



ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΚΡΗΤΗΣ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΟΡΥΚΤΩΝ ΠΟΡΩΝ

Γεωστατιστική Ανάλυση Δεδομένων Συγκέντρωσης Οργανικού Άνθρακα για τη Διερεύνηση Μη Συμβατικών Αποθεμάτων Υδρογονανθράκων

Διπλωματική Εργασία

Κωνσταντίνος Μπλατζώνης

Εξεταστική Επιτροπή
Επίκουρος Καθηγητής, Εμμανουήλ Βαρουχάκης (επιβλέπων)
Καθηγητής, Μιχαήλ Γαλετάκης
Καθηγητής, Νίκος Πασαδάκης

Χανιά,
1 Μαρτίου 2023

Περίληψη

Η εξερεύνηση υδρογονανθράκων συνήθως περιλαμβάνει δείγματα πετρωμάτων από διαφορετικές τοποθεσίες, γεωλογικούς σχηματισμούς και βάθη, τα οποία αναλύονται ως προς την ορυκτολογική τους σύσταση. Τα δείγματα που αξιολογούνται στην παρούσα διπλωματική εργασία προέρχονται από μητρικά πετρώματα τα οποία συλλέχθηκαν και αναλύθηκαν ως προς τη συγκέντρωση οργανικού άνθρακα (TOC wt%) από το Γεωλογικό Ινστιτούτο των ΗΠΑ (USGS). Αντικείμενο της διπλωματικής εργασίας αποτελεί η εφαρμογή ενός γεωστατιστικού μοντέλου για την διερεύνηση της χωρικής κατανομής των δειγμάτων αυτών στην βορειοανατολική χερσαία λεκάνη της ακτής του κόλπου του Μεξικού. Πιο συγκεκριμένα, χρησιμοποιείται η μέθοδος χωρικής παρεμβολής κανονικού kriging με στόχο την εκτίμηση της συγκέντρωσης οργανικού άνθρακα στα σημεία της περιοχής μελέτης όπου δεν υπάρχουν μετρήσεις.

Τα δείγματα εξετάζονται ως προς τη μέση τιμή της συγκέντρωσης οργανικού άνθρακα για κάθε θέση δειγματοληψίας και γίνεται ο υπολογισμός των στατιστικών παραμέτρων της κατανομής τους. Η χωρική τάση προσδιορίζεται με πολυώνυμα χαμηλής τάξης, το γραμμικό, το τετραγωνικό και το κυβικό. Τα πολυώνυμα αυτά συγκρίνονται και η χωρική τάση αφαιρείται από το δείγμα με το γραμμικό πρότυπο και προκύπτει το πεδίο της διακύμανσης. Ο μετασχηματισμός της διακύμανσης σε γκαουσσιανή κατανομή κρίνεται απαραίτητος και γίνεται με τη μέθοδο modified Box-Cox. Για τον έλεγχο της χωρικής εξάρτησης κατασκευάζεται το πειραματικό βαριόγραμμα και δοκιμάζονται τέσσερα πρότυπα βαριογράμματα, το εκθετικό, το γκαουσσιανό, το σφαιρικό και το δυναμονομικό. Η βέλτιστη προσαρμογή στο πειραματικό βαριόγραμμα γίνεται με βάση το άθροισμα τετραγωνικού σφάλματος και επιλέγεται το εκθετικό μοντέλο. Η χαρτογράφηση της συγκέντρωσης οργανικού άνθρακα και ο προσδιορισμός της αβεβαιότητας της εκτίμησης γίνονται με τη μέθοδο κανονικού kriging. Τα αποτελέσματα της εκτίμησης ελέγχονται και αξιολογούνται με τη μέθοδο Leave one out cross-validation. Τέλος, πραγματοποιείται η χαρτογράφηση για τιμή οριακής περιεκτικότητας 2 wt% TOC για τα διαστήματα εμπιστοσύνης 10%, 25% και 75%. Η επεξεργασία των δεδομένων και η εφαρμογή της γεωστατιστικής μεθόδου έγινε με τη βοήθεια λογισμικού σε προγραμματιστικό περιβάλλον MATLAB.

Abstract

Hydrocarbon exploration usually involves rock samples from different locations, geological formations and depths. The science of geostatistics can be applied to provide their spatial distribution in terms of spatial interpolation methods. One such spatial interpolation method is kriging. Kriging assumes that random variables can be spatially correlated and thus points that are located close in space are more likely to have proximal values as well. This attribute provides for estimation at points in the field with unknown observations. In this thesis, a geostatistical model was applied to explore the spatial distribution of total organic carbon weight concentration in the eastern onshore U.S. Gulf Coast Basin. The data were collected and analysed for their mineral composition and organic properties by the USGS.

The determined total organic carbon weight concentration was geostatistically evaluated in terms of its mean value at each sampling location. The statistical parameters are calculated and the spatial trend is determined using low-order models. These models were compared and the spatial trend was removed from the sample through the linear model. The modified Box-Cox technique was applied to normalize the sample distribution of the fluctuation. Four theoretical variograms are tested for the best fit to the experimental variogram, the exponential, the gaussian, the spherical and the power-law, and based on the sum of squared error the exponential model is being used as the best fit. Ordinary kriging was applied to explore the spatial distribution of total organic carbon weight concentration and determine the uncertainty of the estimation. A leave one out cross-validation method was performed to evaluate the efficiency of this method. The correlation coefficient between estimated and observed values is low, approximate 43%. A map of the spatial distribution of total organic carbon weight concentration was constructed along with the 10%, 25% and 75% confidence intervals. MATLAB programming software was used to process the data and apply the geostatistical method.

Ευχαριστίες

Προπαντός θα ήθελα να ευχαριστήσω τον καθηγητή Εμμανουήλ Βαρουχάκη τόσο για το θέμα της διπλωματικής εργασίας που μου εμπιστεύτηκε όσο και για τις συμβουλές που μου πρόσφερε κατά την εκπόνηση της διπλωματικής εργασίας. Ένα μεγάλο ευχαριστώ οφείλω επίσης στον κύριο Ανδρέα Παυλίδη που ήταν πάντα πρόθυμος να με βοηθήσει καθώς και στον καθηγητή Μιχαήλ Γαλετάκη για τις εύστοχες παρατηρήσεις του.

Πίνακας Περιεχομένων

Περίληψη	i
Abstract	iii
Ευχαριστίες	iv
Κατάλογος Σχημάτων	x
Κατάλογος Πινάκων	xiii
1 Εισαγωγή	1
1.1 Σκοπός Διπλωματικής Εργασίας	1
1.2 Δημιουργία Υδρογονανθράκων	2
1.2.1 Κηρογόνο	2
1.3 Μετανάστευση Υδρογονανθράκων	3
1.4 Ανίχνευση Υδρογονανθράκων	4
1.5 Οργανογενή Ορυκτά Καύσιμα	4
1.5.1 Φυσικό Αέριο και Πετρέλαιο	4
1.6 Περιγραφή Περιοχής Μελέτης	6
1.6.1 Γεωλογικό Υπόβαθρο	7
1.6.2 Γεωχημεία Πετρελαίου	8
2 Θεωρητικό Υπόβαθρο	10
2.1 Τυχαία Πεδία	10
2.1.1 Τυχαία Μεταβλητή	11
2.1.2 Διάκριση Τυχαίων Πεδίων	11
2.2 Βασικές Έννοιες Τυχαίων Πεδίων	12
2.2.1 Μέση Τιμή	12
2.2.2 Διακύμανση	13
2.2.3 Λοξότητα	14
2.2.4 Κύρτωση	14

2.2.5	Διασπορά	14
2.2.6	Τυπική Απόκλιση	14
2.2.7	Τυχαιότητα	15
2.2.8	Στατιστική Ομοιογένεια	15
2.2.9	Στατιστική Ισοτροπία	16
2.3	Συνάρτηση Συνδιασποράς	16
2.3.1	Συνθήκες Αποδοχής (Θεώρημα Bochner)	16
2.4	Μοντέλο Χωρικής Τάσης	18
2.5	Χωρική Εξάρτηση	18
2.5.1	Βαριόγραμμα	19
2.5.2	Ευσταθής Εκτιμήτρια Βαριογράμματος	19
2.5.3	Ιδιότητες Βαριογράμματος	20
2.5.4	Επιτρεπτά Μοντέλα Βαριογράμματος	21
2.5.5	Προσαρμογή σε Θεωρητικό Μοντέλο	22
2.6	Μέθοδος Voronoi	23
2.7	Εκτίμηση Τυχαίων Πεδίων - Kriging	24
2.7.1	Συνθήκες Εφαρμογής Μεθόδων Kriging	26
2.7.2	Παραλλαγές Kriging	26
2.7.3	Απλό Kriging	27
2.7.4	Κανονικό Kriging	29
2.7.5	Επιλογή Γειτονιάς Συσχέτισης	31
2.8	Μέτρα Επιβεβαίωσης Χωρικού Μοντέλου	31
3	Εισαγωγική Ανάλυση και Τάσεις	33
3.1	Στατιστική Ανάλυση Δεδομένων	33
3.2	Ανάλυση Χωρικής Τάσης	36
3.3	Μετασχηματισμός Διακύμανσης	39
4	Γεωστατιστική Ανάλυση	41
4.1	Βαριογραφία	41
4.1.1	Προσδιορισμός Πειραματικού Βαριογράμματος	42
4.1.2	Προσαρμογή Θεωρητικού Μοντέλου	42
4.2	Επαλήθευση Χωρικού Μοντέλου	44
4.3	Εκτίμηση Κανονικού Kriging	46
4.4	Ερμηνεία Αποτελεσμάτων	48
5	Συμπεράσματα	50
5.1	Προτάσεις για Μελλοντική Έρευνα	51
	Ελληνική Βιβλιογραφία	52

Διεθνής Βιβλιογραφία

53

Παράρτημα

55

Κατάλογος Σχημάτων

1.1	Στο διάγραμμα van Krevelen διακρίνονται οι βασικοί τύποι του κηρογόνου και οι διαδρομές της θερμικής ωρίμανσης του. Οι χαρακτηριστικές γραμμές οριοθετούν τους τύπους του κηρογόνου και αναπαριστούν την μεταβολή της στοιχειακής τους σύστασης κατά την κατεύθυνση της θερμικής ωρίμανσης.	3
1.2	Η παγκόσμια κατανάλωση ενέργειας ανά καύσιμο σχήμα 1.2α' και οι εκπομπές CO_2 που σχετίζονται με την ενέργεια ανά πηγή καυσίμου σχήμα 1.2β' για το χρονικό διάστημα 1990 έως 2050. Πηγή δεδομένων: U.S. Energy Information Administration, Annual Energy Outlook 2022 (AEO2022)	5
1.3	Πολιτείες της περιοχής μελέτης, Λουιζιάνα, Μισισίπι και Αλαμπάμα. Το σχήμα πάρθηκε από (Enomoto et al., 2018).	6
1.4	Στρωματογραφία γεωλογικών σχηματισμών της Κρητιδικής περιόδου για την ευρύτερη περιοχή της πολιτείας του Μισισιπιά (Lohr et al., 2020).	8
1.5	Η χωρική κατανομή των 132 σημείων δειγματοληψίας και οι γεωλογικοί σχηματισμοί της περιοχής μελέτης. Το σχήμα πάρθηκε από (Varouchakis, 2021a).	9
2.1	Αναπαράσταση ενός δισδιάστατου τυχαίου πεδίου. Το σχήμα περιγράφει την κατανομή της συγκέντρωσης του όζοντος στην ατμόσφαιρα. Ο οριζόντιος και ο κατακόρυφος άξονας εκφράζουν τις χωρικές συντεταγμένες, ενώ οι μεταβολές της συγκέντρωσης (Dobson units) του όζοντος καθορίζονται με την βοήθεια της χρωματικής κλίμακας. Το σχήμα πάρθηκε από (Žukonič and Hristopulos, 2013).	12
2.2	Παράσταση μιας κατάστασης μονοδιάστατου τυχαίου πεδίου (άνω) και της αντίστοιχης συνάρτησης συνδιασποράς (κάτω). Το σχήμα πάρθηκε από (Hristopulos, 2020).	17
2.3	Απεικόνιση της τάξης διανυσμάτων $B(\mathbf{r})$ που αντιστοιχεί στο διάγραμμα απόστασης r . Το σχήμα πάρθηκε από (Hristopulos, 2020).	20

2.4	Προσαρμογή του πειραματικού βαριογράμματος σε ένα εκθετικό μοντέλο. Στο σχήμα απεικονίζονται οι βέλτιστοι παράμετροι του εκθετικού μοντέλου, το άνω φράγμα ή οροφή (Sill), το μήκος συσχέτισης (Range) και το Φαινόμενο πυρήνα ή κόκκου (Nugget effect). Το σχήμα πάρθηκε από (Biswas and Si, 2013).	22
2.5	Διάγραμμα Voronoi. Το σχήμα πάρθηκε από (Hristopulos, 2020). .	23
2.6	Εφαρμογή της μεθόδου leave one out cross-validation σε δέκα σημεία μετρήσεων. Το κόκκινο σημείο παραλείπεται και εκτιμάται η τιμή σε αυτή τη θέση χρησιμοποιώντας τα υπόλοιπα εννέα σημεία (μπλε σημεία). Οι εκτιμώμενες και οι πραγματικές τιμές στη θέση του σημείου που παραλείφθηκε συγκρίνονται. Αυτή η διαδικασία επαναλαμβάνεται για ένα δεύτερο σημείο, και ούτω καθεξής. Το σχήμα πάρθηκε από (ESRI, 2011).	31
3.1	Χωρική κατανομή των σημείων δειγματοληψίας.	34
3.2	Ιστόγραμμα του δείγματος TOC wt% και η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας με τη μορφή της κόκκινης καμπύλης σχήμα (α), ενώ η κανονική κατανομή πιθανότητας του δείγματος (normplot-κόκκινη ευθεία) στο σχήμα (β). Τα μπλε σημεία συμβολίζουν τα σημεία του δείγματος.	35
3.3	Διάγραμμα αθροιστικής κατανομής πιθανότητας των τιμών TOC %wt.	36
3.4	Τρισδιάστατη απεικόνιση της πολλαπλής γραμμικής παλινδρόμησης με τα πολυώνυμα χαμηλής τάξης, το τετραγωνικό, το κυβικό και το γραμμικό. Ο οριζόντιος και ο κάθετος άξονας εκφράζουν τις συντεταγμένες, ενώ ο κατακόρυφος άξονας την συγκέντρωση οργανικού άνθρακα (TOC wt%). Η επιφάνεια αναπαριστά την τάση του δείγματος, ενώ τα κόκκινα σημεία τις θέσεις των μετρήσεων. .	38
3.5	Το ιστόγραμμα και το διάγραμμα συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας των τιμών TOC %wt έπειτα από αφαίρεση της τάσης με το γραμμικό μοντέλο και μετασχηματισμό modified Box-Cox της διακύμανσης. Τα μπλε σημεία συμβολίζουν τα σημεία του δείγματος.	40
4.1	Γραφική παράσταση πειραματικού βαριογράμματος.	42
4.2	Προσαρμογή του εκθετικού μοντέλου βαριογράμματος με φαινόμενο κόκκου στο πειραματικό βαριογράμμα.	44
4.3	Κατανομή σφαλμάτων των συγκεντρώσεων που εκτιμήθηκαν με τη μέθοδο leave one out cross-validation.	46
4.4	Χάρτης κανονικού kriging με τις εκτιμήσεις των συγκεντρώσεων οργανικού άνθρακα (TOC wt%).	47

4.5	Χάρτης της τυπικής απόκλισης κανονικού kriging της διακύμανσης των συγκεντρώσεων οργανικού άνθρακα (TOC wt%).	47
4.6	Τα πολύγωνα νομοποι αναπαριστούν τις πραγματικές τιμές των σημείων που εκτιμήθηκαν με kriging. Στο διάγραμμα διακρίνονται με κόκκινο χρώμα τα σημεία μετρήσεων (×) και οι ακριβείς θέσεις των σημείων με το μεγαλύτερο σφάλμα εκτίμησης (⊗). . .	48
4.7	Χωρική κατανομή της συγκέντρωσης οργανικού άνθρακα με τιμές μεγαλύτερες ή ίσες του 2 %wt για τα διαστήματα εμπιστοσύνης 10%, 25% και 75%. Με τη βοήθεια της χρωματικής κλίμακας καθορίζεται το διάστημα εμπιστοσύνης. Διακρίνονται επίσης τα σημεία (×) που αποτελούν τις μετρήσιμες τιμές συγκέντρωσης που είναι μεγαλύτερες ή ίσες του 2%wt.	49
1	Προσαρμογή των θεωρητικών μοντέλων με φαινόμενο κόκκου στο πειραματικό βαριόγραμμα.	56

Κατάλογος Πινάκων

3.1	Βασικά στατιστικά μεγέθη και στατιστικές ροπές της κατανομής συνολικού οργανικού άνθρακα (TOC wt%), όπου \mathbf{x}_{min} η ελάχιστη τιμή, $m_{\mathbf{x}}$ η μέση τιμή, \mathbf{x}_{max} η μέγιστη τιμή, $\hat{\sigma}_{\mathbf{x}}$ η τυπική απόκλιση, $\hat{s}_{\mathbf{x}}$ ο συντελεστής ασυμμετρίας, $\hat{k}_{\mathbf{x}}$ ο συντελεστής κύρτωσης και $\mathbf{x}_{0.50}$ η διάμεσος.	36
3.2	Παράμετροι των μοντέλων χωρικής τάσης που προέκυψαν από τη μέθοδο πολλαπλής γραμμικής παλινδρόμησης.	37
3.3	Συντελεστές σφάλματος μεταξύ αρχικών δεδομένων και του μοντέλου χωρικής τάσης, όπου ρ ο συντελεστής συσχέτισης Pearson, MAE το μέσο απόλυτο σφάλμα, RMSE το μέσο τετραγωνικό σφάλμα και MARE το μέσο σχετικό απόλυτο σφάλμα της διακύμανσης. . .	37
3.4	Βασικά στατιστικά μεγέθη και στατιστικές ροπές της διακύμανσης έπειτα από μετασχηματισμό modified Box-Cox, όπου \mathbf{x}_{min} η ελάχιστη τιμή, $m_{\mathbf{x}}$ η μέση τιμή, \mathbf{x}_{max} η μέγιστη τιμή, $\hat{\sigma}_{\mathbf{x}}$ η τυπική απόκλιση, $\hat{s}_{\mathbf{x}}$ ο συντελεστής ασυμμετρίας, $\hat{k}_{\mathbf{x}}$ ο συντελεστής κύρτωσης και $x_{0.50}$ η διάμεσος. Οι τιμές είναι κανονικοποιημένες. . .	39
4.1	Τάξεις απόστασης, πλήθος ζευγών ανά τάξη και τιμές πειραματικού βαριογράμματος (σχήμα 4.1).	43
4.2	Τιμές του τετραγωνικού σφάλματος προσαρμογής των θεωρητικών μοντέλων που εξετάστηκαν.	44
4.3	Βέλτιστες τιμές παραμέτρων του εκθετικού μοντέλου. Οι παράμετροι υπολογίστηκαν με βάση τη διακύμανση του πεδίου.	45
4.4	Τιμές των παραμέτρων για την επιβεβαίωση του χωρικού μοντέλου μετά τον αντίστροφο μετασχηματισμό της διακύμανσης, όπου MAE το μέσο απόλυτο σφάλμα, RMSE το μέσο τετραγωνικό σφάλμα, MARE το μέσο σχετικό απόλυτο σφάλμα και R ο συντελεστής συσχέτισης Pearson's ρ	45

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

Το κεφάλαιο αυτό επικεντρώνεται στη γεωχημεία του πετρελαίου. Αρχικά, περιγράφονται οι βασικοί στόχοι της διπλωματικής εργασίας. Έπειτα, δίνονται οι κατάλληλοι ορισμοί του κηρογόνου και επεξηγούνται βασικές έννοιες σχετικά με τη δημιουργία, τη μετανάστευση, την ανίχνευση και την χημική σύσταση των υδρογονανθράκων. Τέλος, γίνονται οι κατάλληλες βιβλιογραφικές αναφορές προκειμένου να σχηματισθεί μια πλήρης εικόνα του γεωλογικού και γεωχημικού υποβάθρου της περιοχής μελέτης.

1.1 Σκοπός Διπλωματικής Εργασίας

Η επιστήμη της γεωστατιστικής μπορεί να εφαρμοστεί για την χωρική κατανομή δειγμάτων πετρωμάτων από διαφορετικές τοποθεσίες, γεωλογικούς σχηματισμούς και βάθη. Η χαρτογράφηση της περιεκτικότητας αυτών πραγματοποιείται με τη μέθοδο χωρικής παρεμβολής Kriging. Η μέθοδος kriging θεωρεί ότι τυχαίες μεταβλητές μπορούν να συσχετιστούν χωρικά και κατά συνέπεια σημεία τα οποία βρίσκονται κοντά στον χώρο έχουν μεγαλύτερη πιθανότητα να έχουν και κοντινές τιμές. Η ιδιότητα αυτή επιτρέπει την εκτίμηση στα σημεία του πεδίου όπου δεν υπάρχουν μετρήσεις.

Τα δεδομένα που αξιολογήθηκαν προέρχονταν από δείγματα πυρήνων γεωτρήσεων μεσοζωικών πετρωμάτων από την βορειοανατολική χερσαία λεκάνη της ακτής του Κόλπου του Μεξικού, κυρίως των Πολιτειών Μισισίπι και Λουιζιάνας. Το ποσοστό κατά βάρος του συνολικού οργανικού άνθρακα στα μητρικά πετρώματα αντιπροσωπεύει τη συγκέντρωση του οργανικού υλικού και σε περιοχές όπου υπάρχει συγκέντρωση αυτού του οργανικού υλικού απαντώνται υδρογονάνθρακες. Σκοπός αυτής της εργασίας είναι η ανάπτυξη ενός γεωστατιστικού μοντέλου για την διερεύνηση της χωρικής κατανομής της συγκέντρωσης οργανικού υλικού

στην βορειοανατολική χερσαία λεκάνη της ακτής του Κόλπου του Μεξικού. Το στατιστικό σφάλμα της εκτίμησης kriging θα καθορίσει την πιθανότητα επιβεβαίωσης των αποθεμάτων υδρογονανθράκων και συνεπώς την οικονομική εκμετάλλευση των υδρογονανθράκων που απαντώνται στην περιοχή μελέτης. Με άλλα λόγια, τα αποτελέσματα χαρτογράφησης της συγκέντρωσης οργανικού άνθρακα θα αναδείξουν τα σημεία γεωλογικού ενδιαφέροντος εντός της περιοχής μελέτης ώστε να πραγματοποιηθούν πιο στοχευμένες μεταλλευτικές έρευνες (π.χ γεωφυσικές έρευνες και ερευνητικές γεωτρήσεις).

1.2 Δημιουργία Υδρογονανθράκων

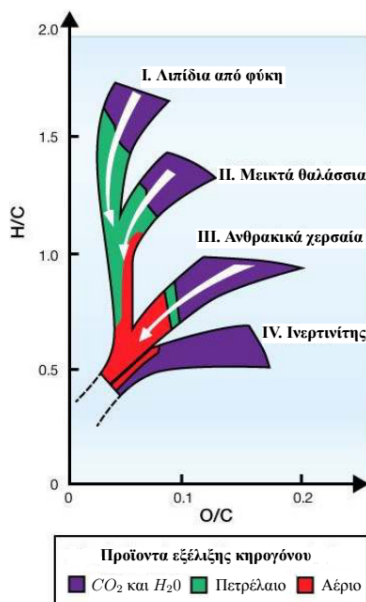
Οι διεργασίες μετασχηματισμού της οργανικής ύλης διακρίνονται σε τέσσερα στάδια τα οποία είναι η διαγένεση, η καταγένεση, η μεταγένεση και η μεταμόρφωση. Τα οργανικά κατάλοιπα των χερσαίων ανώτερων φυτών και θαλασσίων οργανισμών (φυτοπλαγκτόν, ζωοπλαγκτόν και βακτήρια) διατηρήθηκαν με απουσία οξυγόνου μέσα σε ιζηματογενή στρώματα. Κατά το πρώτο στάδιο της μεταμόρφωσης τους, μέσω της δράσης μικροοργανισμών μετατρέπεται μέρος του οργανικού υλικού σε βιογενικό αέριο (μεθάνιο) και σε κηρογόνο. Καθώς το βάθος του στρώματος αυξάνει, ανακόπτεται η μικροβιακή δραστηριότητα και το στάδιο της διαγένεσης ολοκληρώνεται. Σημαντικό παράγοντα πλέον έχουν οι θερμικές μετατροπές και το ήδη σχηματισμένο κηρογόνο διασπάται σε μικρότερα και πιο ευκίνητα μόρια. Τα μόρια αυτά ονομάζονται βιτουμένα τα οποία με την σειρά τους μετατρέπονται σε μικρότερα μόρια υγρής και αέριας φάσης (N.Βαρότσης, 2014).

1.2.1 Κηρογόνο

Το κηρογόνο αποτελεί το στερεό οργανικό υλικό το οποίο είναι προσκολλημένο στο ίζημα και είναι αδιάλυτο σε υδατικά διαλύματα. Σχηματίζεται σε θερμοκρασία έως 50°C και διατηρείται εν μέρει και στα επόμενα στάδια μετασχηματισμού της οργανικής ύλης μέχρι και την μεταμόρφωση. Η οπτική εξέταση του κηρογόνου στο μικροσκόπιο αναδεικνύει τις δομές στις οποίες εντοπίζονται στοιχεία των οργανισμών από τους οποίους προέρχεται. Οι σημαντικότεροι τύποι οργανικών δομικών συστατικών (macerals) είναι ο βιτρινίτης, ο εξινίτης και ο ινερτινίτης. Στο κηρογόνο απαντώνται και άμορφα συστατικά, τα οποία αναφέρονται ως αμορφινίτης (Πασαδάκης, 2015).

Το μοντέλο van Krevelen (βλ. σχήμα 1.1) διακρίνει μέσω της αναλογίας των ατόμων H/C και O/C τέσσερις βασικούς τύπους κηρογόνου (I,II,III,IV) εκ των

οποίων μόνον οι τρεις πρώτοι παράγουν υδρογονάνθρακες. Ωστόσο, με βάση το επίπεδο της θερμικής ωρίμανσης, τα κηρογόνα διακρίνονται σε: ανώριμα, ώριμα και υπερώριμα.



Σχήμα 1.1: Στο διάγραμμα van Krevelen διακρίνονται οι βασικοί τύποι του κηρογόνου και οι διαδρομές της θερμικής ωρίμανσης του. Οι χαρακτηριστικές γραμμές οριοθετούν τους τύπους του κηρογόνου και αναπαριστούν την μεταβολή της στοιχειακής τους σύστασης κατά την κατεύθυνση της θερμικής ωρίμανσης.

1.3 Μετανάστευση Υδρογονανθράκων

Μετά την γένεση του πετρελαίου ακολουθεί η μετανάστευση του, δηλαδή η διαδικασία μεταφοράς των συστατικών του από τα μητρικά πετρώματα στους ταμειυτήρες, όπου συγκεντρώνονται και είναι δυνατή η παραγωγή τους. Η διαδικασία περιλαμβάνει δύο διακριτά στάδια, την πρωτογενή και δευτερογενή μετανάστευση. Κατά την πρωτογενή μετανάστευση οι υδρογονάνθρακες μεταφέρονται διαμέσου πορώδους μέσου από το μητρικό πέτρωμα σε γειτονικούς και περισσότερο διαπερατούς σχηματισμούς, ενώ κατά την δευτερογενή μετανάστευση μεταφέρονται από τους διαπερατούς αυτούς σχηματισμούς στις παγίδες αποθήκευσης (Γιώτης, 2021). Η ανοδική ροή των υδρογονανθράκων διαμέσου ρωγμών του υπεδάφους οφείλεται σε δυνάμεις άνωσης λόγω της διαφοράς πυκνότητας των υδρογονανθράκων και νερού του σχηματισμού. Ωστόσο, όταν αυτή η ροή συναντήσει ένα αδιαπέρατο πέτρωμα, οι δυνάμεις της άνωσης αδυνατούν να υπερκεράσουν τις τριχοειδείς πιέσεις εισόδου στους πόρους και η κίνηση των υδρογονανθράκων αναστέλλεται. Οι παγίδες αυτές είναι είτε στρωματογραφικές, είτε δομικές, όπως αντίκλινα, δομοί άλατος, μεταπτώσεις κλπ (N.Βαρότσης, 2014).

1.4 Ανίχνευση Υδρογονανθράκων

Οι ταμειευτήρες υδρογονανθράκων ανιχνεύονται σύμφωνα τρία στάδια τα οποία είναι η επιφανειακή έρευνα, η γεωλογική έρευνα και η γεωφυσική έρευνα. Η επιφανειακή έρευνα προσφέρει μόνον ενδείξεις, ενώ η γεωλογική έρευνα αποτελεί ένα σημαντικότερο στάδιο αναζήτησης του πετρελαίου. Ιδιαίτερος ρόλος των γεωλογικών ερευνών είναι ο συσχετισμός των σχηματισμών της περιοχής μελέτης με τους αντίστοιχους σχηματισμούς γειτονικών πετρελαιοπαραγωγών που κατα συνέπεια έχουν μελετηθεί εντατικώς. Η γεωφυσική έρευνα αποτελείται από τρεις βασικές μεθόδους, την μαγνητική, την βαρυτομετρική και την σεισμική. Οι μέθοδοι αυτοί παρέχουν σημαντικές πληροφορίες για τη γεωλογική δομή του υπεδάφους αντισταθμίζοντας το κόστος της μεταλλευτικής έρευνας πριν ακόμα διεξαχθούν οι σημαντικά δαπανηρές ερευνητικές γεωτρήσεις (Ν.Βαρότσης, 2014).

Οι δειγματοληπτικές γεωτρήσεις παρέχουν λήψη δειγμάτων από διάφορα βάθη και κατά συνέπεια την εργαστηριακή αξιολόγηση αυτών των δειγμάτων. Η εκτίμηση των φυσικών και χημικών ιδιοτήτων του δείγματος ενισχύουν τη γνώση της γεωλογικής χαρτογράφησης της περιοχής μελέτης (π.χ. ρήγματα, υδρογεωλογικές και τεκτονικές συνθήκες). Τέτοιες πληροφορίες συμβάλλουν στον προσδιορισμό και στην περιχάραξη του κοιτάσματος, στον βέλτιστο τρόπο εκμετάλλευσης και στη λήψη αποφάσεων σχετικά με το αν θα πραγματοποιηθεί η μεταλλευτική επένδυση (Modis and Stamataki, 2016).

1.5 Οργανογενή Ορυκτά Καύσιμα

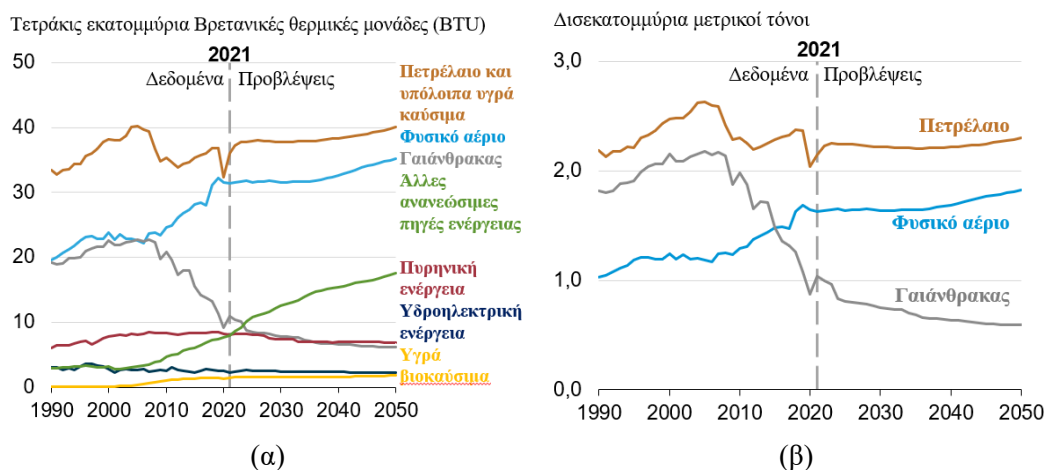
Τα οργανογενή ορυκτά καύσιμα εξασφαλίζουν σήμερα το 80% της παγκόσμιας κατανάλωσης ενέργειας και διακρίνονται σε πετρέλαιο, φυσικό αέριο, σχιστολιθικό αέριο/πετρέλαιο, γαιάνθρακες, ασφαλτούχες άμμοι και υδρίτες. Από αυτά τα καύσιμα το πετρέλαιο και το φυσικό αέριο αναφέρονται ως συμβατικά ορυκτά καύσιμα, διότι καθιερώθηκαν ως η κύρια πηγή παραγωγής ενέργειας στον 20ο αιώνα. Τα υπόλοιπα αναφέρονται ως μη-συμβατικά ορυκτά καύσιμα ή μη-συμβατικοί υδρογονάνθρακες και σύμφωνα με εκτιμήσεις τα αποθεματά τους είναι πολλαπλάσια από εκείνα των συμβατικών (Πασαδάκης, 2015). Η παγκόσμια κατανάλωση ενέργειας ανά καύσιμο καθώς και οι ανάλογες εκπομπές CO_2 απεικονίζονται στο σχήμα 1.2.

1.5.1 Φυσικό Αέριο και Πετρέλαιο

Το φυσικό αέριο αποτελείται από ένα μείγμα ελαφρών υδρογονανθράκων οι οποίοι προέρχονται από γεωλογικούς σχηματισμούς και τα συστατικά τους σε

συνθήκες περιβάλλοντος έχουν αέρια φάση. Τα κύρια συστατικά του είναι τα ελαφρά αλκάνια και περιέχει σε μικρές συγκεντρώσεις άζωτο, διοξείδιο του άνθρακα, υδροθείο και ευγενή αέρια. Αντίθετα, το πετρέλαιο είναι ένα εξαιρετικά σύνθετο υγρό μείγμα το οποίο αποτελείται κυρίως από ενώσεις υδρογονανθράκων, ενώ περιέχει και ενώσεις με άλλα στοιχεία, όπως θείο, άζωτο και οξυγόνο, σε χαμηλές συνήθως συγκεντρώσεις (Πασαδάκης, 2015).

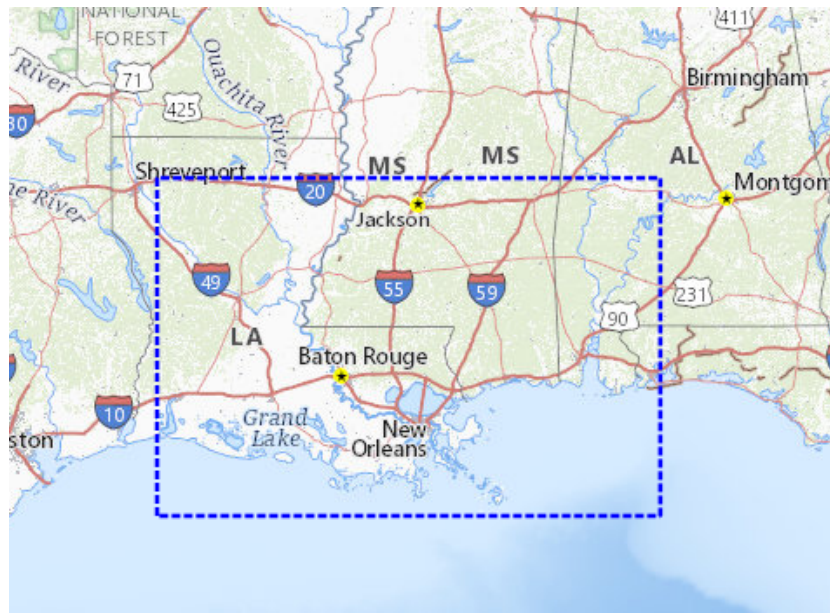
Ο όρος πετρελαιοφόροι σχιστόλιθοι χρησιμοποιείται στη γεωλογία πετρελαίου για να αποδώσει διαφορετικής λιθολογίας μητρικά πετρώματα του πετρελαίου. Δηλαδή, πετρώματα πλούσια σε κηρογόνο το οποίο παρουσιάζει διαφορετικά στάδια θερμικής ωρίμανσης. Το πετρέλαιο που παράγεται με πυρόλυση του περιεχόμενου κηρογόνου και των βιτουμενίων αναφέρεται ως σχιστολιθικό πετρέλαιο (shale oil). Αν η περιεκτικότητα σε κηρογόνο στους πετρελαιοφόρους σχιστόλιθους είναι τουλάχιστον 5 wt%, ο σχηματισμός θεωρείται εν δυνάμει κατάλληλος για παραγωγή, ενώ στα μητρικά πετρώματα η περιεκτικότητα 0.5 wt% σε κηρογόνο θεωρείται αρκετή ώστε να χαρακτηριστούν ως φτωχά (Πασαδάκης, 2015). Το σχιστολιθικό αέριο απαντάται σε σχηματισμούς που είναι όμοιοι με το σχιστολιθικό πετρέλαιο και οι σχηματισμοί αυτοί λειτουργούν ταυτόχρονα ως μητρικό πέτρωμα και ως ταμιευτήρας. Η ελάχιστη τιμή TOC που μπορεί να αποδοθεί σε ταμιευτήρες σχιστολιθικού αερίου είναι 2 wt% (Varouchakis, 2021a).



Σχήμα 1.2: Η παγκόσμια κατανάλωση ενέργειας ανά καύσιμο σχήμα 1.2α' και οι εκπομπές CO₂ που σχετίζονται με την ενέργεια ανά πηγή καυσίμου σχήμα 1.2β' για το χρονικό διάστημα 1990 έως 2050. Πηγή δεδομένων: U.S. Energy Information Administration, Annual Energy Outlook 2022 (AEO2022)

1.6 Περιγραφή Περιοχής Μελέτης

Κατά τη διάρκεια της "σχιστολιθικής επανάστασης" των Ηνωμένων Πολιτειών ο θαλάσσιος σχιστόλιθος Tuscaloosa (TMS) του ανώτερου Κρητιδικού στην περιοχή του νοτίου Μισισιπή και της γειτονικής Λουιζιάνας παρουσίασε ιδιαίτερο οικονομικό ενδιαφέρον. Σύμφωνα με τις αναφορές, ο αρχικός ρυθμός της ημερήσιας παραγωγής των οριζόντιων γεωτρήσεων προσέγγιζε τα 1000 έως 1500 βαρέλια πετρελαίου (Koons et al., 1974). Ωστόσο, λόγω του υψηλού κόστους των γεωτρήσεων και των διατρητικών κινδύνων που σχετίζονται με το πλούσιο σε άργιλο γεωλογικό υπόβαθρο, η μεταλλευτική δραστηριότητα διακόπηκε κατά την ύφεση της πετρελαϊκής βιομηχανίας την περίοδο 2014-2015 και μέχρι σήμερα έχει περιοριστεί. Το Γεωλογικό Ινστιτούτο των Ηνωμένων Πολιτειών (USGS) αξιολόγησε την περίοδο του 2018 τους μη ανακαλυφθέντες μη συμβατικούς πόρους υδρογονανθράκων που βρίσκονται στο TMS του νότιου Μισισιπή και της παρακείμενης Λουιζιάνας. Σύμφωνα με τις έρευνες αυτές, εκτιμήθηκε ότι τα μέσα δυνητικά, τεχνικά απολήψιμα και μη συμβατικά αποθέματα αντιστοιχούν σε 1.5 δισεκατομμύρια βαρέλια πετρελαίου και 4.6 τρισεκατομμύρια κυβικά πόδια φυσικού αερίου (Hackley et al., 2018). Η περιοχή μελέτης έχει έκταση 217, 502 km^2 και περιλαμβάνει τις περιοχές που παρουσιάζονται στο σχήμα 1.3.



Σχήμα 1.3: Πολιτείες της περιοχής μελέτης, Λουιζιάνα, Μισισίπι και Αλαμπάμα. Το σχήμα πάρθηκε από (Enomoto et al., 2018).

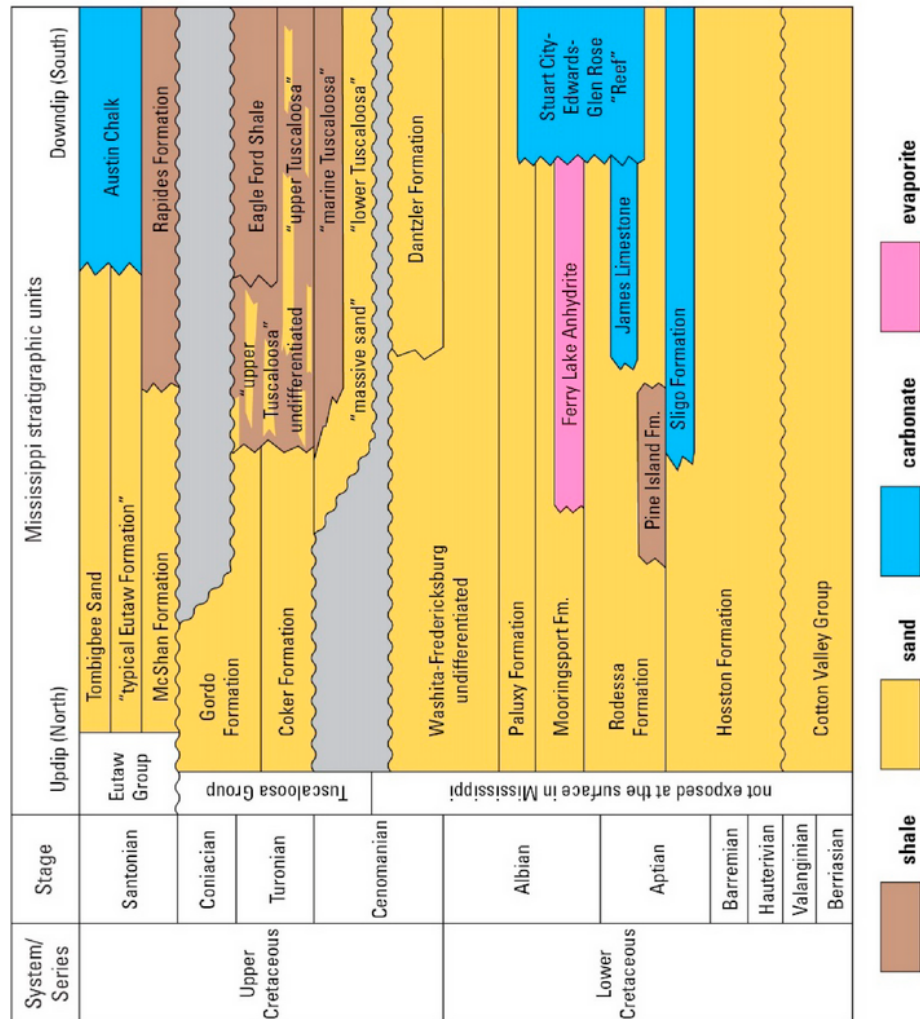
1.6.1 Γεωλογικό Υπόβαθρο

Η ομάδα Tuscaloosa της Ανώτερης Κρητιδικής περιόδου αποτελείται από τρεις ενότητες, την κατώτερη άμμο Tuscaloosa, τη μεσαία Tuscaloosa ή θαλάσσιο σχιστόλιθο Tuscaloosa (TMS) και την ανώτερη άμμο Tuscaloosa, οι οποίες αντιπροσωπεύουν τα αποσυρσιγενή, κατακλυσμιαία και επικλυσσιγενή συστατικά ενός πλήρους κύκλου απόθεσης. Η ομάδα αυτή επικαλύπτει ασύμφωνα την αναλλοίωτη Washita Fredericksburg λόγω ανύψωσης της μέσης-Κενομάνιας και της ευστικής πτώσης της στάθμης της θάλασσας (Koons et al., 1974). Η συγκεκριμένη ασυμφωνία συνδέεται με ένα χάσμα απόθεσης ενός εκατομμυρίου ετών. Βόρεια της άκρης της υφαλοκρηπίδας του Κατώτερου Κρητιδικού στη νοτιοκεντρική Λουιζιάνα και στο νότιο Μισισιπή, το κατώτερο Tuscaloosa αποτέθηκε ως ποτάμιες και δελταϊκές άμμοι με μικρές ενστρώσεις σχιστόλιθων κατά τη διάρκεια της ευστικής ανύψωσης της στάθμης της θάλασσας. Στην περιοχή μελέτης, το κατώτερο Tuscaloosa εναποτέθηκε πάνω από την μεσο-κενομανική ασυμφωνία. Το πάχος της κατώτερης Tuscaloosa και η υψηλή αναλογία περιεκτικότητας σε σχιστολιθική άμμο υποδηλώνει ότι τα πυροκλαστικά ιζήματα μεταφέρθηκαν με υψηλούς ρυθμούς (Borrok et al., 2019). Το κατώτερο Tuscaloosa παραμένει ως ποτάμιος-δελταϊκός ψαμμίτης και σχιστόλιθος στη νότιο-κεντρική Λουιζιάνα και στο νότιο Μισισιπή.

Η μεσαία ενότητα της Tuscaloosa, ο θαλάσσιος σχιστόλιθος Tuscaloosa (TMS), αποτέθηκε συμφώνως πάνω από την κατώτερη Tuscaloosa σε μια ανοικτή θαλάσσια υφαλοκρηπίδα κατά τη διάρκεια έντονης θαλάσσιας επίκλυσης. Η ενότητα αυτή είναι κυρίως θαλάσσιος σχιστόλιθος χρώματος τεφρού και αποτελείται από ιλύς, μαρμαρυγίες, απολιθωματοφόρα πετρώματα ως επί το πλείστον ασβεστίου, φυλλώδη αργιλόλιθο με παρουσία ενστρώσεων από ιλύς, μαρμαρυγίες, απολιθωματοφόρο γλαυκονιτικό, ασβεστιτικό ιλυόλιθο και πολύ λεπτόκοκκο ψαμμίτη. Το TMS έχει πάχος περίπου 70 – 152 m στις περιοχές εξόρυξης υδρογονανθράκων του νοτιοδυτικού Μισισιπή και της κεντρικής Λουιζιάνας. Το πάχος του μειώνεται προς τα δυτικά στη Λουιζιάνα στην ανύψωση της περιοχής Sabine Uplift και προς τα ανατολικά στην κομητεία Clarke της Αλαμπάμα, και απουσιάζει στο βόρειο Μισισιπή λόγω της μη απόθεσής του. Το πάχος του TMS αυξάνει από βορρά προς νότο και μεγιστοποιείται νότια της υφαλοκρηπίδας του Κατώτερου Κρητιδικού (Hackley et al., 2020).

Η υπερκείμενη ανώτερη Tuscaloosa αντιπροσωπεύει μια αποσυρσιγενή φάση ιζηματογένεσης που αποτελείται από μια έντονη απόθεση πυροκλαστικών ιζημάτων. Τα ιζήματα της ανώτερης Tuscaloosa αποτελούνται από ποτάμιες-δελταϊκές αποθέσεις. Οι αποθέσεις αυτές περιλαμβάνουν ακολουθίες από κόκκινους, πράσινους, γκριζούς και μωβ σχιστόλιθους και λασπόλιθους, λεπτόκοκκους έως πολύ

λεπτόκοκκους σχιστόλιθους, χονδρόκοκκης άμμου και συμπλεγμάτων σιδηρίτη, και επικαλύπτουν συμφώνως τον TMS (Borrok et al., 2019; Lohr et al., 2020).

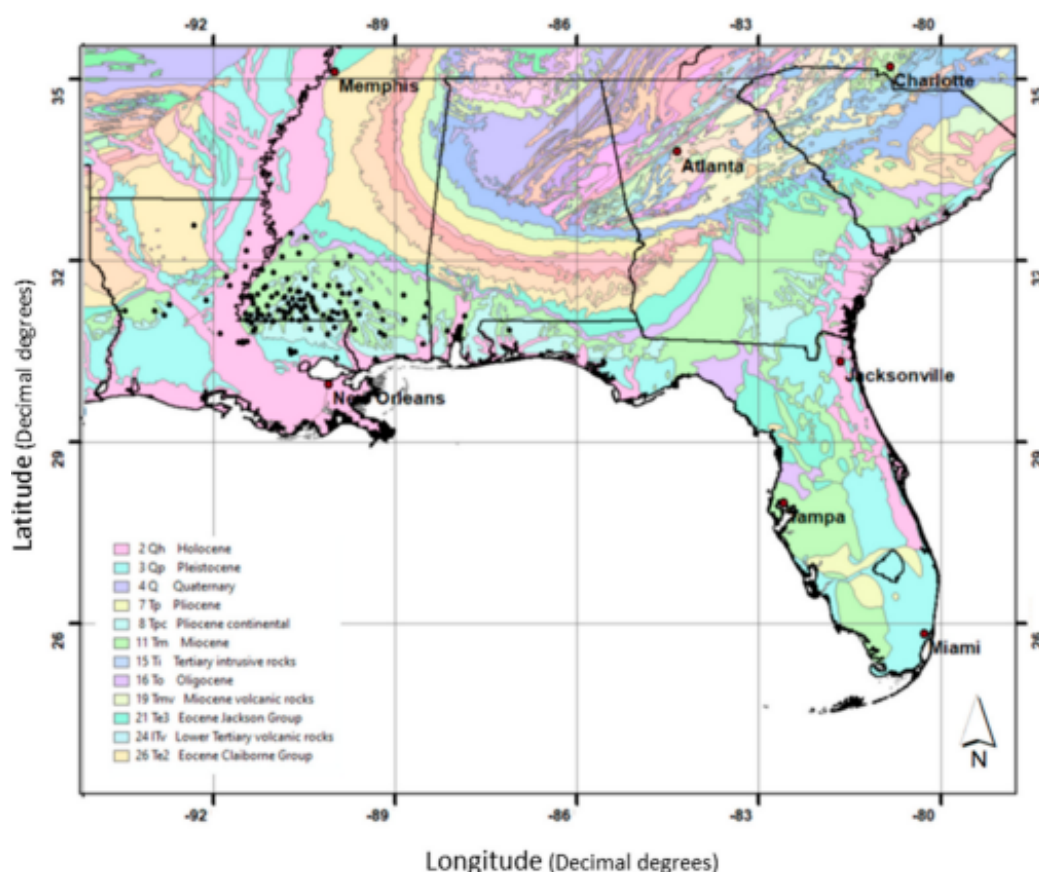


Σχήμα 1.4: Στρωματογραφία γεωλογικών σχηματισμών της Κρητιδικής περιόδου για την ευρύτερη περιοχή της πολιτείας του Μισισσιππή (Lohr et al., 2020).

1.6.2 Γεωχημεία Πετρελαίου

Η περιεκτικότητα σε συνολικό οργανικό άνθρακα είναι μία από τις σημαντικότερες γεωχημικές παραμέτρους η οποία χρησιμοποιείται για την αξιολόγηση ενός ταμιευτήρα υδρογονανθράκων. Η γεωχημική έρευνα του Γεωλογικού Ινστιτούτου των ΗΠΑ εκτίμησε ότι ο θαλάσσιος σχιστόλιθος Tuscaloosa περιέχει συνολικά φτωχά μητρικά πετρώματα με περιεκτικότητα σε ολικό οργανικό άνθρακα περίπου

ιση με 1% και με δείκτη υδρογόνου μικρότερη από 300 mg HC/g TOC (Hackley et al., 2018). Η ανακλαστικότητα του βιτρινίτη προσδιορίστηκε μέσω της πετρογραφικής ανάλυση μητρικών πετρωμάτων και κυμαίνεται από 0.59 έως 0.94%, υποδεικνύοντας την θερμική ωριμότητα της οργανικής ύλης. Σύμφωνα με το διάγραμμα van Krevelen, τα δείγματα που προέρχονται από το κατώτερο Tuscaloosa περιέχουν κηρογόνο τύπου II, ενώ τα δείγματα του TMS περιέχουν μεικτό τύπο κηρογόνου II/III (Lohr et al., 2020). Επιπλέον, το εύρος των τιμών T_{max} 432 – 448 °C αποδεικνύει ότι η οργανική ύλη έχει πρώιμη θερμική ωριμότητα (Borrok et al., 2019; Hoffmann and Borrok, 2020). Συμπερασματικά, τα μητρικά πετρώματα στην περιοχή εκμετάλλευσης είναι πλούσιοι σε άργιλο θαλάσσιοι σχιστόλιθοι με χαμηλή περιεκτικότητα σε οργανικό άνθρακα, μεικτής οργανικής ύλης τύπου II/III και θερμικά ώριμης ως προς το "παράθυρο" δημιουργίας του πετρελαίου (oil window) (Lohr et al., 2020; Berch, 2013).



Σχήμα 1.5: Η χωρική κατανομή των 132 σημείων δειγματοληψίας και οι γεωολογικοί σχηματισμοί της περιοχής μελέτης. Το σχήμα πάρθηκε από (Varouchakis, 2021a).

Κεφάλαιο 2

Θεωρητικό Υπόβαθρο

Η γεωστατιστική περιλαμβάνει μεθόδους εκτίμησης αποθεμάτων και εξάπλωσης ρύπανσης για εξορυκτικές και περιβαλλοντικές δραστηριότητες (Olea, 2012; Matheron, 1963). Ωστόσο, οι τεχνικές αυτές χρησιμοποιούνται και σε άλλα πεδία έρευνας και τεχνολογίας όπως στην εδαφολογία, στην υδρογεωχημεία (Tolosana-Delgado et al., 2019), στη μορφολογική ανάλυση φυσικών και τεχνολογικών ανομοιογενών υλικών, στη χαρτογράφηση, στον χαρακτηρισμό ποιότητας βιομηχανικών προϊόντων, στην τοπογραφική ανάλυση και στα γεωγραφικά συστήματα πληροφορίας (Δ.Θ, 2014).

Σε αυτό το κεφάλαιο παρουσιάζεται η θεωρία των τυχαίων πεδίων. Επεξηγούνται οι βασικές έννοιες που αφορούν τα τυχαία πεδία, την χωρική εξάρτηση, την συνάρτηση συνδιασποράς, την χωρική τάση και την εκτίμηση των τυχαίων πεδίων. Παρουσιάζονται τα πρότυπα βαριογράμματα και οι μαθηματικές σχέσεις που περιγράφουν την εκτίμηση και την αβεβαιότητα με τη μέθοδο του απλού και του κανονικού kriging. Τέλος, περιγράφεται η μέθοδος διασταυρωτικής επαλήθευσης (leave one out cross-validation) και οι εξισώσεις μέτρησης σφάλματος του χωρικού μοντέλου.

2.1 Τυχαία Πεδία

Οι γεωστατιστικές μέθοδοι καθοδηγούνται σε μεγάλο βαθμό από δεδομένα τα οποία μπορούν να συσχετιστούν χωρικά ή χρονικά και μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον χαρακτηρισμό των χωρικών και χρονικών ιδιοτήτων, λαμβάνοντας υπόψη την θεωρία των τυχαίων πεδίων (Hohn, 1998). Η Θεωρία των Τυχαίων Πεδίων αποτελεί μια γενίκευση της Θεωρίας των Πιθανοτήτων που εφαρμόζεται σε αλληλεξαρτημένες μεταβλητές οι οποίες παρουσιάζουν χωρική συνέχεια, μεταβάλλονται δηλαδή από σημείο σε σημείο (Δ.Θ, 2014).

2.1.1 Τυχαία Μεταβλητή

Η πληροφορία για την κατανομή μιας συνολικής πιθανότητας στο σύνολο τιμών της τυχαίας μεταβλητής είναι χρήσιμη για τον υπολογισμό πιθανοτήτων που σχετίζονται με την τυχαία μεταβλητή. Η περιγραφή της κατανομής των πιθανοτήτων μιας τυχαίας μεταβλητής X ορίζεται από την συνάρτηση αθροιστικής κατανομής (cdf):

$$F(x) = P(X \leq x), \quad -\infty < x < +\infty \quad (2.1)$$

Μια τυχαία μεταβλητή X είναι μια μεταβλητή η οποία λαμβάνει τιμές από ένα σύνολο πιθανών τιμών. Μια τυχαία μεταβλητή μπορεί να είναι διακριτή αν παίρνει τιμές x_i όπου $i = 1, \dots, N$, δηλαδή όταν η συχνότητα εμφάνισης της κάθε τιμής προσδιορίζεται από μια συνάρτηση πιθανότητας, ή συνεχής, δηλαδή όταν παίρνει τιμές από ένα συνεχές σύνολο (Παπαδόπουλος, 2015). Όταν η μεταβλητή X λαμβάνει τιμές από ένα απειροελάχιστο διάστημα γύρω από το x , η πιθανότητα υπολογίζεται από την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας (pdf) (Wackernagel et al., 1997; Pavlides, 2016).

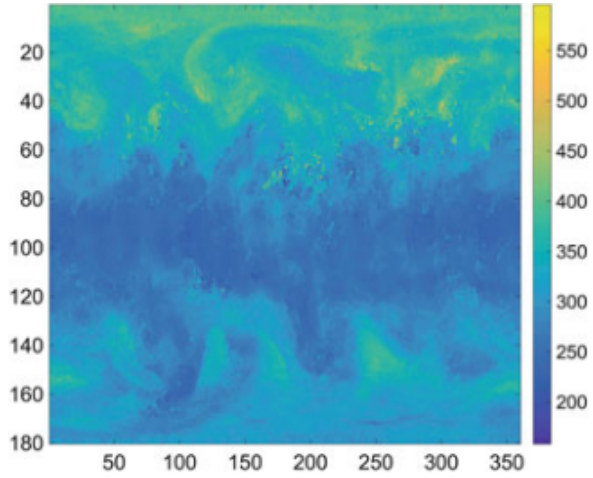
Η αναμενόμενη τιμή $\mathbb{E}[X]$ μιας τυχαίας μεταβλητής X είναι η μέση τιμή της τυχαίας μεταβλητής για το σύνολο των καταστάσεων. Εάν η κατανομή πιθανοτήτων των X ακολουθεί μία συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας pdf $f(x)$, η αναμενόμενη τιμή είναι

$$\mathbb{E}[X] = \int_{-\infty}^{+\infty} x f(x) dx \quad (2.2)$$

2.1.2 Διάκριση Τυχαίων Πεδίων

Ένα τυχαίο πεδίο $X(s)$, όπου s ένα διάνυσμα θέσης, αποτελείται από ένα σύνολο τυχαίων μεταβλητών οι οποίες περιγράφουν τις χωρικές ή χωροχρονικές μεταβολές ενός σχετικού φυσικού μεγέθους (π.χ περιεκτικότητα κατά βάρος σε οργανικό άνθρακα). Τα τυχαία πεδία, σε αντίθεση με τις συναρτήσεις οι οποίες μπορούν να εκφραστούν μαθηματικά με σαφή τρόπο, αντιπροσωπεύουν ένα σύνολο δυνατών καταστάσεων. Κάθε κατάσταση αποτελεί ένα δείγμα του πεδίου και χαρακτηρίζεται από μια πιθανότητα πραγματοποίησης που καθορίζεται από την πολυδιάστατη Συνάρτηση Πυκνότητας Πιθανότητας του πεδίου (Vanmarcke, 2010). Επομένως, ένα τυχαίο πεδίο μπορεί να θεωρηθεί ως μία πολυδιάστατη τυχαία μεταβλητή. Λόγω της αλληλεξάρτησης των φυσικών μεγεθών σε διαφορετικά σημεία του χώρου, τα τυχαία πεδία έχουν ιδιαίτερες μαθηματικές ιδιότητες που τα ξεχωρίζουν από ένα σύνολο ανεξάρτητων τυχαίων μεταβλητών (Hristopoulos, 2020).

Σχήμα 2.1: Αναπαράσταση ενός δισδιάστατου τυχαίου πεδίου. Το σχήμα περιγράφει την κατανομή της συγκέντρωσης του όζοντος στην ατμόσφαιρα. Ο οριζόντιος και ο κατακόρυφος άξονας εκφράζουν τις χωρικές συντεταγμένες, ενώ οι μεταβολές της συγκέντρωσης (Dobson units) του όζοντος καθορίζονται με την βοήθεια της χρωματικής κλίμακας. Το σχήμα πάρθηκε από (Žukovič and Hristopulos, 2013).



Τα τυχαία πεδία διακρίνονται στις παρακάτω κατηγορίες:

- Αν το πεδίο λαμβάνει τιμές μόνο από ένα μετρήσιμο σύνολο αριθμών, ονομάζεται πεδίο διακριτών τιμών.
- Αν οι τιμές του πεδίου προέρχονται από ένα συνεχές διάστημα πραγματικών αριθμών, ονομάζεται πεδίο συνεχών τιμών.
- Όταν η μεταβολή ορίζεται σε έναν συνεχή χώρο (π.χ στα φυσικά πεδία), δημιουργείται ένα πεδίο συνεχούς χώρου.
- Όταν ορίζεται στις θέσεις ενός πλέγματος (καννάβου), ονομάζεται πλεγματοτικό πεδίο.

2.2 Βασικές Έννοιες Τυχαίων Πεδίων

2.2.1 Μέση Τιμή

Σε ένα τυχαίο πεδίο ο προσδιορισμός της μορφής μιας κατανομής πιθανότητας από πειραματικά δεδομένα κρίνεται απαραίτητος. Για τον καθορισμό αυτής της κατανομής απαιτείται η εκτίμηση των παραμέτρων της (Καπαγερίδης, 2015). Οι στατιστικές ροπές μ_k είναι χρήσιμες ως περιλήψεις τέτοιων καθορισμών και ορίζονται γύρω από οποιονδήποτε επιλεγμένο άξονα, δηλαδή γύρω από οποιαδήποτε επιθυμητή τιμή του X , ως εξής:

$$\mu_k = \mathbb{E}[X^k] = \int_{-\infty}^{+\infty} x^k f(x) dx \quad (2.3)$$

Η μέση τιμή του πεδίου είναι η πρώτη ροπή ($k = 1$) μιας κατανομής τυχαίας μεταβλητής, δηλαδή το κέντρο βάρους της κατανομής, και δίνεται από την σχέση

$$m_x(\mathbf{s}) = \mathbb{E}[X(\mathbf{s})] \quad (2.4)$$

όπου $\mathbb{E}[\cdot]$ είναι η μέση τιμή ως προς το σύνολο των καταστάσεων, δηλαδή

$$\mathbb{E}[X(\mathbf{s})] = \int d(x) F_x(x; \mathbf{s}) x \quad (2.5)$$

όπου x οι τιμές που αντιστοιχούν σε μία κατάσταση. Τα όρια του ολοκληρώματος εξαρτώνται από τα όρια στα οποία ορίζεται το πεδίο. Από την σχέση (2.5) παρατηρείται πιθανή εξάρτηση μεταξύ της μέσης τιμής και της θέσης \mathbf{s} (Δ.Θ, 2014).

Ωστόσο, η Συνάρτηση Πυκνότητας Πιθανότητας δεν είναι πάντα γνωστή εκ των προτέρων και η μέση τιμή εκτιμάται από τα δεδομένα με στατιστικές μεθόδους σύμφωνα με την παρακάτω σχέση (VAROUCHAKIS, 2012).

$$\hat{m}_x(\mathbf{s}) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M x_i(\mathbf{s}) \quad (2.6)$$

2.2.2 Διακύμανση

Η διακύμανση αποτελεί μια στατιστική παράμετρος που μετρά την διασπορά των τιμών ενός τυχαίου πεδίου. Πιο συγκεκριμένα, είναι δεύτερη ροπή ($k = 2$) γύρω από τον μέσο και εκφράζει το μέτρο της μέσης απόκλισης των τιμών του τυχαίου πεδίου από την μέση τιμή του. Συνεπώς, η παράμετρος της διακύμανσης καθορίζεται από τη θέση των τιμών σε σχέση με τον μέσο. Αν οι περισσότερες τιμές βρίσκονται κοντά στον μέσο, η διακύμανση θα είναι μικρή. Αν οι τιμές απλώνονται σε μεγαλύτερο εύρος, η διακύμανση θα είναι μεγαλύτερη (Παπαδόπουλος, 2015).

Έστω ένα τυχαίο πεδίο $X(\mathbf{s})$, όπου \mathbf{s} ένα διάνυσμα θέσης, $\mathbf{s} = (x, y)$. Το $X(\mathbf{s})$ συμβολίζει το σύνολο των δυνατών καταστάσεων του πεδίου, ενώ ως $x(\mathbf{s})$ συμβολίζονται οι τιμές που αντιστοιχούν σε μια κατάσταση. Η διακύμανση του τυχαίου πεδίου $X(\mathbf{s})$ είναι ένα τυχαίο πεδίο $X'(\mathbf{s})$, οι τιμές του οποίου είναι διακυμάνσεις των τιμών των $X(\mathbf{s})$, γύρω από την αναμενόμενη τιμή σε αυτές τις θέσεις (Δ.Θ, 2014).

$$X'(\mathbf{s}) = X(\mathbf{s}) - \mathbb{E}[X(\mathbf{s})] \quad (2.7)$$

2.2.3 Λοξότητα

Ο συντελεστής ασυμμετρίας \hat{s}_x αποτελεί την τρίτη ροπή γύρω από τον μέσο και ορίζεται ως εξής:

$$\hat{s}_x = \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \hat{m}_x)^3}{\hat{\sigma}_x^3} \quad (2.8)$$

όπου N το άθροισμα των σημείων του δείγματος. Η τιμή του παραπάνω συντελεστή για μια κανονική κατανομή είναι ίση με το μηδέν. Οι κατανομές που προέρχονται από γεωχημικές μεταβλητές είναι συχνά θετικά λοξές (Hohn, 1998).

2.2.4 Κύρτωση

Ο συντελεστής κύρτωσης είναι η τέταρτη ροπή γύρω από τον μέσο και η αντίστοιχη τιμή της για μια κανονική κατανομή είναι ίση με 3.

$$\hat{k}_x = \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \hat{m}_x)^4}{\hat{\sigma}_x^4} \quad (2.9)$$

2.2.5 Διασπορά

Η διασπορά σ^2 ενός τυχαίου πεδίου δίνεται από τη μέση τιμή του τετραγώνου της διακύμανσης.

$$\sigma_x^2(\mathbf{s}) \equiv \mathbb{E}[\{X(\mathbf{s}) - m_x(\mathbf{s})\}^2] = \mathbb{E}[X'^2(\mathbf{s})] \quad (2.10)$$

Η διασπορά σε ένα τυχαίο πεδίο είναι δυνατό να μεταβάλλεται από σημείο σε σημείο. Αν το πεδίο είναι στατιστικά ομοιογενές, η διασπορά διατηρείται σταθερή σε όλα τα σημεία (Pavlidis, 2016; Isaaks and Srivastava, 1989).

2.2.6 Τυπική Απόκλιση

Η τετραγωνική ρίζα της διακύμανσης του τυχαίου πεδίου $X(\mathbf{s})$,

$$\sigma_x = \sqrt{\mathbb{E}[X'^2(\mathbf{s})]} \quad (2.11)$$

ονομάζεται τυπική απόκλιση του $X(\mathbf{s})$ και προσδιορίζει ποσοτικά την απόκλιση της κατανομής από την μέση τιμή της. Η τυπική απόκλιση είναι το στατιστικό μέγεθος που χρησιμοποιείται για να εκφραστεί το πιθανό σφάλμα πειραματικών μετρήσεων και το σφάλμα εκτίμησης παραμέτρων μιας κατανομής πιθανότητας από ένα πεπερασμένο δείγμα (Δ.Θ, 2014).

2.2.7 Τυχαιότητα

Η τυχαιότητα χαρακτηρίζει φαινόμενα στα οποία η γνώση μιάς κατάστασης με απόλυτη ακρίβεια είναι αδύνατη λόγω διάφορων περιορισμών. Οι περιορισμοί αυτοί είτε είναι εγγενείς, οφείλονται δηλαδή στην έντονη χωρική και χρονική μεταβλητότητα του φαινομένου, είτε επιβάλλονται από την πειραματική διαδικασία (περιορισμένη διακριτική ικανότητα και τυχαία σφάλματα), είτε προκαλούνται από τις διακυμάνσεις περιβαλλοντικών παραγόντων, για παράδειγμα περιβαλλοντικοί παράγοντες, συγκέντρωση κατά βάρος οργανικού άνθρακα, κλπ (Δ.Θ, 2014).

2.2.8 Στατιστική Ομοιογένεια

Ορισμένες παραδοχές που θέτουν περιορισμούς στις ιδιότητες του πεδίου μπορούν να οδηγήσουν σε πιο αποτελεσματικές μεθόδους για τον γεωστατιστικό χαρακτηρισμό και την προσομοίωση (Hristopulos, 2020; Cressie, 1990). Η πιο κοινή απλουστευτική παραδοχή είναι η στατιστική ομοιογένεια, η οποία αποτελεί επέκταση του κλασικού ορισμού της ομοιογένειας. Μια ιδιότητα είναι ομοιογενής αν η αντίστοιχη μεταβλητή έχει σταθερή τιμή στον χώρο. Κατ' επέκταση, ένα τυχαίο πεδίο $X(\mathbf{s})$ είναι στατιστικά ομοιογενές ή στάσιμο αν εκπληρώνονται οι παρακάτω συνθήκες:

1. Η μέση τιμή είναι σταθερή, δηλαδή $m_X(\mathbf{s}) = m_X$.
2. Η συνάρτηση συνδιασποράς ορίζεται και εξαρτάται αποκλειστικά από το διάστημα της απόστασης $r = \mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2$ μεταξύ δύο σημείων, δηλαδή $c_X(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = c_X(r)$.
3. Η δεύτερη συνθήκη συνεπάγεται ότι η διασπορά ενός στατιστικά ομοιογενούς πεδίου είναι σταθερή.

Οι παραπάνω προϋποθέσεις ορίζουν την ασθενή στατιστική ομοιογένεια κατά την ασθενή έννοια. Σύμφωνα με την ισχυρή στατιστική ομοιογένεια, ένα τυχαίο πεδίο είναι στατιστικά ομοιογενές όταν η πολυδιάστατη συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας για N σημεία, όπου το N είναι οποιοσδήποτε θετικός ακέραιος, παραμένει αμετάβλητη από μετασχηματισμούς οι οποίοι αλλάζουν τη θέση των σημείων χωρίς να αλλάζουν τις μεταξύ τους αποστάσεις (VAROUCAKIS, 2012).

Συνεπώς, η έννοια της στατιστικής ομοιογένειας είναι ότι οι στατιστικές ιδιότητες του πεδίου είναι ανεξάρτητες από τις χωρικές συντεταγμένες του σημείων. Πρακτικά, η στατιστική ομοιογένεια προϋποθέτει πως δεν υπάρχουν χωρικές τάσεις, έτσι ώστε η μεταβολή των τιμών του πεδίου μπορεί να αποδοθεί σε διακυμάνσεις γύρω από μία σταθερή στάθμη ίση με τη μέση τιμή (Δ.Θ, 2014).

2.2.9 Στατιστική Ισοτροπία

Η στατιστική ισοτροπία είναι μια ιδιότητα η οποία προϋποθέτει τη στατιστική ομοιογένεια. Ένα πεδίο είναι στατιστικά ισοτροπικό αν είναι στατιστικά ομοιογενές, και ταυτόχρονα η συνάρτηση συνδιασποράς εξαρτάται μόνο από το μέτρο r , αλλά όχι από την κατεύθυνση του διανύσματος απόστασης \mathbf{r} . Αν μία συνάρτηση συνδιασποράς, λοιπόν, είναι στατιστικά ισοτροπική είναι εξίσου ορισμού στατιστικά ομοιογενής. Το αντίστροφο όμως δεν ισχύει (Hristopulos, 2020).

Στην περίπτωση στατιστικά ομοιογενών και ισοτροπικών πεδίων οι δύο πιο σημαντικές παράμετροι είναι η διασπορά $\sigma_x^2 = c_x(0)$ και το μήκος συσχέτισης ξ . Η διασπορά αποτελεί μέτρο του πλάτους (μεγέθους) των μεταβολών του πεδίου. Το μήκος συσχέτισης είναι η παράμετρος η οποία κανονικοποιεί την απόσταση και ορίζει το διάστημα μέσα στο οποίο υπάρχει αλληλεξάρτηση (δηλαδή η τιμή του πεδίου σε ένα σημείο επηρεάζει την τιμή στο άλλο) (Pavlidis, 2016).

2.3 Συνάρτηση Συνδιασποράς

Η Κεντρική Συνάρτηση Συνδιασποράς (ΚΣΣ) αποτελεί σημαντική ιδιότητα της διακύμανσης ενός τυχαίου πεδίου και μπορεί να αποδοθεί ως εξής:

$$c_x(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) \equiv \mathbb{E}[\{X(\mathbf{s}_1) - m_x(\mathbf{s}_1)\}\{X(\mathbf{s}_2) - m_x(\mathbf{s}_2)\}] \quad (2.12)$$

Η ΚΣΣ είναι ίση με τη **συνδιακύμανση**, δηλαδή

$$c_x(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \mathbb{E}[X'(\mathbf{s}_1)X'(\mathbf{s}_2)] \quad (2.13)$$

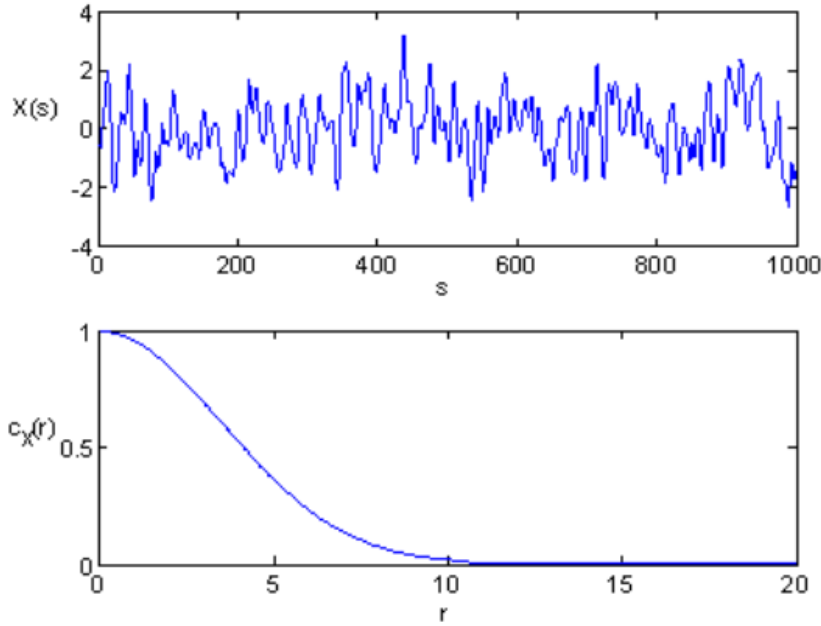
Επομένως, η ΚΣΣ περιγράφει ποσοτικά την εξάρτηση των διακυμάνσεων του πεδίου σε δύο διαφορετικά σημεία (Isaaks and Srivastava, 1989). Όταν τα δύο σημεία της συνάρτησης συνδιασποράς συμπίπτουν, η τιμή της ισούται με την διασπορά του πεδίου στο συγκεκριμένο σημείο, δηλαδή

$$c_x(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_1) = \sigma_x^2(\mathbf{s}_1) \quad (2.14)$$

Η μεταβολή της διασποράς ενός πεδίου στον χώρο υποδηλώνει ότι οι διακυμάνσεις του πεδίου αλλάζουν μέγεθος από σημείο σε σημείο (βλ. σχήμα 2.2) (Δ.Θ, 2014).

2.3.1 Συνθήκες Αποδοχής (Θεώρημα Bochner)

Οι συνθήκες αποδοχής για την συνάρτηση συνδιασποράς κρίνονται απαραίτητες καθώς σε γεωστατιστικές αναλύσεις η πειραματικά προσδιοριζόμενη χωρική



Σχήμα 2.2: Παράσταση μιας κατάστασης μονοδιάστατου τυχαίου πεδίου (άνω) και της αντίστοιχης συνάρτησης συνδιασποράς (κάτω). Το σχήμα πάρθηκε από (Hristopulos, 2020).

εξάρτηση προσαρμόζεται σε ένα βέλτιστο πρότυπο, το οποίο επιλέγεται από ένα σύνολο αποδεκτών θεωρητικών προτύπων (π.χ γκαουσιανό) (Pavlidis, 2016). Το θεώρημα Bochner καθορίζει τις συνθήκες αποδοχής για τη συνάρτηση συνδιασποράς. Αυτό εκφράζεται πιο αποδοτικά με τη βοήθεια της **φασματικής πυκνότητας συνδιασποράς**, η οποία δίνεται από τον μετασχηματισμό Fourier της συνάρτησης συνδιασποράς (Bochner et al., 1959). Ο μετασχηματισμός Fourier ορίζεται από το ολοκλήρωμα

$$\tilde{c}_X(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} c_X(\mathbf{r}), \quad (2.15)$$

όπου \mathbf{r} το διάνυσμα απόστασης μεταξύ δύο σημείων, $\int d\mathbf{r} = \int dx \int dy$ και \mathbf{k} είναι το διάνυσμα της χωρικής συχνότητας (κυματάνυσμα).

Μία συνάρτηση $c_X(\mathbf{r})$ θεωρείται αποδεκτή αν ισχύουν οι παρακάτω συνθήκες:

1. υπάρχει η φασματική πυκνότητα ισχύος $\tilde{c}_X(\mathbf{k})$,
2. είναι μη αρνητική σε όλο το πεδίο συχνοτήτων, δηλαδή $\tilde{c}_X(\mathbf{k}) \geq 0$, και
3. το ολοκλήρωμα της $\tilde{c}_X(\mathbf{k})$ σε ολόκληρο το πεδίο συχνότητας είναι φραγμένο, δηλαδή υπάρχει διασπορά στο πεδίο.

Από πρακτική άποψη, για να ελεγχθεί αν μία συνάρτηση αποτελεί αποδεκτό πρότυπο συνάρτησης συνδιασποράς χρειάζεται να υπολογιστεί (αναλυτικά ή αριθμητικά) ο μετασχηματισμός Fourier της συνάρτησης (Δ.Θ, 2014).

2.4 Μοντέλο Χωρικής Τάσης

Το τυχαίο πεδίο $X(\mathbf{s})$ είναι δυνατό να αναλυθεί σε δύο συνιστώσες. Η πρώτη συνιστώσα είναι η τάση $m_x(\mathbf{s})$ η οποία εκφράζει αργά μεταβαλλόμενες εξαρτήσεις στον χώρο, ενώ η δεύτερη είναι η διακύμανση $X'(\mathbf{s})$ του πεδίου γύρω από την τάση και αποτελεί το στοχαστικό κομμάτι, δηλαδή

$$X(\mathbf{s}) = m_x(\mathbf{s}) + X'(\mathbf{s}), \quad \mathbf{s} \in \Omega$$

Η χωρική τάση $m_x(\mathbf{s})$ μπορεί να προσδιοριστεί από πρότυπα γενικής και τοπικής εξάρτησης, όπως η πολλαπλή γραμμική παλινδρόμηση, τα φίλτρα κινούμενου μέσου όρου, και η μέθοδος της τοπικά ζυγισμένης παλινδρόμησης (Δ.Θ, 2014). Συνήθως όμως μοντελοποιείται με πολυώνυμα χαμηλής τάξης (Pavlidis, 2016).

Μια προϋπόθεση των αλγορίθμων γεωστατιστικής πρόβλεψης Kriging είναι η στασιμότητα, δηλαδή η χωρική στατιστική της τυχαίας μεταβλητής είναι αναλλοίωτη ως προς τη θέση εντός του πεδίου (Isaaks and Srivastava, 1989). Η παρουσία τάσεων μεγάλης κλίμακας παραβιάζει αυτή την υπόθεση της στασιμότητας, καθώς ο μέσος όρος εξαρτάται από τη θέση. Ο σκοπός της μοντελοποίησης με τάση είναι να αφαιρεθεί η ντετερμινιστική συνιστώσα τάσης μεγάλης κλίμακας από την τυχαία μεταβλητή για να ικανοποιηθεί η υπόθεση της στασιμότητας (Qu and Deutsch, 2018).

2.5 Χωρική Εξάρτηση

Ένα τυχαίο πεδίο καθορίζεται τόσο από την τυχειότητα όσο και από την αλληλεξάρτηση σε διαφορετικά σημεία του χώρου. Η χωρική εξάρτηση περιγράφει την εξάρτηση των τιμών του πεδίου σε διαφορετικά σημεία του χώρου μεταξύ τους. Η κατανομή πιθανότητας του πεδίου εμπεριέχει συσχετίσεις μεταξύ διαφορετικών σημείων, έτσι ώστε η πιθανότητα παρατήρησης μιας τιμής σε ένα σημείο να εξαρτάται από τις τιμές στα γειτονικά σημεία (VAROUCHAKIS, 2012).

2.5.1 Βαριόγραμμα

Υπάρχουν διάφοροι τρόποι μέτρησης της χωρικής εξάρτησης. Δύο από τους πλέον ευρέως χρησιμοποιούμενους είναι το **βαριόγραμμα** ή **ημιβαριόγραμμα** και η **συνάρτηση συσχέτισης**. Αυτές οι δύο συναρτήσεις περιγράφουν την εξάρτηση δυο σημείων στον χώρο κατά τη στατιστική έννοια καθώς και οι δύο συναρτήσεις αναφέρονται σε ζεύγη σημείων, επομένως η τιμή τους εξαρτάται από την απόσταση μεταξύ των σημείων. Ο όρος κατά την στατιστική έννοια, προσδιορίζει ότι η περιγραφόμενη εξάρτηση προκύπτει ως μια μέση τιμή από ένα μεγάλο αριθμό ζευγών και δεν χαρακτηρίζει ένα μεμονωμένο ζεύγος σημείων (Olea, 2012).

Η συνάρτηση συσχέτισης για ένα τυχαίο πεδίο περιγράφεται από την παρακάτω εξίσωση

$$\rho_x = \frac{c_x(\mathbf{r})}{\sigma_x^2(\mathbf{s})} \quad (2.16)$$

ενώ το βαριόγραμμα ενός τυχαίου πεδίου δίνεται από την εξίσωση

$$\gamma_x(\mathbf{s}, \mathbf{r}) = \frac{1}{2} \mathbb{E} \left\{ [X'(\mathbf{s} + \mathbf{r}) - X'(\mathbf{s})]^2 \right\} \quad (2.17)$$

Συνεπώς, το βαριόγραμμα ορίζεται σε σχέση με ένα ζεύγος σημείων, με τη βοήθεια της μέσης τιμής του τετραγώνου της διαφοράς $\delta X(\mathbf{s}; \mathbf{r}) \equiv X'(\mathbf{s} + \mathbf{r}) - X'(\mathbf{s})$. Το πεδίο της διαφοράς $\delta X(\mathbf{s}; \mathbf{r})$ αποκαλείται επίσης βήμα απόστασης \mathbf{r} . Η τιμή του βαριογράμματος για $\mathbf{r} = 0$ μηδενίζεται, σύμφωνα με την εξίσωση ορισμού του.

Αν το τυχαίο πεδίο $X(\mathbf{s})$ είναι στατιστικά ομοιογενές, το βαριόγραμμα συνδέεται άμεσα με τη συνάρτηση συνδιασποράς ως εξής:

$$\gamma_x(\mathbf{r}) = \sigma_x^2 - c_x(\mathbf{r}) \quad (2.18)$$

Το βαριόγραμμα $\gamma_x(\mathbf{r})$ ενός στατιστικά ομοιογενούς πεδίου περιέχει την ίδια πληροφορία με την συνάρτηση συνδιασποράς και εξαρτάται αποκλειστικά από την απόσταση \mathbf{r} μεταξύ των σημείων (Δ.Θ, 2014).

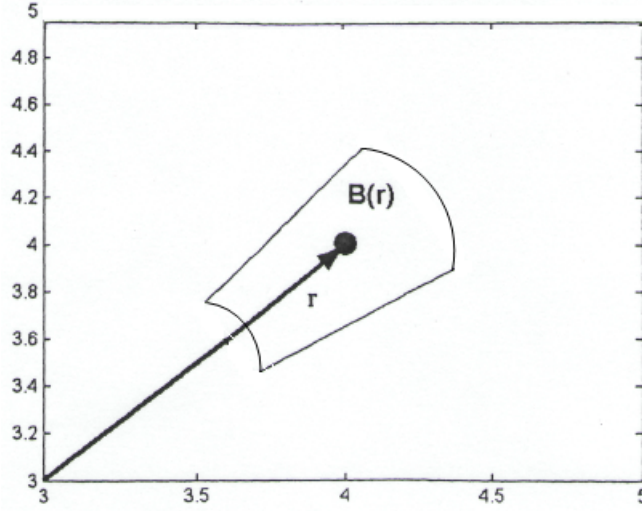
2.5.2 Ευσταθής Εκτιμήτρια Βαριογράμματος

Η ευσταθής εκτιμήτρια (Cressie and Hawkins, 1980) ορίζεται ως εξής:

$$2\hat{\gamma}_x(\mathbf{r}_k) = \left[\frac{1}{N_r} \sum_{i=1}^{n_r} |X(\mathbf{s}_i) - X(\mathbf{s}_j)|^{1/2} \right]^4 / \left(0.457 + \frac{0.494}{N_r} \right) \quad (2.19)$$

όπου, $(\mathbf{s}_i - \mathbf{s}_j) \in B(\mathbf{r}_k)$, $k = 1, \dots, N_c$, N_c το πλήθος των τάξεων και n_r το πλήθος των ζευγών που περιέχονται μέσα στην τάξη $B(\mathbf{r}_k)$ όπως φαίνεται στον πίνακα 4.1.

Υποθετικά η περιοχή που δημιουργείται περιμετρικά του διανύσματος \mathbf{r}_k ονομάζεται (\mathbf{r}_k) και υπολογίζει το μέγεθος της τάξης του βήματος (βλ. σχήμα 2.3) (Δ.Θ, 2014).



Σχήμα 2.3: Απεικόνιση της τάξης διανυσμάτων $B(\mathbf{r})$ που αντιστοιχεί στο διάνυσμα απόστασης r . Το σχήμα πάρθηκε από (Hristopulos, 2020).

2.5.3 Ιδιότητες Βαριογράμματος

Σε ένα στατιστικά ομοιογενές πεδίο η τιμή του βαριογράμματος για πολύ μεγάλες αποστάσεις \mathbf{r} τείνει ασυμπτωτικά προς ένα όριο ίσο την διασπορά σ_x^2 του τυχαίου πεδίου. Αυτή η ιδιότητα βασίζεται στην σχέση $\gamma_x(\mathbf{r}) = \sigma_x^2 - c_x(\mathbf{r})$ και στο γεγονός ότι η τιμή της συνάρτησης συνδιασποράς τείνει στο μηδέν σε μεγάλες αποστάσεις.

Το μήκος συσχέτισης προσδιορίζει την "ταχύτητα" με την οποία το βαριογράμμα πλησιάζει το άνω φράγμα και προσδιορίζει την ακτίνα εντός της οποίας δύο σημεία βρίσκονται σε χωρική εξάρτηση.

Η χωρική εξάρτηση των τιμών του πεδίου μεταξύ δύο γειτονικών σημείων καθορίζεται από τις παραμέτρους του βαριογράμματος (Isaaks and Srivastava, 1989). Το βαριογράμμα παρουσιάζει τις παρακάτω ιδιότητες:

- Είναι ημιθετικά ορισμένο, δηλαδή $\gamma_x(\mathbf{r}) \geq 0$.
- Ξεκινά στο 0 για $r = 0$.

- Συνήθως αυξάνει ανάλογα, όχι απαραίτητα γραμμικά, με το r .
- Έχει την δυνατότητα να αυξάνει μέχρι μια ορισμένη τιμή του r και μετά να σταθεροποιείται.
- Εναλλακτικά, μπορεί να συνεχίσει να αυξάνει για αυξανόμενα διαστήματα r .

2.5.4 Επιτρεπτά Μοντέλα Βαριογράμματος

Ένα βαριόγραμμα θεωρείται αποδεκτό αν είναι υπό συνθήκη αρνητικά ορισμένο (πρβλ. 2.3.1) (Bochner et al., 1959). Οι εξισώσεις που περιγράφονται παρακάτω αποτελούν μερικά από τα ευρέως χρησιμοποιούμενα ισοτροπικά πρότυπα βαριογραμμμάτων. Επιπλέον, διακρίνονται οι παράμετροι των μοντέλων, το άνω φράγμα ή οροφή σ^2 (Sill), το μήκος συσχέτισης ξ (Range) και το φαινόμενο πυρήνα ή κόκκου c_0 (Nugget effect).

1. Εκθετικό:

$$\gamma_x(r) = \sigma_x^2 \left[1 - \exp \left(- \frac{\|\mathbf{r}\|}{\xi} \right) \right] \quad (2.20)$$

2. Γκαουσιανό:

$$\gamma_x(r) = \sigma_x^2 \left[1 - \exp \left(- \frac{\|\mathbf{r}\|^2}{\xi^2} \right) \right] \quad (2.21)$$

3. Σφαιρικό:

$$\gamma_x(r) = \begin{cases} \sigma_x^2 \left[1.5 \left(\frac{\|\mathbf{r}\|}{\xi} \right) - 0.5 \left(\frac{\|\mathbf{r}\|}{\xi} \right)^3 \right] & \|\mathbf{r}\| \leq \xi \\ \sigma_x^2 & \|\mathbf{r}\| \geq \xi \end{cases} \quad (2.22)$$

4. Δυναμονομικό (αλγεβρικό):

$$\gamma_x(\|\mathbf{r}\|) = \alpha \|\mathbf{r}\|^{2H} \quad 0 < H < 1, \alpha > 0 \quad (2.23)$$

5. Φαινόμενο Κόκκου:

$$\gamma_x(r) = \begin{cases} C_0 \{1 - \delta(r)\} & r \neq 0 \\ 0 & r = 0 \end{cases} \quad (2.24)$$

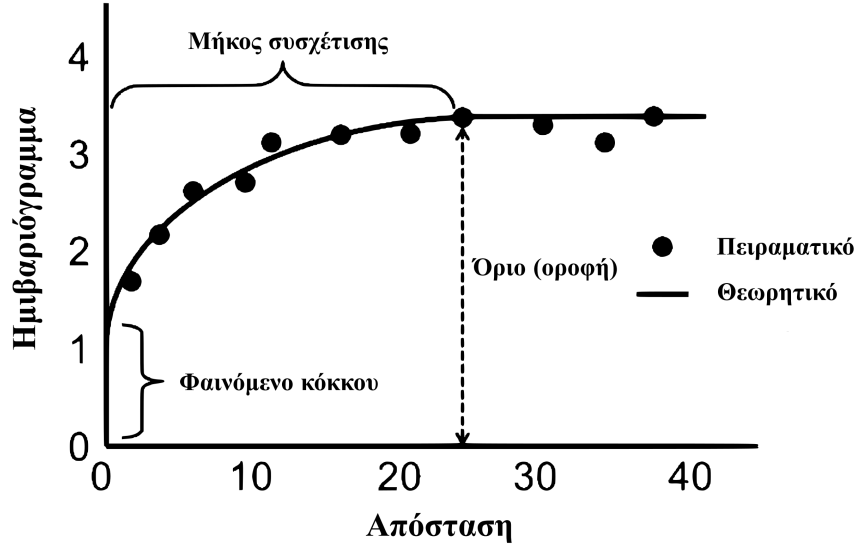
2.5.5 Προσαρμογή σε Θεωρητικό Μοντέλο

Το πειραματικό βαριόγραμμα προσαρμόζεται σε ένα θεωρητικό μοντέλο το οποίο επιτρέπει τον προσδιορισμό του βαριογράμματος για οποιαδήποτε απόσταση. Με άλλα λόγια, το θεωρητικό μοντέλο αποτελεί μια συνεχή θεωρητική καμπύλη που προσαρμόζεται στο πειραματικό βαριόγραμμα (βλ. σχήμα 2.4) και χρησιμοποιείται για την πρόβλεψη των τιμών του πεδίου σε σημεία όπου δεν υπάρχουν μετρήσεις (Δ.Θ, 2014).

Οι βέλτιστες τιμές των παραμέτρων σ_0^2 (άνω φράγμα) και ξ (ακτίνα συσχέτισης) προσδιορίζονται από την ελαχιστοποίηση του αθροίσματος των τετραγωνικών σφαλμάτων σύμφωνα με την παρακάτω εξίσωση:

$$\chi^2(\sigma_0^2, \xi) = \sum_{k=1}^{N_c} n(\mathbf{r}_k) [\hat{\gamma}_x(\mathbf{r}_k) - \gamma_x(\mathbf{r}_k; \sigma_0^2, \xi)]^2 \quad (2.25)$$

όπου, $\gamma_x(\mathbf{r}_k; \sigma_0^2, \xi)$ το θεωρητικό μοντέλο, N_c ο αριθμός των τάξεων και $n(\mathbf{r}_k)$ το πλήθος ζευγών ανά τάξη απόστασης.



Σχήμα 2.4: Προσαρμογή του πειραματικού βαριογράμματος σε ένα εκθετικό μοντέλο. Στο σχήμα απεικονίζονται οι βέλτιστοι παράμετροι του εκθετικού μοντέλου, το άνω φράγμα ή οροφή (Sill), το μήκος συσχέτισης (Range) και το Φαινόμενο πυρήνα ή κόκκου (Nugget effect). Το σχήμα πάρθηκε από (Biswas and Si, 2013).

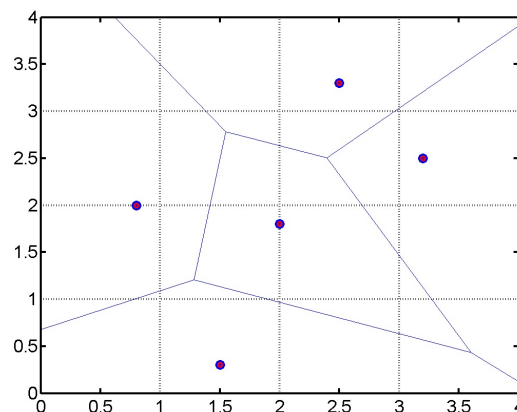
Η εκτιμώμενη τιμή του **άνω φράγματος** σ^2 δεν αποδίδει με ακρίβεια την πραγματική τιμή της διασποράς του πεδίου καθώς προκύπτει από την ελαχιστοποίηση της απόκλισης του θεωρητικού από το πειραματικό μοντέλο (Δ.Θ, 2014).

Η **ακτίνα συσχέτισης** ξ ορίζει το διάστημα αλληλεξάρτησης των σημείων της περιοχής μελέτης. Η παράμετρος αυτή είναι δυνατό να παρουσιάζει σημαντικές αποκλίσεις όταν υπάρχουν σφάλματα ή έκτοπες τιμές, ή όταν το δείγμα είναι αραιο (Hristopulos, 2020).

Το **φαινόμενο πυρήνα** c_0 οφείλεται τόσο στην χαμηλή πυκνότητα δεδομένων (π.χ μειωμένος αριθμός γεωτρήσεων) όσο και στα σφάλματα μετρήσης. Η παράμετρος αυτή μεταβάλλεται ανάλογα με το εύρος των τάξεων απόστασης που υπολογίζεται το βαριογράμμα. Όταν το εύρος των τάξεων απόστασης αυξάνεται, η διακριτική ικανότητα του πειραματικού βαριογράμματος μειώνεται, άρα και η φαινόμενη μεταβλητότητα στις μικρές αποστάσεις αυξάνεται (Δ.Θ, 2014).

2.6 Μέθοδος Voronoi

Το διάγραμμα Voronoi σχηματίζεται από κυρτά πολύγωνα τα οποία περιβάλλουν κάθε σημείο δειγματοληψίας. Στόχος της μεθόδου είναι ο εντοπισμός σημείων τα οποία βρίσκονται πλησιέστερα σε κάθε θέση δειγματοληψίας. Συνεπώς, η περιοχή που ανήκει σε κάθε πολυγώνο voronoi αποτελεί τον γεωμετρικό τόπο των σημείων του χώρου που βρίσκονται πλησιέστερα στη θέση δειγματοληψίας από ό,τι σε οποιοδήποτε άλλο σημείο δειγματοληψίας. Η τιμή κάθε σημείου εντός του πολυγώνου Voronoi θεωρείται ότι ταυτίζεται με την τιμή του εκάστοτε σημείου δειγματοληψίας που βρίσκεται εντός του πολυγώνου (Δ.Θ, 2014).



Σχήμα 2.5: Διάγραμμα Voronoi. Το σχήμα πάρθηκε από (Hristopulos, 2020).

2.7 Εκτίμηση Τυχαίων Πεδίων - Kriging

Συνήθως η μεταβολή μιας ιδιότητας (π.χ. συγκέντρωση ολικού οργανικού άνθρακα) στον χώρο αναπαριστάται με την βοήθεια ενός πεδίου τυχαίων μεταβλητών. Ο όρος "εκτίμηση" αναφέρεται σε όλες τις μαθηματικές διαδικασίες που απαιτούνται για να προσδιοριστούν οι άγνωστες τιμές του πεδίου, δηλαδή οι τιμές σε σημεία όπου δεν υπάρχουν μετρήσεις της ιδιότητας (Christakos, 2012).

Η εκτίμηση μπορεί να είναι είτε σημειακή, αν πρόκειται για την τιμή του πεδίου σε ένα συγκεκριμένο σημείο, είτε γενική αν προσδιορίζει την τιμή που περιγράφει ολόκληρη την περιοχή (Wackernagel et al., 1997). Απαραίτητη προϋπόθεση για την εκτίμηση του πεδίου είναι η ύπαρξη ενός προτύπου χωρικής εξάρτησης, προκειμένου η τιμή της ιδιότητας σε κάθε σημείο να επηρεάζεται από τις γειτονικές τιμές του πεδίου.

Η εκτίμηση μιας ιδιότητας (π.χ. συγκέντρωση οργανικού άνθρακα) στα σημεία όπου δεν υπάρχουν μετρήσεις χρησιμοποιώντας μετρήσεις των γειτονικών σημείων ονομάζεται χωρική παρεμβολή. Οι αιτιοκρατικές μέθοδοι χωρικής παρεμβολής είναι ιδιαίτερα ευαίσθητες στον θόρυβο και στα σφάλματα των μετρήσεων. Η χωρική μεταβλητότητα και η περιορισμένη δειγματοληψία καθιστούν τις ντετερμινιστικές μεθόδους λιγότερο ακριβείς και η προσέγγιση τέτοιων προβλημάτων με γεωστατιστικές τεχνικές, όπως οι μέθοδοι "kriging", αποτελούν ιδανικότερη επιλογή (Modis and Stamatakis, 2016).

Ο όρος "kriging" αποδόθηκε από τον G. Matheron προς τιμή του D.G. Krige, ο οποίος πρωτοπόρησε στη χρήση στατιστικών μεθόδων για την εκτίμηση αποθεμάτων στη Νότια Αφρική κατά την δεκαετία του '50 (Isaaks and Srivastava, 1989; Krige, 1951). Η μέθοδοι kriging εφαρμόζονται εκτενώς από τις αρχές του 1970 μέχρι σήμερα και έχουν καθιερωθεί επίσημα σε διεθνές επίπεδο ως η μοναδική αποδεκτή τεχνική για την εκτίμηση μεταλλευτικών αποθεμάτων (Καπαγερίδης, 2015).

Έστω ένα σύνολο δεδομένων δείγματος $X(\mathbf{s}_i)$ στα σημεία $\mathbf{s}_i (i = 1, \dots, N)$ τα οποία ανήκουν σε μια περιοχή Ω και ένα σημείο εκτίμησης $\mathbf{u} \in \Omega$ το οποίο δεν ταυτίζεται με κανένα από τα $\mathbf{s}_i (i = 1, \dots, N)$. Η εκτιμώμενη τιμή του πεδίου στο σημείο \mathbf{u} περιγράφεται ως $\hat{X}(\mathbf{u})$. Η επανάληψη αυτής της διαδικασίας σε όλα τα σημεία του υπολογιστικού πλέγματος επιτρέπει τη χαρτογράφηση ολόκληρης της περιοχής μελέτης. Οι χάρτες που δημιουργούνται αναπαριστούν τις ισοϋψείς καμπύλες του πεδίου. Οι χάρτες αυτοί χρειάζεται να παρουσιάζουν εκτίμηση της αξιοπιστίας, έτσι ώστε να προσδιορίζεται η αβεβαιότητα της εκτίμησης σε κάθε σημείο του πεδίου (VAROUCHAKIS, 2012).

Η εκτίμηση πραγματοποιείται με βάση τον γραμμικό συνδυασμό των σημείων που βρίσκονται στην περιοχή του σημείου εκτίμησης (Armstrong, 1998). Στις μεθόδους kriging προσδιορίζεται μια γειτονιά συσχέτισης $\omega(\mathbf{u})$ του σημείου \mathbf{u} , η οποία περιέχει $n(\mathbf{u}) \leq N$ σημεία από τα $\mathbf{s}_i (i = 1, \dots, N)$. Το μέγεθος της γειτονιάς προσδιορίζεται από το μήκος συσχέτισης. Η διακύμανση του πεδίου στο σημείο εκτίμησης εκφράζεται σύμφωνα με τον παρακάτω γραμμικό συνδυασμό (Δ.Θ, 2014).

$$\hat{X}(\mathbf{u}) - m_x(\mathbf{u}) = \sum_{\mathbf{s}_\alpha \in \omega(\mathbf{u})} \lambda_\alpha [X(\mathbf{s}_\alpha) - m_x(\mathbf{s}_\alpha)] = \sum_{\alpha=1}^{n(\mathbf{u})} \lambda_\alpha [X(\mathbf{s}_\alpha) - m_x(\mathbf{s}_\alpha)], \quad (2.26)$$

Οι συντελεστές λ_α αναφέρονται στα γραμμικά βάρη. Η εξίσωση (2.26) περιγράφει τη διακύμανση στο σημείο εκτίμησης σαν συνάρτηση της διακύμανσης στα υπόλοιπα σημεία της γειτονιάς εκτίμησης. Η εκτιμώμενη τιμή του πεδίου ορίζεται από την παρακάτω εξίσωση.

$$\hat{X}(\mathbf{u}) = m_x(\mathbf{u}) + \sum_{\alpha=1}^{n(\mathbf{u})} \lambda_\alpha [X(\mathbf{s}_\alpha) - m_x(\mathbf{s}_\alpha)]. \quad (2.27)$$

Η εκτιμήτρια $\hat{X}(\mathbf{u})$ καθορίζεται από έναν γραμμικό συνδυασμό τιμών ενός τυχαίου πεδίου. Επομένως, η εκτιμήτρια $\hat{X}(\mathbf{u})$ και το σφάλμα εκτίμησης $\varepsilon(\mathbf{u})$ μπορούν να θεωρηθούν ως τυχαίες μεταβλητές. Οι μέθοδοι kriging χρησιμοποιούν τα βάρη που ελαχιστοποιούν τη διασπορά του σφάλματος της εκτίμησης έτσι ώστε να προσδιορίσουν τη "βέλτιστη" τιμή $\hat{X}(\mathbf{u})$ (Wackernagel et al., 1997).

Σφάλμα Εκτίμησης

Το σφάλμα εκτίμησης είναι η τυχαία μεταβλητή που προκύπτει από τη διαφορά ανάμεσα στην πραγματική και την εκτιμώμενη τιμή του πεδίου.

$$\varepsilon(\mathbf{u}) \equiv X(\mathbf{u}) - \hat{X}(\mathbf{u}) \quad (2.28)$$

Συνθήκη Αμεροληψίας

Η συνθήκη αμεροληψίας καθορίζει ότι η μέση τιμή του σφάλματος εκτίμησης είναι ίση με το μηδέν, δηλαδή

$$\mathbb{E}[\varepsilon(\mathbf{u})] = \mathbb{E}[\hat{X}(\mathbf{u}) - X(\mathbf{u})] = 0 \quad (2.29)$$

Η βέλτιστη τιμή $\hat{X}(\mathbf{u})$ αντιστοιχεί στην τιμή η οποία ελαχιστοποιεί τη διασπορά του σφάλματος εκτίμησης, δηλαδή

$$\sigma_E^2(\mathbf{u}) = Var \left\{ X(\mathbf{u}) - \hat{X}(\mathbf{u}) \right\} \quad (2.30)$$

2.7.1 Συνθήκες Εφαρμογής Μεθόδων Kriging

Οι μέθοδοι kriging χρησιμοποιούν ως πρότυπο τις ακόλουθες παραδοχές:

1. Αν αφαιρεθεί η χωρική τάση, τότε το πεδίο αποκτά στάσιμες ιδιότητες. Το νέο πεδίο αποτελείται από την διακύμανση.
2. Αν η συνάρτηση κατανομής πιθανότητας του πεδίου είναι συμμετρική και κατά προτίμηση γκαουσιανή, τότε η εκτίμηση είναι ακριβής.
3. Αν η διακύμανση περιγράφεται από ένα στατιστικά ομοιογενές πεδίο, τότε η συνάρτηση διασποράς και το βαριόγραμμα εξαρτώνται αποκλειστικά από την απόσταση μεταξύ δύο σημείων. Ωστόσο, δεν είναι απαραίτητο πάντα να υπάρχει ισοτροπία.

$$\mathbb{E} [X'(\mathbf{s} + \mathbf{r})X'(\mathbf{s})] = c_X(\mathbf{r})$$

2.7.2 Παραλλαγές Kriging

Η μέθοδος kriging έχει πλέον καθιερωθεί στη μεταλλευτική έρευνα και η συνεχής εφαρμογή της σε ιδιόμορφα τυχαία πεδία είχε ως αποτέλεσμα την ανάπτυξη νέων προσεγγίσεων που παρέχουν πιο ακριβείς και αμερόληπτες εκτιμήσεις (Goonaerts et al., 1997). Η μέθοδος **kriging με παλινδρόμηση** προκύπτει αν η τάση διαχωριστεί από τις διακυμάνσεις. Στην περίπτωση αυτή το kriging εφαρμόζεται στη διακύμανση (Δ.Θ, 2014). Οι προσεγγίσεις αυτές ανάλογα με την μέση τιμή και τον τρόπο χειρισμού της ανάλυσης του πεδίου σε τάση και διακυμάνσεις διακρίνονται σε πέντε κατηγορίες μεθόδων.

1. Στο **απλό kriging** (simple kriging) η μέση τιμή του πεδίου είναι γνωστή σε όλη την περιοχή εκτίμησης (Wackernagel et al., 1997).
2. Στο **κανονικό Kriging** (ordinary kriging) η μέση τιμή του πεδίου θεωρείται σταθερή στη γειτονιά συσχέτισης $\omega(\mathbf{u})$ του σημείου εκτίμησης. Ωστόσο, η τιμή της $m_X(\mathbf{s})$ είναι πιθανό να μεταβάλλεται από γειτονιά σε γειτονιά (Δ.Θ, 2014).

3. Το **καθολικό Kriging** (universal kriging) προκύπτει αν η τάση συμπεριληφθεί στο πεδίο προς εκτίμηση, ενώ η μέση τιμή του πεδίου μεταβάλλεται εντός της γειτονίας του σημείου εκτίμησης (Wackernagel et al., 1997).
4. Το **kriging σε πεδίο δεικτών** (indicator kriging) εφαρμόζεται όταν η συνάρτηση κατανομής πιθανότητας δεν είναι συμμετρική και παρουσιάζει σημαντική πυκνότητα στις υψηλές τιμές. Η μέθοδος αυτή μετατρέπει τα αρχικά δεδομένα σε δείκτες οι οποίοι λαμβάνουν τις τιμές 1 ή 0 ανάλογα με το αν υπερβαίνουν ένα καθορισμένο όριο εκμεταλλεύσιμης περιεκτικότητας. Η επανάληψη της εκτίμησης για πολλαπλές τιμές του ορίου επιτρέπει την εκτίμηση της αθροιστικής κατανομής πιθανότητας (Hohn, 1998).
5. Το **συνδυαστικό kriging** (co-kriging) εφαρμόζεται για δύο τυχαίες μεταβλητές οι οποίες παρουσιάζουν ισχυρή συσχέτιση με σκοπό την χρήση της πρώτης μεταβλητής στη διαδικασία εκτίμησης της δεύτερης σε σημεία όπου δεν υπάρχουν μετρήσεις. Για παράδειγμα, η περιεκτικότητα σε Pb μπορεί να χρησιμοποιηθεί στην εκτίμηση του περιεχόμενου Ag, μειώνοντας το κόστος των αναλύσεων αργύρου (Καπαγερίδης, 2015).

2.7.3 Απλό Kriging

Η εκτιμήτρια δίνεται από την παρακάτω εξίσωση:

$$\hat{X}(\mathbf{u}) = \sum_{\alpha=1}^{n(\mathbf{u})} \lambda_{\alpha} X(\mathbf{s}_{\alpha}) - m_{\mathbf{x}} \left[\sum_{\alpha=1}^{n(\mathbf{u})} \lambda_{\alpha} - 1 \right] \quad (2.31)$$

Η μέση τιμή $m_{\mathbf{x}}$ είναι σταθερή στην περιοχή εκτίμησης και προσδιορίζεται με βάση τα αρχικά δεδομένα (Isaaks and Srivastava, 1989). Η διασπορά του σφάλματος δίνεται από την επόμενη εξίσωση:

$$\sigma_{E,SK}^2(\mathbf{u}) = \sum_{\alpha=1}^{n(\mathbf{u})} \sum_{\beta=1}^{n(\mathbf{u})} \lambda_{\alpha} \lambda_{\beta} c_{\mathbf{x}}(\mathbf{s}_{\alpha} - \mathbf{s}_{\beta}) + \sigma_{\mathbf{x}}^2 - 2 \sum_{\alpha=1}^{n(\mathbf{u})} \lambda_{\alpha} c_{\mathbf{x}}(\mathbf{s}_{\alpha} - \mathbf{u}) \quad (2.32)$$

Οι βέλτιστες τιμές των γραμμικών συντελεστών ελαχιστοποιούν το μέσο τετραγωνικό σφάλμα. Οι συντελεστές υπολογίζονται μέσω της επίλυσης του συστήματος εξισώσεων που προκύπτει από τον μηδενισμό των μερικών παραγώγων του σφάλματος ως προς όλα τα γραμμικά βάρη, δηλαδή

$$\frac{\partial \sigma_{E,SK}^2(\mathbf{u})}{\partial \lambda_{\alpha}} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, n(\mathbf{u}) \quad (2.33)$$

Το γραμμικό σύστημα που προκύπτει περιγράφεται ως εξής:

$$\sum_{\beta=1}^{n(\mathbf{u})} \lambda_{\beta} c_{\mathbf{x}}(\mathbf{s}_{\alpha} - \mathbf{s}_{\beta}) = c_{\mathbf{x}}(\mathbf{s}_{\alpha} - \mathbf{u}), \quad \alpha = 1, \dots, n(\mathbf{u}) \quad (2.34)$$

Ωστόσο, το παραπάνω γραμμικό σύστημα μπορεί να εκφραστεί ως εξίσωση πινάκων, ως εξής:

$$\mathbf{C}_{\alpha,\beta} \lambda_{\beta} = \mathbf{C}_{\alpha,u} \quad (2.35)$$

Με τη χρήση της σχέσης $c_{\mathbf{x}}(0) = \sigma_{\mathbf{x}}^2$ οι πίνακες του γραμμικού συστήματος διαμορφώνονται ως εξής:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{\mathbf{x}}^2 & \cdots & \cdots & c_{\mathbf{x}}(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_n) \\ c_{\mathbf{x}}(\mathbf{s}_2 - \mathbf{s}_1) & \cdots & \cdots & c_{\mathbf{x}}(\mathbf{s}_2 - \mathbf{s}_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{\mathbf{x}}(\mathbf{s}_n - \mathbf{s}_1) & \cdots & \vdots & \sigma_{\mathbf{x}}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{x}}(\mathbf{s}_1 - \mathbf{u}) \\ c_{\mathbf{x}}(\mathbf{s}_2 - \mathbf{u}) \\ \vdots \\ c_{\mathbf{x}}(\mathbf{s}_n - \mathbf{u}) \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

Η λύση του συστήματος δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

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

Για τον υπολογισμό των στοιχείων του πίνακα συνδιασποράς χρησιμοποιείται το βέλτιστο πρότυπο του βαριογράμματος, όπως φαίνεται στην παρακάτω εξίσωση:

$$c_{\mathbf{x}}(\mathbf{s}_{\alpha}, \mathbf{s}_{\beta}) = \sigma_{\mathbf{x}}^2 - \gamma_{\mathbf{x}}(\mathbf{s}_{\alpha}, \mathbf{s}_{\beta}) \quad (2.37)$$

Η διασπορά του σφάλματος ή το μέσο τετραγωνικό σφάλμα της εκτίμησης προσδιορίζεται από τις επόμενες εξισώσεις:

$$\sigma_{E,SK}^2(\mathbf{u}) = \sigma_{\mathbf{x}}^2 - \sum_{\alpha=1}^{n(\mathbf{u})} \sum_{\beta=1}^{n(\mathbf{u})} C_{u,\alpha} C_{\alpha,\beta}^{-1} C_{\beta,u} \quad (2.38)$$

Επιπλέον, η σχέση αυτή περιγράφεται ισοδύναμα ως εξής:

$$\sigma_{E,SK}^2(\mathbf{u}) = \sigma_{\mathbf{x}}^2 \left[1 - \sum_{\alpha=1}^{n(\mathbf{u})} \sum_{\beta=1}^{n(\mathbf{u})} \rho_{\alpha,u} \rho_{\alpha,\beta}^{-1} \rho_{\beta,u} \right] \quad (2.39)$$

$$\sigma_{E,SK}^2(\mathbf{u}) = \sigma_{\mathbf{x}}^2 \left(1 - \sum_{\alpha=1}^{n(\mathbf{u})} \rho_{u,\alpha} \lambda_{\alpha} \right) \quad (2.40)$$

όπου $\rho_{\alpha,\beta}$ είναι τα στοιχεία του πίνακα συσχέτισης $C_{\alpha,\beta} = \sigma_x^2 \rho_{\alpha,\beta}$.

Με βάση τις παραπάνω εξισώσεις προκύπτει ότι το σφάλμα της εκτίμησης αυξάνεται ανάλογα με την τυπική απόκλιση. Αντίθετα, το σφάλμα μειώνεται όταν ο λόγος της απόστασης προς το αντίστοιχο μήκος συσχέτισης (αδιάστατη απόσταση) έχει τιμή μικρότερη της μονάδας (Δ.Θ, 2014).

2.7.4 Κανονικό Kriging

Η μέθοδος κανονικού kriging εφαρμόζεται για την εκτίμηση μιας τιμής σε ένα σημείο μιας περιοχής όπου το βαριόγραμμα είναι γνωστό (Hohn, 1998). Η μέση τιμή θεωρείται άγνωστη και σταθερή μέσα σε κάθε γειτονιά (συσχέτισης) της θέσης εκτίμησης, αλλά μεταβάλλεται από γειτονιά σε γειτονιά (Wackernagel et al., 1997). Για τον υπολογισμό της βέλτιστης μέσης τιμής είναι απαραίτητη η συνάρτηση συνδιασποράς. Ωστόσο, η εκτίμηση της συνάρτησης συνδιασποράς προϋποθέτει την γνώση της μέσης τιμής. Το αναδρομικό αυτό πρόβλημα μπορεί να λυθεί με την χρήση της μεθόδου κανονικού kriging (Hristopulos, 2020). Σύμφωνα με την βασική εξίσωση του kriging, η εκτίμηση περιγράφεται από τις παρακάτω εξισώσεις:

$$\hat{X}(\mathbf{u}) = \sum_{\alpha=1}^{n(\mathbf{u})} \lambda_{\alpha} X(\mathbf{s}_{\alpha}) \quad (2.41)$$

$$\sum_{\alpha=1}^{n(\mathbf{u})} \lambda_{\alpha} = 1 \quad (2.42)$$

Η δεύτερη εξίσωση εκφράζει την συνθήκη αμεροληψίας. Στη μέθοδο κανονικού kriging, το ελάχιστο μέσο τετραγωνικό σφάλμα υπολογίζεται με τη χρήση συντελεστών Lagrange μ λαμβάνοντας υπόψη τον περιορισμό που επιβάλλει η συνθήκη αμεροληψίας στις τιμές των βαρών. Η διασπορά του σφάλματος υπολογίζεται ως εξής:

$$\begin{aligned} \sigma_{E,OK}^2(\mathbf{u}) = & \sigma_x^2(\mathbf{u}) + \sum_{\alpha=1}^{n(\mathbf{u})} \sum_{\beta=1}^{n(\mathbf{u})} \lambda_{\alpha} \lambda_{\beta} \mathbb{E}[X'(\mathbf{s}_{\alpha}) X'(\mathbf{s}_{\beta})] \\ & - 2 \sum_{\alpha=1}^{n(\mathbf{u})} \lambda_{\alpha} \mathbb{E}[X'(\mathbf{s}_{\alpha}) X'(\mathbf{u})] + 2\mu \sum_{\beta=1}^{n(\mathbf{u})} (\lambda_{\beta} - 1) \end{aligned} \quad (2.43)$$

Η σταθερά 2μ είναι ο συντελεστής Lagrange για την συνθήκη αμεροληψίας. Με τη χρήση της συνάρτησης συνδιασποράς η παραπάνω σχέση εκφράζεται ως εξής:

$$\begin{aligned} \sigma_{E,OK}^2(\mathbf{u}) = \sigma_x^2(\mathbf{u}) + \sum_{\alpha=1}^{n(\mathbf{u})} \sum_{\beta=1}^{n(\mathbf{u})} \lambda_{\alpha} \lambda_{\beta} c_x(\mathbf{s}_{\alpha}, \mathbf{s}_{\beta}) \\ - 2 \sum_{\alpha=1}^{n(\mathbf{u})} \lambda_{\alpha} c_x(\mathbf{s}_{\alpha}, \mathbf{u}) + 2\mu \sum_{\beta=1}^{n(\mathbf{u})} (\lambda_{\beta} - 1) \end{aligned} \quad (2.44)$$

Η ελάχιστη τιμή τιμή του σφάλματος εκτίμησης προσδιορίζεται μέσω της επίλυσης του συστήματος των εξισώσεων που προκύπτει από τον μηδενισμό των παραγώγων του σφάλματος ως προς τα βάρη και την παράμετρο μ , δηλαδή

$$\frac{\partial \sigma_{E,OK}^2(\mathbf{u})}{\partial \lambda_{\alpha}} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, n(\mathbf{u}) \quad (2.45)$$

$$\frac{\partial \sigma_{E,OK}^2(\mathbf{u})}{\partial \mu} = 0 \quad (2.46)$$

Οι συνθήκες αυτές παράγουν το ακόλουθο σύστημα εξισώσεων για τα γραμμικά βάρη.

$$\sum_{\beta=1}^{n(\mathbf{u})} \lambda_{\beta} c_x(\mathbf{s}_{\alpha} - \mathbf{s}_{\beta}) + \mu = c_x(\mathbf{s}_{\alpha} - \mathbf{u}), \quad \alpha = 1, \dots, n(\mathbf{u}) \quad (2.47)$$

$$\sum_{\alpha=1}^{n(\mathbf{u})} \lambda_{\alpha} = 1 \quad (2.48)$$

Το παραπάνω γραμμικό σύστημα εξισώσεων περιγράφεται με τη μορφή πινάκων ως εξής:

$$\begin{pmatrix} \sigma_x^2 & c_x(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2) & \cdots & c_x(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_n) & 1 \\ c_x(\mathbf{s}_2 - \mathbf{s}_1) & \sigma_x^2 & \cdots & c_x(\mathbf{s}_2 - \mathbf{s}_n) & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ c_x(\mathbf{s}_n - \mathbf{s}_1) & c_x(\mathbf{s}_n - \mathbf{s}_2) & \vdots & \sigma_x^2 & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_x(\mathbf{s}_1 - \mathbf{u}) \\ c_x(\mathbf{s}_2 - \mathbf{u}) \\ \vdots \\ c_x(\mathbf{s}_n - \mathbf{u}) \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.49)$$

Το ελάχιστο μέσο τετραγωνικό σφάλμα της εκτίμησης δίνεται από την ακόλουθη σχέση

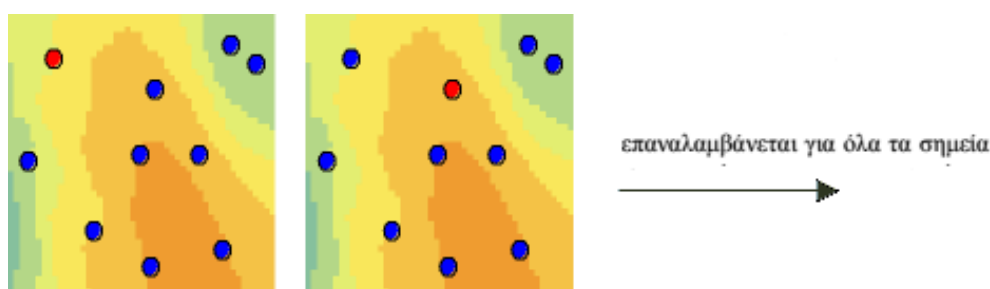
$$\sigma_{E,OK}^2(\mathbf{u}) = \sigma_x^2 - \sum_{\alpha=1}^{n(\mathbf{u})} \lambda_{\alpha} c_x(\mathbf{u}, \mathbf{s}_{\alpha}) - \mu \quad (2.50)$$

2.7.5 Επιλογή Γειτονιάς Συσχέτισης

Η γειτονιά kriging αποτελείται από ένα σημείο εκτίμησης και τα γειτονικά σημεία του. Τα γειτονικά σημεία ορίζονται με βάση την ακτίνα της γειτονιάς $\omega(\mathbf{u})$. Η μέγιστη ακτίνα της γειτονιάς του σημείου εκτίμησης απαιτείται να μην υπερβαίνει κατά πολύ την ακτίνα συσχέτισης του πεδίου. Σε περίπτωση που η ακτίνα της γειτονιάς $\omega(\mathbf{u})$ είναι πολύ μεγαλύτερη από την ακτίνα συσχέτισης, η γραμμική παρεμβολή χρησιμοποιεί μετρήσεις που δεν έχουν έντονη επίδραση στο σημείο εκτίμησης, αυξάνοντας τον αριθμητικό χρόνο επίλυσης του συστήματος kriging. Η χρήση περιορισμένων σε μήκος γειτονιών απεικονίζει με μεγαλύτερη ακρίβεια τοπικές μεταβολές της μέσης τιμής από γειτονιά σε γειτονιά (Δ.Θ, 2014).

2.8 Μέτρα Επιβεβαίωσης Χωρικού Μοντέλου

Η μέθοδος leave one out cross-validation εφαρμόζεται για την επιβεβαίωση των εκτιμήσεων του γεωστατιστικού μοντέλου, δηλαδή τις παραμέτρους του ημιβαριογράμματος και της ακτίνας της γειτονιάς. Κατά τη διαδικασία της μεθόδου αφαιρείται ένα σημείο από τις μετρήσεις και πραγματοποιείται εκτίμηση σε αυτό λαμβάνοντας υπόψη τις υπόλοιπες τιμές στα σημεία μετρήσεων. Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται για όλα τα σημεία μετρήσεων με σκοπό την σύγκριση μεταξύ των εκτιμώμενων και πραγματικών τιμών του πεδίου (Wackernagel et al., 1997). Μετά την ολοκλήρωση της διασταυρωμένης επαλήθευσης, ορισμένες θέσεις μετρήσεων παραλείπονται εάν περιέχουν μεγάλα σφάλματα απαιτώντας την εκ νέου προσαρμογή του γεωστατιστικού μοντέλου.



Σχήμα 2.6: Εφαρμογή της μεθόδου leave one out cross-validation σε δέκα σημεία μετρήσεων. Το κόκκινο σημείο παραλείπεται και εκτιμάται η τιμή σε αυτή τη θέση χρησιμοποιώντας τα υπόλοιπα εννέα σημεία (μπλε σημεία). Οι εκτιμώμενες και οι πραγματικές τιμές στη θέση του σημείου που παραλείφθηκε συγκρίνονται. Αυτή η διαδικασία επαναλαμβάνεται για ένα δεύτερο σημείο, και ούτω καθεξής. Το σχήμα πάρθηκε από (ESRI, 2011).

Ο έλεγχος της ακρίβειας των εκτιμήσεων επιγχάνεται χρησιμοποιώντας τις παρακάτω εξισώσεις μέτρησης σφάλματος, όπου N ο αριθμός των σημείων του συνόλου επαλήθευσης, $\hat{X}(\mathbf{s}_i)$ οι εκτιμώμενες τιμές και $X(\mathbf{s}_i)$ οι πραγματικές τιμές του πεδίου.

- Μέσο απόλυτο σφάλμα (Mean absolute error)

$$\varepsilon_{MAE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\hat{X}(\mathbf{s}_i) - X(\mathbf{s}_i)| \quad (2.51)$$

- Μέσο σχετικό απόλυτο σφάλμα (Mean relative absolute error)

$$\varepsilon_{MARE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|\hat{X}(\mathbf{s}_i) - X(\mathbf{s}_i)|}{\hat{X}(\mathbf{s}_i)} \quad (2.52)$$

- Ρίζα μέσου τετραγωνικού σφάλματος (Root mean square error)

$$\varepsilon_{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\hat{X}(\mathbf{s}_i) - X(\mathbf{s}_i)]^2} \quad (2.53)$$

- Ο συντελεστής γραμμικής συσχέτισης Pearson's R (Correlation coefficient)

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^N [X(\mathbf{s}_i) - m_x] [\hat{X}(\mathbf{s}_i) - m_x]}{\sqrt{\sum_{i=1}^N [X(\mathbf{s}_i) - m_x]^2} \sqrt{\sum_{i=1}^N [\hat{X}(\mathbf{s}_i) - m_x]^2}} \quad (2.54)$$

Ο συντελεστής γραμμικής συσχέτισης λαμβάνει τιμές στο διάστημα $[-1, 1]$ και εκφράζει την κατεύθυνση και το μέγεθος της σχέσης δύο μεταβλητών. Δύο μεταβλητές συσχετίζονται απόλυτα για τιμή $R^2 = 1$.

Κεφάλαιο 3

Εισαγωγική Ανάλυση και Τάσεις

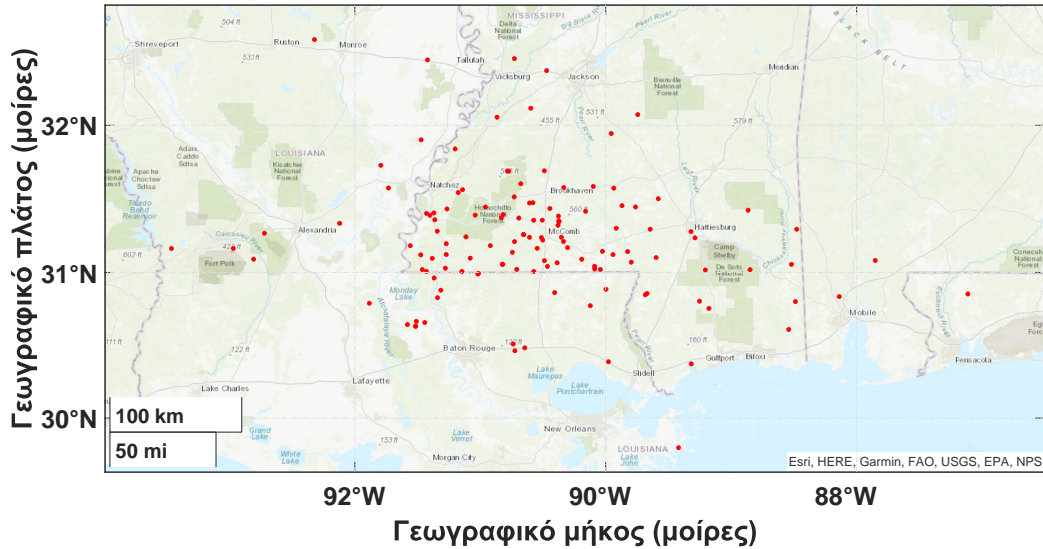
Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζονται οι στατιστικοί παράμετροι της κατανομής του δείγματος, η ανάλυση της χωρικής τάσης και ο μετασχηματισμός της διακύμανσης σε γκαουσιανή κατανομή. Στόχος του κεφαλαίου είναι αφενός μεν ο έλεγχος της κατανομής του δείγματος, αφετέρου δε, ο προσδιορισμός της χωρικής τάσης. Τα υπολογιστικά προβλήματα επιλύθηκαν σε προγραμματιστικό περιβάλλον με τη χρήση του λογισμικού πακέτου MATLAB R2014b.

3.1 Στατιστική Ανάλυση Δεδομένων

Τα δεδομένα που αξιολογήθηκαν, συλλέχθηκαν από το Γεωλογικό Ινστιτούτο των Η.Π.Α (USGS) (Enomoto et al., 2018) κατά την περίοδο 2011 έως 2017 με σκοπό τη διερεύνηση πιθανών μη ανακαλυφθέντων πετρελαϊκών πόρων στις βορειοανατολικές ακτές του κόλπου του Μεξικού. Τα δεδομένα αυτά περιλαμβάνουν τις συγκεντρώσεις οργανικού άνθρακα από 561 δείγματα μητρικών πετρωμάτων που απαντώνται σε διαφορετικούς σχηματισμούς και βάθη κυρίως στην περιοχή του Μισισίπι και της Λουιζιάνας. Πιο συγκεκριμένα, για κάθε δείγμα υπάρχουν πληροφορίες για την ακριβή τοποθεσία (γεωγραφικό μήκος και πλάτος), το βάθος δειγματοληψίας και τα αποτελέσματα της πυρόλυσης Rock-Eval.

Η περιοχή μελέτης περιλαμβάνει 132 δειγματοληπτικές γεωτρήσεις. Η κάθε δειγματοληπτική γεώτρηση παρέχει δείγματα μητρικών πετρωμάτων από διαφορετικό βάθος. Για τον λόγο αυτό το σύνολο των δειγμάτων αυτών εξετάστηκε ως προς τη μέση τιμή της περιεκτικότητας wt% σε οργανικό άνθρακα για κάθε θέση δειγματοληψίας. Συνεπώς, χρησιμοποιήθηκαν 132 δείγματα με βάση τη μέση τιμή TOC wt% για την ανάλυση των δεδομένων (βλ. σχήμα 3.1). Σύμφωνα με προηγούμενη γεωστατιστική έρευνα της περιοχής μελέτης (Varouchakis, 2021a) η χρήση της μέσης τιμής αποδείχθηκε αξιόπιστη και πλήρως αντιπροσωπευτική ως προς

την τιμή της περιεκτικότητας του κάθε δείγματος.

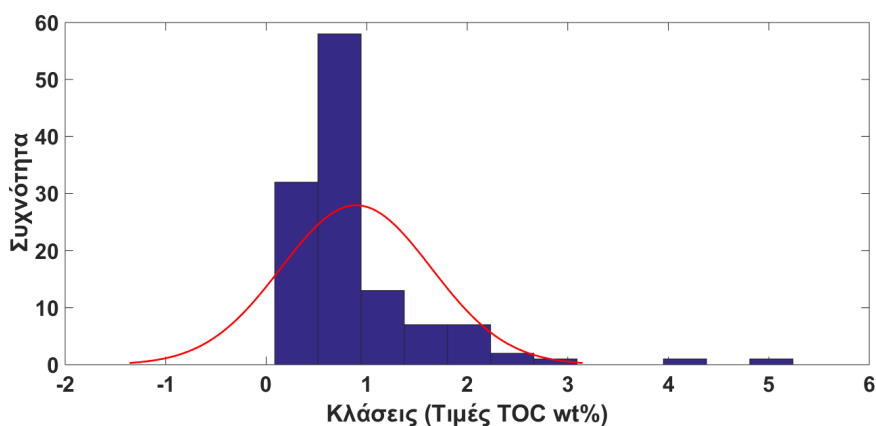


Σχήμα 3.1: Χωρική κατανομή των σημείων δειγματοληψίας.

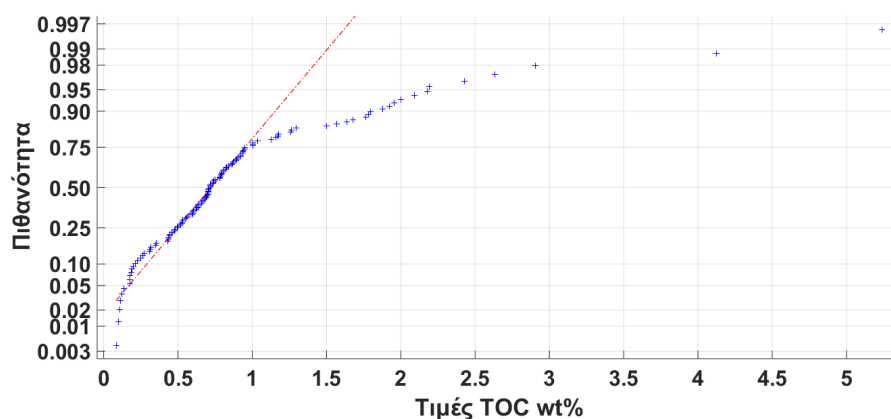
Οι στατιστικοί παράμετροι της κατανομής ενός δείγματος επηρεάζουν την διαδικασία υπολογισμού του βαριογράμματος και την εκτίμηση Kriging. Για να εκφραστεί η εκτίμηση του Kriging με διαστήματα αξιοπιστίας είναι απαραίτητο οι τιμές του δείγματος να ακολουθούν κανονική κατανομή. Αν οι τιμές ενός δείγματος δεν ακολουθούν κανονική κατανομή τότε είναι απαραίτητος ο μετασχηματισμός τους (VAROUCHAKIS, 2012). Ο έλεγχος της κατανομής του δείγματος TOC wt% έγινε με βάση το ιστόγραμμα και το διάγραμμα κανονικής κατανομής.

Αν η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας ενός δείγματος είναι συμμετρική ως προς τη μέση τιμή, τότε το δείγμα ακολουθεί κανονική κατανομή. Με βάση το σχήμα 3.2 οι μετρήσεις TOC wt% κατανεμήθηκαν σε εννέα κλάσεις και παρουσιάζουν ασύμμετρη κατανομή καθώς δεν προσαρμόζονται στη βέλτιστη καμπύλη κανονικής κατανομής. Επιπλέον, ένα δείγμα ακολουθεί κανονική κατανομή αν τα σημεία του ταυτίζονται με την κόκκινη ευθεία γραμμή του διαγράμματος κανονικής κατανομής. Σύμφωνα με το διάγραμμα κανονικής κατανομής του σχήματος 3.2 το δείγμα δεν ακολουθεί κανονική κατανομή, διότι υπάρχουν πολλά σημεία με σημαντική απόκλιση από την κανονική συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας.

Σύμφωνα με τα στατιστικά στοιχεία του πίνακα 3.1 η μέγιστη τιμή σε οργανικό άνθρακα είναι 5.24 wt%, ενώ η ελάχιστη τιμή για να θεωρηθεί ένας πετρελαιοφόρος σχιστόλιθος εν δυνάμει κατάλληλος για παραγωγή είναι 5 wt%. Επιπλέον, η τιμή της διασποράς είναι περίπου 0.75 wt%, ενώ η ελάχιστη τιμή για να θεωρηθεί



(α) Ιστόγραμμα



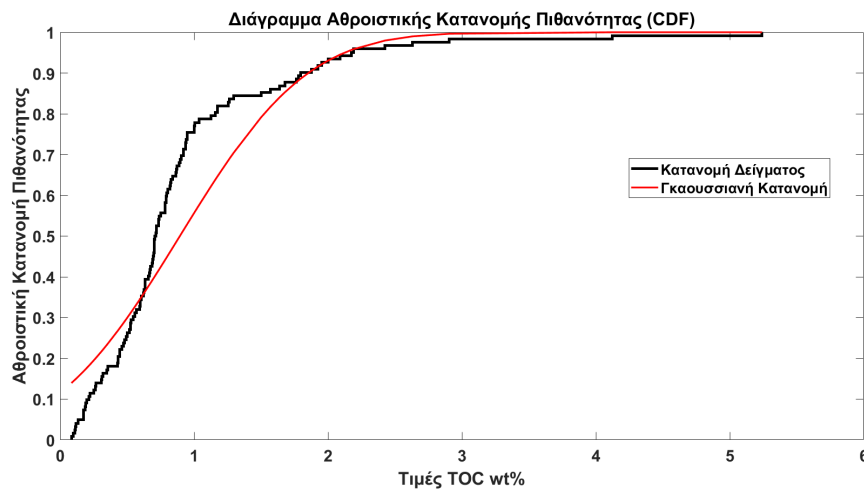
(β) Διάγραμμα συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας

Σχήμα 3.2: Ιστόγραμμα του δείγματος TOC wt% και η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας με τη μορφή της κόκκινης καμπύλης σχήμα (α), ενώ η κανονική κατανομή πιθανότητας του δείγματος (normplot-κόκκινη ευθεία) στο σχήμα (β). Τα μπλε σημεία συμβολίζουν τα σημεία του δείγματος.

ένα μητρικό πέτρωμα φτωχό σε οργανικό άνθρακα είναι 0.5 wt%. Οι στατιστικές ροπές του πίνακα 3.1 αποδεικνύουν ότι η κατανομή του δείγματος συνολικού οργανικού άνθρακα είναι ασύμμετρη με θετική λοξότητα και έχει σημαντικές αποκλίσεις από την κανονική κατανομή. Επομένως, κρίνεται απαραίτητος ο μετασχηματισμός των τιμών του δείγματος σε γκαουσσισιανή κατανομή. Ο γκαουσσισιανός μετασχηματισμός πραγματοποιήθηκε μετά την ανάλυση χωρικής τάσης. Ο μετασχηματισμός έγινε στις τιμές του νέου πεδίου που προέκυψαν μετά την αφαίρεση της τάσης από το αρχικό δείγμα, δηλαδή έγινε με βάση τη διακύμανση του πεδίου.

Πίνακας 3.1: Βασικά στατιστικά μεγέθη και στατιστικές ροπές της κατανομής συνολικού οργανικού άνθρακα (TOC wt%), όπου x_{min} η ελάχιστη τιμή, m_x η μέση τιμή, x_{max} η μέγιστη τιμή, $\hat{\sigma}_x$ η τυπική απόκλιση, \hat{s}_x ο συντελεστής ασυμμετρίας, \hat{k}_x ο συντελεστής κύρτωσης και $x_{0.50}$ η διάμεσος.

x_{min}	m_x	x_{max}	$\hat{\sigma}_x$	\hat{s}_x	\hat{k}_x	$x_{0.50}$
0.0850	0.8945	5.2400	0.7480	2.7411	13.7754	0.7117
wt%	wt%	wt%	wt%			wt%



Σχήμα 3.3: Διάγραμμα αθροιστικής κατανομής πιθανότητας των τιμών TOC %wt.

3.2 Ανάλυση Χωρικής Τάσης

Ένας βασικός στόχος της γεωστατιστικής ανάλυσης είναι ο προσδιορισμός της χωρικής τάσης και των στατιστικών ιδιοτήτων των διακυμάνσεων με βάση τα δεδομένα, και η μετέπειτα αξιοποίηση αυτών των προτύπων για την εκτίμηση του πεδίου $X(s)$ σε σημεία όπου δεν υπάρχουν μετρήσεις (πρβλ. 2.4) (Δ.Θ, 2014).

Η ανάλυση της χωρικής τάσης πραγματοποιήθηκε με την μέθοδο πολλαπλής γραμμικής παλινδρόμησης με τη χρήση πολυωνύμων χαμηλής τάξης. Για την απεικόνιση της τάσης στην περιοχή μελέτης κατασκευάστηκε ένα πλέγμα με πλήθος κελιών 300×500 .

Σύμφωνα με τον πίνακα 3.3 παρατηρείται ότι υπάρχει τάση στο δείγμα επειδή η συσχέτιση μεταξύ δεδομένων και τάσης είναι μεγαλύτερη του 30%. Επιπλέον, η παρουσία τάσης υποδηλώνεται όταν το βαριόγραμμα δεν καταλήγει σε μία στα-

Πίνακας 3.2: Παράμετροι των μοντέλων χωρικής τάσης που προέκυψαν από τη μέθοδο πολλαπλής γραμμικής παλινδρόμησης.

Μοντέλο	Εκτιμώμενη Χωρική Τάση
Μέση Τιμή	$m_x = 0.8945$
Γραμμικό	$m_x = -3.8276 - 0.2085x - 0.4533y$
Τετραγωνικό	$m_x = -728.4776 - 15.8386x + 0.8397y$ $- 0.0272x^2 + 0.3443xy + 0.4775y^2$
Κυβικό	$m_x = -1776.9216 + 252.3764x + 870.6233y$ $+ 6.9566x^2 + 23.5339xy + 6.3185y^2$ $+ 0.0244x^3 - 0.0110x^2y + -0.4013xy^2 + 0.4490y^3$

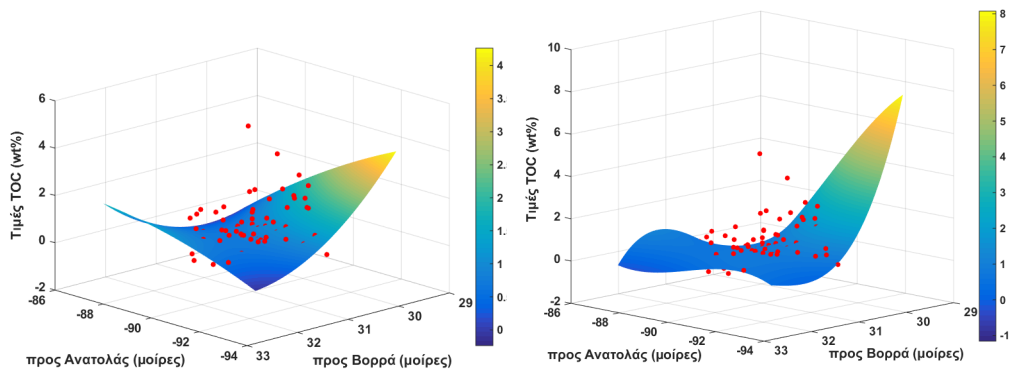
Πίνακας 3.3: Συντελεστές σφάλματος μεταξύ αρχικών δεδομένων και του μοντέλου χωρικής τάσης, όπου ρ ο συντελεστής συσχέτισης Pearson, MAE το μέσο απόλυτο σφάλμα, RMSE το μέσο τετραγωνικό σφάλμα και MARE το μέσο σχετικό απόλυτο σφάλμα της διακύμανσης.

Μοντέλα	R %	MAE wt%	RMSE wt%	MARE wt%
Γραμμικό	34.09	0.4535	0.7003	0.8531
Τετραγωνικό	40.84	0.4287	0.6799	0.8404
Κυβικό	44.08	0.4014	0.6686	0.7172

θερή τιμή, δηλαδή τα πειραματικά σημεία του εμφανίζονται πάνω από την οροφή ή το άνω φράγμα (sill).

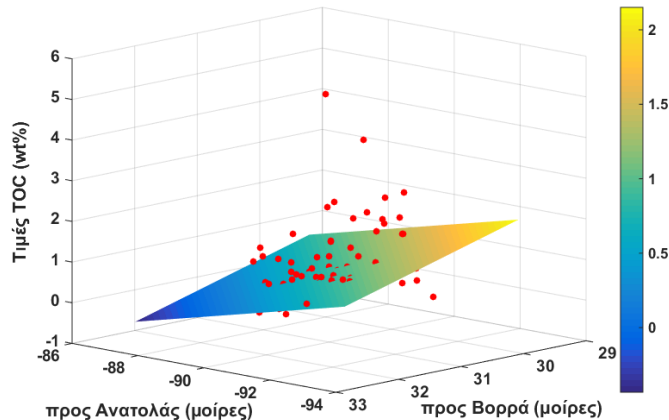
Γενικά η τάση μοντελοποιείται με πολυώνυμα χαμηλής τάξης επειδή τα μοντέλα υψηλών τάξεων αφαιρούν την συνολική μεταβλητότητα. Τα μοντέλα υψηλού βαθμού προσαρμόζονται μεν καλύτερα, αλλά τα σφάλματα αυξάνονται όσο αυτά απομακρύνονται από τις μετρήσεις. Σύμφωνα με το σχήμα 3.4 το τετραγω-

νικό και το κυβικό μοντέλο παρόλο που είναι πιο κοντά στα δεδομένα παρουσιάζουν ακραίες τιμές όσο απομακρύνονται από τα σημεία μετρήσεων. Συνεπώς, το γραμμικό μοντέλο δείχνει πιο αξιόπιστο από τα υπόλοιπα μοντέλα και γι αυτό επιλέχθηκε ως πρότυπο χωρικής τάσης. Παρατηρούνται μεγάλες τιμές τάσης στη νοτιοδυτική περιοχή μελέτης, ενώ βορειο ανατολικά η τάση μειώνεται. Το νέο πεδίο που προκύπτει είναι η διαδύμανση.



(α) Τετραγωνικό μοντέλο

(β) Κυβικό μοντέλο



(γ) Γραμμικό μοντέλο

Σχήμα 3.4: Τρισδιάστατη απεικόνιση της πολλαπλής γραμμικής παλινδρόμησης με τα πολυώνυμα χαμηλής τάξης, το τετραγωνικό, το κυβικό και το γραμμικό. Ο οριζόντιος και ο κάθετος άξονας εκφράζουν τις συντεταγμένες, ενώ ο κατακόρυφος άξονας την συγκέντρωση οργανικού άνθρακα (TOC wt%). Η επιφάνεια αναπαριστά την τάση του δείγματος, ενώ τα κόκκινα σημεία τις θέσεις των μετρήσεων.

3.3 Μετασχηματισμός Διακύμανσης

Μια βασική προϋπόθεση για την εφαρμογή του γεωστατιστικού μοντέλου είναι η κανονική ή γκαουσσισιανή κατανομή του δείγματος των μετρήσεων. Η γκαουσσισιανή κατανομή μειώνει την επίδραση των ακραίων τιμών και βελτιώνει την στασιμότητα του δείγματος. Επομένως, ένας μετασχηματισμός των δεδομένων παρέχει πιο σταθερά βαριογράμματα και βελτιώνει την εκτίμηση της μεθόδου κανονικού Kriging (Armstrong, 1998; Goovaerts et al., 1997).

Ο γκαουσσισιανός μετασχηματισμός εφαρμόστηκε στη διακύμανση $X'(s)$ του πεδίου με τη χρήση της μεθόδου modified Box-Cox. Η μέθοδος αυτή μπορεί να εφαρμοστεί με επιτυχία σε αρνητικές τιμές διακύμανσης (Varouchakis, 2021b) και ορίζεται με βάση το παρακάτω μη γραμμικό σύστημα:

$$y := g_{\mathbf{k}}(X'(s)) = \frac{(X'(s) - X'_{min}(s) + \alpha^2)^\lambda - 1}{\lambda}, \quad \mathbf{k}^T = (\lambda, \alpha) \quad (3.1)$$

όπου $y := g_{\mathbf{k}}$ οι μετασχηματισμένες τιμές του δείγματος και \mathbf{k} ένα διάνυσμα των παραμέτρων.

Στη μέθοδο αυτή οι παράμετροι της ασυμμετρίας και της κύρτωσης του δείγματος κανονικοποιούνται, δηλαδή $\hat{s}_s = 0$ και $\hat{k}_x = 3$, αντίστοιχα (Varouchakis, 2021b). Οι μετασχηματισμένες τιμές 3.4 προκύπτουν από την ελαχιστοποίηση της παρακάτω εξίσωσης:

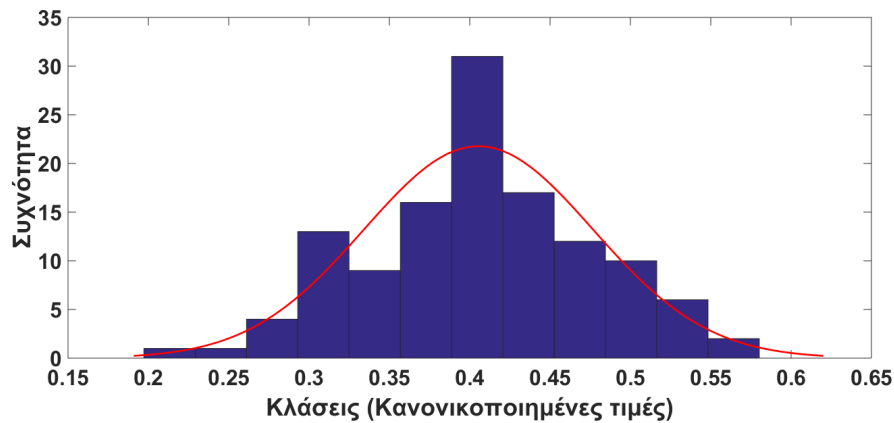
$$(\hat{\lambda}, \hat{\alpha}) = \underset{(\lambda, \alpha)}{\operatorname{argmin}} \left\{ \left[\frac{\hat{m}_y(\lambda, \alpha) - \hat{y}_{0.50}(\lambda, \alpha)}{\hat{\sigma}_y(\lambda, \alpha)} \right]^2 + \left[\hat{k}_y(\lambda, \alpha) - 3 \right]^2 \right\} \quad (3.2)$$

όπου $(\hat{m}_y - \hat{y}_{0.50}) / \hat{\sigma}_y$ ο συντελεστής ασυμμετρίας Pearson.

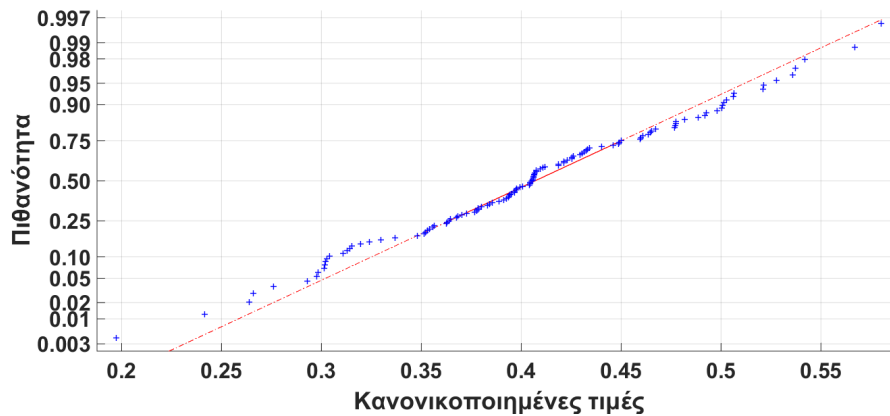
Πίνακας 3.4: Βασικά στατιστικά μεγέθη και στατιστικές ροπές της διακύμανσης έπειτα από μετασχηματισμό modified Box-Cox, όπου \mathbf{x}_{min} η ελάχιστη τιμή, $m_{\mathbf{x}}$ η μέση τιμή, \mathbf{x}_{max} η μέγιστη τιμή, $\hat{\sigma}_{\mathbf{x}}$ η τυπική απόκλιση, $\hat{s}_{\mathbf{x}}$ ο συντελεστής ασυμμετρίας, $\hat{k}_{\mathbf{x}}$ ο συντελεστής κύρτωσης και $x_{0.50}$ η διάμεσος. Οι τιμές είναι κανονικοποιημένες.

\mathbf{x}_{min}	$m_{\mathbf{x}}$	\mathbf{x}_{max}	$\hat{\sigma}_{\mathbf{x}}$	$\hat{s}_{\mathbf{x}}$	$\hat{k}_{\mathbf{x}}$	$x_{0.50}$
0.1972	0.4054	0.5802	0.0713	-0.0827	3.0000	0.4054

Σύμφωνα με το σχήμα 3.5 και τα στοιχεία του πίνακα 3.4 υπάρχουν μετασχηματισμένες τιμές οι οποίες παρουσιάζουν μερική απόκλιση από τη γκαουσιανή κατανομή, υπάρχει δηλαδή ασυμμετρία της κατανομής. Ωστόσο, οι περισσότερες τιμές του νέου πεδίου προσεγγίζουν σε ικανοποιητικό βαθμό την γκαουσιανή κατανομή. Επομένως, ο μετασχηματισμός modified Box-Cox είναι αποτελεσματικός.



(α) Ιστόγραμμα



(β) Διάγραμμα συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας

Σχήμα 3.5: Το ιστόγραμμα και το διάγραμμα συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας των τιμών TOC %wt έπειτα από αφαίρεση της τάσης με το γραμμικό μοντέλο και μετασχηματισμό modified Box-Cox της διακύμανσης. Τα μπλε σημεία συμβολίζουν τα σημεία του δείγματος.

Κεφάλαιο 4

Γεωστατιστική Ανάλυση

Το κεφάλαιο αυτό περιλαμβάνει την γεωστατιστική ανάλυση η οποία διακρίνεται σε τρία βασικά στάδια. Το θεμελιώδες στάδιο είναι η βαριογραφία, δηλαδή ο προσδιορισμός της χωρικής εξάρτησης στο πεδίο. Στο στάδιο αυτό κατασκευάζεται το πειραματικό βαριόγραμμα και γίνεται η βέλτιστη προσαρμογή του σε ένα θεωρητικό μοντέλο βαριογράμματος. Στο δεύτερο στάδιο επιβεβαιώνεται το χωρικό μοντέλο με τη μέθοδο leave one out cross-validation και στο τρίτο στάδιο εφαρμόζεται η μέθοδος κανονικού kriging στη διακύμανση για την χαρτογράφηση της συγκέντρωσης οργανικού άνθρακα στην περιοχή μελέτης.

Οι χάρτες της εκτίμησης και της αβεβαιότητας του κανονικού kriging αξιολογούνται και κατασκευάζεται ένας χάρτης με συγκεντρώσεις σε οργανικό άνθρακα μεγαλύτερες ή ίσες του 2 wt% για τα επίπεδα εμπιστοσύνης 10%, 25% και 75% με τη βοήθεια της συνάρτησης αθροιστικής κατανομής πιθανότητας. Σκοπός του κεφαλαίου αυτού είναι ο εντοπισμός των αποθεμάτων υδρογονανθράκων της περιοχής μελέτης.

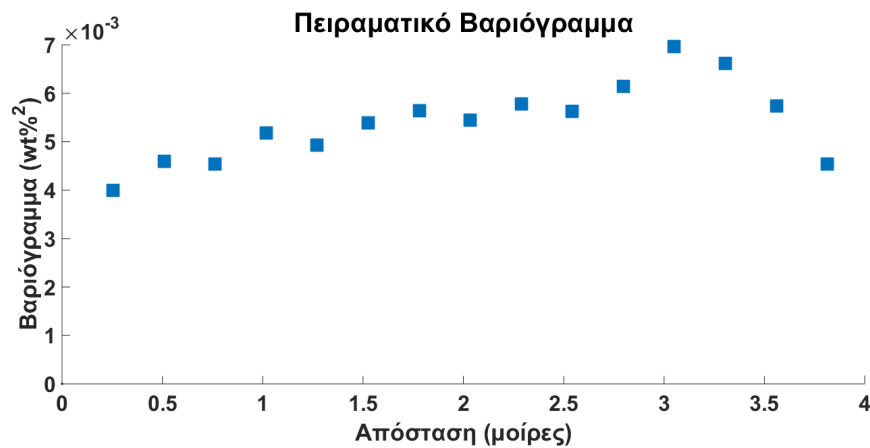
4.1 Βαριογραφία

Το βαριόγραμμα ή ημιβαριόγραμμα αποτελεί ακρογωνιαίο λίθο της γεωστατιστικής ανάλυσης. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι από το βαριόγραμμα συνάγονται τα βάρη του kriging και τα επακόλουθα τυπικά σφάλματα της εκτίμησης με kriging. Το βαριόγραμμα περιγράφει με θεωρητικό τρόπο την εξάρτηση δύο γειτονικών σημείων στον χώρο, ενώ μαθηματικά καθορίζει την χωρική μεταβλητότητα των διακυμάνσεων του δείγματος. Επιπλέον, το βαριόγραμμα εξαρτάται τόσο από την απόσταση μεταξύ δύο σημείων όσο και από την κατεύθυνση κατά την οποία μεταβάλλεται αυτή η εξάρτηση των δύο σημείων. Ισχύει γενικά ότι ένα κοντινό ζεύγος σημείων μπορεί να συσχετιστεί πιο εύκολα από ένα μακρινό ζεύγος σημείων.

4.1.1 Προσδιορισμός Πειραματικού Βαριόγραμματος

Το βαριόγραμμα ορίζεται με τη βοήθεια της μέσης τιμής (πρβλ. 2.5) και από την σχέση (2.17). Ωστόσο, για τον περιορισμό των σφαλμάτων και των τιμών εκτός κατανομής (outliers) χρησιμοποιήθηκε η ευσταθής εκτιμήτρια (Cressie and Hawkins, 1980) η οποία περιγράφεται από την σχέση (2.19).

Η κατασκευή του πειραματικού βαριογράμματος έγινε με 15 τάξεις έπειτα από δοκιμές και έλεγχο του αριθμού των ζευγών σε κάθε τάξη. Για την εξασφάλιση της αξιοπιστίας του βαριογράμματος και της επάρκειας του πλήθους ζευγών αγνοήθηκαν τα ζεύγη της κάθε τάξης με εύρος κάτω από 30.



Σχήμα 4.1: Γραφική παράσταση πειραματικού βαριογράμματος.

Στο πειραματικό βαριόγραμμα (βλ. σχήμα 4.1) ως μέγιστη απόσταση για τον προσδιορισμό της απόστασης των τάξεων ορίστηκε το 60% της μέγιστης απόστασης ζεύγους. Η αποκοπή του βαριογράμματος έγινε επειδή το πλήθος των ζευγών ανά τάξη μειώνεται με την αύξηση της απόστασης (βλ. πίνακα 4.1). Συνεπώς, το βαριόγραμμα διακόπηκε σε κατάλληλη απόσταση ώστε να έχει επαρκές αριθμό ζευγών και σταθερό άνω φράγμα ώστε να επιτρέπει την βέλτιστη προσαρμογή του θεωρητικού μοντέλου.

4.1.2 Προσαρμογή Θεωρητικού Μοντέλου

Η προσαρμογή ενός θεωρητικού μοντέλου ημιβαριογράμματος στο πειραματικό βαριόγραμμα είναι απαραίτητη για τον υπολογισμό των τιμών του βαριογράμματος σε αποστάσεις όπου δεν υπάρχουν μετρήσεις. Η προσαρμογή του θεωρητικού μοντέλου έγινε με τη χρήση της μεθόδου ελαχίστων τετραγώνων βλ.

Πίνακας 4.1: Τάξεις απόστασης, πλήθος ζευγών ανά τάξη και τιμές πειραματικού βαριογράμματος (σχήμα 4.1).

\mathbf{r}_k	$n(\mathbf{r}_k)$	$\gamma(\mathbf{r}_k)$
0.2542	1376	0.0040
0.5085	1944	0.0046
0.7627	2202	0.0045
1.0170	2046	0.0052
1.2712	1598	0.0049
1.5254	1418	0.0054
1.7797	942	0.0056
2.0339	776	0.0054
2.2882	660	0.0058
2.5424	410	0.0056
2.7966	368	0.0061
3.0509	280	0.0070
3.3051	162	0.0066
3.5594	148	0.0057
3.8136	64	0.0045

σχέση (2.25) μέσω της οποίας προσδιορίστηκαν οι βέλτιστοι παράμετροι, η διασπορά και η ακτίνα συσχέτισης.

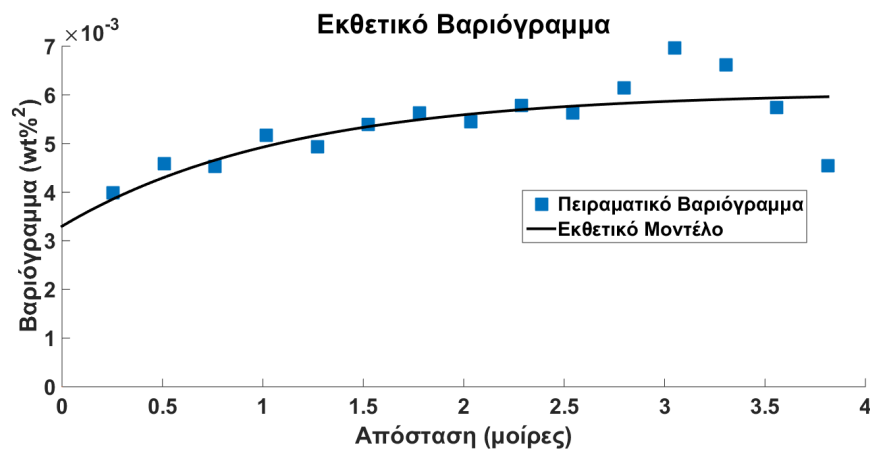
Για την προσαρμογή του θεωρητικού μοντέλου στο πειραματικό βαριόγραμμα (βλ. σχήμα 4.1) εξετάστηκαν τέσσερα μοντέλα βαριογραμμμάτων με φαινόμενο κόκκου, το εκθετικό, το γκαουσσισιανό, το σφαιρικό και το δυναμονομικό. Η ποιότητα προσαρμογής του θεωρητικού μοντέλου χαρακτηρίζεται από το άθροισμα των τετραγωνικών σφαλμάτων (πρβλ. 2.5.5). Συνεπώς, η επιλογή του βέλτιστου μοντέλου βαριογράμματος καθορίστηκε με βάση το σφάλμα προσαρμογής στο πειραματικό βαριόγραμμα.

Σύμφωνα με τον πίνακα 4.2 το γκαουσσισιανό και το δυναμονομικό πρότυπο παρουσιάζουν σημαντικό σφάλμα και απορρίπτονται. Αυτό επιβεβαιώνεται και από την γραφική τους παράσταση (βλ. σχήματα 1β' και 1γ'). Το εκθετικό και το σφαιρικό μοντέλο έχουν ικανοποιητική προσαρμογή και έχουν ελάχιστη διαφορά σφάλματος μεταξύ τους. Ωστόσο, το μοντέλο που επιλέχθηκε για την βέλτιστη προσαρμογή στο πειραματικό βαριόγραμμα είναι το εκθετικό. Το εκθετικό μοντέλο βαριογράμματος (βλ. σχήμα 4.2) διαθέτει το χαμηλότερο τετραγωνικό

Πίνακας 4.2: Τιμές του τετραγωνικού σφάλματος προσαρμογής των θεωρητικών μοντέλων που εξετάστηκαν.

Θεωρητικό Μοντέλο	Τετραγωνικό Σφάλμα ($\times 10^{-6}$)
Εκθετικό	4.14
Γκαουσσσιανό	49.72
Σφαιρικό	4.91
Δυναμονομικό	10.27

σφάλμα από τα υπόλοιπα πρότυπα βαριογράμματα που εξετάστηκαν και συνεπώς κρίνεται πιο αξιόπιστο για την αναπαράσταση της χωρικής εξάρτησης των σημείων της περιοχής μελέτης.



Σχήμα 4.2: Προσαρμογή του εκθετικού μοντέλου βαριογράμματος με φαινόμενο κόκκου στο πειραματικό βαριόγραμμα.

Στην παρούσα εργασία έγινε προσπάθεια διερεύνησης της ανισοτροπίας στην περιοχή μελέτης. Ωστόσο, τα κατευθυντικά βαριογράμματα που υπολογίστηκαν δεν κρίθηκαν αξιόπιστα λόγω της έλλειψης πειραματικών σημείων και δεν θα παρουσιαστούν. Συνεπώς, το πεδίο θεωρήθηκε στατιστικά ισοτροπικό.

4.2 Επαλήθευση Χωρικού Μοντέλου

Το εκθετικό μοντέλο και η βέλτιστη ακτίνα γειτονιάς του kriging αξιολογήθηκαν με τη μέθοδο leave one out cross-validation. Στη μέθοδο αυτή αφαιρέθηκε ένα σημείο μέτρησης TOC wt% από τις συνολικές μετρήσεις και έγινε χωρική

Πίνακας 4.3: Βέλτιστες τιμές παραμέτρων του εκθετικού μοντέλου. Οι παράμετροι υπολογίστηκαν με βάση τη διακύμανση του πεδίου.

Παράμετροι Εκθετικού Μοντέλου	Μετασχηματισμένες τιμές
Διασπορά ($wt\%^2$)	2.80×10^{-3}
Ακτίνα Συσχέτισης (μοίρες)	3.36
Φαινόμενο Κόκκου ($wt\%^2$)	3.30×10^{-3}

παρεμβολή με την μέθοδο κανονικού kriging και τις παραμέτρους του εκθετικού μοντέλου για την εκτίμηση στο σημείο αυτό χρησιμοποιώντας τα υπόλοιπα δεδομένα. Η διαδικασία αυτή επαναλήφθηκε για το σύνολο των σημείων με διαδοχική αφαίρεση ενός σημείου κάθε φορά.

Για την σύγκριση των αποτελεσμάτων χρειάζεται οι τιμές TOC wt% της εκτιμώμενης διακύμανσης (cross-validation) να επιστρέψουν στο αρχικό τους εύρος. Πιο συγκεκριμένα, πρέπει να γίνει αντίστροφος μετασχηματισμός modified Box-Cox του διανύσματος της εκτιμώμενης διακύμανσης και έπειτα το διάνυσμα αυτό να αθροιστεί με την τάση. Η διαδικασία αυτή περιγράφεται από την παρακάτω σχέση:

$$\hat{X}(\mathbf{u}) = \left[(\lambda_{MBC} \hat{X}'(\mathbf{u}) + 1)^{1/\lambda_{MBC}} + X'_{min}(\mathbf{s}) - \alpha^2 \right] + m_x(\mathbf{s}), \quad (4.1)$$

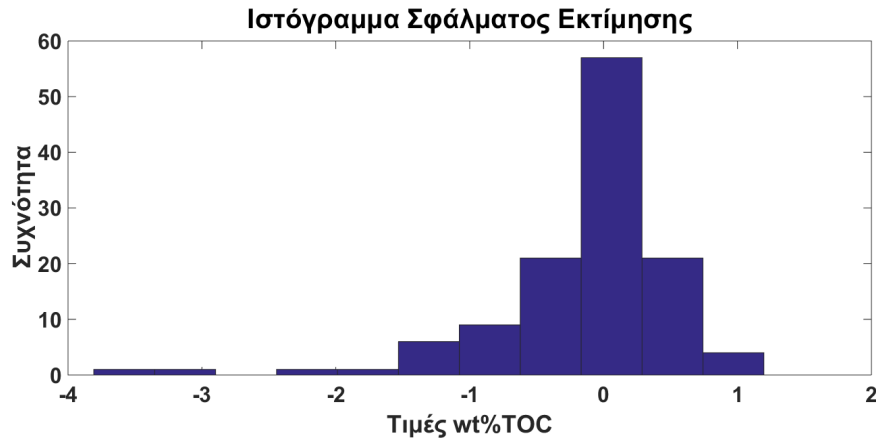
όπου $\hat{X}'(\mathbf{u})$ η μετασχηματισμένη διακύμανση, ενώ λ_{MBC} και α οι παράμετροι του modified Box-Cox (πρβλ. 3.3).

Πίνακας 4.4: Τιμές των παραμέτρων για την επιβεβαίωση του χωρικού μοντέλου μετά τον αντίστροφο μετασχηματισμό της διακύμανσης, όπου MAE το μέσο απόλυτο σφάλμα, RMSE το μέσο τετραγωνικό σφάλμα, MARE το μέσο σχετικό απόλυτο σφάλμα και R ο συντελεστής συσχέτισης Pearson's ρ .

MAE TOC wt%	RMSE TOC wt%	MARE TOC wt%	R %
0.42	0.68	0.58	43.37

Σύμφωνα με τον πίνακα 4.4 οι πραγματικές και εκτιμώμενες τιμές της συγκέντρωσης TOC %wt συσχετίζονται κατά 43.37%. Αυτή η τιμή συσχέτισης είναι ασθενής. Συνεπώς, η ποιότητα προσαρμογής του εκθετικού μοντέλου δεν είναι

τόσο καλή και η ικανότητα εκτίμησης της συγκέντρωσης TOC %wt με μεγάλη ακρίβεια σε σημεία όπου δεν υπάρχουν μετρήσεις είναι μειωμένη. Το πλήθος των σφαλμάτων κυμαίνεται στο διάστημα 1.5 έως 1. Ωστόσο, τα αποτελέσματα υποβιβάζονται επειδή υπάρχουν κάποιες έκτοπες τιμές στο δείγμα οι οποίες παρουσιάζουν σφάλματα της τάξης του -3 (βλ. σχήμα 4.3).



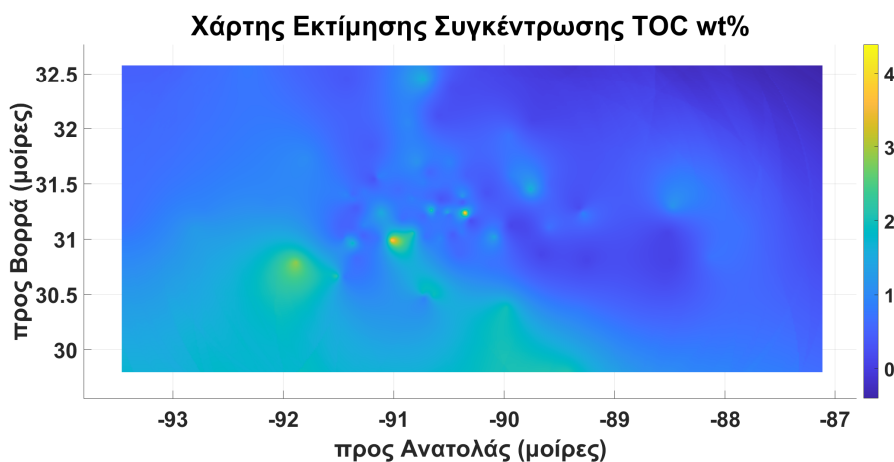
Σχήμα 4.3: Κατανομή σφαλμάτων των συγκεντρώσεων που εκτιμήθηκαν με τη μέθοδο leave one out cross-validation.

4.3 Εκτίμηση Κανονικού Kriging

Η χαρτογράφηση της συγκέντρωσης οργανικού άνθρακα πραγματοποιήθηκε με τη χρήση των εξισώσεων του κανονικού kriging (πρβλ. 2.7.4). Οι εξισώσεις αυτές εφαρμόστηκαν στη διακύμανση, δηλαδή σε δεδομένα μετά την αφαίρεση χωρικής τάσης και τον μετασχηματισμό της κατανομής τους. Η μέθοδος αυτή ονομάζεται αλλιώς kriging με παλινδρόμηση.

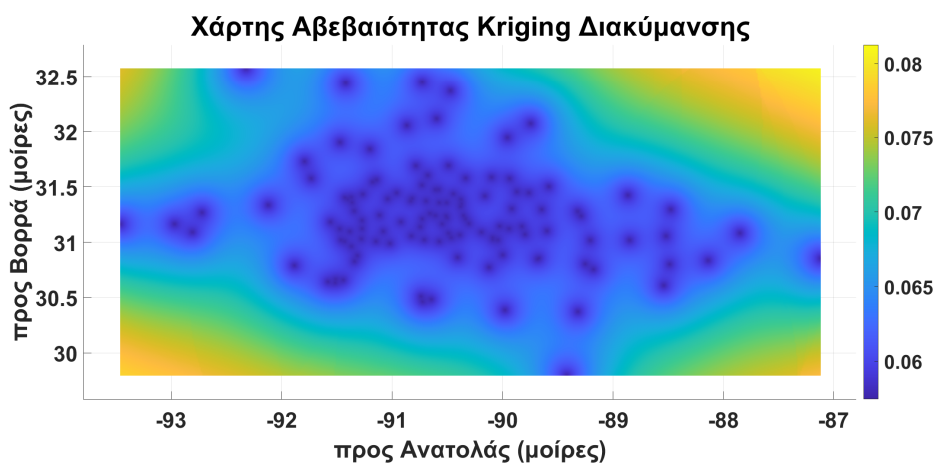
Οι διαστάσεις του χώρου είναι $2.78^\circ \times 6.35^\circ$ ή $308.58 \text{ Km} \times 704.85 \text{ Km}$, αν θεωρηθεί ότι $1^\circ \simeq 111 \text{ Km}$. Το πλήθος κελιών που χρησιμοποιήθηκε για την κατασκευή του πλέγματος είναι 300×500 . Συνεπώς, οι διαστάσεις του κάθε κελιού είναι $\frac{308.58 \text{ Km}}{300} \times \frac{704.85 \text{ Km}}{500}$, δηλαδή $1.03 \text{ Km} \times 1.41 \text{ Km}$. Το ελάχιστο έυρος των γειτόνων σε κάθε σημείο (κελί) εκτίμησης καθορίστηκε ίσο με τρία. Για την εκτίμηση χρησιμοποιήθηκε το ισοτροπικό εκθετικό μοντέλο με τις παραμέτρους του πίνακα 4.3. Με τη χρήση της ακτίνας της γειτονιάς εκτίμησης επιδιώκεται η αναζήτηση σημείων τα οποία μπορούν να συσχετιστούν με το σημείο εκτίμησης. Η τιμή της μέγιστης ακτίνας του kriging εκτιμάται ίση με 3.36° ή περίπου 373 Km . Η εκτίμηση της ακτίνας του kriging προέκυψε από την αποκοπή του εκθετικού

βαριογράμματος (βλ. σχήμα 4.2) και παρουσιάζει αβεβαιότητα.



Σχήμα 4.4: Χάρτης κανονικού kriging με τις εκτιμήσεις των συγκεντρώσεων οργανικού άνθρακα (TOC wt%).

Η μέγιστη τιμή συγκέντρωσης οργανικού άνθρακα της εκτίμησης kriging είναι 4.39 wt%, ενώ η μέση τιμή είναι 0.79 wt%. Σύμφωνα με το σχήμα 4.4 οι υψηλές τιμές συγκεντρώσεων παρατηρούνται στην κεντροδυτική περιοχή του χάρτη και αντιπροσωπεύουν τις περιοχές σημαντικού γεωλογικού ενδιαφέροντος.

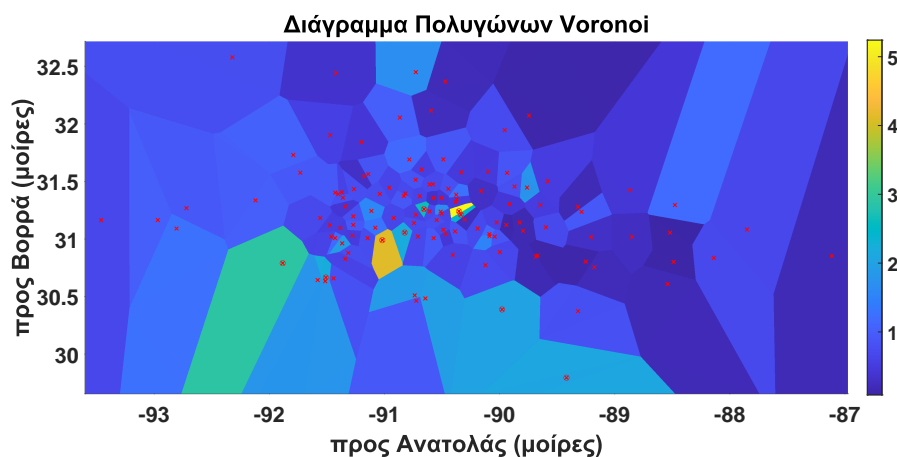


Σχήμα 4.5: Χάρτης της τυπικής απόκλισης κανονικού kriging της διακύμανσης των συγκεντρώσεων οργανικού άνθρακα (TOC wt%).

Η χαρτογράφηση των σφαλμάτων της εκτίμησης kriging έγινε σύμφωνα με την τυπική απόκλιση. Αυτή η ιδιότητα μπορεί να εκφραστεί σε wt%, αλλά τα αποτελέσματα δεν μπορούν να συγκριθούν με τις τιμές των αρχικών δεδομένων επειδή η αντιστροφή της αβεβαιότητας στην αρχική κλίμακα είναι αδύνατη καθώς η μέθοδος modified Box-Cox είναι λογαριθμικός μετασχηματισμός. Σύμφωνα με το σχήμα 4.5 και την χωρική κατανομή των σημείων δειγματοληψίας (βλ. σχήμα 3.1) παρατηρήθηκε ότι τα εκτιμώμενα σημεία που βρίσκονται κοντά σε γειτονικά σημεία παρουσιάζουν μειωμένες τιμές τυπικής απόκλισης από τα σημεία εκτίμησης που βρίσκονται σε απομακρυσμένη απόσταση από τα γειτονικά σημεία.

4.4 Ερμηνεία Αποτελεσμάτων

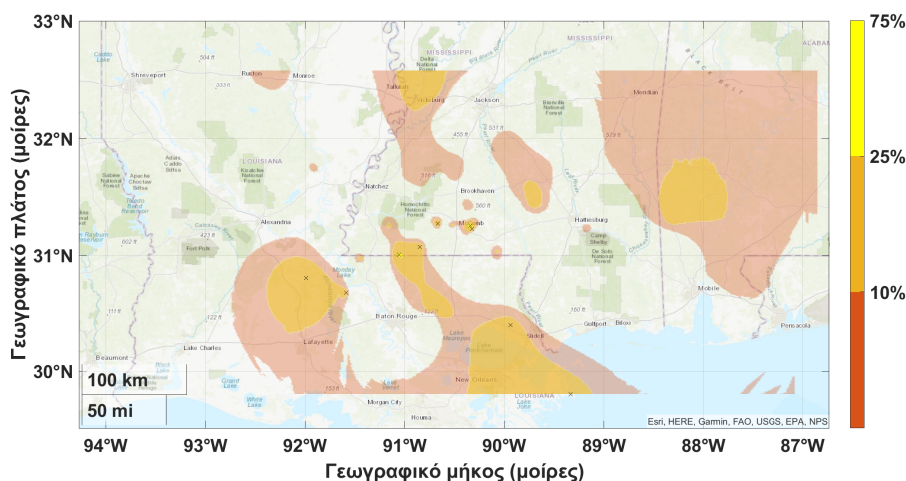
Το γεωστατιστικό μοντέλο παρουσίασε σημαντική αβεβαιότητα. Συνεπώς, ο χάρτης kriging του σχήματος 4.4 δεν κρίνεται απόλυτα αξιόπιστος. Οι περισσότερες εκτιμώμενες τιμές TOC wt% εμφάνισαν αποκλίσεις από -1 έως +1 wt% σε σχέση με τις πραγματικές τιμές, ενώ υπάρχουν και εκτιμήσεις με πιο ακραίες τιμές απόκλισης (βλ. σχήμα 4.3). Για τον λόγο αυτό εξετάστηκαν με τη βοήθεια της μεθόδου Voronoi τα σημεία τα οποία εμφάνισαν μεγαλύτερο σφάλμα και έγινε η χωρική κατανομή της συγκέντρωσης 2 wt% για τα διαστήματα αξιοπιστίας 10%, 25% και 75% (βλ. σχήμα 4.7) με βάση την εμπειρική συνάρτηση αθροιστικής κατανομής του σχήματος 3.3.



Σχήμα 4.6: Τα πολύγωνα voronoi αναπαριστούν τις πραγματικές τιμές των σημείων που εκτιμήθηκαν με kriging. Στο διάγραμμα διακρίνονται με κόκκινο χρώμα τα σημεία μετρήσεων (x) και οι ακριβείς θέσεις των σημείων με το μεγαλύτερο σφάλμα εκτίμησης (⊗).

Τα σφάλματα της εκτίμησης kriging δεν είναι τόσο ικανοποιητικά και υπάρχουν εκτιμώμενα σημεία με σημαντικές αποκλίσεις από τις πραγματικές τιμές (βλ. σχήμα 4.3). Αυτά τα ελαττωματικά σημεία διερευνήθηκαν διότι υποβαθμίζουν την εκτίμηση kriging. Σύμφωνα με το διάγραμμα νοτονοί 4.6 τα προβληματικά σημεία ανήκουν στα σημεία γεωλογικού ενδιαφέροντος και δεν μπορούν να αφαιρεθούν από τα δεδομένα μετρήσεων. Τα σημεία αυτά δεν μπορούν να εκτιμηθούν με τη μέθοδο leave one out cross-validation επειδή έχουν πολύ υψηλές τιμές σε σχέση με τα γειτονικά σημεία τους. Για παράδειγμα αφαιρείται ένα σημείο με 4 wt% και τα γειτονικά σημεία του έχουν τιμές περίπου 1 wt%. Άρα, η μέθοδος kriging προκαλεί "over-smoothing" και δεν εξασφαλίζεται η στασιμότητα του πεδίου.

Τα διαστήματα αξιοπιστίας προσδιορίστηκαν μέσω της αθροιστικής κατανομής πιθανότητας (CDF) για τιμή οριακής περιεκτικότητας (cut-off). Τα τμήματα της περιοχής μελέτης των οποίων η περιεκτικότητα υπερβαίνει ή είναι ίση με το 2 %wt θεωρούνται οικονομικά εκμεταλλεύσιμα. Για τον λόγο αυτό έγινε η χαρτογράφηση της συγκέντρωσης 2 wt% TOC για τα επίπεδα εμπιστοσύνης 10%, 25% και 75% (βλ. χάρτη 4.7). Οι κίτρινες περιοχές του χάρτη 4.7 χαρτογραφήθηκαν με αξιοπιστία 75% και αποτελούν τις περιοχές όπου αξίζει να πραγματοποιηθούν πιο στοχευμένες έρευνες για την αναζήτηση αποθεμάτων σχιστολιθικού αερίου.



Σχήμα 4.7: Χωρική κατανομή της συγκέντρωσης οργανικού άνθρακα με τιμές μεγαλύτερες ή ίσες του 2 %wt για τα διαστήματα εμπιστοσύνης 10%, 25% και 75%. Με τη βοήθεια της χρωματικής κλίμακας καθορίζεται το διάστημα εμπιστοσύνης. Διακρίνονται επίσης τα σημεία (x) που αποτελούν τις μετρήσιμες τιμές συγκέντρωσης που είναι μεγαλύτερες ή ίσες του 2%wt.

Κεφάλαιο 5

Συμπεράσματα

Η παρούσα διπλωματική εργασία είχε ως στόχο την εφαρμογή ενός γεωστατιστικού μοντέλου σε δεδομένα συγκέντρωσης οργανικού άνθρακα για την διερεύνηση μη συμβατικών αποθεμάτων υδρογονανθράκων στην βορειοανατολική χερσαία λεκάνη της ακτής του Κόλπου του Μεξικού. Ειδικότερα, προσδιορίστηκαν οι παράμετροι του γεωστατιστικού μοντέλου (δηλαδή η διασπορά, το μήκος συσχέτισης και το φαινόμενο κόκκου) με τη βοήθεια του εκθετικού βαριογράμματος. Το εκθετικό μοντέλο βαριογράμματος είχε την πιο ικανοποιητική προσαρμογή σε σχέση με τα υπόλοιπα τρία μοντέλα βαριογραμμάτων που δοκιμάστηκαν (το γκαουσιανό, το σφαιρικό και το δυναμονομικό). Ωστόσο, το εκθετικό μοντέλο παρουσίασε υψηλή τιμή φαινομένου πυρήνα λόγω των περιορισμένων σημείων δειγματοληψίας. Η χωρική παρεμβολή πραγματοποιήθηκε με τη χρήση των εξισώσεων του κανονικού kriging οι οποίες εφαρμόστηκαν στη διακύμανση του πεδίου. Η τιμή της μέγιστης ακτίνας του kriging θεωρήθηκε ίση με την ακτίνα συσχέτισης του πεδίου ώστε να επιτυγχάνεται ισχυρή συσχέτιση και ικανός αριθμός γειτόνων σε κάθε γειτονιά εκτίμησης. Η μέθοδος κανονικού kriging παρουσίασε χαμηλή συσχέτιση, της τάξεως του 43%, μεταξύ εκτιμώμενων και πραγματικών τιμών. Συνεπώς, το γεωστατιστικό μοντέλο παρουσίασε σημαντική αβεβαιότητα.

Επιπλέον, διαπιστώθηκε ότι η μέθοδος κανονικού kriging προκάλεσε «over smoothing» με αποτέλεσμα να μην ανιχνεύσει τις απότομες μεταβολές στο πεδίο. Παρόλα αυτά, το γεωστατιστικό μοντέλο έχει την δυνατότητα εντοπισμού των σημείων ενδιαφέροντος της περιοχής μελέτης, δηλαδή των τμημάτων όπου απαντώνται μη συμβατικά αποθέματα υδρογονανθράκων. Για τον λόγο αυτό κατασκευάστηκε χάρτης με τιμή οριακής περιεκτικότητας οργανικού άνθρακα 2 wt% για τα διαστήματα εμπιστοσύνης 10%, 25% και 75%.

Η εκτίμηση θεωρείται βέλτιστη όταν το βαριόγραμμα είναι γνωστό. Για να είναι όμως το βαριόγραμμα γνωστό πρέπει να εξασφαλίζεται η στασιμότητα του

πεδίου. Όταν δεν εξασφαλίζεται η στασιμότητα του πεδίου η εκτίμηση του kriging υποτιμάται, επειδή μια από τις παραδοχές του kriging είναι η στασιμότητα.

Τέλος, από την παραπάνω έρευνα προκύπτει ότι ο μετασχηματισμός και ο αντίστροφος μετασχηματισμός modified Box-Cox δεν δημιούργησαν επιπλέον σφάλματα.

5.1 Προτάσεις για Μελλοντική Έρευνα

Το γεωστατιστικό μοντέλο που εφαρμόστηκε στην παρούσα διπλωματική εργασία επιτρέπει τη χρήση μεθόδων οι οποίες αναμένεται να βελτιώσουν την απόδοση του. Ειδικότερα, η αύξηση του αριθμού των δειγματοληπτικών γεωτρήσεων στα σημεία ενδιαφέροντος θα ενισχύσει τη γνώση της χαρτογράφησης. Με άλλα λόγια, η πύκνωση των σημείων δειγματοληψίας θα εξασφαλίσει τον έλεγχο της παραμέτρου της ανισοτροπίας η οποία παράμετρος δεν λήφθηκε υπόψη κατά την παρούσα μοντελοποίηση. Επιπλέον, μπορεί να χρησιμοποιηθεί η μέθοδος indicator kriging μέσω της οποίας θα χαρτογραφηθεί η πιθανότητα υπέρβασης ενός καθορισμένου ορίου εκμεταλλεύσιμης περιεκτικότητας. Το indicator kriging σε συνδυασμό με προσομοιώσεις με μεθόδους Monte Carlo (π.χ. simulated annealing) θα βελτιώσει την προσέγγιση των σημείων ενδιαφέροντος. Τέλος, αξίζει να πραγματοποιηθεί μια έρευνα ως προς την στρωματογραφία της περιοχής μελέτης, δηλαδή μια τρισδιάστατη μοντελοποίηση του θαλάσσιου σχιστόλιθου Tuscaloosa.

Ελληνική Βιβλιογραφία

Ν.Βαρότσης. *Μηχανική Ταμιευτήρων*. Σημειώσεις Διαλέξεων. Πολυτεχνείο Κρήτης, 2014.

Νίκος Πασαδάκης. *Γεωχημεία Πετρελαίου*. ΕΚΔΟΣΕΙΣ ΤΖΙΟΛΑ, 2015.

Ανδρέας Γιώτης. *Μηχανική Ταμιευτήρων Υ/Α, Reservoir Engineering*. Σημειώσεις Διαλέξεων. Πολυτεχνείο Κρήτης, 2021.

Konstantinos Modis and Sofia Stamataki. Introduction to mineral exploration. 2016.

Χριστόπουλος Δ.Θ. *Εφαρμοσμένη Γεωστατιστική*. Σημειώσεις Διαλέξεων. Πολυτεχνείο Κρήτης, 2014.

Γιώργος Κ. Παπαδόπουλος. *Εισαγωγή στις Πιθανότητες και τη Στατιστική*. ΕΚΔΟΣΕΙΣ GUTENBERG, 2015.

Ιωάννης Κ. Καπαγερίδης. *Εισαγωγή στη Γεωστατιστική*. ΕΚΔΟΣΕΙΣ ΙΩΝ, 2015.

Γκάφα Παναγιώτα. Διπλωματική Εργασία, Γεωστατιστική ανάλυση αποθεμάτων γαιάνθρακα βάσει δεδομένων από την κομητεία campbell των ΗΠΑ, 2017.

Διεθνής Βιβλιογραφία

Emmanouil A Varouchakis. Median polish kriging and sequential gaussian simulation for the spatial analysis of source rock data. *Journal of Marine Science and Engineering*, 9(7):717, 2021a.

Charles B Koons, John G Bond, and Fred L Peirce. Effects of depositional environment and postdepositional history on chemical composition of lower tuscaloosa oils. *AAPG Bulletin*, 58(7):1272–1280, 1974.

Paul C Hackley, Catherine B Enomoto, Brett J Valentine, William A Rouse, Celeste D Lohr, Frank T Dulong, Javin J Hatcherian, Sean T Brennan, William H Craddock, Thomas M Finn, et al. Assessment of undiscovered continuous oil and gas resources in the upper cretaceous tuscaloosa marine shale of the us gulf coast, 2018. Technical report, US Geological Survey, 2018.

C Enomoto, C Lohr, P Hackley, B Valentine, F Dulong, and J Hatcherian. Petroleum geology data from mesozoic rock samples in the eastern us gulf coast collected 2011 to 2017. *US Geol. Survey Data Release*, 2018.

David M Borrok, Wan Yang, Mingzhen Wei, and Mehdi Mokhtari. Heterogeneity of the mineralogy and organic content of the tuscaloosa marine shale. *Marine and Petroleum Geology*, 109:717–731, 2019.

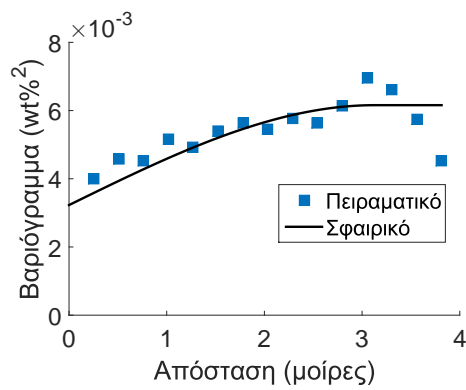
Paul C Hackley, Kristin O Dennen, Daniel Garza, Celeste D Lohr, Brett J Valentine, Javin J Hatcherian, Catherine B Enomoto, and Frank T Dulong. Oil-source rock correlation studies in the unconventional upper cretaceous tuscaloosa marine shale (tms) petroleum system, mississippi and louisiana, usa. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 190:107015, 2020.

Celeste D Lohr, Brett J Valentine, Paul C Hackley, and Frank T Dulong. Characterization of the unconventional tuscaloosa marine shale reservoir in southwestern mississippi, usa: Insights from optical and sem petrography. *Marine and Petroleum Geology*, 121:104580, 2020.

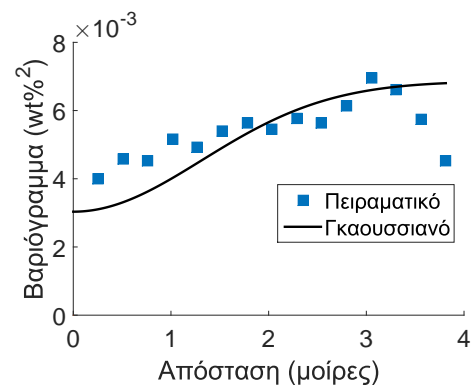
- Anna A Hoffmann and David M Borrok. The geochemistry of produced waters from the tuscaloosa marine shale, usa. *Applied Geochemistry*, 116:104568, 2020.
- Hunter Berch. Predicting potential unconventional production in the tuscaloosa marine shale play using thermal modeling and log overlay analysis, 2013.
- Ricardo A Olea. *Geostatistics for engineers and earth scientists*. Springer Science & Business Media, 2012.
- Georges Matheron. Principles of geostatistics. *Economic geology*, 58(8):1246–1266, 1963.
- Raimon Tolosana-Delgado, Ute Mueller, and K Gerald van den Boogaart. Geostatistics for compositional data: an overview. *Mathematical geosciences*, 51(4):485–526, 2019.
- Michael Hohn. *Geostatistics and petroleum geology*. Springer Science & Business Media, 1998.
- Hans Wackernagel, Victor De Oliveira, and Benjamin Kedem. Multivariate geostatistics. *SIAM Review*, 39(2):340–340, 1997.
- Andrew G. Pavlides. *Development of new geostatistical methods for spatial analysis and applications in reserves estimation and quality characteristics of coal deposits*. PhD thesis, TECHNICAL UNIVERSITY OF CRETE, 2016.
- Erik Vanmarcke. *Random fields: analysis and synthesis*. World scientific, 2010.
- Dionissios T Hristopulos. *Random fields for spatial data modeling*. Springer, 2020.
- Milan Žukovič and Dionissios T Hristopulos. Reconstruction of missing data in remote sensing images using conditional stochastic optimization with global geometric constraints. *Stochastic environmental research and risk assessment*, 27(4):785–806, 2013.
- EMMANOUIL A. VAROUCHAKIS. *Geostatistical Analysis and Space-Time Models of Aquifer Levels: Application to Mires Hydrological Basin in the Prefecture of Crete*. PhD thesis, TECHNICAL UNIVERSITY OF CRETE, 2012.
- Edward H Isaaks and Mohan R Srivastava. *Applied geostatistics*. Number 551.72 ISA. Oxford University Press, 1989.

- Noel Cressie. The origins of kriging. *Mathematical geology*, 22(3):239–252, 1990.
- Salomon Bochner et al. *Lectures on Fourier integrals*, volume 42. Princeton University Press, 1959.
- Jianan Qu and Clayton V Deutsch. Geostatistical simulation with a trend using gaussian mixture models. *Natural Resources Research*, 27(3):347–363, 2018.
- Noel Cressie and Douglas M Hawkins. Robust estimation of the variogram: I. *Journal of the international Association for Mathematical Geology*, 12(2):115–125, 1980.
- Asim Biswas and Bing Cheng Si. Model averaging for semivariogram model parameters. *Advances in Agrophysical Research*, 4:81–96, 2013.
- George Christakos. *Random field models in earth sciences*. Courier Corporation, 2012.
- Daniel G Krige. A statistical approach to some basic mine valuation problems on the witwatersrand. *Journal of the Southern African Institute of Mining and Metallurgy*, 52(6):119–139, 1951.
- Margaret Armstrong. *Basic linear geostatistics*. Springer Science & Business Media, 1998.
- Pierre Goovaerts et al. *Geostatistics for natural resources evaluation*. Oxford University Press on Demand, 1997.
- ESRI. Arcgis desktop: Release 10. Redlands, CA: Environmental Systems Research Institute, 2011.
- Emmanouil A Varouchakis. Gaussian transformation methods for spatial data. *Geosciences*, 11(5):196, 2021b.

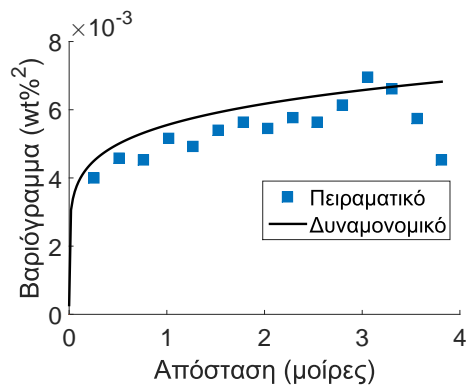
Παράρτημα



(α) Σφαιρικό Βαρίογραμμα



(β) Γκαουσιανό Βαρίογραμμα



(γ) Δυναμονομικό Βαρίογραμμα

Σχήμα 1: Προσαρμογή των θεωρητικών μοντέλων με φαινόμενο κόκκου στο πειραματικό βαρίογραμμα.