάσσονται στην Μεσοζωική εποχή και αποτελούνται από ιζήματα της Τριαδικής και Ιουρασικής περιόδου. Τα πετρώματα αυτά αποτελούνται από ανθρακικά άλατα και άλλα εβαποριτικά πετρώματα, που είχαν

αποτεθεί σε αβαθείς λίμνες αυτής της περιόδου. Παράλληλα τα πετρώματα που απαντώνται στις κορυφές των Jura, κατά κύριο λόγο ασβεστόλιθοι και μάρμαρα.

3. Τριτογενείς κλαστικούς σχηματισμούς βράχων, οι οποίοι αναπτύσσονται από τα βορειοανατολικά προς τα νοτιοδυτικά.

Κεφάλαιο 2

Θεωρητικό υπόβαθρο

2.1 Γεωστατιστική και Τυχαία Πεδία

Γεωστατιστική είναι η επιστήμη που επικεντρώνεται σε χωρικά και χωροχρονικά σύνολα δεδομένων και περιλαμβάνει μεθόδους εκτίμησης αποθεμάτων και εξάπλωσης ρύπανσης, για εξορυκτικές ή περιβαλλοντικές δραστηριότητες[2]. Αυτές οι μέθοδοι μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον χαρακτηρισμό χωρικών και χρονικών ιδιοτήτων, λαμβάνοντας υπόψη τη θεωρία των τυχαίων πεδίων.

Αυτό που ορίζουμε ως *τυχαίο πεδίο* συνίσταται από ένα αποτελεσματικό αριθμητικό πλαίσιο για την ανάλυση των δεδομένων που μας ενδιαφέρουν και χρησιμοποιείται με τον ίδιο τρόπο που εφαρμόζεται η ανάλυση χρονοσειρών σε χρονικά δεδομένα. Λόγω της συνεχούς διαφοροποίησης μιας πεπερασμένης γεωγραφικής (χωρικής) θέσης στο χρόνο, ο αριθμός των μεταβλητών που απαιτείται ώστε να περιγραφεί ικανοποιητικά και με πληρότητα μία χωρική διαδικασία, τείνει στο άπειρο. Η Γεωστατιστική βρίσκει σήμερα εφαρμογή σε πολλά επιστημονικά πεδία, όπως για παράδειγμα στην τοπογραφία, στη γεωγραφική απεικόνιση και χαρτογραφία, στη μετεωρολογία[4], στην έρευνα κοιτασμάτων[13] και στη μελέτη του περιβάλλοντος γενικότερα, όπως π.χ. στις μετρήσεις ποιότητας του αέρα, του υδροφόρου ορίζοντα και του υπεδάφους.

Οι παράγοντες στους οποίους μπορεί να οφείλεται η τυχαιότητα που υπεισέρχεται στη μελέτη των τυχαίων πεδίων συνήθως μπορούν να χαρακτηρισθούν ως: εγγενείς (παράγοντες με σημαντική χωρική και χρονική μεταβλητότητα), ή μη εγγενείς (παράγοντες που προέρχονται από πειραματικές διαδικασίες ή από μεταβολές του υπό εξέταση περιβάλλοντος[2]).

2.2 Συνοπτική θεωρία Τυχαίων Πεδίων

2.2.1 Τυχαία μεταβλητή

Τυχαία μεταβλητή X ονομάζουμε μία μεταβλητή η οποία μπορεί να λάβει τιμές από ένα σύνολο πιθανών τιμών. Μια τυχαία μεταβλητή ονομάζεται διακριτή αν παίρνει τιμές x_i όπου $i = 1, 2, \dots, N$ και η συχνότητα εμφάνισης της κάθε τιμής προσδιορίζεται από μία συγκεκριμένη συνάρτηση πιθανότητας. Η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας[17] προσδιορίζει την πιθανότητα η τυχαία μεταβλητή X να παίρνει τιμές από ένα απειροελάχιστο διάστημα γύρω από το x .

Αναμενόμενη τιμή $E[X]$ τυχαίας μεταβλητής X ονομάζουμε τη μέση τιμή της τυχαίας μεταβλητής, μέσα από το σύνολο των τιμών που εμφανίζει, ενώ επιπλέον η κατανομή πιθανοτήτων των x_i ακολουθεί μία συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας (pdf) $f(x)$. Η αναμενόμενη τιμή δίνεται από τον τύπο:

$$E[X] = \int_{-\infty}^{+\infty} x f(x) dx \quad (2.1)$$

2.2.2 Τυχαίο Πεδίο

Ως **τυχαίο πεδίο** X_s θεωρούμε μία συλλογή τυχαίων τιμών οι οποίες κατανέμονται στο χώρο, με το διάνυσμα s να αντιστοιχεί στη χωρική θέση του κάθε σημείου. Ένα τυχαίο πεδίο είναι διακριτό όταν απαρτίζεται από ένα πεπερασμένο και συγκεκριμένο σύνολο τυχαίων αριθμών, με τους δείκτες τους s να ανήκουν σε ένα χώρο n -διαστάσεων, το χώρο δηλαδή που μελετάμε. Με άλλα λόγια, ένα τυχαίο πεδίο αποτελείται από ένα σύνολο τυχαίων μεταβλητών που περιγράφουν κάποια χωρική αλλαγή ως μία

πολυδιάστατη τυχαία μεταβλητή. Λόγω της αλληλεξάρτησης των φυσικών μεγεθών σε διαφορετικές θέσεις στο χώρο, τα τυχαία πεδία έχουν μοναδικές μαθηματικές ιδιότητες, γεγονός που τα κάνει να ξεχωρίζουν από ένα σύνολο ανεξάρτητων τυχαίων μεταβλητών[9, 2].

Ένα σημαντικό μέγεθος που πρέπει να ορίσουμε είναι και η στατιστική διακύμανση του τυχαίου πεδίου X_s . Αυτή δίνεται από την εξίσωση:

$$X'_s = X(s) - E[X(s)] \quad (2.2)$$

η οποία υπολογίζει τις διακυμάνσεις των τιμών των X_s γύρω από την αναμενόμενη τιμή τους, σε αυτές τις θέσεις.

2.2.3 Στατιστική ομοιογένεια

Προκειμένου να μελετήσουμε με μεγαλύτερη ευκολία (απλουστεύοντας την πολυπλοκότητα) κάνουμε ορισμένες παραδοχές που θέτουν περιορισμούς στις ιδιότητες ενός τυχαίου πεδίου. Η παραδοχή της **στατιστικής ομοιογένειας** είναι μια από τις πλέον συνήθεις και περιγράφεται ως εξής: Μια ιδιότητα είναι ομοιογενής αν η αντίστοιχη μεταβλητή η οποία την αντιπροσωπεύει έχει σταθερή τιμή στο χώρο.

Σύμφωνα με το παραπάνω, ένα τυχαίο πεδίο X_s θα εμφανίζει στατιστική ομοιογένεια, αν η μέση τιμή $m_X(s) = m_X$ είναι σταθερή, αν η συνάρτηση συνδιασποράς, όπως φαίνεται και παρακάτω στη Σχέση (2.6), ορίζεται και εξαρτάται αποκλειστικά από το διάνυσμα της απόστασης $r = s_1 - s_2$ μεταξύ των δύο σημείων και όχι από την απόλυτη θέση τους $c_X(s_1, s_2) = c_X(r)$, και η διασπορά του πεδίου είναι σταθερή. Λέμε τότε ότι η στατιστική ομοιογένεια του τυχαίου πεδίου εξασφαλίζεται κατά την ασθενή έννοια. Αντίθετα, κατά την ισχυρή έννοια, ένα τυχαίο πεδίο είναι στατιστικώς ομοιογενές όταν η πολυδιάστατη συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας για N σημεία (όπου N οποιοσδήποτε θετικός ακέραιος αριθμός) παραμένει αμετάβλητη από μετασχηματισμούς οι οποίοι αλλάζουν την θέση των σημείων χωρίς να αλλάζουν τις μεταξύ τους αποστάσεις.

Επομένως, η έννοια της στατιστικής ομοιογένειας υφίσταται όταν οι στατιστικές ιδιότητες ενός τυχαίου πεδίου δεν εξαρτώνται από τις χωρικές συντεταγμένες των σημείων, άρα είναι ανεξάρτητες από το σύστημα αναφοράς. Πρακτικά η στατιστική ομοιογένεια προϋποθέτει ότι δεν υπάρχουν συστηματικές τάσεις, και έτσι η μεταβολή των τιμών του πεδίου μπορεί να αποδοθεί σε διακυμάνσεις γύρω από μια σταθερή στάθμη ίση με την μέση τιμή[4, 2].

2.2.4 Στατιστική ισοτροπία

Μια άλλη ιδιότητα που χρησιμοποιούμε στην γεωστατιστική ανάλυση ενός τυχαίου πεδίου είναι η **στατιστική ισοτροπία**. Ένα πεδίο θεωρείται στατιστικώς ισοτροπικό αν είναι στατιστικώς ομοιογενές και συγχρόνως η συνάρτηση συνδιασποράς εξαρτάται μόνο από το μέτρο και όχι από τη κατεύθυνση του διανύσματος απόστασης r . Αυτή η θεώρηση διευκολύνει τον προσδιορισμό της χωρικής εξάρτησης. Αν μια συνάρτηση συνδιασποράς είναι στατιστικώς ισοτροπική είναι και στατιστικώς ομοιογενής (το αντίστροφο δεν ισχύει).

Ένα τυχαίο πεδίο θεωρείται ανισοτροπικό όταν η χωρική μεταβλητότητα εξαρτάται από την κατεύθυνση. Η συνδιασπορά ενός ανισοτροπικού τυχαίου πεδίου εξαρτάται τόσο από την απόσταση r όσο και από την κατεύθυνση του διανύσματος r . Σε ένα τέτοιο πεδίο οι κατευθυντικές συνδιασπορές μπορεί να παρουσιάζουν διαφορετικές τιμές, τόσο κατά τη διασπορά τους όσο και κατά το μήκος συσχέτισης. Στην περίπτωση στατιστικώς ισοτροπικών πεδίων οι δύο πιο σημαντικές παράμετροι είναι η διασπορά $\sigma_x^2 = c_x(0)$ και το μήκος συσχέτισης. Η διασπορά αποτελεί μέτρο του πλάτους των διακυμάνσεων του τυχαίου πεδίου. Το μήκος συσχέτισης ορίζει το διάστημα μέσα στο οποίο υπάρχει αλληλεξάρτηση, δηλαδή ορίζει την απόσταση μέσα στην οποία η τιμή του πεδίου σε ένα σημείο του επηρεάζει την τιμή σε ένα άλλο σημείο του[10, 15, 18].

2.2.5 Μέση τιμή, διασπορά και τυπική απόκλιση

Η **μέση τιμή** τυχαιάς μεταβλητής X ορίζεται από τον τύπο:

$$m_X(s) = E[X(s)] \quad (2.3)$$

όπου $X(s)$ είναι το υπό μελέτη τυχαίο πεδίο και $E[X(s)]$ είναι η μέση τιμή ως προς το σύνολο των καταστάσεών του. Ισχύει ότι:

$$E[X(s)] = \int d(x) f_X(x; s) x \quad (2.4)$$

όπου x είναι οι τιμές που αντιστοιχούν σε μία κατάσταση. Στην παραπάνω εξίσωση (2.4) τα όρια του ολοκληρώματος καθορίζονται κατά περίπτωση από το διάστημα μέσα στο οποίο είναι ορίζεται το υπό μελέτη τυχαίο πεδίο. Επίσης από την ίδια εξίσωση συνάγουμε ότι μπορεί να υπάρχει εξάρτηση μεταξύ της $E[X(s)]$ και της θέσης s .

Ως **διασπορά** ορίζεται η μέση τιμή του τετραγώνου της διακύμανσης και δίνεται από τον τύπο:

$$\sigma_X^2(s) = E[(X(s) - m_X(s))^2] = E[X'^2(s)] \quad (2.5)$$

Σε στατιστικά ομοιογενές τυχαίο πεδίο η διασπορά παραμένει σταθερή, σε όλα τα σημεία του.

Τέλος, ως **τυπική απόκλιση** (σ_X) ορίζεται η τετραγωνική ρίζα της διασποράς και προσδιορίζει ποσοτικά την απόκλιση της κατανομής από την μέση τιμή της. Ποιοτικά, το εύρος της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας, τουλάχιστον για συμμετρικές κατανομές, είναι ανάλογο της τυπικής απόκλισης. Η τυπική απόκλιση είναι το στατιστικό μέγεθος που χρησιμοποιείται για να εκφραστεί το πιθανό σφάλμα πειραματικών μετρήσεων και το σφάλμα εκτίμησης παραμέτρων μιας κατανομής πιθανότητας από ένα πεπερασμένο δείγμα.

2.3 Συνδιασπορά

2.3.1 Γενικά για τη συνδιασπορά

Η συνάρτηση συνδιασποράς ενός τυχαίου πεδίου X_s περιγράφει ποσοτικά την εξάρτηση των διακυμάνσεων σε δύο διαφορετικά σημεία[2] και ορίζεται από τον τύπο:

$$c_X(s_1, s_2) = E[(X(s_1)X(s_2))] - E[X(s_1)]E[X(s_2)] \quad (2.6)$$

εκφράζοντας την επιρροή που ασκεί η διακύμανση του τυχαίου πεδίου στο σημείο s_1 , στη διακύμανση του τυχαίου πεδίου στο σημείο s_2 . Σύμφωνα με τη Σχέση (2.2), θα ισχύει ότι $X'(s_1) = X(s_1) - m_X(s_1)$. Στην περίπτωση που δύο σημεία του τυχαίου πεδίου συμπίπτουν, η τιμή της συνδιασποράς γίνεται ίση με τη διασπορά του τυχαίου πεδίου στο συγκεκριμένο κοινό σημείο και τότε θα ισχύει ότι:

$$c_X(s_1, s_2) = \sigma_X^2(s_1) \quad (2.7)$$

2.3.2 Μοντέλα συνδιασποράς

Τα ιστροπικά μοντέλα συνδιασποράς εξαρτώνται μόνο από το μέτρο της απόστασης (r). Συνήθη ιστροπικά μοντέλα συνδιασποράς παρατίθενται στη συνέχεια. Συμβολίζονται με: σ_X^2 η διασπορά, r η απόσταση, ξ το μήκος συσχέτισης, $\Gamma(\nu)$ η συνάρτηση Γάμμα, $K(\nu)$ η τροποποιημένη συνάρτηση Bessel, R και ν οι θετικές παράμετροι της συνδιασποράς[10, 15].

Το εκθετικό μοντέλο:

$$c_X(r) = \sigma_X^2 \exp\left(-\frac{\|r\|}{\xi}\right) \quad (2.8)$$

Το Γκαουσιανό μοντέλο:

$$c_X(r) = \sigma_X^2 \exp\left(-\frac{r^2}{\xi^2}\right) \quad (2.9)$$

Το σφαιρικό μοντέλο:

$$c_X(r) = \sigma_X^2 \left[1 - 1,5 \left(\frac{\|r\|}{\xi} \right) + 0,5 \left(\frac{\|r\|}{\xi} \right)^3 \right] \vartheta(\xi - \|r\|) \quad (2.10)$$

όπου η ποσότητα $\vartheta(\xi - \|r\|)$ αντιστοιχεί στη βηματική συνάρτηση.

Το μοντέλο συνάρτησης με οπή αντισυσχέτισης:

$$c_X(r) = \sigma_X^2 \left(\frac{\sin(\|r\|/\xi)}{\|r\|/\xi} \right) \quad (2.11)$$

Το δυναμονομικό - αλγεβρικό μοντέλο:

$$\lim_{\|r\| \rightarrow \infty} c_X(r) \propto \|r\|^{2\alpha}, \text{ με } -1 < \alpha < 0 \quad (2.12)$$

Το μοντέλο ρητής τετραγωνικής εξάρτησης:

$$c_X(r) = \frac{\sigma_X^2}{\left[1 + \left(\frac{\|r\|}{\xi} \right)^2 \right]^\beta} \quad (2.13)$$

Το γενικευμένο εκθετικό μοντέλο:

$$c_X(r) = \sigma_X^2 \exp\left(-\frac{\|r\|^\nu}{\xi^\nu}\right), \text{ για } 0 < \nu < 2 \quad (2.14)$$

Το μοντέλο Matérn:

$$c_X(r) = \frac{\sigma_X^2}{2^{(\nu-1)}\Gamma(\nu)} \left(\frac{2\sqrt{\nu}}{R} \|r\| \right)^\nu K_\nu \left(\frac{2\sqrt{\nu}}{R} \|r\| \right) \quad (2.15)$$

Το μοντέλο nugget effect ή φαινομένου πυρήνα ή κόκκου:

$$c_X(r) = \begin{cases} 0, & \text{αν } r = 0 \\ c_0, & \text{αν } r \neq 0 \end{cases} \quad (2.16)$$

2.3.3 Παράμετροι συνδιασποράς και κριτήρια αποδοχής

Στην περίπτωση στατιστικά ομοιογενών ισοτροπικών πεδίων οι σημαντικότερες παράμετροι της συνάρτησης συνδιασποράς είναι: (α) η διασπορά $\sigma_x^2 = c_x(0)$ που υπολογίζει το πλάτος των μεταβολών του πεδίου και (β) το μήκος συσχέτισης το οποίο κανονικοποιεί την απόσταση r/ξ [10, 15, 18]. Όταν η τιμή του πεδίου σε ένα σημείο επηρεάζεται από την τιμή του σε ένα άλλο, τότε θεωρούμε ότι υπάρχει αλληλεξάρτηση μεταξύ των τιμών του πεδίου στο χώρο. Στην περίπτωση ανισοτροπικής εξάρτησης είναι φανερό ότι για κάθε μία από τις κύριες διευθύνσεις ανισοτροπίας υπάρχει και ένα διαφορετικό μήκος συσχέτισης.

Όταν διενεργούμε γεωστατιστικές αναλύσεις προσαρμόζουμε την πειραματική χωρική εξάρτηση σε κατάλληλα μοντέλα, όπως αυτά που αναφέρθηκαν παραπάνω. Για αυτό πρέπει να είναι γνωστές οι συνθήκες που αντιπροσωπεύουν τα θεωρητικά πρότυπα που προσεγγίζουμε στατιστικά. Για να γίνει αποδεκτή μία συνάρτηση συνδιασποράς θα πρέπει να τηρούνται οι συνθήκες αποδοχής, οι οποίες καθορίζονται από το θεώρημα του Bochner. Το θεώρημα αυτό εκφράζεται μέσω της φασματικής πυκνότητας συνδιασποράς με χρήση μετασχηματισμού Fourier[6]. Ο μετασχηματισμός αυτός αναπαριστά τη συνάρτηση συνδιασποράς σε συνεχή χώρο, στον οποίο υπολογίζεται το κυματάνυσμα k , σύμφωνα με τη Σχέση:

$$\tilde{c}_x(k) = \int dr e^{-ikr} c_x(r) \quad (2.17)$$

Σύμφωνα με το θεώρημα αυτό, μια συνάρτηση $c_x(r)$ είναι συνάρτηση συνδιασποράς αν ισχύουν οι ακόλουθες προϋποθέσεις: (α) να μπορεί να υπολογισθεί η μη αρνητική φασματική πυκνότητα ισχύος $\tilde{c}_x(k)$ και (β) το ολοκλήρωμα της Σχέσης (2.17) να είναι φραγμένο, αυτά δε σε ολόκληρο το πεδίο συχνότητας. Να σημειωθεί ότι πρακτικά, για να ελεγχθεί αν μία συνάρτηση είναι αποδεκτή ως συνάρτηση συνδιασποράς, θα πρέπει να προσδιοριστεί αναλυτικά ή αριθμητικά ο αντίστοιχος μετασχηματισμός Fourier.

2.4 Χωρική εξάρτηση

Η χωρική εξάρτηση αφορά στις συσχετίσεις μεταξύ διαφορετικών σημείων του χώρου, έτσι ώστε η πιθανότητα να πάρει το πεδίο την τιμή $X(s) = A$ σε ένα σημείο s , να εξαρτάται από τις τιμές των γειτονικών του σημείων. Για να εκτιμηθεί αυτή η χωρική συσχέτιση προβαίνουμε στον υπολογισμό του **βαριογράμματος**[2]. Αυτό δίνεται από τη Σχέση:

$$\gamma_x(s, r) = \frac{1}{2} E[\{X(s+r) - X(s)\}^2] \quad (2.18)$$

Παρατηρούμε ότι η χωρική εξάρτηση δύο γειτονικών σημείων (τιμών) του τυχαίου πεδίου καθορίζεται από τις παραμέτρους του βαριογράμματος. Από την τελευταία Σχέση ισχύει ότι $\gamma_x(r) \geq 0$, θεωρούμε το βαριόγραμμα ως ημιθετικά ορισμένο. Η αντίστροφη Σχέση δεν ισχύει πάντοτε (δηλαδή, μία ημιθετικά ορισμένη συνάρτηση δεν αποτελεί απαραίτητα συνάρτηση βαριογράμματος). Το βαριόγραμμα ορίζεται με τη βοήθεια της μέσης τιμής του τετραγώνου της διαφοράς $X(s+r) - X(s)$. Είναι φανερό ότι όταν $r = 0$ τότε και η τιμή του βαριογράμματος είναι μηδέν. Στην περίπτωση ομοιογενούς πεδίου $X(s)$ το βαριόγραμμα συνδέεται άμεσα με τη συνάρτηση συνδιασποράς, σύμφωνα με τη Σχέση:

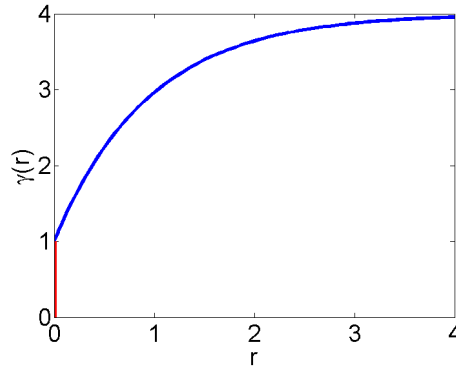
$$\gamma_x(r) = \sigma_x^2 - c_x(r) \quad (2.19)$$

Εφόσον, όταν το r τείνει στο άπειρο το $c_x(r)$ τείνει στο μηδέν, προκύπτει ότι το βαριόγραμμα ενός στάσιμου τυχαίου πεδίου έχει ως άνω φράγμα του τη διασπορά του τυχαίου πεδίου. Πρακτικά το βαριόγραμμα μπορεί να εμφανίσει ασυνέχεια ίση

με c_0 , η οποία αντιστοιχεί στο λεγόμενο φαινόμενο πυρήνα (nugget effect). Το μήκος συσχέτισης είναι μία παράμετρος κανονικοποίησης της απόστασης r που καθορίζει το διάστημα μέσα στο οποίο η τιμή ενός σημείου επηρεάζει την τιμή ενός άλλου μέσα στο τυχαίο πεδίο[10, 16].

2.4.1 Υπολογισμός βαριόγραμματος

Στην περίπτωση που μελετάμε στατιστικά ομοιογενές τυχαίο πεδίο με ισοτροπική χωρική εξάρτηση, για να υπολογίσουμε το βαριόγραμμα χρειαζόμαστε δύο παραμέτρους: (α) το άνω φράγμα και (β) το μήκος συσχέτισης που φανερώνει τον ρυθμό σύγκλισης προς το άνω φράγμα και την ακτίνα του χωρικού σημείου συσχέτισης. Όσον αφορά στο (α) και βάσει της Σχέσης (2.19), δεδομένου ότι η τιμή συνάρτησης συνδιασποράς σε μεγάλες αποστάσεις τείνει στο μηδέν, γνωρίζουμε ότι η τιμή του βαριόγραμματος για πολύ μεγάλες αποστάσεις r τείνει ασυμπτωτικά προς ένα άνω φράγμα, ίσο με την διασπορά σ_X^2 του τυχαίου πεδίου.



Σχήμα 2.1: Βαριόγραμμα, όπου με κόκκινη γραμμή συμβολίζεται το φαινόμενο πυρήνα (Nugget Effect).

Στην περίπτωση που το βαριόγραμμα είναι ισοτροπικό, οι ισοϋψείς καμπύλες (δηλαδή ο γεωμετρικός τόπος των διανυσμάτων απόστασης r , για τα οποία ισχύει πως $\sigma_X(r) = c_i$), θα είναι κυκλικές. Στην περίπτωση που το βαριόγραμμα είναι ανισοτροπικό, το άνω φράγμα είναι ανεξάρτητο της κατεύθυνσης, με το μήκος συσχέτισης (ταχύτητα προσέγγισης) να εξαρτάται από τη διεύθυνση. Το βαριόγραμμα τότε μπορεί να εκφραστεί ως συνάρτηση των αποστάσεων r/ξ , όπου ξ τα μήκη συσχέτισης στις

αντίστοιχες δευθύνσεις, ως εξής:

$$\gamma_x \left(\frac{r_1}{\xi_1}, \frac{r_2}{\xi_2}, \dots, \frac{r_d}{\xi_d} \right) \quad (2.20)$$

Για να υπολογίσουμε το βαριόγραμμα στην περίπτωση ανισοτροπίας ζώνης, δεδομένου ότι το άνω φράγμα εξαρτάται από την χωρική κατεύθυνση, κάνουμε χρήση της Σχέσης:

$$\gamma_x(r) = \gamma_{x,1}(r) + \gamma_{x,2}(\hat{r}) \quad (2.21)$$

όπου $\gamma_{x,1}(r)$ είναι η ισοτροπική εξάρτηση και $\gamma_{x,2}(\hat{r})$ η συνάρτηση που συνδέει την ανισοτροπική εξάρτηση του άνω φράγματος με την κατεύθυνση \hat{r} του μοναδιαίου διανύσματος r .

Στην περίπτωση που μελετάμε στατιστικά ανομοιογενές τυχαίο πεδίο, το βαριόγραμμα παρουσιάζει αλγεβρική μορφή που δίνεται από τη Σχέση:

$$\gamma_x(r) = r^{2H} \quad (2.22)$$

Η συνάρτηση αυτή είναι μία καμπύλη που αυξάνεται μονοτονικά ως προς την απόσταση. Ο αριθμός H που καθορίζει τον τύπο της χωρικής εξάρτησης, ονομάζεται συντελεστής του Hurst[5, 2].

2.4.2 Μοντέλα βαριογράμματος

Στην ενότητα αυτή παρουσιάζονται συνήθη ισοτροπικά μοντέλα βαριογράμματος. Συμβολίζονται με: σ_X^2 η διασπορά, r η απόσταση, ξ το μήκος συσχέτισης, $\Gamma(\nu)$ η συνάρτηση Γάμμα, $K(\nu)$ η τροποποιημένη συνάρτηση Bessel, R και ν οι θετικές παράμετροι της συνδιασποράς.

Το εκθετικό μοντέλο:

$$\gamma_x(r) = \sigma_X^2 \left[1 - \exp \left(-\frac{\|r\|}{\xi} \right) \right] \quad (2.23)$$

Το Γκαουσιανό μοντέλο:

$$\gamma_X(r) = \sigma_X^2 \left[1 - \exp\left(-\frac{\|r\|^2}{\xi^2}\right) \right] \quad (2.24)$$

Το σφαιρικό μοντέλο:

$$\gamma_X(r) = \begin{cases} \sigma_X^2 \left[1, 5 \left(\frac{\|r\|}{\xi} \right) - 0, 5 \left(\frac{\|r\|}{\xi} \right)^3 \right] & \text{αν } \|r\| \leq \xi \\ \sigma_X^2 & \text{αν } \|r\| > \xi \end{cases} \quad (2.25)$$

Το γενικευμένο εκθετικό μοντέλο:

$$\gamma_X(\|r\|) = \sigma_X^2 \left[1 - \exp\left(-\frac{\|r\|^\nu}{\xi^\nu}\right) \right], \text{ για } 0 < \nu < 2 \quad (2.26)$$

Το μοντέλο Matérn:

$$\gamma_X(r) = \sigma_X^2 \left[1 - \frac{1}{2^{(\nu-1)}\Gamma(\nu)} \left(\frac{2\sqrt{\nu}}{R} \|r\| \right)^\nu K_\nu \left(\frac{2\sqrt{\nu}}{R} \|r\| \right) \right] \quad (2.27)$$

Το κυματοειδές μοντέλο:

$$\gamma_X(\|r\|) = \sigma_X^2 [1 - \xi \|r\|^{-1} \sin(\|r\|/\xi)] \quad (2.28)$$

2.4.3 Κριτήρια αποδοχής

Ένα βαριόγραμμα θεωρείται αποδεκτό όταν είναι υπό συνθήκη αρνητικά ορισμένο. Τότε, για οποιονδήποτε γραμμικό συντελεστή λ_α που ικανοποιεί τη συνθήκη:

$$\sum_{\alpha=1}^n \lambda_\alpha = 0 \quad (2.29)$$

ισχύει:

$$-\sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n \lambda_{\alpha} \lambda_{\beta} \gamma_X(s_{\alpha} - s_{\beta}) \geq 0 \quad (2.30)$$

Δεδομένου ότι πρακτικά ο έλεγχος της τελευταίας ανισο-ισότητας δεν είναι δυνατόν να διεκπεραιωθεί αποτελεσματικά για κάθε δυνατό συνδυασμό συντελεστών λ_{α} , θα πρέπει το κριτήριο αποδοχής να εκφρασθεί με έναν αποτελεσματικότερο τρόπο. Κάνοντας χρήση του θεωρήματος Bochner, θεωρούμε ότι η συνάρτηση $\gamma_X(r)$ είναι αποδεκτό βαριόγραμμα d διαστάσεων, αν ισχύουν οι ακόλουθες σχέσεις[2]:

$$\gamma_X(0) = 0 \quad (2.31)$$

$$\exists \tilde{\gamma}_X(k) \quad (2.32)$$

όπου $\tilde{\gamma}_X(k)$ ο γενικευμένος μετασχηματισμός Fourier,

$$\exists \tilde{\gamma}_X(k) \text{ ώστε } -k^2 \tilde{\gamma}_X(k) \geq 0 \quad (2.33)$$

και

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \gamma_X(r)/r^2 = 0 \quad (2.34)$$

Στην περίπτωση που το υπό μελέτη τυχαίο πεδίο είναι ομοιογενές, τότε είναι εύκολο να ελεγχθεί η αποδοχή ενός βαριογράμματος με τη συνάρτηση $\sigma_X^2 = \gamma_X(r)$. Αν η συνάρτηση $\gamma_X(r)$ αντιπροσωπεύει ένα αποδεκτό βαριόγραμμα, τότε η συνάρτηση $c_X(r) = \sigma_X^2 = \gamma_X(r)$ είναι αποδεκτή συνάρτηση συνδιασποράς και το αντίστροφο[2].

2.5 Εκτίμηση με τη μέθοδο kriging

2.5.1 Γενικά

Για να λάβει χώρα αποτελεσματική εκτίμηση ενός τυχαίου πεδίου θα πρέπει να δημιουργήσουμε ένα πρότυπο χωρικής εξάρτησης, έτσι ώστε η κάθε σημειακή εκτίμηση να επηρεάζεται από τα γειτονικά σημεία. Τις περισσότερες φορές, η εκτίμηση χρησιμοποιείται για μία μεγαλύτερη περιοχή και όχι για μεμονωμένα σημεία και πραγματο-

ποιείται με επανάληψη της σημειακής εκτίμησης, σε κάθε σημείο που μας ενδιαφέρει. Οι πλέον διαδεδομένες μέθοδοι βασίζονται στη χρήση γραμμικής παρεμβολής, σε συνδυασμό με ελαχιστοποίηση του τετραγωνικού σφάλματος της εκτίμησης. Η μεθοδολογία αυτή στο σύνολό της ονομάζεται kriging.

Στην εκτίμηση kriging προσδιορίζεται μία περιοχή συσχέτισης $\omega(u)$ του σημείου u , η οποία περιλαμβάνει $n(u) \leq N$ σημεία, από σύνολο S_i όπου $i = 1, \dots, N$. Το εύρος της περιοχής προσδιορίζεται από το μήκος της συσχέτισης. Η διακύμανση του πεδίου στο σημείο εκτίμησης προσδιορίζεται με τη βοήθεια της ακόλουθης Σχέσης, η οποία εκφράζει τη διακύμανση στο σημείο εκτίμησης ως συνάρτηση διακύμανσης στα γειτονικά σημεία εκτίμησης[14]:

$$\hat{X}(u) - m_X(u) = \sum_{\alpha=1}^{n(u)} \lambda_{\alpha} [X(s_{\alpha}) - m_X(s_{\alpha})] \quad (2.35)$$

Συνεπώς, για να υπολογίσουμε τη ζητούμενη εκτιμώμενη τιμή του τυχαίου πεδίου μπορούμε να κάνουμε χρήση της:

$$\hat{X}(u) = m_X(u) + \sum_{\alpha=1}^{n(u)} \lambda_{\alpha} [X(s_{\alpha}) - m_X(s_{\alpha})] \quad (2.36)$$

όπου με λ_{α} συμβολίζουμε τα γραμμικά βάρη της εκτίμησης.

Το σφάλμα της εκτίμησης $\varepsilon(u)$ είναι κι αυτό τυχαία μεταβλητή και ορίζεται ως η διαφορά ανάμεσα στην πραγματική και στην εκτιμώμενη τιμή του τυχαίου πεδίου, σύμφωνα με τη Σχέση[7]:

$$\varepsilon(u) = X(u) - \hat{X}(u) \quad (2.37)$$

Είναι φανερό ότι, εφόσον με το kriging κάνουμε χρήση των λ_{α} που ελαχιστοποιούν τη διασπορά του σφάλματος της εκτίμησης, υπολογίζουμε τη βέλτιστη τιμή και για το $\hat{X}(u)$.

2.5.2 Είδη kriging

Ανάλογα με τη μέση τιμή του τυχαίου πεδίου, με τον τρόπο υπολογισμού της $m_X(s)$ και της διακύμανσης, έχουν καθιερωθεί στη βιβλιογραφία διάφορα είδη kriging[2, 14].

Απλό kriging (simple kriging): Χρησιμοποιείται όταν η μέση τιμή του τυχαίου πεδίου είναι γνωστή σε όλη την περιοχή Ω .

Κανονικό kriging (ordinary kriging): Χρησιμοποιείται όταν η μέση τιμή του τυχαίου πεδίου θεωρείται σταθερή στην περιοχή συσχέτισης $\omega(u)$ του σημείου εκτίμησης αλλά η τιμή της $m_X(s)$ μπορεί να μεταβάλλεται από περιοχή σε περιοχή.

Καθολικό kriging (universal kriging): Χρησιμοποιείται όταν η τάση ενσωματωθεί στο προς εκτίμηση τυχαίο πεδίο.

Kriging με παλινδρόμηση (regression kriging): Χρησιμοποιείται όταν η τάση διαχωριστεί από τις διακυμάνσεις και εφαρμόσουμε kriging σε αυτές μόνο.

Kriging στο πεδίο δεικτών (indicator kriging): Χρησιμοποιείται όταν η τιμή του πεδίου λαμβάνει τιμές μέσα στο διάστημα $(0, \dots, 1)$.

Τα δύο πρώτα είδη θα αναλυθούν στη συνέχεια.

2.6 Απλό kriging (simple kriging)

2.6.1 Εκτίμηση

Αναφέραμε ότι το απλό kriging χρησιμοποιείται όταν η μέση τιμή του τυχαίου πεδίου είναι γνωστή σε όλη την περιοχή Ω . Θεωρώντας επίσης αυτή την τιμή σταθερή, δηλαδή $E[X(s)] = m_X$, η εκτιμήτρια $\hat{X}(u)$ θα δίνεται από τη Σχέση:

$$\hat{X}(u) = \sum_{\alpha=1}^{n(u)} \lambda_{\alpha} X(s_{\alpha}) - m_X \left[\sum_{\alpha=1}^{n(u)} \lambda_{\alpha} X(s_{\alpha}) - 1 \right] \quad (2.38)$$

Τα βάρη λ_α υπολογίζονται κάνοντας χρήση της συνθήκης ελαχιστοποίησης του τετραγωνικού σφάλματος. Η συνθήκη αμεροληψίας ικανοποιείται υπολογίζοντας τη μέση τιμή $E[\hat{X}(u)]$. Η διασπορά του σφάλματος υπολογίζεται με τη Σχέση:

$$\sigma_{E,S,K}^2(u) = \text{Var}[X(u) - \hat{X}(u)] = \text{Var}[\hat{X}(u) - m_X - X'(u)] \quad (2.39)$$

2.6.2 Γραμμικά βάρη

Για να υπολογίσουμε τα γραμμικά βάρη της μεθόδου του απλού kriging ξεκινάμε από τη Σχέση:

$$\sum_{\beta=1}^{n(u)} \lambda_\beta c_X(s_\alpha - s_\beta) = c_X(s_\alpha - u), \alpha = 1, \dots, n(u) \quad (2.40)$$

η οποία μπορεί να εκφρασθεί με μορφή πινάκων και ως:

$$C_{\alpha,\beta} \lambda_\beta = C_{\alpha,u} \quad (2.41)$$

όπου $C_{\alpha,\beta}$ ο πίνακας της συνδιασποράς και $C_{\alpha,u}$ το διάνυσμα που αντιστοιχεί στις τιμές της συνάρτησης συνδιασποράς των σημείων του δείγματος και του σημείου της εκτίμησης $c_X(s_\alpha - u)$. Εφόσον επιπλέον ισχύει ότι $c_X(0) = \sigma_X^2$, μπορούμε να μετασχηματίσουμε τις παραπάνω σχέσεις στο γραμμικό σύστημα:

$$\begin{pmatrix} \sigma_X^2 & \cdots & \cdots & c_X(s_1 - s_n) \\ c_X(s_2 - s_1) & \cdots & \cdots & c_X(s_2 - s_n) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ c_X(s_n - s_1) & \cdots & \cdots & \sigma_X^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_X(s_1 - u) \\ c_X(s_2 - u) \\ \vdots \\ c_X(s_n - u) \end{pmatrix} \quad (2.42)$$

του οποίου η λύση δίνεται από τη Σχέση:

$$\lambda_\beta = C_{\beta,\alpha}^{-1} C_{\alpha,u}, \forall \beta = 1, \dots, n(u) \quad (2.43)$$

Από το πρότυπο βαριόγραμμα υπολογίζονται τα στοιχεία του πίνακα συνδιασποράς, κάνοντας χρήση της Σχέσης:

$$c_X(s_\alpha, s_\beta) = \sigma_X^2 - \gamma_X(s_\alpha, s_\beta) \quad (2.44)$$

Από αυτό το γραμμικό σύστημα μπορούμε να υπολογίσουμε τους συντελεστές λ_i αν η συνάρτηση συνδιασποράς είναι αποδεκτή και δεν χρησιμοποιούνται πολλαπλές μετρήσεις στο ίδιο σημείο. Οι τιμές των γραμμικών βαρών είναι ανεξάρτητες από το άνω φράγμα του βαριογράμματος, εξαρτώνται όμως από το πρότυπο συνδιασποράς. Η εκτίμηση kriging μας δίνει τη δυνατότητα της ακριβούς γραμμικής μεταβολής, δηλαδή σε κάθε σημείο που υπάρχει μέτρηση, η εκτίμηση είναι ίδια με την τιμή του δείγματος[7, 10].

2.6.3 Σφάλματα

Το μέσο τετραγωνικό σφάλμα εκτίμησης της μεθόδου του απλού kriging υπολογίζεται από τη Σχέση:

$$\sigma_{E,S,K}^2(u) = \sigma_X^2 - \sum_{\alpha=1}^{n(u)} \sum_{\beta=1}^{n(u)} C_{u,\alpha} C_{\alpha,\beta}^{-1} C_{\beta,u} \quad (2.45)$$

και είναι ίσο με τη διασπορά του σφάλματος $\sigma_{E,S,K}^2(u)$. Η τιμή του σφάλματος αυτού αυξάνει ανάλογα με την τιμή της τυπικής απόκλισης σ_X . Στην περίπτωση που τα βάρη λ_α παίρνουν τιμές μεγαλύτερες του μηδενός, η συσχέτιση $\rho_{u,\alpha}$ τείνει στη μονάδα και το σφάλμα θα μειώνεται, όσο θα μειώνεται η απόσταση $|u - s_\alpha|$ μεταξύ του σημείου εκτίμησης και των σημείων του δείγματος[7, 10].

2.7 Κανονικό kriging (ordinary kriging)

Στο κανονικό kriging η μέση τιμή είναι σταθερή για κάθε γειτονιά συσχέτισης, μπορεί όμως να μεταβάλλεται σε κάθε γειτονιά. Συνεπώς η μέση τιμή δεν είναι απαραίτητα γνωστή και πρέπει να εκτιμηθεί, υπολογιζόμενη όχι από τον μέσο όρο τιμών των δειγμάτων, αλλά, ως βέλτιστη προσέγγιση, από τη συνάρτηση της συνδιασποράς.

Βέβαια, για να γίνει εκτίμηση της συνάρτησης συνδιασποράς θα πρέπει να είναι γνωστή η μέση τιμή, πράγμα που μας οδηγεί σε ένα αναδρομικό κυκλικό πρόβλημα. Το τελευταίο μπορεί να αποφευχθεί αν κάνουμε χρήση του κανονικού kriging. Η εκτίμηση υπολογίζεται με τη βοήθεια των παρακάτω σχέσεων:

$$\hat{X}(u) = \sum_{\alpha=1}^{n(u)} \lambda_{\alpha} X(s_{\alpha}) \quad (2.46)$$

και

$$\sum_{\alpha=1}^{n(u)} \lambda_{\alpha} = 1 \quad (2.47)$$

Η τελευταία σχέση εκφράζει τη συνθήκη αμεροληψίας. Στο κανονικό kriging το μέσο τετραγωνικό σφάλμα πρέπει να υπολογιστεί με τον περιορισμό που επιβάλλει αυτή η συνθήκη στις τιμές των βαρών.

2.7.1 Γραμμικά βάρη

Για να υπολογίσουμε τα γραμμικά βάρη της μεθόδου του κανονικού kriging ξεκινάμε από τη Σχέση:

$$\sum_{\beta=1}^{n(u)} \lambda_{\beta} c_X(s_{\alpha} - s_{\beta}) + \mu = c_X(s_{\alpha} - u), \alpha = 1, \dots, n(u) \quad (2.48)$$

όπου μ είναι ο συντελεστής Lagrange και ισχύει η Σχέση (2.47). Το γραμμικό σύστημα των (2.47) και (2.48) μπορεί να αναπαρασταθεί και με μορφή πινάκων, σύμφωνα με τη Σχέση:

$$\begin{pmatrix} \sigma_X^2 & c_X(s_1 - s_2) & \cdots & c_X(s_1 - s_n) & 1 \\ c_X(s_2 - s_1) & \sigma_X^2 & \cdots & c_X(s_2 - s_n) & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ c_X(s_n - s_1) & c_X(s_n - s_2) & \cdots & \sigma_X^2 & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_X(s_1 - u) \\ c_X(s_2 - u) \\ \vdots \\ c_X(s_n - u) \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.49)$$

2.7.2 Σφάλματα

Το μέσο τετραγωνικό σφάλμα για το κανονικό kriging υπολογίζεται από την εξίσωση:

$$\sigma_{E,O,K}^2(u) = \sigma_X^2 - \sum_{\alpha=1}^n (u) \lambda_{\alpha} c_X(u, s_{\alpha}) - \mu \quad (2.50)$$

όπου μ είναι ο συντελεστής Lagrange. Η τιμή του συντελεστή Lagrange είναι πάντα αρνητική. Ως εκ τούτου, η αβεβαιότητα της εκτίμησης του κανονικού kriging υπερβαίνει την εκτίμηση του απλού kriging. Αυτό συμβαίνει γιατί το κανονικό kriging δεν λαμβάνει υπόψη του τη μέση τιμή του πεδίου, οπότε και μας οδηγεί σε μεγαλύτερη αβεβαιότητα [8, 10].

2.7.3 Επιλογή της γειτονιάς συσχέτισης

Η μέγιστη ακτίνα συσχέτισης $\omega(u)$ δεν πρέπει να είναι πολύ μεγαλύτερη από το μήκος συσχέτισης του πεδίου. Ο προσδιορισμός της ακτίνας συσχέτισης γίνεται από την ανάλυση του πειραματικού βαριογράμματος, με σχετικά μεγάλη αβεβαιότητα. Σε περίπτωση που η ακτίνα της γειτονιάς είναι αρκετά μεγαλύτερη από το μήκος συσχέτισης του πεδίου, τότε η γραμμική παρεμβολή λαμβάνει υπόψη μετρήσεις οι οποίες δεν έχουν σημαντική συνεισφορά στο σημείο εκτίμησης. Συνέπεια αυτού είναι να αυξάνεται το αριθμητικό κόστος του kriging. Αντίθετα, αν χρησιμοποιηθούν μικρές ακτίνες στις γειτονιές, τότε υπάρχει η δυνατότητα απεικόνισης των τοπικών μεταβολών της μέσης τιμής, από γειτονιά σε γειτονιά, με μεγαλύτερη ακρίβεια.

2.8 Επιβεβαίωση των χωρικών μοντέλων

Τα σφάλματα που προκύπτουν από τις πειραματικές μετρήσεις διακρίνονται σε συστηματικά και σε τυχαία [2]. Τα πρώτα προέρχονται από ατέλειες στις μεθόδους μέτρησης. Τα δεύτερα προκαλούνται από τυχαίες, μη ελεγχόμενες διακυμάνσεις. Μια τεχνική για να μειωθεί το τυχαίο σφάλμα του μέσου όρου (κατά την τετραγωνική ρίζα του πλήθους των μετρήσεων) είναι να επαναληφθούν οι μετρήσεις. Να

σημειωθεί ότι πρέπει να γίνεται διάκριση μεταξύ των όρων: (α) ακρίβεια της μέτρησης (accuracy) και (β) ακρίβεια της επαναλαμβανόμενης μέτρησης, δηλαδή κατά την επαναλαμβανόμενη λήψη της ίδιας πειραματικής τιμής (precision)[20].

Η διενέργεια της επαλήθευσης ή επιβεβαίωσης δίνει τη δυνατότητα αξιολόγησης της απόδοσης διάφορων χωρικών μοντέλων, με τη βοήθεια στατιστικών παραμέτρων. Περιλαμβάνει μεθόδους που μετρούν την ικανότητα πρόβλεψης ενός μοντέλου. Αν θεωρήσουμε ένα τυχαίο πεδίο X_s με γνωστές τιμές στις θέσεις s_i , όπου $i = 1, \dots, N$, με χρήση της μεθόδου αφαίρεσης ενός σημείου εκ περιτροπής (Leave-One-Out Cross-Validation), η τιμή του $x(s_i)$ αφαιρείται από τα δεδομένα και εκτιμάται το $\hat{x}(s_i)$ με βάση τα υπόλοιπα δεδομένα. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται για όλα τα δεδομένα. Η επαλήθευση γίνεται μεταξύ των $x(s_i)$ και $\hat{x}(s_i)$ για $i = 1, \dots, N$, σύμφωνα με τα σφάλματα αξιολόγησης, τα οποία και απαριθμούνται στη συνέχεια.

2.8.1 Σφάλματα αξιολόγησης

Μέσο Σφάλμα (ME): Το μέσο σφάλμα υπολογίζει την μεροληψία της εκτίμησης (bias). Υψηλές θετικές ή αρνητικές τιμές αυτού του σφάλματος σημαίνουν ότι υπάρχει συστηματικό σφάλμα που οδηγεί σε μεγάλη ανακρίβεια. Η Σχέση που υπολογίζει το ME είναι:

$$ME = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\hat{x}(s_i) - x(s_i)] \quad (2.51)$$

Μέσο Απόλυτο Σφάλμα (MAE): Το μέσο απόλυτο σφάλμα υπολογίζει την ορθότητα και την ακρίβεια μιας εκτίμησης. Όλες οι μεμονωμένες διαφορές έχουν την ίδια βαρύτητα με το μέσο απόλυτο σφάλμα. Η Σχέση που υπολογίζει το MAE δίνεται στη συνέχεια:

$$MAE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\hat{x}(s_i) - x(s_i)| \quad (2.52)$$

Ρίζα του Μέσου Τετραγωνικού Σφάλματος (RMSE): Το σφάλμα αυτό υπολογίζει, όπως και το μέσο απόλυτο σφάλμα, την ορθότητα και την ακρίβεια μιας εκτίμησης. Επίσης, επειδή τα σφάλματα έχουν υψωθεί στο τετράγωνο χωρίς την απόλυτη τιμή, η ρίζα του μέσου τετραγωνικού σφάλματος δίνει υψηλότερο βάρος στα μεγαλύτερα

σφάλματα. Η Σχέση που υπολογίζει το (RMSE) είναι η:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\hat{x}(s_i) - x(s_i)]^2} \quad (2.53)$$

Ο συντελεστής συσχέτισης ρ : Ο συντελεστής συσχέτισης ρ ή αλλιώς συντελεστής συσχέτισης Pearson, χρησιμοποιείται για να εκτιμά τη σχέση μεταξύ δύο μεταβλητών και υπολογίζεται από την ακόλουθη Σχέση [12]:

$$\bar{\rho}_{X,\hat{X}} = \frac{\sum_{i=1}^N [x(s_i) - \overline{x(s_i)}] [\hat{x}(s_i) - \overline{\hat{x}(s_i)}]}{\sqrt{\sum_{i=1}^N [x(s_i) - \overline{x(s_i)}]^2} \sqrt{\sum_{i=1}^N [\hat{x}(s_i) - \overline{\hat{x}(s_i)}]^2}} \quad (2.54)$$

Ο συντελεστής συσχέτισης ρ μας δίνει την τιμή της γραμμικής σχέσης μεταξύ δύο μεταβλητών. Η σχέση αυτή μπορεί να εξηγηθεί με ένα διάγραμμα διασποράς. Αν $\rho = +1$, το διάγραμμα διασποράς δίνεται από μία ευθεία γραμμή με θετική κλίση. Αν $\rho = -1$, το διάγραμμα της διασποράς δίνεται από μία ευθεία γραμμή με αρνητική κλίση. Όταν $|\rho| < 1$, τα σημεία στο διάγραμμα διασποράς απεικονίζονται ως νέφος, το οποίο γίνεται τόσο περισσότερο διάχυτο, όσο η ποσότητα $|\rho|$ τείνει προς το 0 (μειώνεται).

Κεφάλαιο 3

Γεωστατιστική Ανάλυση Δεδομένων

Για την επεξεργασία των δεδομένων κατά την εκπόνηση της παρούσας διπλωματικής εργασίας έγινε χρήση της γλώσσας προγραμματισμού R, καθότι είναι μια δωρεάν open source και ευρέως διαδεδομένη γλώσσα προγραμματισμού, η οποία προσφέρει πολλά έτοιμα εργαλεία για τη διενέργεια στατιστικής ανάλυσης και οπτικοποίησης δεδομένων (γραφήματα, διαγράμματα, κ.λπ.).

Στο πρώτο στάδιο της επεξεργασίας έγινε η εισαγωγή των δεδομένων στο περιβάλλον επεξεργασίας της γλώσσας R. Εν συνεχεία πραγματοποιήθηκε ο υπολογισμός και η αξιολόγηση των στατιστικών στοιχείων και των ιστογραμμάτων για κάθε μέταλλο ξεχωριστά. Στο σημείο αυτό επιλέχθηκε μετασχηματισμός με λογαρίθμηση των τιμών του Ψευδάργυρου, Μόλυβδου, Χαλκού, Κοβαλτίου και Καδμίου, προκειμένου οι κατανομές των δεδομένων που προέκυψαν αρχικά να προσαρμοστούν σε εκείνες της κανονικής κατανομής.

Στο επόμενο βήμα της επεξεργασίας έγινε υπολογισμός των βαριογραμμάτων και έρευνα για την ύπαρξη και την αφαίρεση τυχόν τάσεων, σε καθένα από τα βαρέα μέταλλα που χρησιμοποιήθηκαν.

Στο τελικό στάδιο της επεξεργασίας, χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος της χωρικής παρεμβολής, Κανονικό Kriging (Ordinary Kriging) ώστε να γίνει εκτίμηση των συγκεντρώσε-

ων των βαρέων μετάλλων κοντά στις θέσεις των γεωτρήσεων που επιλέχθηκαν για την δειγματοληψία. Σαν τελευταίο βήμα επεξεργασίας, εκτιμήθηκε η αξιοπιστία της μεθόδου του Kriging, μέσω της διασταυρωτικής επιβεβαίωσης (Cross Validation), συγκρίνοντας την εκτιμώμενη με τη δεδομένη τιμή.

Στα πλαίσια της παρούσας μελέτης, θα εστιάσουμε στην επεξεργασία των συνόλων δεδομένων του Χρωμίου (Cr) και του Ψευδαργύρου (Zn), καθώς οι εμφάνισαν μεγαλύτερο ενδιαφέρον στην πορεία της επεξεργασίας και συνάμα αποτελούν αντιπροσωπευτικό δείγμα του συνόλου δεδομένων που χρησιμοποιήθηκε.

Τα σχήματα καθώς και οι πίνακες που προέκυψαν κατά την επεξεργασία των υπόλοιπων βαρέων μετάλλων παρατίθενται ξεχωριστά στα Παραρτήματα Α και Β ως εξής: Στο Παράρτημα Α περιέχονται σχήματα και πίνακες μετάλλων τα δεδομένα των οποίων υπέστησαν μετασχηματισμό ενώ στο Παράρτημα Β περιέχονται σχήματα και πίνακες τα δεδομένα των οποίων δεν μετασχηματίστηκαν.

3.1 Στατιστική Ανάλυση Δεδομένων

Στα πλαίσια μιας γεωστατιστικής ανάλυσης είναι σημαντικό να γνωρίζουμε κάποια βασικά στατιστικά στοιχεία των δεδομένων που συλλέχθηκαν, με σκοπό την καλύτερη κατανόηση και επεξεργασία τους. Ο όρος βασικά στατιστικά στοιχεία περιγράφει κατά βάση την μέση τιμή, την διάμεσο, την τυπική απόκλιση καθώς και την ελάχιστη και μέγιστη τιμή για το σύνολο των δεδομένων[10]. Ο υπολογισμών των τιμών αυτών όπως φαίνονται παρακάτω στον Πίνακα 3.1, έγινε με κατασκευή του κατάλληλου κώδικα στην γλώσσα προγραμματισμού R.

Τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν στην συγκεκριμένη εργασία, αποτελούνται από μετρήσεις που καταγράφηκαν σε 359 θέσεις γεωτρήσεων διασπαρμένων στο χώρο, (βλ. Σχήμα 3.5). Πιο συγκεκριμένα, καταγράφηκαν οι συγκεντρώσεις επτά βαρέων μετάλλων (Χρώμιο, Ψευδάργυρος, Μόλυβδος, Νικέλιο, Χαλκός, Κοβάλτιο, Κάδμιο) σε κάθε διαφορετική τοποθεσία. Το σύνολο των δεδομένων απαρτίζεται από συντεταγμένες (x,y), οι οποίες περιγράφουν τις θέσεις δειγματοληψίας στον κάρναβο

Τιμή (ppm)	Cr	Zn(log)	Pb(log)	Ni	Cu(log)	Co(log)	Cd(log)
M.T.	35,02	75,88	54,63	20,02	23,59	9,44	1,29
Δ.	34,80	73,56	46,80	20,68	17,20	9,84	1,10
T.A.	10,66	30,82	33,09	8,09	22,27	3,57	0,86
E.	3,32	25,00	18,68	1,98	3,55	1,55	0,14
M.	70,00	259,84	300,00	53,20	166,40	20,60	5,13

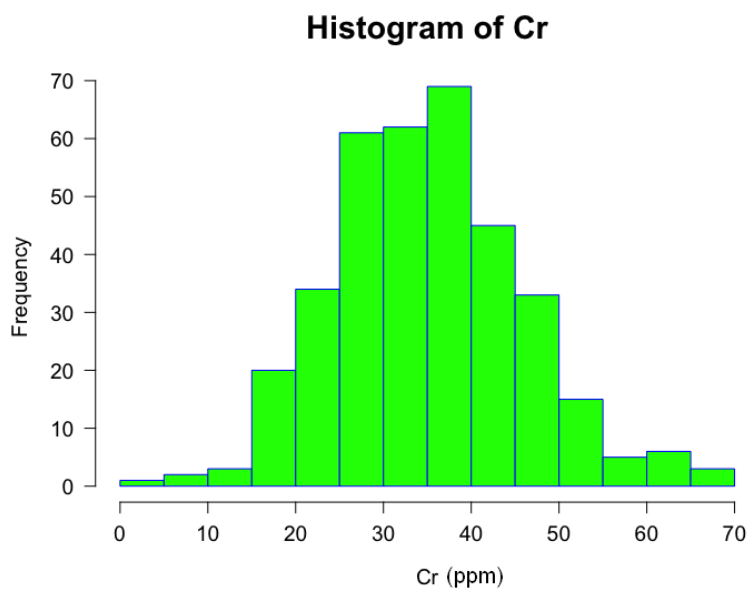
Πίνακας 3.1: Στατιστικά στοιχεία των συγκεντρώσεων βαρέων μετάλλων (σε ppm), όπου M.T. Μέση Τιμή, Δ. Διάμεσος, T.A. Τυπική Απόκλιση, E. Ελάχιστο και M. Μέγιστο.

της περιοχής μελέτης. Τα δεδομένα αυτά, γνωστά και ως Jura Data μοιράζονται δύο χαρακτηριστικά, κοινά για τα περισσότερα σύνολα δεδομένων των επιστημών της Γης:

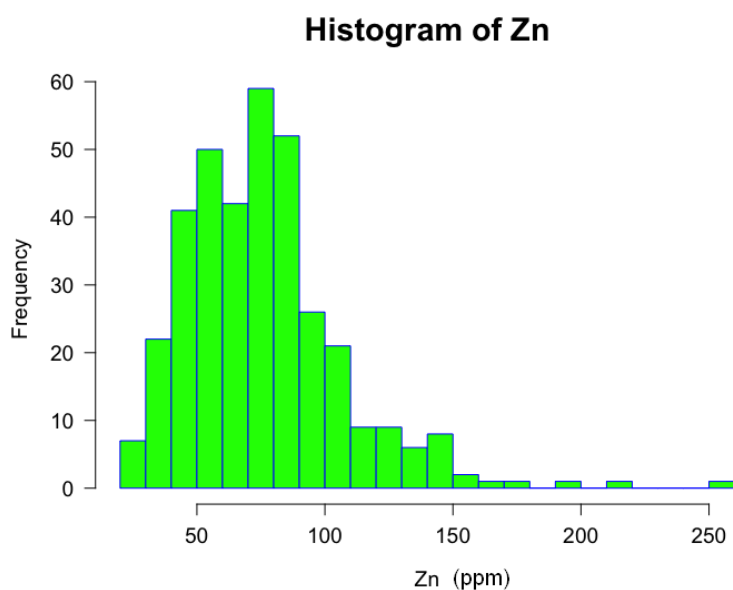
1. Τα δεδομένα αλληλοσχετίζονται στο χώρο.
2. Τα δεδομένα μοιράζονται κοινά χαρακτηριστικά.

Ως επόμενο βήμα επεξεργασίας μετά τον υπολογισμό των στατιστικών στοιχείων, καθορίστηκε ο υπολογισμός του ιστογράμματος για καθένα από τα βαρέα μέταλλα. Το ιστόγραμμα χαρακτηρίζεται ως βασικός στατιστικός δείκτης για κάθε σύνολο δεδομένων όπου μέσου αυτού καθίσταται δυνατή μία πρώτη εκτίμηση της συμβατότητας, της κατανομής των δεδομένων, σε σχέση με εκείνη της κανονικής κατανομής. Στα Σχήματα 3.1 και 3.2 που ακολουθούν, παρουσιάζονται τα ιστογράμματα του Χρωμίου και του Ψευδαργύρου αντιστοίχως. Στον άξονα Y (Frequency) του ιστογράμματος προβάλλεται η συχνότητα της εμφάνισης του εκάστοτε μετάλλου ενώ στον άξονα X προβάλλεται η συγκέντρωση για καθένα από τα μέταλλα του Χρωμίου (Cr) και Ψευδαργύρου (Zn) σε μονάδες ppm.

Από τα ιστογράμματα αυτά συμπεραίνουμε ότι η κατανομή των δεδομένων του Χρωμίου βρίσκεται αρκετά κοντά με εκείνη της κανονικής κατανομής, κάτι που συμβαίνει με την κατανομή του συνόλου δεδομένων του Ψευδαργύρου.



Σχήμα 3.1: Ιστόγραμμα των δεδομένων του Χρωμίου πριν την εφαρμογή μετασχηματισμού.

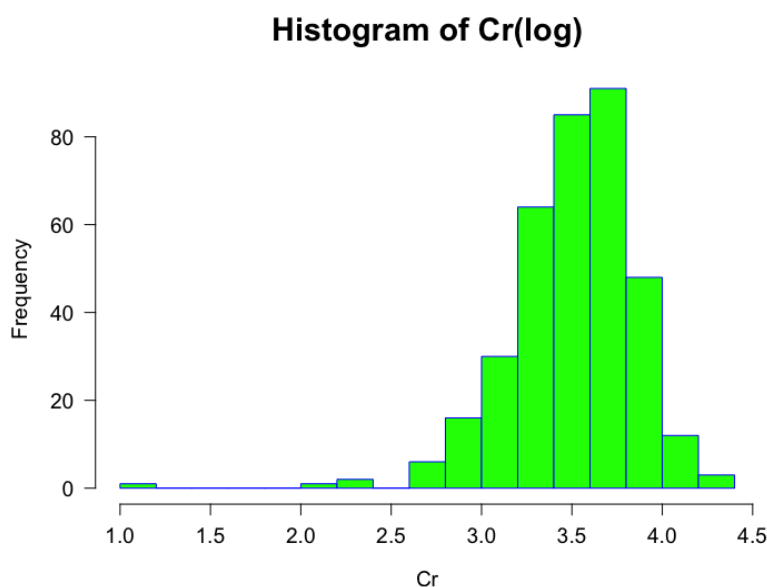


Σχήμα 3.2: Ιστόγραμμα των δεδομένων του Ψευδαργύρου πριν την εφαρμογή μετασχηματισμού.

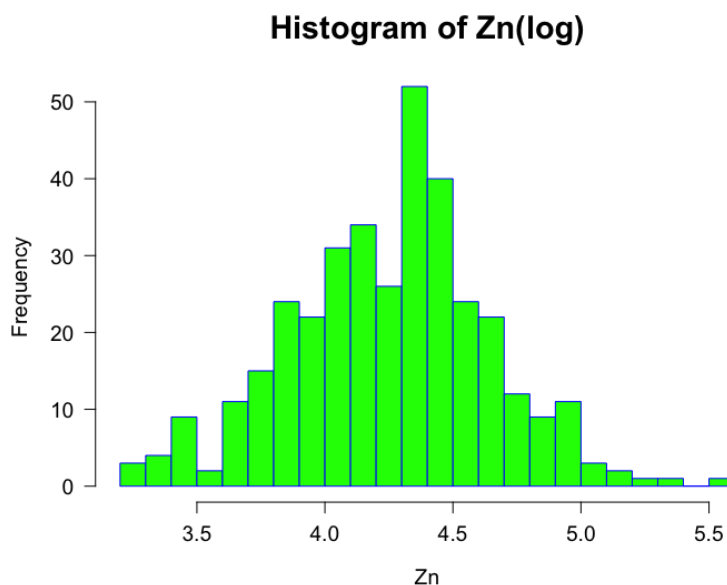
Στο σημείο αυτό εφαρμόστηκε μετασχηματισμός των δεδομένων με λογαρίθμηση των τιμών του αρχικού συνόλου μετρήσεων και ακολούθησε επαναυπολογισμός των ιστογραμμάτων, με στόχο την προσαρμογή των δεδομένων και για τα δύο μέταλλα όπως φαίνεται στα Σχήματα 3.3 και 3.4.

Στο Σχήμα 3.4 παρατηρείται σημαντική βελτίωση στα δεδομένα του Ψευδαργύρου, καθότι πλέον συνάδουν σε ικανοποιητικό βαθμό με την καμπύλη κανονικής κατανομής, κάτι δε φαίνεται να συμβαίνει σε εκείνα του Χρωμίου, μετά τον μετασχηματισμό, όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.3.

Εφαρμόστηκε η ίδια διαδικασία για το σύνολο των μετάλλων, μέσω της οποίας επιλέχθηκε ο κατάλληλος τύπος των μετρήσεων για κάθε ένα από αυτά και για το σύνολο της επεξεργασίας που πραγματοποιήθηκε. Στο Παράρτημα Α παρατίθενται τα ιστογράμματα των μετάλλων που δεν υπέστησαν μετασχηματισμό, ενώ αντιστοίχως στο Παράρτημα Β βρίσκονται τα ιστογράμματα των μετάλλων, τα δεδομένα των οποίων υπέστησαν μετασχηματισμό.



Σχήμα 3.3: Ιστόγραμμα των δεδομένων του Χρωμίου μετά την εφαρμογή μετασχηματισμού.

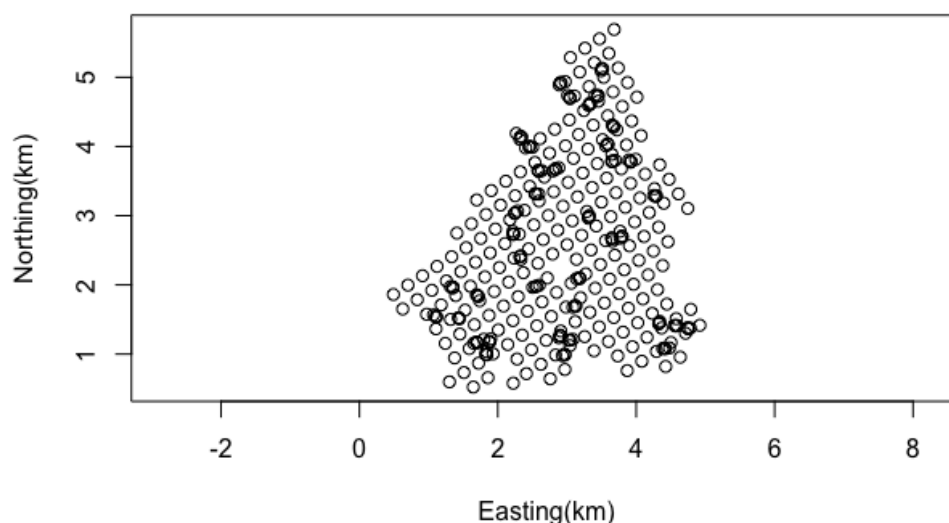


Σχήμα 3.4: Ιστόγραμμα των δεδομένων του Ψευδαργύρου μετά την εφαρμογή μετασχηματισμού.

3.2 Χωρική εξάρτηση δεδομένων

Στο κεφάλαιο αυτό θα παρουσιαστούν τα βαριογράμματα που υπολογίστηκαν, τα διαγράμματα κανονικής πιθανότητας (normplots) και η έρευνα που έγινε για την ύπαρξη πιθανών τάσεων. Επίσης παραθέτονται τα σφάλματα και η επιλογή του θεωρητικού μοντέλου, μετά την διαδικασία προσαρμογής των θεωρητικών μοντέλων, με σκοπό την ελαχιστοποίηση της απόκλισης του του θεωρητικού προτύπου από το εμπειρικό. Τέλος, έγινε έλεγχος για την ύπαρξη ανισοτροπίας με χρήση των κατευθυντικών βαριογραμμάτων[3].

Αρχικά κατασκευάστηκε γράφημα το οποίο περιγράφει τις θέσεις δειγματοληψίας, σύμφωνα με τις συντεταγμένες τους, όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.5, με σκοπό την αρχική κατανόηση της περιοχής μελέτης.



Σχήμα 3.5: Γράφημα με τις θέσεις λήψης εδαφικών δειγμάτων στην περιοχή μελέτης.

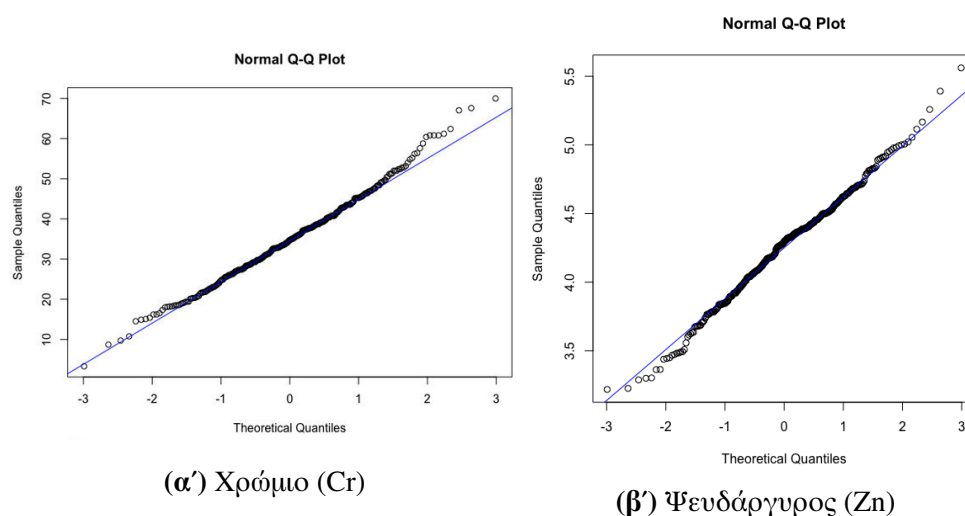
3.2.1 Εμπειρικό Βαριόγραμμα

Ο υπολογισμός του βαριογράμματος, όπως αναφέρθηκε στο Κεφάλαιο 2, πραγματοποιήθηκε σύμφωνα με τη Σχέση 2.18, με σκοπό την ύπαρξης μιας ολοκληρωμένης εικόνας για την χωρική εξάρτηση των σημείων στην περιοχή μελέτης. Έτσι, στον υπολογισμό του βαριογράμματος, για τις δεδομένες τιμές συγκέντρωσης του Χρωμίου καθώς και για εκείνες του Ψευδαργύρου, χρησιμοποιήθηκε βήμα $h=0.15\text{km}$ (150m) και σε απόσταση 1.7km.

Στο Σχήμα 3.6 που παρατίθεται στη συνέχεια, φαίνονται τα διαγράμματα κανονικής πιθανότητας (Normplot), μέσω των οποίων δύναται να γίνει η διαπίστωση της απόκλισης των δεδομένων από την κανονική κατανομή. Στο σημείο αυτό θα πρέπει να σημειωθεί ότι, ακόμα και μετά από έρευνα για την ύπαρξη τάσεων για τα σύνολα δεδομένων του Χρωμίου και του Ψευδαργύρου, δεν προέκυψαν ισχυρές τάσεις ώστε να χρειασθεί αφαίρεση αυτών.

Παρατηρούμε ότι οι κύκλοι που αντιστοιχούν στις τιμές των δεδομένων του Χρωμίου στο Σχήμα 3.6α' σχεδόν εφάπτονται με την ευθεία που περιγράφει την κανονική

κατανομή. Το ίδιο φαίνεται να συμβαίνει και στο διάγραμμα του Σχήματος 3.6β' που αφορά στα δεδομένα του Ψευδαργύρου, αφού ούτε εδώ διαφαίνονται σημαντικές αποκλίσεις.



Σχήμα 3.6: Διαγράμματα κανονικής πιθανότητας για τις συγκεντρώσεις των μετάλλων Χρωμίου (μη λογαριθμημένα δεδομένα) και Ψευδαργύρου (λογαριθμημένα δεδομένα), με σκοπό να εξετασθεί αν τα δεδομένα ακολουθούν την κανονική κατανομή. Οι κύκλοι που απεικονίζονται στον άξονα Y αντιστοιχούν στις τιμές των δεδομένων, ενώ στον άξονα X απεικονίζονται οι θεωρητικές τιμές της κατανομής. Η ευθεία γραμμή σε καθένα από τα διαγράμματα περιγράφει την κανονική κατανομή.

Αφαίρεση Τάσεων

Η αναπαράσταση των τυχαίων πεδίων δύναται να παρατεθεί ως: $X(s) = m_X(s) + X'(s)$. Η συνάρτηση $m_X(s)$ είναι συνάρτηση τάσης η οποία αντιπροσωπεύει τις ντετερμινιστικές χωρικές συσχετίσεις μεταξύ των στοιχείων. Η έννοια της τάσης m_X η οποία συνδέεται με ομαλά μεταβαλλόμενες συνιστώσες της μεταβλητότητας X_S , συνήθως μοντελοποιείται με χαμηλής τάξης πολυώνυμα.

Η εκτίμηση για το βαθμό της τάσης δίδεται από τον συντελεστή του Pearson, δηλαδή το $r\%$ μεταξύ της τάσης και των δεδομένων. Τιμή του r μεγαλύτερη από 30% θεωρείται πως αποτελεί επαρκή εξάρτηση για την ύπαρξη τάσης. Κατά τον έλεγχο

για ύπαρξη τάσης στα δεδομένα και των δύο βαρέων μετάλλων πραγματοποιήθηκε υπολογισμός των εμπειρικών βαριογραμμμάτων τους. Έγινε εφαρμογή μοντέλου τάσης πρώτου βαθμού το οποίο δίνεται ως εξής:

$$m_x = \alpha_0 + \alpha_1 x_i + \alpha_2 y_i, i = 1, \dots, n \quad (3.1)$$

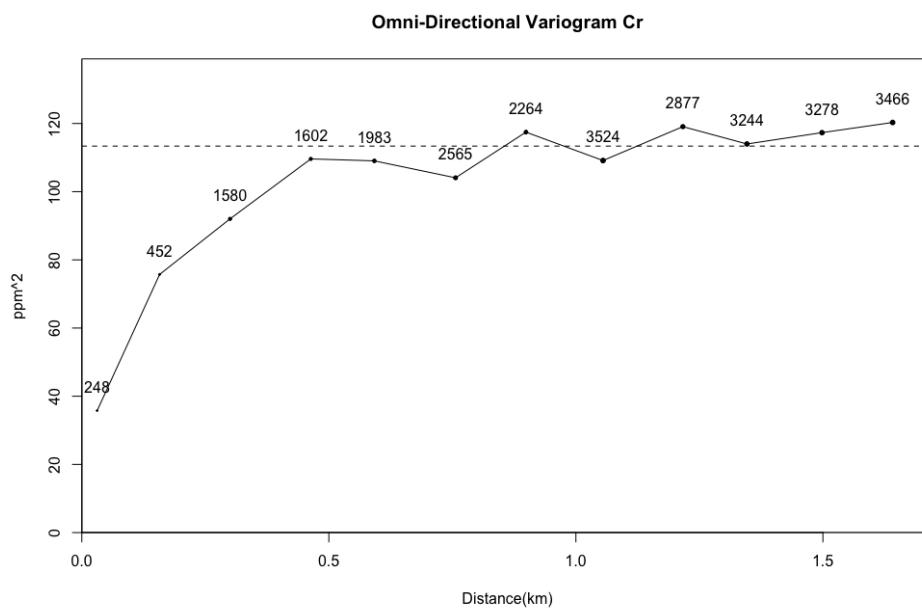
όπου m_x είναι η μέση τιμή των γεωτρήσεων, N είναι ο αριθμός των γεωτρήσεων, ενώ x_i, y_i είναι οι συντεταγμένες των γεωτρήσεων. Για την επίλυση της εξίσωσης (3.1) το μοντέλο της τάσης δημιούργησε σύστημα εξισώσεων με αγνώστους τα a_0, a_1, a_2 , αφού οι θέσεις των γεωτρήσεων x_i, y_i ήταν γνωστές.

Στον Πίνακα 3.2 παρατίθενται οι μετρήσεις επιβεβαίωσης και οι συντελεστές των εξισώσεων που προέκυψαν για την τάση, ενώ στα Σχήματα 3.7 και 3.8 παρουσιάζονται τα εμπειρικά βαριογράμματα τα οποία υπολογίστηκαν με βήμα $h=0.15$ (150m) και σε απόσταση 1.7km για καθένα από τα σύνολα δεδομένων που μελετήθηκαν.

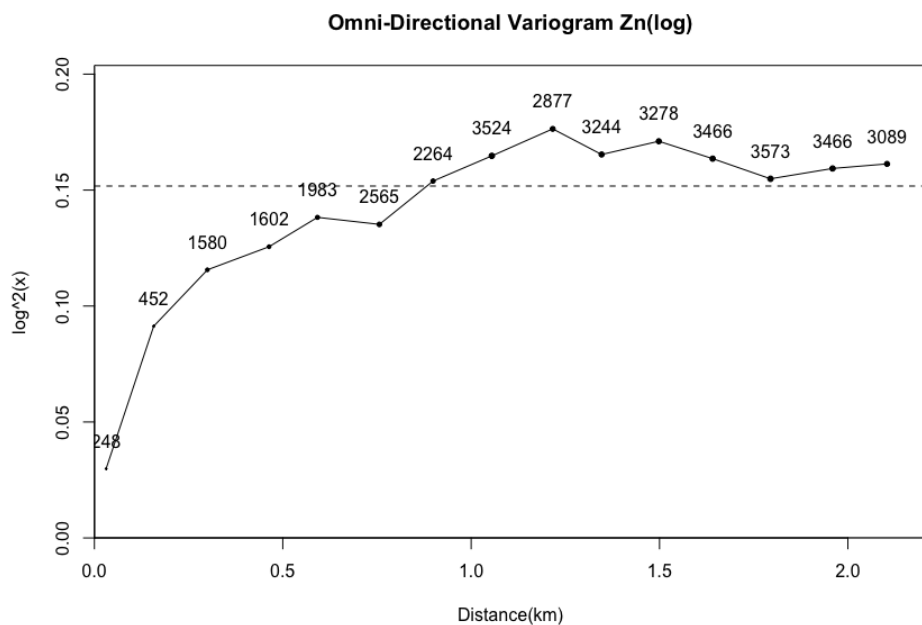
Παράμετρος	Cr	Zn(log)
Εξίσωση	37.0670-0.8371X+0.1638Y	4.2304+0.1062X-0.1014Y
ρ	7,52%	15,36%
ME	1,13E-05	2,10E-05
MAE	8,37	0,31
MaxAE	33,64	1,23
RMSE	10,62	0,38

Πίνακας 3.2: Μετρήσεις επιβεβαίωσης (Validation Measures) της τάσης, καθώς οι συντελεστές των εξισώσεων αυτής, για τα σύνολα δεδομένων Χρωμίου και Ψευδαργύρου, όπου ρ : ο Συντελεστής Συσχέτισης Pearson (Pearson's Correlation Coefficient), ME: το Μέσο Σφάλμα, MAE: το Μέσο Απόλυτο Σφάλμα, MaxAE: το Μέγιστο Απόλυτο Σφάλμα και RMSE: το Μέσο Τετραγωνικό Σφάλμα.

Όπως φαίνεται στον Πίνακα 3.2, οι τιμές του συντελεστή Pearson (ρ) αντιστοιχούν σε 7,5% για το σύνολο δεδομένων του Χρωμίου και σε 15,3% για τα δεδομένα του Ψευδαργύρου, κάτι που αποτελεί ισχυρή ένδειξη για την έλλειψη ύπαρξης τάσεων στα δύο συγκεκριμένα σύνολα δεδομένων.



Σχήμα 3.7: Εμπειρικό βαριόγραμμα των δεδομένων του Χρωμίου.



Σχήμα 3.8: Εμπειρικό βαριόγραμμα των δεδομένων του Ψευδαργύρου.

Προσαρμογή Θεωρητικών Μοντέλων

Με την προσαρμογή θεωρητικού μοντέλου στο εμπειρικό βαριόγραμμα επιτυγχάνονται τόσο η δυνατότητα υπολογισμού του βαριογράμματος σε αποστάσεις όπου δεν υπάρχουν σημεία, όσο και η ακριβής εκτίμηση κάποιων βασικών παραμέτρων. Μία από τις παραμέτρους αυτές αποτελεί το φαινόμενο του πυρήνα (Nugget Effect) το οποίο προκύπτει είτε λόγω σφαλμάτων στις μετρήσεις που πραγματοποιήθηκαν είτε λόγω χαμηλής πυκνότητας των δεδομένων.

Πιο συγκεκριμένα, σε περιπτώσεις αύξησης του εύρους των τάξεων απόστασης, η διακριτική απόσταση του πειραματικού βαριογράμματος μειώνεται. Ως επακόλουθο αυτού είναι η αύξηση της φαινόμενης μεταβλητότητας στις μικρές αποστάσεις, με αποτέλεσμα το εμπειρικό βαριόγραμμα να μην ξεκινά από την αρχή των αξόνων αλλά από ένα υψηλότερο σημείο στον άξονα Υ.

Μία άλλη παράμετρος η οποία εκτιμάται από την διαδικασία προσαρμογής του θεωρητικού μοντέλου είναι το άνω φράγμα του βαριογράμματος σ^2 , το οποίο δε συνάδει απαραίτητα με την δειγματική διασπορά $\sigma^2_{(x)}$. Το σ^2 προκύπτει λόγω της προσαρμογής σε ένα θεωρητικό μοντέλο. Με τη διαδικασία αυτή υπολογίζεται το μήκος συσχέτισης ξ σύμφωνα με την προσαρμογή του βαριογράμματος σε κάποιο θεωρητικό πρότυπο και παράλληλα ελαχιστοποιείται η απόκλιση του θεωρητικού προτύπου από το εμπειρικό για όλες τις αποστάσεις, ενώ δεν εκτιμάται με ακρίβεια η πραγματική τιμή της διασποράς.

Επιλογή Θεωρητικού Μοντέλου - Χρώμιο (Cr)

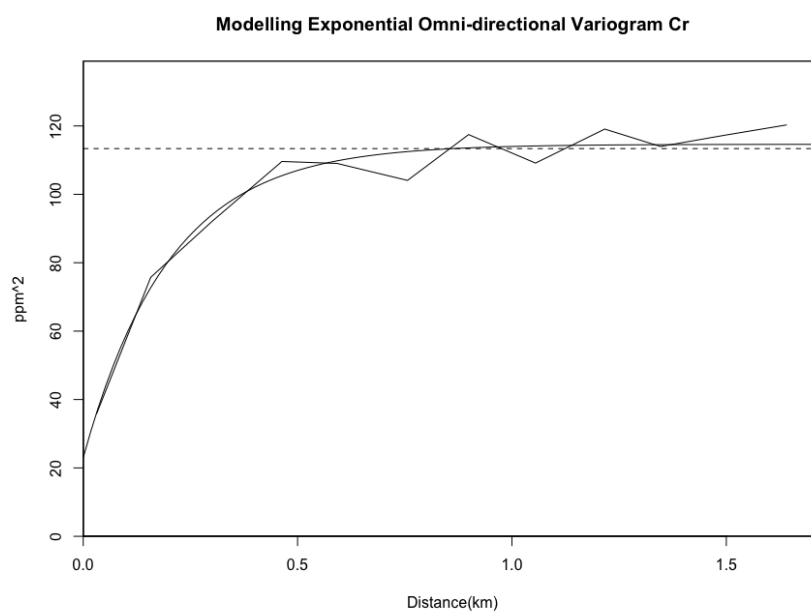
Κατά την επεξεργασία των συνόλων δεδομένων, στο στάδιο αυτό δοκιμάστηκαν τρία θεωρητικά μοντέλα για καθένα από τα βαρέα μέταλλα. Ειδικότερα δοκιμάστηκε η προσαρμογή του σφαιρικού (Spherical) μοντέλου, του εκθετικού (Exponential) μοντέλου και του γκαουσιανού (Gaussian) μοντέλου, όπου για καθένα από τα θεωρητικά πρότυπα έγινε η εκτίμηση του τετραγωνικού σφάλματος, σύμφωνα με τις σχέσεις που αναφέρθηκαν στο δεύτερο Κεφάλαιο και εν συνεχεία με αφαίρεση της τιμής αυτής

από την τιμή του εμπειρικού βαριογράμματος.

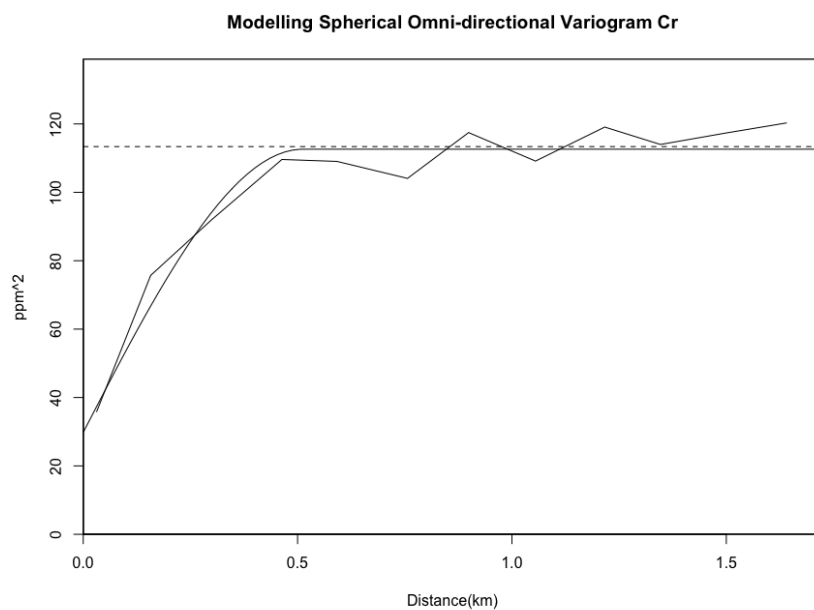
Στον Πίνακα 3.3 παρατίθενται τα αποτελέσματα των αθροιστικών τετραγωνικών σφαλμάτων για τα τρία θεωρητικά πρότυπα ενώ στα Σχήματα 3.9, 3.10 και 3.11 φαίνεται η απεικόνιση της προσαρμογής των θεωρητικών μοντέλων στο εμπειρικό βαριόγραμμα.

Μοντέλο	Σφάλμα για το Cr (ppm^2)
Spherical	1005,17
Exponential	204,40
Gaussian	654,71
Επιλεγθέν μοντέλο	Exponential

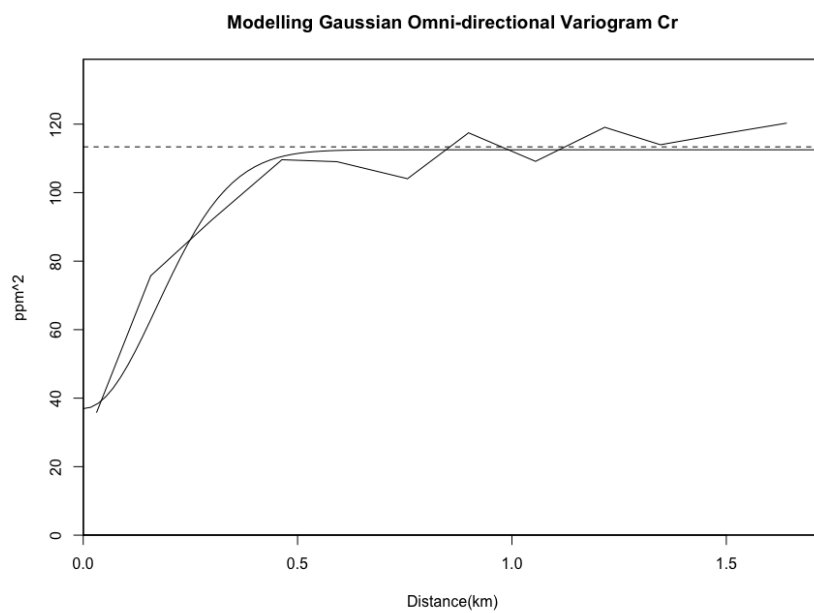
Πίνακας 3.3: Τιμές των τετραγωνικών σφαλμάτων με σκοπό την επιλογή του κατάλληλου θεωρητικού μοντέλου για τα δεδομένα του Χρωμίου.



Σχήμα 3.9: Απεικονίσεις των δοκιμών για το Χρώμιο, όπως αυτές προέκυψαν μετά την προσαρμογή του θεωρητικού Εκθετικού μοντέλου.



Σχήμα 3.10: Απεικονίσεις των δοκιμών για το Χρώμιο, όπως αυτές προέκυψαν μετά την προσαρμογή του θεωρητικού Σφαιρικού μοντέλου.



Σχήμα 3.11: Απεικονίσεις των δοκιμών για το Χρώμιο, όπως αυτές προέκυψαν μετά την προσαρμογή του θεωρητικού Γκαουσιανού μοντέλου.

Σύμφωνα με τα διαγράμματα που προέκυψαν, παρατηρείται ότι στο Σφαιρικό και στο Γκαουσιανό μοντέλο υπάρχει σημαντική απόκλιση από την γραφική παράσταση του εμπειρικού βαριογράμματος το οποίο επιβεβαιώνεται και από τα τετραγωνικά σφάλματα των θεωρητικών μοντέλων, αφού το Σφαιρικό μοντέλο παρουσιάζει σφάλμα ίσο με 1005,1 ενώ το Γκαουσιανό 654,7, όπως φαίνεται στον Πίνακα 3.3, συνεπώς τα δύο αυτά μοντέλα απορρίπτονται.

Ως τελική επιλογή καθορίζεται το Εκθετικό μοντέλο αφού εμφανίζει το μικρότερο τετραγωνικό σφάλμα με τιμή ίση με 204,3. Η επιλογή του Εκθετικού μοντέλου καθορίζει και το υπόλοιπο της επεξεργασίας, αφού βάσει της γραφικής παράστασης αυτού, υπολογίζονται το φαινόμενο πυρήνα (Nugget Effect), η διασπορά σ^2 καθώς και το μήκος συσχέτισης ξ , όπως φαίνεται στον Πίνακα 3.4.

Παράμετροι Εκθετικού Μοντέλου	Τιμή
Φαινόμενο Πυρήνα (Nugget Effect) ppm^2	22,97
Διασπορά (σ^2) ppm^2	91,60
Μήκος Συσχέτισης (ξ)	0,20

Πίνακας 3.4: Παράμετροι που προέκυψαν από την προσαρμογή του εκθετικού θεωρητικού μοντέλου στο εμπειρικό βαριόγραμμα, όπως υπολογίστηκε για τα δεδομένα του Χρωμίου.

Επιλογή Θεωρητικού Μοντέλου - Ψευδάργυρος (Zn)

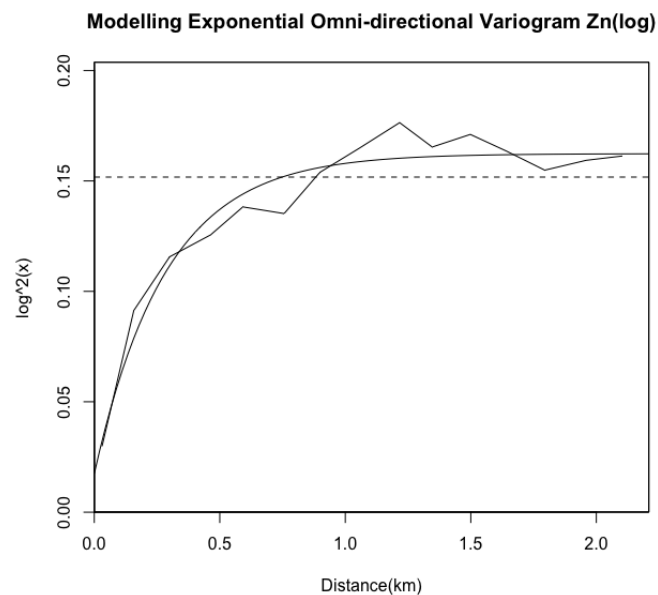
Η επιλογή κατάλληλου θεωρητικού προτύπου για το σύνολο δεδομένων του Ψευδαργύρου καθορίστηκε με επανάληψη της διαδικασίας που ακολουθήθηκε για το σύνολο δεδομένων του Χρωμίου. Αναλυτικότερα, έγινε προσαρμογή των τριών θεωρητικών προτύπων στο εμπειρικό βαριόγραμμα, υπολογίζοντας τις τιμές των αθροιστικών τετραγωνικών σφαλμάτων για καθένα από αυτά.

Στον Πίνακα 3.5 παρατίθενται τα αποτελέσματα των τετραγωνικών σφαλμάτων για τα τρία θεωρητικά πρότυπα ενώ στα Σχήματα 3.12, 3.13 και 3.14 φαίνεται η απεικόνιση της προσαρμογής των θεωρητικών μοντέλων στο εμπειρικό βαριόγραμμα.

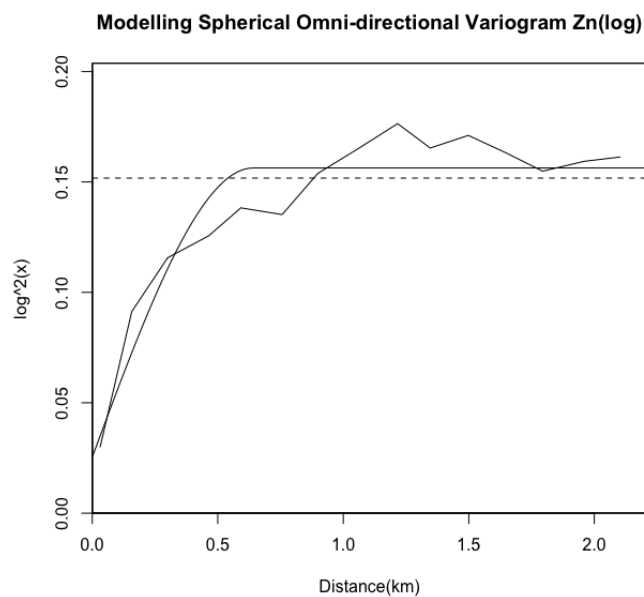
Μοντέλο	Σφάλμα για το Zn(log) (ppm^2)
Spherical	3×10^{-3}
Exponential	1×10^{-3}
Gaussian	4×10^{-3}
Επιλεγθέν μοντέλο	Exponential

Πίνακας 3.5: Τιμές των τετραγωνικών σφαλμάτων με σκοπό την επιλογή του κατάλληλου θεωρητικού μοντέλου για τα δεδομένα του Ψευδαργύρου.

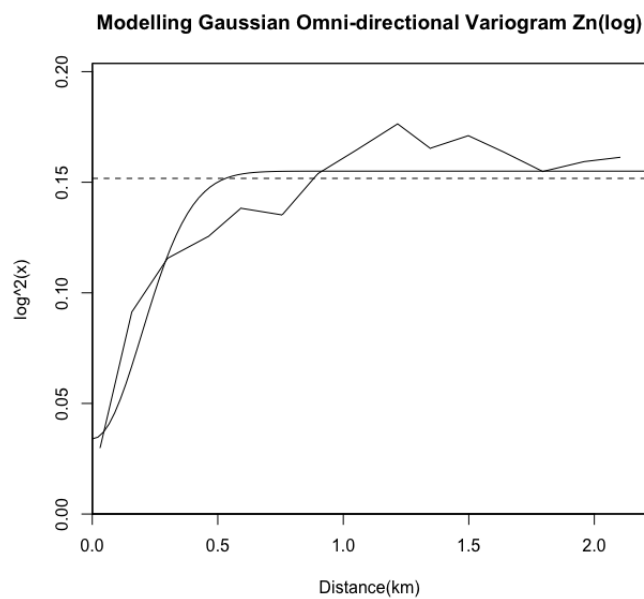
Σε αντίθεση με το θεωρητικό μοντέλο που επιλέχθηκε για το σύνολο δεδομένων του Χρωμίου, το μοντέλο που προσαρμόζεται σε πιο ικανοποιητικό βαθμό για τα δεδομένα του Ψευδαργύρου είναι το Σφαιρικό. Οι τιμές των τετραγωνικών σφαλμάτων που προέκυψαν κατόπιν υπολογισμού, διαμορφώθηκαν ως 0,0032 για το Σφαιρικό, 0,001 για το Εκθετικό και 0,0042 για το Γκαουσιανό. Οι παράμετροι που υπολογίστηκαν βάσει της προσαρμογής του Σφαιρικού μοντέλου στο εμπειρικό βαριόγραμμα παρατίθενται στον Πίνακα 3.6.



Σχήμα 3.12: Απεικονίσεις των δοκιμών για τον Ψευδάργυρο, όπως αυτές προέκυψαν μετά την προσαρμογή του θεωρητικού Εκθετικού μοντέλου.



Σχήμα 3.13: Απεικονίσεις των δοκιμών για τον Ψευδάργυρο, όπως αυτές προέκυψαν μετά την προσαρμογή του θεωρητικού Σφαιρικού μοντέλου.



Σχήμα 3.14: Απεικονίσεις των δοκιμών για τον Ψευδάργυρο, όπως αυτές προέκυψαν μετά την προσαρμογή του θεωρητικού Γκαουσιανού μοντέλου.

Παράμετροι Εκθετικού Μοντέλου	Τιμή
Φαινόμενο Πυρήνα (Nugget Effect) ppm	0,02
Διασπορά (σ^2) ppm^2	0,11
Μήκος Συσχέτισης (ξ)	0,28

Πίνακας 3.6: Παράμετροι που προέκυψαν από την προσαρμογή του Εκθετικού θεωρητικού μοντέλου στο εμπειρικό βαριόγραμμα, όπως υπολογίστηκε για τα δεδομένα του Ψευδαργύρου.

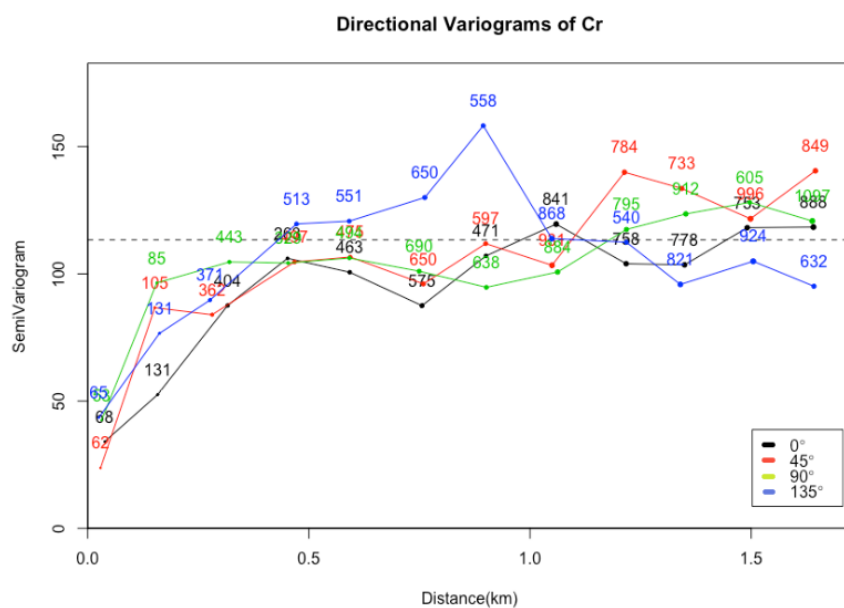
3.2.2 Ανισοτροπία

Η ύπαρξη ανισοτροπίας σε μία περιοχή μελέτης είναι πιθανό να οφείλεται στην τοπογραφία του εδάφους, δηλαδή σε διαφορετικές διευθύνσεις της περιοχής κατά τις οποίες, οι φυσικές ιδιότητες του εδάφους μεταβάλλονται. Αποτέλεσμα αυτού είναι κατά τη διαδικασία σχηματισμού κοιτασμάτων, να επικρατούν διαφορετικές συνθήκες σχηματισμού, σε διαφορετικές διευθύνσεις του κοιτάσματος[10].

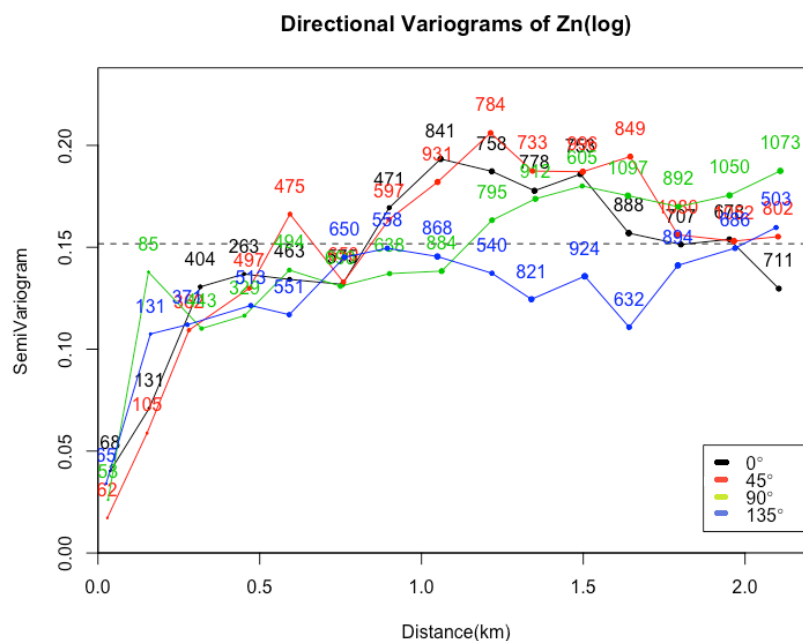
Με την χρήση των κατευθυντικών βαριογραμμάτων, ελέγχθηκε η περιοχή μελέτης για την ύπαρξη γεωμετρικής ανισοτροπίας. Ειδικότερα υπολογίστηκαν τα βαριογράμματα για τις κατευθύνσεις 0° , 45° , 90° και 135° . Ο υπολογισμός των κατευθυντικών βαριογραμμάτων έγινε με τις ίδιες παραμέτρους που χρησιμοποιήθηκαν κατά τον υπολογισμό των εμπειρικών βαριογραμμάτων, με βήμα $h=0.15(150m)$ και σε απόσταση 1.7km.

Η διαδικασία για την εύρεση της ύπαρξης ανισοτροπίας καθώς και της κατεύθυνσης της, έγινε βάση προσαρμογής του εκθετικού μοντέλου στα κατευθυντικά βαριογράμματα. Από τους δύο λόγους των τεσσάρων μηκών συσχέτισης που προέκυψαν για τα δύο βαρέα μέταλλα που μελετήθηκαν, προέκυψε τιμή ανισοτροπίας ίση με 1.649 για το σύνολο δεδομένων του Χρωμίου και τιμή ανισοτροπίας ίση με 1.27 για το σύνολο δεδομένων του Ψευδαργύρου.

Στα Σχήματα 3.15 και 3.16 παρατίθενται τα κατευθυντικά βαριογράμματα για καθένα από τα βαρέα μέταλλα.



Σχήμα 3.15: Διάγραμμα με τα κατευθυντικά βαριογράμματα που υπολογίστηκαν για τον έλεγχο της ανισοτροπίας στο σύνολο δεδομένων του Χρωμίου, στις κατευθύνσεις 0° , 45° , 90° και 135° .



Σχήμα 3.16: Διάγραμμα με τα κατευθυντικά βαριογράμματα που υπολογίστηκαν για τον έλεγχο της ανισοτροπίας στο σύνολο δεδομένων του Ψευδαργύρου, στις κατευθύνσεις 0° , 45° , 90° και 135° .

Παρατηρώντας τα μπορούμε να συμπεράνουμε ότι η μικρή απόσταση μεταξύ των κατευθυντικών βαριογραμμάτων είναι μία πρώτη ένδειξη της έλλειψης ανισοτροπίας στα δεδομένα. Παράλληλα οι μικρές διαφορές μεταξύ των μηκών συσχέτισης, όπως αυτές φαίνονται στον Πίνακα 3.9, είναι ακόμη ένα στοιχείο που υποστηρίζει την έλλειψη ανισοτροπίας και στα δύο συνόλων δεδομένων.

Παράμετρος	Τιμή 0°	Τιμή 45°	Τιμή 90°	Τιμή 135°
(Nugget Effect) m^2	34,05	23,71	42,5	43,49

Πίνακας 3.7: Τιμές του φαινομένου πυρήνα (Nugget Effect) ως παράμετρο της προσαρμογής του εκθετικού θεωρητικού μοντέλου στα κατευθυντικά βαριογράμματα, για το σύνολο δεδομένων του Χρωμίου.

Παράμετρος	Τιμή 0°	Τιμή 45°	Τιμή 90°	Τιμή 135°
(Nugget Effect) m^2	0,041	0,012	0,019	0,028

Πίνακας 3.8: Τιμές του φαινομένου πυρήνα (Nugget Effect) ως παράμετρο της προσαρμογής του εκθετικού θεωρητικού μοντέλου στα κατευθυντικά βαριογράμματα, για το σύνολο δεδομένων του Ψευδαργύρου.

Παράμετρος	Χρώμιο (Cr)	Ψευδάργυρος (Zn(log))
Min Μήκος συσχέτισης ξ (km)	0,146	0,280
Max Μήκος συσχέτισης ξ (km)	0,225	0,371
Τιμή Ανισοτροπίας	1,649	1,755

Πίνακας 3.9: Τιμές των μηκών συσχέτισης ως παράμετρο της προσαρμογής του εκθετικού θεωρητικού μοντέλου στα κατευθυντικά βαριογράμματα καθώς και τις τιμές της ανισοτροπίας για τα σύνολα δεδομένων του Χρωμίου και Ψευδαργύρου.

3.3 Επιβεβαίωση Χωρικού Μοντέλου

Στο στάδιο αυτό έπρεπε να γίνει ο απαραίτητος έλεγχος των αποτελεσμάτων που προέκυψαν κατά την επεξεργασία που έλαβε χώρα στην ενότητα 3.2. Ο έλεγχος της

αξιοπιστίας των αποτελεσμάτων πραγματοποιήθηκε με την μέθοδο της διασταυρωτικής επιβεβαίωσης (Cross-Validation) και συγκεκριμένα με τη μέθοδο αφαίρεσης ενός σημείου εκ περιτροπής (Leave-One-Out). Μέσω της διαδικασίας αυτής εξετάστηκε κατά πόσο μπορούν να χρησιμοποιηθούν τα αποτελέσματα που προέκυψαν στον υπολογισμό της εκτίμησης των συγκεντρώσεων στην περιοχή μελέτης. Για τον υπολογισμό των εκτιμήσεων πραγματοποιήθηκε αντιστροφή του μετασχηματισμού μόνο για το σύνολο δεδομένων του Ψευδαργύρου, αφού δεν υπήρξε μετασχηματισμός για τα δεδομένα του Χρωμίου.

Κατά την εφαρμογή της μεθόδου της αφαίρεσης ενός σημείου εκ περιτροπής, πραγματοποιείται επαναληπτικά η αφαίρεση ενός σημείου από το δείγμα κάνοντας Kriging στις τιμές των μετρήσεων και κατόπιν υπολογίζεται εκ νέου η τιμή που έχει αφαιρεθεί. Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται για κάθε σημείο του δείγματος και στη συνέχεια πραγματοποιείται σύγκριση με τις αρχικές τιμές των γεωτρήσεων.

Για τον έλεγχο των αποτελεσμάτων υπολογίστηκαν το Μέσο Τετραγωνικό Σφάλμα (RMSE), το Μέσο Σφάλμα (ME), το Μέσο Απόλυτο Σφάλμα (MAE) καθώς και ο Συντελεστής Συσχέτισης Pearson (ρ), όπως αυτά παρουσιάζονται στον Πίνακα 3.10. Για το σύνολο δεδομένων του Ψευδαργύρου, η σύγκριση που πραγματοποιήθηκε στην τελική εκτίμηση περιλάμβανε αντιστροφή του μετασχηματισμού που είχε πραγματοποιηθεί για το σύνολο δεδομένων του Ψευδαργύρου.

Οι τιμές του συντελεστή συσχέτισης (ρ) διαμορφώθηκαν έως 0,64 για τα δεδομένα του Χρωμίου και έως 0,85 για τα δεδομένα του Ψευδαργύρου, κάτι που αντιπροσωπεύει μία ικανοποιητική συσχέτιση μεταξύ των τιμών που υπολογίστηκαν και των αρχικών τιμών. Συμπερασματικά, το μοντέλο βαριογράμματος που επιλέχθηκε για καθένα από τα βαρέα μέταλλα που μελετήθηκαν παράγει αξιόπιστα αποτελέσματα.

Παράμετρος	Χρώμιο (Cr)	Ψευδάργυρος (Zn(log))
RMSE (ppm)	8,17	0,30
ME (ppm)	0,21	0,75
MAE (ppm)	6,14	0,24
ρ	0,64	0,85

Πίνακας 3.10: Τιμές των μεγεθών που χρησιμοποιήθηκαν για την επαλήθευση της μεθόδου του βαριογράμματος. Παρουσιάζονται οι τιμές για τις εξής παραμέτρους: το Μέσο Τετραγωνικό Σφάλμα (RMSE), το Μέσο Σφάλμα (ME), το Μέσο Απόλυτο Σφάλμα (MAE) και ο Συντελεστής Συσχέτισης Pearson (Pearson's Correlation Coefficient) (ρ).

3.4 Μέθοδος χωρικής παρεμβολής

Η εκτίμηση των κατανομών των συγκεντρώσεων, τόσο για τα δεδομένα του Χρωμίου όσο και για τα δεδομένα του Ψευδαργύρου πραγματοποιήθηκε με την χρήση της στοχαστικής μεθόδου χωρικής παρεμβολής Κανονικού Kriging (Ordinary Kriging) διότι στο Κανονικό Kriging η μέση τιμή παραμένει σταθερή για κάθε διαφορετική γειτονιά που επιλέχθηκε και δε χρειάζεται να είναι γνωστή. Το Kriging στην περίπτωση του συνόλου δεδομένων του Ψευδαργύρου πραγματοποιήθηκε για τα μετασχηματισμένα δεδομένα. Για την επεξεργασία της συγκεκριμένης μεθόδου επιλέχθηκαν τα εξής πλέγματα για κάθε σύνολο δεδομένων: διάσταση καννάβου 90×100 με μέγεθος κελιών 42×38 μέτρων για τα δεδομένα του Χρωμίου και διάσταση καννάβου 90×90 με μέγεθος κελιών 50×52 μέτρων για τις μετρήσεις συγκέντρωσης του Ψευδαργύρου. Επίσης το Kriging που επιλέχθηκε ήταν ισοτροπικό, λόγω του ότι το πεδίο ήταν ισοτροπικό, όπως προέκυψε κατά την διαδικασία ελέγχου της ανισοτροπίας.

3.4.1 Επιλογή Γειτονιάς Συσχέτισης

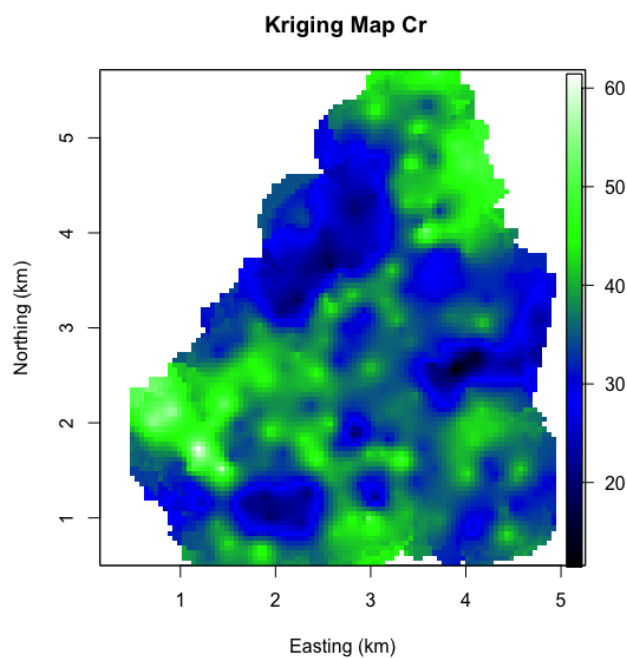
Κύριο μέλημα κατά την επιλογή γειτονιάς συσχέτισης αποτέλεσε η ύπαρξη συσχέτισης των σημείων της γειτονιάς. Έτσι, το μέγεθος γειτονιάς που επιλέχθηκε για τα δεδομένα του Χρωμίου έχει τιμή ίση με 500m, περίπου 2,5 φορές το μήκος συσχέτισης του εκθετικού θεωρητικού μοντέλου που προσαρμόσθηκε. Για το σύνολο των

μετρήσεων του Ψευδαργύρου επιλέχθηκε γειτονιά ίση με 500m που αντιστοιχεί στην τιμή του μήκους συσχέτισης, αφού το θεωρητικό πρότυπο που επιλέχθηκε για τις τιμές συγκέντρωσης του Ψευδαργύρου είναι το Σφαιρικό, όπου ισχύει ότι $r < \xi$. Επίσης ο ελάχιστος αριθμός δεδομένων στην γειτονιά του εκτιμώμενου σημείου για να την πραγματοποίηση των προβλέψεων καθορίστηκε στα 3 σημεία.

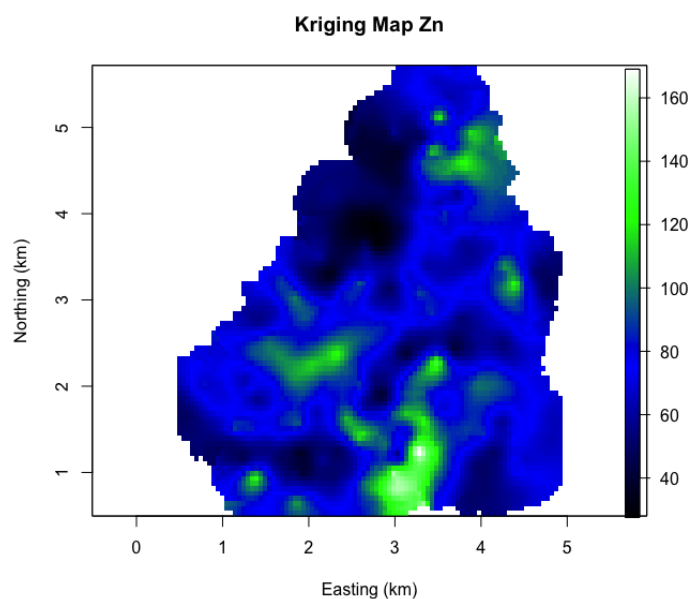
3.4.2 Εκτίμηση Συγκεντρώσεων στην Περιοχή Μελέτης

Με την μέθοδο του Kriging δίνεται η δυνατότητα να πραγματοποιηθούν εκτιμήσεις της συγκέντρωσης για κάθε σημείο του κανάβου και για τα δύο σύνολα δεδομένων. Κατά την διαδικασία αυτή λαμβάνονται υπόψιν η γειτονιά συσχέτισης, το εκάστοτε θεωρητικό πρότυπο που προσαρμόστηκε στο εμπειρικό βαριόγραμμα κάθε μετάλλου καθώς και οι παράμετροι του κάθε θεωρητικού μοντέλου, δηλαδή το φαινόμενο πυρήνα του κανάβου (Nugget Effect), το μήκος συσχέτισης $r < \xi$ και η διασπορά σ^2 . Ως αποτέλεσμα της μεθόδου του Kriging παράγεται ο τελικός χάρτης εκτιμήσεων των συγκεντρώσεων για την περιοχή μελέτης, όπως φαίνεται στα Σχήματα 3.17 και 3.18, για κάθε μέταλλο ξεχωριστά. Κατά την επεξεργασία που πραγματοποιήθηκε για τα δεδομένα συγκεντρώσεων του Ψευδαργύρου έπρεπε να εφαρμοστεί αντιστροφή του μετασχηματισμού, η οποία και πραγματοποιήθηκε.

Από το Σχήμα 3.17 παρατηρείται ότι το μεγαλύτερο μέρος του Χρωμίου φέρεται να είναι συγκεντρωμένο στις γεωτρήσεις που βρίσκονται στο βόρειο, στο ανατολικό καθώς και στο νότιο και στο δυτικό τμήμα του χάρτη, ενώ στο Σχήμα 3.18 ο χάρτης που περιγράφει τις εκτιμήσεις των συγκεντρώσεων του Ψευδαργύρου φέρεται να εμφανίζει υψηλές συγκεντρώσεις στις γεωτρήσεις που περιλαμβάνονται στο κεντρικό και νότιο τμήμα του χάρτη.



Σχήμα 3.17: Χάρτης του Kriging με τις εκτιμήσεις των συγκεντρώσεων (σε ppm) για το σύνολο δεδομένων του Χρωμίου (Cr), χρησιμοποιώντας τετραγωνικό πλέγμα με κελιά μεγέθους 50×52 μέτρων.



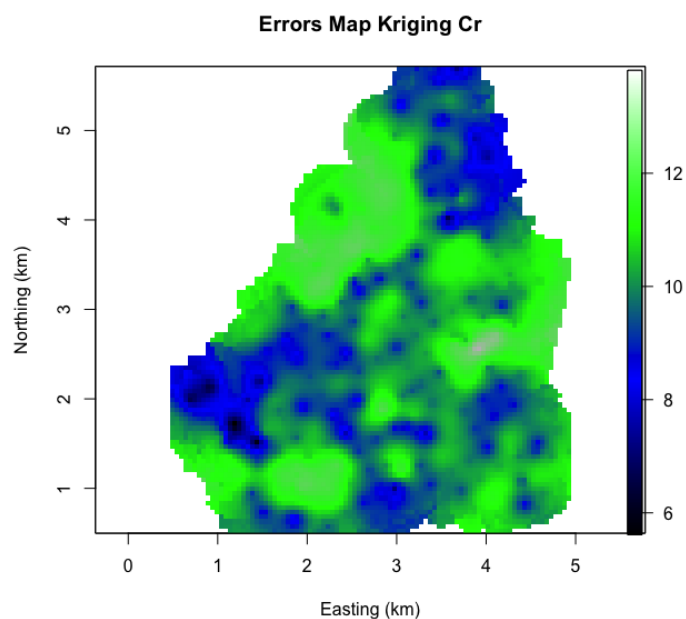
Σχήμα 3.18: Χάρτης του Kriging με τις εκτιμήσεις των συγκεντρώσεων για το σύνολο δεδομένων του Ψευδαργύρου (Zn), σε ppm, χρησιμοποιώντας τετραγωνικό πλέγμα με κελιά μεγέθους 26×27 μέτρων.

Ως τελευταίο στάδιο της επεξεργασίας της μεθόδου του Kriging καθορίστηκε ο έλεγχος της ακρίβειας εκτιμήσεων μέσου του υπολογισμού του Kriging, σύμφωνα με τη Σχέση (2.50). Με τον τρόπο αυτό προχωρήσαμε στην κατασκευή των αντίστοιχων χαρτών σφαλμάτων και για τα δύο βαρέα μέταλλα (ενώ οι αντίστοιχοι χάρτες για τα υπόλοιπα μέταλλα παρατίθενται σε Παράρτημα). Οι χάρτες των σφαλμάτων δίνονται στα Σχήματα 3.19 και 3.20.

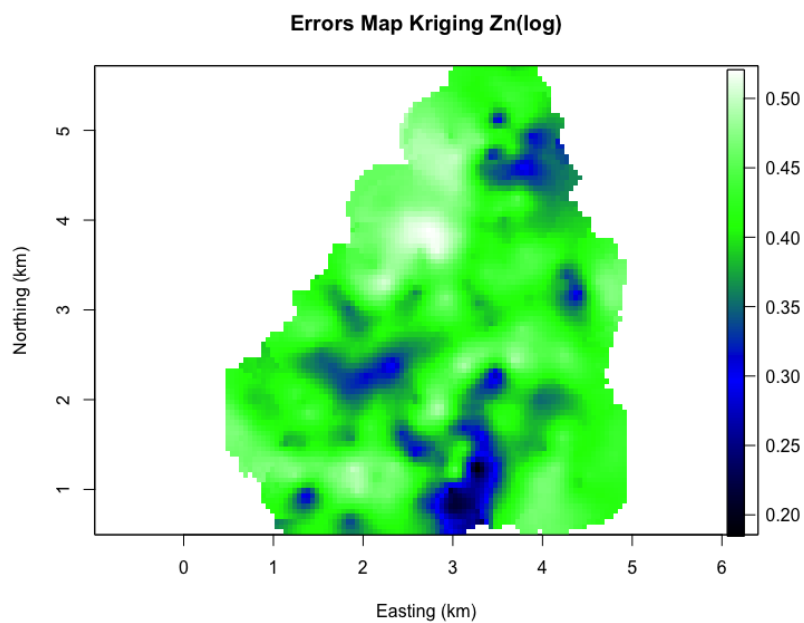
Για τον χάρτη σφαλμάτων του Χρωμίου στο Σχήμα 3.19 παρατηρείται ότι κυρίως στο δυτικό αλλά και ανατολικό τμήμα του χάρτη εκτιμώνται μεγαλύτερα σφάλματα, αφού λόγω έλλειψης γειτόνων στην συγκεκριμένη περιοχή δεν έχουν γίνει εκτιμήσεις από την μέθοδο του Kriging, κάτι που δε συμβαίνει στο νότιο και κεντρικό τμήμα του χάρτη όπου και παρατηρούνται μικρότερα σφάλματα λόγω μικρότερων αποστάσεων μεταξύ των γεωτρήσεων και συνεπώς αποτελεσματικότερη εύρεση γειτονικών σημείων κατά την εκτίμηση.

Αντιστοίχως, μέσου του χάρτη σφαλμάτων για το σύνολο δεδομένων του Ψευδαργύρου στο Σχήμα 3.20, διαπιστώνεται ότι για το δυτικό και ανατολικό τμήμα του χάρτη δεν υπάρχουν εκτιμήσεις, λόγω έλλειψης γειτόνων, κάτι που δεν συμβαίνει για τις κεντρικές περιοχές του χάρτη.

Οι χάρτες των εκτιμήσεων καθώς και των σφαλμάτων που προέκυψαν από την επεξεργασία με τη μέθοδο του Kriging για τα υπόλοιπα μέταλλα, παρατίθενται στα Παραρτήματα Α και Β.



Σχήμα 3.19: Χάρτης με τα σφάλματα των εκτιμήσεων του Kriging για το σύνολο δεδομένων του Χρωμίου (Cr), σε ppm.



Σχήμα 3.20: Χάρτης με τα σφάλματα των εκτιμήσεων του Kriging για το σύνολο δεδομένων του Ψευδαργύρου (Zn), σε ppm.

3.5 Συμπεράσματα

Η εκπόνηση της παρούσας διπλωματικής εργασίας πραγματοποιήθηκε με σκοπό την γεωστατιστική ανάλυση των συγκεντρώσεων επτά βαρέων μετάλλων σε μια περιοχή μελέτης στα Ελβετικά Όρη Jura με την χρήση της γλώσσας προγραμματισμού R. Για την εκτίμηση των συγκεντρώσεων των μετάλλων στην περιοχή μελέτης, παράχθηκαν χάρτες μέσω της μεθόδου χωρικής παρεμβολής με την μέθοδο του Κανονικού Kriging (Ordinary Kriging). Οι παράμετροι του μήκους συσχέτισης, της διασποράς καθώς και του φαινομένου του πυρήνα χρησιμοποιήθηκαν κατόπιν υπολογισμού μέσω των βαριογραμμάτων.

Στο πρώτο στάδιο μελέτης των δεδομένων παρατηρήθηκε ότι μόνο τα δεδομένα του Χρωμίου και του Νικελίου συμπίπτουν σε ικανοποιητικό βαθμό με την κανονική κατανομή. Για τον λόγο αυτό εφαρμόστηκε μετασχηματισμός με λογάριθμο για το σύνολο των υπόλοιπων μετάλλων, με αποτέλεσμα η τελική επιλογή για την μορφή των δεδομένων να καθορίζεται από τα διαγράμματα κανονικής πιθανότητας. Στην εργασία παρουσιάστηκαν τα αποτελέσματα των δεδομένων Χρωμίου και Ψευδαργύρου, αφού εμφάνισαν μεγαλύτερο ενδιαφέρον κατά την επεξεργασία, ενώ τα σχήματα των υπόλοιπων μετάλλων παρατέθηκαν στα Παραρτήματα Α και Β.

Επιλέχθηκε μετασχηματισμός των δεδομένων του Ψευδαργύρου, ενώ δε χρειάστηκε αντίστοιχος για εκείνα του Χρωμίου. Κατά την διερεύνηση για την ύπαρξη τάσεων δεν προέκυψαν σημαντικές τάσεις, αφού ο συντελεστής συσχέτισης Pearson περιέγραψε χαμηλή συσχέτιση και διαμορφώθηκε έως $\rho=7.5\%$ για το Χρώμιο και έως $\rho=15.3\%$ για τον Ψευδάργυρο.

Στα εμπειρικά βαριογράμματα που υπολογίστηκαν έγινε η προσαρμογή του Εκθετικού θεωρητικού προτύπου, τόσο για τα δεδομένα του Χρωμίου όσο και για εκείνα του Ψευδαργύρου, μετά από τον υπολογισμό των τετραγωνικών σφαλμάτων για τα τρία θεωρητικά μοντέλα που δοκιμάστηκαν (Σφαιρικό, Εκθετικό, Γκαουσιανό). Το Εκθετικό μοντέλο χρησιμοποιήθηκε στην μέθοδο Kriging και για τα δύο μέταλλα που παρουσιάστηκαν.

Για τον υπολογισμό των εκτιμήσεων των συγκεντρώσεων στην περιοχή μελέτης χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος του Κανονικού Kriging. Σε πρώτο στάδιο κατασκευάστηκαν οι χάρτες των εκτιμήσεων για τα δεδομένα Χρωμίου και Ψευδαργύρου ξεχωριστά, χρησιμοποιώντας τετραγωνικό πλέγμα με κελιά μεγέθους 50×52 μέτρων για τους χάρτες του Χρωμίου και κελιά μεγέθους 26×27 μέτρων για τους χάρτες του Ψευδαργύρου. Κατόπιν ο έλεγχος αξιοπιστίας των εκτιμήσεων του Kriging πραγματοποιήθηκε με την κατασκευή χαρτών με τα σφάλματα των εκτιμήσεων και για τα δύο μέταλλα. Από τον χάρτη σφαλμάτων του Χρωμίου παρατηρήθηκε ότι στις δυτικές και ανατολικές περιοχές το σφάλμα είναι αρκετά μεγάλο, σε αντίθεση με τις κεντρικές περιοχές, όπου αυτό ελαττώνεται, κυρίως λόγω του ότι στις τελευταίες υπάρχει μικρότερη απόσταση γεωτρήσεων. Αντίστοιχα, το ίδιο φαίνεται να συμβαίνει και στον χάρτη σφαλμάτων των εκτιμήσεων του Ψευδαργύρου, όπου στις ανατολικές και δυτικές περιοχές φαίνεται να υπάρχει μεγάλο σφάλμα, λόγω της μεγάλης απόστασης των γεωτρήσεων, σε αντίθεση με τις κεντρικές περιοχές.

Προτάσεις για μελλοντική έρευνα

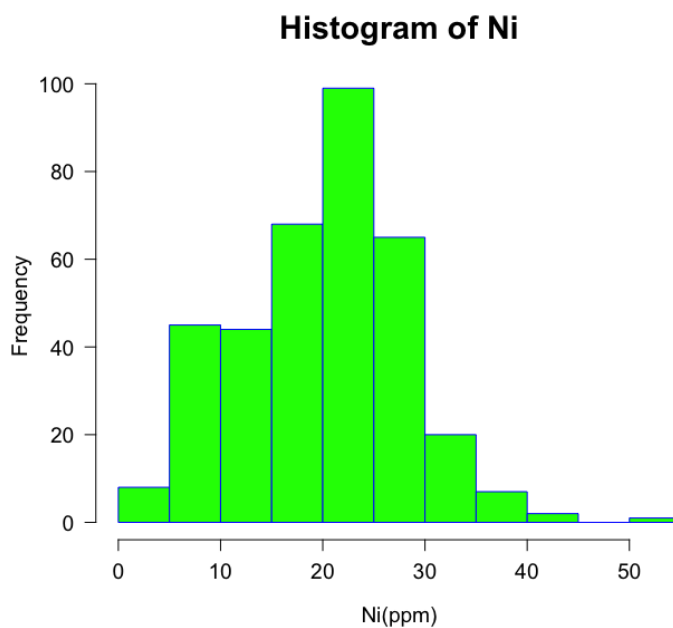
Μία πρόταση για μελλοντική έρευνα είναι να χρησιμοποιηθεί διαφορετική μέθοδος Kriging και πιο συγκεκριμένα αυτή του Co-Kriging κατά την οποία συνυπολογίζονται και δευτερεύουσες πληροφορίες για την εκτίμηση της συγκέντρωσης στις επιλεγμένες θέσεις της περιοχής μελέτης.

Επιπλέον μία ακόμη πρόταση μελλοντικής έρευνας συνιστάται στο να εξετασθεί και να διερευνηθεί μέσω προσομοίωσης η αβεβαιότητα των εκτιμήσεων της μεθόδου χωρικής παρεμβολής Kriging.

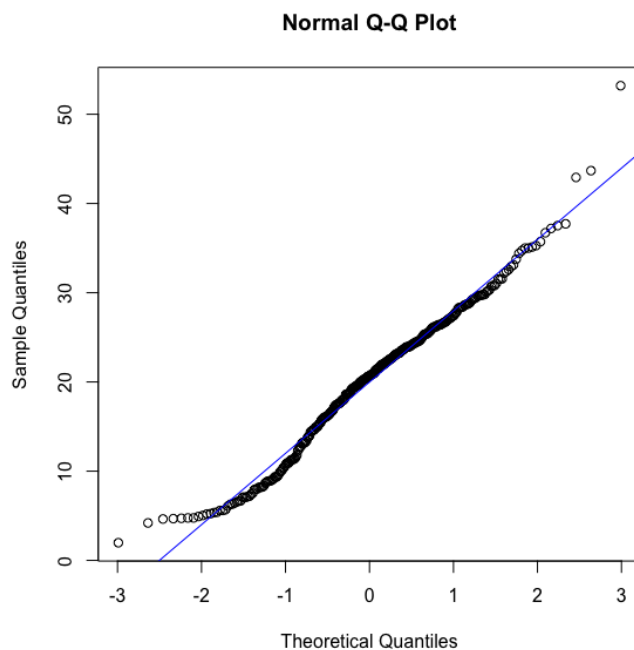
Παράρτημα Α΄

Διαγράμματα Νικελίου (Ni)

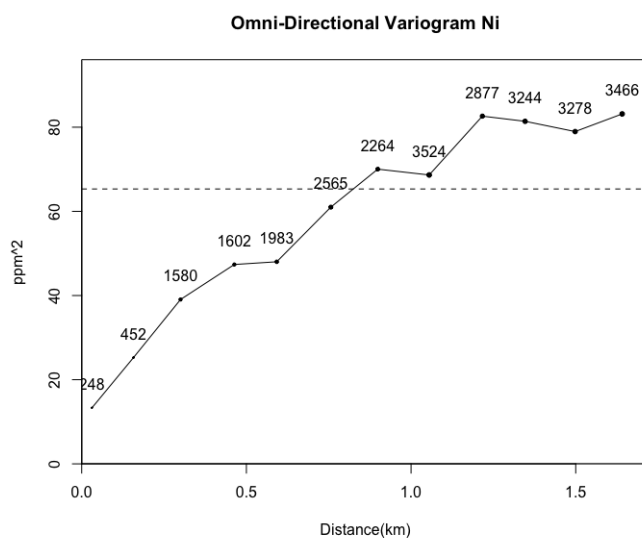
Στο παράρτημα αυτό παρατίθενται τα διαγράμματα που προέκυψαν από την επεξεργασία των δεδομένων του Νικελίου (Ni).



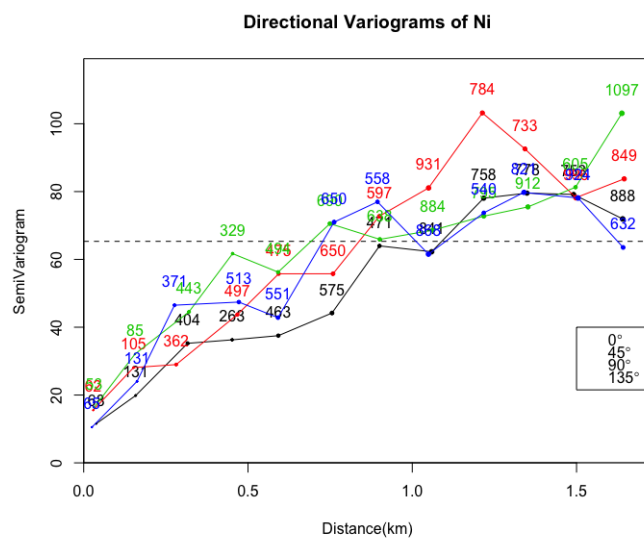
Σχήμα Α΄.1: Ιστόγραμμα των δεδομένων του Νικελίου χωρίς την εφαρμογή μετασχηματισμού.



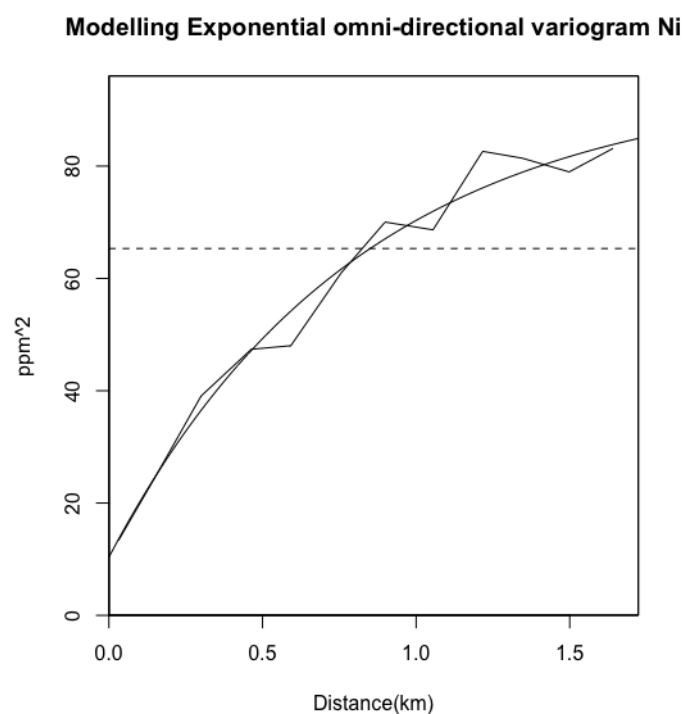
Σχήμα Α'.2: Διάγραμμα κανονικής πιθανότητας της συγκέντρωσης για το Νικέλιο, με σκοπό να εξετασθεί αν τα δεδομένα ακολουθούν την κανονική κατανομή. Οι κύκλοι που απεικονίζονται στον άξονα Υ αντιστοιχούν στις τιμές των δεδομένων, ενώ στον άξονα Χ απεικονίζονται οι θεωρητικές τιμές της κατανομής. Η ευθεία γραμμή περιγράφει την κανονική κατανομή.



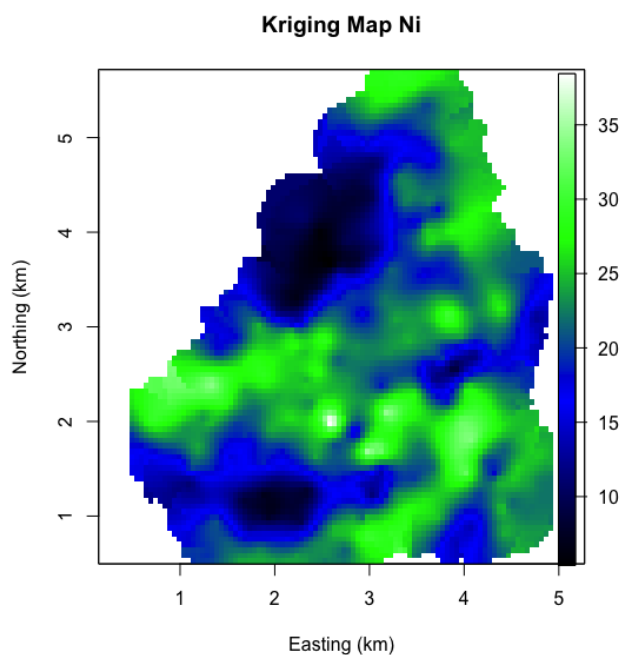
Σχήμα Α'.3: Εμπειρικό βαριόγραμμα για το σύνολο των δεδομένων του Νικελίου.



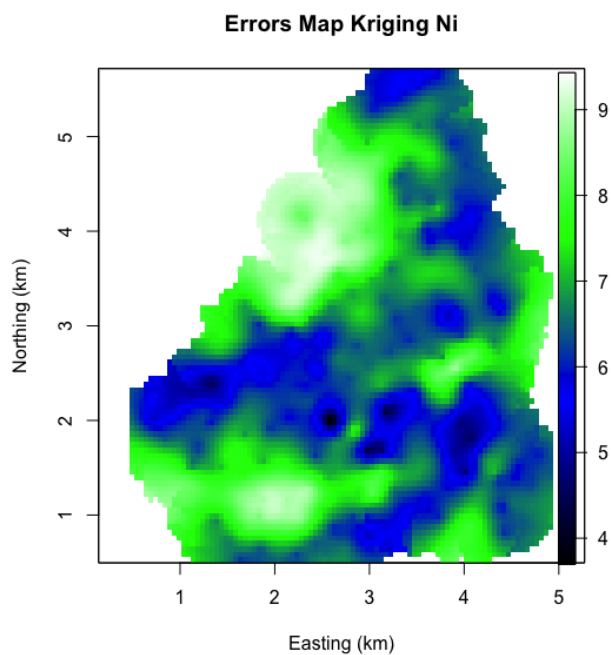
Σχήμα Α'.4: Διάγραμμα με τα κατευθυντικά βαριογράμματα που υπολογίστηκαν για τον έλεγχο της ανισοτροπίας, για το σύνολο των δεδομένων του Νικελίου, στις κατευθύνσεις 0°, 45°, 90° και 135°.



Σχήμα Α'.5: Απεικόνιση της δοκιμής του Εκθετικού θεωρητικού μοντέλου για το σύνολο δεδομένων του Νικελίου, το οποίο επιλέχθηκε μετά από σύγκριση των τετραγωνικών σφαλμάτων που προέκυψαν μετά την προσαρμογή των θεωρητικών μοντέλων (Εκθετικό, Σφαιρικό, Γκαουσιανό).



Σχήμα Α'.6: Χάρτης του Kriging με τις εκτιμήσεις των συγκεντρώσεων για το σύνολο των δεδομένων του Νικελίου.

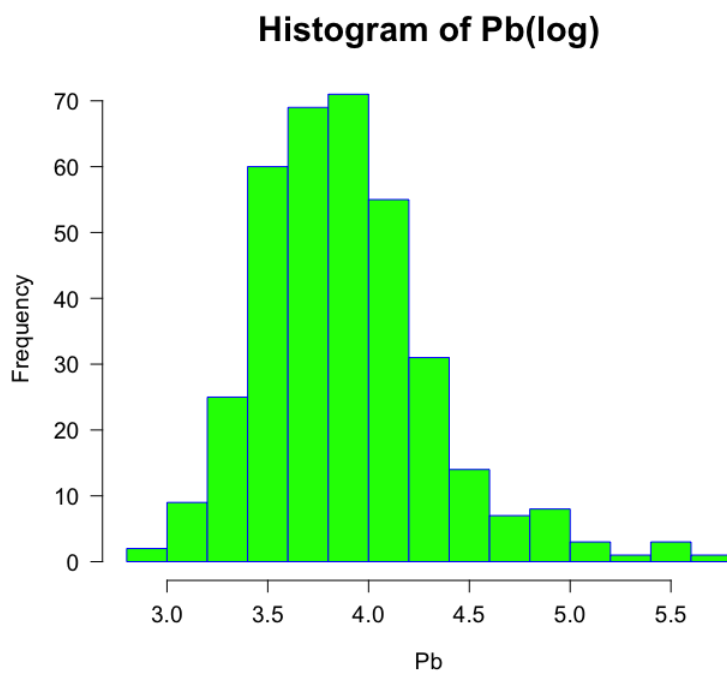


Σχήμα Α'.7: Χάρτης με τα σφάλματα των εκτιμήσεων του Kriging για το σύνολο των δεδομένων του Νικελίου.

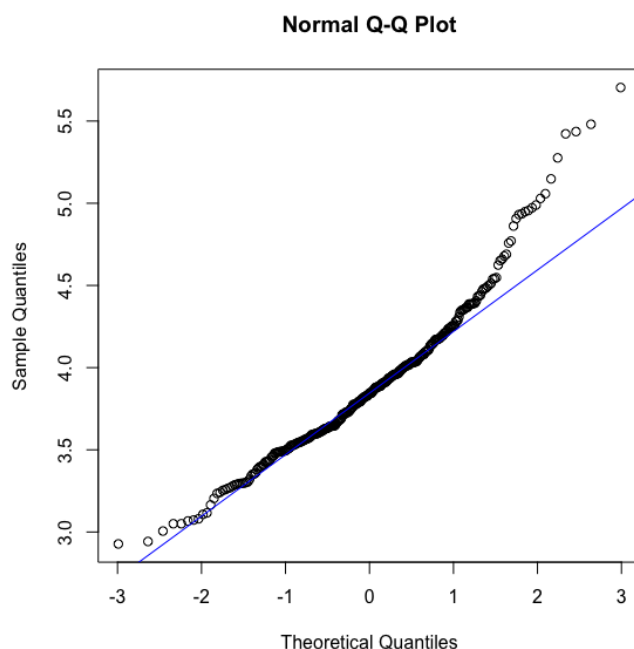
Παράρτημα Β΄

Διαγράμματα Μολύβδου (Pb), Χαλκού (Cu), Κοβαλτίου (Co), Καδμίου (Cd)

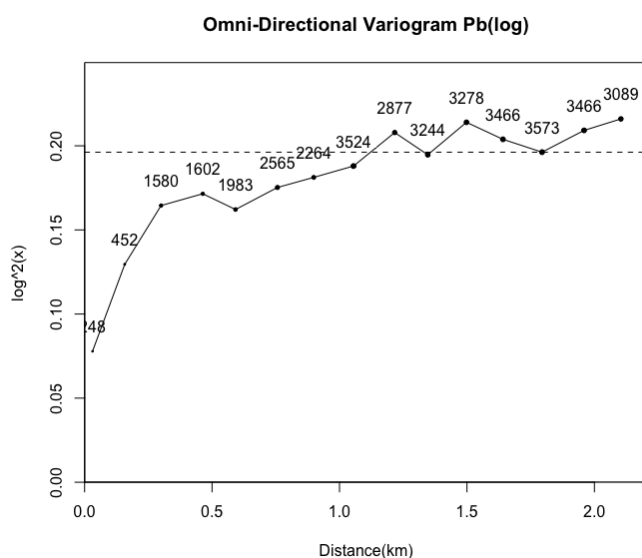
Στο παράρτημα αυτό παρατίθενται τα διαγράμματα που προέκυψαν με την διαδικασία μετασχηματισμού με λογάριθμο, για το σύνολο της επεξεργασίας των δεδομένων του Μολύβδου (Pb), Χαλκού (Cu), Κοβαλτίου (Co) και Καδμίου (Cd).



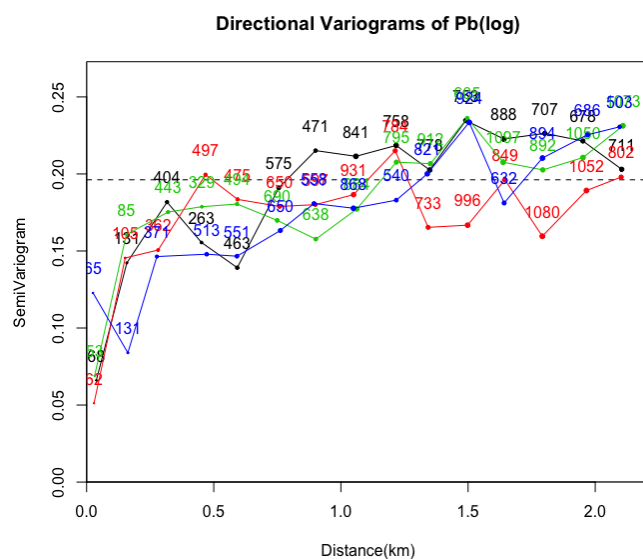
Σχήμα Β'.1: Ιστόγραμμα των δεδομένων του Μολύβδου, μετά την εφαρμογή μετασχηματισμού με λογάριθμο.



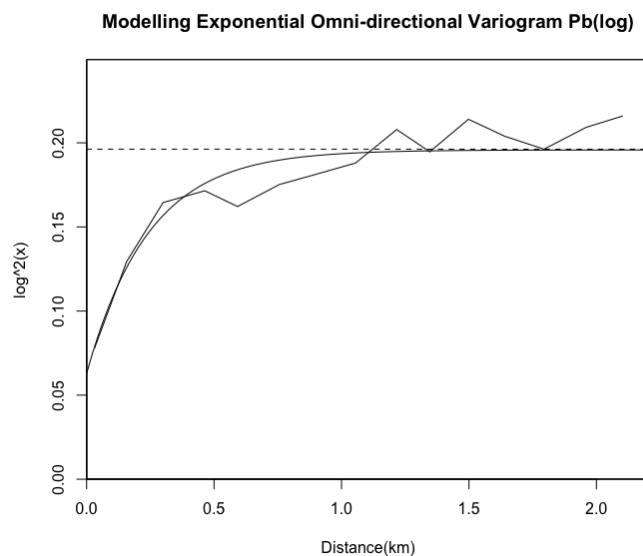
Σχήμα Β'.2: Διάγραμμα κανονικής πιθανότητας της συγκέντρωσης για τον Μόλυβδο, με σκοπό να εξετασθεί αν τα δεδομένα ακολουθούν την κανονική κατανομή. Οι κύκλοι που απεικονίζονται στον άξονα Υ αντιστοιχούν στις τιμές των δεδομένων, ενώ στον άξονα Χ απεικονίζονται οι θεωρητικές τιμές της κατανομής. Η ευθεία γραμμή περιγράφει την κανονική κατανομή.



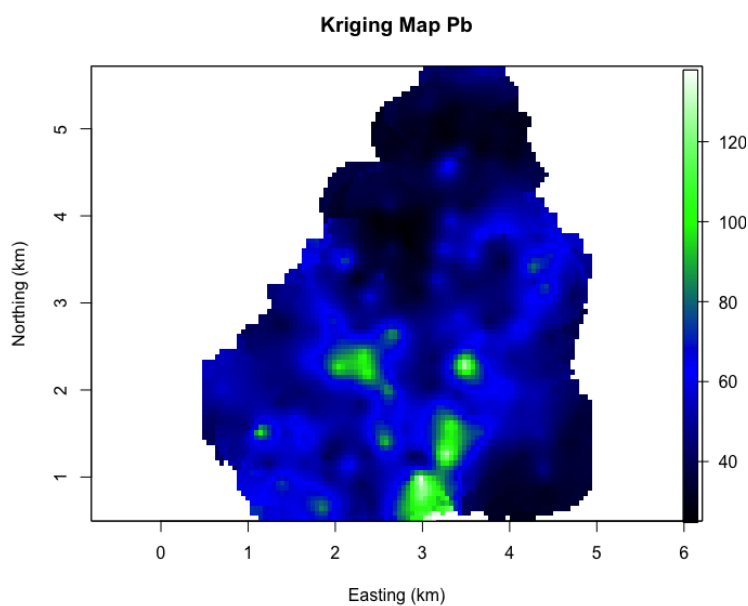
Σχήμα Β'.3: Εμπειρικό βαριόγραμμα για το σύνολο των δεδομένων του Μολύβδου.



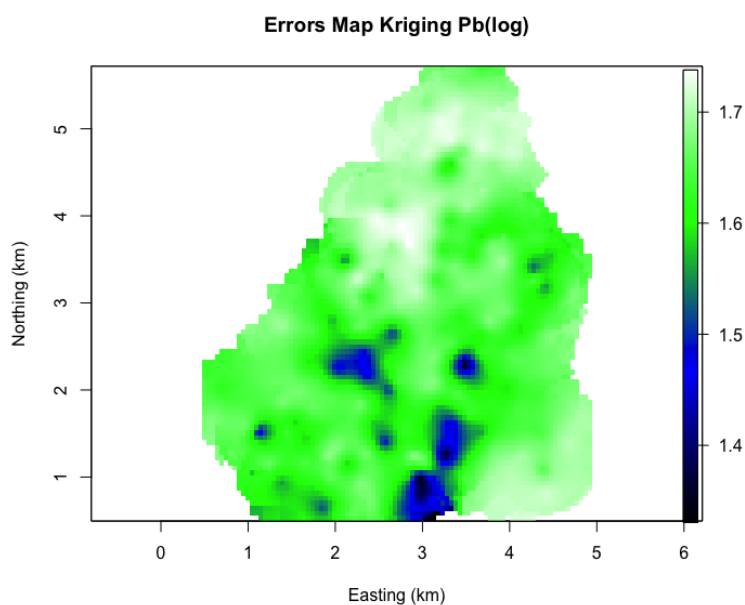
Σχήμα Β'.4: Διάγραμμα με τα κατευθυντικά βαριογράμματα που υπολογίστηκαν για τον έλεγχο της ανισοτροπίας, για το σύνολο των δεδομένων του Μολύβδου, στις κατευθύνσεις 0° , 45° , 90° και 135° .



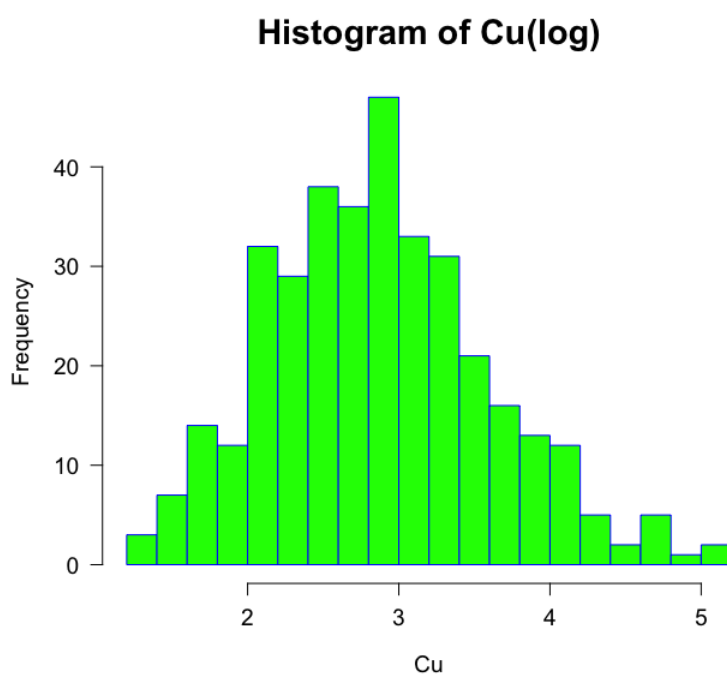
Σχήμα Β'.5: Απεικόνιση της δοκιμής του Εκθετικού θεωρητικού μοντέλου για το σύνολο δεδομένων του Μολύβδου, το οποίο επιλέχθηκε μετά από σύγκριση των τετραγωνικών σφαλμάτων που προέκυψαν μετά την προσαρμογή των θεωρητικών μοντέλων (Εκθετικό, Σφαιρικό, Γκαουσιανό).



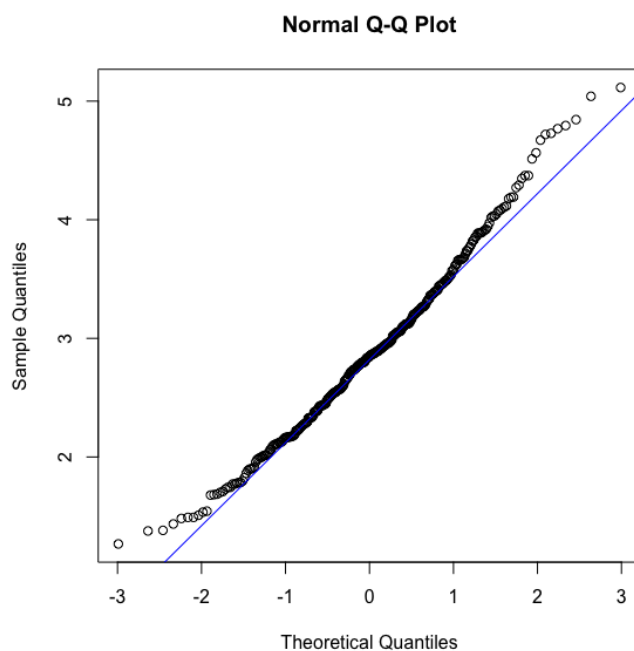
Σχήμα Β'.6: Χάρτης του Kriging με τις εκτιμήσεις των συγκεντρώσεων για το σύνολο των δεδομένων του Μολύβδου.



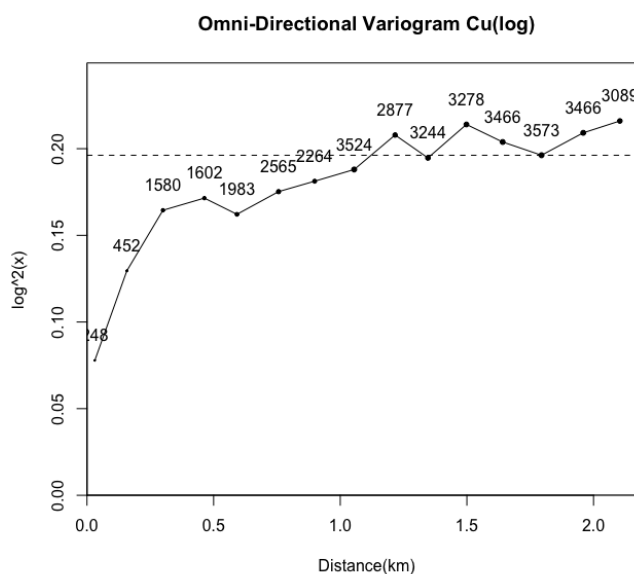
Σχήμα Β'.7: Χάρτης με τα σφάλματα των εκτιμήσεων του Kriging για το σύνολο των δεδομένων του Μολύβδου.



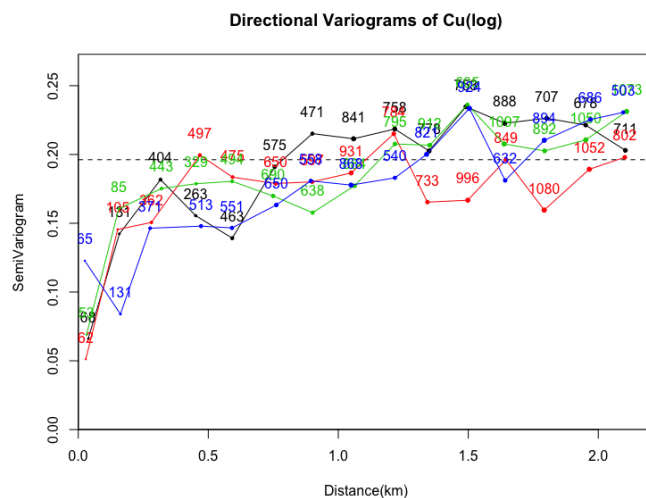
Σχήμα Β'.8: Ιστόγραμμα των δεδομένων του Χαλκού, μετά την εφαρμογή μετασχηματισμού με λογάριθμο.



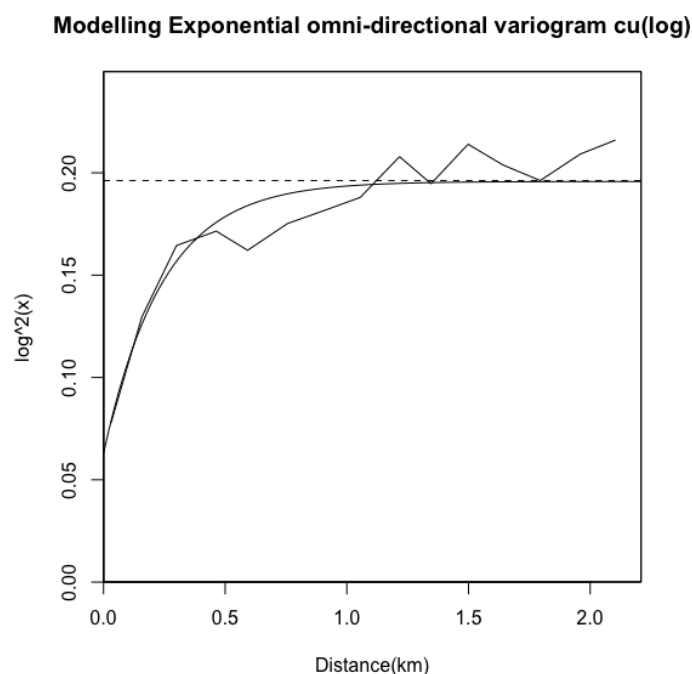
Σχήμα Β'9: Διάγραμμα κανονικής πιθανότητας της συγκέντρωσης για τον Χαλκό, με σκοπό να εξετασθεί αν τα δεδομένα ακολουθούν την κανονική κατανομή. Οι κύκλοι που απεικονίζονται στον άξονα Υ αντιστοιχούν στις τιμές των δεδομένων, ενώ στον άξονα Χ απεικονίζονται οι θεωρητικές τιμές της κατανομής. Η ευθεία γραμμή περιγράφει την κανονική κατανομή.



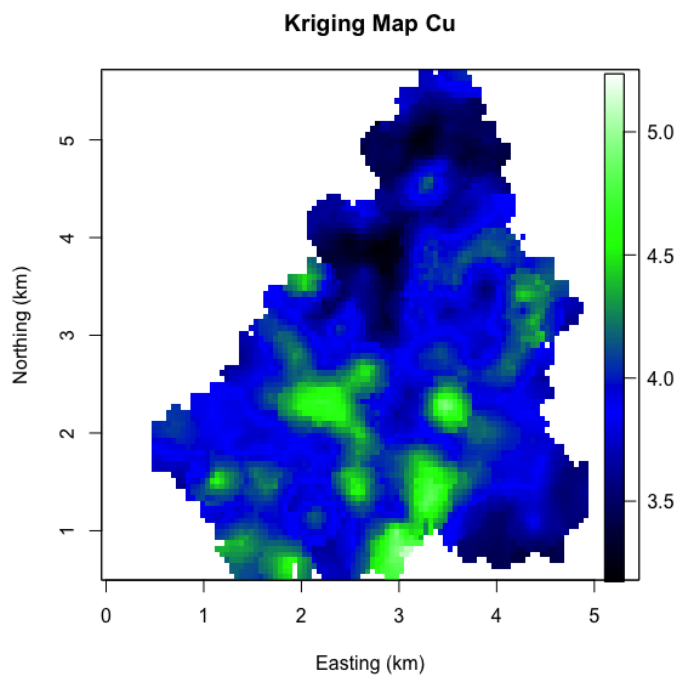
Σχήμα Β'10: Εμπειρικό βαριόγραμμα για το σύνολο των δεδομένων του Χαλκού.



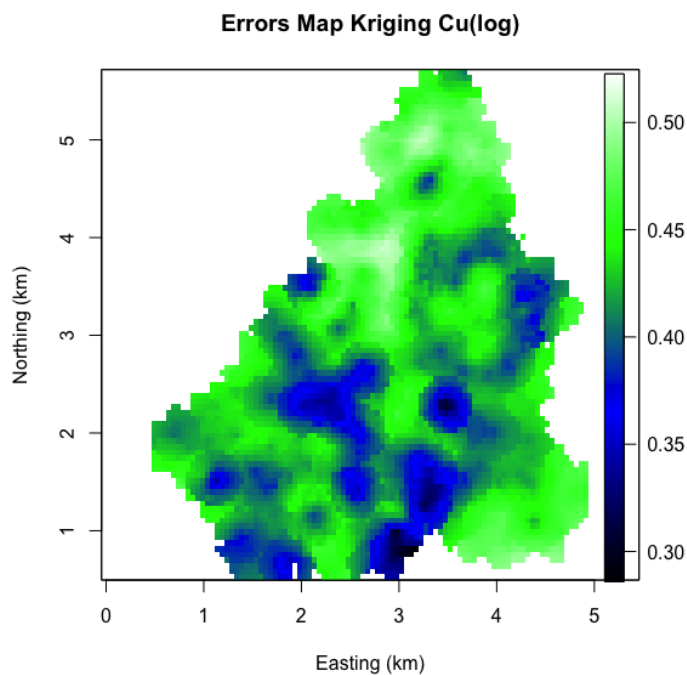
Σχήμα Β'.11: Διάγραμμα με τα κατευθυντικά βαριογράμματα που υπολογίστηκαν για τον έλεγχο της ανισοτροπίας, για το σύνολο των δεδομένων του Χαλκού, στις κατευθύνσεις 0°, 45°, 90° και 135°.



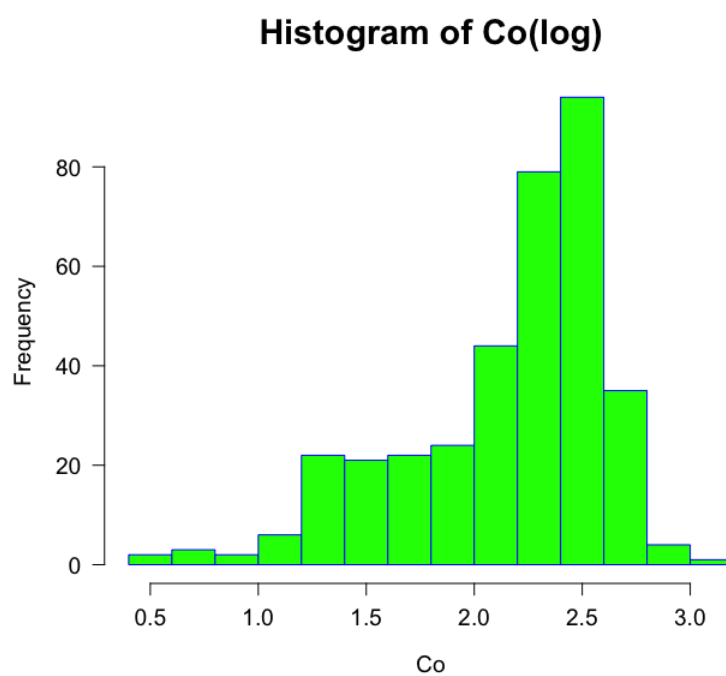
Σχήμα Β'.12: Απεικόνιση της δοκιμής του Εκθετικού θεωρητικού μοντέλου για το σύνολο δεδομένων του Χαλκού, το οποίο επιλέχθηκε μετά από σύγκριση των τετραγωνικών σφαλμάτων που προέκυψαν μετά την προσαρμογή των θεωρητικών μοντέλων (Εκθετικό, Σφαιρικό, Γκαουσιανό).



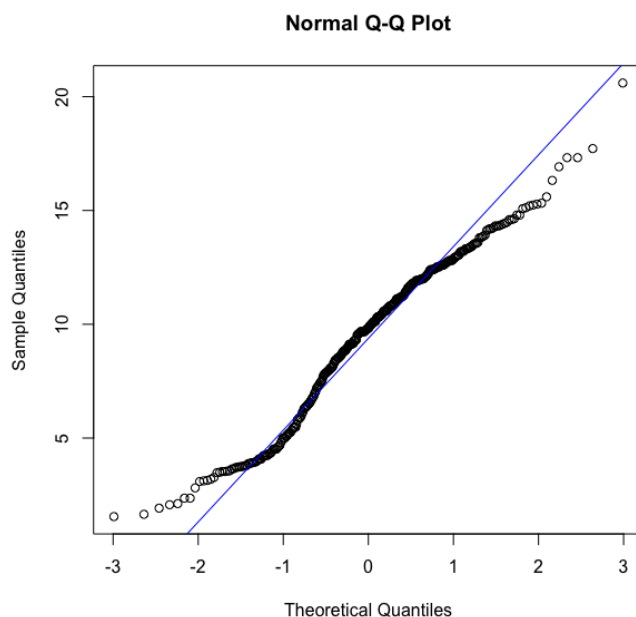
Σχήμα Β'.13: Χάρτης του Kriging με τις εκτιμήσεις των συγκεντρώσεων για το σύνολο των δεδομένων του Χαλκού.



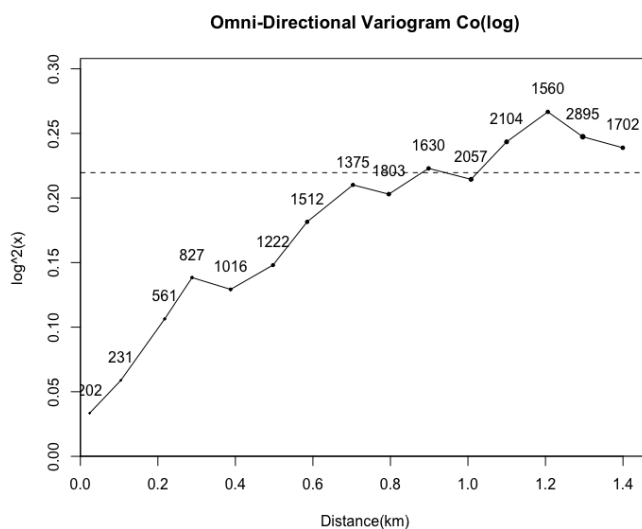
Σχήμα Β'.14: Χάρτης με τα σφάλματα των εκτιμήσεων του Kriging για το σύνολο των δεδομένων του Χαλκού.



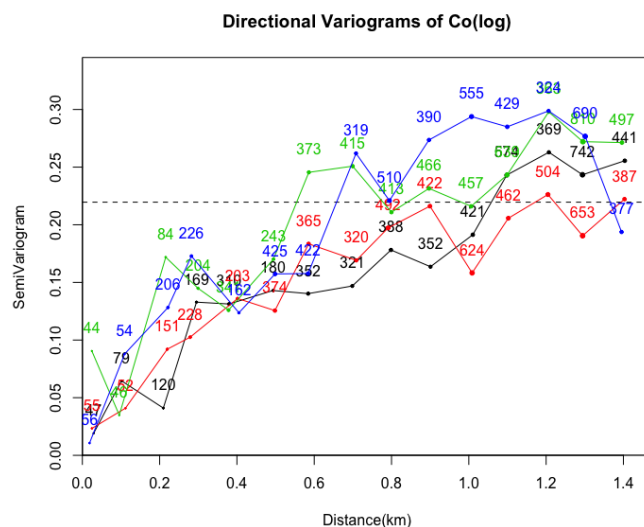
Σχήμα Β'.15: Ιστόγραμμα των δεδομένων του Κοβαλτίου, μετά την εφαρμογή μετασχηματισμού με λογάριθμο.



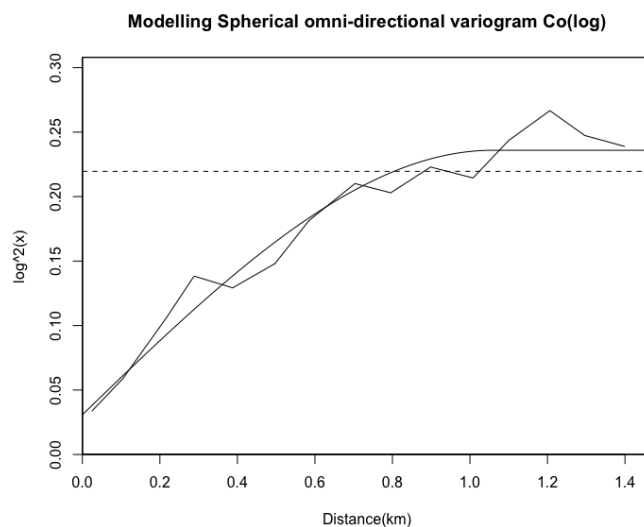
Σχήμα Β'.16: Διάγραμμα κανονικής πιθανότητας της συγκέντρωσης για το Κοβάλτιο, με σκοπό να εξετασθεί αν τα δεδομένα ακολουθούν την κανονική κατανομή. Οι κύκλοι που απεικονίζονται στον άξονα Υ αντιστοιχούν στις τιμές των δεδομένων, ενώ στον άξονα Χ απεικονίζονται οι θεωρητικές τιμές της κατανομής. Η ευθεία γραμμή περιγράφει την κανονική κατανομή.



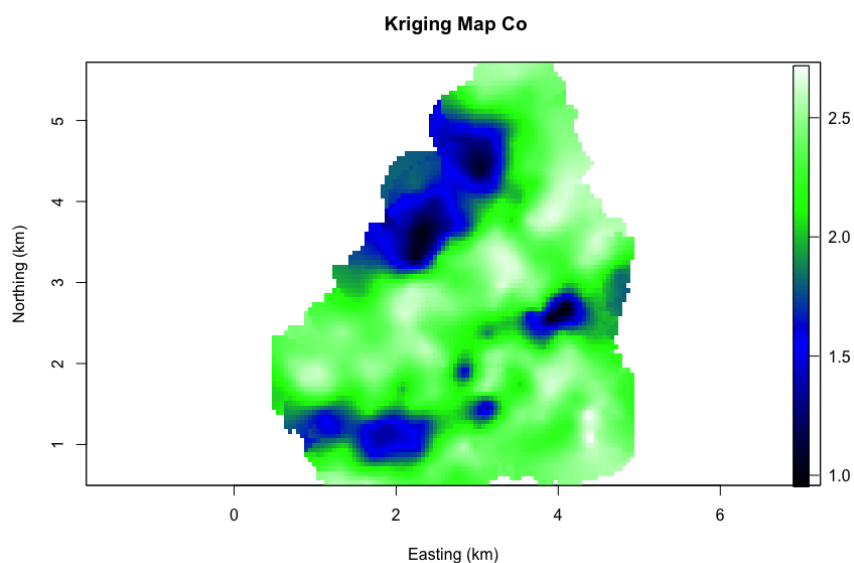
Σχήμα Β'.17: Εμπειρικό βαριόγραμμα για το σύνολο των δεδομένων του Κοβαλτίου.



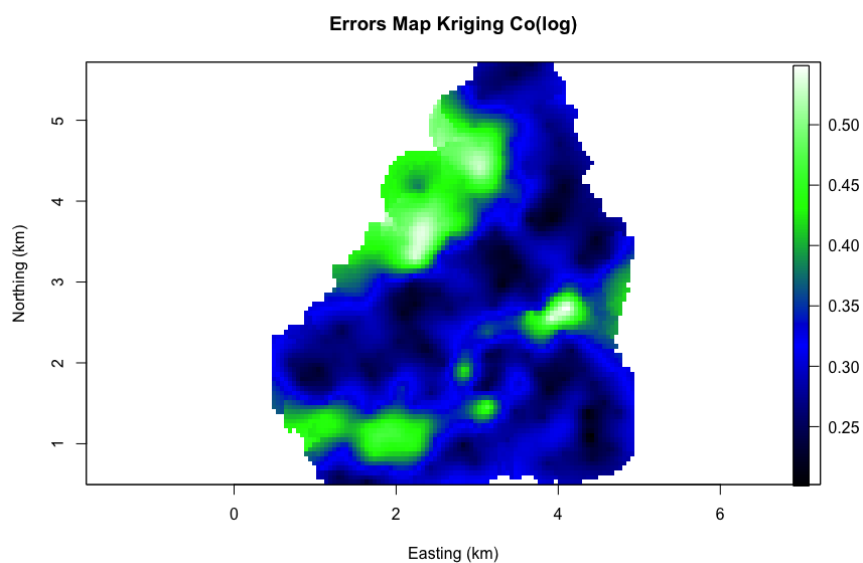
Σχήμα Β'.18: Διάγραμμα με τα κατευθυντικά βαριογράμματα που υπολογίστηκαν για τον έλεγχο της ανισοτροπίας, για το σύνολο των δεδομένων του Κοβαλτίου, στις κατευθύνσεις 0° , 45° , 90° και 135° .



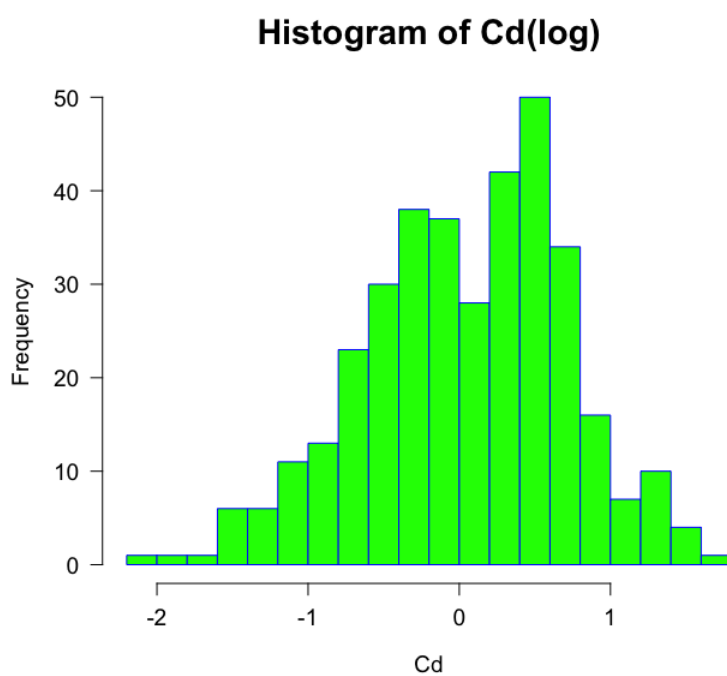
Σχήμα Β'.19: Απεικόνιση της δοκιμής του Σφαιρικού θεωρητικού μοντέλου για το σύνολο δεδομένων του Κοβαλτίου, το οποίο επιλέχθηκε μετά από σύγκριση των τετραγωνικών σφαλμάτων που προέκυψαν μετά την προσαρμογή των θεωρητικών μοντέλων (Εκθετικό, Σφαιρικό, Γκαουσιανό).



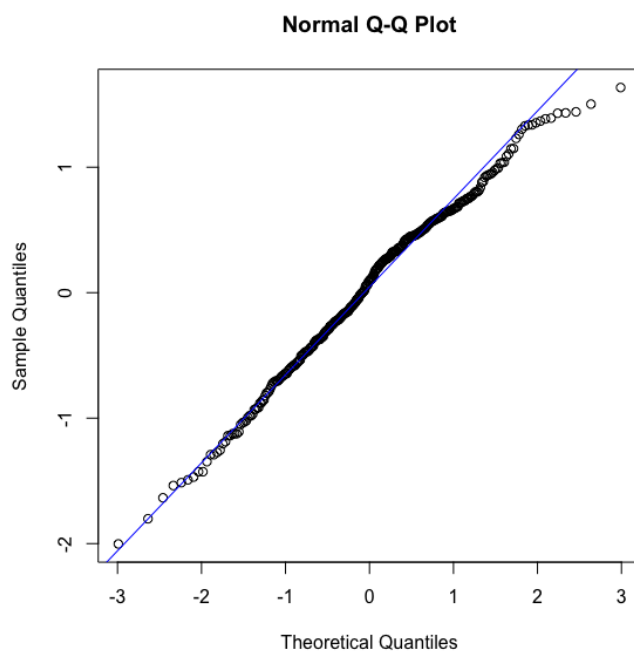
Σχήμα Β'.20: Χάρτης του Kriging με τις εκτιμήσεις των συγκεντρώσεων για το σύνολο των δεδομένων του Κοβαλτίου.



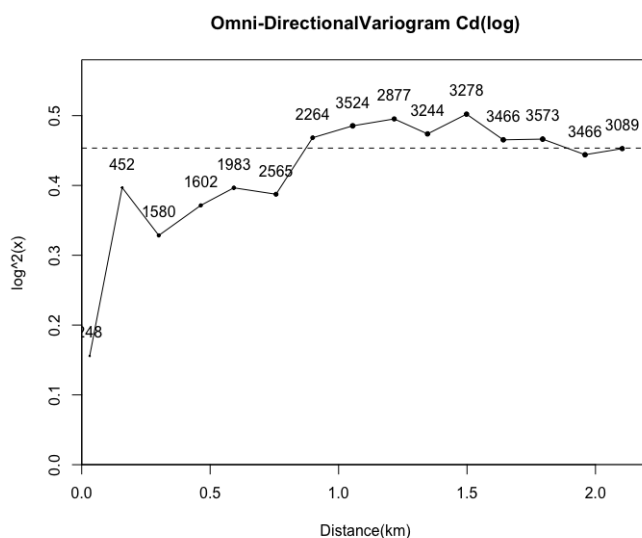
Σχήμα Β'.21: Χάρτης με τα σφάλματα των εκτιμήσεων του Kriging για το σύνολο των δεδομένων του Κοβαλτίου.



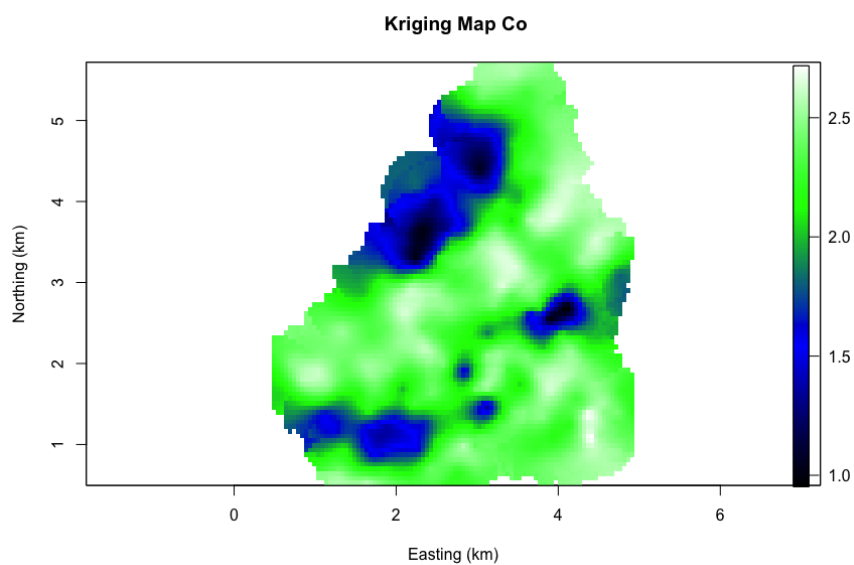
Σχήμα Β'.22: Ιστόγραμμα των δεδομένων του Καδμίου, μετά την εφαρμογή μετασχηματισμού με λογάριθμο.



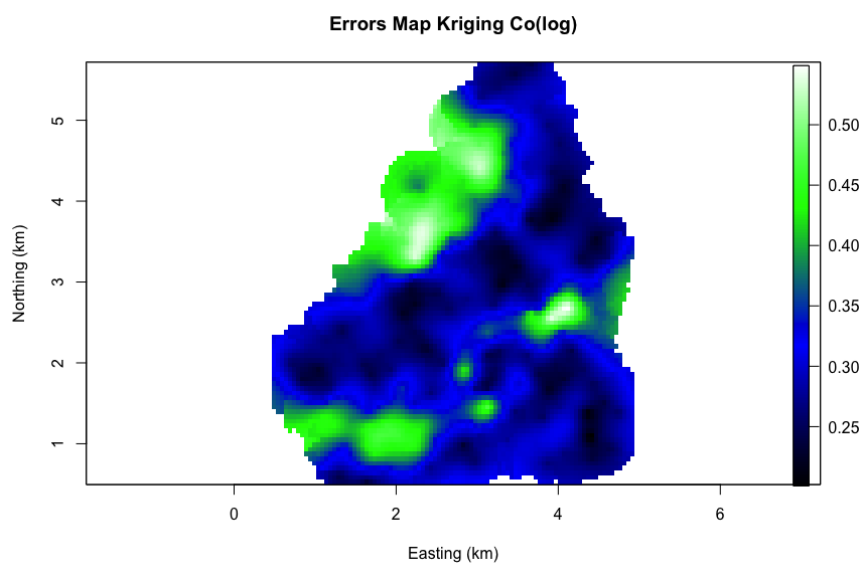
Σχήμα Β'.23: Διάγραμμα κανονικής πιθανότητας της συγκέντρωσης για το Κάδμιο, με σκοπό να εξετασθεί αν τα δεδομένα ακολουθούν την κανονική κατανομή. Οι κύκλοι που απεικονίζονται στον άξονα Υ αντιστοιχούν στις τιμές των δεδομένων, ενώ στον άξονα Χ απεικονίζονται οι θεωρητικές τιμές της κατανομής. Η ευθεία γραμμή περιγράφει την κανονική κατανομή.



Σχήμα Β'.24: Εμπειρικό βαριόγραμμα για το σύνολο των δεδομένων του Καδμίου.



Σχήμα Β'.27: Χάρτης του Kriging με τις εκτιμήσεις των συγκεντρώσεων για το σύνολο των δεδομένων του Καδμίου.



Σχήμα Β'.28: Χάρτης με τα σφάλματα των εκτιμήσεων του Kriging για το σύνολο των δεδομένων του Καδμίου.

Παράρτημα Γ΄

Κώδικας R

Στο Παράρτημα αυτό παρουσιάζεται ο κώδικας που κατασκευάστηκε στην γλώσσα προγραμματισμού R, για την επεξεργασία του συνόλου δεδομένων του Χρωμίου (Cr).

```
1 rm(list=ls(all.names=TRUE))
2 graphics.off()
3
4 #####____THEESIS PROJECT CODE
   IN R____
   #####
5
6
7 library(sp)
8 library(gstat)
9 library(Rcpp)
10 library(RGeostats)
11 library(car)
12 library(ggplot2)
13 library(FitAR)
14 library(FNN)
15 library(geoR)
16 library(gttrendsR)
```

```
17 library(grid)
18 library(crop)
19 library(maps)
20 library(splines2)
21 library(gdata)
22 library(e1071)
23 library(lattice)
24 library(automap)
25 library(tcltk2)
26 library(spam)
27 library(dplR)
28 library(detrender)
29 library(fields)
30 library(foreign)
31 library(openxlsx)
32 library(MASS)
33
34 setwd("/Users/AsteriosPagonis/Desktop/Thesis Project/Jura")
35 jurasetvalues= read.table("jurasetvalues.txt",header = TRUE)
36
37 #####STATS
38
39 mean(jurasetvalues[,7])
40 median(jurasetvalues[,7])
41 min(jurasetvalues[,7])
42 max(jurasetvalues[,7])
43 sd(jurasetvalues[,7])
44 skewness(jurasetvalues[,7])
45 kurtosis(jurasetvalues[,7])
46
47
48
49 #####HISTOGRAMS#####
50 #####Histogram of Cu
```

```
51
52 hist(jurasetvalues[,4],
53       main="Histogram of Cu",
54       xlab="Cu",
55       border="blue",
56       col="green",
57       las=1,
58       breaks=15,cex.lab=1.2, cex.axis=1.2, cex.main=1.8)
59
60 hist(log(jurasetvalues[,4]),
61       main="Histogram of Cu(log)",
62       xlab="Cu",
63       border="blue",
64       col="green",
65       las=1,
66       breaks=15,cex.lab=1.2, cex.axis=1.2, cex.main=1.8)
67
68 #####Histogram of Cd
69
70 hist(jurasetvalues[,3],
71       main="Histogram of Cd",
72       xlab="Cd",
73       border="blue",
74       col="green",
75       las=1,
76       breaks=15,cex.lab=1.2, cex.axis=1.2, cex.main=1.8)
77
78 hist(log(jurasetvalues[,3]),
79       main="Histogram of Cd(log)",
80       xlab="Cd",
81       border="blue",
82       col="green",
83       las=1,
84       breaks=15,cex.lab=1.2, cex.axis=1.2, cex.main=1.8)
85
```



```
86 #####Histogram of Pb
87
88 hist(jurasetvalues[,5],
89     main="Histogram of Pb",
90     xlab="Pb",
91     border="blue",
92     col="green",
93     las=1,
94     breaks=17,cex.lab=1.2, cex.axis=1.2, cex.main=1.8)
95
96 hist(log(jurasetvalues[,5]),
97     main="Histogram of Pb(log) ",
98     xlab="Pb",
99     border="blue",
100    col="green",
101    las=1,
102    breaks=17,cex.lab=1.2, cex.axis=1.2, cex.main=1.8)
103
104 #####Histogram of Co
105
106 hist(log(jurasetvalues[,6]),
107     main="Histogram of Co(log) ",
108     xlab="Co",
109     border="blue",
110     col="green",
111     las=1,
112     breaks=15,cex.lab=1.2, cex.axis=1.2, cex.main=1.8)
113
114 #####Histogram of Cr
115
116 hist(jurasetvalues[,7],
117     main="Histogram of Cr",
118     xlab="Cr",
119     border="blue",
120     col="green",
```

```
121     las=1,
122     breaks=17,cex.lab=1.2, cex.axis=1.2, cex.main=1.8)
123
124 #####Histogram of Ni
125
126 hist(jurasetvalues[,8],
127     main="Histogram of Ni",
128     xlab="Ni",
129     border="blue",
130     col="green",
131     las=1,
132     breaks=17,cex.lab=1.2, cex.axis=1.2, cex.main=1.8)
133
134 #####Histogram of Zn
135
136 hist(jurasetvalues[,9],
137     main="Histogram of Zn",
138     xlab="Zn",
139     border="blue",
140     col="green",
141     las=1,
142     breaks=17,cex.lab=1.2, cex.axis=1.2, cex.main=1.8)
143
144 hist(log(jurasetvalues[,9]),
145     main="Histogram of Zn(log)",
146     xlab="Zn",
147     border="blue",
148     col="green",
149     las=1,
150     breaks=17,cex.lab=1.2, cex.axis=1.2, cex.main=1.8)
151
152 #####CODE FOR VARIOGRAMS#####
153     -#####
154
155 setwd("/Users/AsteriosPagonis/Desktop/Thesis Project/Jura")
```

```

155 df = read.table("jurasetvalues.txt",header = TRUE)
156 datadb=db.create(df,flag.grid = FALSE,ndim=2,autoname=FALSE)
157
158 datadb=db.locate(datadb,"Cr","z",1)
159 datavariogram=vario.calc(datadb,lag=0.15,nlag=12)
160 plot(datavariogram,npairdw=TRUE,npairpt=1,title="Omni-Directional
    Variogram Cr",ylab="ppm^2",xlab="Distance(km)")
161
162 data8dvariogram=vario.calc(datadb,lag=0.15,nlag=12,dir=c
    (0,45,90,135))
163 plot(data8dvariogram,npairdw=TRUE,npairpt=1,title="Directional
    Variograms of Cr",ylab="SemiVariogram",xlab="Distance(km)")
164 legend(1.5,40,c(expression(0*degree),expression(45*degree),
    expression(90*degree),expression(135*degree)))
165
166 #data8dvariogram0=vario.calc(datadb,lag=0.15,nlag=12,dir=0)
167 #plot(data8dvariogram0,npairdw=TRUE,npairpt=1,title="Directional
    Variogram 0 Degrees",ylab="SemiVariogram",xlab="Distance(km)")
168 #legend(1.5,40,c(expression(0*degree))
169 #data8dvariogram45=vario.calc(datadb,lag=0.15,nlag=12, dir=(45))
170 #plot(data8dvariogram45, npairdw=TRUE,npairpt=1,title="
    Directional Variogram 45 Degrees",ylab="SemiVariogram",xlab="
    Distance(km)")
171 #legend(1.5,40,c(expression(45*degree)))
172 #data8dvariogram90=vario.calc(datadb,lag=0.15,nlag=12, dir=(90))
173 #plot(data8dvariogram90,title="Directional Variogram 90 Degrees")
174 #data8dvariogram135=vario.calc(datadb,lag=0.15,nlag=12,dir=(135))
175 #plot(data8dvariogram135,title="Directional Variogram 135 Degrees
    ")
176
177 data8dvariogramfitting=model.auto(data8dvariogram,struct =c("
    Exponential","Nugget Effect"),title="Modelling Exponential
    omni-directional variogram")
178 #data8dvariogramfitting0=model.auto(data8dvariogram0,struct =c("
    Exponential","Nugget Effect"),title="Modelling Exponential

```

```

    omni-directional variogram")
179 #data8dvariogramfitting45=model.auto(data8dvariogram45,struct =c
    ("Exponential","Nugget Effect"),title="Modelling Exponential
    omni-directional variogram")
180 #data8dvariogramfitting90=model.auto(data8dvariogram90,struct =c
    ("Exponential","Nugget Effect"),title="Modelling Exponential
    omni-directional variogram")
181 #data8dvariogramfitting135=model.auto(data8dvariogram135,struct =
    c("Exponential","Nugget Effect"),title="Modelling Exponential
    omni-directional variogram")
182
183
184
185
186
187
188     i=7                # X=1 Y=2 Cd=3 Cu=4 Pb=5 Co=6 Cr=7 Ni=8 Zn=9
189 sd(df[,i])
190 print(sd)
191
192 #####CODE FOR TRENDS#####
193
194
195 X=df[,1]
196 Y=df[,2]
197 Cr=df[,7]
198 #f=lm(Cr~X+Y)
199 #print(f)
200 #trendCr=37.0670-0.8371*X+0.1638*Y
201 #print(trendCr)
202
203 ##### Validation Measures#####
204 #ME      Mean Error
205 #MAE     Mean Absolut Error

```

```

206 #RMSE  Route Mean Square Error
207 #R      Correlation Coefficient
208 #R=cor(trendCr,Cr)
209 #errorCr=Cr-trendCr
210 #ME=mean(errorCr)
211 #MAE=mean(abs(errorCr))
212 #MaxAE=max(abs(errorCr))
213 #RMSE=sqrt(mean(errorCr^2))
214 #print(R)
215 #print(ME)
216 #print(MAE)
217 #print(MaxAE)
218 #print(RMSE)
219
220 #####_DETRENDING_#####
221 #####
222 #fluctuationCr=Cr-trendCr
223
224 #Histograms for detrended Cr
225 hist(fluctuationCr,
226      main="Histogram fluaction of Cr",
227      xlab="Cr' ",
228      border="blue",
229      col="green",
230      las=1,
231      breaks=17)
232
233 #####  Modelfit  #####
234
235 datamodelfit1=model.auto(datavariogram,struct =c("Spherical", "
      Nugget Effect"),title="Modelling Spherical Omni-directional
      Variogram Cr",xlab="Distance(km)",ylab="ppm^2")
236 datamodelfit2=model.auto(datavariogram,struct =c("Exponential", "
      Nugget Effect"),title="Modelling Exponential Omni-directional

```

```

    Variogram Cr",xlab="Distance(km)",ylab="ppm^2")
237 datamodelfit3=model.auto(datavariogram,struct =c("Gaussian","
    Nugget Effect"),title="Modelling Gaussian Omni-directional
    Variogram Cr",xlab="Distance(km)",ylab="ppm^2")
238
239
240 #####ErrorsMODELFIT#####
    #####
241
242 sillsspherical=82.822
243 rangespherical=0.512
244 nuggetspherical=29.785
245 setwd("/Users/AsteriosPagonis/Desktop/Thesis Project/Spherical_
    Error__Tables")
246 distancevaluevariogramvolumns= read.table("distanceCr.txt",header
    = TRUE)
247 r=distancevaluevariogramvolumns[,1]
248 officialssphericalvaluestable=sillsspherical*((1.5*abs(r))/
    rangespherical-((0.5*abs(r))/rangespherical)^3)+
    nuggetspherical
249 print(officialssphericalvaluestable)
250
251 setwd("/Users/AsteriosPagonis/Desktop/Thesis Project/Spherical_
    Error__Tables")
252 distancevaluevariogramvolumns= read.table("
    DistanceValueVariogramColumnsCr.txt",header = TRUE)
253
254 #sphericalsquareerror=sum((sillsspherical*((1.5*abs(r))/
    rangespherical-((0.5*abs(r))/rangespherical)^3)-
    distancevaluevariogramvolumns[,2])^2)
255 #sphericalsquareerror=sum((sillsspherical*((1.5*abs(r))/
    rangespherical-((0.5*abs(r))/rangespherical)^3)+
    nuggetspherical-distancevaluevariogramvolumns[,2])^2)
256 sphericalsquareerror=(distancevaluevariogramvolumns[,3]-
    distancevaluevariogramvolumns[,2])^2

```

```

257 sum(sphericalsquareerror)
258
259
260 sillexp=91.658
261 theorangeexp=0.201
262 nuggetsillexp=22.973
263 #expsquareerror=sum((sillexp*(1-exp(-r/theorangeexp))+
      nuggetsillexp - distancevaluevariogramvolumns[,2]))^2)
264 kexp=(sillexp*(1-exp(-r/theorangeexp))+nuggetsillexp)
265 expsquareerror=sum((kexp-distancevaluevariogramvolumns[,2])^2)
266
267 sillgaussian=75.577
268 theorangegaussian=0.243
269 nuggetsillgaussian=36.938
270 #gaussiansquareerror=sum((sillgaussian*(exp(-r/theorangegaussian)
      )^2+nuggetsillgaussian - distancevaluevariogramvolumns[,2])^2)
271 kgau=(sillexp*(1-exp(-r^2/theorangeexp^2))+nuggetsillexp)
272 gaussiansquareerror=sum((kgau-distancevaluevariogramvolumns[,2])
      ^2)
273
274 print(sum(sphericalsquareerror))
275 print(expsquareerror)
276 print(gaussiansquareerror)
277
278
279
280 #####_____KRIGING
      _____#####
281
282 a=proc.time()
283 load("/Users/AsteriosPagonis/Desktop/Thesis Project/Kriging_
      Neighborhoods/Neigh_0.5.RData") # Neigh_0.283.RData Neigh_0
      .5.RData Neigh_0.750.RData Neigh_1.0.RData
284 #neighcreator <- neigh.input(ndim=2) ## new neighborhood
285 #save(neighcreator, file = "Neigh_0.420.RData")

```

```

286 nx=90
287 ny=100
288 grid.db <- db.grid.init(datadb,nodes=c(nx,ny))
289 grid.db <- kriging(datadb,grid.db,datamodelfit2,neighcreator)
290 plot(grid.db)
291 b=proc.time()
292 timepassed=(b-a)[3.]
293
294 plot(grid.db,xlab="Easting (km)",ylab="Northing (km)",title="
      Kriging Map Cr",axes=TRUE,asp=1,col=colorRampPalette(c("black"
      ,"blue","green","white"))(255))
295 box(col = 'black',)
296 #coll <- designer.colors( n=256, col= c("darkviolet", "
      deepskyblue4", "green", "yellow", "red"), x= seq(0,1, 0.25))
297 zr=range(grid.db[,4],na.rm=TRUE)
298 image.plot( legend.only=TRUE, zlim= zr,col=colorRampPalette(c("
      black","blue","green","white"))(255), legend.mar = 4,
      horizontal = FALSE)
299
300 #####_____ERRORS
      KRIGGING_____
301 gridbb=grid.db
302 gridbb[,4]=grid.db[,5]-grid.db[,4]
303 plot(gridbb,xlab="Easting (km)",title="Errors Map Kriging Cr(log)
      ",ylab="Northing (km)",axes=TRUE,asp=1,col=colorRampPalette(c(
      "black","blue","green","grey"))(255))
304 box(col = 'black')
305 zr=range(grid.db[,5],na.rm=TRUE)
306 image.plot( legend.only=TRUE, zlim= zr,col=colorRampPalette(c("
      black","blue","green","white"))(255), legend.mar = 4,
      horizontal = FALSE)
307
308
309 #####____Cross Validaton for Kriging____
      #####

```



```
310 Cr2=Cr
311 Cr2[90]=NA
312 Cr2=na.omit(Cr2)
313 #trendCr2=trendCr
314 #trendCr2[90]=NA
315 #trendCr2=na.omit(trendCr2)
316
317 datadb11 <- xvalid(datadb, datamodelfit2, neighcreator)
318 NAd11=sum(is.na(datadb11[,11])) # ALL THE NA VALUES
319 d112=datadb11[,11]^2
320 d11sum=sum(d112, na.rm=TRUE)
321 d11=na.omit(datadb11[,11])
322
323 #datadb11[,11]=d11
324 #Cr[90]=NA
325 #Cr=na.omit(Cr[90])
326 #Cr2=Cr
327
328 MEcrossdatadb11=mean(datadb11[,11], na.rm = TRUE)
329 MAEcrossdatadb11=mean(abs(datadb11[,11]), na.rm = TRUE)
330 MaxAECrossdatadb11=max(abs(datadb11[,11]), na.rm = TRUE)
331 RMSEcrossdatadb11=sqrt(mean(d11sum/358))
332 RKriging=cor((d11)+Cr2, Cr2)
333 print(MEcrossdatadb11)
334 print(MAEcrossdatadb11)
335 print(MaxAECrossdatadb11)
336 print(RMSEcrossdatadb11)
337 print(RKriging)
338
339
340 #MEcrossdatadb11=mean(datadb11[,11], na.rm = TRUE)
341 #MAEcrossdatadb11=mean(abs(datadb11[,11]), na.rm = TRUE)
342 #MaxAECrossdatadb11=max(abs(datadb11[,11]), na.rm = TRUE)
343 #RMSEcrossdatadb11=sqrt(mean(d11sum/359))
344 #RKriging=cor((d11+trendCr2), Cr2)
```

```
345 #print (MEcrossdatadb11,)  
346 #print (MAEcrossdatadb11,)  
347 #print (MaxAEcrossdatadb11,)  
348 #print (RMSEcrossdatadb11)  
349 #print (RKriging)
```

Βιβλιογραφία

- [1] Μεγαδούκα, Δήμητρα Γ.: *Προσδιορισμός και Στατιστική Επεξεργασία Βιοδιαθέσιμων Βαρέων Μετάλλων σε Επιβαρυμένα Εδάφη της Περιοχής Βάρης - Κορωπίου*. Μεταπτυχιακή Διπλωματική Εργασία, Γεωπονικό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 2011.
- [2] Χριστόπουλος, Δ. Θ.: *Εφαρμοσμένη Γεωστατιστική*. Πολυτεχνείο Κρήτης, 2012.
- [3] Γκάφα, Παναγιώτα: *Γεωστατιστική ανάλυση αποθεμάτων γαιάνθρακα βάσει δεδομένων από την κομητεία Κάμπελ των ΗΠΑ*. Διπλωματική Εργασία, Πολυτεχνείο Κρήτης, 2017.
- [4] Agou, V. D.: *Geostatistical analysis of precipitation on the island of Crete*. MSc thesis, Technical University of Crete, 2016.
- [5] Armstrong, M.: *Common problems seen in variograms*. Journal of the International Association for Mathematical Geology, 16(3):305, April 1984, ISSN 1573-8868. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01032694>.
- [6] Bochner, S., Tenenbaum, M., and Pollard, H.: *Lectures on Fourier Integrals*. Annals of mathematics studies. Princeton University Press, 1959, ISBN 9780691079943. <https://books.google.gr/books?id=-vU02QewWK8C>.
- [7] Chilès, J.P. and Delfiner, P.: *Geostatistics: Modeling Spatial Uncertainty*. Wiley Series in Probability and Statistics. Wiley, 2012, ISBN 9780470183151. <https://books.google.gr/books?id=sj4KBtRBQbQC>.

- [8] Christakos, G.: *Random Field Models in Earth Sciences*. Elsevier Science, 2013, ISBN 9781483288307. <https://books.google.gr/books?id=7EngBAAAQBAJ>.
- [9] Coles, S.: *An Introduction to Statistical Modeling of Extreme Values*. Lecture Notes in Control and Information Sciences. Springer, 2001, ISBN 9781852334598. <https://books.google.gr/books?id=2nugUEaKqFEC>.
- [10] Goovaerts, P.: *Geostatistics for Natural Resources Evaluation*. Applied geostatistics series. Oxford University Press, 1997, ISBN 9780195115383. <https://books.google.gr/books?id=CW-7tHAaVR0C>.
- [11] Greene, H. J.: *Evaluation of corrosion protection methods for Aluminum metal matrix composites*. PhD thesis, University of Southern California, Los Angeles, California, U.S.A., 1992.
- [12] Isaaks, E.H. and Srivastava, R.M.: *Applied Geostatistics*. Oxford University Press, 1989, ISBN 9780195050134. <https://books.google.gr/books?id=vC2dcXFLI3YC>.
- [13] Journel, A.G. and Huijbregts, C.J.: *Mining Geostatistics*. Blackburn Press, 2003, ISBN 9781930665910. <https://books.google.gr/books?id=Id1GAAAAYAAJ>.
- [14] Krige, Daniel G.: *A Statistical Approach to Some Basic Mine Valuation Problems on the Witwatersrand*. Journal of the Chemical, Metallurgical and Mining Society of South Africa, 52(6):119–139, December 1951. <http://dx.doi.org/10.2307/3006914>.
- [15] Olea, R.A.: *Geostatistics for Engineers and Earth Scientists*. Springer US, 1999, ISBN 9780792385233. <https://books.google.gr/books?id=bKoD2mM0RHUC>.
- [16] Olea, Ricardo A.: *A six-step practical approach to semivariogram modeling*. Stochastic Environmental Research and Risk Assessment, 20(5):307–318, 2006, ISSN 1436-3259. <http://dx.doi.org/10.1007/s00477-005-0026-1>.

- [17] Papoulis, A. and Pillai, S.U.: *Probability, random variables, and stochastic processes*. McGraw-Hill electrical and electronic engineering series. McGraw-Hill, 2002, ISBN 9780073660110. <https://books.google.gr/books?id=YYwQAQAIAAJ>.
- [18] Pavlides, A. G.: *Development of New Geostastical Methods for Spatial Analysis and Applications in Reserves Estimation and Quality Characteristics of Coal Deposits*. PhD thesis, Technical University of Crete, 2016.
- [19] Sommaruga, Anna: *From the central jura mountains to the molasse basin (france and switzerland)*. Swiss bulletin for applied geology, 16(3):63–75, February 2011, ISSN 1664-1884. <http://doi.org/10.5169/seals-327746>.
- [20] Taylor, J.R.: *Introduction To Error Analysis: The Study of Uncertainties in Physical Measurements*. A series of books in physics. University Science Books, 1997, ISBN 9780935702750. <https://books.google.gr/books?id=giFQcZub80oC>.