应用地质统计学处理原生晕数据 及其与趋势面分析结果对比

杨海明 池三川

(中国地质大学北京研究生院)

本文结合实际资料,将趋势面分析与地质统计学从理论及其实践结果进行了对比,证明地质统计学比趋势面分析有许多优点,指出在处理化探数据时应大量采用地质统计学方法。

关键词: 地质统计学; 趋势面分析; 原生晕; 数据处理

研究化探数据空间分布规律的常用统计学方法是趋势面分析,但使用这一方法有一些弊端。理论和实践可以证明,地质统计学方法比趋势面分析有许多优点。在处理某锡多金属矿田原生晕数据时,笔者采用了地质统计学,并与趋势面分析结果作了对比,认为地质统计学较趋势面分析优越。

趋势面分析的某些不足

设 Z 为平面区域内 R 点 (x, y) 处化探数据的观测值,各种分析方法的目的是对 R 内未知点或未知块段的 Z 值进行估计,以了解 Z 在 R 内的变化规律。

趋势面分析的思路是:根据已知点上的 Z 值,为满足残差平方和最小,用最小二乘法拟合一个光滑曲面,得出一个以坐标 x, y 为自变量, Z 值为因变量的函数,并用其计算已知点 (x_0, y_0) 上的 Z 值作为该点的趋势值 $\hat{Z}$,用该点的观测值与 $\hat{Z}$ 之差代表剩余值,并作出相应的趋势值图和剩余值图,从而达到分析数据空间分布规律的目的。这种思路方法至少存在以下几个缺点:

1. 由于地质作用的复杂性,特别是多期次成矿作用的叠加,化探数据的分布往往是极其复杂的。如果区内断裂、岩浆作用复杂,化探数据的突变性现象很多,用多项式

拟合这种复杂的图景势必会有“削足适履”之嫌。所以用多项式就能描述这些复杂现象的观点依据不足。

2. 即使这样的假设是成立的,多项式模型次数的选择有很大的人为性。固然多项式能拟合逼近许多形式的函数,但其次数的确定是很复杂的。人们往往不知其次数,而作出几种不同次数的结果,并将它们与实际情况对比而选择较好的结果。这种选择只能算是“凑合”地质现象的过程,带有较大的主观性。

3. 王仁铎等(1984)指出,从数学上讲,趋势面分析的某些概念不够明确,对“趋势值” Z 可以有三种理解:①点 (x, y) 处 Z 的数学期望;②点 (x, y) 处 Z 的估计值 $\hat{Z}(x, y)$;③ $Z(x, y)$ 在 (x, y) 点的滑动平均值。

3. 在解决实际问题时,趋势面只能估计趋势,对未知点也只能估计趋势,而不能得到未知点 (x, y) 处的真实值的估计值,也难以估计以某点 (x_0, y_0) 为中心的块段 V 上 Z 的平均值。

4. 对趋势面分析结果的优劣,缺乏较好的衡量标准。拟合度是常用的衡量参数,一般随多项式次数的增高而增长,但若次数太高,又在一定程度上失去了解大范围内数据变化规律的目的。

地质统计学的基本原理

地质统计学是为了解决矿床从普查勘探、矿山设计到整个开采过程中各种储量计算而发展起来的,因而多应用于储量计算。理论和实践证明,它用于计算储量时,有许多优点。显然我们可以利用这些优点来处理化探数据。考虑到矿田地质构造的复杂性及成矿作用的多期性,化探数据可能存在漂移,此次应用中采用的是泛克立格法。

1. 半变异函数 克立格法是一种在考虑了信息样品形状、大小及其与待估块段之间的空间位置关系等几何特征后,为了满足线性、无偏条件并且使估计方差达到最小,对每一个已知样品给予不同权系数,从而进行加权估计未知点或块段的方法。与传统的估计方法相比,它考虑了信息样品彼此间和样品与待估块段之间的数据构形等几何因素,同时也考虑数据之间存在的空间相关性及其变化特征。数据的空间相关性及其变化特征是通过结构函数(协方差函数或变差函数)来描述的。

变差函数的定义为

$$\gamma(x, h) = E[Z(x) - Z(x+h)]^2 / 2$$

其中 x 表示空间的某一点, h 为空间的一矢量。

在满足平稳假设或本征假设时,可以用实验变差函数

$$\gamma^*(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} [Z(x_i) - Z(x_i+h)]^2$$

来代替滞后为 h 的两点间的变差函数。从实际计算变差函数的公式看,它实际上是数据在空间上变化的性状。

在不同方向上,我们可作出变差函数图。克立格法借助变差函数,合理地对不同方向上分布的信息值给予权系数。

2. 克立格法 这里仅讨论文中所采用的泛克立格法。

泛克立格法假设,非平稳区域化变量可

分解成漂移 $m(x)$ 和剩余 $R(x)$,即满足

$$Z(x) = m(x) + R(x)$$

$m(x)$ 为 $Z(x)$ 在 x 处的期望,剩余 $R(x)$ 的数学期望为零,假设

$$\begin{cases} E[Z(x)] = m(x) \\ E[Z(x)Z(y)] = m(x)m(y) + C(x, y) \end{cases}$$

$C(x, y)$ 为协方差函数,进一步假设 $C(x, y)$ 是已知的,且点 x 处 Z 值的数学期望 $m(x)$ 可表示为

$$m(x) = \sum_{i=0}^k a_i f_i(x)$$

现用 n 个已知点 $x_i (i=1, 2, \dots, n)$ 上的 Z_i 来估计包括信息点或块段在内的任一以 x 为中心的域上的 Z ,用线性估计量

$$Z^*(x) = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z_i$$

泛克立格法对 λ_i 有如下限制:

①无偏条件:

$$E[Z^*] = E[Z(x)] = m(x)$$

由此可推得 $\sum_{\alpha=1}^n \lambda_{\alpha} f_l(x_{\alpha}) = f_l(x), l=0, 1, \dots, k$

称这 $k+1$ 个方程为无偏方程组;

②最优估计:即保证估计方差 σ_E^2 最小, σ_E^2 的定义为: $\sigma_E^2 = E[Z^* - Z(x)]^2$

使用拉格朗日乘数法可得,要使 σ_E^2 最小,必须满足

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i C(x_{\alpha}, x_i) - \sum_{l=0}^k \mu_l f_l(x_{\alpha}) = C(x_{\alpha}, x)$$

$$\alpha = 1, 2, \dots, k$$

结合无偏方程组,称为泛克立格方程组。

本文中要估计的是以 x 为中心的块段 $V(x)$ 上 Z 值的平均值,只需将上述方程组稍作变换成如下形式

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n \lambda_i \bar{C}(v_{\alpha}, v_i) - \sum_{l=0}^k \mu_l b^l v_{\alpha} \\ \sum_{\alpha=1}^n \lambda_{\alpha} \bar{f}_l(x_{\alpha}) \end{cases}$$

$$\begin{cases} = \bar{C}(v_a, V) & \alpha = 1, 2, \dots, n \\ = \bar{f}_l(x) & l = 0, 1, \dots, k \end{cases}$$

其中 $\bar{C}(v_a, V)$ 是 v_a 与块段中各点协方差的平均值, $\bar{f}_l(x) = \frac{1}{v_a} \int_{v_a} f_l(x) dx$,

$$\bar{f}_l(x) = \frac{1}{V} \int_V f_l(x) dx.$$

解方程组即可得到 $\lambda_i (i=1, \dots, n)$ 及估计方差

$$\sigma_E^2 = \bar{C}(V, V) + \sum_{l=1}^k \mu_l \bar{f}_l(x) - \sum_{\alpha=1}^n \lambda_\alpha \bar{C}(V_\alpha, V)$$

3. 对漂移的估计 按前面的叙述, 漂移 $m(x)$ 即为 $Z(x)$ 的期望值。同估计 Z 的思路相似, 我们可以得到 $m(x)$ 的估计值及相应的估计方差。

限于篇幅, 在此对泛克立格法的原理不作更多的叙述。

从以上讨论可以看出, 泛克立格法相对趋势面分析有以下优点:

①在满足无偏估计和最优估计的同时, 考虑了信息点间及其与待估域之间的位置关系, 具体地是用结构函数表现出来。

②泛克立格法不仅可以对未知点进行估计, 同时可对未知块段进行估计。这在化探数据的处理中有时是非常有用的。

③泛克立格法可以通过估计方差给出一个衡量估计值优劣的标准。

某矿田泛克立格法的使用

在矿田范围内, 系统采了260个原生晕样品, 采样间距约为 $220 \times 220\text{m}$, 样品分布不规则, 但大致均匀。采用的分析测试手段满足精度要求。

矿田出露地层为泥盆系, 岩性为一套碎屑岩、碳酸盐岩、泥岩及硅质岩, 反映的沉积相为台间海槽相。岩浆岩在地表为岩脉,

深部经钻孔证实有隐伏花岗岩体, 热变质发育, 热变质中心与隐伏花岗岩隆起高点近于一致。矿田构造复杂, 边界三条规模较大的断层限定了矿田的范围。东部为近南北向断层, 南部为北东—南西向断层, 西部断层为北西西—南东东向。矿田内部广泛发育有北北西向控岩控矿断裂, 并有一北西向主体背斜及叠加于其上的北东向小褶皱构造。矿体多呈似层状产出, 也有大脉型矿体, 除锡矿外, 尚有一定规模的Pb、Zn、Sb、Ag等矿种。据野外研究, 成矿作用包括沉积期, 热变质期及热液蚀变等几个阶段。矿床分布与北西向褶皱构造与北东向构造的叠加部位关系密切, 具有北西成带, 北东成行的分布特点。

此次应用中对Sn、Pb、Zn、Cu、Ag、Sb等成矿元素及某些成矿指示元素进行了处理。这里仅以Sn的结果为例说明。

考虑到数据起伏较大, 且基本符合对数正态分布(图1), 故将原始数据全部作对数变换后再处理。

图1 分布型式检验

1—理论概率曲线; 2—实际频率曲线

1. 半变异函数的研究 半变异函数作为反映数据空间相关性的工具, 既是地质统计学不同于其它统计方法的重要方面之一, 也是泛克立格法实施的基础, 同时还可以利用有关参数反映某些地质信息。

4 个主要方向(0°, 45°, 90°, 135°) 实验半变异函数基本稳定。各方向实验半变异函数计算时, 距离容差为基本滞后距的一半, 角度容差为22.5°。目的是在数据量有限的情况下, 充分利用数据。

实验半变异函数均用球状模型拟合成理论模型, 各方向模型参数如表所示:

	0°	45°	90°	135°
C_0	1.755	0.842	1.470	1.502
C	1.275	3.386	2.288	2.918
A	33.321	39.163	30.625	50.495

这里我们给出主要构造线方向(135°)及其垂直方向上实验半变异函数及理论模型曲线图(图2、3)。从图上看, 实验半变异函数确实比较稳定。

图 2 135.方向实验半变异函数及其球状模型

理论上讲, 块金常数 C_0 是反映微观尺度上变量空间相关性的, 因而各方向上 C_0 应相近。但此次应用中4个 C_0 有较显著的差别, 可能有两方面的原因, 一是取样密度未能充分地大; 二是由于半变异函数的拟合是采用计算机拟合的, 没有考虑到 C_0 的这一特点而强调了实验半变异函数点的客观性。

图 3 45°方向实验半变异函数及其球状模型

我们知道, 变程 a 是反映样品空间相关性存在范围的, 拱高 C 则是反映变化幅度的。从锡的变异函数图上可看出, 45°方向的变程值为39.163, 拱高为3.386, 而135°方向变程为50.495, 拱高为2.918, 这说明矿田内Sn元素空间相关性的存在范围在北西—南东向大, 北东—南西向小, 而变化幅度在北西—南东向小, 北东—南西向大。这与野外见到的矿体分布特征是一致的。

2. 关于统一的半变异函数理论模型的形成 在实施克立格法时, 必须有统一的结构模型。对各项异性问题形成“套合结构”。形式为:

$$\gamma(h) = \sum_{i=1}^N \gamma_i(h)$$

求两点之间的半变异函数时, 根据连接两点的矢量的方向使用变换矩阵, 拉长或压缩长度, 从而达到用统一模型, 对不同方向的矢量, 分别按相应方向的理论模型求半变异函数值的目的。

我们认为, 这种方法在使用时, 特别是要将二个方向以上的模型合并在一起时, 常常有些不便。因为不同方向的半变异函数, 我们有时可能用不同的模型拟合。本文中的

半变异函数的拟合工作是由计算机完成的，各方向的块金常数又由于样品较稀有一定的差异，因而形成套合结构较麻烦。

由于在实验半变异函数计算时，方向容差放宽到 22.5° ，因而每个半变异函数的模型覆盖了整个角度区间的四分之一，平面上任一方向的矢量，总可以落入4个小区间中的某一个内，从而找到包含此方向的半变异函数理论模型。

本文中，没有用形成统一套合模型的方法，而是将4个方向的模型引进泛克立格估值程序中，在求两点间的结构函数值时，视矢量所属区间分别处理。

3. 泛克立格法的实施 克立格法用于储量计算时，块段形状常是矩阵的。本文中采用了三角形待估地段。经对比发现这种块段划分方法与四边形块段没有显著差别。

估计时使用了伪协方差的概念。估值邻域的范围视4个方向的变程大小确定。

图4 泛克立格估值等值线图

图5 五次趋势面分析趋势值等值线图

4. 泛克立格法结果与趋势面分析结果的对比 图4及图5分别是泛克立格法估值等值线及五次趋势面分析趋势值等值线。两图对比可以看出。

①泛克立格估值图上有两个高异常区，其中分布于图幅中心附近的异常(I)与矿田内已知矿体分布一致，且是隐体花岗岩体的高点部位，另一异常(II)其分布范围在地质上正是北西向褶皱构造与北东向褶皱构造叠加部位，可能是有找矿意义的异常。

②趋势值等值线图中只有一个较明显的高值区，其位置与已知矿化地段略有偏移。这是五次趋势面分析的结果，其拟合度只有23.1%，继续增加多项式的次数，计算机时有较大的增加，但拟合度基本不变。

工作过程中得到了蒋耀松教授及黄竞先、侯景儒等老师的帮助指导。在此致谢

A Comparison of Primary Halo Data Processed by Geostatistics and Those Analysed by Trend Surface Analysis

Yang Haiming Chi Sanchuan

In this paper a comparison of primary halo data respectively processed by trend surface analysis and geostatistical method has been made. It shows that the results processed by the geostatistical method is much better than those treated by trend surface analysis. The authors point out that geochemical prospecting data would be best processed by geostatistics if could be fully utilized