



ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΚΡΗΤΗΣ
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΟΡΥΚΤΩΝ ΠΟΡΩΝ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

**Ανάπτυξη νευρωνικών δικτύων με χαρακτηριστικά τοπικού
εκτιμητή για υπολογισμό αποθεμάτων και ποιότητας
κοιτασμάτων**

Αικατερίνη Χαϊντούτη

Εξεταστική Επιτροπή:

Μιχαήλ Γαλετάκης, Καθηγητής (Επιβλέπων)

Χριστόπουλος Διονύσιος, Καθηγητής

Δρ. Γεώργιος Κρητικάκης

Χανιά

Σεπτέμβριος, 2020

Copyright © Αικατερίνη Χαϊντούτη , 2020

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

Η εκπόνηση της διπλωματική εργασία πραγματοποιήθηκε στο τμήμα Μηχανικών Ορυκτών Πόρων του Πολυτεχνείου Κρήτης. Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται στην παρούσα διπλωματική εργασία δεν εκφράζουν κατ' ανάγκη τις απόψεις τις τριμελούς επιτροπής. Η έγκρισή της δεν υποδηλώνει και την αποδοχή των απόψεων του συγγραφέα.

Ευχαριστίες

Η παρούσα διπλωματική εργασία πραγματοποιήθηκε στη Σχολή Μηχανικών Ορυκτών Πόρων του Πολυτεχνείου Κρήτης, με επιβλέποντα καθηγητή τον κ. Γαλετάκη Μιχαήλ.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον επιβλέποντα καθηγητή της διπλωματικής μου κ. Γαλετάκη Μιχαήλ για την πολύτιμη βοήθεια του, την καθοδήγηση που μου προσέφερε και για τις γνώσεις που μου παρείχε τόσο κατά την εκπόνηση της εργασίας, όσο και κατά τη διάρκεια των σπουδών μου.

Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον καθηγητή κ. Χριστόπουλο Διονύσιο και τον Δρ. κ. Κρητικάκη Γεώργιο για την τιμή που μου έκαναν ως μέλη της εξεταστικής επιτροπής και για την βοήθεια τους.

Τους καθηγητές του τμήματος Μηχανικών Ορυκτών Πόρων για τις γνώσεις που μου προσέφεραν όλα τα έτη σπουδών μου.

Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένεια μου που με την αγάπη και κατανόησή τους μου πρόσφεραν την απαραίτητη στήριξη καθ' όλη την διάρκεια των σπουδών μου.

Περίληψη

Ο υπολογισμός της περιεκτικότητας και της εκτίμησης των αποθεμάτων ενός κοιτάσματος είναι μια εξαιρετικά σημαντική διαδικασία καθώς αποτελεί βασικό πυλώνα της μελέτης και του σχεδιασμού μιας εκμετάλλευσης. Οι πιο διαδεδομένες διαδικασίες υπολογισμού περιεκτικότητας που συναντώνται και έχουν εφαρμογή έως και σήμερα είναι η γεωστατιστική μέθοδος Kriging, οι μέθοδοι των αντιστρόφων αποστάσεων και οι γεωμετρικές μέθοδοι. Στην παρούσα εργασία μελετήθηκε η δυνατότητα υπολογισμού αποθεμάτων και ποιότητας κοιτασμάτων με τη βοήθεια τεχνητών νευρωνικών δικτύων (ΤΝΔ) με χαρακτηριστικά τοπικού εκτιμητή. Χρησιμοποιήθηκαν νευρωνικά δίκτυα ευθείας προώθησης με οπισθοδιάδοση του σφάλματος (feedforward with backpropagation). Η εκπαίδευση των αναπτυχθέντων νευρωνικών δικτύων πραγματοποιήθηκε με βάση τα στοιχεία των δειγματοληπτικών γεωτρήσεων που έχουν ληφθεί κατά το στάδιο της έρευνας του κοιτάσματος. Αναπτύχθηκαν δυο διαφορετικοί τύποι νευρωνικών δικτύων με χαρακτηριστικά τοπικού εκτιμητή τα ΤΝΔ_distance και ΤΝΔ_xyz. Το ΤΝΔ_distance χρησιμοποιεί ως δεδομένα εισόδου τις συντεταγμένες X,Y,Z του εξεταζόμενου δείγματος, τις αποστάσεις d_i και τις περιεκτικότητες g_i των n γειτονικών δειγμάτων, ενώ ως έξοδο την περιεκτικότητα g σε χρήσιμο συστατικό του εξεταζόμενου δείγματος. Το ΤΝΔ_xyz έχει ως εισόδους τις συντεταγμένες X,Y,Z του εξεταζόμενου δείγματος, τις συντεταγμένες X_i, Y_i, Z_i και τις περιεκτικότητες g_i των n γειτονικών δειγμάτων, ενώ και αυτό έχει ως έξοδο την περιεκτικότητα g του εξεταζόμενου δείγματος. Για την επιλογή των βέλτιστων παραμέτρων των νευρωνικών δικτύων (αριθμός των γειτονικών δειγμάτων που χρησιμοποιούνται και το μέγεθος του κρυφού επιπέδου) χρησιμοποιήθηκε ο παραγοντικός σχεδιασμός και η ανάλυση επιφανειών απόκρισης (factorial design and response surface). Ως κριτήρια απόδοσης ορίστηκαν ο συντελεστής συσχέτισης R των υπολογισμένων τιμών με τις πραγματικές και το μέσο τετραγωνικό σφάλμα MSE. Τα δείγματα που χρησιμοποιήθηκαν για την εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων, προέρχονται από κοίτασμα χαλκού που ερευνήθηκε με 40 γεωτρήσεις, από τις οποίες προέκυψαν 1864 αρχικά δείγματα πυρήνων που ενοποιήθηκαν σε 410 σύνθετα δείγματα. Εξετάστηκαν τρεις διαφορετικές περιπτώσεις εκτίμησης της ποιότητας g και εκτίμησης των αποθεμάτων με νευρωνικά δίκτυα. Στην πρώτη περίπτωση αναπτύχθηκε απλό νευρωνικό δίκτυο το οποίο εκπαιδεύτηκε με όλα τα σύνθετα δείγματα των γεωτρήσεων, χωρίς τη χρήση γειτονικών δειγμάτων (X,Y,Z

ως είσοδοι και g ως έξοδος). Στην δεύτερη περίπτωση χρησιμοποιήθηκαν τα νευρωνικά δίκτυα τοπικών εκτιμήσεων TNΔ_distance και TNΔ_xyz. Για αυτά τα TNΔ ο βέλτιστος αριθμός γειτονικών σημείων υπολογίστηκε σε 3 και ο βέλτιστος αριθμός νευρώνων του κρυφού επιπέδου σε 10. Στη τρίτη περίπτωση, έγινε τροποποίηση στα δεδομένα εκπαίδευσης του νευρωνικού δικτύου TNΔ_distance, δίνοντας μεγαλύτερη βαρύτητα κατά την εκπαίδευση στα δείγματα με αυξημένη περιεκτικότητα. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν συγκρίθηκαν χρησιμοποιώντας ως κριτήριο τον συντελεστή R (συσχέτιση υπολογισμένων και πραγματικών τιμών) και το μέσο τετραγωνικό σφάλμα της εκτίμησης (MSE). Οι τιμές του R και MSE έδειξαν ότι το TNΔ_distance και το TNΔ_xyz επιτυγχάνουν παραπλήσιας ακρίβειας προβλέψεις, που είναι ανώτερες εκείνων που επιτυγχάνει το απλό TNΔ που δεν χρησιμοποιεί γειτονικά δείγματα. Η εκπαίδευση του TNΔ_distance με το τροποποιημένο σύνολο δεδομένων πέτυχε καλύτερα αποτελέσματα, αφού μειώθηκε σημαντικά το σφάλμα εκτίμησης σε περιοχές με υψηλή περιεκτικότητα.

Περιεχόμενα

Ευχαριστίες	3
Περίληψη	4
Κατάλογος Σχημάτων.....	8
Κατάλογος Πινάκων.....	10
1 Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα (ΤΝΔ) και εφαρμογές τους στη μεταλλευτική εκτιμητική.....	11
1.1 Δομή νευρωνικών δικτύων	11
1.2 Μέθοδοι εκπαίδευσης νευρωνικών δικτύων	15
1.3 Εφαρμογές νευρωνικών δικτύων στη μεταλλευτική.....	19
2 Ανάπτυξη και εφαρμογή νευρωνικών δικτύων για τον υπολογισμό των αποθεμάτων και της ποιότητας.....	23
2.1 ΤΝΔ πρόσθιας τροφοδότησης με οπισθοδιάδοση του σφάλματος με χαρακτηριστικά καθολικού εκτιμητή για τον υπολογισμό ποιότητας και αποθεμάτων κοιτάσματος.....	23
2.2 ΤΝΔ με χαρακτηριστικά τοπικού εκτιμητή.....	24
2.2.1 Δομή αναπτυχθέντων ΤΝΔ.....	25
2.3 Επεξεργασία στοιχείων γεωτρήσεων και δημιουργία του συνόλου εκπαίδευσης του ΤΝΔ.....	29
2.4 Μεθοδολογία καθορισμού των βέλτιστων παραμέτρων δομής και εκπαίδευσης του ΤΝΔ.....	31
3 Υπολογισμός των αποθεμάτων και της ποιότητας κοιτασμάτων χαλκού με χρήση των ΤΝΔ	37
3.1 Περιγραφή του κοιτάσματος χαλκού	37
3.2 Πρωτογενή στοιχεία γεωτρήσεων και δημιουργία σύνθετων δειγμάτων	41
3.3 Στατιστική ανάλυση και υπολογισμός βαριογραμμμάτων για τα σύνθετα δείγματα	43
3.4 Ανάπτυξη και εκπαίδευση ΤΝΔ για τον υπολογισμό της περιεκτικότητας σε Cu	46
3.5 Εύρεση των βέλτιστων τιμών των παραμέτρων του ΤΝΔ	46
4 Υπολογισμός αποθεμάτων και ποιότητας και σύγκριση με εκείνα που προκύπτουν με τη μέθοδο Kriging	55
4.1 Απλό νευρωνικό δίκτυο.....	56
4.2 Νευρωνικό δίκτυο με χαρακτηριστικά τοπικού εκτιμητή.....	59
4.3 Νευρωνικό δίκτυο με χαρακτηριστικά τοπικού εκτιμητή που εκπαιδεύτηκε με τη χρήση τροποποιημένου συνόλου δεδομένων.	62
5 Συμπεράσματα και προτάσεις.....	65
Βιβλιογραφία	67
Διεθνής βιβλιογραφία	67

Ελληνική βιβλιογραφία.....	69
Παράρτημα Α: Κώδικας σε γλώσσα προγραμματισμού MATLAB, για την επεξεργασία των δεδομένων για τη δημιουργία των συνόλων εκπαίδευσης από τα στοιχεία των γεωτρήσεων	70
Παράρτημα Β:Κώδικας σε γλώσσα προγραμματισμού MATLAB, για τα αναπτυχθέντα νευρωνικά δίκτυα	72

Κατάλογος Σχημάτων

Σχήμα 1.1 : Μορφή της σιγμοειδούς συνάρτησης.	12
Σχήμα 1.2: Δομή και λειτουργία τεχνητού νευρώνα.	13
Σχήμα 1.3: Τεχνητό νευρωνικό δίκτυο πρόσθιας τροφοδότησης (feedforward).	14
Σχήμα 1.4: Τεχνητό νευρωνικό δίκτυο οπίσθιας τροφοδότησης (feedback).	15
Σχήμα 1.5: Σχεδιάγραμμα διαδικασίας εκμάθησης ΤΝΔ (Γαλετάκης, 2000)	17
Σχήμα 1.6: Διάγραμμα της εύρεσης ιδανικού σημείου εκπαίδευσης για αποφυγή της υπερεκπαίδευσης.	18
Σχήμα 2.1: Δομή νευρωνικού δικτύου με χαρακτηριστικά καθολικού εκτιμητή για την εκτίμηση της περιεκτικότητας % σε Cu ενός κοιτάσματος με βάση τις συντεταγμένες X,Y,Z των δειγμάτων των γεωτρήσεων. Η είσοδος πόλωσης (b) είναι μια επιπρόσθετη είσοδος με στόχο τη βελτίωση της ακρίβειας και της απόδοσης του νευρωνικού δικτύου.	24
Σχήμα 2.2: Δομή νευρωνικού δικτύου ΤΝΔ_distance με χαρακτηριστικά τοπικού εκτιμητή για την εκτίμηση της περιεκτικότητας κοιτάσματος. Χρησιμοποιεί ως εισόδους τις συντεταγμένες X, Y, Z του εξεταζόμενου δείγματος, τις αποστάσεις d_i και τις περιεκτικότητες g_i των n γειτονικών δειγμάτων και έχει ως έξοδο την περιεκτικότητα g (grade) σε χρήσιμο συστατικό.	26
Σχήμα 2.3: Δομή νευρωνικού δικτύου ΤΝΔ_xyz με χαρακτηριστικά τοπικού εκτιμητή για την εκτίμηση της περιεκτικότητας κοιτάσματος. Χρησιμοποιεί ως εισόδους τις συντεταγμένες X,Y,Z του εξεταζόμενου δείγματος, τις συντεταγμένες X_i, Y_i, Z_i και τις περιεκτικότητες g_i των n γειτονικών δειγμάτων ενώ ως έξοδος έχει την περιεκτικότητα g (grade) του δείγματος σε χρήσιμο συστατικό.	27
Σχήμα 2.4 Μεταβολή του αριθμού των συνάψεων των ΤΝΔ_distance και ΤΝΔ_xyz σε σχέση με τον αριθμό των γειτονικών δειγμάτων για ένα νευρωνικό δίκτυο με 10 νευρώνες στο κρυφό επίπεδο.	28
Σχήμα 2.5: Απεικόνιση των παραμέτρων σχεδιασμού και μεταβλητών απόκρισης με στόχο την δημιουργία νευρωνικού δικτύου για εκτίμηση αποθεμάτων ποιότητας.	34
Σχήμα 3.1: Τοπογραφικός χάρτης της ευρύτερης περιοχής εντός της οποίας βρίσκεται το κοιτάσμα Arizona_Cu (κόκκινο ορθογώνιο). Οι διαστάσεις κατά τους άξονες X και Y είναι σε ft. (Hustrulid and Kuchta,1998).	39
Σχήμα 3.2: Γεωλογικός χάρτης της ευρύτερης περιοχής του κοιτάσματος Arizona_Cu (διαστάσεις κατά τους άξονες X και Y σε ft) (Hustrulid and Kuchta, 2006).	40
Σχήμα 3.3: Χάρτης θέσεων γεωτρήσεων για την έρευνα του κοιτάσματος Arizona_Cu (οι διαστάσεις κατά άξονες X και Y είναι ft).	41
Σχήμα 3.4: Σχηματική τομή γεώτρησης που έχει διατρήσει μια μεταλλοφόρο ζώνη (Γαλετάκης, 2017).	42
Σχήμα 3.5: Αποτελέσματα στατιστικής ανάλυσης της περιεκτικότητας σε Cu% των σύνθετων δειγμάτων για το κοιτάσμα Arizona_Cu.	43
Σχήμα 3.6: Αποτελέσματα στατιστικής ανάλυσης έπειτα από την εφαρμογή του λογαριθμικού μετασχηματισμού της περιεκτικότητας σε Cu% των σύνθετων δειγμάτων.	44
Σχήμα 3.7: Συνολικό βαριόγραμμα των λογαριθμισμένων τιμών των περιεκτικότητων Cu των σύνθετων δειγμάτων για το κοιτάσμα Arizona_Cu (οι αποστάσεις είναι σε ft).	45
Σχήμα 3.8: Διαγράμματα συσχέτισης των τιμών των περιεκτικότητων (Cu%) για την περίπτωση Νο7 για τα δείγματα εκπαίδευσης (training), του ελέγχου της εκπαίδευσης (validation) , του ελέγχου της γενίκευσης (testing) και του συνόλου των δειγμάτων (all).	48
Σχήμα 3.9: Κατανομή του σφάλματος εκτίμησης της περιεκτικότητας σε Cu% από το νευρωνικό δίκτυο της περίπτωσης Νο7. (Σφάλμα εκτίμησης = Πραγματική τιμή - Εκτιμηθείσα τιμή).	48

Σχήμα 3.10. Επάνω: Επίδραση (effect) των παραμέτρων σχεδιασμού στο συντελεστή συσχέτισης $R(\text{test})$. Κάτω: Μεταβολή του $R(\text{test})$ όταν οι παράμετροι σχεδιασμού μεταβάλλεται από το χαμηλό στο υψηλό επίπεδο.	51
Σχήμα 4.1: Δομή νευρωνικού δικτύου.	56
Σχήμα 4.2: Συσχέτιση των τιμών των περιεκτικοτήτων (Cu%) στο απλό νευρωνικό δίκτυο για τα δείγματα εκπαίδευσης (training), του ελέγχου της εκπαίδευσης (validation) , του ελέγχου της γενίκευσης (testing) του για το σύνολο των δειγμάτων (all).	57
Σχήμα 4.3: Διάγραμμα συσχέτισης περιεκτικότητας Cu% που εκτιμήθηκαν με την εφαρμογή του απλού TNA δικτύου με εκείνων της μεθόδου Kriging.	58
Σχήμα 4.4: Καμπύλη αποθεμάτων ποιότητας με βάση τα νευρωνικά δίκτυα και τη μέθοδο Kriging.	58
Σχήμα 4.5: Συσχέτιση των τιμών των περιεκτικοτήτων (Cu%) του TNA_distance για τα δείγματα εκπαίδευσης (training), του ελέγχου της εκπαίδευσης (validation), του ελέγχου της γενίκευσης (testing) του για το σύνολο των δειγμάτων (all).	60
Σχήμα 4.6: Διάγραμμα μεταβολής του σφάλματος (MSE) συναρτήσει των κύκλων εκπαίδευσης (epoch) για τον καθορισμό του σημείου διακοπής της εκπαίδευσης (early stopping).	61
Σχήμα 4.7: Διάγραμμα συσχέτιση περιεκτικότητας Cu% που εκτιμήθηκαν με την εφαρμογή του TNA_distance με εκείνων της μεθόδου Kriging.	61
Σχήμα 4.8: Συσχέτιση των τιμών των περιεκτικοτήτων (Cu%) για τα δείγματα εκπαίδευσης (training), του ελέγχου της εκπαίδευσης (validation), του ελέγχου της γενίκευσης (testing) του για το σύνολο των δειγμάτων (all).	63
Σχήμα 4.9: Διάγραμμα μεταβολής του σφάλματος (MSE) συναρτήσει των κύκλων εκπαίδευσης (epoch) για τον καθορισμό του σημείου διακοπής της εκπαίδευσης (early stopping)	63
Σχήμα 4.10: Καμπύλη αποθεμάτων-ποιότητας με βάση τα νευρωνικά δίκτυα και τη μέθοδο Kriging.	64

Κατάλογος Πινάκων

Πίνακας 2.1: Μεταβολή του αριθμού των νευρώνων και των συνάψεων για τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα TND_distance και TND_xyz. Ο αριθμός των νευρώνων του εσωτερικού επιπέδου και στα δύο δίκτυα είναι 10.	28
Πίνακας 2.2: Τυπικό απόσπασμα αρχικής μορφής στοιχείων γεωτρήσεων (σύνθετα δείγματα σταθερού μήκους) ενός κοιτάσματος χαλκού.	30
Πίνακας 2.3: Μορφή δεδομένων εισόδου, όπως διαμορφώθηκαν με τον αλγόριθμο nninoutmake, για την εκπαίδευση του TND_distance που χρησιμοποιεί τα 3 πλησιέστερα δείγματα. Περιλαμβάνει τις συντεταγμένες X,Y,Z του εξεταζόμενου δείγματος, τις αποστάσεις των 3 πλησιέστερων δειγμάτων d_1, d_2, d_3 και τις αντίστοιχες περιεκτικότητες g_1, g_2, g_3	30
Πίνακας 2.4 Μορφή δεδομένων εισόδου, όπως διαμορφώθηκαν με τον αλγόριθμο "nninoutmake", για την εκπαίδευση του TND_xyz. Περιλαμβάνει τις συντεταγμένες X,Y,Z του εξεταζόμενου δείγματος, τις συντεταγμένες των 3 πλησιέστερων δειγμάτων $X_1, Y_1, Z_1, X_2, Y_2, Z_2, X_3, Y_3, Z_3$ και τις αντίστοιχες περιεκτικότητες g_1, g_2, g_3	31
Πίνακας 2.5: Παράμετροι σχεδιασμού και επίπεδα μελέτης τους.	34
Πίνακας 3.1: Αποτελέσματα παραγοντικού σχεδιασμού για το TND_distance με δεδομένα εκπαίδευσης από το κοιτάσμα Arizona_Cu.	49
Πίνακας 3.3: Συντελεστές μοντέλων παλινδρόμησης 2ου βαθμού.	52
Πίνακας 3.4: Αποτελέσματα βελτιστοποίησης με στόχο την μεγιστοποίηση του R (test).	53
Πίνακας 3.5 Αποτελέσματα βελτιστοποίησης με στόχο την μεγιστοποίηση του R(total).	53
Πίνακας 3.6: Αποτελέσματα βελτιστοποίησης με στόχο την ελαχιστοποίηση του σφάλματος.	53
Πίνακας 3.7: Βέλτιστες τιμές των παραμέτρων σχεδιασμού.	54

1 Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα (ΤΝΔ) και εφαρμογές τους στη μεταλλευτική εκτιμητική

1.1 Δομή νευρωνικών δικτύων

Τα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα-ΤΝΔ (Artificial Neural Networks-ANN) αποτελούν μια προσπάθεια προσομοίωσης της πολύπλοκης λειτουργίας του ανθρώπινου εγκεφάλου. Ο ανθρώπινος εγκέφαλος αποτελείται περίπου από 100 δισεκατομμύρια διακριτά στοιχεία τα οποία ονομάζονται νευρώνες (neurons) και έχουν την δυνατότητα να επικοινωνούν μεταξύ τους μέσω συνάψεων, με σκοπό την επίλυση προβλημάτων. Κύριο χαρακτηριστικό των τεχνητών νευρωνικών δικτύων είναι ότι οι βασικές λειτουργίες τους, καθώς και η δομή τους, μιμούνται τις αντίστοιχες ενός ανθρώπινου εγκεφάλου. Είναι γνωστό ότι ο ανθρώπινος εγκέφαλος είναι το πιο σύνθετο σύστημα επεξεργασίας δεδομένων και ότι η λειτουργία του δεν μπορεί σε καμία περίπτωση να συγκριθεί με τον τρόπο που λειτουργούν οι ηλεκτρονικοί υπολογιστές. Ο τρόπος με τον οποίο ο εγκέφαλος επεξεργάζεται δεδομένα, καθώς επίσης και ο τρόπος που οδηγείται σε μια πιθανή λύση, πυροδότησε την έρευνα για ανάπτυξη των τεχνητών νευρωνικών δικτύων. Ένα ΤΝΔ μπορεί να εκπαιδευτεί, να σκεφτεί και να μάθει, χαρακτηριστικά που κατέχει ο ανθρώπινος εγκέφαλος. Με άλλα λόγια, η κατασκευή των ΤΝΔ είναι η μελέτη του πώς να κάνουμε τους υπολογιστές ικανούς να κάνουν πράγματα στα οποία προς το παρόν οι άνθρωποι τα καταφέρνουν καλύτερα (Rich & Knight, 1990).

Πιο συγκεκριμένα, τα ΤΝΔ είναι μη γραμμικά δυναμικά συστήματα αφού στόχο έχουν τη μοντελοποίηση μη γραμμικών προβλημάτων. Αποτελούνται από ένα σύνολο νευρώνων που αλληλεπιδρούν και συνδέονται μεταξύ τους με τις λεγόμενες συνδέσεις ή συνάψεις (synapses). Το αρχικό επίπεδο με τους νευρώνες λαμβάνει ως δεδομένα εισόδου τα x_i , ακολουθούν τα ενδιάμεσα επίπεδα (hidden layers) που το πλήθος τους καθορίζει και την πολυπλοκότητα του προβλήματος και τέλος το επίπεδο εξόδου (output layer) που αποδίδει τις τιμές της εξόδου y_i . Κάθε είσοδος x_i που λαμβάνει ο νευρώνας, πολλαπλασιάζεται με ένα βάρος w_i που ονομάζεται συναπτικό βάρος (synaptic weights). Ο συντελεστής w_i δείχνει πόσο ισχυρά συνδεδεμένοι είναι οι δύο νευρώνες. Σε κάθε νευρώνα, τα αποτελέσματα αθροίζονται μέσω της συνάρτησης αθροίσματος (summation function) όλες οι εισοδοί του x_i αφού σταθμιστούν με τα

συναπτικά βάρη w_i και τέλος υπολογίζεται η έξοδος y_i μέσω μιας κατάλληλης συνάρτησης που ονομάζεται συνάρτηση ενεργοποίησης.

Επομένως ο νευρώνας εκτελεί δυο λειτουργίες:

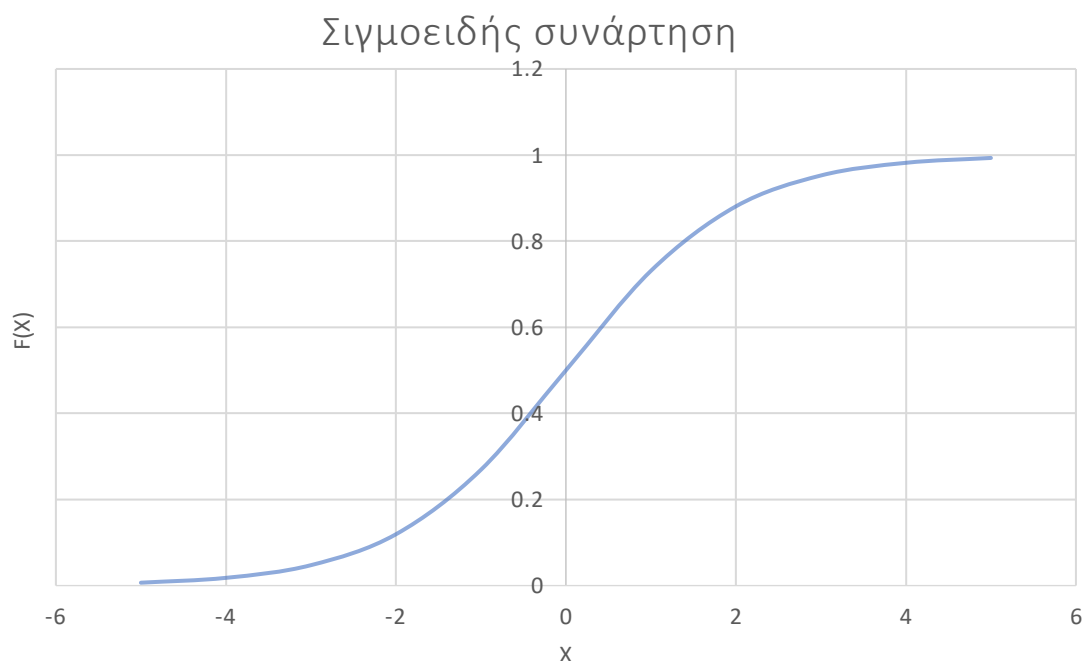
- Αθροίζει κατ' αρχήν τις επιμέρους εισόδους (x_1, x_2, \dots, x_n) που λαμβάνει χρησιμοποιώντας τους συντελεστές w_i και υπολογίζει τη συνολική είσοδο $I_{net} = \sum w_i \cdot x_i$ για $i=1$ έως n . Οι συντελεστές w_i ενισχύσουν ή αποσβένουν το σήμα εξόδου.
- Χρησιμοποιεί στη συνέχεια μια κατάλληλη συνάρτηση $F(x)$, που ονομάζεται συνάρτηση διέγερσης ή συνάρτηση ενεργοποίησης (activation function), για να υπολογίσει την έξοδο $O_{net} = F(I_{net})$.

Η πλέον διαδεδομένη συνάρτηση ενεργοποίησης (1) είναι η σιγμοειδής $F(x)$:

$$F(x) = \frac{1}{1 + e^{-\lambda x}} \quad (1)$$

όπου:

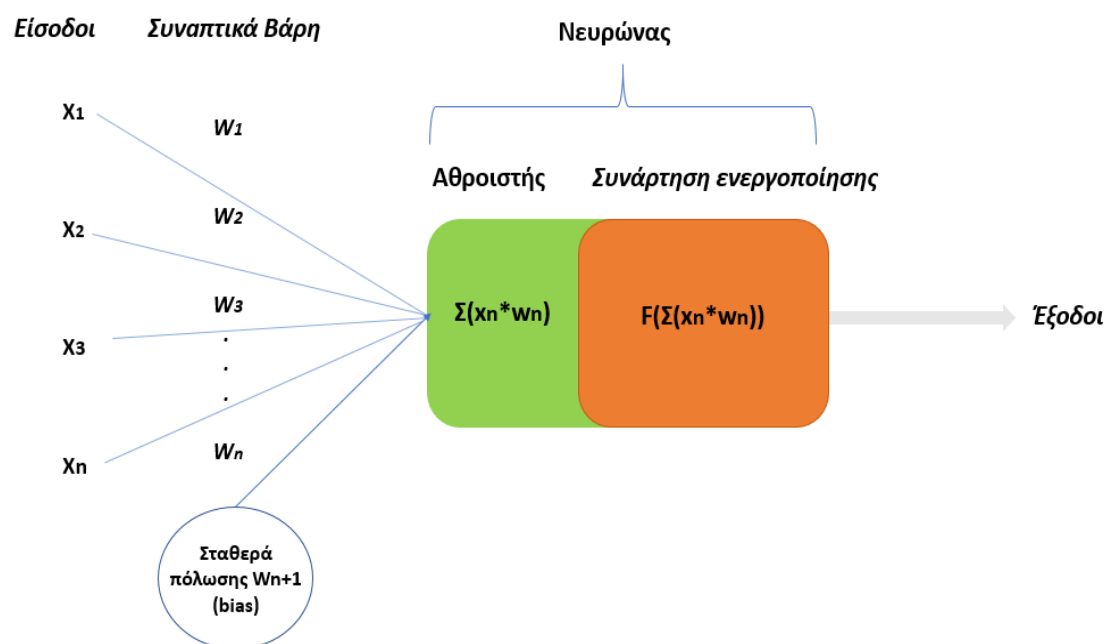
λ = συντελεστής έντασης (συνήθως λαμβάνεται $\lambda=1$) και $f(x) \in [0,1] \forall x \in \mathbb{R}$ (Seggern, 2007).



Σχήμα 1.1 : Μορφή της σιγμοειδούς συνάρτησης.

Άλλες χρησιμοποιούμενες συναρτήσεις ενεργοποίησης είναι η βηματική συνάρτηση (step function), η συνάρτηση προσήμου (sign function), η γραμμική συνάρτηση (linear function) και η γκαουσιανή συνάρτηση (Gaussian).

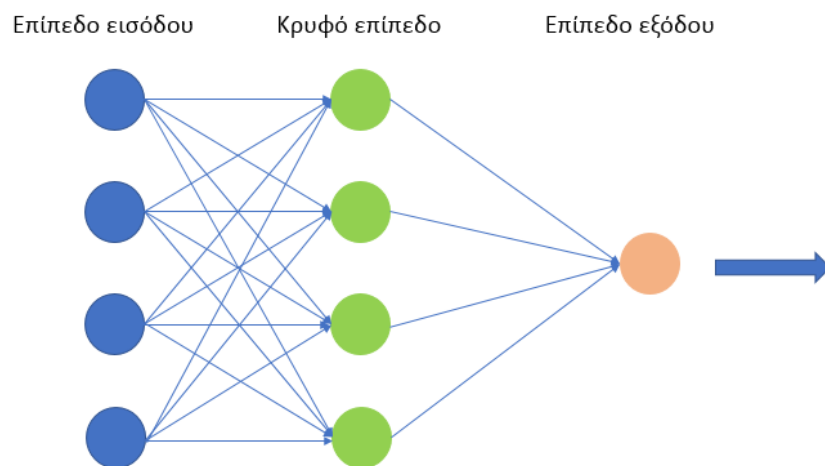
Για την καλύτερη απόδοση του ΤΝΔ εισάγεται μια επιπλέον είσοδος στον αθροιστή, η σταθερά πόλωσης (bias), η οποία αποτελεί το $n+1$ συναπτικό βάρος. Η επιπλέον είσοδος του αθροιστή είναι σταθερή, δηλαδή $x_{n+1}=1$, και πολλαπλασιάζεται με τη σταθερά πόλωσης (bias), η οποία αποτελεί το $n+1$ βάρος του τεχνητού νευρώνα, δηλαδή $w_{n+1}=b$ (Καμπουρλάζος, 2015). Στο σχήμα 1.2 δίνεται παραστατικά η δομή και λειτουργία ενός τεχνητού νευρώνα.



Σχήμα 1.2: Δομή και λειτουργία τεχνητού νευρώνα.

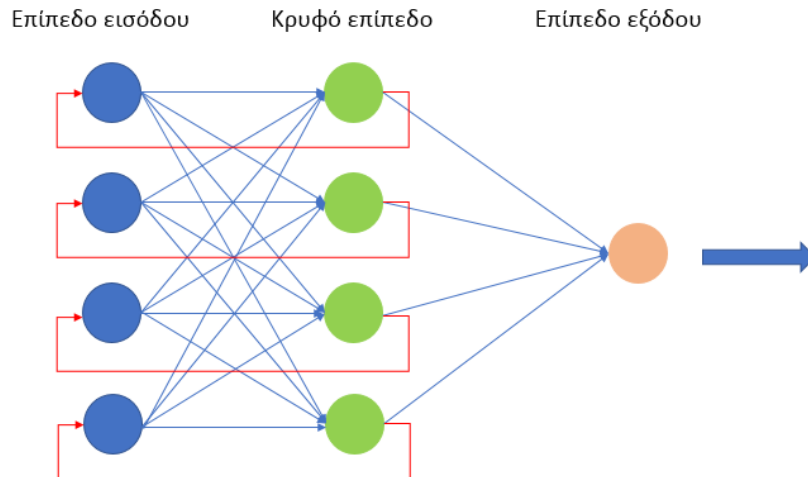
Η κατηγοριοποίηση των ΤΝΔ γίνεται με βάση την αρχιτεκτονική τους και την συνδεσμολογία τους. Ως πλήρως συνδεδεμένα (Fully connected) χαρακτηρίζονται εκείνα στα οποία ο νευρώνας ενός επιπέδου συνδέεται ανεξαιρέτως με όλους τους νευρώνες του επόμενου επιπέδου. Στην περίπτωση όμως που η έξοδος ενός νευρώνα δεν έχει αντιστοιχία με κάποιον νευρώνα του επόμενου επιπέδου τότε χαρακτηρίζονται ως μερικώς συνδεδεμένα (Partially connected). Επιπλέον τα ΤΝΔ με βάση την φορά των εξόδων ενός νευρώνα ταξινομούνται σε πρόσθιας τροφοδότησης (Feedforward) και οπίσθιας τροφοδότησης (Feedback).

Στα ΤΝΔ πρόσθιας τροφοδότησης η φορά διάδοσης γίνεται πάντα προς μια κατεύθυνση, δηλαδή δεν υπάρχει καμία έξοδος από ένα επίπεδο που να τροφοδοτεί προηγούμενο επίπεδο ή ακόμα και το ίδιο. Η πρόσθια τροφοδότηση, αποτελεί τον πλέον πιο διαδεδομένο τρόπο τροφοδότησης νευρωνικών δικτύων. Ο Rosenblatt ήταν από τους πρώτους που ανέπτυξε απλουστευμένα ΤΝΔ αυτού του τύπου, τα οποία ονομάζονται Perceptron. Στο Σχήμα 1.3 αναπαρίσταται ο τρόπος δομής ενός ΤΝΔ πρόσθιας τροφοδότησης.



Σχήμα 1.3: Τεχνητό νευρωνικό δίκτυο πρόσθιας τροφοδότησης (feedforward).

Όσον αφορά τα ΤΝΔ οπισθίως τροφοδοτούμενα (Σχήμα 1.4), δεν τίθεται θέμα περιορισμού στη φορά και στη κατεύθυνση της τροφοδότησης, αφού επιτρέπεται στο επίπεδο να τροφοδοτεί το ίδιο ή και προηγούμενα επίπεδα. Αν η ανατροφοδότηση αφορά κόμβους στο ίδιο επίπεδο, τότε τα δίκτυα καλούνται αυτοσυσχετιζόμενες μνήμες (auto-associated memories), διαφορετικά, καλούνται ετεροσυσχετιζόμενες μνήμες (hetero-associated memories) (Γεωργούλη, 2015).



Σχήμα 1.4: Τεχνητό νευρωνικό δίκτυο οπίσθιας τροφοδότησης (feedback).

Γενικότερα, ο τρόπος με τον οποίο είναι διατεταγμένοι οι νευρώνες, οι συναρτήσεις ενεργοποίησης, ο τρόπος σύνδεσης των νευρώνων, η φορά διάδοσης του σήματος και η στρατηγική εκπαίδευσης που ακολουθείται, χαρακτηρίζουν τον τύπο του νευρωνικού δικτύου (Rumelhart et al. 1986).

1.2 Μέθοδοι εκπαίδευσης νευρωνικών δικτύων

Η εκπαίδευση (training) είναι η διαδικασία κατά την οποία εκπαιδεύεται το νευρωνικό δίκτυο μέσω της προσαρμογής των βαρών w_i να παράγει συγκεκριμένο διάνυσμα εξόδου. Βασικός στόχος της εκπαίδευσης είναι η ικανότητα γενίκευσης, δηλαδή η ικανότητα του δικτύου να παράγει «σωστές» προβλέψεις (εξόδους) για άγνωστα πρότυπα (Αντωνίου, 2018). Οι μέθοδοι εκπαίδευσης που μπορούμε να εφαρμόσουμε σε ένα ΤΝΔ διαχωρίζονται στην εκπαίδευση με επίβλεψη ή επιτηρούμενη (supervised), στην εκπαίδευση χωρίς επίβλεψη ή μη επιτηρούμενη (unsupervised) και τέλος, στην ενισχυμένη εκπαίδευση (reinforcement training).

Η επιτηρούμενη εκπαίδευση αποτελεί τον πιο συνηθισμένο τρόπο μάθησης που εφαρμόζεται σε ένα νευρωνικό δίκτυο. Η πληροφορία του σφάλματος που έχει εφαρμογή στην αλλαγή των συντελεστών των συνάψεων, αποστέλλεται προς τα πίσω, αντίθετα δηλαδή από τη διεύθυνση διάδοσης της διέγερσης (Rumelhart et al. 1986). Η πιο κοινή τεχνική διάδοση του σφάλματος, όπως προαναφέρθηκε, είναι προς τα πίσω

(backward-error propagation ή back-propagation). Όταν τελικά το σύστημα εκπαιδευθεί σωστά και δεν απαιτείται καμία περαιτέρω εκμάθηση τα βάρη σταθεροποιούνται. Στην εκπαίδευση με επιτήρηση παρέχεται στο νευρωνικό δίκτυο ένα σύνολο δεδομένων ως είσοδοι και ταυτόχρονα τα αποτελέσματα που επιθυμούμε να λάβουμε για ένα συγκεκριμένο πρόβλημα που μελετάται. Μια από τις πιο γνωστές τεχνικές μάθησης που χρησιμοποιείται για την εκπαίδευση με επιτήρηση είναι ο κανόνας δέλτα (Delta rule). Σαν “δέλτα” ονομάζεται η διαφορά ανάμεσα στην τιμή που υπολογίζει το νευρωνικό δίκτυο και στην πραγματική τιμή που χρησιμοποιείται για την εκπαίδευσή του και εκφράζεται ως συνάρτηση των συντελεστών w_i .

Για την αλλαγή των συντελεστών w_i χρησιμοποιείται η σχέση (2) που αναπτύχθηκε από τους Rumelhart et al., 1986:

$$\Delta w(t) = -\alpha \partial E / \partial w(t) + \beta \Delta w(t-1) \quad (2)$$

όπου:

α = συντελεστής μάθησης

β = συντελεστής ορμής

E = συνάρτηση σφάλματος

$w(t)$ = συντελεστής συνάψεων κατά τον κύκλο εκπαίδευσης t

$\Delta w(t)$ = μεταβολή των συντελεστών κατά τον κύκλο εκπαίδευσης t

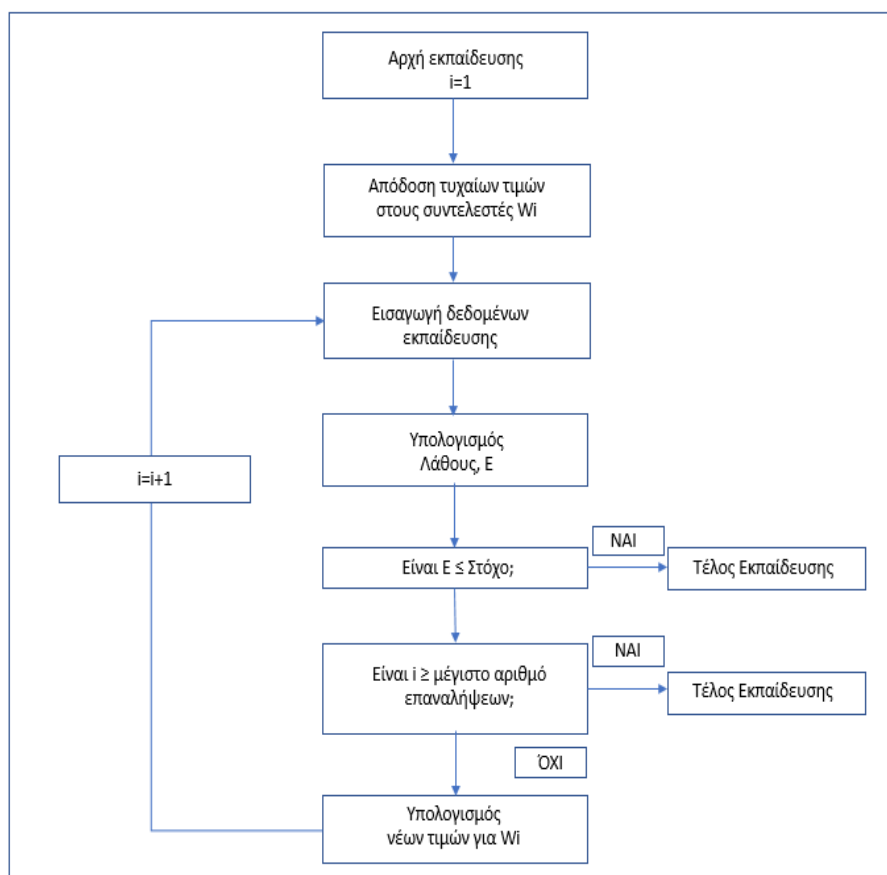
$\Delta w(t-1)$ = μεταβολή των συντελεστών κατά τον κύκλο εκπαίδευσης $t-1$

Ο συντελεστής μάθησης (α) χρησιμοποιείται για τον έλεγχο της ταχύτητας της διαδικασίας εκπαίδευσης, ενώ ο συντελεστής ορμής (β) βοηθά στην υπερπήδηση τοπικών ελαχίστων που μπορεί να παρουσιάζει η συνάρτηση $E(w)$ (Rumelhart, 1986). Η διαδικασία συνεχίζεται ως ότου το νευρωνικό φτάσει στην βέλτιστη απόδοσή του και δίνει ως αποτελέσματα εξόδου τα καλύτερα δυνατά αποτελέσματα.

Στη μη επιτηρούμενη εκπαίδευση το νευρωνικό δίκτυο αναγνωρίζει τις ομοιότητες στα δεδομένα εισόδου που του έχουμε τροφοδοτήσει κατηγοριοποιώντας τα, μετέπειτα, σε ομάδες. Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται όσες φορές είναι αναγκαίο έτσι ώστε να μην παρατηρείται πλέον αλλαγή στην ταξινόμηση των δεδομένων.

Στην ενισχυμένη εκπαίδευση, ή αλλιώς αυτο-επιτηρούμενη (self-training), το ΤΝΔ μαθαίνει με βάση μια στρατηγική ενεργειών που ακολουθεί και μέσα από αλληλεπίδραση με το σύστημα. Ουσιαστικά το ΤΝΔ είναι σε θέση να εκπαιδεύει το ίδιο το σύστημα από μόνο του.

Στο Σχήμα 1.5 περιγράφονται αναλυτικά τα στάδια που ακολουθούνται κατά την διαδικασία της εκπαίδευσης με επιτήρηση.

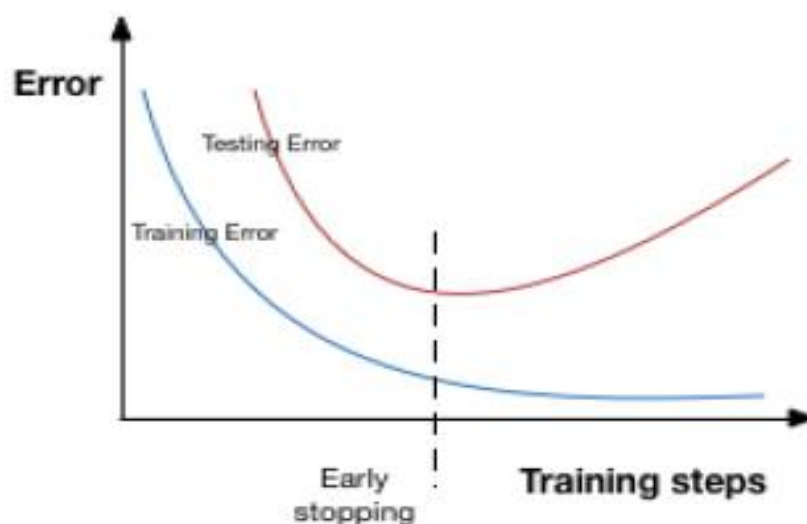


Σχήμα 1.5: Σχεδιάγραμμα διαδικασίας εκμάθησης ΤΝΔ (Γαλετάκης, 2000)

Κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης ελλοχεύει ο κίνδυνος το ΤΝΔ να υπερεκπαιδευτεί (overtraining) ή να υποεκπαιδευτεί (undertraining). Η ικανότητα της γενίκευσης του ΤΝΔ επηρεάζεται αρνητικά κατά την υπερεκπαίδευση. Εάν ένα ΤΝΔ παρουσιάζει μεγαλύτερη πολυπλοκότητα από την επιθυμητή, έχει ως αποτέλεσμα να "μαθαίνει" την λεπτομέρεια και τον θόρυβο των δειγμάτων. Επομένως, το νευρωνικό δίκτυο δεν είναι σε θέση να επιτύχει τους στόχους της εκπαίδευσης και την γενίκευση σε άγνωστα δείγματα. Για την αποφυγή της υπερεκπαίδευσης και για να γίνει έλεγχος της

γενίκευσης ενός δικτύου γίνεται εφαρμογή της διαδικασίας της πρόωρης διακοπής (early stopping) (Morgan & Bourland 1990). Τα δείγματα που χρησιμοποιούνται κατά την εκπαίδευση χωρίζονται στα δεδομένα της εκπαίδευσης (training), στον έλεγχο εκπαίδευσης (validation) και έλεγχο γενίκευσης (testing). Τα δεδομένα εκπαίδευσης (training) χρησιμοποιούνται για την προσαρμογή των βαρών στο νευρωνικό, ο έλεγχος γενίκευσης (testing) για τον προσδιορισμό της κατάλληλης στιγμής τερματισμού της διαδικασία της εκπαίδευσης και ο έλεγχος εκπαίδευσης (validation) εξυπηρετεί την αξιολόγηση της γενικευμένης παρουσίας του εκπαιδευόμενου νευρωνικού δικτύου όταν εισάγονται νέα δεδομένα.

Η εκπαίδευση γίνεται μέσω των δεδομένων εκπαίδευσης και υπολογίζεται το σφάλμα εκπαίδευσης (training error). Το εκπαιδευμένο ΤΝΔ τροφοδοτείται με τα δεδομένα ελέγχου και κρίνει το αποτέλεσμα υπολογίζοντας το σφάλμα ελέγχου (testing error). Η βέλτιστη τιμή για την εφαρμογή της πρόωρης διακοπής και αποφυγής της υπερεκπαίδευσης απεικονίζεται στο Σχήμα 1.6. Όσο ο αριθμός των βημάτων (training steps) αυξάνεται, το σφάλμα εκπαίδευσης (training error) μειώνεται, ενώ η καμπύλη του σφάλματος ελέγχου (testing error) παρατηρούμε ότι μειώνεται έως ένα συγκεκριμένο σημείο και στη συνέχεια ακολουθεί μια αυξητική πορεία. Ο στόχος της εκπαίδευσης είναι η εύρεση του χαμηλότερου σημείου του σφάλματος ελέγχου το οποίο σηματοδοτεί και τον τερματισμό της εκπαίδευσης.



Σχήμα 1.6: Διάγραμμα της εύρεσης ιδανικού σημείου εκπαίδευσης για αποφυγή της υπερεκπαίδευσης.

Όσον αφορά την περίπτωση της υποεκπαίδευσης, το ΤΝΔ που προκύπτει είναι αρκετά απλουστευμένο συγκριτικά με το πρόβλημα που καλείται να λύσει.

1.3 Εφαρμογές νευρωνικών δικτύων στη μεταλλευτική

Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα αποτελούν ένα πολύ χρήσιμο εργαλείο επίλυσης προβλημάτων και έχουν πολλές εφαρμογές στις σύγχρονες επιστήμες. Ορισμένες ευρέως διαδεδομένες χρήσεις των νευρωνικών δικτύων είναι στους τομείς της βιολογίας (κατανόηση του ανθρώπινου εγκεφάλου), της ιατρικής (κατασκευή μοντέλων όρασης ή ακουστικών βαρηκοΐας), στη βιομηχανία (αυτοματοποίηση στον έλεγχο ποιότητας και αξιοπιστίας στην γραμμή παραγωγής), στην μετεωρολογία (πρόβλεψη καιρικών συνθηκών) κ.ά.

Όσον αφορά τον τομέα της μεταλλευτικής βιομηχανίας, όλο και περισσότερο, τις τελευταίες δεκαετίες στρέφεται στη χρήση των ΤΝΔ, με σκοπό την επίλυση θεμάτων που σχετίζονται με την έρευνα και την αξιολόγηση κοιτασμάτων και την εκτίμηση της ποιότητας και των αποθεμάτων.

Οι Xiping και Yingxin (1992) για τον προσδιορισμό της περιεκτικότητας σε κοίτασμα πορφυριτικού χαλκού χρησιμοποίησαν ΤΝΔ πρόσθιας τροφοδότησης (feedforward) και οδηγήθηκαν στο συμπέρασμα ότι η εφαρμογή των νευρικών δικτύων μπορεί να χρησιμοποιηθεί με επιτυχία στην εκτίμηση της περιεκτικότητας.

Ο Γαλετάκης (1999) ασχολήθηκε με τον υπολογισμό των απολήψιμων αποθεμάτων και της ποιότητας πολυστρωματικών λιγνιτικών κοιτασμάτων. Ανάπτυξε μια ειδική μεθοδολογία καθορισμού των εκμεταλλεύσιμων αποθεμάτων και της ποιότητας του λιγνιτικού κοιτάσματος του Νοτίου Πεδίου που βρίσκεται στην περιοχή των ορυχείων Πτολεμαΐδας του Λιγνιτικού Κέντρου Δυτικής Μακεδονίας. Επίσης, ο Γαλετάκης (2000) ασχολήθηκε και με την πρόβλεψη των ποιοτικών παραμέτρων ασβεστολιθικών αδρανών υλικών με τη χρήση τεχνητών νευρωνικών δικτύων. Η προσαρμοστικότητα των ΤΝΔ σε πολύπλοκα προβλήματα και η δυνατότητά τους να χειρίζονται εύκολα πολλές παραμέτρους, ακόμη και διαφορετικής φύσης, δίνουν τη δυνατότητα να αξιοποιηθούν και άλλες πληροφορίες για την κατανόηση των σχέσεων που διέπουν τα χαρακτηριστικά των ορυκτών υλών, όπως αυτές που σχετίζονται με το γεωλογικό περιβάλλον, τις συνθήκες γένεσης κτλ.

Οι Brown et al. (2000) ανέπτυξαν ένα νευρωνικό δίκτυο πρόσθιας τροφοδότησης πολλαπλών εσωτερικών επιπέδων (feedforward) με στόχο την αξιολόγηση κοιτάσματος χρυσού στην περιοχή Tenterfield, νότια της Νέας Ουαλίας (Αυστραλία). Η μελέτη έδειξε ότι η χρήση των νευρωνικών δικτύων έδωσε αρκετά καλύτερα αποτελέσματα σε σχέση με υφιστάμενες μεθόδους.

Ο Καπαγερίδης (2005) χρησιμοποίησε ΤΝΔ ακτινικής συνάρτησης βάσης (Radial Basis Function, RBF) για την εκτίμηση της περιεκτικότητας μεταλλευμάτων. Το συγκεκριμένο νευρωνικό δίκτυο χρησιμοποιεί ειδικές συναρτήσεις για την απεικόνιση της περιεκτικότητας στο χώρο. Τόνισε το γεγονός ότι η επιλογή του αριθμού αλλά της θέσης στο χώρο των δεδομένων εισόδου του νευρωνικού δικτύου είναι μεγάλης σημασίας και καθορίζει την απόδοσή του.

Οι Samanta και Bandyopadhyay (2009) με νευρωνικά δίκτυα τύπου RBF προσδιόρισαν την περιεκτικότητα χρυσού σε κοιτάσμα που βρίσκεται στην Αλάσκα, νότια της χερσονήσου Seward δυτικά της πόλης Fairbanks και βορειοδυτικά της πόλης Άνκορατζ. Το αποτέλεσμα αυτής της μελέτης έδειξε ότι το νευρωνικό δίκτυο τύπου RBF ανταποκρίθηκε καλύτερα από το νευρωνικό δίκτυο πρόσθιας προώθησης και τη συνηθισμένη μέθοδο Kriging .

Ο Tutmez (2009) με την μέθοδο των τεχνητών νευρο-ασαφών δικτύων (Fuzzy-neural network), πραγματοποίησε εκτίμηση της περιεκτικότητας λιγνιτικού κοιτάσματος. Η σύγκριση των αποτελεσμάτων με άλλες συμβατικές μεθόδους έδειξε ότι αυτή η μέθοδος υπολογισμού είναι εξίσου αποτελεσματική.

Οι Dutta et al.(2010) είχαν ως επίκεντρο της μελέτης τους την χρήση δυο αλγορίθμων μηχανικής μάθησης (Machine Learning Algorithms, MLA) για την εκτίμηση μεταλλευτικών αποθεμάτων. Πιο συγκεκριμένα, εστίασαν στα νευρωνικά δίκτυα (NN) και στα Support Vector Machines SVM, με σκοπό την εκτίμηση περιεκτικότητας χρυσού σε κοιτάσμα στην περιοχή Nome στην Αλάσκα. Ένα τέτοιο εγχείρημα αποτέλεσε πρόκληση λόγω της γεωλογικής πολυπλοκότητας της περιοχής. Τα διάφορα κριτήρια που χρησιμοποιήθηκαν για τη σύγκριση της απόδοσης του μοντέλου ήταν το μέσο σφάλμα (ME), το μέσο απόλυτο σφάλμα (MAE), το μέσο τετραγωνικό σφάλμα (RMSE) και το συντελεστή R^2 . Το συμπέρασμα στο οποίο κατέληξαν οι ερευνητές ήταν ότι οι μέθοδοι που ανέπτυξαν με την βοήθεια των νευρωνικών δικτύων είχαν σημαντικά καλύτερα αποτελέσματα από την κλασική μέθοδο Kriging.

Οι Xiao-li et al (2010) ασχολήθηκαν με μια νέα μη γραμμική μέθοδο βασισμένη στη θεωρία των κυματιδίων (wavelet) και στα νευρωνικά δίκτυα (Wavelet Neural Network) για τον υπολογισμό αποθεμάτων κοιτασμάτων από δεδομένα γεωτρήσεων. Τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν πάρθηκαν από το βιβλίο "Geostatistical Ore Reserve Estimation" του M.David και προέρχονται από κοίτασμα πορφυριτικού χαλκού. Ο συνδυασμός της μεθόδου wavelet με τα νευρωνικά δίκτυα φάνηκε να βελτιώνει την ακρίβεια εκτίμησης της περιεκτικότητας και την ταχύτητα εκπαίδευσης του νευρωνικού δικτύου.

Οι Mehdi et al. (2010) χρησιμοποίησαν ΤΝΔ με σκοπό τον προσδιορισμό της περιεκτικότητας σιδήρου στο κοίτασμα Jalal-Abad Zarrand, νότια του Ιράν. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τα ΤΝΔ συγκρίθηκαν με εκείνα της μεθόδου Kriging (median indicator Kriging) και έδειξαν ότι τα καλύτερα αποτελέσματα επιτυγχάνονται με την χρήση ΤΝΔ.

Οι Pejman και Ardeshir (2012) βασίστηκαν στον συνδυασμό των τεχνητών νευρωνικών δικτύων με τα συστήματα ασαφούς λογικής (FL). Ο συνδυασμός αυτός ονομάστηκε "Coactive Neuro-Fuzzy Inference System" (CANFIS). Η μέθοδος CANFIS εφαρμόστηκε στο κοίτασμα χαλκού Sungun στο Ιράν. Τα αποτελέσματά της έδειξαν ότι η CANFIS αποτελεί μια ταχύτερη και ακριβέστερη εναλλακτική λύση σε σχέση με τις υπόλοιπες και για αυτό τον λόγο οι ερευνητές πρότειναν την εφαρμογή της σε παρόμοια προβλήματα.

Οι Saeed et al. (2016) εφάρμοσαν συνδυασμό μεθόδων τεχνητών νευρωνικών δικτύων (ANN) και γενετικών αλγορίθμων (Genetic Algorithms, GA) δημιουργώντας το ΤΝΔ τύπου ANN-GA, και με την μέθοδο προσομοιωμένης απόπτησης (simulated annealing) (SA) δημιούργησαν το ΤΝΔ τύπου ANN-SA. Τα μοντέλα αυτά αναπτύχθηκαν με σκοπό την πρόβλεψη της εισροής υπόγειων υδάτων στις υπαίθριες εκμεταλλεύσεις. Τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν προέρχονταν από υπάρχουσες γεωτρήσεις. Οι προβλέψεις με βάση τα μοντέλα αυτά ήταν πιο ακριβείς σε σύγκριση με τα αποτελέσματα απλών ANN. Τα αποτελέσματα έδειξαν επίσης ότι, παρά τη χρήση λιγότερων και απλούστερων συνδυαστικών μοντέλων, το ANN-GA και σε κάποιο βαθμό η μέθοδος ANN-SA, είχαν τη δυνατότητα να ανταγωνιστούν σύνθετα αριθμητικά μοντέλα.

Οι Nezamolhosseini et al. (2015) εφάρμοσαν τα νευρωνικά δίκτυα για τον προσδιορισμό της περιεκτικότητας του σιδήρου στο κοίτασμα Choghart της περιοχής Yazd στο κεντρικό Ιράν. Διαπίστωσαν ότι οι κλασικές γεωστατιστικές μέθοδοι για τον προσδιορισμό της περιεκτικότητας σε μεταβαλλόμενες συνθήκες, είναι πολύ δύσκολο να εφαρμοστούν. Τα ΤΝΔ αποτελούν ένα εναλλακτικό τρόπο επεξεργασίας τέτοιων δεδομένων. Για τον λόγο αυτόν, δημιούργησαν ένα νευρωνικό δίκτυο τύπου Perceptron πολλαπλών επιπέδων (MLP) για την εκτίμηση της περιεκτικότητας σιδήρου. Με στόχο τη βελτίωση του ΤΝΔ, το κοίτασμα χωρίστηκε σε 4 ομοιογενείς ζώνες. Τέλος συγκρίνοντας τα αποτελέσματα του συντελεστή συσχέτισης (R) και του μέσου τετραγωνικού σφάλματος (MSE) κατέληξαν ότι το ΤΝΔ είχε πολύ καλύτερη απόδοση όταν εφαρμόστηκε στις 4 ξεχωριστές ζώνες, σε σχέση με την εφαρμογή του συνολικά, σε όλο το κοίτασμα.

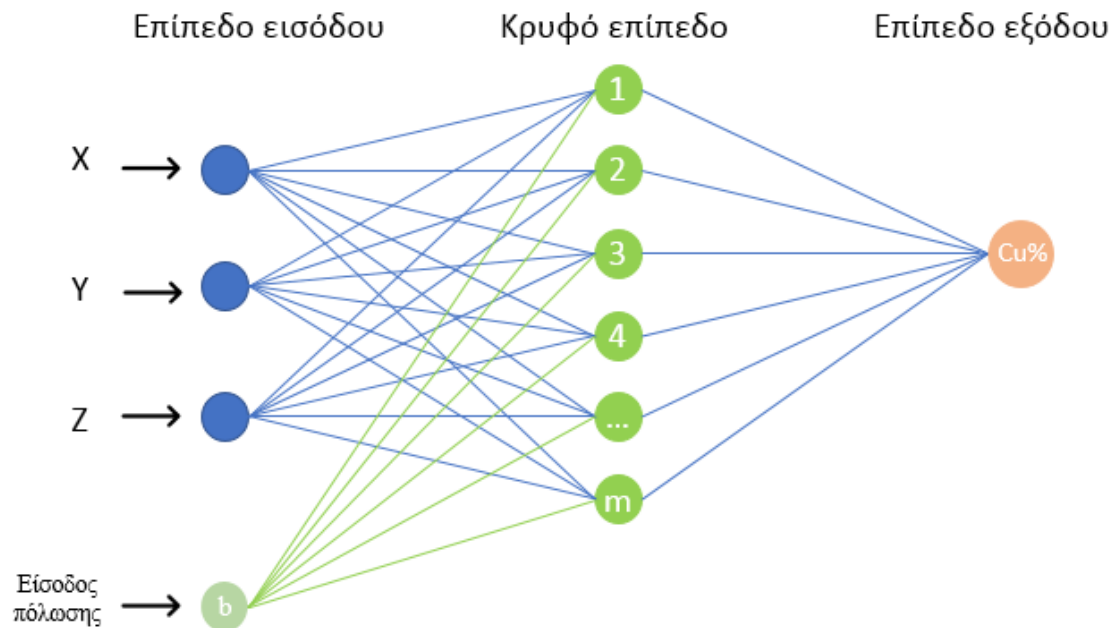
Συνοπτικά, παρατηρείται ότι μελετήθηκαν και χρησιμοποιήθηκαν κατά κύριο λόγο ΤΝΔ ευθείας προώθησης με οπισθοδιάδοση του σφάλματος, ενώ σε μικρότερο βαθμό έγινε χρήση των ακτινικών συναρτήσεων βάσης (RBF), των νευρο-ασαφών δικτύων, της μηχανικής μάθησης, της θεωρίας κυματιδίων (wavelet) σε συνδυασμό με ΤΝΔ, των γενετικών αλγορίθμων ή της προσομοίωσης απόπτησης σε συνδυασμό με ΤΝΔ κτλ. Στις περισσότερες περιπτώσεις των ΤΝΔ ευθείας προώθησης με οπισθοδιάδοση του σφάλματος, ως είσοδοι χρησιμοποιούνται οι συντεταγμένες (X, Y, Z) κάθε δείγματος και ως έξοδο η ζητούμενη περιεκτικότητα στο χρήσιμο συστατικό. Ως κύριο στόχο όλα τα ΤΝΔ είχαν την εκτίμηση της τιμής της περιεκτικότητας του μελετώμενου κοιτάσματος. Διαπιστώνεται ότι δεν χρησιμοποιήθηκαν καθόλου ως δεδομένα εισόδου κατά την εκπαίδευση οι συντεταγμένες ή οι αποστάσεις μιας ομάδας δειγμάτων που ανήκουν σε μια συγκεκριμένη περιοχή. Επομένως, παρατηρείται μια καθολική προσέγγιση του προβλήματος. Με αυτόν τον τρόπο είναι πιθανόν να μειώνεται η αποτελεσματικότητα των ΤΝΔ σε σχέση με τις τοπικές εκτιμήσεις.

2 Ανάπτυξη και εφαρμογή νευρωνικών δικτύων για τον υπολογισμό των αποθεμάτων και της ποιότητας

2.1 ΤΝΔ πρόσθιας τροφοδότησης με οπισθοδιάδοση του σφάλματος με χαρακτηριστικά καθολικού εκτιμητή για τον υπολογισμό ποιότητας και αποθεμάτων κοιτάσματος

Από τα ευρήματα της βιβλιογραφικής επισκόπησης που αναφέρθηκε στο κεφάλαιο 1, φάνηκε ότι ο κύριος τύπος ΤΝΔ που χρησιμοποιείται για την εκτίμηση των αποθεμάτων είναι τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα πρόσθιας τροφοδότησης με οπισθοδιάδοση του σφάλματος (feedforward with backpropagation). Τα ΤΝΔ αυτά όμως έχουν χαρακτηριστικά καθολικού εκτιμητή (global estimator), καθώς εκπαιδεύονται για να εκτιμούν την παράμετρο ποιότητας ή άλλο χαρακτηριστικό του κοιτάσματος στο χώρο, σε ένα σημείο (X,Y,Z) λαμβάνοντας υπόψη το σύνολο όλων των δειγμάτων των γεωτρήσεων του κοιτάσματος.

Όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.1, χρησιμοποιούν ως είσοδοι τις συντεταγμένες X,Y,Z των δειγμάτων (κέντρο του δείγματος) και ως έξοδο την περιεκτικότητα του δείγματος σε χρήσιμο συστατικό (π.χ. την περιεκτικότητα % σε Cu για κοιτάσματα χαλκού). Το μέγεθος m (αριθμός νευρώνων) του κρυφού επιπέδου του νευρωνικού δικτύου επιλέγεται κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσής του με κριτήριο την ελαχιστοποίηση του σφάλματος γενίκευσης του νευρωνικού δικτύου. Το σφάλμα αυτό υπολογίζεται στα δείγματα του συνόλου γενίκευσης (testing set) που αποτελούν ένα υποσύνολο των διατιθέμενων δειγμάτων που δεν έχουν χρησιμοποιηθεί κατά την εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου. Τέτοιου τύπου νευρωνικά δίκτυα αποδίδουν τη γενική τάση μεταβολής της περιεκτικότητας στο χώρο και αδυνατούν να αποδώσουν με ακρίβεια τις τοπικές μεταβολές του κοιτάσματος (Οικονομίδου, 2018, Galetakis et al., 2019). Για την αντιμετώπιση του προβλήματος αυτού, στα πλαίσια της παρούσης διπλωματικής εργασίας, αναπτύχθηκαν και μελετήθηκαν ΤΝΔ με χαρακτηριστικά τοπικού εκτιμητή.



Σχήμα 2.1: Δομή νευρωνικού δικτύου με χαρακτηριστικά καθολικού εκτιμητή για την εκτίμηση της περιεκτικότητας % σε Cu ενός κοιτάσματος με βάση τις συντεταγμένες X,Y,Z των δειγμάτων των γεωτρήσεων. Η είσοδος πόλωσης (b) είναι μια επιπρόσθετη είσοδος με στόχο τη βελτίωση της ακρίβειας και της απόδοσης του νευρωνικού δικτύου.

2.2 ΤΝΔ με χαρακτηριστικά τοπικού εκτιμητή

Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα πρόσθιας τροφοδότησης με οπισθοδιάδοση του σφάλματος (feedforward with backpropagation) με χαρακτηριστικά τοπικού εκτιμητή (local estimator) που προτείνονται, εκπαιδεύονται με το σύνολο όλων των δειγμάτων των γεωτρήσεων του κοιτάσματος, ενώ παράλληλα λαμβάνουν υπόψη και ένα συγκεκριμένο αριθμό γειτονικών δειγμάτων. Χρησιμοποιούν ως δεδομένα εισόδου τις συντεταγμένες X, Y, Z των δειγμάτων (κέντρο του δείγματος) και τα n γειτονικά δείγματα γεωτρήσεων (αποστάσεις ή συντεταγμένες) μαζί με τις περιεκτικότητές τους και ως έξοδο την περιεκτικότητα του δείγματος σε χρήσιμο συστατικό (π.χ. την περιεκτικότητα % σε Cu για κοιτάσματα χαλκού).

Εισάγοντας τα δεδομένα θέσης, το ΤΝΔ εκπαιδεύεται γύρω από την συσχέτιση που αναπτύσσεται μεταξύ της θέσης στο χώρο και της περιεκτικότητας του κοιτάσματος. Η χρήση ενός τέτοιου τύπου νευρωνικού δικτύου αποδίδει καλύτερα σε προβλήματα προσδιορισμού περιεκτικότητας και εντοπισμού τοπικών μεταβολών στα κοιτάσματα

(Καπαγερίδης, 2005). Επιπλέον, έχει τη δυνατότητα εφόσον χρησιμοποιεί τις συντεταγμένες X, Y, Z των n γειτονικών δειγμάτων, να ενσωματώσει και την πιθανή ενυπάρχουσα ανισοτροπία. Τα κοιτάσματα είναι γνωστό ότι πολύ συχνά παρουσιάζουν ανισότροπη συμπεριφορά, αφού σε κάθε διαφορετική θέση εντοπίζεται διαφορά στον βαθμό αποσάθρωσης και εξαλλοίωσης, ενώ σπάνια παρατηρείται ομοιογένεια.

Αναπτύχθηκαν και μελετήθηκαν δυο διαφορετικοί τύποι νευρωνικών δικτύων με ιδιότητες τοπικού εκτιμητή. Στον πρώτο τύπο TNA_distance χρησιμοποιούνται ως είσοδοι οι συντεταγμένες X, Y, Z του εξεταζόμενου δείγματος, καθώς και οι αποστάσεις d_i και οι περιεκτικότητες g_i των n γειτονικών δειγμάτων. Στο δεύτερο τύπο TNA_xyz χρησιμοποιούνται ως είσοδοι οι συντεταγμένες X, Y, Z του εξεταζόμενου δείγματος, καθώς και οι συντεταγμένες X_i, Y_i, Z_i και οι περιεκτικότητες g_i των n γειτονικών δειγμάτων ($i=1..n$). Και στους δυο τύπους TNA ως έξοδος ορίζεται η περιεκτικότητα g του δείγματος με συντεταγμένες X, Y, Z.

2.2.1 Δομή αναπτυχθέντων TNA

Αρχικά αναπτύχθηκε και εκπαιδεύτηκε το TNA_distance με χαρακτηριστικά τοπικού εκτιμητή, το οποίο χρησιμοποιεί ως δεδομένα εισόδου τις συντεταγμένες X, Y, Z του εξεταζόμενου δείγματος, τις αποστάσεις d_i και τις περιεκτικότητες g_i των n γειτονικών δειγμάτων, ενώ ως έξοδο την περιεκτικότητά του δείγματος σε χρήσιμο συστατικό, όπως παρουσιάζεται στο Σχήμα 2.2.

Το συνολικό πλήθος των νευρώνων εισόδου (Num_Inp_1) υπολογίζεται από τη σχέση:

$$Num_Inp_1 = 3 + 2 * n \quad (3)$$

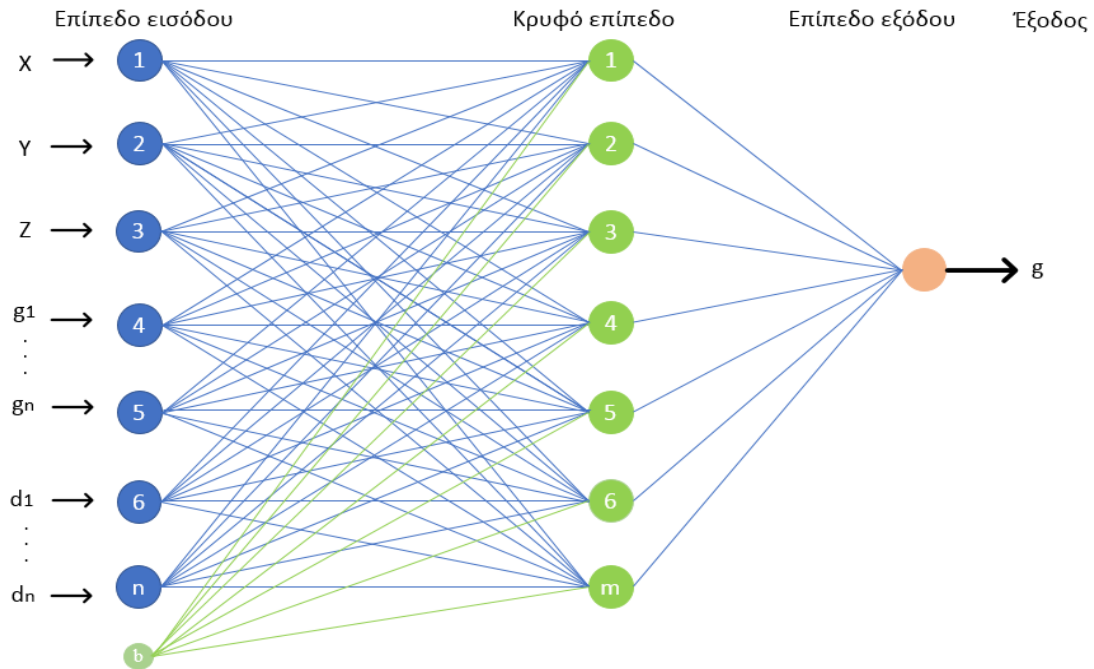
όπου: n= ο αριθμός των γειτονικών δειγμάτων που εισάγει ο χρήστης.

Ο αριθμός των συνάψεων (w_i) που δημιουργούνται, για ένα νευρωνικό δίκτυο που περιέχει ένα κρυφό επίπεδο και είσοδο πόλωσης, είναι:

$$w_i = (Num_Inp_1 + 1) * m + m \quad (4)$$

όπου:

m = μέγεθος του κρυφού επιπέδου (αριθμός νευρώνων) και η μονάδα εισάγεται για να ληφθεί υπόψη η επιπλέον είσοδος πόλωσης (bias).



Σχήμα 2.2: Δομή νευρωνικού δικτύου TNA_distance με χαρακτηριστικά τοπικού εκτιμητή για την εκτίμηση της περιεκτικότητας κοιτάσματος. Χρησιμοποιεί ως εισόδους τις συντεταγμένες X, Y, Z του εξεταζόμενου δείγματος, τις αποστάσεις d_i και τις περιεκτικότητες g_i των n γειτονικών δειγμάτων και έχει ως έξοδο την περιεκτικότητα g (grade) σε χρήσιμο συστατικό.

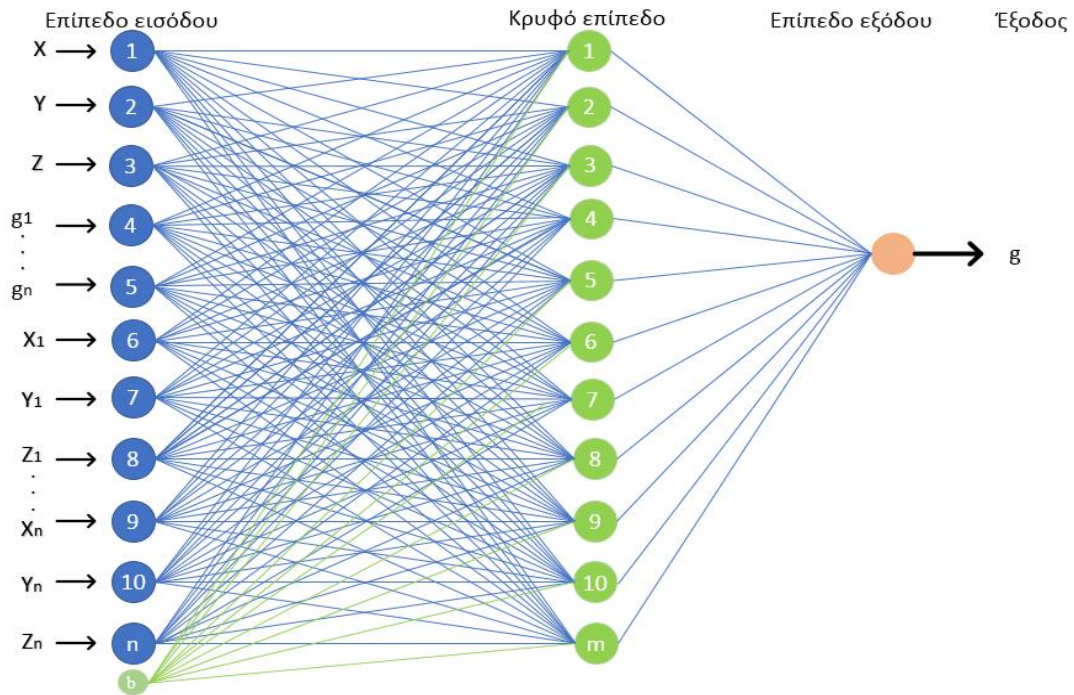
Στη συνέχεια, αναπτύχθηκε και εκπαιδεύτηκε το TNA_xyz με χαρακτηριστικά τοπικού εκτιμητή, το οποίο έχει ως εισόδους τις συντεταγμένες X, Y, Z του εξεταζόμενου δείγματος, τις συντεταγμένες X_i, Y_i, Z_i και τις περιεκτικότητες g_i των n γειτονικών δειγμάτων, ενώ ως έξοδο έχει την περιεκτικότητα g του δείγματος σε χρήσιμο συστατικό, όπως παρουσιάζεται στο Σχήμα 2.3. Το νευρωνικό αυτό δίκτυο θεωρήθηκε ότι μπορεί να ενσωματώσει αποτελεσματικότερα σε σχέση με το προηγούμενο την επίδραση της ανισοτροπίας του κοιτάσματος, αφού λαμβάνει υπόψη τις θέσεις των δειγμάτων στο χώρο και όχι μόνο τις αποστάσεις.

Το πλήθος των νευρώνων εισόδου (Num_Inp_2) υπολογίζεται από τη σχέση:

$$Num_Inp_2 = 3 + 4 * n \quad (5)$$

ενώ ο αριθμός των συνάψεων (w_i) είναι:

$$w_i = (Num_{Inp_2} + 1) * m + m \quad (6)$$

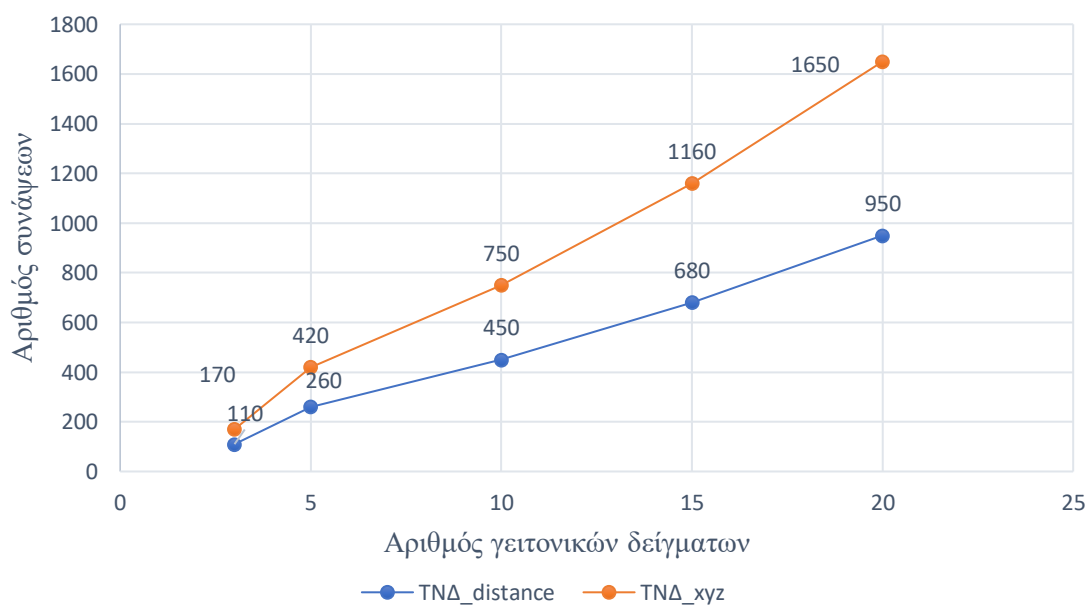


Σχήμα 2.3: Δομή νευρωνικού δικτύου TNA_xyz με χαρακτηριστικά τοπικού εκτιμητή για την εκτίμηση της περιεκτικότητας κοιτάσματος. Χρησιμοποιεί ως εισόδους τις συντεταγμένες X, Y, Z του εξεταζόμενου δείγματος, τις συντεταγμένες X_i, Y_i, Z_i και τις περιεκτικότητες g_i των n γειτονικών δειγμάτων ενώ ως έξοδος έχει την περιεκτικότητα g (grade) του δείγματος σε χρήσιμο συστατικό.

Συγκρίνοντας το TNA_distance με το TNA_xyz, παρατηρείται ότι στη δεύτερη περίπτωση προκύπτει πιο πολύπλοκο TNA, αφού λόγω της αύξησης των νευρώνων εισόδου (Num_{Inp}) αυξάνεται σημαντικά και το πλήθος των συνάψεων (w_i). Στον Πίνακα 2.1 και στο αντίστοιχο Σχήμα 2.4 δίνεται η μεταβολή του αριθμού των συνάψεων των TNA_distance και TNA_xyz σε σχέση με τον αριθμό των γειτονικών δειγμάτων που χρησιμοποιούνται. Παρατηρείται μεγάλη αύξηση, ειδικά για το TNA_xyz, γεγονός το οποίο πρέπει να ληφθεί υπόψη στην επιλογή της δομής του νευρωνικού δικτύου.

Πίνακας 2.1: Μεταβολή του αριθμού των νευρώνων και των συνάψεων για τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα TNA_distance και TNA_xyz. Ο αριθμός των νευρώνων του εσωτερικού επιπέδου και στα δύο δίκτυα είναι 10.

	TNA_distance		TNA_xyz	
Αριθμός γειτονικών δειγμάτων	Νευρώνες	Συνάψεις	Νευρώνες	Συνάψεις
3	9	110	15	170
5	13	260	19	420
10	23	450	23	750
15	33	680	27	1160
20	43	950	31	1650



Σχήμα 2.4 Μεταβολή του αριθμού των συνάψεων των TNA_distance και TNA_xyz σε σχέση με τον αριθμό των γειτονικών δειγμάτων για ένα νευρωνικό δίκτυο με 10 νευρώνες στο κρυφό επίπεδο.

2.3 Επεξεργασία στοιχείων γεωτρήσεων και δημιουργία του συνόλου εκπαίδευσης του TNA

Η μορφή των αρχικών δεδομένων των γεωτρήσεων που προέκυψαν κατά την έρευνα του κοιτάσματος αποτελείται από τις συντεταγμένες X , Y , Z των δειγμάτων των γεωτρήσεων και τις τιμές των περιεκτικότητων τους g στο χρήσιμο συστατικό.

Για τη δημιουργία του συνόλου των δεδομένων εκπαίδευσης που απαιτείται να δημιουργηθούν για την εκπαίδευση των TNA που παρουσιάστηκαν παραπάνω, αναπτύχθηκε αλγόριθμος με την βοήθεια του προγράμματος MATLAB. Με βάση το αρχικό σύνολο δεδομένων παρήγαγε ένα νέο σύνολο δεδομένων σε μορφή πινάκων. Το νέο σύνολο δεδομένων περιέχει για κάθε δείγμα της γεώτρησης με συντεταγμένες X , Y , Z και περιεκτικότητα g , τις αποστάσεις d_i ή τις συντεταγμένες X_i , Y_i , Z_i καθώς και τις αντίστοιχες περιεκτικότητες g_i των n πλησιέστερων δειγμάτων σε αυτό.

Περιγραφή αλγορίθμου:

Η κατασκευή του αλγορίθμου με την ονομασία "nninoutmake" έγινε με τη βοήθεια της γλώσσας προγραμματισμού MATLAB. Η κύρια συνάρτηση που χρησιμοποιήθηκε είναι η "knnsearch", η γενική μορφή της οποίας είναι $[Idx, distance] = knnsearch(X, Y, 'K', 'k\text{-γειτονικές αποστάσεις}')$. Η συνάρτηση αυτή εντοπίζει την απόσταση του πλησιέστερου γείτονα στο X για κάθε σημείο αναζήτησης στο Y και επιστρέφει τους δείκτες, δηλαδή τις θέσεις των πλησιέστερων k -γειτόνων στο Idx . Το Idx έχει τον ίδιο αριθμό γραμμών με το Y και είναι ένα διάνυσμα στήλης.

Αναλυτικά ο αλγόριθμος "nninoutmake" με το σχετικό κώδικα που αναπτύχθηκε παρουσιάζεται στο Παράστημα Α.

Στον Πίνακα 2.2 δίνεται τυπικό απόσπασμα των αρχικών δεδομένων που είναι διαθέσιμα από τα στοιχεία των γεωτρήσεων. Στον Πίνακα 2.3 δίνονται τα δεδομένα εισόδου για το νευρωνικό δίκτυο τύπου TNA_distance που χρησιμοποιεί τρία γειτονικά δείγματα, όπως διαμορφώθηκαν από τον αλγόριθμο "nninoutmake". Αντίστοιχα στον Πίνακα 2.4 δίνονται τα δεδομένα εισόδου για το νευρωνικό δίκτυο τύπου TNA_xyz που χρησιμοποιεί και αυτό τρία γειτονικά δείγματα, όπως διαμορφώθηκαν από τον αλγόριθμο "nninoutmake".

Πίνακας 2.2: Τυπικό απόσπασμα αρχικής μορφής στοιχείων γεωτρήσεων (σύνθετα δείγματα σταθερού μήκους) ενός κοιτάσματος χαλκού.

X	Y	Z	Περιεκτικότητα % σε Cu (g)
2582	5042	3871,5	0,02
2582	5042	3866,5	0,02
2582	5042	3861,5	0,02
2582	5042	3856,5	0,02
2582	5042	3851,5	0,02
2582	5042	3846,5	0,02
2582	5042	3901,5	0,03
2582	5042	3881,5	0,032
2582	5042	3876,5	0,036
.....

Πίνακας 2.3:Μορφή δεδομένων εισόδου, όπως διαμορφώθηκαν με τον αλγόριθμο nninoutmake, για την εκπαίδευση του TNA_distance που χρησιμοποιεί τα 3 πλησιέστερα δείγματα. Περιλαμβάνει τις συντεταγμένες X,Y,Z του εξεταζόμενου δείγματος, τις αποστάσεις των 3 πλησιέστερων δειγμάτων d₁,d₂,d₃ και τις αντίστοιχες περιεκτικότητες g₁,g₂,g₃.

X	Y	Z	d ₁	d ₂	d ₃	g ₁	g ₂	g ₃
2582	5042	3871,5	5	5	10	0,02	0,04	0,02
2582	5042	3866,5	5	5	10	0,02	0,02	0,02
2582	5042	3861,5	5	5	10	0,02	0,02	0,02
2582	5042	3856,5	5	5	10	0,02	0,02	0,02
2582	5042	3851,5	5	5	10	0,02	0,02	0,02
2582	5042	3846,5	5	5	10	0,02	0,08	0,02
2582	5042	3901,5	5	5	10	0,05	0,10	0,04
2582	5042	3881,5	5	5	10	0,04	0,04	0,02
2582	5042	3876,5	5	5	10	0,02	0,03	0,02

....
------	------	------	------	------	------	------	------	------

Πίνακας 2.4 Μορφή δεδομένων εισόδου, όπως διαμορφώθηκαν με τον αλγόριθμο "nninoutmake", για την εκπαίδευση του ΤΝΔ_xyz. Περιλαμβάνει τις συντεταγμένες X,Y,Z του εξεταζόμενου δείγματος, τις συντεταγμένες των 3 πλησιέστερων δειγμάτων X_1, Y_1, Z_1 , X_2, Y_2, Z_2 , X_3, Y_3, Z_3 και τις αντίστοιχες περιεκτικότητες g_1, g_2, g_3 .

X	Y	Z	X_1	Y_1	Z_1	X_2	Y_2	Z_2	X_3	Y_3	Z_3	g_1	g_2	g_3
2582	5042	3871,5	2582	5042	3866,5	2582	5042	3876,5	2582	5042	3861,5	0,02	0,04	0,02
2582	5042	3866,5	2582	5042	3871,5	2582	5042	3861,5	2582	5042	3856,5	0,02	0,02	0,02
2582	5042	3861,5	2582	5042	3866,5	2582	5042	3856,5	2582	5042	3871,5	0,02	0,02	0,02
2582	5042	3856,5	2582	5042	3861,5	2582	5042	3851,5	2582	5042	3866,5	0,02	0,02	0,02
2582	5042	3851,5	2582	5042	3856,5	2582	5042	3846,5	2582	5042	3861,5	0,02	0,02	0,02
2582	5042	3846,5	2582	5042	3851,5	2582	5042	3841,5	2582	5042	3856,5	0,02	0,08	0,02
2582	5042	3901,5	2582	5042	3906,5	2582	5042	3896,5	2582	5042	3911,5	0,05	0,10	0,04
2582	5042	3881,5	2582	5042	3876,5	2582	5042	3886,5	2582	5042	3871,5	0,036	0,04	0,02
2582	5042	3876,5	2582	5042	3871,5	2582	5042	3881,5	2582	5042	3866,5	0,02	0,03	0,02
...

Το σύνολο των νέων δεδομένων που προέκυψε χωρίστηκε σε τρία υποσύνολα με τυχαίο τρόπο από το πρόγραμμα MATLAB. Το μέγεθος κάθε υποσυνόλου καθορίζεται από το χρήστη. Στην παρούσα εργασία, το 70% των δεδομένων χρησιμοποιήθηκε για το υποσύνολο της εκπαίδευσης (training set), το 15% για το υποσύνολο του ελέγχου της εκπαίδευσης (validation set) και το 15% για το υποσύνολο του ελέγχου της γενίκευσης (testing set) των ΤΝΔ.

2.4 Μεθοδολογία καθορισμού των βέλτιστων παραμέτρων δομής και εκπαίδευσης του ΤΝΔ

Ένα νευρωνικό δίκτυο αποτελείται από ένα πλήθος νευρώνων που συνδέονται μεταξύ τους, ενώ ο τρόπος με τον οποίο συνδέονται καθορίζει την αρχιτεκτονική του. Ο τρόπος διασύνδεσης και ο τύπος των νευρώνων (π.χ. το είδος της συνάρτησης ενεργοποίησης κτλ.) καθορίζονται κάθε φορά από τον τύπο του προβλήματος που καλείται το ΤΝΔ να επιλύσει. Επίσης, ένα ακόμα κρίσιμο σημείο είναι αν απαιτείται μετασχηματισμός

των δεδομένων, καθώς και το είδος του μετασχηματισμού. Επομένως, η ανάπτυξη ενός νευρωνικού δικτύου συνεπάγεται και την επιλογή πολλών παραμέτρων που το προσδιορίζουν. Ο προσδιορισμός της βέλτιστης δομής του ΤΝΔ αποτελεί το κυριότερο ζήτημα κατά τη διαδικασία ανάπτυξης ενός νευρωνικού δικτύου για την επίλυση ενός προβλήματος.

Όπως αναφέρθηκε και στην αρχή του κεφαλαίου, τα προτεινόμενα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα για την εκτίμηση των αποθεμάτων είναι τα πρόσθιας τροφοδότησης με οπισθοδιάδοση του σφάλματος (feedforward with backpropagation), αφού αποτελούν εργαλεία με μεγάλη προσαρμοστικότητα. Κάθε τέτοιο ΤΝΔ περιλαμβάνει ένα επίπεδο με νευρώνες (input layer) που προσλαμβάνει την είσοδο, ένα επίπεδο με τους νευρώνες εξόδου που δίδουν την τελική απόκριση του συστήματος (output layer), καθώς και τους νευρώνες που διατάσσονται στο κρυφό επίπεδο (hidden layers). Οι παράμετροι της δομής του ΤΝΔ που κρίθηκαν απαραίτητο να διερευνηθούν είναι ο αριθμός των νευρώνων στο επίπεδο εισόδου (καθορίζεται από τον αριθμό των γειτονικών δειγμάτων που θα χρησιμοποιηθούν), το μέγεθος του κρυφού επιπέδου (αριθμός νευρώνων στο εσωτερικό επίπεδο) και αν θα εφαρμοστεί μετασχηματισμός για τα δεδομένα της περιεκτικότητας. Η συνάρτηση ενεργοποίησης που χρησιμοποιήθηκε είναι η σιγμοειδής, αφού με βάση την βιβλιογραφική έρευνα (κεφ. 1.3) είναι η πλέον διαδεδομένη για τέτοια προβλήματα.

Το μέγεθος του κρυφού επιπέδου αντικατοπτρίζει την πολυπλοκότητα του προβλήματος που πρόκειται να επιλυθεί. Η δημιουργία ενός πολύπλοκου ΤΝΔ ελλοχεύει το κίνδυνο να προκύψουν καλά αποτελέσματα κατά την διαδικασία της εκπαίδευσης, αλλά κατά την γενίκευση τα αποτελέσματα να είναι ανακριβή. Από την άλλη πλευρά, εάν δημιουργηθεί ένα εξαιρετικά απλό ΤΝΔ μπορεί να μην ανταποκρίνεται στο πρόβλημα που καλείται να επιλύσει (αδυναμία κατανόησης). Αναφορικά με τον μετασχηματισμό των αρχικών δεδομένων, ο πιο ευρέως διαδεδομένος είναι ο λογαριθμικός για δεδομένα περιεκτικότητας κοιτασμάτων (κυρίως κοιτασμάτων Cu και Au). Αυτή η προεπεξεργασία (preprocessing) των δεδομένων είναι μια σημαντική διεργασία και εξυπηρετεί καλύτερα τη διαδικασία της μάθησης από το ΤΝΔ (Τεμπονέρας, 2018).

Αφού καθοριστεί η αρχιτεκτονική ενός ΤΝΔ, όσον αφορά τον τύπο τροφοδότησης και την εσωτερική του δομή, ακολουθεί η εκπαίδευση (training). Επιλέχθηκε η εκπαίδευση με επίβλεψη, όπου το νευρωνικό δίκτυο μαθαίνει να απεικονίζει δεδομένες εισόδους

σε εξόδους εκ των προτέρων γνωστές (σύνολο εκπαίδευσης), με απώτερο στόχο τη γενίκευση της αναγνώρισης αυτής και για παρεμφερείς εισόδους στο μέλλον (Γεωργούλη, 2015).

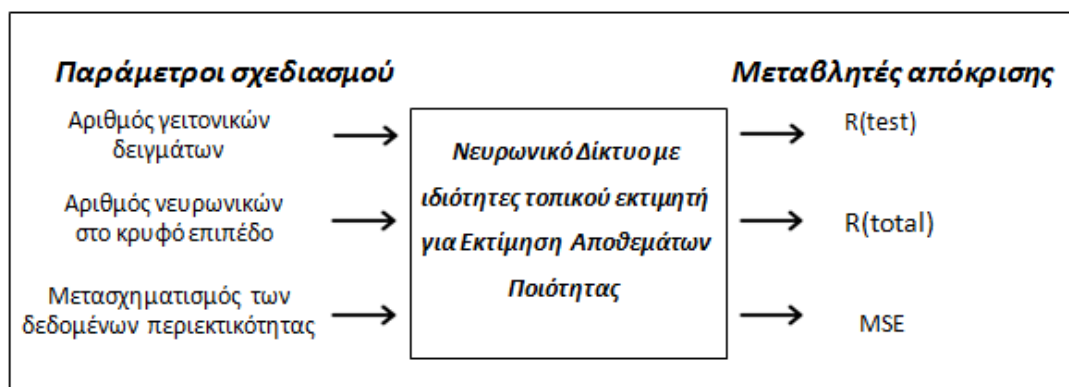
Ως μέτρα απόδοσης των ΤΝΔ που αναπτύχθηκαν ορίστηκαν ο συντελεστής συσχέτισης R των υπολογισμένων τιμών με τις πραγματικές και το μέσο τετραγωνικό σφάλμα ($MSE - \text{Mean Square Error}$).

Πιο συγκεκριμένα, επιλέχθηκαν ο συντελεστής συσχέτισης για τα δεδομένα ελέγχου της γενίκευσης $R(\text{test})$ και ο συνολικός συντελεστής συσχέτισης $R(\text{total})$, ενώ τέλος για την εκτίμηση του σφάλματος επιλέχθηκε το μέσο τετραγωνικό σφάλμα (MSE) για το σύνολο των δεδομένων ελέγχου γενίκευσης (testing set). Στόχος είναι η μεγιστοποίηση του $R(\text{test})$ και $R(\text{total})$, ενώ αντίθετα για το MSE η ελαχιστοποίηση του. Μεγαλύτερη έμφαση δόθηκε στο συντελεστή συσχέτισης $R(\text{test})$, αφού αποτελεί βασικό κριτήριο αν το ΤΝΔ έχει "κατανοήσει" το πρόβλημα που καλείται να επιλύσει. Ο συντελεστής συσχέτισης $R(\text{test})$ παρουσιάζει την συμπεριφορά του ΤΝΔ για τα άγνωστα δεδομένα που δεν έχουν χρησιμοποιηθεί κατά το στάδιο της εκπαίδευσης.

Για την εύρεση των βέλτιστων παραμέτρων δομής του ΤΝΔ πρέπει να ακολουθηθεί μια σειρά πολυάριθμων πειραμάτων (δοκιμών) και μέσω δοκιμής και σφάλματος υπολογίζονται οι βέλτιστες τιμές. Με στόχο την επιτάχυνση και αποτελεσματικότητα της διαδικασίας προτείνεται στην παρούσα εργασία μια μέθοδος καθορισμού των βέλτιστων τιμών παραμέτρων δομής του ΤΝΔ που βασίζεται στον παραγοντικό σχεδιασμό.

Ο παραγοντικός σχεδιασμός πειραμάτων είναι μια οργανωμένη και συστηματοποιημένη σχεδίαση, εκτέλεση και ανάλυση μιας σειράς πειραμάτων που έχει ως στόχο την επιλογή των βέλτιστων τιμών των ελεγχόμενων παραμέτρων μιας διαδικασίας (παράμετροι σχεδιασμού), έτσι ώστε το αποτέλεσμα (μεταβλητές απόκρισης) που θα προκύψει να προσεγγίζει όσο περισσότερο γίνεται τις επιθυμητές τιμές (Box and Drapper, 1987). Ο παραγοντικός σχεδιασμός συμβάλλει στη λήψη αξιόπιστων δεδομένων από τα πειράματα και στη μείωση του αριθμού των πειραμάτων που απαιτούνται (Santos and Ludermir, 1999). Η βελτιστοποίηση βασίζεται στην τεχνική των επιφανειών απόκρισης (response surface) (Myers, 1999).

Στο Σχήμα 2.5 δίνονται οι παράμετροι σχεδιασμού και οι μεταβλητές απόκρισης που επιλέχθηκαν να μελετηθούν για το "σύστημα" του ΤΝΔ που αναπτύχθηκε.



Σχήμα 2.5: Απεικόνιση των παραμέτρων σχεδιασμού και μεταβλητών απόκρισης με στόχο την δημιουργία νευρωνικού δικτύου για εκτίμηση αποθεμάτων ποιότητας.

Ως παράμετροι σχεδιασμού θεωρούνται ο αριθμός των γειτονικών δειγμάτων, το μέγεθος του κρυφού επιπέδου (αριθμός νευρώνων) και η εφαρμογή ή όχι μετασχηματισμού στα αρχικά δεδομένα της περιεκτικότητας. Οι δυο πρώτοι παράμετροι σχεδιασμού λαμβάνουν ακέραιες τιμές και μελετώνται σε k και l επίπεδα αντίστοιχα. Η τρίτη παράμετρος σχεδιασμού (εφαρμογή μετασχηματισμού) είναι δυαδική μεταβλητή και λαμβάνει την τιμή “ΝΑΙ” ή “ΟΧΙ” (2 επίπεδα). Ο αριθμός των συνδυασμών που προκύπτουν για ένα πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό είναι $2ml$. Για να περιοριστεί ο αριθμός των προκύπτοντων συνδυασμών, το πλήθος των επιπέδων που λαμβάνουν οι παράμετροι σχεδιασμού συνήθως κυμαίνεται από 3 έως 5. Οι παράμετροι σχεδιασμού και τα επίπεδα στα οποία εξετάστηκαν δίνονται στον Πίνακα 2.5.

Πίνακας 2.5:Παράμετροι σχεδιασμού και επίπεδα μελέτης τους.

Παράμετροι σχεδιασμού	Σύμβολο/τύπος	Επίπεδα
Αριθμός γειτονικών δειγμάτων	n , ακέραιος	n_1, n_2, \dots, n_k
Μέγεθος του κρυφού επιπέδου (αριθμός νευρώνων)	m , ακέραιος	m_1, m_2, \dots, m_l
Μετασχηματισμός των δεδομένων περιεκτικότητας	Δυαδική	ΝΑΙ, ΟΧΙ

Τέλος, δημιουργείται συγκεντρωτικός πίνακας στον οποίο καταχωρούνται όλοι οι δυνατοί συνδυασμοί των τιμών των παραμέτρων σχεδιασμού και των αποτελεσμάτων

(μεταβλητών απόκρισης) που εξάγονται από το TND. Με βάση τον πίνακα αυτόν γίνεται η ανάλυση των αποτελεσμάτων και η προσέγγιση της επιφάνειας απόκρισης με κατάλληλο μοντέλο παλινδρόμησης πρώτης και δεύτερης τάξης (Μίχου, 2017).

Η παλινδρόμηση είναι ένα στατιστικό εργαλείο για τη διερεύνηση των αλληλοεπιδράσεων μεταξύ των παραμέτρων σχεδιασμού. Το επίκεντρο του ενδιαφέροντος εστιάζεται στην μελέτη τουλάχιστον δυο μεταβλητών με σκοπό τον προσδιορισμό του τρόπου συσχέτισής τους. Ενώ όταν οι μεταβλητές που μελετώνται με απώτερο στόχο την πρόβλεψη μιας από αυτές μέσω των άλλων ονομάζεται ανάλυση παλινδρόμησης (regression analysis) (Κούτρας, 2011).

Η συμμετοχή τουλάχιστον δύο μεταβλητών σε μία ανάλυση παλινδρόμησης ονομάζεται πολλαπλή παλινδρόμηση (Multiple Regression Analysis). Ουσιαστικά, είναι η ταυτόχρονη εφαρμογή μετρήσεων για τρεις ή περισσότερες μεταβλητές από τις οποίες η μία θεωρούμε ότι είναι εξαρτημένη (μεταβλητή απόκρισης y) από τη δράση των λοιπών (παραμέτροι σχεδιασμού x) (Πετρίδης, 2015). Η προσέγγιση της βέλτιστης μεταβλητή απόκρισης γίνεται με το μοντέλο δεύτερης τάξης της μορφής:

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i>j}^k \sum_{j=1}^k \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \varepsilon \quad (9)$$

όπου:

y = μεταβλητή απόκρισης

$\beta_0, \beta_i, \beta_{ii}$ = συντελεστές παλινδρόμησης

β_{ij} = αλληλεπιδράσεις

ε = τυχαίο σφάλμα

Αφού ολοκληρωθεί η εύρεση τιμών των παραμέτρων, οι οποίες βελτιστοποιούν την κύρια μεταβλητή απόκρισης $R(\text{test})$ (μεγιστοποίηση), ολοκληρώνεται και η ανάλυση των αποτελεσμάτων του παραγοντικού σχεδιασμού. Για την υλοποίηση του παραγοντικού σχεδιασμού, που περιεγράφηκε παραπάνω, έγινε χρήση του λογισμικού Statgraphics 5.0 Plus (www.statgraphics.com).

Συνοπτικά τα βήματα εφαρμογής και τα σημεία τα οποία χρήζουν προσοχής κατά το σχεδιασμό και ανάλυση παραγοντικών σχεδίων, σύμφωνα με τους Wu και Hamada (2011) είναι:

1. Καθορισμός στόχου του παραγοντικού σχεδιασμού και κατ' επέκταση των σχεδιαζόμενων δοκιμών (πειράματα).
2. Επιλογή των κατάλληλων μεταβλητών απόκρισης (response variables). Αν απαιτείται ο καθορισμός περισσότερων της μιας μεταβλητής απόκρισης, τότε είναι σημαντικό να ιεραρχηθεί η σημασία κάθε μιας με απόδοση ενός συντελεστή βαρύτητας.
3. Επιλογή των παραμέτρων σχεδιασμού και των επιπέδων τους. Ο καθορισμός τους είναι πολύ σημαντικός αφού προσδιορίζει τον τύπο του παραγοντικού σχεδιασμού που θα χρησιμοποιηθεί και επίσης έχει άμεση επίδραση στο επιδιωκόμενο αποτέλεσμα. Οι παράμετροι σχεδιασμού μπορεί να είναι ποσοτικές (quantitative) ή ποιοτικές (qualitative) μεταβλητές.
4. Επιλογή του κατάλληλου τύπου παραγοντικού σχεδιασμού (πλήρης ή κλασματικός). Το βήμα αυτό είναι αρκετά κρίσιμο, αφού για παράδειγμα μια λάθος εκτίμηση και δημιουργία ενός ακατάλληλου τύπου παραγοντικού σχεδιασμού οδηγεί σε ελλιπή δεδομένα για τη μεταβλητή απόκρισης.
5. Δημιουργία του τυχαιοποιημένου πίνακα σχεδιασμού των δοκιμών (design matrix), υλοποίηση του παραγοντικού σχεδιασμού, συγκέντρωση και καταγραφή των αποτελεσμάτων στον πίνακα σχεδιασμού.
6. Ανάλυση των αποτελεσμάτων με βάση τον τύπο του παραγοντικού σχεδιασμού που έχει ακολουθηθεί.
7. Παρουσίαση των συμπερασμάτων και προτάσεων βελτίωσης έτσι ώστε να ικανοποιείται ο στόχος που ορίστηκε στο πρώτο βήμα και αποτελεί το κύριο ζητούμενο του παραγοντικού σχεδιασμού.

3 Υπολογισμός των αποθεμάτων και της ποιότητας κοιτασμάτων χαλκού με χρήση των ΤΝΔ

3.1 Περιγραφή του κοιτάσματος χαλκού

Τα δεδομένα γεωτρήσεων που χρησιμοποιούνται στην παρούσα εργασία έχουν ληφθεί από ένα τυπικό κοίτασμα χαλκού (Arizona_Cu). Το κοίτασμα που μελετήθηκε και έγινε χρήση των δεδομένων των γεωτρήσεων του είναι πορφυριτικού τύπου με διάσπαρτη μεταλλοφορία χαλκού. Περιγράφεται αναλυτικά στο σύγγραμμα «Open Pit Mine Planning & Design: CSMine software package» των Hustrulid and Kuchta, (2006). Το κοίτασμα Arizona_Cu βρίσκεται κοντά στην πολιτεία Αριζόνα και είναι σχετικά "φτωχό" καθώς έχει χαμηλές περιεκτικότητες χαλκού. Ο τρόπος που έγινε η δειγματοληψία και η διερεύνηση του κοιτάσματος είναι με κατακόρυφες γεωτρήσεις.

▪ Κοίτασμα Arizona_Cu

Το κοίτασμα Arizona_Cu είναι αρκετά μικρό σε έκταση και βρίσκεται μεταξύ των πόλεων Globe και Miami. Περικλείεται από ένα σύστημα τριών ρηγματογενών ζωνών (Drummond, Coronada και Sleeping Beauty). Το πάχος του εξαλλοιωμένου καλύμματος κυμαίνεται από 20 έως 115 ft και η περιεκτικότητά του σε χαλκό είναι μικρότερη από 0.1% (Hustrulid and Kuchta, 2006). Το κοίτασμα χαλκού καλύπτεται από ένα εξαλλοιωμένο ανώτερο τμήμα από χαλαζιακό μονζονίτη και πορφυριτικό γρανίτη. Το παχύτερο και πλουσιότερο τμήμα του κοιτάσματος εντοπίζεται εντός του χαλαζιακού μονζονίτη, ενώ το λεπτότερο στον πορφυριτικό γρανίτη (Hustrulid and Kuchta, 2006).

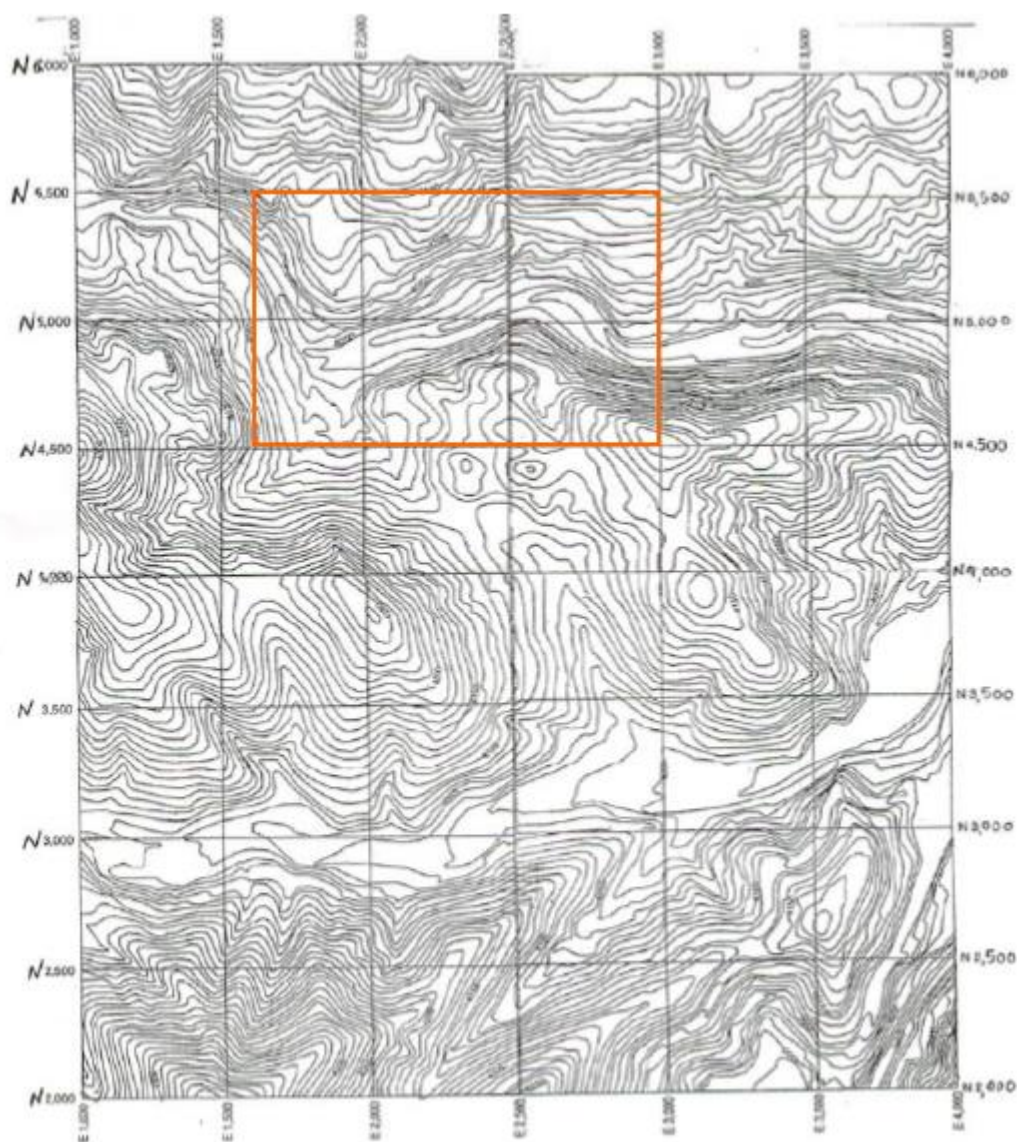
Τα βασικότερα ορυκτά που εντοπίζονται στο κοίτασμα Arizona_Cu είναι ο χαλαζίας, ο σιδηροπυρίτης, ο χαλκοπυρίτης και ο μολυβδαινίτης. Ο χαλκοσίτης και ο κοβελλίνης είναι τα επιγενετικά θειούχα ορυκτά του χαλκού στο κοίτασμα. Ο μαλαχίτης, ο αζουρίτης και το τικουάζ αποτελούν τα κυριότερα ορυκτά του χαλκού στο κάλυμμα της εξαλλοίωσης.

Η περιεκτικότητα του κοιτάσματος σε μολυβδαίνιο ανέρχεται σε 0.004%. Η μεταλλοφορία εντός του χαλαζιακού μονζονίτη απαντάται σε σύστημα διακλάσεων και ρηγμάτων από τα οποία άλλα είναι προγενέστερα και άλλα μεταγενέστερα της μεταλλογένεσης. Στα προγενέστερα συστήματα διακλάσεων και ρηγμάτων αναπτύσσονται φλέβες χαλαζία, σιδηροπυρίτη και χαλκοπυρίτη. Τα μεταγενέστερα

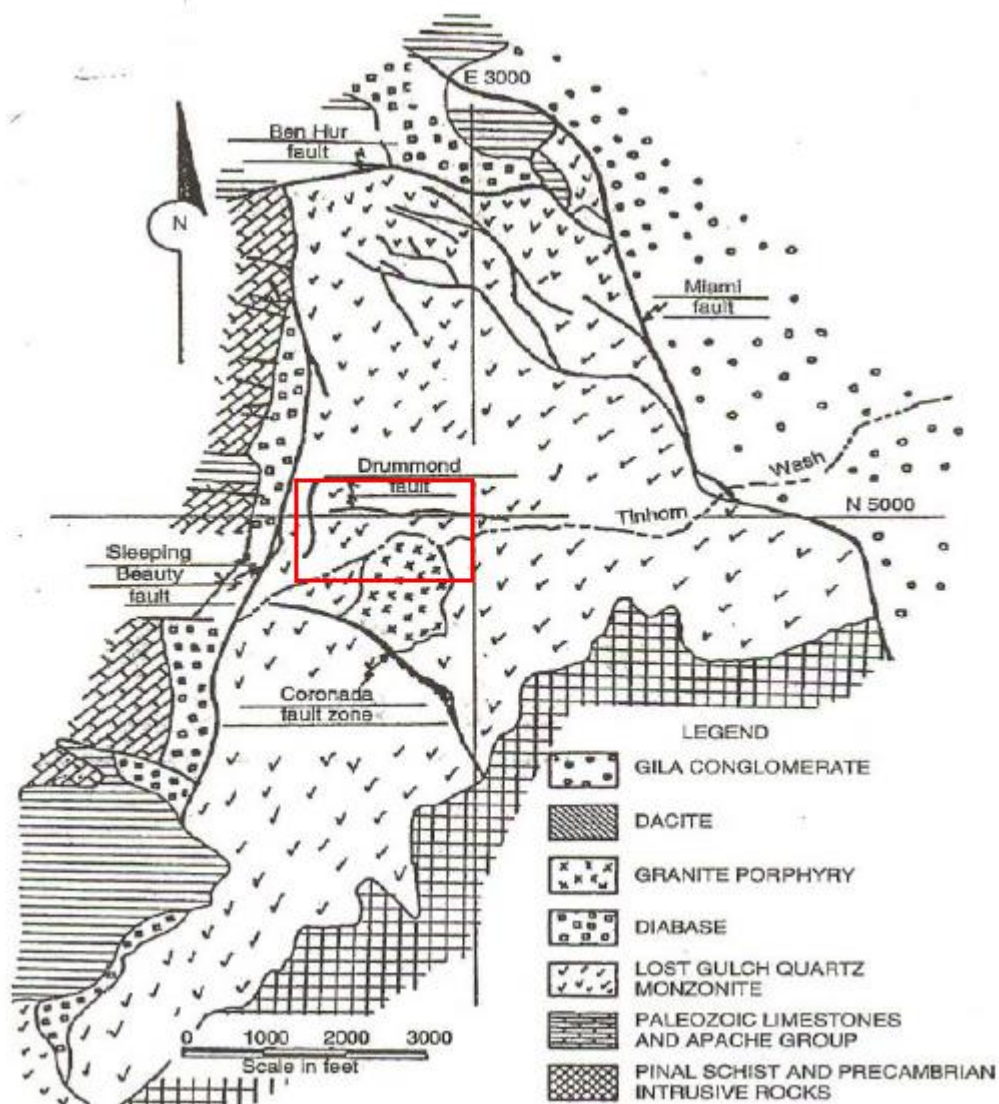
ρήγματα είναι εμφανή σε όλη την έκταση του κοιτάσματος αλλά δεν υπάρχει ένδειξη ότι έχουν επηρεάσει τη μεταλλοφορία δημιουργώντας δευτερογενείς ζώνες εξαλλοίωσης.

Η μεταλλοφορία μεταβάλλεται καθ' ύψος καθώς όλες σχεδόν οι ερευνητικές γεωτρήσεις δείχνουν μια μείωση της περιεκτικότητας σε Cu του κοιτάσματος καθώς απομακρυνόμαστε από την επαφή της ζώνης εξαλλοίωσης. Σε μικρό αριθμό γεωτρήσεων παρατηρήθηκαν αποκλίσεις από τη γενική αυτή τάση μείωσης της περιεκτικότητας σε Cu με το βάθος. Οι αποκλίσεις αυτές οφείλονται κυρίως στην τεκτονική του κοιτάσματος.

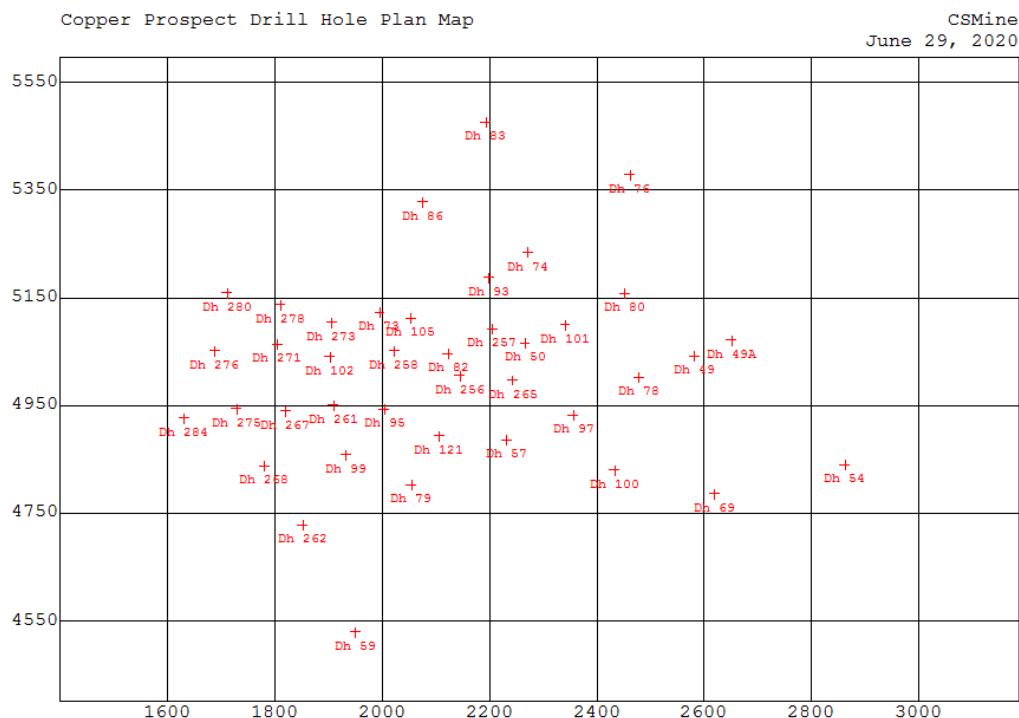
Στα Σχήματα 3.1 έως 3.3 δίνονται αντίστοιχα ο τοπογραφικός χάρτης της ευρύτερης περιοχής του κοιτάσματος, ο γεωλογικός χάρτης και ο χάρτης θέσεων των γεωτρήσεων.



Σχήμα 3.1: Τοπογραφικός χάρτης της ευρύτερης περιοχής εντός της οποίας βρίσκεται το κοίτασμα Arizona_Cu (κόκκινο ορθογώνιο). Οι διαστάσεις κατά τους άξονες X και Y είναι σε ft. (Hustrulid and Kuchta, 1998).



Σχήμα 3.2: Γεωλογικός χάρτης της ευρύτερης περιοχής του κοιτάσματος Arizona_Cu (διαστάσεις κατά τους άξονες X και Y σε ft) (Hustrulid and Kuchta, 2006).



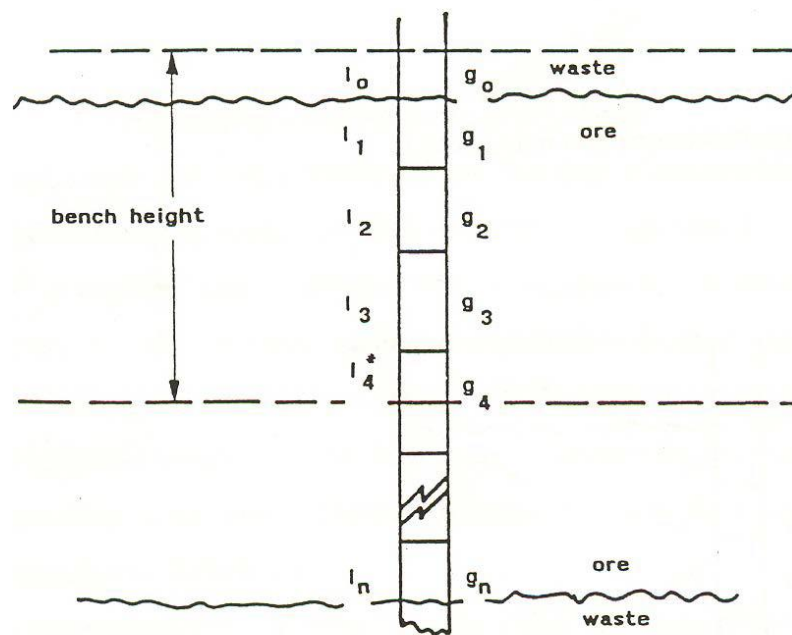
Σχήμα 3.3: Χάρτης θέσεων γεωτρήσεων για την έρευνα του κοιτάσματος Arizona_Cu (οι διαστάσεις κατά άξονες X και Y είναι ft).

3.2 Πρωτογενή στοιχεία γεωτρήσεων και δημιουργία σύνθετων δειγμάτων

Με στόχο τη δημιουργία σύνθετων δειγμάτων (composites) χρησιμοποιήθηκαν τα αναλυτικά στοιχεία των γεωτρήσεων από το κοιτάσμα χαλκού Arizona_Cu . Για να μπορέσουμε να δημιουργήσουμε το μοντέλο ενός κοιτάσματος, θα πρέπει τα δεδομένα για τα δείγματα των γεωτρήσεων να μετατραπούν σε ομαδοποιημένα ή σύνθετα δείγματα ίσου μήκους (Γαλετάκης, 2017). Η ενοποίηση των στοιχείων του κάθε κοιτάσματος οδήγησε στο υπολογισμό των σύνθετων δειγμάτων. Τα σύνθετα δείγματα επιλέγονται να έχουν κατάλληλο μήκος, ώστε να είναι συμβατά με τη σχεδιαζόμενη γεωμετρία του ορυχείου. Καθοριστική παράμετρος για τον υπολογισμό των σύνθετων δειγμάτων αποτελεί συνήθως το ύψος της βαθμίδας του ορυχείου. Επομένως, βασική προϋπόθεση αποτέλεσε ο προσδιορισμός του ύψους της βαθμίδας, έτσι ώστε να πραγματοποιηθεί σωστά ο υπολογισμός των σύνθετων δειγμάτων και να δημιουργηθεί

το μοντέλο του κάθε κοιτάσματος. Η διαδικασία πραγματοποιήθηκε με την βοήθεια του λογισμικού CSMine.

Στο Σχήμα 3.4 παρουσιάζεται αναλυτικά η τομή μιας γεώτρησης που έχει διατρέξει μια μεταλλοφόρο ζώνη. Εντός της ζώνης αυτής έχουν καταγραφεί από τους πυρήνες των γεωτρήσεων τα δείγματα με μήκη και περιεκτικότητες l_1, l_2, \dots, l_n και g_1, g_2, \dots, g_n αντίστοιχα (Γαλετάκης, 2017).



Σχήμα 3.4: Σχηματική τομή γεώτρησης που έχει διατρέξει μια μεταλλοφόρο ζώνη (Γαλετάκης, 2017).

Η μέση περιεκτικότητα g για τη γεώτρηση αυτή για όλο το πάχος της μεταλλοφόρου ζώνης υπολογίζεται από τον τύπο:

$$g = \frac{\sum l_i g_i}{\sum l_i} \quad (10)$$

Όπου:

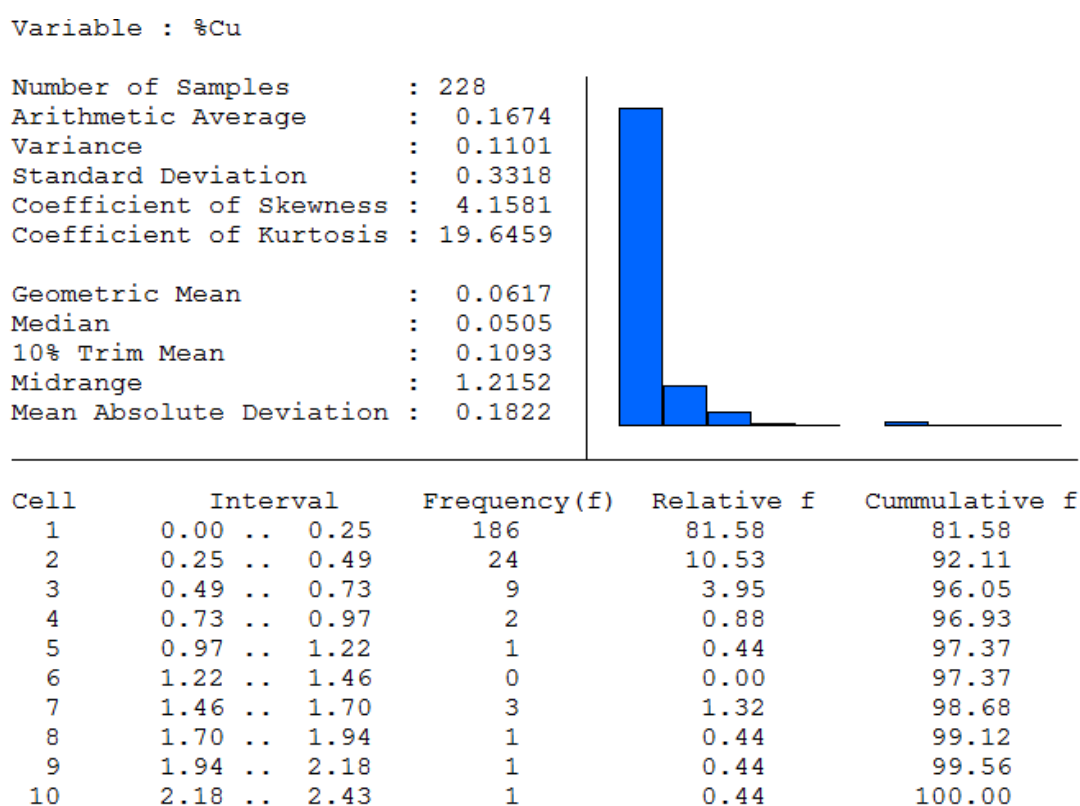
l_i =μήκος του δείγματος

g_i =περιεκτικότητα του δείγματος i

3.3 Στατιστική ανάλυση και υπολογισμός βαριογραμμάτων για τα σύνθετα δείγματα

Πραγματοποιήθηκε στατιστική ανάλυση των σύνθετων δειγμάτων του κοιτάσματος με την βοήθεια του λογισμικού CSMine. Αναλυτικά τα αποτελέσματα παρουσιάζονται παρακάτω.

Από το γράφημα του Σχήματος 3.5 παρατηρείται ότι οι περισσότερες τιμές των δειγμάτων συγκεντρώνονται στις χαμηλές περιεκτικότητας (186 τιμές με εύρος περιεκτικότητας 0.00-0.25 Cu%).



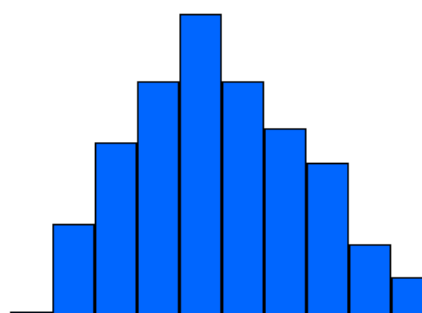
Σχήμα 3.5: Αποτελέσματα στατιστικής ανάλυσης της περιεκτικότητας σε Cu% των σύνθετων δειγμάτων για το κοιτάσμα Arizona_Cu.

Με σκοπό τη βελτίωση του διαγράμματος και την προσέγγιση της κανονικής κατανομής, εφαρμόστηκε ο σύνθετος λογαριθμικός μετασχηματισμός $y = \ln(x + \beta)$ στις αρχικές τιμές. Όπως φαίνεται και στο Σχήμα 3.6, μετά τον μετασχηματισμό οι τιμές των δειγμάτων προσεγγίζουν ικανοποιητικά την κανονική κατανομή.

Date : July 12, 2020
 File Name: C:\CSMine\Data_Files\Ariz_Cu\ArizCu.cmp
 Variable : Ln(%Cu), beta = -0.0060

Number of Samples : 224
 Arithmetic Average : -2.9697
 Variance : 2.3481
 Standard Deviation : 1.5324
 Coefficient of Skewness : 0.1993
 Coefficient of Kurtosis : -0.4896

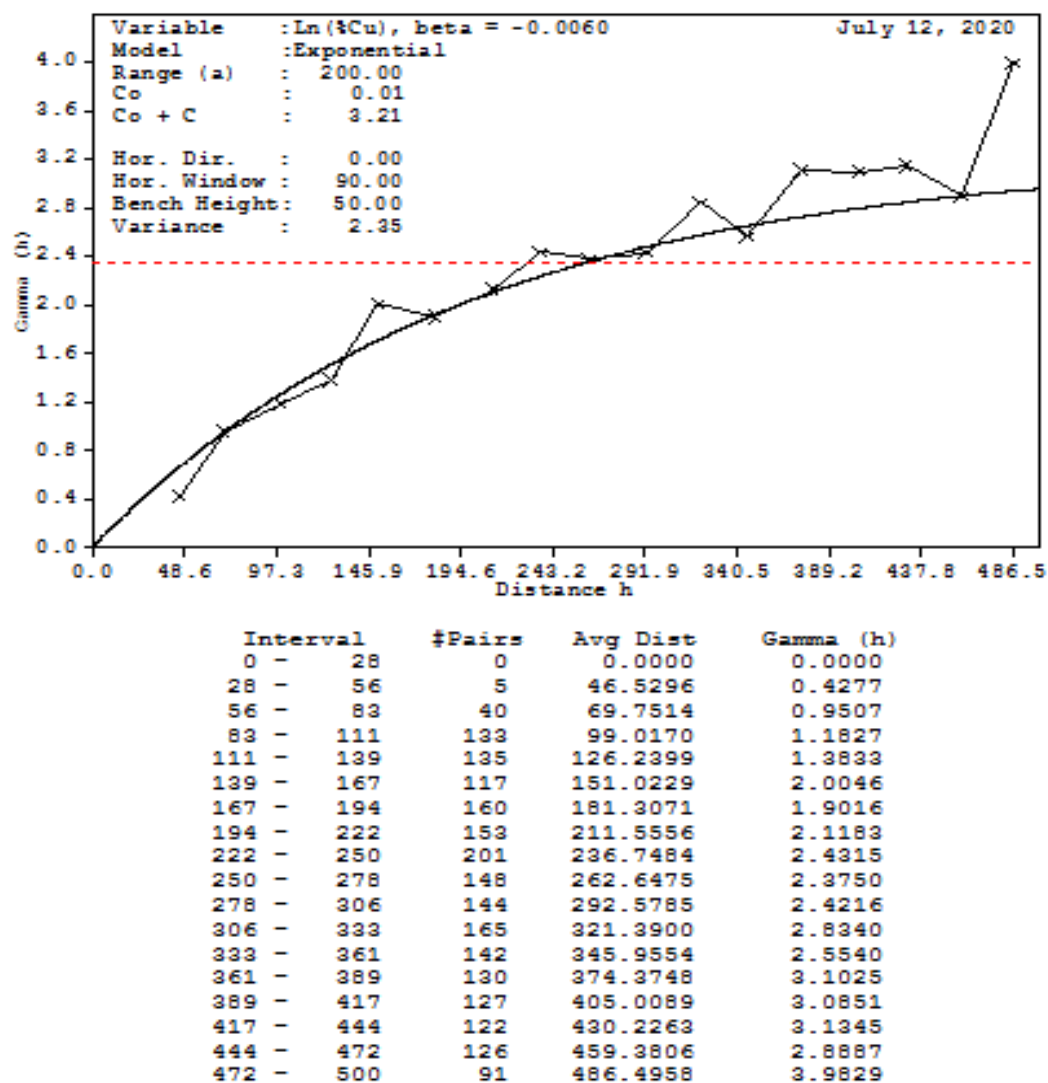
Geometric Mean : 0.0000
 Median : -3.0391
 10% Trim Mean : -2.9949
 Midrange : -2.9210
 Mean Absolute Deviation : 1.2569



Cell	Interval	Frequency (f)	Relative f	Cummulative f
1	-6.73 .. -5.96	1	0.45	0.45
2	-5.96 .. -5.20	14	6.25	6.70
3	-5.20 .. -4.44	26	11.61	18.30
4	-4.44 .. -3.68	35	15.63	33.93
5	-3.68 .. -2.92	45	20.09	54.02
6	-2.92 .. -2.16	35	15.63	69.64
7	-2.16 .. -1.40	28	12.50	82.14
8	-1.40 .. -0.64	23	10.27	92.41
9	-0.64 .. 0.12	11	4.91	97.32
10	0.12 .. 0.88	6	2.68	100.00

Σχήμα 3.6: Αποτελέσματα στατιστικής ανάλυσης έπειτα από την εφαρμογή του λογαριθμικού μετασχηματισμού της περιεκτικότητας σε Cu% των σύνθετων δειγμάτων.

Στο Σχήμα 3.7 παρουσιάζεται το πειραματικό συνολικό (πανκατευθυντικό) βαριόγραμμα των μετασχηματισμένων τιμών για την περιεκτικότητα σε Cu και το εκθετικό μοντέλο που προσαρμόστηκε. Η ανισοτροπία θεωρήθηκε μη σημαντική με βάση τα κατευθυντικά βαριογράμματα που κατασκευάστηκαν για τις 0°, 45°, 90° και 135°.



Σχήμα 3.7: Συνολικό βαριόγραμμα των λογαριθμισμένων τιμών των περιεκτικοτήτων Cu των σύνθετων δειγμάτων για το κοίτασμα Arizona_Cu (οι αποστάσεις είναι σε ft).

3.4 Ανάπτυξη και εκπαίδευση ΤΝΔ για τον υπολογισμό της περιεκτικότητας σε Cu

Αναπτύχθηκαν και εκπαιδεύτηκαν δυο τύποι νευρωνικών δικτύων πρόσθιας τροφοδότησης με οπισθοδιάδοση του σφάλματος με τη χρήση της εξειδικευμένης εργαλειοθήκης για νευρωνικά δίκτυα (Neural Networks toolbox) της Matlab. Και οι δυο περιπτώσεις των νευρωνικών δικτύων (ΤΝΔ_distance, ΤΝΔ_xyz) που αναπτύχθηκαν έχουν χαρακτηριστικά τοπικού εκτιμητή. Το σύνολο των δεδομένων που χρησιμοποιήθηκαν για την εκπαίδευση, τον έλεγχο της εκπαίδευσης και τον έλεγχο της γενίκευσης των δυο τύπων ΤΝΔ πάρθηκαν από το κοίτασμα χαλκού της Arizona. Βασικός στόχος της εκπαίδευσης ήταν ο υπολογισμός της περιεκτικότητας σε Cu για το κοίτασμα αυτό. Από αυτά το 70% των δειγμάτων χρησιμοποιήθηκε για την εκπαίδευση (training set), το 15% για τον έλεγχο της εκπαίδευσης (validation set) και το 15% για τον έλεγχο της γενίκευσης (testing set).

Για την εύρεση των βέλτιστων παραμέτρων που χρησιμοποιήθηκαν κατά την ανάπτυξη και την εκπαίδευση των ΤΝΔ μελετήθηκαν πολλοί συνδυασμοί και έγινε ο υπολογισμός των βέλτιστων τιμών των παραμέτρων δομής των ΤΝΔ με τη μεθοδολογία του παραγοντικού σχεδιασμού και των επιφανειών απόκρισης όπως αναλύθηκε στο κεφάλαιο 2. Η αρχιτεκτονική, η δομή καθώς και οι παράμετροι που επιλέχθηκαν για τα δυο ΤΝΔ αποτέλεσαν ένα καθοριστικό και εξαιρετικά σημαντικό βήμα.

3.5 Εύρεση των βέλτιστων τιμών των παραμέτρων του ΤΝΔ

Αρχικά επιλέχθηκαν τα επίπεδα μεταβολής των παραμέτρων του ΤΝΔ. Ως παράμετρος Α θεωρήθηκε ο αριθμός γειτονικών δειγμάτων που χρησιμοποιεί ως είσοδο το ΤΝΔ και επιλέχθηκαν 5 επίπεδα μεταβολής για την παράμετρο αυτή με τιμές: 3,5,10,15 και 20. Ως παράμετρος Β θεωρήθηκε το μέγεθος του κρυφού επιπέδου και επιλέχθηκαν επίσης 5 επίπεδα μεταβολής με τιμές: 10,20,30,40,50. Τέλος ως παράμετρος C θεωρήθηκε η εφαρμογή ή όχι μετασχηματισμού των περιεκτικοτήτων σε Cu των δειγμάτων με 2 επίπεδα μεταβολής (0=OXI, 1=NAI). Δημιουργήθηκαν όλοι οι δυνατοί

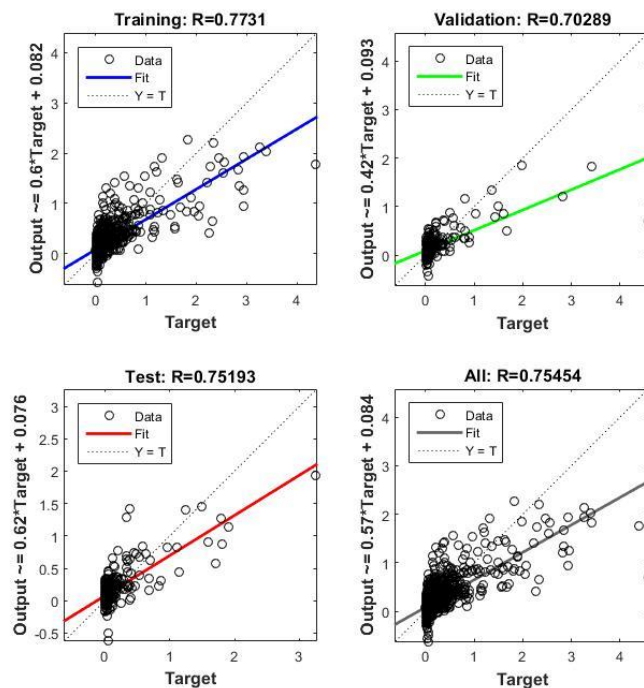
συνδυασμοί (πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός) που ανέρχονται $5 \times 5 \times 2 = 50$ και στη συνέχεια τυχαιοποιήθηκαν. Οι συνδυασμοί αυτοί δίνονται στον Πίνακα 3.1.

Για κάθε συνδυασμό αναπτύχθηκε το αντίστοιχο TNA_dist, εκπαιδεύτηκε και ελέγχθηκε με τα δεδομένα από το κοίτασμα Arizona. Για την ανάπτυξη, εκπαίδευση και έλεγχο των TNA χρησιμοποιήθηκε το εύχρηστο γραφικό περιβάλλον του Neural Networks Toolbox της Matlab. Τα βήματα που ακολουθήθηκαν για την ανάπτυξης αυτών των TNA ήταν:

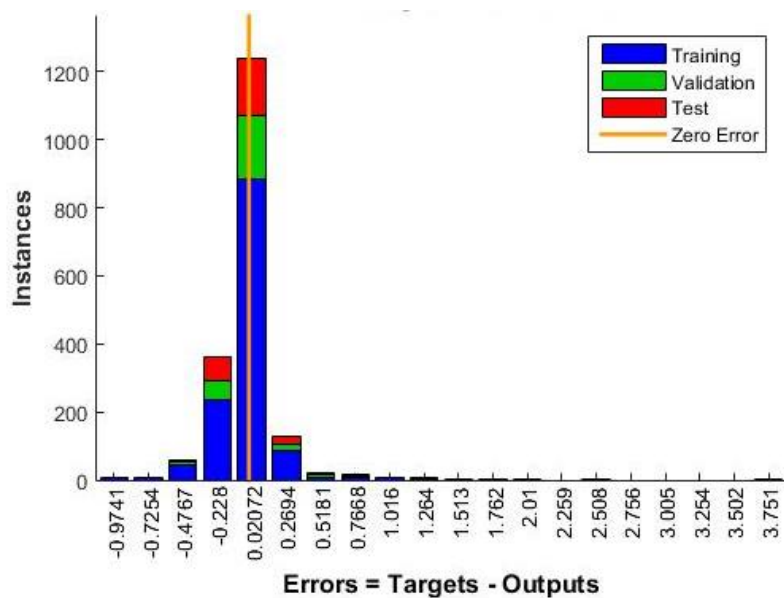
- Δημιουργία κατάλληλου TNA ορίζοντας αριθμό νευρώνων εισόδου, αριθμό νευρώνων εσωτερικού επιπέδου και έξοδο.
- Εκπαίδευση του TNA με τις τιμές του υποσυνόλου της εκπαίδευσης (training). Επιπλέον, σε αυτό το στάδιο έγινε η επιλογή εάν θα εφαρμοστεί ή όχι μετασχηματισμός των δεδομένων της περιεκτικότητας.
- Έλεγχος για να διερευνηθεί κατά πόσο έγιναν κατανοητά τα δεδομένα από το εκάστοτε TNA. Στο στάδιο ελέγχου του TNA υπολογίστηκε το μέσο τετραγωνικό σφάλμα και οι συντελεστές R για το υποσύνολο των δεδομένων του ελέγχου γενίκευσης (test) και για το σύνολο των δεδομένων (total). Οι τιμές αυτές δίνονται στον Πίνακα 3.1.

Στο Σχήμα 3.8 δίνεται ένα τυπικό παράδειγμα ανάπτυξης και ελέγχου του TNA της περίπτωσης No7 του Πίνακα 3.1. Αρχικά ορίστηκε ο αριθμός των γειτονικών δειγμάτων σε 5, το μέγεθος του κρυφού επιπέδου σε 20, ενώ δεν έγινε χρήση του λογαριθμικού μετασχηματισμού των δεδομένων της περιεκτικότητας. Οι τιμές του συντελεστή R για τα υποσύνολα των δεδομένων, εκπαίδευσης (training), ελέγχου της εκπαίδευσης (validation), ελέγχου της γενίκευσης (testing) και για το σύνολο (total) δίνονται στα αντίστοιχα διαγράμματα συσχέτισης. Επίσης υπολογίστηκε και το μέσο τετραγωνικό σφάλμα (MSE) και έγινε και ανάλυση της κατανομής των σφαλμάτων, όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.9. Το μέσο σφάλμα ήταν πολύ κοντά στο μηδέν, ενώ η κατανομή των σφαλμάτων εμφανίζεται συμμετρική γύρω από το μηδέν.

Ακολουθώντας την παραπάνω διαδικασία και για τις 50 περιπτώσεις που εξετάστηκαν, συμπληρώθηκε αναλυτικά ο Πίνακας 3.1 με τα αποτελέσματα από το TNA_distance με τα δεδομένα εκπαίδευσης από το κοίτασμα Arizona_Cu.



Σχήμα 3.8: Διαγράμματα συσχέτισης των τιμών των περιεκτικοτήτων (Cu%) για την περίπτωση No7 για τα δείγματα εκπαίδευσης (training), του ελέγχου της εκπαίδευσης (validation), του ελέγχου της γενίκευσης (testing) και του συνόλου των δειγμάτων (all).



Σχήμα 3.9: Κατανομή του σφάλματος εκτίμησης της περιεκτικότητας σε Cu% από το νευρωνικό δίκτυο της περίπτωσης No7. (Σφάλμα εκτίμησης = Πραγματική τιμή - Εκτιμηθείσα τιμή).

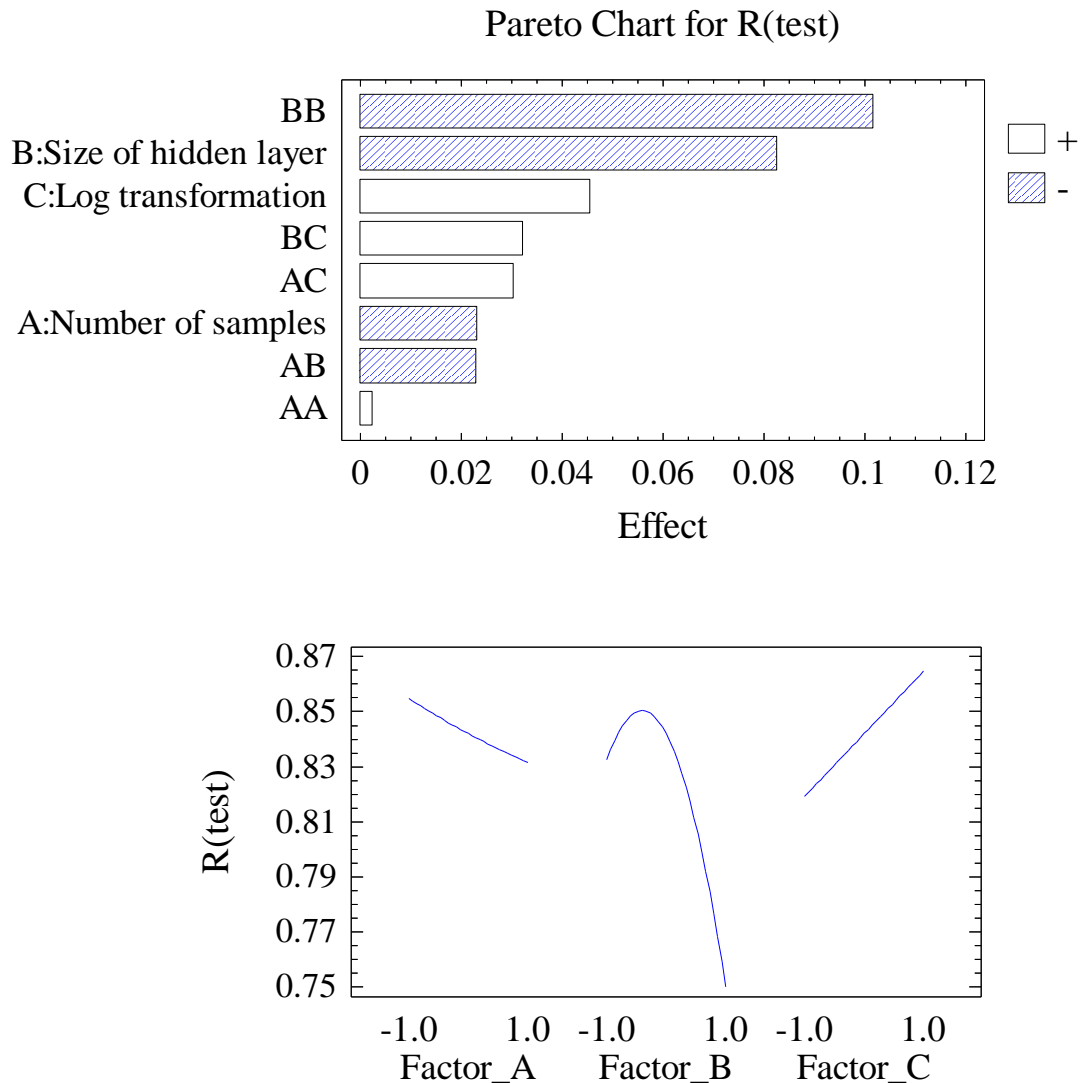
Πίνακας 3.1: Αποτελέσματα παραγοντικού σχεδιασμού για το TND_distance με δεδομένα εκπαίδευσης από το κοίτασμα Arizona_Cu.

No	Παράμετρος σχεδιασμού A	Παράμετρος σχεδιασμού B	Παράμετρος σχεδιασμού C	Μεταβλητές απόκρισης		
	Αριθμός γειτονικών δειγμάτων	Μέγεθος κρυφού επιπέδου	Μετασχηματισμός των δεδομένων περιεκτικότητας	R(test)	R(total)	MSE
1	5	10	NAI	0,915	0,910	0,028
2	20	20	NAI	0,904	0,904	0,037
3	15	10	OXI	0,901	0,918	0,023
4	20	40	NAI	0,894	0,916	0,030
5	3	20	NAI	0,916	0,903	0,027
6	3	40	NAI	0,843	0,910	0,074
7	5	20	OXI	0,793	0,903	0,050
8	5	50	NAI	0,594	0,829	0,157
9	3	10	OXI	0,892	0,913	0,030
10	10	10	OXI	0,855	0,935	0,043
11	20	20	OXI	0,803	0,883	0,075
12	20	50	NAI	0,780	0,898	0,122
13	10	40	NAI	0,830	0,912	0,087
14	3	40	OXI	0,845	0,912	0,053
15	15	50	NAI	0,875	0,893	0,048
16	5	20	NAI	0,806	0,906	0,064
17	10	40	OXI	0,807	0,913	0,044
18	20	30	OXI	0,796	0,915	0,036
19	15	20	OXI	0,813	0,839	0,076
20	3	50	NAI	0,866	0,897	0,055
21	5	10	OXI	0,659	0,921	0,008
22	10	30	OXI	0,881	0,915	0,032
23	3	50	OXI	0,606	0,859	0,136
24	5	30	OXI	0,894	0,925	0,024
25	5	40	NAI	0,924	0,909	0,023
26	15	30	OXI	0,872	0,902	0,047
27	20	40	OXI	0,569	0,897	0,097
28	20	50	OXI	0,657	0,796	0,157
29	5	40	OXI	0,901	0,921	0,039
30	10	10	NAI	0,707	0,907	0,078
31	5	50	OXI	0,752	0,882	0,100
32	10	20	OXI	0,788	0,925	0,082
33	10	50	NAI	0,776	0,902	0,070
34	20	10	NAI	0,874	0,844	0,031
35	3	30	NAI	0,948	0,911	0,948
36	15	40	OXI	0,687	0,892	0,085
37	15	30	NAI	0,773	0,910	0,078
38	10	50	OXI	0,754	0,916	0,072
39	10	30	NAI	0,903	0,937	0,014
40	20	30	NAI	0,805	0,907	0,064
41	20	10	OXI	0,844	0,881	0,030
42	15	40	NAI	0,899	0,899	0,026

43	5	30	NAI	0,714	0,869	0,111
44	15	20	NAI	0,859	0,907	0,043
45	3	10	NAI	0,819	0,896	0,069
46	10	20	NAI	0,869	0,909	0,034
47	15	50	OXI	0,797	0,894	0,055
48	3	30	OXI	0,820	0,897	0,100
49	15	10	NAI	0,906	0,896	0,016
50	3	20	OXI	0,876	0,895	0,046

Η ανάλυση των αποτελεσμάτων του παραγοντικού σχεδιασμού, που δίνονται στον Πίνακα 3.1, έγινε με το λογισμικό Statgraphics 5 Plus. Αρχικά υπολογίστηκαν οι επιδράσεις πρώτης και δεύτερης τάξης καθώς και οι αλληλεπιδράσεις των παραμέτρων σχεδιασμού A,B,C στις παραμέτρους απόκρισης R(test), R(total) και MSE.

Στο Σχήμα 3.10 δίνονται σε διάγραμμα Pareto οι επιδράσεις πρώτης τάξης (A,B,C), οι επιδράσεις δεύτερης τάξης (AA, BB, CC) καθώς και οι αλληλεπιδράσεις (AB, AC, BC) των παραμέτρων σχεδιασμού A,B,C στο συντελεστή R(test) που θεωρήθηκε ως η πλέον σημαντική μεταβλητή απόκρισης που δείχνει την ακρίβεια εκτίμησης του ΤΝΔ για δεδομένα εισόδου που δεν έχουν χρησιμοποιηθεί στην εκπαίδευση (ικανότητα γενίκευσης της γνώσης). Ως επίδραση (effect) ενός παράγοντα σχεδιασμού στο R θεωρείται η μεταβολή του R όταν ο παράγοντας μεταβάλλεται από το χαμηλό στο υψηλό επίπεδο. Καθώς ο αριθμός των γειτονικών δειγμάτων (factor A) αυξάνεται παρατηρείται μείωση του συντελεστή R(test), δηλαδή έχει αρνητική επίδραση. Η αύξηση του μεγέθους του κρυφού επιπέδου (factor B) πέραν ενός ορίου μειώνει επίσης το συντελεστή R(test). Τέλος, η επίδραση της εφαρμογής του λογαριθμικού μετασχηματισμού στο συντελεστή R(test) είναι θετική αφού η εφαρμογή του οδήγησε στην αύξησή του. Συνοπτικά, παρατηρείται ότι η βελτίωση του συντελεστή συσχέτισης R(test), προέρχεται κυρίως από την εφαρμογή του λογαριθμικού μετασχηματισμού, ενώ η αύξηση του αριθμού των γειτονικών δειγμάτων και του μεγέθους του κρυφού επιπέδου πέραν ενός ορίου έχει αρνητική επίδραση.



Σχήμα 3.10. Επάνω: Επίδραση (effect) των παραμέτρων σχεδιασμού στο συντελεστή συσχέτισης $R(\text{test})$. Κάτω: Μεταβολή του $R(\text{test})$ όταν οι παράμετροι σχεδιασμού μεταβάλλεται από το χαμηλό στο υψηλό επίπεδο.

Ομοίως υπολογίστηκαν οι επιδράσεις πρώτης τάξης (A,B,C), οι επιδράσεις δεύτερης τάξης (AA, BB, CC) καθώς και οι αλληλεπιδράσεις (AB, AC, BC) των παραμέτρων σχεδιασμού A,B,C στο συντελεστή $R(\text{total})$ και στο MSE και κατασκευάστηκαν τα αντίστοιχα διαγράμματα Pareto και τα διαγράμματα μεταβολής. Παρατηρήθηκε ότι η αύξηση του αριθμού των γειτονικών δειγμάτων και των νευρώνων του εσωτερικού επιπέδου έως ενός ορίου οδηγεί σε αύξηση του συντελεστής $R(\text{total})$, ενώ αύξηση πέραν αυτού του ορίου οδηγεί σε μείωση του. Τέλος η εφαρμογή του λογαριθμικού μετασχηματισμού οδήγησε σε αύξηση του συντελεστή $R(\text{total})$. Οι επιδράσεις των

παραγόντων σχεδιασμού στο MSE είναι αντίστοιχες με εκείνων στο R(total) αλλά με αντίθετο πρόσημο.

Από την μελέτη των αποτελεσμάτων του παραγοντικού σχεδιασμού προέκυψε ότι οι μεταβλητές απόκρισης που εξετάστηκαν, R(test), R(total), MSE παρουσιάζουν μη γραμμική εξάρτηση με τους παράγοντες σχεδιασμού και κατά συνέπεια τα πλέον κατάλληλα μοντέλα για την κατασκευή των επιφανειών απόκρισης και την εύρεση των βέλτιστων τιμών είναι τα μοντέλα παλινδρόμησης δευτέρου βαθμού της μορφής:

$$y_i = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1^2 + a_5x_1x_2 + a_6x_1x_3 + a_7x_2^2 + a_8x_2x_3 + a_9x_3^2 \quad (11)$$

όπου:

y_i είναι το R(test) ή R(total) ή MSE και

x_1 = αριθμός γειτονικών δειγμάτων,

x_2 = μέγεθος του κρυφού επιπέδου,

x_3 = μετασχηματισμός των δεδομένων

Οι συντελεστές a_i που υπολογίστηκαν και δίνονται στον Πίνακα 3.3.

Πίνακας 3.2: Συντελεστές μοντέλων παλινδρόμησης 2ου βαθμού.

Συντελεστές	R(test)	R(total)	MSE
α_0	0,842	0,916	0,227
α_1	-0,011	-0,006	-0,031
α_2	-0,041	-0,008	0,050
α_3	0,022	0,001	0,010
α_4	0,001	-0,017	0,067
α_5	-0,011	0,006	0,004
α_6	0,015	0,001	-0,042
α_7	-0,050	-0,018	-0,025
α_8	0,016	0,001	-0,011

Με βάση τα πολυωνυμικά μοντέλα που υπολογίστηκαν για $R(\text{test})$, $R(\text{total})$ και MSE έγινε το προσδιορισμός των βέλτιστων τιμών των παραμέτρων σχεδιασμού, που παρουσιάζονται στους Πίνακες 3.4, 3.5 και 3.6.

Πίνακας 3.3: Αποτελέσματα βελτιστοποίησης με στόχο την μεγιστοποίηση του $R(\text{test})$.

Παράγοντας	Χαμηλή τιμή	Υψηλή τιμή	Βέλτιστη τιμή
Αριθμός γειτονικών δειγμάτων	3	20	3
Μέγεθος του κρυφού επιπέδου	10	50	20
Μετασχηματισμός των δεδομένων περιεκτικότητας	OXI	NAI	NAI

Πίνακας 3.4 Αποτελέσματα βελτιστοποίησης με στόχο την μεγιστοποίηση του $R(\text{total})$.

Παράγοντας	Χαμηλή τιμή	Υψηλή τιμή	Βέλτιστη τιμή
Αριθμός γειτονικών δειγμάτων	3	20	5
Μέγεθος του κρυφού επιπέδου	10	50	20
Μετασχηματισμός των δεδομένων περιεκτικότητας	OXI	NAI	NAI

Πίνακας 3.5: Αποτελέσματα βελτιστοποίησης με στόχο την ελαχιστοποίηση του σφάλματος.

Παράγοντας	Χαμηλή τιμή	Υψηλή τιμή	Βέλτιστη τιμή
Αριθμός γειτονικών δειγμάτων	3	20	5
Μέγεθος του κρυφού επιπέδου	10	50	10
Μετασχηματισμός των δεδομένων περιεκτικότητας	OXI	NAI	NAI

Τέλος έγινε προσδιορισμός των βέλτιστων τιμών των παραγόντων σχεδιασμού με συνδυασμό πολλαπλών στόχων. Χρησιμοποιήθηκε η διαδικασία βελτιστοποίησης που υποστηρίζει το λογισμικό Statgraphics που στηρίζεται στις συναρτήσεις επιθυμητής τιμής (Desirability functions). Έτσι για την ταυτόχρονη βελτιστοποίηση περισσότερων μεταβλητών απόκρισης y_i κατασκευάζεται μια νέα μεταβλητή z που συνδυάζει όλες τις προς βελτιστοποίηση μεταβλητές απόκρισης y_i λαμβάνοντας υπόψη την βαρύτητα κάθε μεταβλητής στο επιδιωκόμενο αποτέλεσμα. Για την κατασκευή της μεταβλητής z απαιτείται να μετασχηματιστούν κατάλληλα οι τιμές των y_i σε νέες z_i που λαμβάνουν τιμές εντός του διαστήματος $[0, 1]$, έτσι ώστε η τιμή 1 να εκφράζει πάντοτε την επιθυμητή τιμή (Harrington 1965, Derringer and Suich 1980).

Στον Πίνακα 3.7 δίνονται τα αποτελέσματα της βελτιστοποίησης αυτής στην οποία δόθηκε μεγαλύτερη βαρύτητα στο $R(\text{test})$. Το βέλτιστο ΤΝΔ είναι ένα σχετικά απλό, αφού χρησιμοποιεί μικρό αριθμό (3) γειτονικών δειγμάτων ως είσοδο και το μέγεθος του κρυφού επιπέδου του είναι 10.

Πίνακας 3.6: Βέλτιστες τιμές των παραμέτρων σχεδιασμού.

Βέλτιστες τιμές παραμέτρων σχεδιασμού		Στόχοι βελτιστοποίησης μεταβλητών απόκρισης
Αριθμός γειτονικών δειγμάτων	3	$R(\text{test})$ (μεγιστοποίηση)
Μέγεθος του κρυφού επιπέδου	10	$R(\text{total})$ (μεγιστοποίηση)
Μετασχηματισμός των δεδομένων περιεκτικότητας	NAI	MSE (ελαχιστοποίηση)

Η παραπάνω διαδικασία βελτιστοποίησης επαναλήφθηκε και για το ΤΝΔ_{xyz}, αλλά το βέλτιστο νευρωνικό δίκτυο που υπολογίστηκε ήταν σημαντικά πιο πολύπλοκο από το αντίστοιχο ΤΝΔ_{distance} χωρίς να δίνει μεγαλύτερη ακρίβεια εκτίμησης (με βάση τις τιμές των $R(\text{test})$, $R(\text{total})$ και MSE). Έτσι στη συνέχεια για τον υπολογισμό των αποθεμάτων χρησιμοποιήθηκε το ΤΝΔ_{distance}.

4 Υπολογισμός αποθεμάτων και ποιότητας και σύγκριση με εκείνα που προκύπτουν με τη μέθοδο Kriging

Με στόχο τον υπολογισμό αποθεμάτων και ποιότητας του κοιτάσματος Arizona, και τη σύγκριση των αποτελεσμάτων που επιτυγχάνουν τα ΤΝΔ αναπτύχθηκαν τρεις εναλλακτικές εκδοχές ΤΝΔ. Στην πρώτη περίπτωση αναπτύχθηκε ένα απλό νευρωνικό δίκτυο που βασίζεται στις συντεταγμένες X, Y, Z και στην περιεκτικότητα g ενός δείγματος χωρίς να χρησιμοποιεί πληροφορίες από γειτονικά δείγματα. Για την εκπαίδευση και τον έλεγχο του χρησιμοποιήθηκαν όλα τα σύνθετα δείγματα των γεωτρήσεων. Κύριο χαρακτηριστικό αυτού του νευρωνικού δικτύου είναι ότι λειτουργεί ως γενικός εκτιμητής (Οικονομίδου, 2018). Στην δεύτερη περίπτωση έγινε χρήση του βέλτιστου νευρωνικού δικτύου $TND_distance$, το οποίο χρησιμοποιεί ως δεδομένα εισόδου τις συντεταγμένες X, Y, Z του εξεταζόμενου δείγματος, τις αποστάσεις d_i και τις περιεκτικότητες g_i των 3 γειτονικών δειγμάτων, ενώ ως έξοδο την περιεκτικότητα g του δείγματος σε χρήσιμο συστατικό (%Cu). Τέλος, στην τρίτη περίπτωση, αναπτύχθηκε ένα νέο σύνολο τροποποιημένων δεδομένων εκπαίδευσης για το $TND_distance$. Το νέο σύνολο των δεδομένων εκπαίδευσης τροποποιήθηκε κατάλληλα ώστε να δίνεται μεγαλύτερη βαρύτητα κατά την εκπαίδευση στα δείγματα με υψηλή περιεκτικότητα σε Cu που έχουν πολύ μικρή συχνότητα εμφάνισης. Πιο συγκεκριμένα τα σύνθετα δείγματα με $Cu\% > 0.3$ επαναλαμβάνονταν στους κύκλους εκπαίδευσης του ΤΝΔ περισσότερες φορές από τα δείγματα με μικρότερη περιεκτικότητα. Η τεχνική αυτή έχει αποδειχθεί ότι είναι αποτελεσματική σε περιπτώσεις όπου τα υψηλής περιεκτικότητας δείγματα είναι σπάνια (Galetakis et al., 2018).

Για την εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων έγινε χρήση των 410 σύνθετων δειγμάτων του κοιτάσματος Arizona. Το σύνολο των δεδομένων χωρίστηκε σε τρία υποσύνολα με τυχαίο τρόπο. Το 70% των δεδομένων χρησιμοποιήθηκε για το υποσύνολο της εκπαίδευσης, το 15% για το υποσύνολο του ελέγχου της εκπαίδευσης και το 15% για υποσύνολο του ελέγχου της γενίκευσης.

Για τον υπολογισμό της ποιότητας και των αποθεμάτων του κοιτάσματος χαλκού Arizona το κοίτασμα διαιρέθηκε σε στοιχειώδους όγκους (blocks) διαστάσεων

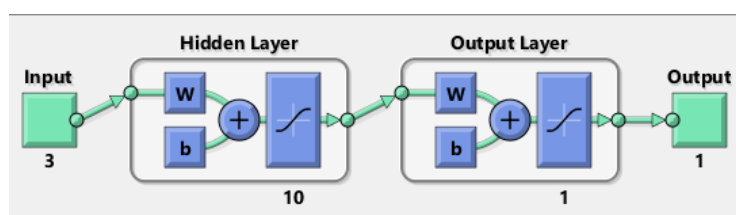
$\Delta X=50\text{ft}$, $\Delta Y=50\text{ft}$ και $\Delta Z=25\text{ft}$. Θεωρήθηκε ότι το κοίτασμα θα υποστεί υπαίθρια εκμετάλλευση με ύψος βαθμίδας 25ft ίσο με το ύψος ΔZ του block.

Επιπλέον έγινε εκπαίδευση των ΤΝΔ και με τα σύνθετα δείγματα του κοιτάσματος Arizona που αντιστοιχούν σε τρεις γειτονικές βαθμίδες εκμετάλλευσης με υψόμετρα 3925, 3950 και 3975 ft αντίστοιχα. Η επιλογή αυτή έγινε προκειμένου να γίνει υπολογισμός αποθεμάτων για τη βαθμίδα 3950 τόσο με τα ΤΝΔ όσο και με τη μέθοδο Krigging, που χρησιμοποιεί το λογισμικό CSMine, και να συγκριθούν τα αποτελέσματα.

Ο σκοπός δεν ήταν η λεπτομερής – ακριβής σύγκριση με την μέθοδο Krigging και για τον λόγο αυτό η μέθοδος Krigging δεν διερευνήθηκε διεξοδικά. Παρουσιάστηκαν ενδεικτικά οι τιμές που προέκυψαν για τα αποθέματα και την ποιότητα με τη χρήση της μεθόδου Ordinary Kriging για τις λογαριθμισμένες τιμές της περιεκτικότητας. Οι παράμετροι της μεθόδου Kriging βασίστηκαν στο συνολικό βαριόγραμμα που κατασκευάστηκε (Σχήμα 3.7), ως ακτίνα αναζήτησης χρησιμοποιήθηκαν τα 200ft και ως μέγιστος αριθμός δειγμάτων εντός της περιοχής αναζήτησης το 5.

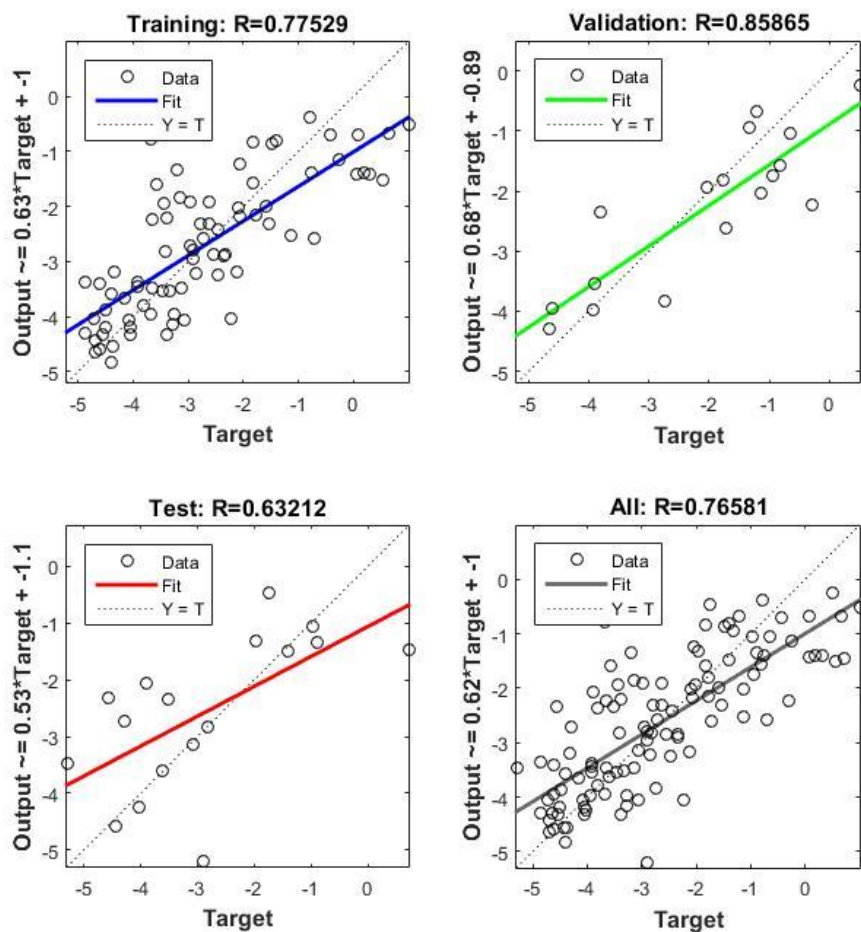
4.1 Απλό νευρωνικό δίκτυο

Στο Σχήμα 4.1 παρουσιάζεται η δομή του απλού νευρωνικού δικτύου, που χρησιμοποιεί ως δεδομένα εισόδου τις συντεταγμένες X,Y,Z κάθε δείγματος και ως δεδομένα εξόδου την περιεκτικότητα σε %Cu.



Σχήμα 4.1: Δομή νευρωνικού δικτύου.

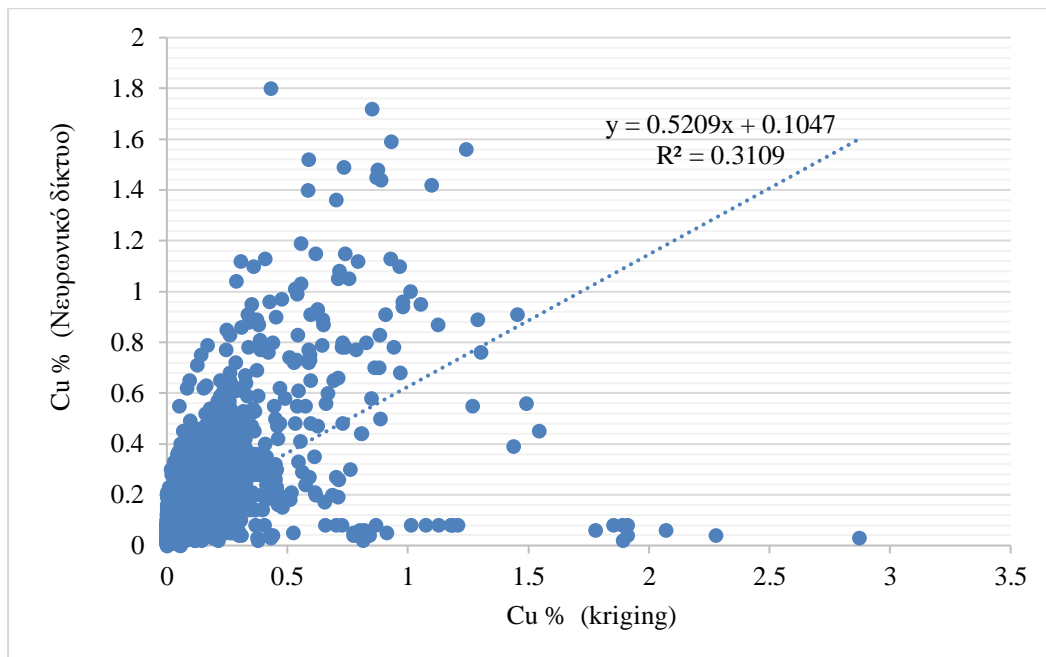
Στο Σχήμα 4.2 παρουσιάζονται οι συντελεστές συσχέτισης R που προέκυψαν έπειτα από την εκπαίδευση του απλού νευρωνικού δικτύου. Ο συντελεστής συσχέτισης R μεταξύ των πραγματικών και των υπολογισμένων τιμών για τον έλεγχο της γενίκευσης είναι $R(\text{test})=0.63$.



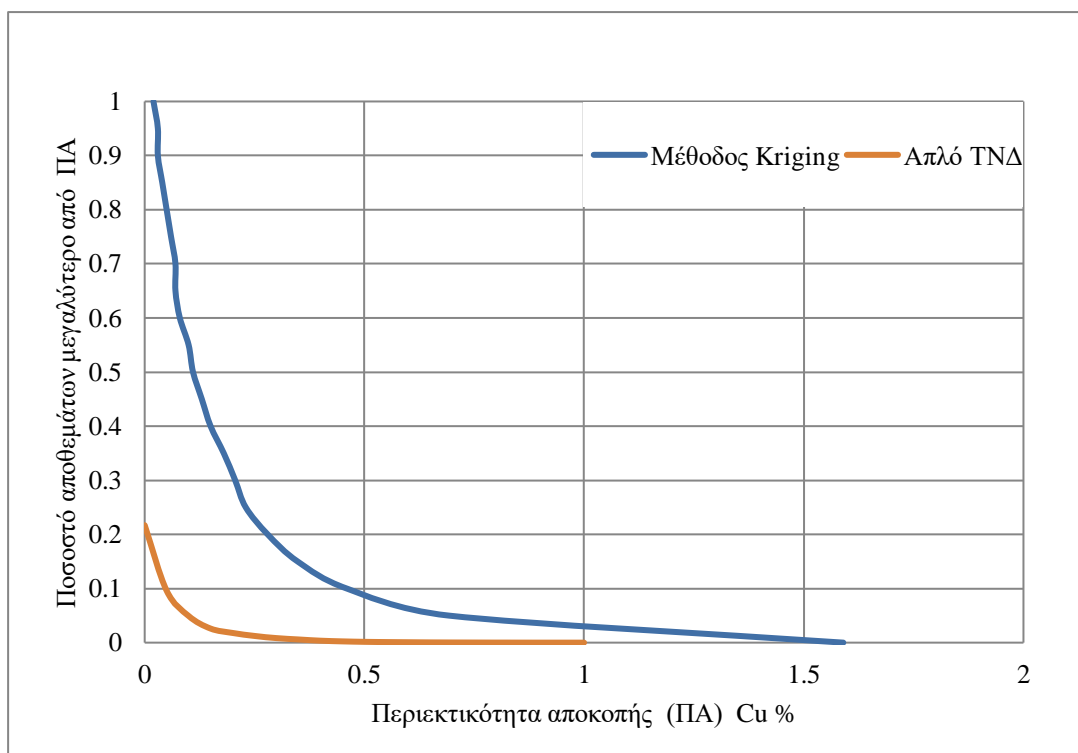
Σχήμα 4.2: Συσχέτιση των τιμών των περιεκτικοτήτων (Cu%) στο απλό νευρωνικό δίκτυο για τα δείγματα εκπαίδευσης (training), του ελέγχου της εκπαίδευσης (validation), του ελέγχου της γενίκευσης (testing) του για το σύνολο των δειγμάτων (all).

Η σύγκριση των εκτιμήσεων της περιεκτικότητας σε Cu % των μπλόκς του απλού νευρωνικού δικτύου με εκείνα της μεθόδου Kriging φαίνεται στο σχήμα 4.3. Όπως φαίνεται η συσχέτιση είναι ασθενής ιδιαίτερα στις υψηλές τιμές περιεκτικοτήτων.

Όσον αφορά την εκτίμηση των αποθεμάτων για την βαθμίδα 3950, οι καμπύλες αποθεμάτων – ποιότητας που προέκυψαν (Σχήμα 4.4) δείχνουν ότι το ΤΝΔ νευρωνικών δικτύων υποεκτιμά σημαντικά τα αποθέματα σε σχέση με την μέθοδο Kriging.



Σχήμα 4.3: Διάγραμμα συσχέτισης περιεκτικότητας Cu% που εκτιμήθηκαν με την εφαρμογή του απλού ΤΝΔ δικτύου με εκείνων της μεθόδου Kriging.

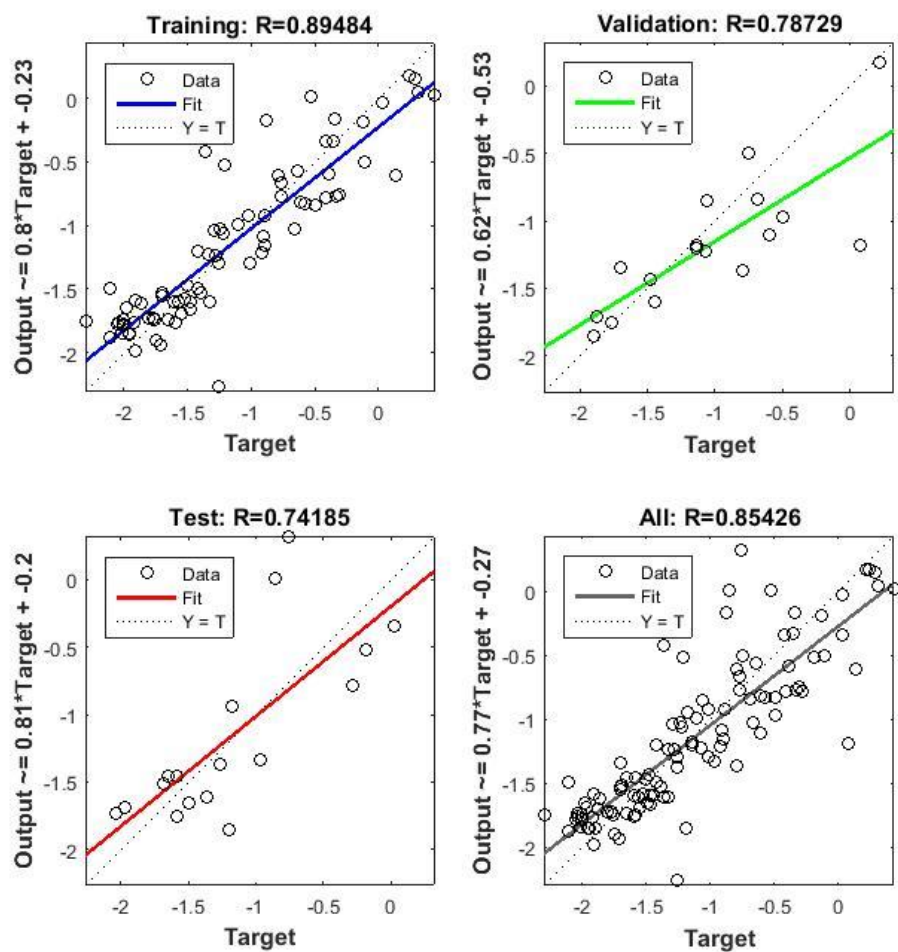


Σχήμα 4.4: Καμπύλη αποθεμάτων ποιότητας με βάση τα νευρωνικά δίκτυα και τη μέθοδο Kriging.

4.2 Νευρωνικό δίκτυο με χαρακτηριστικά τοπικού εκτιμητή.

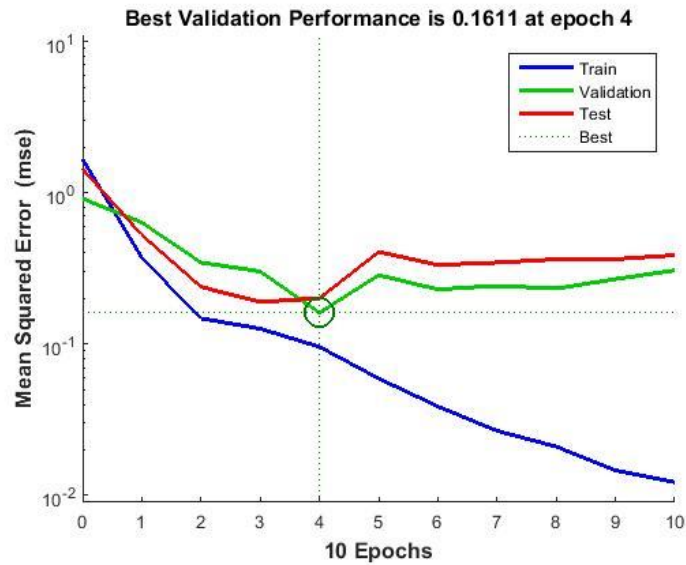
Για την επίλυση των προβλημάτων που προέκυψαν από τη χρήση του απλού νευρωνικού δικτύου, χρησιμοποιήθηκε το τεχνητό νευρωνικό δίκτυο TNΔ_distance που έχει χαρακτηριστικά τοπικού εκτιμητή. Κατά το στάδιο της εκπαίδευσης χρησιμοποιήθηκαν ως δεδομένα εισόδου οι συντεταγμένες X, Y, Z του εξεταζόμενου δείγματος, οι αποστάσεις d_i και οι περιεκτικότητες g_i των 3 γειτονικών δειγμάτων, ενώ ως έξοδο η περιεκτικότητα g του δείγματος σε χρήσιμο συστατικό (%Cu).

Στο Σχήμα 4.5 παρουσιάζονται οι συντελεστές συσχέτισης R που προέκυψαν έπειτα από την εκπαίδευση του τεχνητού νευρωνικού δικτύου TNΔ_distance. Ο συντελεστής συσχέτισης R μεταξύ των πραγματικών και των υπολογισμένων τιμών για τον έλεγχο της γενίκευσης είναι $R(\text{test})=0.74$. Επομένως, παρατηρείται μια βελτίωση των τιμών των συντελεστών συσχέτισης και ειδικότερα του $R(\text{test})$, ο οποίος θεωρείται και ο πιο σημαντικός.



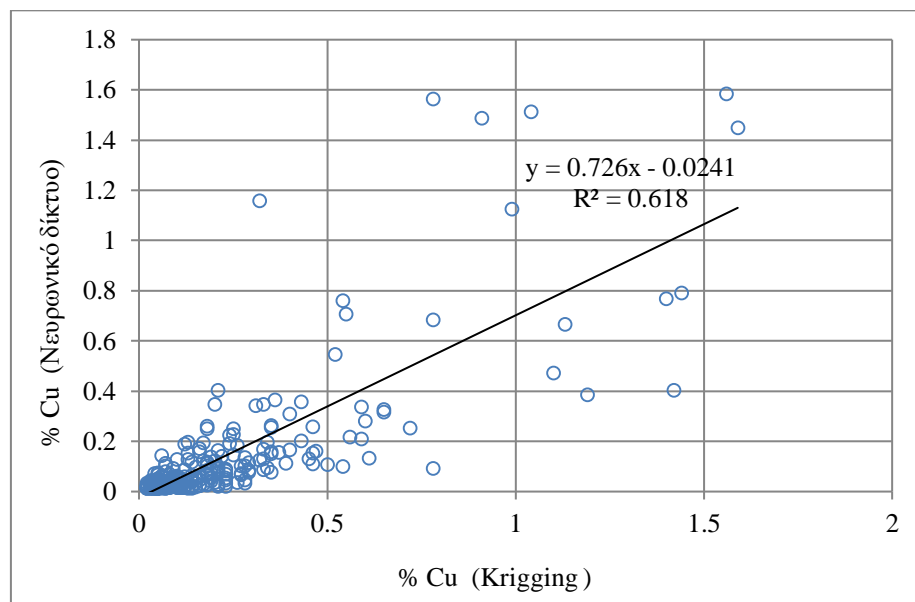
Σχήμα 4.5: Συσχέτιση των τιμών των περιεκτικοτήτων (Cu%) του TNA_distance για τα δείγματα εκπαίδευσης (training), του ελέγχου της εκπαίδευσης (validation), του ελέγχου της γενίκευσης (testing) του για το σύνολο των δειγμάτων (all).

Από το διάγραμμα του Σχήματος 4.6 παρατηρούμε ότι κατά τη διαδικασία της εκπαίδευσης, το σφάλμα των εκτιμήσεων (mean squared error - MSE) μειώνεται σταδιακά με την πάροδο των κύκλων εκπαίδευσης (epochs) για το σύνολο των δεδομένων της εκπαίδευσης. Ο βέλτιστος αριθμός των κύκλων εκπαίδευσης ήταν 4 αφού μετά τον κύκλο αυτό το σφάλμα εκτίμησης για το υποσύνολο του ελέγχου εκπαίδευσης (validation) αυξάνει.



Σχήμα 4.6: Διάγραμμα μεταβολής του σφάλματος (MSE) συναρτήσει των κύκλων εκπαίδευσης (epoch) για τον καθορισμό του σημείου διακοπής της εκπαίδευσης (early stopping).

Η σύγκριση των εκτιμήσεων της περιεκτικότητας σε Cu % των μπλόκς του TNA_distance με εκείνα της μεθόδου Kriging φαίνεται στο σχήμα 4.7. Όπως φαίνεται η συσχέτιση είναι ικανοποιητική και αρκετά ισχυρότερη από εκείνη που εμφανίζει το απλό TNA. Η συσχέτιση στις υψηλές τιμές περιεκτικότητας εξακολουθεί να είναι μικρή.



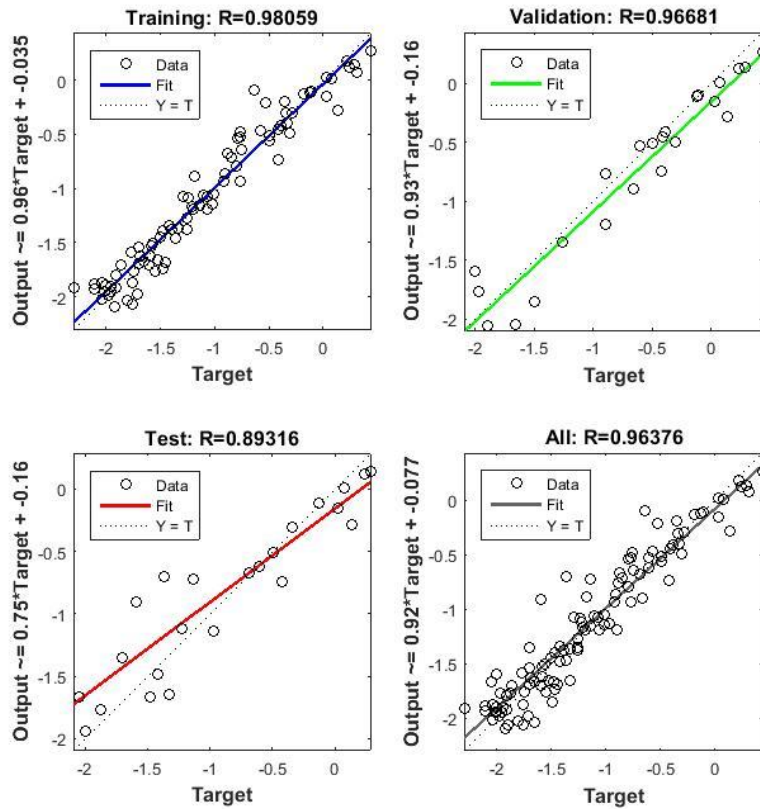
Σχήμα 4.7: Διάγραμμα συσχέτιση περιεκτικότητας Cu% που εκτιμήθηκαν με την εφαρμογή του TNA_distance με εκείνων της μεθόδου Kriging.

4.3 Νευρωνικό δίκτυο με χαρακτηριστικά τοπικού εκτιμητή που εκπαιδεύτηκε με τη χρήση τροποποιημένου συνόλου δεδομένων.

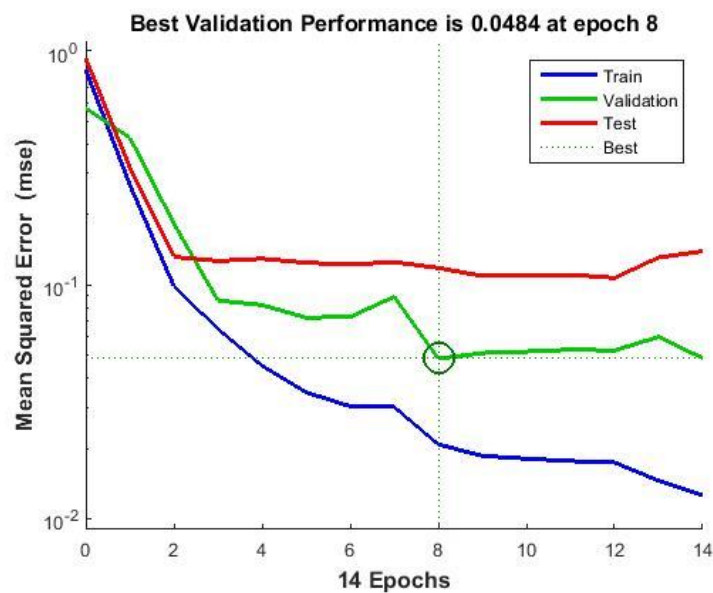
Εξαιτίας του μεγάλου πλήθους των χαμηλών περιεκτικοτήτων των δεδομένων εκπαίδευσης και του πολύ μικρού αριθμού δειγμάτων με υψηλές περιεκτικότητες, αναπτύχθηκε ένα σύνολο τροποποιημένων δεδομένων με σκοπό τη βελτίωση της ακρίβειας εκτίμησης. Η αύξηση της βαρύτητας των σύνθετων δειγμάτων με περιεκτικότητα $Cu \% > 0.3$ κατά την εκπαίδευση επιτεύχθηκε με επανάληψη των περιπτώσεων αυτών κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης. Πιο συγκεκριμένα το υποσύνολο των δεδομένων με $Cu\% > 0.3$ αυξήθηκε σε μέγεθος και εξισώθηκε με εκείνο των χαμηλών περιεκτικοτήτων. Η αύξηση του μεγέθους του έγινε με τυχαία δειγματοληψία και επανατοποθέτηση (bootstrapping). Για το λόγο αυτό το νευρωνικό δίκτυο που εκπαιδεύτηκε με αυτό το τροποποιημένο σύνολο δεδομένων ονομάστηκε TNA_distance3_bootstrapping.

Στο Σχήμα 4.8 παρουσιάζονται τα διαγράμματα συσχέτισης για τα δεδομένα της εκπαίδευσης (training), του ελέγχου της εκπαίδευσης (validation), του ελέγχου της γενίκευσης (testing) και του συνόλου των δειγμάτων (all). Οι τιμές των συντελεστών συσχέτισης κρίνονται αρκετά ικανοποιητικές, ιδιαίτερα για το $R(\text{test})=0.89$.

Από το διάγραμμα του Σχήματος 4.9 παρατηρούμε ότι κατά τη διαδικασία της εκπαίδευσης, το σφάλμα των εκτιμήσεων (MSE) μειώνεται σταδιακά με την πάροδο των κύκλων εκπαίδευσης (epochs) για το σύνολο των δεδομένων της εκπαίδευσης. Ο βέλτιστος αριθμός των κύκλων εκπαίδευσης ήταν 8 αφού μετά τον κύκλο αυτό το σφάλμα εκτίμησης για το υποσύνολο του ελέγχου εκπαίδευσης (validation) αυξάνει.

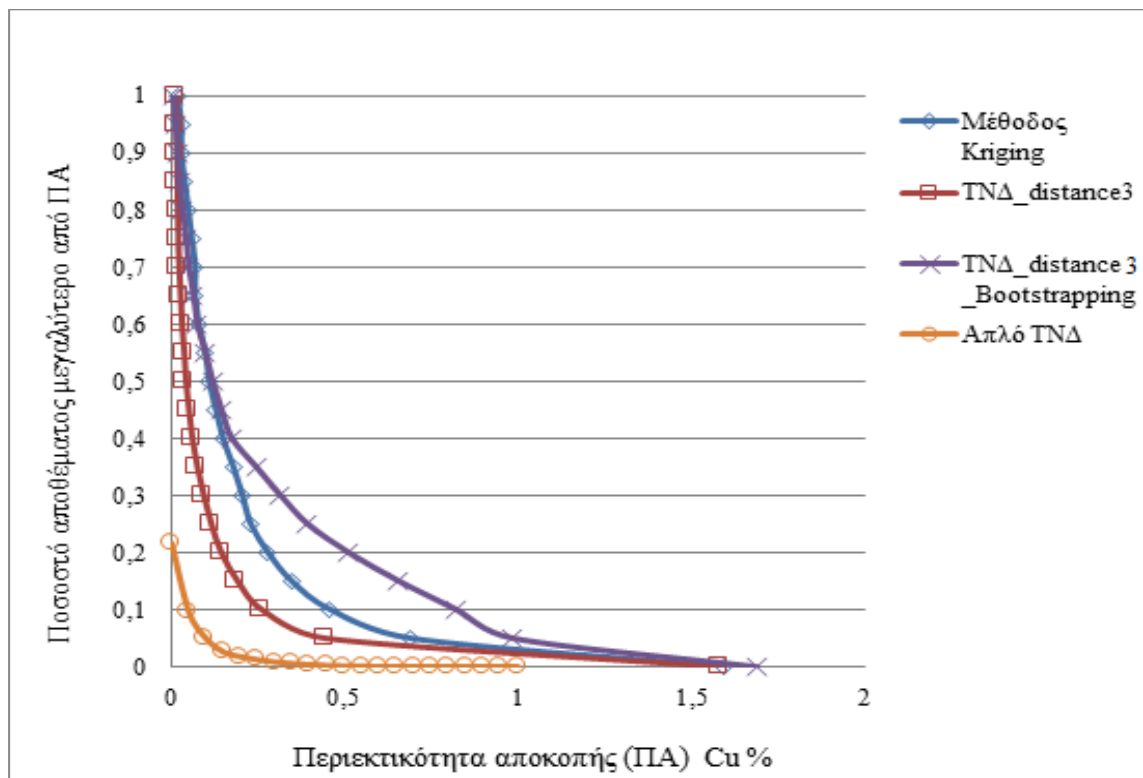


Σχήμα 4.8: Συσχέτιση των τιμών των περιεκτικοτήτων (Cu%) για τα δείγματα εκπαίδευσης (training), του ελέγχου της εκπαίδευσης (validation), του ελέγχου της γενίκευσης (testing) του για το σύνολο των δειγμάτων (all).



Σχήμα 4.9: Διάγραμμα μεταβολής του σφάλματος (MSE) συναρτήσει των κύκλων εκπαίδευσης (epoch) για τον καθορισμό του σημείου διακοπής της εκπαίδευσης (early stopping)

Όσον αφορά την εκτίμηση των αποθεμάτων για την βαθμίδα 3950, οι καμπύλες αποθεμάτων – ποιότητας που προέκυψαν (Σχήμα 4.10) δείχνουν ότι το ΤΝΔ που εκπαιδεύτηκε με το τροποποιημένο σύνολο δεδομένων υπερεκτιμά τα αποθέματα σε σχέση με την μέθοδο Kriging. Στο ίδιο σχήμα παρουσιάζονται επίσης και οι άλλες δυο περιπτώσεις ΤΝΔ που αναφέρθηκαν προηγουμένως για λόγους σύγκρισης. Οι καμπύλες αυτών των ΤΝΔ, όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως, υποεκτιμούν τα αποθέματα δίνοντας μεγάλο αριθμό μπλόκς με πολύ χαμηλές περιεκτικότητες που δεν θεωρούνται εκμεταλλεύσιμα αποθέματα. Η τροποποίηση του συνόλου των εκπαίδευσης των δεδομένων (αύξηση της συχνότητας εμφάνισης των δειγμάτων με υψηλές τιμές) οδήγησε σε σημαντική αλλαγή στη καμπύλη αποθεμάτων ποιότητας.



Σχήμα 4.10: Καμπύλη αποθεμάτων-ποιότητας με βάση τα νευρωνικά δίκτυα και τη μέθοδο Kriging.

5 Συμπεράσματα και προτάσεις

Διερευνήθηκε η δυνατότητα βελτίωσης του υπολογισμού αποθεμάτων και ποιότητας κοιτασμάτων με τη βοήθεια ανάπτυξης νευρωνικών δικτύων με χαρακτηριστικά τοπικού εκτιμητή. Χρησιμοποιήθηκαν νευρωνικά δίκτυα ευθείας προώθησης με οπισθοδιάδοση του σφάλματος (feedforward with backpropagation). Αναπτύχθηκαν δυο διαφορετικοί τύποι νευρωνικών δικτύων με χαρακτηριστικά τοπικού εκτιμητή. Το πρώτο νευρωνικό δίκτυο, TNA_distance, χρησιμοποιεί ως δεδομένα εισόδου τις συντεταγμένες X,Y,Z του εξεταζόμενου δείγματος, τις αποστάσεις d_i και τις περιεκτικότητες g_i των n γειτονικών δειγμάτων, ενώ ως έξοδο την περιεκτικότητα g του δείγματος σε χρήσιμο συστατικό. Το δεύτερο αναπτυχθέν νευρωνικό δίκτυο, TNA_xyz είχε ως εισόδους τις συντεταγμένες X,Y,Z του εξεταζόμενου δείγματος, τις συντεταγμένες X_i , Y_i , Z_i και τις περιεκτικότητες g_i των n γειτονικών δειγμάτων, ενώ ως έξοδο έχει την περιεκτικότητα g του δείγματος σε χρήσιμο συστατικό. Για τον καθορισμό των βέλτιστων τιμών των παραμέτρων της δομής των τεχνητών νευρωνικών δικτύων (αριθμός γειτονικών δειγμάτων, μέγεθος κυφού επιπέδου και χρήση μετασχηματισμού στα δεδομένα) χρησιμοποιήθηκε ο παραγοντικός σχεδιασμός και οι επιφάνειες απόκρισης. Ως κριτήρια απόδοσης των νευρωνικών δικτύων ορίστηκαν ο συντελεστής συσχέτισης R των υπολογισμένων τιμών με τις πραγματικές και το μέσο τετραγωνικό σφάλμα MSE.

Τα αποτελέσματα του παραγοντικού σχεδιασμού έδειξαν ότι η βελτίωση του συντελεστή συσχέτισης R , οφείλεται κυρίως στην εφαρμογή του λογαριθμικού μετασχηματισμού, ενώ η αύξηση του αριθμού των γειτονικών δειγμάτων και του μεγέθους του κρυφού επιπέδου πέραν ενός ορίου έχει αρνητική επίδραση. Το βέλτιστο TNA_distance που προέκυψε είναι ένα σχετικά απλό, αφού χρησιμοποιεί μικρό αριθμό (3) γειτονικών δειγμάτων ως είσοδο και το μέγεθος του κρυφού επιπέδου του είναι 10. Το βέλτιστο νευρωνικό δίκτυο TNA_xyz που υπολογίστηκε ήταν σημαντικά πιο πολύπλοκο από το αντίστοιχο TNA_distance χωρίς όμως να προκύπτει βελτίωση στη τιμή του συντελεστή R . Για τον λόγο αυτό ως βέλτιστο TNA χρησιμοποιήθηκε το TNA_distance.

Εξετάστηκαν στη συνέχεια τρεις διαφορετικές περιπτώσεις εκτίμησης της ποιότητας και των αποθεμάτων με νευρωνικά δίκτυα σε κοίτασμα χαλκού. Στην πρώτη περίπτωση

αναπτύχθηκε απλό νευρωνικό δίκτυο το οποίο εκπαιδεύτηκε με όλα τα σύνθετα δείγματα των γεωτρήσεων χωρίς τη χρήση γειτονικών δειγμάτων (X, Y, Z ως είσοδο και g ως έξοδος). Στην δεύτερη περίπτωση χρησιμοποιήθηκε το βέλτιστο $TN\Delta_distance$ και στη τρίτη περίπτωση, έγινε τροποποίηση στα δεδομένα εκπαίδευσης του νευρωνικού δικτύου $TN\Delta_distance$ δίνοντας μεγαλύτερη βαρύτητα κατά την εκπαίδευση στα δείγματα με αυξημένη περιεκτικότητα. Οι τιμές του R και MSE έδειξαν ότι το $TN\Delta_distance$ υπερτερεί του απλού $TN\Delta$ σε ακρίβεια εκτιμήσεων. Η εκπαίδευση του $TN\Delta_distance$ με το τροποποιημένο σύνολο δεδομένων βελτίωσε περαιτέρω την ακρίβεια των εκτιμήσεων και μειώθηκε σημαντικά το σφάλμα εκτίμησης ιδιαίτερα σε περιοχές με υψηλή περιεκτικότητα. Τέλος συγκρίθηκαν οι καμπύλες αποθεμάτων – ποιότητας που προέκυψαν με τα $TN\Delta$ και με τη μέθοδο Kriging. Η σύγκριση έδειξε ότι το μεγάλο πλήθος των δειγμάτων με χαμηλή περιεκτικότητα επηρέασε σε μεγάλο βαθμό την εκπαίδευση των δυο πρώτων νευρωνικών δικτύων και οδήγησε σε υποεκτιμήσεις της περιεκτικότητας. Αντίθετα για στην τρίτη περίπτωση όπου ο $TN\Delta$ εκπαιδεύτηκε δίνοντας στα δείγματα που έχουν υψηλές τιμές περιεκτικότητας αυξημένη βαρύτητα οδήγησε σε αύξηση της ακρίβειας εκτίμησης αλλά και σε αλλαγή στη καμπύλη αποθεμάτων ποιότητας.

Με βάση τα παραπάνω φαίνεται ότι πέρα από τον καθορισμό της βέλτιστης δομής ενός $TN\Delta$, σημαντικό ρόλο στην ακρίβεια που επιτυγχάνει κατά τη γενίκευση διαδραματίζει και η διαδικασία εκπαίδευσης του. Για την βελτίωση της ακρίβειας των εκτιμήσεων αποθεμάτων και ποιότητας των κοιτασμάτων με $TN\Delta$ προτείνεται η ανάπτυξη εξειδικευμένων τεχνικών εκπαίδευσης που θα λαμβάνουν υπόψη τις ιδιαιτερότητες των κοιτασμάτων (ακτίνα επιρροής, ανισοτροπία κ.α.). Επίσης προτείνεται η χρήση και άλλων τύπων νευρωνικών δικτύων, όπως τα συνελκτικά νευρωνικά δίκτυα (convolutional neural networks) ή και η χρήση των προσαρμοζόμενων νευροασαφών συστημάτων (Adaptive Neuro-Fuzzy Inference Systems ή ANFIS).

Βιβλιογραφία

Διεθνής βιβλιογραφία

1. Badel, M., Angorani, S., & Panahi, M. S. (2011). The application of median indicator kriging and neural network in modeling mixed population in an iron ore deposit. *Computers & geosciences*, 37(4), 530-540.
2. Bahrami, S., Ardejani, F. D., & Baafi, E. (2016). Application of artificial neural network coupled with genetic algorithm and simulated annealing to solve groundwater inflow problem to an advancing open pit mine. *Journal of Hydrology*, 536, 471-484.
3. Brown, W. M., Gedeon, T. D., Groves, D. I., & Barnes, R. G. (2000). Artificial neural networks: a new method for mineral prospectivity mapping. *Australian journal of earth sciences*, 47(4), 757-770.
4. Derringer, G. and Suich, R. (1980). Simultaneous Optimization of Several Response Variables, *Journal of Quality Technology*, Volume 12, No. 4, pp. 214-219.
5. Dutta, S., Bandopadhyay, S., Ganguli, R., & Misra, D. (2010). Machine learning algorithms and their application to ore reserve estimation of sparse and imprecise data. *Journal of Intelligent Learning Systems and Applications*, 2(02), 86.
6. Harrington, E.C. Jr. (1965). The Desirability Function, *Industrial Quality Control*, Volume 21, No. 10, pp. 494-498.
7. Kapageridis, I. K. (2005). Input space configuration effects in neural network-based grade estimation. *Computers & geosciences*, 31(6), 704-717.
8. Kapageridis, I. K., & Denby, B. (1998, September). Neural network modelling of ore grade spatial variability. In *International Conference on Artificial Neural Networks* (pp. 209-214). Springer, London.
9. Li, X. L., Xie, Y. L., Guo, Q. J., & Li, L. H. (2010). Adaptive ore grade estimation method for the mineral deposit evaluation. *Mathematical and computer modelling*, 52 (11-12), 1947-1956.
10. Manguistics Inc. (2005). *Statgraphics 5 Plus. User's Guide*.
11. Myers R.H. (1999), Response surface methodology – current status and future directions. (with discussion) *Journal of Quality Technology*, 31, 30–44.
12. Samanta, B., & Bandopadhyay, S. (2009). Construction of a radial basis function network using an evolutionary algorithm for grade estimation in a placer gold deposit. *Computers & Geosciences*, 35(8), 1592-1602.
13. Santos, M. S., & Ludermir, T. B. (1999, July). Using factorial design to optimise neural networks. In *IJCNN'99. International Joint Conference on Neural Networks. Proceedings* (Cat. No. 99CH36339) (Vol. 2, pp. 857-861). IEEE
14. Sillitoe, R. H. (2010). Porphyry copper systems. *Economic geology*, 105(1), 3-41.
15. Sykes, A. O. (1993). *An introduction to regression analysis*.

16. Tahmasebi, P., & Hezarkhani, A. (2012). A hybrid neural networks-fuzzy logic-genetic algorithm for grade estimation. *Computers & geosciences*, 42, 18-27.
17. Tutmez, B. (2009). Use of hybrid intelligent computing in mineral resources evaluation. *Applied Soft Computing*, 9(3), 1023-1028.
18. Wu, C. J., & Hamada, M. S. (2011). *Experiments: planning, analysis, and optimization* (Vol. 552). John Wiley & Sons.
19. Wu, X., & Zhou, Y. (1993). Reserve estimation using neural network techniques. *Computers & Geosciences*, 19(4), 567-575.

Ελληνική βιβλιογραφία

1. Galetakis, M., & Roumpos, C. (2015). A multi-objective response surface analysis for the determination of the optimal cut-off quality and minimum thickness for selective mining of multiple-layered lignite deposits. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*, 37(4), 428-439.
2. Γεώργιος, Β. (2017). Τεχνικές Βαθιάς Μηχανικής Μάθησης Για Την Αυτόματη Δημιουργία Περιγραφών Εικόνων.
3. Γεωργούλη Κ. , (2015) , «ΤΕΧΝΗΤΗ ΝΟΗΜΟΣΥΝΗ Μια Εισαγωγική Προσέγγιση»
4. Ζιώγας, Γ. Μ. (2012). Στατιστικός έλεγχος ποιότητας και παραγοντικοί σχεδιασμοί: ανθεκτικοί παραμετρικοί σχεδιασμοί (robust parameter designs) (Master's thesis).
5. Ζώρης, Ν., & Κατσινούλας, Ν. (2014). Νευρωνικά δίκτυα και εφαρμογές αυτών
6. Ιωάννης, Ρ., & Πληροφορικής, Τ. Ε. (2006). ΤΕΧΝΗΤΗ ΝΟΗΜΟΣΥΝΗ. Γ' Έκδοση Φεβρουάριος.
7. Κολοσιώνης, Κ. (2018). Συνδυασμός Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων και Γεωστατιστικών μοντέλων για την βελτιστοποίηση δικτύου γεωτρήσεων παρακολούθησης στάθμης υπόγειου υδροφόρου.
8. Μίχου, Ε. (2017). Σχεδιασμοί αποκριτικών επιφανειών (Master'sthesis, Πανεπιστήμιο Πειραιώς).
9. Παπαδόπουλος, Γ. (2010). Εργαστήριο Μαθηματικών & Στατιστικής. Σημειώσεις Μαθήματος, Αθήνα, Γεωπονικό Πανεπιστήμιο Αθηνών, στο <http://www.aua.gr/grapadopoulos/shmeiwseis.php> [Πρόσβαση 30/9/2010].
10. Πετρίδης, Δ. (2015). ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΗΝ ΠΟΛΥΔΙΑΣΤΑΣΗ.
11. Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών στη Ρομποτική Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής Τ.Ε.Ι. Κεντρικής Μακεδονίας Μάιος 2018 Ευστάθιος Αντωνίου
12. Τεμπονέρας, Γ. (2018). Τεχνητά νευρωνικά δίκτυα και εφαρμογές σε σύγχρονα προγραμματιστικά περιβάλλοντα (Doctoral dissertation).
13. "Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα" (Πανεπιστημιακές παραδόσεις), Α. Λύκας, Παν. Ιωαννίνων.
14. Τσουνικά, Μ. Α. (2007). Νευρωνικά δίκτυα και εφαρμογές (No. GRI-2007-577). Aristotle University of Thessaloniki.

Παράρτημα Α: Κώδικας σε γλώσσα προγραμματισμού MATLAB, για την επεξεργασία των δεδομένων για τη δημιουργία των συνόλων εκπαίδευσης από τα στοιχεία των γεωτρήσεων

Αρχικά, εισάγεται από τον χρήστη ο πίνακας με τα αρχικά δεδομένα της μορφής [X Y Z g]. Η μεταβλητή g συμβολίζει την περιεκτικότητα (grade) του δείγματος σε χρήσιμο συστατικό. Στη συνέχεια, ακολουθεί ο διαχωρισμός των συντεταγμένων και της περιεκτικότητας, δημιουργώντας δύο νέους πίνακες [X Y Z] και [g].

Ο χρήστης εισαγάγει το επιθυμητό πλήθος k-γειτονικών αποστάσεων και με την βοήθεια της συνάρτησης knnsearch, που περιγράφηκε παραπάνω, δημιουργείται πίνακας με δυο στήλες [δείκτες, αποστάσεις] και γραμμές ανάλογες του μεγέθους του αρχικού πίνακα. Έπειτα, αναδιατάσσοντας τους πίνακες [X Y Z] και [g] βρίσκονται οι αντίστοιχες περιεκτικότητες και συντεταγμένες των k-γειτονικών αποστάσεων και δημιουργούνται οι δυο πίνακες των νέων συνόλων δεδομένων για τα TNA_distance και TNA_xyz, όπως παρουσιάζονται στους πίνακες 2.3 και 2.4. Η διαδικασία της αναδιάταξης είναι αρκετά εύκολη, δεδομένου ότι είναι γνωστοί οι αρχικοί δείκτες των k-γειτονικών αποστάσεων που εντόπισε η συνάρτηση knnsearch.

```
function [nninxyz,nnindist,nnout]=nninoutmake;
%function [nninxyz,nnindist,nnout]=nninoutmake;
% create of a function that automatically export data of the closest points from the study
point.The classification is made of the nearests distances or the nearests coordinates of
these points.
%
% INPUT: prompt to select a mat file (matlab table with [x y z Cu(%)]
%
%OUTPUT:
% nninxyz : n rows x (1+m)x3 columns. n rows coresponds to data number.
%          m corespondts to the No of nearest data points. The values %          at
%          columns are x y z coordinates for the studied point
%          (column 1,2,3) and the m nearest points as well
%          (x1,y1,z1,x2,y2,z2, ...xm,ym,zm)
% nnindist : n rows x 3 + m columns. n rows coresponds to data number. %          m
%          corespondts to No of nearest data points. The values at %          the 3 first columns are
%          x y z coordinates for the studied point and
%          the rest m columns are distances from the studied point.
% nnout : n x m vector containing the Cu grade in % at the m nearest
%          points.
%%
nninxyz=[];
nnindist=[];
```

```

nnout=[];
%read data from mat file (matlab table with [x y z Cu(%)]
[FileName, Path]=uigetfile({'*.xls;*.xlsx'},'Please read data. Press Cancel to abort');
if FileName==0;
    return
end
cd(Path)
data=xlsread(FileName);
%filevariables = {'data'};
%load('-mat',FileName, filevariables{:});
%
p=data(:,1:3);%get the coordinates (x,y,z)
q=data(:,4);%get the Cu grades (%)

nnout=q;% the NN out should be the grades of original data

ndata=size(p,1);
%Request from user the number of nearest points of interest
%Enter the parameters of model
prompt = {'Enter the number of nearest points of interest'};
tit    = 'SET THE NEAREST POINTS OF INTEREST';
lin    = 1;
df     = {'3'};
xv     = inputdlg(prompt,tit,lin,df);

npi=str2num(xv{1});%Number of Points of Interest

[idx,dis]=knnsearch(p,p,'K',npi+1);%call knnsearch function for the npi positions

distnpi=dis(:,2:npi+1);%truncate the first column which corresponds to the studied point

idxnpi=idx(:,2:npi+1);%truncate the first column which corresponds to the studied point
%% Build nnindist
g=zeros(ndata,npi);%zero matrix for the grades of nearest points of interest
for i=1:npi;
    g(:,i)=q(idxnpi(:,i));%fill g with grades
end
nnindist=[p distnpi g];%build input for Neural Network
%% Build nninxyz
tmpmtx=zeros(ndata,npi*3);
for i=1:npi
    tmpmtx(:,(i-1)*3+1:i*3)=p(idxnpi(:,i),:);%fill tmpmtx with xyz coordinates
end
nninxyz=[p tmpmtx g];

return

```

Παράρτημα Β: Κώδικας σε γλώσσα προγραμματισμού MATLAB, για τα αναπτυχθέντα νευρωνικά δίκτυα

Για την υλοποίηση του νευρωνικού δικτύου έγινε χρήση του εργαλείου ανάπτυξης εφαρμογών της Matlab nntool, η οποία εμπεριέχεται στο neural toolbox της Matlab. Η συνάρτηση nntool οδηγεί τον χρήστη σε ένα νέο παράθυρο Network / Data Manager, στο οποίο έχει την δυνατότητα να εισαγάγει, να δημιουργεί, να χρησιμοποιεί και να εξαγάγει νευρωνικά δίκτυα και δεδομένα.

```
function [Y,Xf,Af] = myNeuralNetworkFunction(X,~,~)
%MYNEURALNETWORKFUNCTION neural network simulation function.
%
% Generated by Neural Network Toolbox function genFunction, 29-Jun-2020
20:47:14.
%
% [Y] = myNeuralNetworkFunction(X,~,~) takes these arguments:
%
% X = 1xTS cell, 1 inputs over TS timesteps
% Each X{1,ts} = 13xQ matrix, input #1 at timestep ts.
%
% and returns:
% Y = 1xTS cell of 1 outputs over TS timesteps.
% Each Y{1,ts} = 1xQ matrix, output #1 at timestep ts.
%
% where Q is number of samples (or series) and TS is the number of timesteps.

%#ok<*RPMT0>

% ===== NEURAL NETWORK CONSTANTS =====

% Input 1
x1_step1_xoffset      =      [1631;4530;3526.5;5;5;10;10;15;-6.21460809842219;-
5.80914299031403;-6.21460809842219;-6.21460809842219;-6.21460809842219];
x1_step1_gain          =
[0.00162337662337662;0.00211416490486258;0.00323624595469256;0.1;0.1;0.1;0.
03696756400207;0.0406996507293897;0.27042662039547;0.272819957537451;0.2
68982135910519;0.258521278310208;0.27548893875339];
x1_step1_ymin = -1;

% Layer 1
b1      =      [1.9129742557617135;-1.6495725519112567;-1.6447993057896393;-
1.671537998602197;1.6059498583826475;2.1843410724947945];
IW1_1 = [-0.13635880437391329 -0.73501847503637963 -0.69613971420578102 --
1.101658768095092      0.1730264586308222      0.22342932595761966      -
0.28703395237133222];

% Layer 2
b2 = -0.4307227687343762;
```



```
LW2_1 = [0.0012655046930222097 -0.58892796434341144 -0.0594583470507404 -
-0.46339357592257352          0.25226191713570939          0.32676790134493788
0.60419192941690969 0.81149864885450362 -1.2736026106606146];
```

```
% Output 1
```

```
y1_step1_ymin = -1;
y1_step1_gain = 0.436871996505024;
y1_step1_xoffset = 0.002;
```

```
% ===== SIMULATION =====
```

```
% Format Input Arguments
```

```
isCellX = iscell(X);
if ~isCellX, X = {X}; end;
```

```
% Dimensions
```

```
TS = size(X,2); % timesteps
if ~isempty(X)
Q = size(X{1},2); % samples/series
else
Q = 0;
end
```

```
% Allocate Outputs
```

```
Y = cell(1,TS);
```

```
% Time loop
```

```
for ts=1:TS
```

```
% Input 1
```

```
Xp1 = mapminmax_apply(X{1,ts},x1_step1_gain,x1_step1_xoffset,x1_step1_ymin);
```

```
% Layer 1
```

```
a1 = tansig_apply(repmat(b1,1,Q) + IW1_1*Xp1);
```

```
% Layer 2
```

```
a2 = repmat(b2,1,Q) + LW2_1*a1;
```

```
% Output 1
```

```
Y{1,ts} = mapminmax_reverse(a2,y1_step1_gain,y1_step1_xoffset,y1_step1_ymin);
end
```

```
% Final Delay States
```

```
Xf = cell(1,0);
```

```
Af = cell(2,0);
```

```
% Format Output Arguments
```

```
if ~isCellX, Y = cell2mat(Y); end
end
```

```

% ===== MODULE FUNCTIONS =====

% Map Minimum and Maximum Input Processing Function
function y = mapminmax_apply(x,settings_gain,settings_xoffset,settings_ymin)
y = bsxfun(@minus,x,settings_xoffset);
y = bsxfun(@times,y,settings_gain);
y = bsxfun(@plus,y,settings_ymin);
end

% Sigmoid Symmetric Transfer Function
function a = tansig_apply(n)
a = 2 ./ (1 + exp(-2*n)) - 1;
end

% Map Minimum and Maximum Output Reverse-Processing Function
function x = mapminmax_reverse(y,settings_gain,settings_xoffset,settings_ymin)
x = bsxfun(@minus,y,settings_ymin);
x = bsxfun(@rdivide,x,settings_gain);
x = bsxfun(@plus,x,settings_xoffset);
end

```