

Original Research Paper

3D modeling of ore grade with an approximate Bayesian approach

Ahmadreza Boskabadi¹, Alireza Arab-Amiri^{1*}, Behzad Tokhmechi¹, and Hossein Baghishani²

¹ Faculty of Mining, Petroleum and Geophysics Engineering, Shahrood University of Technology, Shahrood, Iran

² Faculty of Mathematical Sciences, Shahrood University of Technology, Shahrood, Iran

ARTICLE INFO

Article history:

Received: 2024 January 02

Accepted: 2024 August 12

Available online: 2024 December 21

Keywords:

Geostatistics

Bayesian inference

Laplace approximation

Differential equations

3D modeling

ABSTRACT

Since the grade of elements in a mining area has spatial correlation, its statistical analysis is impossible with the usual statistical methods. Therefore, spatial statistics methods are used in their analysis to model the spatial correlation structure and predict the unknown grade values in arbitrary locations. For prediction, including dependence structures and trend following due to contextual factors (such as topography) helps improve the accuracy of response variable forecasting. In data analysis, the small number of observations, the presence of outlier observations, or data with a highly skewed distribution, causes an inaccurate estimation of the variogram. In this article, a Bayesian approach is used for the 3D modeling of the data, and an approximate Bayesian method known as Integrated Nested Laplace Approximations (INLA) is used to fit the proposed model. Since Geostatistical data are densely indexed, to ensure fast calculations using INLA, the spatial model defined on the study area was converted into a Gaussian Markov Random Field (GMRF) using triangulation and the Stochastic Partial Differential Equation (SPDE) approach. The implementation of the INLA+SPDE method on a 3D Geostatistical data set is a new topic in the field of mining data modeling.

1. Introduction

Spatial modeling is important in various scientific fields such as urban planning, health, geology, meteorology, and environment (Cressie and Wikle, 2011; Gelfand et al., 2010). The purpose of spatial modeling is to describe the spatial dependence within and between variables. Since the grade of elements in an area has a spatial correlation, statistical analysis to calculate the grade in different parts of a mine is not possible with classical interpolation methods. In classical interpolation methods, the results obtained from measuring samples are analyzed independently of their

spatial location. Therefore, it is better to use spatial statistics and Geostatistical interpolation to model the spatial correlation structure and predict the unknown grade values in desired locations. Among the Geostatistical interpolation methods, Kriging is calculated based on the spatial correlation between the data and through the transform function (Li and Heap, 2011).


Stationarity (consistency of the possible structure of observations in separate sub-areas) and Gaussian distribution (lack of outlier observations or out-of-line points and skewed distribution) are two


* Corresponding author: Alireza Arab-Amiri; E-mail: alirezaarabamiri@yahoo.com

Citation:

Boskabadi, A.R., Arab-Amiri, A.R., Tokhmechi, B., and Baghishani, H., 2024. 3D modeling of ore grade with an approximate Bayesian approach. Scientific Quarterly Journal of Geosciences, 34(4), 134, 23-36. <https://doi.org/10.22071/gsj.2024.433476.2129>.

E-ISSN: 2645-4963; Copyright©2021 G.S. Journal & the authors. All rights reserved.

 doi: 10.22071/gsj.2024.433476.2129

 dor: 20.1001.1.10237429.1403.34.4.2.2



This is an open access article under the by-nc/4.0/ License (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

basic assumptions in kriging calculations (Krainski, 2019).

In practice, to predict the grade in a mining area, it is necessary to include the dependence structures and follow the trend due to the background factors (such as topography). In this situation, using the general kriging version can help improve prediction accuracy. On the other hand, in most cases, in mines due to the cost and time-consuming nature of conducting mineral analyses, the number of observations is usually small, and in some cases, due to errors in sampling or errors in analysis, the presence of outlier observations or data with a highly skewed distribution causes imprecise estimation of the variogram. In these cases, it is recommended to use the model-based Geostatistics approach. In the model-based Geostatistical approach, a model is first formulated to predict the target response variable. Then, it is used to predict the data in the lack of observation points and finally, the efficiency of the model is evaluated (Diggle et al., 2003).

Considering the various advantages of the Bayesian perspective in statistical inference compared to conventional methods, such as the ability to take advantage of the available information through previous similar studies and the ability to make probabilistic statements about the parameters, we use a Bayesian framework for data modeling (Wang et al., 2018; Brown et al., 2019). Extraneous side information is usually summarized in a probabilistic structure called prior distribution. In the Bayesian theory, the information obtained from the observations and the metadata are combined in the form of the prior distribution, which leads to the construction of the posterior distribution. The posterior distribution as a function of the unknowns of the model becomes the basis of all inferences and in Bayesian Geostatistics it is used to predict the response variable in arbitrary locations without observation. Usually, extracting the results from the posterior distribution involves the calculation of high-dimensional integrals, which are rarely available analytically (Beguin et al., 2012). The usual solution in these cases is to approximate the posterior distribution. One of the posterior distribution approximation methods, in a wide range of spatial models, is INLA. The INLA method is a widely used deterministic method for Bayesian approximation that combines the Laplace approximation and numerical integrations efficiently to provide a low-error approximation to the posterior distribution of the model (Rue et al., 2009, 2017; Van Niekerk and Rue et al., 2021; Gaedke-Merzhäuser et al., 2023). This method can be computationally much faster than the usual posterior distribution approximation methods, i.e., Markovian Chain Monte Carlo (MCMC) algorithms, and it can turn the multi-hour fitting of a model with an MCMC algorithm into a multi-second fit.

The stunning computational efficiency of the INLA method is due to the Markovian property of the observations in the area under study. If the study area is sparse, Markovianity can be accepted,

but this property is not established for not sparse areas. For this reason, considering the density of Geostatistical data, to ensure the inherent computational efficiency of the INLA method, we convert the spatial model defined on the study mining area into a GMRF using triangulation and the SPDE approach. It is noteworthy that the implementation of the INLA+SPDE method on a 3D Geostatistical data set in the field of mining data modeling has not been done so far, and we intend to describe its details and evaluate its performance in this article.

2. Research methodology

In this article, considering the obvious advantages of the Bayesian data analysis perspective, we use a Bayesian framework to estimate the grade of a mineral in 3D space. For this purpose, we first provide an introduction from the point of view of Bayesian data modeling. Although Bayesian inference is easy to implement in theory, it can be very difficult in practice due to the serious computational difficulties of obtaining the posterior distribution. This is especially true for models with complex and high-dimensional structures. For this reason, we will introduce Bayesian hierarchical models in a Model-based Geostatistics framework and a special subcategory of them, known as Latent Gaussian Models (LGMs). Since in the Bayesian analysis of LGMs models, we encounter the solution of complex integrals, we will use the INLA method to approximate them. The INLA method is a new Bayesian analysis method that can provide accurate and fast results for LGMs.

To take advantage of the amazing computational efficiency of the INLA method, we introduce Gaussian random fields (GRFs) and Gaussian-Markovian fields (GMRFs) and explain how they can be modeled using the stochastic partial differential equation (SPDE) approach. Linked with each other. The generalization of the combined INLA+SPDE algorithm for 3D mining data is presented for the first time in this article and a summary of its details is presented.

2. 1. Bayesian view of statistical inference

In the Bayesian inference perspective, all inferences and results of data analysis, including estimation of unknown parameters of the model and estimation of the response variable, are obtained based on the posterior distribution.

In summary, Bayesian analysis starts by choosing a suitable prior distribution (if any) which is usually obtained from our prior knowledge of the parameter. Then, the appropriate probability model is determined for the data and based on that, the posterior distribution is calculated definitively or approximately. So, building a Bayesian model includes the following steps:

1- Building the likelihood function of the model based on the selected distribution for the data.

- 2- Determine the prior distribution for the model parameters.
- 3- Finding the posterior distribution of the model based on the combination of the likelihood function and the prior distribution based on equation (2).

With the posterior distribution known, all analyses including estimation of unknowns, hypothesis testing about quantities of interest, and response estimation at unobserved points are calculated based on the posterior distribution, which usually leads to solving an integral. Although this process is theoretically straightforward, in practice it can face the following problems:

- 1- Calculating the posterior distribution of $\pi(\theta|x)$ may be difficult or even impossible.
- 2- Even if the posterior distribution is known, analytical calculation of target integral quantities becomes impossible, especially when the dimension of θ parameters is large (Chavander, 2016).

To solve these problems, different versions of posterior distribution approximation and integral quantities are used (Robert and Casella, 2004). In this article, due to the complexity of the model used, an efficient approximation version is used, which we introduce. First, we need to introduce the Model-based Geostatistics modeling framework.

2.2. Model-based Geostatistics

Applying the general principles of modeling and statistical inference in Geostatistical problems can be called Model-based Geostatistics (Diggle et al., 2003). Based on the general principles of modeling and statistical inference in Geostatistical problems, you should first formulate a simple model based on the types of hidden structures that you believe exist in the data, then use probability-based inference methods and respond to the raised objectives. In fact, this approach based on mixed linear and generalized linear models is extended when the sample is small or when variogram modeling suffers from uncertainty due to the presence of outlying observations or data that are extracted from a highly skewed distribution (Bivand et al., 2013). An overview of the principles governing Model-based Geostatistics is shown in Figure 1.

2.3. Bayesian Hierarchical Models

This class of models uses a hierarchy of parameters or variables to model data. These models are proposed when the diversity of prior information or the variability of observations requires the introduction of several levels of prior distributions (Allenby et al., 2005). Bayesian hierarchical models follow a hierarchical structure that includes three stages:

- Step 1) Observation model: This step specifies the model governing the data.
- Step 2) Process model: the set of hidden variables follows equation 4 under the condition of hyperparameters θ_2 .

Step 3) Parameters model: To complete the hierarchical structure, the prior distribution of all model parameters, $\theta = (\theta_1, \theta_2)$, is determined by equation 5.

This type of modeling can create high flexibility in building efficient and suitable models for data analysis. One of the subcategories of Hierarchical Bayesian models is the category of Latent Gaussian Models, most of the popular models today are members of this category (Rue et al., 2009). Some of these models include linear and generalized linear regression for temporal, spatial, and spatio-temporal data analysis with the effects of linear and non-linear explanatory variables.

2.4. Latent Gaussian Models

A hidden variable is a variable that cannot be directly observed, but it is a source that causes visible changes in the obvious variables of the model or model parameters. The hidden variable model can be considered a model in which a set of obvious variables is linked to a set of hidden variables, so it is assumed that:

- 1- The response variable or observed variable related to each observation is affected by the values of hidden variables for that observation.
- 2- As long as the hidden variables are known, the obvious variables are independent of each other, which is known as conditional independence (Vafaei, 2016).

2.5. Integrated Nested Laplace Approximation

Usually, in the category of LGMs, due to the non-gaussianness of the posterior distribution of the model and the existence of a high number of hidden variables, the posterior quantities of interest for data analysis and spatial estimation do not have a closed and analytical form. In these cases, the methods of approximating the posterior distribution of the model and especially algorithms based on MCMC sampling are used. But the use of MCMC algorithms, in the category of LGMs, usually faces the problems of slow convergence and long calculation time. To solve these problems, the INLA method was introduced by Rue et al. (2009). This method relies on Laplace approximations (Tierney et al., 1989) to calculate the lateral posterior distributions of different components of the model. More precisely, this method repeatedly uses several Laplace transforms for each lateral posterior distribution to provide an approximation of the form $\tilde{\pi}(z_i|y)$. Rue and colleagues (Rue et al., 2009) presented three different algorithms for this task, the details of each of which are mentioned in their article.

One of the advantages of this method is the ease of creating and modifying complex spatial models without the need to write complex codes and the speed of inference even for spatial problems with thousands of observations, so that in a much shorter period, an acceptable approximation of the posterior distribution can

be replaced by simulation. It does heavy MCMC and avoids the convergence problems of MCMC methods. On the other hand, one of the main challenges of the INLA method is 1) the difficulty of modeling the spatial dependence structure of bulk data (Bakka et al., 2018) and 2) the lack of coherent development of the 3D spatial data modeling framework.

The INLA method is constantly being improved to increase its usefulness and applicability to researchers. One of the recent advances is the implementation of new parallelization schemes, which have led to a significant increase in the speed of fitting larger models (Gaedke-Merzhäuser et al., 2023). The effectiveness of the INLA method relies on the precise implementation of different algorithms inside it. This implementation is available in the R-INLA software package in the R environment, which allows us to embed complex models in seconds. However, as stated, the generalization of the method to all types of 3D data is a serious challenge that limits its use for the analysis of such data, similar to the data of this paper. In this paper, we have tried to overcome this limitation for mineral data. To see more details of the INLA method, you can refer to the article by Rue et al. (2009).

2.6. Stochastic Partial Differential Equations

An SPDE can be applied to represent a Gaussian Random Field as a GMRF. The Gaussian process is used to model observations in a dense region. Tobler's first law in geography is the basis of the introduction of spatial statistics analysis, which says that nearby things are more related than distant things (Tobler, 1970). This property is preserved by Gaussian random fields and motivates the use of GRF for modeling (Lindgren and Rue, 2011). Inference and estimation with a spatial model require inversion and decomposition of the covariance matrix Σ . The covariance matrix of a GRF is usually dense, and the computational cost for matrix operations on dense matrices is of the order of $O(n^3)$, where n is the dimension of the matrix. But if the accuracy matrix Q has a Markovian structure (or conditional independence), which is typical for GMRFs, the computational cost of the matrix operation can be reduced to $O(n^{3/2})$. For this reason, the computational efficiency of modeling based on GMRFs can be much higher than GRFs and allows us to make faster inferences and estimates. For dense sets such as Geostatistical data, with the help of SPDE approach, the dense set can be transformed into a Markovian set with the help of triangulation, so that the implementation of the INLA method for the data in the new approximate set be more efficient (oudeh, 2021). The solution is expressed numerically using the Finite Element Method and displaying the basic functions defined on a triangular grid.

To implement the SPDE method, the study area must first be triangulated. In Equation (13), $x(u)$ is a GRF defined in the

triangulation of region D , where m is the number of vertices in the triangle. The basic functions φ_k are chosen in such a way that they are piecewise linear and have local support in each triangle. This means that $\varphi_k = 1$ at vertex k and zero at other vertices. This property guarantees that the approximation has Markovian properties and constitutes a GMRF (Mathisen, 2020). A representation of the INLA+SPDE algorithm can be seen in Figure 4.

In order to be able to use the SPDE method in the analysis of 3D mineral Geostatistical data, we used a tetrahedral mesh instead of a triangle to discretize the area under study (Figure 3-b). The positive point that can be used in this generalization is that the structural matrices required for the finite element method can be calculated similarly to the two-dimensional case. Determining the parameters of the meter field in the implementation of the SPDE method is also similar to the two-dimensional mode and can be implemented using the standard functions available in the mentioned method in the R-INLA package (Fakhri, 2020).

2.7. Model evaluation

To evaluate the performance of the estimators, we will use two criteria: mean absolute error (MAE) and root mean square error (RMSE). These two criteria are calculated as Formulas 14 and 15.

3. Discussions

3.1. Data and Information

With new technical developments, it is now possible to mass produce, simulate, and generate data and models close to the behavior of the mineral environment and use them for the purposes of analysis and validation of predictive models. To evaluate the proposed method in this article and compare it with the conventional universal kriging estimation method (Cressie and Helderbrand, 1994), a static primary model (synthetic data) was created as a three-dimensional model of the earth, each dimension having 20 blocks of elongation. In fact, the built model is simulated according to the mineral range and the response variable values in each block, replacing the grade of the mineral at that point of the mine according to equation (32). The statistical characteristics of the simulated model are reported in Table (1). The distribution diagram of the simulated data in three different views is also shown in Figure 5.

Then, eight locations were determined randomly as drilling points. Since a percentage of the removed core cannot be used in actual sampling, the recovery factor for the cores was considered to be 80%, and 20% of the borehole data was randomly removed (see Figure 6). It should be noted that because the real model is simulated, changing the depth, angle, and slope of the boreholes does not cost the user, and if necessary, the data of the boreholes can be collected with any of the desired settings.

4. Results

After generating artificial data as an observed data set, we first estimated the model using the kriging method as a reference method. Due to the trend in the data, the data were detrended and the general kriging method was used to reconstruct the real model and estimate the entire simulated three-dimensional area. Then, using the proposed method (INLA+SPDE) with the same observed data, the real model was estimated in the area under study. Next, the estimation error in each position of the three-dimensional area was calculated for both methods, and the evaluation criteria of MAE and RMSE were obtained. For a more detailed investigation, this whole process was repeated 150 times. Table 2 shows the average values of the obtained criteria in all repetitions. Considering the smaller values of both criteria for the INLA+SPDE method compared to the universal kriging method, the superiority of the estimation performance of the proposed method is clearly evident.

5. Conclusion

By examining the obtained results, it can be concluded that the INLA method can be a more effective alternative approach to the kriging method in earth sciences. Among the advantages of this method are the ease of creating and modifying complex models without the need to write complex codes, the speed of inference even for voluminous data, and the possibility of embedding previous information about the target problem in the model.

It is worth noting that if you have information on other minerals, they can be used as explanatory variables to improve estimates with the model-based Geostatistical method. Even if the effect of these explanatory variables is nonlinear, it is possible to flexibly model them within the framework of the LGMs category and use the INLA+SPDE method.

مدل سازی سه بعدی عیار ماده معدنی با یک رهیافت بیزی تقریبی

احمد رضا بسکابادی^۱، علیرضا عرب امیری^{۱*}، بهزاد تخمچی^۱ و حسین باغیشنی^۲

^۱دانشکده مهندسی معدن، نفت و ژئوفیزیک، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود، ایران

^۲دانشکده علوم ریاضی، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود، ایران

چکیده

از آنجا که عیار عناصر در یک محدوده معدنی دارای همبستگی فضایی است، تحلیل آماری آن با روش های آماری معمول امکان پذیر نیست. بنابراین، برای مدل بندی ساختار همبستگی فضایی و تخمین مقادیر نامعلوم عیار در مکان های دلخواه، در تحلیل آن ها از روش های آمار فضایی استفاده می شود. برای انجام تخمین، گنجاندن ساختارهای وابستگی و پیروی از روند به دلیل عوامل زمینه ای (مانند توپوگرافی) در بهبود دقت تخمین متغیر پاسخ کمک می کند. در تحلیل داده ها، کم بودن تعداد مشاهدات، وجود مشاهدات پرت یا داده هایی با توزیع شدیداً چوله، باعث برآوردی نادقیق از تغییرنگار (Variogram) می شود. در این موارد، استفاده از یک رویکرد زمین آماری مبتنی بر مدل توصیه می شود. در این مقاله برای مدل سازی سه بعدی داده ها از یک رهیافت بیزی و برای برآزش مدل پیشنهادی از یک روش بیزی تقریبی معروف به تقریب لاپلاس آشیانه ای جمع بسته (INLA) استفاده می شود. با توجه به چگال بودن داده های زمین آماری، برای اطمینان از محاسبات سریع با استفاده از INLA، مدل فضایی تعریف شده روی ناحیه معدنی تحت مطالعه را به کمک مثلث سازی و رهیافت معادلات دیفرانسیل جزئی تصادفی (SPDE)، به یک فرایند تصادفی مارکوفی گاوسی (GMRF) تبدیل می کنیم. پیاده سازی روش ترکیبی INLA+SPDE بر روی یک مجموعه داده زمین آماری سه بعدی، مبحث جدیدی در زمینه مدل سازی داده های معدنی است.

اطلاعات مقاله

تاریخچه مقاله:

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۱۰/۱۲

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۰۵/۲۲

تاریخ انتشار: ۱۴۰۳/۱۰/۰۱

کلیدواژه ها:

زمین آمار

استنباط بیزی

تقریب لاپلاس

معادلات دیفرانسیل

مدل سازی سه بعدی

۱- پیش نوشتار

در عمل، برای تخمین عیار در یک محدوده معدنی، گنجاندن ساختارهای وابستگی و پیروی از روند به دلیل عوامل زمینه ای (مانند توپوگرافی) امری ضروری است. در این شرایط استفاده از نسخه کریگینگ عام می تواند در بهبود دقت تخمین کمک کند. از سوی دیگر، در بیشتر موارد، در معادن به دلیل هزینه و زمان بر بودن انجام آنالیزهای معدنی معمولاً تعداد مشاهدات کم بوده و در مواردی به دلیل خطا در نمونه برداری یا خطا در آنالیز، وجود مشاهدات پرت یا داده هایی با توزیع شدیداً چوله سبب برآورد نادقیق تغییرنگار می شود. در این موارد، استفاده از رویکرد زمین آماری مبتنی بر مدل (Model-based Geostatistics) توصیه می شود. در این رویکرد، ابتدا یک مدل برای تخمین متغیر پاسخ هدف فرمول بندی می شود. سپس از آن برای تخمین داده ها در نقاط فاقد مشاهده استفاده می شود و در انتها کارایی مدل مورد ارزیابی قرار می گیرد (Diggle et al., 2003).

با توجه به مزایای متنوع دیدگاه بیزی در استنباط آماری نسبت به روش های متداول، مانند توانایی بهره گیری از اطلاعات جانبی در دسترس از طریق مطالعات مشابه پیشین و توانایی ساخت گزاره های احتمالی در مورد پارامترها، برای مدل سازی داده ها از

مدل سازی فضایی نقش مهمی در زمینه های مختلف علمی مانند برنامه ریزی شهری، بهداشت، زمین شناسی، هواشناسی و محیط زیست ایفا می کند (Cressie and Wikle, 2011; Gelfand et al., 2010). هدف از مدل سازی فضایی توصیف وابستگی فضایی درون و بین متغیرها است. از آنجا که عیار عناصر در یک محدوده دارای همبستگی فضایی است، تحلیل آماری برای محاسبه عیار در نقاط مختلف یک معدن، با روش های درون یابی کلاسیک مقدور نیست. در روش های درون یابی کلاسیک، نتایج حاصل از اندازه گیری نمونه ها، مستقل از موقعیت مکانی (فضایی) آن ها مورد تحلیل قرار می گیرند. بنابراین، لازم است برای مدل سازی ساختار همبستگی فضایی و تخمین مقادیر نامعلوم عیار در مکان های دلخواه، از روش های آمار فضایی و درون یابی زمین آماری استفاده شود. در بین روش های درون یابی زمین آماری، کریگینگ (Kriging) بر اساس همبستگی فضایی بین داده ها و از طریق تابع تغییرنگار محاسبه می شود (Li and Heap, 2011). مانایی (ثابت ماندن ساختار احتمالی مشاهدات در زیرناحی جدا) و گاوسی بودن توزیع (عدم وجود مشاهدات پرت یا نقاط خارج از ردیف و توزیع چوله) دو پذیره زیربنایی در محاسبات کریگینگ هستند (Krainski et al., 2019).

* نویسنده مسئول: علیرضا عرب امیری؛ E-mail: alirezaarabamiri@yahoo.com

ماخذ نگاری:

بسکابادی، ا. ر.، عرب امیری، ع. ر.، تخمچی، ب. و باغیشنی، ح.، ۱۴۰۳، مدل سازی سه بعدی عیار ماده معدنی با یک رهیافت بیزی تقریبی. فصلنامه علمی علوم زمین، ۳۴(۴)، ۲۳-۳۶. <https://doi.org/10.22071/gsj.2024.433476.2129>

doi: 10.22071/gsj.2024.433476.2129

doi: 20.1001.1.10237429.1403.34.4.2.2

حقوق معنوی مقاله برای فصلنامه علوم زمین و نویسندگان مقاله محفوظ است.



This is an open access article under the by-nc/4.0/ License (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

داده‌های معدنی سه بعدی، در این مقاله معرفی و خلاصه‌ای از جزئیات آن مطرح می‌شود.

۲-۱- دیدگاه بیزی استنباط آماری

در دیدگاه استنباط بیزی، همه استنباطها و نتایج تحلیل داده‌ها، شامل برآورد پارامترهای نامعلوم مدل و تخمین متغیر پاسخ، بر مبنای توزیع پسین به دست می‌آیند. توسعه استنباط بیزی بر مبنای قانون بیز بنا شده است که می‌توان آن را به صورت معادله (۱) نوشت:

$$\pi(\theta|y) = \frac{\pi(\theta)\pi(y|\theta)}{\pi(y)} \quad (1)$$

که در آن $\pi(\theta|y)$ تابع چگالی احتمال توزیع پسین مشروط به مشاهدات متغیر پاسخ y است، برادر θ پارامترهای نامعلوم مدلی است که برای تحلیل مشاهدات متغیر پاسخ انتخاب شده است، $\pi(y|\theta)$ توزیع توام متغیر پاسخ y با فرض θ است که بیانگر مکانیسم پشتیبان داده‌های y است، $\pi(\theta)$ تابع چگالی احتمال توزیع پیشین پارامترهای θ است و $\pi(y)$ تابع چگالی کناری y (Marginal distribution) است که وظیفه نرمال سازی یا سازگاری محاسبات با مفهوم احتمال را دارد. تابع درست‌نمایی مدل، در واقع تابع چگالی احتمال مشاهدات پاسخ است که به آن به عنوان تابعی از پارامتر نگاه می‌شود نه تابعی از مشاهدات. با صرف نظر کردن از ثابت نرمال ساز $\pi(y)$ ، می‌توان معادله (۲) را نوشت:

$$\pi(\theta|y) \propto \pi(y|\theta)\pi(\theta) \quad (2)$$

بنابراین، بنا به فرمول (۲)، می‌توان دریافت که توزیع پسین از ترکیب اطلاعات پیشین نسبت به پارامترهای مدل و اطلاعات حاصل از مشاهدات پدیده مورد نظر (در قالب پاسخ y) به دست می‌آید. در واقع این توزیع، باور اولیه نسبت به پارامترها را با کسب اطلاعات حاصل از مشاهدات اندازه‌گیری شده به روز می‌کند. پس می‌توان انتظار داشت که اگر اطلاعات پیشین درباره پارامترهای مدل مفید باشند، نتایج تحلیلی که بر پایه دیدگاه بیزی و توزیع پسین به دست می‌آیند کاراتر از نتایج متناظر حاصل از دیدگاه کلاسیک استنباط آماری باشد. این انتظار به ویژه زمانی که حجم مشاهدات کوچک است، تقویت می‌شود.

به طور خلاصه، تحلیل بیزی با انتخاب یک توزیع پیشین مناسب (در صورت وجود) که معمولاً از دانش قبلی ما درباره پارامتر به دست می‌آید، شروع می‌شود. سپس مدل احتمالی مناسب برای داده‌ها تعیین می‌شود و بر اساس آن توزیع پسین به صورت قطعی یا تقریبی محاسبه می‌شود. پس ساخت یک مدل بیزی شامل مراحل زیر است:

- ۱- ساخت تابع درست‌نمایی مدل بر اساس توزیع انتخاب شده برای داده‌ها.
- ۲- تعیین توزیع پیشین برای پارامترهای مدل.
- ۳- پیدا کردن توزیع پسین مدل بر اساس ترکیب تابع درست‌نمایی و توزیع پیشین بر مبنای رابطه (۲).

با معلوم شدن توزیع پسین، تمام تحلیل‌ها شامل برآورد پارامترها، آزمون فرضیه درباره کمیت‌های مورد علاقه و تخمین پاسخ در نقاط فاقد مشاهده، بر اساس توزیع پسین محاسبه می‌شوند که معمولاً منجر به حل یک انتگرال می‌شوند. این فرایند اگرچه به طور نظری سراسر است ولی در عمل می‌تواند با مشکلات زیر مواجه شود:

- ۱- محاسبه توزیع پسین $\pi(\theta|x)$ شاید دشوار یا حتی ناممکن باشد.
- ۲- حتی اگر توزیع پسین قابل حصول باشد، محاسبه تحلیلی کمیت‌های انتگرالی هدف به ویژه هنگامی که بعد پارامترهای θ بزرگ باشد، دشوار یا ناممکن می‌شود (چاوندر، ۱۳۹۵).

برای حل این مشکلات، از نسخه‌های مختلف تقریب توزیع پسین و کمیت‌های انتگرالی استفاده می‌شود (Robert and Casella, 2004). در این مقاله، با توجه به

یک چارچوب بیزی استفاده می‌کنیم (Wang et al., 2018; Brown et al., 2019). اطلاعات مازاد جانبی معمولاً در قالب یک ساختار احتمالی تحت عنوان توزیع پیشین (Prior distribution) خلاصه می‌شود. در دیدگاه بیزی، اطلاعات حاصل از مشاهدات و اطلاعات جانبی در قالب توزیع پیشین با هم ترکیب می‌شوند که منتهی به ساخت توزیع پسین (Posterior distribution) می‌شود. توزیع پسین به عنوان تابعی از مجهولات مدل مبنای تمام استنباطها می‌شود و در زمین آمار بیزی از آن برای تخمین متغیر پاسخ در مکان‌های دلخواه فاقد مشاهده استفاده می‌شود. معمولاً استخراج نتایج حاصل از توزیع پسین شامل محاسبه انتگرال‌های با ابعاد بالا است که به ندرت به صورت تحلیلی در دسترس هستند (Beguin et al., 2012). راهکار معمول در این موارد، استفاده از تقریب توزیع پسین است. یکی از روش‌های تقریب توزیع پسین، در رده‌ای نسبتاً وسیع از مدل‌های فضایی، INLA (Integrated Nested Laplace Approximations) است. روش INLA یک روش بسیار پر کاربرد برای استنباط تقریبی بیزی است که تقریب لاپلاس و انتگرال‌گیری‌های عددی را به شیوه‌ای کارا با هم ترکیب می‌کند تا تقریبی با خطای ناچیز برای توزیع پسین مدل فراهم کند (Rue et al., 2009, 2017; Van Niekerk and Rue et al., 2021; Gaedke-Merzhäuser et al., 2023). این روش از نظر محاسباتی می‌تواند بسیار سریع‌تر از روش‌های تقریب معمول توزیع پسین، یعنی الگوریتم‌های مونت کارلوی زنجیر مارکوفی (Markov chain Monte Carlo; MCMC)، باشد و برازش چندساعته یک مدل با یک الگوریتم MCMC را به یک برازش چندثانیه‌ای تبدیل کند.

کارایی محاسباتی خیره‌کننده روش INLA مرهون ویژگی مارکوفی بودن مشاهدات در ناحیه تحت مطالعه است. اگر ناحیه تحت مطالعه تنک (Sparse) باشد، می‌توان مارکوفی بودن را پذیرفت ولی برای نواحی چگال (ناتنک) این ویژگی برقرار نیست. به همین دلیل، با توجه به چگال بودن داده‌های زمین آمار، برای اطمینان از کارایی محاسباتی ذاتی روش INLA، مدل فضایی تعریف شده روی ناحیه معدنی تحت مطالعه را به کمک مثلث‌سازی و رهیافت SPDE (Stochastic partial differential equations)، به یک GMRF (Gaussian Markov random field) تبدیل می‌کنیم. قابل توجه است که پیاده‌سازی ترکیبی دو روش INLA و SPDE بر روی یک مجموعه داده زمین‌آمار سه بعدی در زمینه مدل‌سازی داده‌های معدنی تا کنون انجام نشده است که قصد داریم در این مقاله جزئیات آن را بیان و عملکرد آن را ارزیابی کنیم.

۲- روش پژوهش

در این مقاله، با توجه به مزایای آشکار دیدگاه تحلیل بیزی داده‌ها از یک چارچوب بیزی برای تخمین عیار ماده معدنی در یک فضای سه بعدی استفاده می‌کنیم. به همین منظور، ابتدا مقدمه‌ای از دیدگاه مدل‌بندی بیزی داده‌ها ارائه می‌کنیم. اگرچه اجرای استنباط بیزی به صورت نظری آسان است، اما در عمل به دلیل مشکلات جدی محاسباتی برای به دست آوردن توزیع پسین، می‌تواند بسیار سخت یا دست‌نیافتنی باشد. این امر به ویژه برای مدل‌هایی با ساختار پیچیده و بعد بالا صادق است. به همین دلیل، به معرفی مدل‌های سلسله‌مراتبی بیزی در یک چارچوب زمین‌آمار مبتنی بر مدل و زیررده خاصی از آن‌ها، معروف به مدل گاوسی پنهان (Latent Gaussian Models; LGMs) خواهیم پرداخت. از آن‌جا که در تحلیل بیزی مدل‌های LGMs با حل انتگرال‌های پیچیده مواجه می‌شویم، برای تقریب آن‌ها از روش INLA استفاده خواهیم کرد. روش INLA یک روش نسبتاً جدید تحلیل بیزی است که می‌تواند نتایجی دقیق و سریع را برای رده LGMs فراهم کند.

برای بهره بردن از کارایی محاسباتی خیره‌کننده روش INLA، مقدمه‌ای از میدان‌های تصادفی گاوسی (GRFs) و گاوسی مارکوفی (GMRFs) را بیان می‌کنیم و توضیح می‌دهیم چگونه می‌توان آن‌ها را با روش معادلات دیفرانسیل جزئی تصادفی (SPDE) به یکدیگر مرتبط کرد. تعمیم الگوریتم ترکیبی INLA+SPDE برای

مرحله ۲) مدل فرایند: مجموعه متغیرهای پنهان به شرط ابر پارامترهای θ_2 از معادله (۴) پیروی می کند:

$$x|\theta_2 \sim \pi(x, \theta_2) \quad (4)$$

مرحله ۳) مدل پارامترها: برای تکمیل ساختار سلسله مراتبی، توزیع پیشین همه پارامترهای مدل، یعنی $\theta = (\theta_1, \theta_2)$ ، توسط معادله (۵) تعیین می شود:

$$\theta \sim \pi(\theta) \quad (5)$$

این نوع مدل بندی، می تواند انعطاف بالایی در ساخت مدل های کارا و مناسب تحلیل داده ها ایجاد کند. یکی از زیررده های مدل های سلسله مراتبی بیزی، رده مدل های گاوسی پنهان است که بیشتر مدل های پرطرفدار در مسائل کاربردی اعضای این رده هستند (Rue et al., 2009). برخی از این مدل ها شامل رگرسیون خطی و خطی تعمیم یافته برای تحلیل داده های زمانی، فضایی و فضایی-زمانی با اثرات متغیرهای تبیینی (Explanatory variables) خطی و غیر خطی است.

۲-۴- مدل های گاوسی پنهان

متغیر پنهان متغیری است که به طور مستقیم قابل مشاهده نیست، اما منبعی است که موجب تغییرات قابل مشاهده در متغیرهای آشکار مدل یا پارامترهای مدل می شود. مدل متغیر پنهان را می توان مدلی دانست که در آن یک مجموعه از متغیرهای آشکار به مجموعه ای از متغیرهای پنهان مرتبط می شود، به طوری که فرض می شود:

۱- متغیر پاسخ یا متغیر آشکار مربوط به هر مشاهده، متاثر از مقادیر متغیرهای پنهان برای آن مشاهده است.

۲- به شرط معلوم بودن متغیرهای پنهان، متغیرهای آشکار از هم مستقل اند، که این موضوع تحت عنوان استقلال شرطی شناخته می شود (وفایی، ۱۳۹۵).

در رده LGM، پاسخ y_i متعلق به یک خانواده توزیع احتمالی با میانگین μ_i تعلق دارد که از طریق تابع پیوند $g(\cdot)$ به یک پیشگو، η_i مرتبط می شود و می توان به صورت معادله (۶) نوشت:

$$g(\mu_i) = \eta_i \quad i=1, \dots, n \quad (6)$$

در این پیشگو، اثرات متغیرهای تبیینی و سایر اثرات ساختارمند (Structured effects) به صورت جمعی به شکل معادله (۷) وارد می شوند:

$$\eta_i = \alpha + \sum_{j=1}^{n\beta} \beta_j z_{ji} + \sum_{k=1}^{m\beta} f_k(u_{ki}) + \epsilon_i, \quad i=1, \dots, n \quad (7)$$

که در آن α پارامتر عرض از مبدا است، β_j ها اثرات ثابت متغیرهای تبیینی z_j را بیان می کنند و $f_k(\cdot)$ ها توابع ساختارمند نامعلوم متغیرهای تبیینی u_k هستند، که می توانند شامل اثرات تصادفی، زمانی و فضایی باشند. افزون بر این، مولفه خطای مدل است. اندیس $i=1, \dots, n$ مشاهدات فردی پاسخ و متغیرهای کمکی را نشان می دهد، n_β تعداد کل اثرات ثابت و n_f تعداد کل اثرات تصادفی و ساختارمند مدل است. مولفه های $f_k(\cdot)$ برای مدل بندی اثرات غیر خطی متغیرهای تبیینی یا وابستگی های مکانی و زمانی در داده ها استفاده می شوند. در یک مدل LGM فرض می شود بردار به صورت معادله (۸) تعریف شود.

$$x = (\alpha, \eta_1, \dots, \eta_n, \beta_1, \dots, \beta_{(n\beta)}, f_1, \dots, f_{(n_f)}) \quad (8)$$

به شرط بردار ابر پارامترهای θ_2 دارای توزیع گاوسی است، معادله (۹)، یعنی

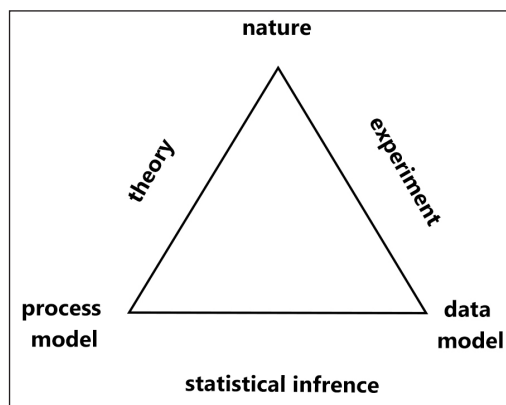
$$x|\theta_2 \sim \pi(x, \theta_2) = N(x; 0, Q^{-1}(\theta_2)) \propto |Q(\theta_2)|^{1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2}x^T Q(\theta_2)x\right\} \quad (9)$$

که در آن $N(x; \theta, Q^{-1}(\theta_2))$ نماد یک توزیع گاوسی چندمتغیره با بردار میانگین صفر و ماتریس دقت (معکوس ماتریس کوواریانس) $Q=Q(\theta_2)$ است. در عمل نوع خاصی از LGM ها با ویژگی استقلال شرطی (مارکوفی) برای میدان پنهان مورد علاقه است. در یک LGM از نوع مارکوفی، که به GMRF معروف است، ماتریس دقت Q یک ماتریس تنگ است. وجود این ویژگی مدل، برای روش استنباط بیزی تقریبی که در بخش بعدی معرفی می شود، به دلیل مزیت محاسباتی قابل توجهی که ارایه می کند، ضروری است (Rue et al., 2017).

پیچیدگی مدل مورد استفاده، از یک نسخه تقریبی کارا استفاده می شود که آن را معرفی می کنیم. ابتدا نیازمند معرفی چارچوب مدل بندی زمین آمار مبتنی بر مدل هستیم.

۲-۲- زمین آمار مبتنی بر مدل

به کار بردن اصول کلی مدل سازی و استنباط آماری در مسائل زمین آماری را می توان زمین آمار مبتنی بر مدل نامید (Diggle et al., 2003). بر اساس این اصول، باید ابتدا یک مدل ساده بر اساس انواع ساختارهای پنهان موجود در داده ها، فرمول بندی کنیم. سپس از روش های استنباط مبتنی بر احتمال استفاده کرده و به اهداف مطرح شده پاسخ دهیم. در حقیقت این رویکرد، زمانی که حجم نمونه کوچک است یا مدل سازی تغییرنگار به دلیل وجود مشاهدات پرت یا توزیع شدیداً چوله داده ها نادقیق می شود، بر پایه مدل های آمیخته خطی (Linear mixed models) و خطی تعمیم یافته (Generalized liner mixed models) گسترش می یابد (Bivand et al., 2013). نمایی از اصول حاکم بر زمین آمار مبتنی بر مدل در شکل ۱ نمایش داده شده است.



شکل ۱- اصول کلی زمین آمار مبتنی بر مدل (Diggle et al., 2003).

Figure 1. General principles of Model-based Geostatistics (Diggle et al., 2003).

یکی از محبوب ترین رده از مدل های احتمالی در زمین آمار مبتنی بر مدل، مدل های سلسله مراتبی بیزی (Bayesian hierarchical models) است که در ادامه به معرفی آن می پردازیم.

۲-۳- مدل های سلسله مراتبی بیزی

این رده از مدل های سلسله مراتبی از پارامترها یا متغیرها برای مدل بندی داده ها استفاده می شود. این مدل ها زمانی مطرح می شوند که تنوع اطلاعات پیشینی یا تغییرپذیری مشاهدات مستلزم معرفی چندین سطح از توزیع های پیشین باشد (Allenby et al., 2005). مدل های سلسله مراتبی بیزی از یک ساختار سلسله مراتبی پیروی می کنند که شامل سه مرحله است:

مرحله ۱) مدل مشاهده: این مرحله مدل حاکم بر داده ها را مشخص می کند. فرض کنید n مشاهده $y = (y_1, \dots, y_n)$ از متغیر پاسخ Y داریم، که به شرط معلوم بودن متغیر پنهان x و پارامترهای θ_1 مدل احتمال برای این مشاهدات به صورت معادله (۳) است:

$$y|x, \theta_1 \sim \pi(y|x, \theta_1) \quad (3)$$

بیشتر روش INLA می‌تواند به مقاله رو و همکاران (Rue et al., 2009) مراجعه کنید.

۲-۶- معادلات دینامیک جزئی تصادفی (SPDE)

یک SPDE می‌تواند برای نمایش یک میدان تصادفی گاوسی به صورت یک GMRF اعمال شود. فرایند گاوسی معمولاً برای مدل‌بندی مشاهدات در یک ناحیه چگال به کار می‌رود. قانون اول توپلر در جغرافی، پایه و اساس ورود تحلیل‌های آمار فضایی است که می‌گوید چیزهای نزدیک بیشتر از چیزهای دور به هم مرتبط هستند (Tobler, 1970). این ویژگی توسط میدان‌های تصادفی گاوسی حفظ می‌شود و انگیزه استفاده از GRF برای مدل‌بندی است (Lindgren and Rue, 2011). استنباط و تخمین با یک مدل فضایی نیازمند وارون کردن و تجزیه ماتریس کوواریانس Σ است. ماتریس کوواریانس یک GRF معمولاً چگال است و هزینه محاسباتی برای عملیات ماتریسی روی ماتریس‌های چگال از مرتبه $O(n^3)$ است که در آن n بعد ماتریس است. اما اگر ماتریس دقت Q دارای ساختار مارکوفی (یا همان استقلال شرطی) باشد، که برای GMRFs معمول است، هزینه محاسباتی عملیات ماتریسی را می‌توان به $O(n^{\frac{3}{2}})$ کاهش داد. به همین دلیل، کارایی محاسباتی مدل‌بندی مبتنی بر GMRF ها نسبت به GRF ها می‌تواند بسیار بیشتر باشد و به ما امکان می‌دهد استنباط و تخمین سریع تری انجام دهیم.

ماتریس کوواریانس یک GRF ساختار وابستگی آن را مشخص می‌کند و از یک تابع کوواریانس ساخته شده است. توابع کوواریانس رایج مدل‌های نمایی و مترن هستند (Gelfand et al., 2010). خانواده مترن یک کلاس بسیار انعطاف‌پذیر از توابع کوواریانس را نشان می‌دهد که به طور طبیعی در بسیاری از زمینه‌های علمی ظاهر می‌شود (Guttorp and Gneiting, 2006). برای مکان‌های $s_i, s_j \in R^2$ تابع کوواریانس مترن به صورت

$$Cov(Z(s_i), Z(s_j)) = \frac{\sigma^2}{2^{\nu-1} \Gamma(\nu)} (k \|s_i - s_j\|)^{\nu} K_{\nu}(k \|s_i - s_j\|) \quad (13)$$

است که در آن $\|s_i - s_j\|$ فاصله اقلیدسی بین s_i و s_j است، σ^2 نشان دهنده واریانس حاشیه‌ای میدان فضایی و $k > 0$ پارامتر مدل است که سرعت کاهش همبستگی با فاصله را کنترل می‌کند و $K_{\nu}(0)$ تابع بسل اصلاح شده نوع دوم از مرتبه $\nu > 0$ است (Moraga, 2020). درجه همواری تابع را کنترل می‌کند که اغلب مقدار ثابتی دارد. شکل ۲ برای $\nu = (1, 1.5, 2)$ مقدار تابع همبستگی مترن را نشان می‌دهد.

برای مجموعه‌های چگال مانند داده‌های زمین‌آمار، به کمک رهیافت SPDE می‌توان مجموعه چگال را به کمک مثلث‌سازی به یک مجموعه با ویژگی مارکوفی تبدیل کرد به طوری که اجرای روش INLA برای داده‌ها در مجموعه جدید تقریبی، کارا تر باشد (برموده، ۱۴۰۰). راه‌حل، با استفاده از روش عناصر متناهی (Finite element method) به صورت عددی و نمایش توابع پایه تعریف‌شده بر روی یک شبکه مثلثی بیان می‌شود. در واقع می‌توان معادله (۱۴) را نوشت:

$$x(u) = \sum_{k=1}^m \phi_k(u) \omega_k \quad (14)$$

که در آن $x(u)$ یک GRF با ماتریس کوواریانس مترن است و ϕ_k برای $k=1, \dots, m$ توابع پایه و ω_k ها وزن‌های با توزیع گاوسی و میانگین صفر هستند. تعداد گره‌های شبکه، m پیچیدگی محاسباتی انجام استنباط و تخمین‌ها بر روی GMRF تقریبی ساخته‌شده توسط SPDE را تعیین می‌کند. همچنین برای کنترل اثرات مرزی باید یک لایه بیرونی برای شبکه در نظر گرفت (شکل ۳). لایه‌های شبکه باید به گونه‌ای تعریف شوند که به اندازه کافی کوتاه باشند تا تنوع فضایی در منطقه مورد مطالعه را نشان دهند. شبکه باید خارج از ناحیه هدف نیز گسترش یابد، به طوری که به اندازه کافی گسترده باشد تا بتواند اثرات مرزی را که از حل عددی SPDE رخ می‌دهد، کنترل کند (Lindgren, 2018; Lindgren et al., 2021).

مشاهدات متغیر پاسخ به شرط بردار اثرات پنهان و پارامترهای مدل، مستقل فرض می‌شوند. بنابراین، تابع درست‌نمایی مدل احتمالی مشاهدات در اولین مرحله از ساختار سلسله‌مراتبی LGM ها به صورت معادله (۱۰) قابل نوشتن است:

$$\pi(y|x, \theta_1) \sim \prod_{i=1}^n \pi(y_i | \eta_i, \theta_1) \quad (10)$$

در اینجا η_i پیشگوی جمعی مدل است (که بخشی از بردار اثرات پنهان x است) و هر مشاهده y_i فقط به یک عنصر در میدان گاوسی پنهان، پیشگوی خطی η_i و پارامترهای θ_1 بستگی دارد. برای نهایی کردن ساختار سلسله‌مراتبی LGM ها، کفایت پیشین‌های مناسبی به پارامترهای مدل اختصاص داده شود. با تجمع همه مراحل، توزیع پسین توام همه اجزای نامعلوم $z = (x, \theta)$ در مدل به صورت معادله (۱۱) نوشته می‌شود (Berild, 2020):

$$\pi(z|y) \propto \pi(\theta) \pi(x|\theta) \prod_{i=1}^n \pi(y_i | x_i, \theta_i) \propto \pi(\theta) Q(\theta)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} x^T Q(\theta) x + \sum_{i=1}^n \ln \pi(y_i | \eta_i, \theta) \right\} \quad (11)$$

توزیع پسین $\pi(z|y)$ اغلب ابعاد بسیار بالایی دارد، به طوری که نتایج تحلیلی در آن قابل دستیابی نیست. روش INLA یکی از روش‌هایی است که برای انجام استنباط کارا در رده مدل‌های LGM توسعه داده شده است و در بخش بعدی معرفی خواهد شد.

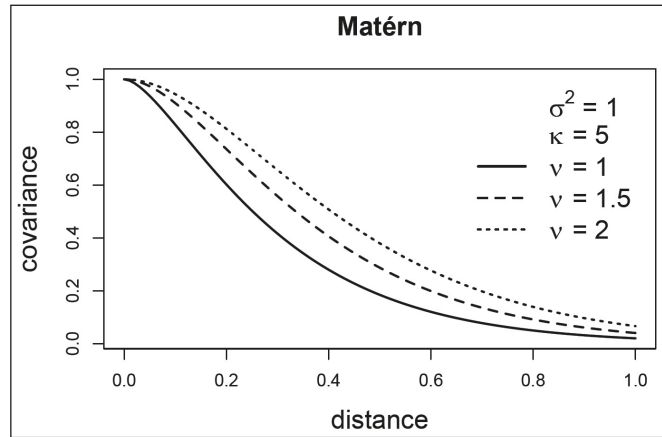
۲-۵- تقریب لاپلاس آشیانه‌ای جمع بسته (INLA)

معمولاً در رده LGMs، به دلیل ناگوسی بودن توزیع پسین مدل و وجود تعداد متغیرهای پنهان بالا، کمیت‌های پسینی مورد علاقه برای تحلیل داده‌ها و تخمین فضایی، شکل بسته و تحلیلی ندارند. در این موارد از روش‌های تقریب توزیع پسین مدل و به ویژه الگوریتم‌های مبتنی بر نمونه‌گیری MCMC استفاده می‌شود. اما استفاده از الگوریتم‌های MCMC، در رده LGMs، معمولاً با مشکلات همگرایی کند و طولانی بودن زمان محاسبات مواجه می‌شود. برای حل این مشکلات، روش INLA توسط رو و همکاران (Rue et al., 2009) معرفی شد. این روش بر تقریب‌های لاپلاس (Tierney et al., 1989) برای محاسبه توزیع‌های پسین کناری مولفه‌های مختلف مدل متکی است. به‌طور دقیق‌تر این روش برای هر توزیع پسین کناری از چند تبدیل لاپلاس به‌طور مکرر استفاده می‌کند تا تقریبی به شکل $\tilde{\pi}(z_i|y)$ فراهم کند (معادله ۱۲).

$$\pi(z_i|y), \quad i=1, \dots, \dim(Z) \quad (12)$$

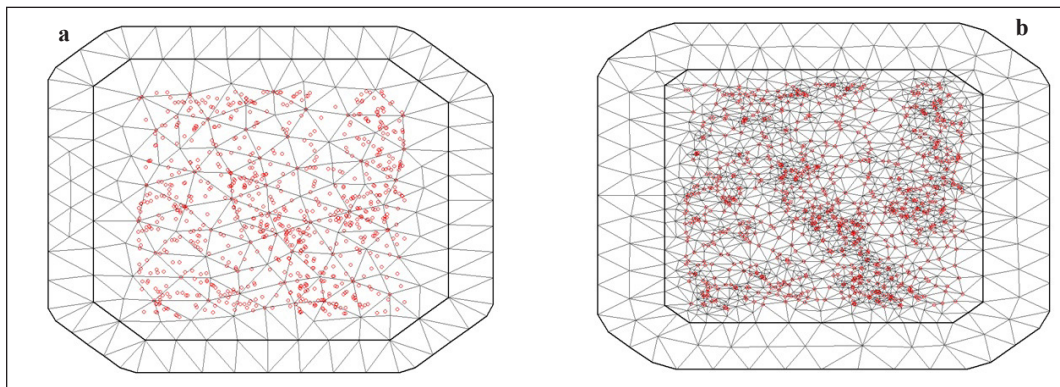
رو و همکاران (Rue et al., 2009) برای این کار سه الگوریتم متفاوت ارائه کردند که جزییات هر کدام در مقاله آن‌ها آورده شده است. از مزایای این روش، سهولت ایجاد و اصلاح مدل‌های پیچیده فضایی بدون نیاز به نوشتن کدهای پیچیده و سرعت استنباط حتی برای مسائل فضایی با هزاران مشاهده است به گونه‌ای که در مدت زمان بسیار کوتاه‌تر، تقریبی قابل قبول از توزیع پسین را جایگزین شبیه‌سازی‌های سنگین MCMC می‌کند و از مشکلات همگرایی روش‌های MCMC نیز برحذر است. از طرف دیگر، از چالش‌های اصلی روش INLA، سختی مدل‌بندی ساختار وابستگی فضایی داده‌های حجیم (Bakka et al., 2018) و (۲) توسعه نیافتن منسجم چارچوب مدل‌بندی داده‌های فضایی سه‌بعدی هستند.

روش INLA مداوم در حال بهبود است تا سودمندی و کاربرد آن برای پژوهشگران افزایش یابد. یکی از پیشرفت‌های اخیر، اجرای طرح‌های موازی‌سازی جدید است، که به افزایش قابل توجه سرعت برازش مدل‌های بزرگتر انجامیده است (Gaedke-Merzhäuser et al., 2023). کارایی روش INLA به پیاده‌سازی دقیق الگوریتم‌های مختلف در داخل آن متکی است. این پیاده‌سازی در بسته نرم‌افزاری R-INLA در محیط نرم‌افزار R موجود است که به ما امکان می‌دهد مدل‌های پیچیده را در عرض چند ثانیه جاسازی کنیم. البته همان‌طور که بیان شد، تعمیم یکپارچه روش برای انواع داده‌های سه‌بعدی، چالش جدی است که استفاده از آن را برای تحلیل این گونه داده‌ها، مشابه داده‌های این مقاله، محدود می‌کند. در این مقاله، سعی کرده‌ایم این محدودیت را برای داده‌های معدنی مرتفع کنیم. برای دیدن جزییات



شکل ۲- توابع کوواریانس مربوط به مدل ماترن (Moraga, 2020).

Figure 2. Covariance functions corresponding to Matérn model (Moraga, 2020).



شکل ۳- دو نمونه مثلث بندی دوبعدی درشت (a) و ظریف (b) با لایه بیرونی (کران محدود).

Figure 3. Two examples of 2D triangulation: coarse (a) and fine (b) with the outer layer (limited boundary).

تعیین پارامترهای میدان مترن (Matérn field) در اجرای روش SPDE نیز شبیه حالت دوبعدی و با استفاده از توابع استاندارد موجود در روش یاد شده در بسته R-INLA قابل اجرا است (فخری، ۱۳۹۹).

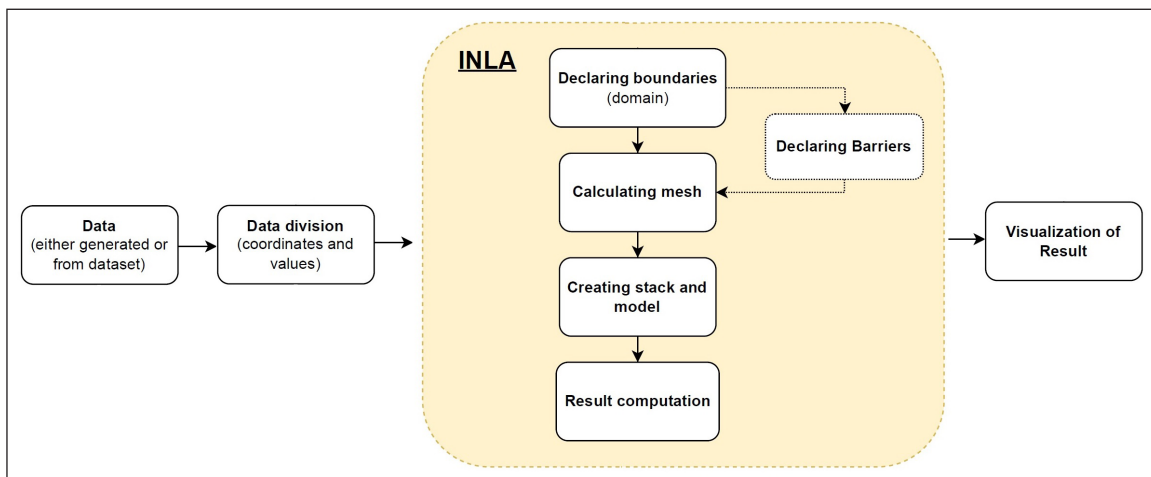
۳- داده ها و اطلاعات

به لطف پیشرفت های فنی جدید، اکنون می توان داده ها و مدل های نزدیک به رفتار محیط معدنی را به صورت انبوه، شبیه سازی و تولید کرد و برای اهداف بررسی تحلیل مدل های پیش بینی مورد استفاده قرار داد. داده های مصنوعی در سه بعد که هر بعد آن ۲۰ بلوک کشیدگی دارد ساخته شد. در حقیقت مدل ساخته شده در حکم محدوده معدنی و مقادیر متغیر پاسخ در هر بلوک جایگزین عیار ماده معدنی در آن نقطه از معدن طبق رابطه (۱۵) شبیه سازی شده است.

$$Resp = \log[x^2 + y^2 + z^2 + 10(x^2 + y^2)(y^2 + z^2)] \quad (15)$$

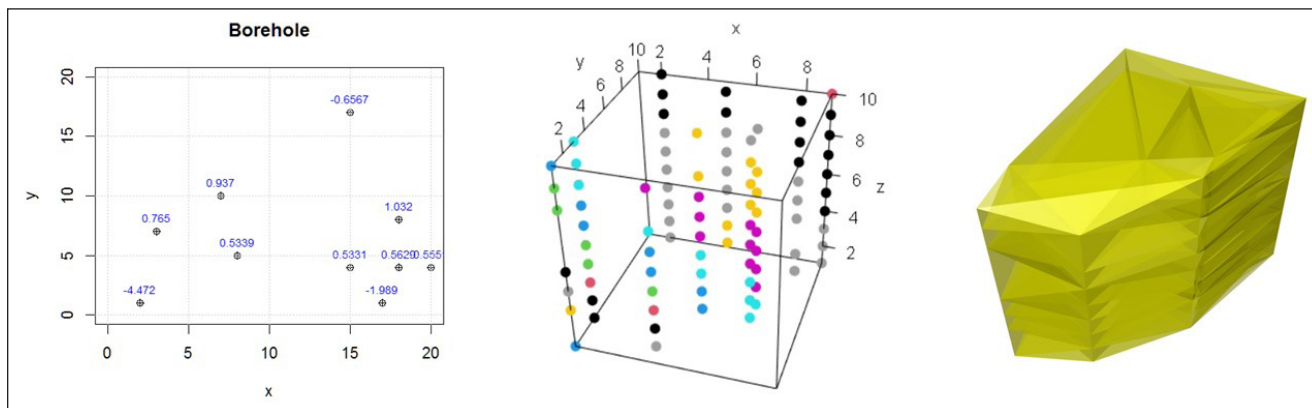
همان گونه که اشاره شد، برای اجرای روش SPDE ابتدا باید ناحیه تحت مطالعه را مثلث بندی کرد. در رابطه (۱۳)، یک GRF است که در مثلث بندی ناحیه D تعریف شده است، به طوری که m تعداد رئوس در مثلث است. توابع پایه ϕ_k به گونه ای انتخاب می شوند که در هر مثلث به صورت تکه ای خطی و دارای تکیه گاه محلی باشند. این به آن معنی است که در راس k ، $\phi_k = 1$ و در سایر رئوس صفر است. این ویژگی تضمین می کند که تقریب دارای ویژگی های مارکوفی است و یک GMRF را تشکیل می دهد (Mathisen, 2020). نمایشی از الگوریتم روش INLA+SPDE در شکل ۴ قابل مشاهده است.

به منظور امکان استفاده از روش SPDE در تحلیل داده های زمین آماری سه بعدی معدنی، برای گسسته سازی ناحیه تحت مطالعه از مش بندی چهاروجهی (Tetrahedral mesh) به جای مثلث استفاده کردیم (شکل ۵- سمت راست). نکته مثبت قابل استفاده در این تعمیم آن است که ماتریس های ساختاری لازم برای روش عناصر منتهای مشابه حالت دوبعدی قابل محاسبه هستند.



شکل ۴- نمایش نموداری الگوریتم INLA+SPDE (Dudek and Baranowski, 2023).

Figure 4. Diagrammatic representation of INLA+SPDE Algorithm (Dudek and Baranowski, 2023).



شکل ۵- یک نمونه از مشبکه هرمی سه بعدی (شکل سمت راست) بر اساس داده‌های اندازه‌گیری شده در عمق‌های مختلف گمانه‌ها.

Figure 5. An example of a 3D tetrahedral mesh (right Figure) based on data measured at different depths of boreholes.

میانگین خطای مطلق (Mean absolute error; MAE) که تفاوت بین مقدار واقعی و مقدار تخمینی را نشان می‌دهد و ریشه میانگین توان‌های دوم خطا (Root mean square error; RMSE) که به اندازه و جهت خطاها حساس است و خطاهای بزرگ را بیشتر وزن می‌دهد را برای هر موقعیت از ناحیه سه بعدی در هر دو روش محاسبه می‌کنیم. این دو معیار به صورت معادله (۱۶) و (۱۷) محاسبه می‌شوند که در آن‌ها o_i و p_i به ترتیب مقادیر واقعی و تخمین زده شده در موقعیت i ام هستند.

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |p_i - o_i| \quad (16)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (p_i - o_i)^2} \quad (17)$$

۴-۲- نتایج تخمین

برای اعتبار سنجی نتایج تخمین، هر الگوریتم چندین بار اجرا (Cross Validation) می‌شود، که در هر بار اجرا بخشی از داده‌ها به عنوان داده مشاهده شده جهت آموزش و بخش دیگر به عنوان داده تست جهت بررسی نتایج تخمین استفاده می‌شود. برای بررسی دقیق‌تر، کل این روند ۱۰۰ بار تکرار می‌شود. در انتها داده‌ها تخمین زده شده را در یک آرایه ذخیره کرده و در مرحله بعد نتایج حاصل از تخمین با مقادیر واقعی (اولیه) مقایسه می‌شود و شاخص‌های ارزیابی RMSE، MAE را استخراج می‌کنیم.

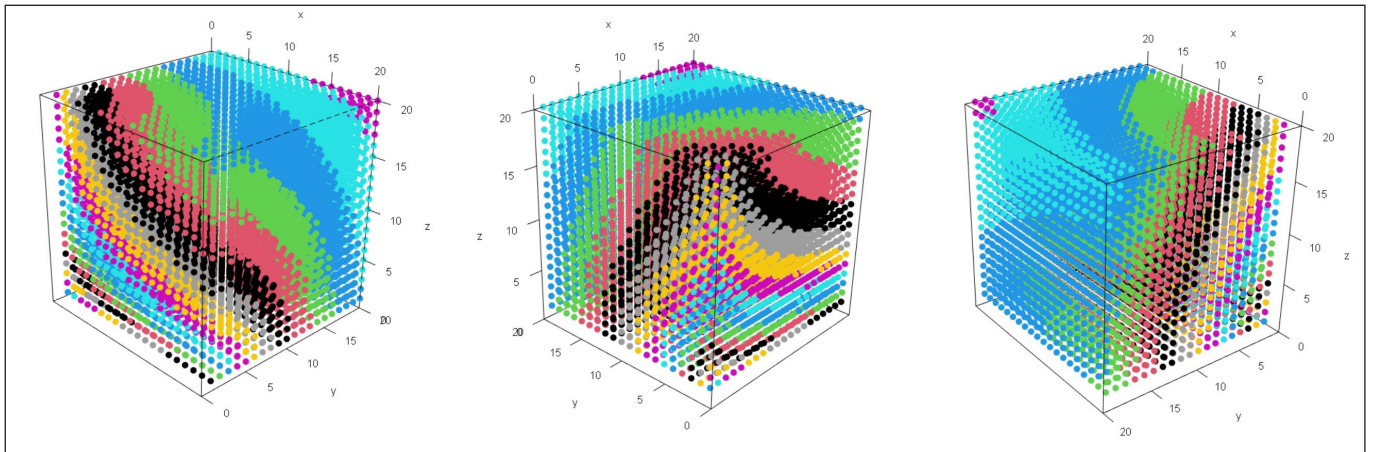
نمودار پراکنش داده‌های شبیه‌سازی شده در سه نمای مختلف نیز در شکل ۶ نمایش داده شده است و ویژگی‌های آماری مدل شبیه‌سازی شده در جدول ۱ گزارش شده‌اند.

۴-۳- بحث

۴-۱- ارزیابی مدل

به منظور ارزیابی روش ترکیبی که در این مقاله مطرح شده است، پس از تولید داده‌های مصنوعی به صورت تصادفی هشت موقعیت به عنوان نقاط حفاری مشخص می‌شود. سپس از آنجا که در نمونه‌گیری واقعی درصدی از مغزه خارج شده قابل استفاده نیست، ضریب ریکاوری برای مغزه‌ها ۸۰ درصد در نظر گرفته شده و به صورت تصادفی ۲۰ درصد از داده‌ها حذف می‌شوند (شکل ۷).

این داده‌ها به عنوان مجموعه داده مشاهده شده در نظر گرفته شده، سپس با توجه به وجود روند در داده‌ها، از روش کریجینگ عام (Universal Kriging) (Cressie and Helterbrand, 1994) برای ساخت مدل و تخمین مقادیر در کل ناحیه سه بعدی و مقایسه آن با روش پیشنهادی استفاده می‌شود. از سوی دیگر به کمک روش (INLA+SPDE) با همان داده‌های مشاهده شده، مدل واقعی در ناحیه تحت مطالعه تخمین زده می‌شود. در ادامه، برای ارزیابی عملکرد تخمین‌گرها، دو معیار



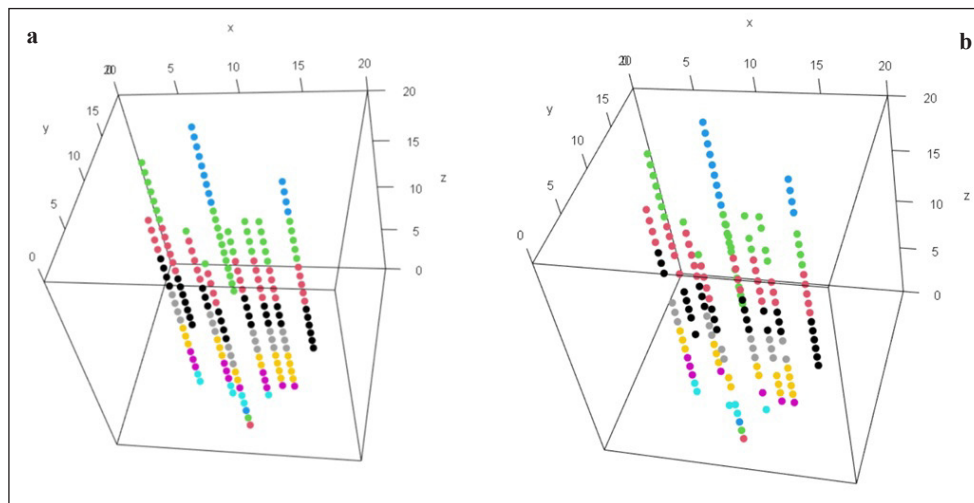
شکل ۶- تصویر پراکنش سه‌بعدی داده‌های شبیه‌سازی شده از سه نمای مختلف.

Figure 6. 3D scatter plot of simulated data from three different views.

جدول ۱- خلاصه‌های عددی عیار ماده معدنی شبیه‌سازی شده

Table 1. Numerical summaries of simulated ore grade

Min	Max	Means	Median	Mode	Sd	Skewness	Kurtosis	CoV
4.41	22.35	18.39	18.93	4.41	2.41	-1.25	1.96	13.13



شکل ۷- گمانه‌ها به صورت خام (a) و داده‌ها پس از اعمال ضریب ریکاوری (b).

Figure 7. The raw boreholes (a) and the data after applying the recovery factor (b).

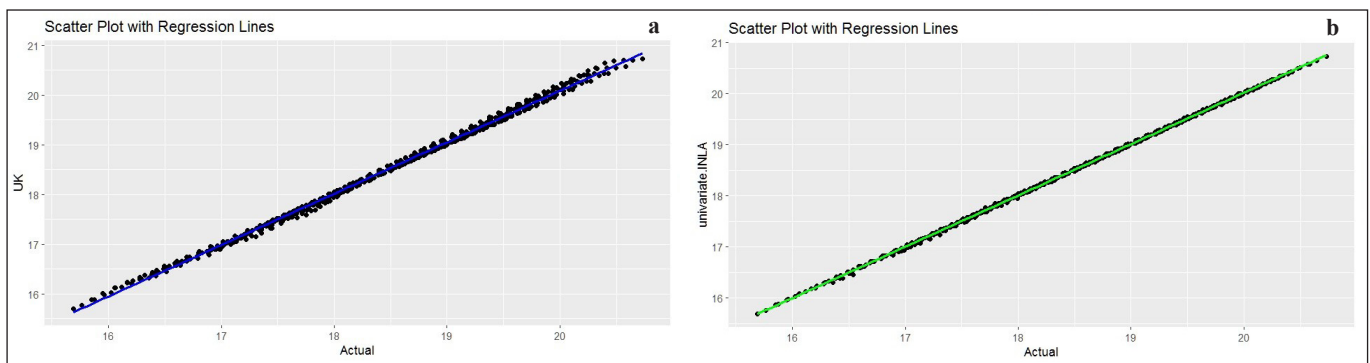
و محور دیگر مقادیر معلوم اولیه را در نقطه‌ای با مختصات معلوم نشان می‌دهد (شکل ۸). نیم‌ساز ربع اول این دستگاه مختصات، حداقل پراکندگی (اختلاف) بین مقادیر اندازه‌گیری شده و تخمین زده شده را نمایش می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، نمودار نتایج روش پیشنهادی دارای پراکندگی کمتری بین مقادیر اندازه‌گیری و تخمین است به این معنی که مقادیر تخمین شده تطبیق بیشتری با مقادیر اصلی دارند.

همان‌گونه که در جدول ۲ مشاهده می‌شود، می‌توان نتیجه گرفت نتایج در روش INLA+SPDE نسبت به روش کریجینگ عام، میانگین مطلق خطای تخمین کمتری دارند همچنین پراکندگی خطا در روش INLA+SPDE کمتر است. برای نمایش نتایج حاصل از تخمین با مقادیر معلوم اولیه (واقعی)، می‌توان یک دستگاه مختصات رسم کرد. در این دستگاه مختصات، یکی از محورها مقادیر تخمینی

جدول ۲- نتایج ارزیابی دو روش تخمین.

Table 2. Predictive assessment of estimation methods.

Method	MAE	RMSE
Universal Kriging	0.10641	0.15461
INLA+SPDE	0.08850	0.14695



شکل ۸- مقادیر واقعی در مقابل مقادیر (a) تخمین به روش کریگینگ عام و (b) به روش INLA+SPDE.

Figure 8. Actual values versus predicted values by the method a) universal kriging and b) INLA+SPDE .

۵- نتیجه گیری

شایان یادآوری است که در صورت داشتن اطلاعات سایر مواد معدنی، می‌توان از آن‌ها به‌عنوان متغیرهای تبیینی در بهبود تخمین‌ها با روش زمین‌آمار مبتنی بر مدل استفاده کرد. حتی اگر اثر این متغیرهای تبیینی غیرخطی باشد، امکان مدل‌بندی متعطف آن‌ها در چارچوب رده LGMs و استفاده از روش INLA+SPDE وجود دارد.

با بررسی نتایج به‌دست آمده، می‌توان نتیجه گرفت که روش INLA+SPDE می‌تواند یک رویکرد جایگزین کارآتر برای روش کریگینگ در علوم زمین باشد. از جمله مزایای این روش، سهولت ایجاد و اصلاح مدل‌های پیچیده بدون نیاز به نوشتن کدهای پیچیده، سرعت استنباط حتی برای داده‌های حجیم، و امکان تعبیه کردن اطلاعات پیشین درباره مساله مورد هدف در مدل است.

کتابنگاری

- برموده، ل.، ۱۴۰۰، تحلیل بیزی داده‌های رسته‌ای با ساختارهای فضایی و فضایی-زمانی، رساله دکتری، گروه آمار، دانشگاه صنعتی شاهرود، ۱۰۰ص
- چاوندر، ق.، ۱۳۹۵، روش‌های محاسباتی بیزی تقریبی، پایان‌نامه کارشناسی ارشد، گروه آمار، دانشگاه سمنان، ۱۰۴ص
- فخری، ف.، ۱۳۹۹، مدل‌بندی سه بعدی ژئومکانیکی بیزی با استفاده از مدل‌های زمین‌آمار مطالعه موردی یکی از مخازن نفتی ایران، پایان‌نامه کارشناسی ارشد، گروه آمار، دانشگاه صنعتی شاهرود، ۱۰۶ص
- وفایی، س.، ۱۳۹۵، برازش مدل فرایند نقطه‌ای با استفاده از تقریب لاپلاس آشیانه‌ای جمع بسته و کاربرد آن در جنگلداری، پایان‌نامه کارشناسی ارشد، گروه آمار، دانشگاه رازی، ۱۰۰ص

References

- Allenby, G., Rossi, P., and McCulloch, R., 2005. Hierarchical Bayes Models: A Practitioners Guide, SSRN Electronic Journal, doi:10.2139/ssrn.655541.
- Bakka, H., Rue, H., Fuglstad, G-A., Riebler, A., Bolin, D., Illian, J., Krainski, E., Simpson, D., and Lindgren, F., 2018. Spatial modeling with R-INLA: A review, WIREs Comput Stat, 10:e1443, doi:10.1002/wics.1443.
- Beguín, J., Martino, S., Rue, H., and Cumming, S.G., 2012. Hierarchical analysis of spatially autocorrelated ecological data using integrated nested Laplace approximation, Methods in Ecology and Evolution, 921-929, doi:10.1111/j.2041-210X.2012.00211.x.
- Berild, M., 2020. Integrated Nested Laplace Approximations within Monte Carlo Methods, Master's thesis in Applied Physics and Mathematics, Norwegian University of Science and Technology, 82p.
- Barmoudeh, L., 2021. Bayesian analysis of categorical data with spatial and spatio-temporal structures. ph.D. Thesis, Statistics group, Shahrood University of Technology, 100 p. (In Persian).

- Bivand, R., Pebesma, E., and Rubio, V.G., 2013. *Applied Spatial Data Analysis with R*, Springer, Berlin, ISBN: 0387781706, doi: 10.1007/978-1-4614-7618-4.
- Brown, W., Gyenis, Z., and Rédei, M., 2019. The Modal Logic of Bayesian Belief Revision, *Journal of Philosophical Logic* 48 (5):809-824, doi:10.1007/s10992-018-9495-9.
- Chavandar, Gh., 2016. *Approximate Bayesian calculation methods*, Master. Thesis, Statistics group, Semnan University, 104p. (In Persian).
- Cressie, N., and Helderbrand, J.D., 1994. Universal cokriging under intrinsic coregionalization, *Mathematical Geology*, Volume 26, pages 205–226.
- Cressie, N., and Wikle, C.K., 2011. *Statistics for Spatio-Temporal Data*, CourseSmart Series. Wiley. ISBN: 9780471692744. URL: <https://books.google.no/>.
- Diggle, P.J., Ribeiro, P.J., and Christensen, O.F., 2003. An Introduction to Model-based Geostatistics. In: Møller, J. (eds) *Spatial Statistics and Computational Methods*. Lecture Notes in Statistics, vol 173. doi: 10.1007/978-0-387-21811-3_2.
- Dudek, A., and Baranowski, J., 2023. Spatial Modeling of Air Pollution Using Data Fusion, *Electronics*, 12(15):3353. doi:10.3390/electronics12153353.
- Fakhri, F., 2020. *Three-dimensional Bayesian geomechanical modeling using geostatistical models, a case study of one of Iran's oil reservoirs.*, Master. Thesis, Statistics group, Shahrood University of Technology, 106 p. (In Persian).
- Gaedke-Merzhäuser, L., Niekerk, J., Schenk, O., and Rue, H., 2023. Parallelized integrated nested Laplace approximations for fast Bayesian inference, *Statistics and Computing*, 33(1): 25, doi: 10.1007/s11222-022-10192-1.
- Gelfand, A.E., Diggle, P.J., Fuentes, M., and Guttorp, P., 2010. *Handbook of spatial statistics*. Chapman & Hall/CRC Handbooks of Modern Statistical Methods. CRC Press, Boca Raton, FL, pp. xii+607. ISBN: 978-1-4200-7287-7. doi: 10.1201/9781420072884.
- Guttorp, P., and Gneiting, T., 2006. Studies in the history of probability and statistics xlix on the matern correlation family. *Biometrika*, 93(4):989–995.
- Krainski, E., Gómez-Rubio, V., Bakka, H., Lenzi, A., Castro-Camilo, D., Simpson, D., Lindgren, F., and Rue, H., 2019. *Advanced Spatial Modeling with Stochastic Partial Differential Equations*, Taylor & Francis, New York, 298p.
- Li, J., and Heap, A.D., 2011. A review of comparative studies of spatial interpolation methods in environmental sciences: Performance and impact factors, *Ecological Informatics*, Volume 6, Issues 3–4, Pages 228-241.
- Lindgren, F., 2018. Spatially Varying Mesh Quality, <https://www.maths.ed.ac.uk/~flindgre/posts/2018-07-22-spatially-varying-mesh-quality>.
- Lindgren, F., Sidén, P., Bolin, D., Andersson-Eklund, L., and Villani, M., 2021. Spatial 3D Matérn priors for fast whole-brain fMRI analysis, *Bayesian analysis*, 28p.
- Lindgren, F., and Rue, H., 2011. An explicit link between gaussian fields and gaussian Markov random fields: the stochastic partial differential equation approach", *Journal of the Royal Statistical Society* Volume 73, Issue 4, Pages 423-498, doi: 10.1111/j.1467-9868.2011.00777.x.
- Mathisen, A.S., 2020. *Inference on extreme hourly precipitation in Norway using INLA*, Master's thesis in Mathematical Sciences, Norwegian University of Science and Technology, 64p.
- Moraga, P., 2020. *Geospatial Health Data: Modeling and Visualization with R-INLA and Shiny*. Chapman & Hall/CRC, Biostatistics Series.
- Robert, C.P., and Casella, G., 2004. *Monte Carlo Statistical Methods*, Springer New York, NY, 649p. doi:10.1007/978-1-4757-4145-2.
- Rue, H., Martino, S., and Chopin, N., 2009. Approximate Bayesian inference for latent Gaussian models by using integrated nested Laplace approximations. *Journal of the royal statistical society: Series b (statistical methodology)*, 71(2):319–392.
- Rue, H., Riebler, A., Sorbye, S. H., Illian, J. B., Simpson, D. P., and Lindgren, F. K., 2017. Bayesian computing with INLA: a review, *Annual Review of Statistics and Its Application*, 4: 395–421.
- Tierney, L., Kass, R.E., and Kadane, J., 1989. Fully Exponential Laplace Approximations to Expectations and Variances of Nonpositive Functions. *Journal of the American Statistical Association*, 84, 710-716.
- Tobler, W.R., 1970. A computer movie simulating urban growth in the detroit region. *Economic Geography*, Volume 46, Pages 234-240, doi:10.2307/143141.
- Vafaei, S., 2016. *Fitting spatial point process models using integrated nested Laplace approximation (INLA) and its application in forestry (in Persian)*, Master's thesis, Department of Statistics, Razi University, 100 pages.
- Van Niekerk, J., and Rue, H., 2021. Correcting the Laplace Method with Variational Bayes., arXiv preprint arXiv:2111.12945.
- Wang, X., Ryan, Y., and Faraway, J., 2018. *Bayesian Regression Modeling with INLA*, Chapman & Hall, 324 P.