地质统计学



北京科技大学

一、地质统计学的发展历史和现状

- 什么是地质统计学？

  地质统计学(Geostatistics)包含经典统计学与空间统计学，按其基本原理可定义为：地质统计学是以区域化变量理论为基础，以变异函数为主要工具，研究那些在空间分布上既有随机性，又有结构性的自然现象的科学 。

- 地质统计学诞生过程

上世纪40年代后期，当南非统计学家H.S西奇尔（Sichel）判明南非各金矿的样品品位呈对数正态分布以后，才真正确立了地质统计学的开端。

1951年，南非的矿山工程D.G.克立格Daniel Krige）在H.S西奇尔研究的基础上提出一个论点：“可以预计，一个矿山总体中的金品位的相对变化要大于该矿山某一部分中的金品位的相对变化”。换句话说，以较近距离采集的样品很可能比以较远距离采集的样品具有更近似的品位。这一论点是描述在多维空间内定义的数值特征的空间统计学据以建立的基础。

到上世纪60年代，才认识到需要把样品值之间的相似性作为样品间距离的函数来加以模拟，并且得出了半变异函数。法国概率统计学家马特隆（Matheron）创立了一个理论框架，为克立格作出的经验论点提供了精确而简明的数学阐释。马特隆创造了一个新名词“克立格法”（Kriging），藉以表彰克立格在矿床的地质统计学评价工作中所起到的先驱作用。即1962年，马特隆在克立格和西奇尔研究的基础上，将他们的成果理论化、系统化，并首先提出了区域化变量（Regionalized variable）的概念，为了更好地研究具有随机性及结构性的自然现象，提出了地质统计学（Geostatistics）一词，发表了《应用地质统计学》，该著作的出版标志着地质统计学作为一门新兴边缘学科而诞生。地质统计学开始进入了学术界。在法国枫丹白露成立了地质统计学中心（Centre de Geostatistiques），培养了一大批学员，不仅为地质统计学的研究而且为它的传播起到了巨大的作用。

- 地质统计学的发展

自70年代，地质统计学的发展突飞猛进。在此期间，从理论突破的频度、论文发表的篇数、以及世界各地对地质统计学所表现的极大关心程度，都说明地质统计学达到了前所未有的发展阶段。目前条件模拟技术广泛应用于石油、采矿、水文、和环境保护等领域中。研制出一批高水平的地质统计学方法计算程序软件。在地质统计学的理论及方法基础上开发了许多成熟的应用软件。如美国开发的矿床建模软件包（Deposit Modeling System），功能上可覆盖矿山地质设计的全过程；而MICL（英国矿业计算机有限公司）开发的DATMINE软件包，则集地、测、采于一体；法国巴黎高等矿院地质统计学研究中心研制出两种大型软件系统:ISATIS系统及HERESIM系统；澳大利亚的MICROMINE软件,SURPAC软件，加拿大的GEOSTAT软件，CAMET软件和GLS软件系统等。

地质统计学是在1977年由美国福禄尔采矿金属有限公司（Flour Mining & Meta Incorporation）H.M.Parker博士随美中贸易全国委员会矿业代表团来华访问，传入我国，继而得到进一步的发展。1989年11月召开的全国第一届地质统计学学术讨论会，地质统计学在我国的发展进入了一个新的阶段，理论研究更加深入，涉及的方法原理更加广泛。地质统计学已经被广泛地承认是矿床评价的必要部分，在我国已经认可用地质统计学对矿床进行评价的地质报告。

1、区域化变量理论

- 区域化变量

G.马特隆定义区域化变量是：一种在空间上具有数值的实函数，它在空间的每一个点取一个确定的数值，即当由一个点移到下一个点时，函数值是变化的。

从地质及矿业角度来看，区域化变量具有如下性质：

（1）空间局限性：即它被限制在一个特定的空间（如一个矿体内）；该空间称为区域化的几何域；区域化变量是按几何支撑定义的。

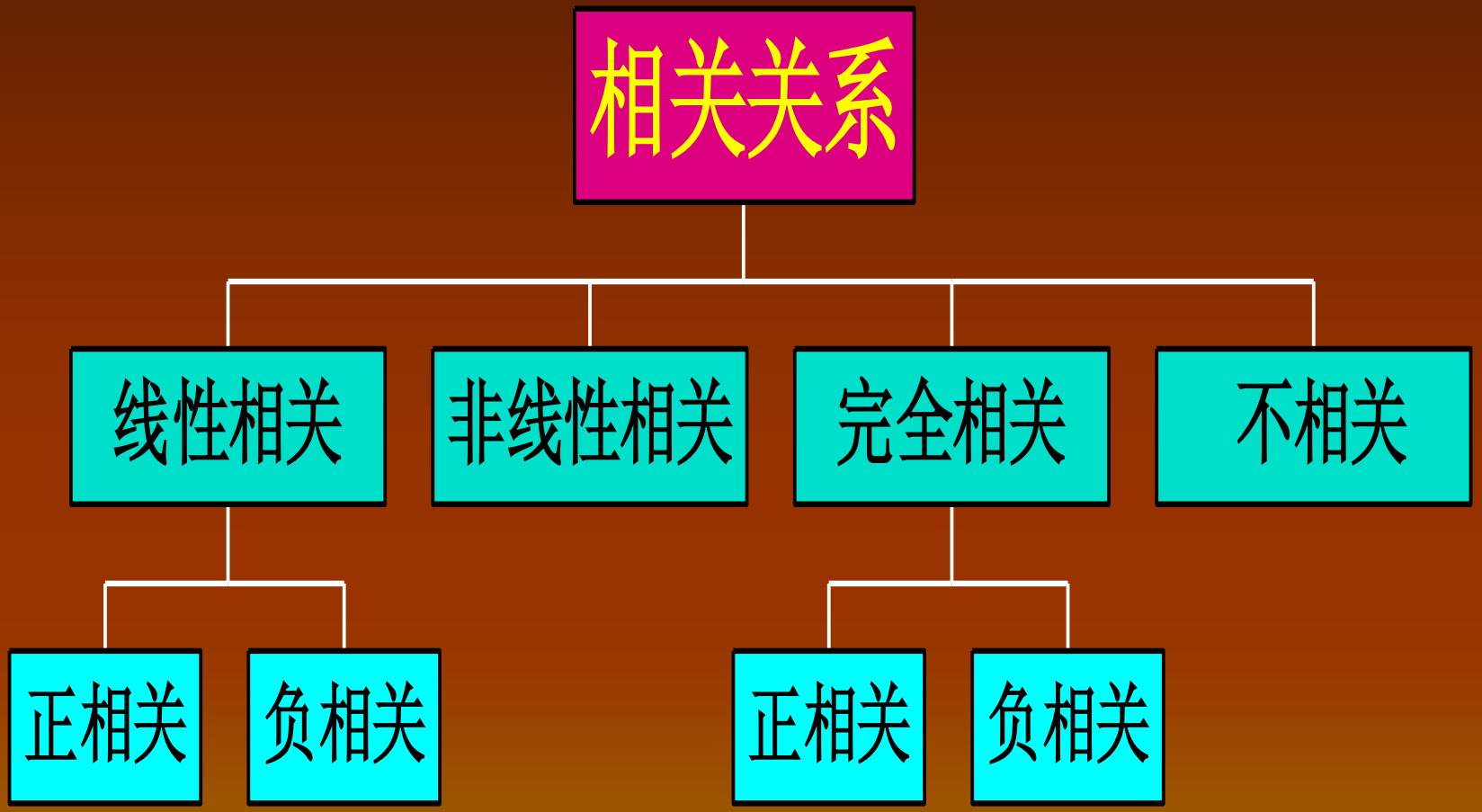
（2）连续性：不同的区域化变量具有不同的连续性，这种连续性是通过相邻样品之间的变异函数来描述的。

（3）异向性：当区域化变量在各个方向上具有相同的性质时称各向同性，否则称各向异性。

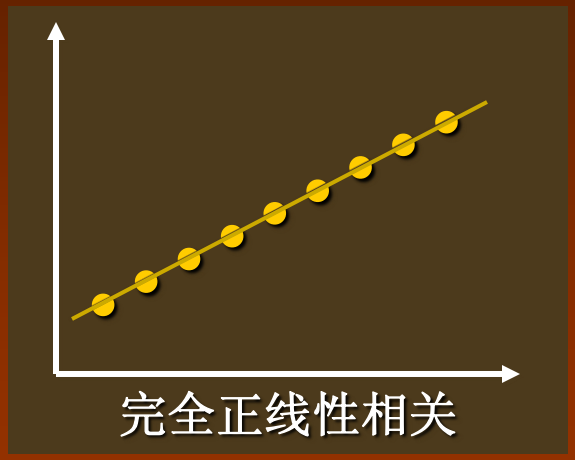
（4）相关性：一定范围内、一定程度上的空间相关性，当超出这一范围后相关性减弱以至消失。

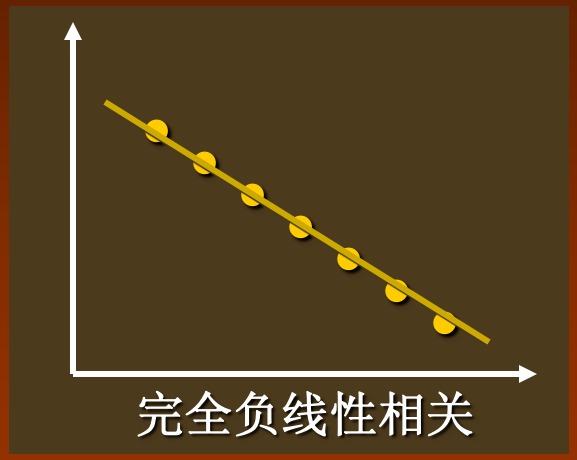
（5）对于任一区域化变量而言，特殊的变异性可以叠加在一般规律之上。

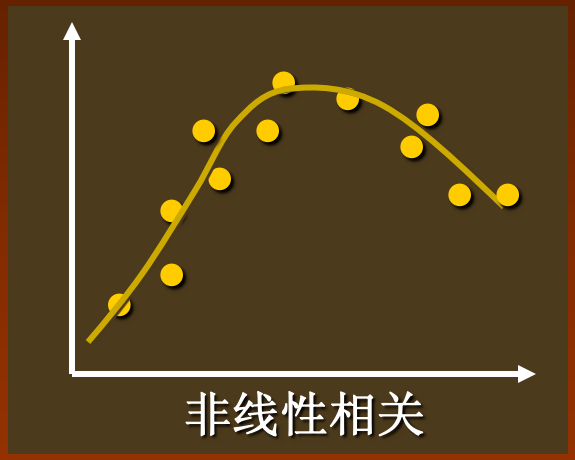
•相关关系

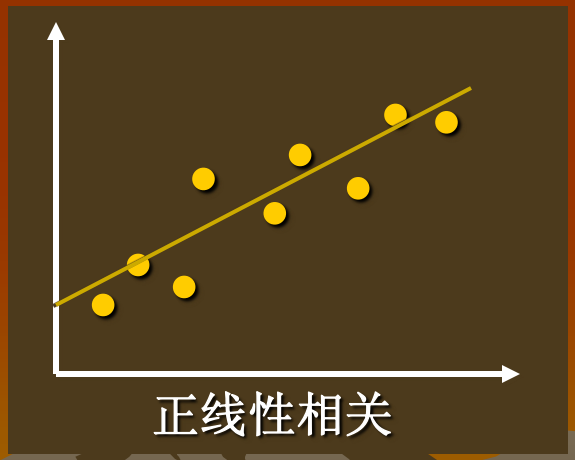


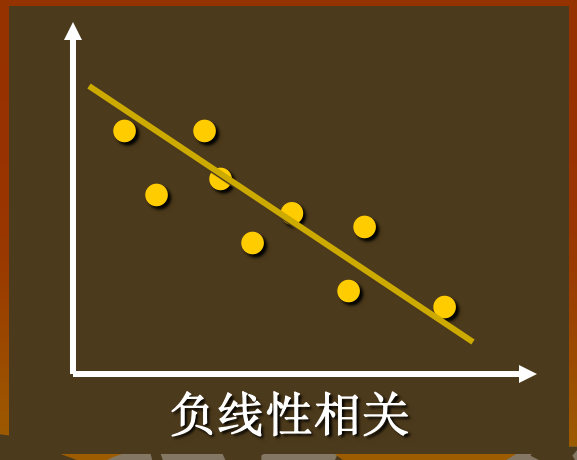
散点图
(scatter diagram)

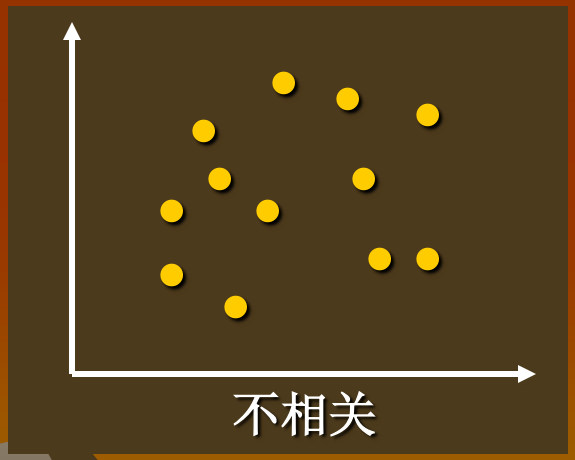












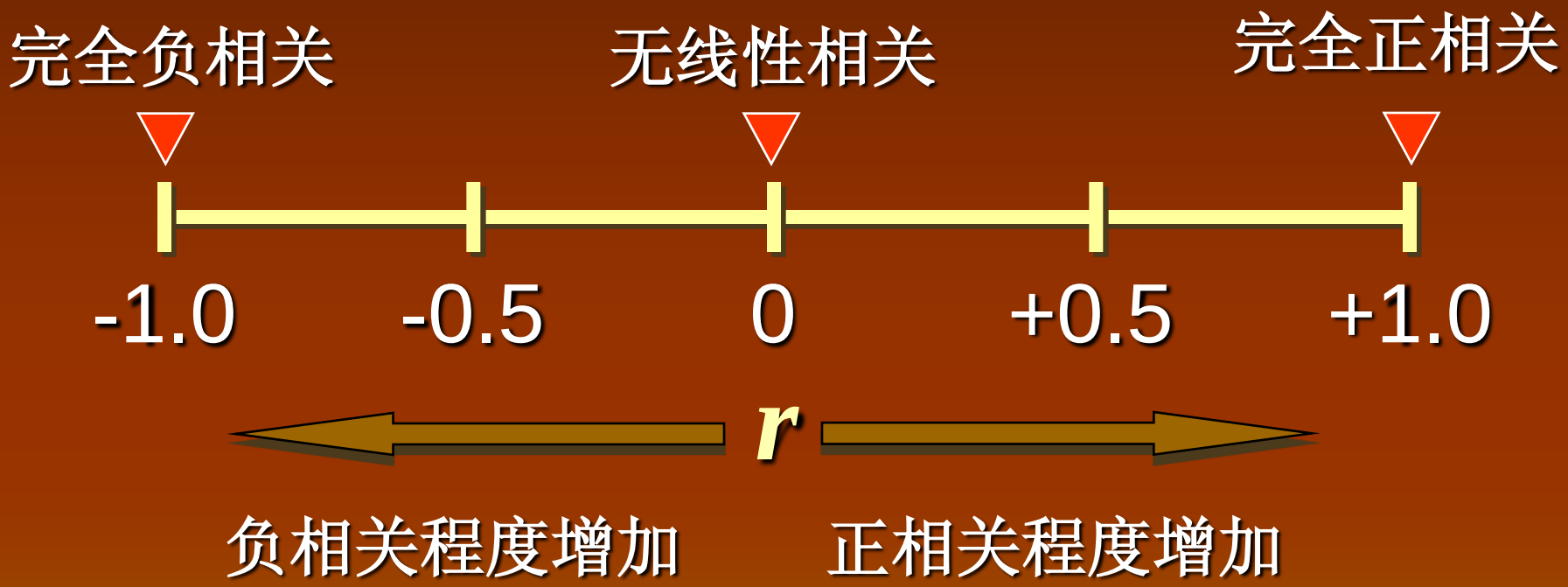
相关系数
(计算公式)

- 样本相关系数的计算公式

$$\rho_{XY} = \frac{\mathrm{Cov}(X,Y)}{\sqrt{D(X)}\sqrt{D(Y)}}$$

$$r = \frac{\sum (x-\bar{x})(y-\bar{y})}{\sqrt{\sum (x-\bar{x})^2 \cdot \sum (y-\bar{y})^2}}$$

相关系数
(取值及其意义)



• 变异函数(Variogram)

研究区域化变量使用变异函数，在一维条件下变异函数定义如下：当空间点 X 在一维 X 轴上变化时，把区域化变量在 x 与 x+h 处的值 $Z(x)$ 与 $Z(x+h)$ 的差的方差之半定义为区域化变量 $Z(x)$ 在 x 轴方向上的变异函数，并记为 $\gamma(x,h)$：

$$\gamma(x,h)=\frac{1}{2}E[Z(x)-Z(x+h)]^2$$

当变异函数 $\gamma(x,h)$ 与位置 x 无关，而只依赖于分隔两个样品点之间的距离 h 时，则 $\gamma(x,h)$ 就可改写为 $\gamma(h)$：

$$\gamma(h)=\frac{1}{2}E[Z(x)-Z(x+h)]^2$$

• 协方差函数(Covariance)

当随机函数依赖于多个自变量时，$Z(x)=Z(x_u,x_v,x_\omega)$ 称为随机场。而随机场 $Z(x)$ 在空间点 x 和 x+h 处的两个随机变量 $Z(x)$ 和 $Z(x+h)$ 的二阶中心混合矩定义为随机场 $Z(x)$ 的自协方差函数：

$$Cov[Z(x),Z(x+h)]=E[Z(x)Z(x+h)]-E[Z(x)]E[Z(x+h)]$$

协方差函数一般依赖于空间点 x 和向量 h。当 h=0 时，则协方差函数变为：$Cov[Z(x),Z(x+0)]=E[Z(x)]^2-\{E[Z(x)]\}^2$，即等于先验方差函数 $Var[Z(x)]$，当其不依赖于 x 时，简称方差，从而有：

$$Var[Z(x)]=E[Z(x)]^2-\{E[Z(x)]\}^2$$

• 平稳假设(Stationary assumption)

当区域化变量满足下列两个条件时，称该区域化变量满足二阶平稳：

（1） 在整个研究区内，区域化变量 $Z(x)$ 的期望存在且等于常数：

$$E[Z(x)] = m \qquad \text{(常数)} \qquad \forall x$$

（2） 在整个研究区内，区域化变量的空间协方差函数存在且平稳：

$$Cov[Z(x), Z(x+h)] = E[Z(x)Z(x+h)] - m^2 = C(h) \qquad \forall x, \forall h$$

当 h=0 时，上式变成：

$$Var[z(x)] = C(0) \qquad \forall x$$

即它有有限先验方差。

• 内蕴假设(intrinsic assumption)

当区域化变量 $Z(x)$ 的增量 $Z(x)-Z(x+h)$ 满足下列两个条件时，称该区域化变量满足内蕴假设：

（1） 在整个研究区域内，随机函数 $Z(x)$ 的增量 $Z(x)-Z(x+h)$ 的数学期望为 0：

$$E[Z(x)-Z(x+h)]=0 \qquad \forall x,\ \forall h$$

（2） 对于所有矢量的增量 $Z(x)-Z(x+h)$ 的方差函数存在且平稳，即

$$Var[Z(x)-Z(x+h)]=E[Z(x)-Z(x+h)]^2$$

$$=2\gamma(x,h)$$

$$=2\gamma(h) \qquad \forall x,\ \forall h$$

即要求 $Z(x)$ 的变异函数 $\gamma(h)$ 存在且平稳。

• 估计方差(Estimation variance) 1

任一估计方法，使被估块段的实际值与估计值不同，即产生估计误差，一个储量计算方法的可靠程度就是根据该方法所包含的误差大小来衡量的。最好的估计方法是误差最小的方法。

设有一矿床被分成大小相等的以 x_i（$i=1,2,\ldots,N$）为中心的 N 个块段，令每一块段的实际品位为 $Z(x_i)$（$i=1,2,\ldots,N$），而用某种方法估计出 $Z(x_i)$ 的估计品位为 $Z^*(X_i)$（$i=1,2,\ldots,N$），这时就有估计误差：

即 $$R(X_i)=Z(X_i)-Z^*(X_i) \qquad (i=1,2,\ldots,N)$$

当然，我们总是希望估计的平均值与实际值的平均值相同，即

$$E[R(X)]=E[Z(X)-Z^*(X)]=0$$

换句话说，不希望有系统误差（所谓无偏性）。 此外，我们总是希望上述大多数误差的绝对值要小一些，并且在某一确定值周围波动，即估计误差的分布具有较小离散性：

$$\delta^2=Var[Z(X)-Z^*(X)]=>0$$

• 估计方差(Estimation variance) 2

令 $Z(x)$ 为一个二阶平稳的随机函数，其数学期望为 m，协方差为 $C(h)$ 或变异函数为 $\gamma(h)$，且只依赖于向量 h。

估计方差的计算公式如下：

$$\delta_E^2 = \overline{C}(V,V) + \overline{C}(v,v) - 2\overline{C}(V,v)$$

上式可用平均变异函数表示如下：

$$\delta_E^2 = 2\bar{\gamma}(V,v) + \bar{\gamma}(V,V) - \bar{\gamma}(v,v)$$

式中 $\overline{C}(V,v)$ 及 $\bar{\gamma}(V,v)$ 分别代表当矢量的两个端点各自独立地扫过待估域 V 及信息域 v 的协方差函数平均值及变异函数平均值；$\overline{C}(v,v)$ 及 $\bar{\gamma}(v,v)$ 分别代表当矢量的两个端点各自独立地扫过任两个信息域 v 的协方差函数平均值及变异函数平均值；$\overline{C}(V,V)$ 及 $\bar{\gamma}(V,V)$ 分别代表当矢量的两个端点各自独立地在待估域 V 扫过时的协方差函数平均值及变异函数平均值。

• 估计方差(Estimation variance) 3

当估计量是加权平均值时，

$$Z^{*} = \sum \lambda_i Z_i \qquad i = 1, 2, \cdots, \ n$$

估计方差的公式可表示如下：

$$\delta_E^2 = \overline{C}(V,V) + \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \lambda_i \lambda_j \overline{C}(v_i, v_j) - 2\sum_{i=1}^{n} \lambda_i \overline{C}(V, v_i)$$

式中的v_i， v_j表示信息域，v 表示待估域， λ_i， λ_j为v_i， v_j的权系数。或

$$\delta_E^2 = 2\sum_{i=1}^{n} \lambda_i \overline{\gamma}(V, v_i) - \overline{\gamma}(V,V) - \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \lambda_i \lambda_j \overline{\gamma}(v_i, v_j)$$

• 离差方差 (Dispersion variance)

令 V 是以点 x 为中心的开采面，并将其分成以 x_i 为中心的 N 个大小相等的生产单元 $v(x_i)$ $(i=1,2,\ldots,N)$。 这 N 个品位值 $z_v(x_i)(i=1,2,\ldots,N)$ 对它的平均值 $Z_V(x)$ 的离散程度可用其方差表示：

$$s^2(x)=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}[z_v(x_i)-Z_V(x)]^2$$

离差方差定义如下：在区域化变量满足二阶平稳假设条件下，把随机变量 $s^2(x)$ 的数学期望定义为在开采面 V 内 N 个生产单元 v 的离差方差，记为 $D^2(v/V)$：

$$D^2(v/V)=E[s^2(x)]=E\{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}[z_v(x_i)-Z_V(x)]^2\}$$

经过推导得到离差方差的通式：

$$D^2(v/V)=\overline{C}(v,v)-\overline{C}(V,V)$$

或

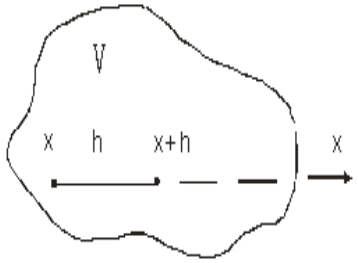
$$D^2(v/V)=\overline{\gamma}(V,V)-\overline{C}(v,v)$$

2、变异函数及结构分析

为表征一个矿床金属品位等特征量的变化，经典统计学通常采用均值、方差等一类参数，这些统计量只能概括该矿床中金属品位等特征量的全貌，却无法反映局部范围和特定方向上地质特征的变化。地质统计学引入变异函数这一工具，它能够反映区域化变量的空间变化特征——相关性和随机性，特别是透过随机性反映区域化变量的结构性，故变异函数又称结构函数。

• 变异函数及变异曲线

我们可以把一个矿床看成是空间中的一个域，如图中 x，x+h 为沿 x 方向被矢量 h 分割的两个点，其观测值分别为 $Z(x)$ 及 $Z(x+h)$，该两者的差值 $[Z(x)-Z(x+h)]$ 就是一个有明确物理意义的结构信息，因而可以看成是一个变量。



域 V 内的变量值

区域化变量 $Z(x)$ 在空间相距 h 的任意两点 x 和 x+h 处的值 $Z(x)$ 与 $Z(x+h)$ 差的方差之半定义为区域化变量 $Z(x)$ 的变异函数，记为 $\gamma(x,h)$：

$$\gamma(x,h)=\frac{1}{2}Var[Z(x)-Z(x+h)]$$

当 $\gamma(x,h)$ 与位置 x 无关，而只依赖于分隔两个样品点之间的距离 h 时，则可把变异函数 $\gamma(x,h)$ 写为：$\gamma(h)$：

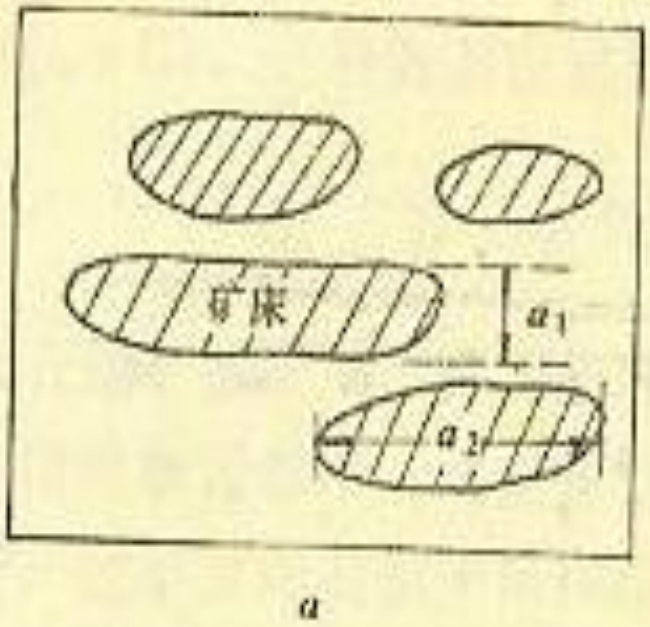
$$\gamma(h)=\frac{1}{2}E[Z(x)-Z(x+h)]^2$$

在实践中，样品的数目总是有限的，把有限实测样品值构制的变异函数称为实验变异函数（experimental variogram），记为 $\gamma^*(h)$：

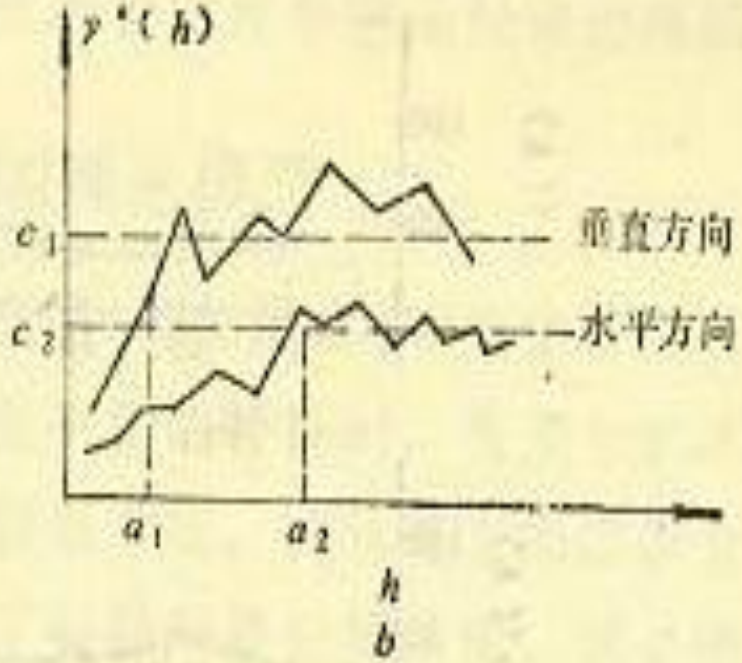
$$\gamma^*(h)=\frac{1}{2N(h)}\sum_{i=1}^{N(h)}[Z(x_i)-Z(x_i+h)]^2$$

$\gamma^*(h)$ 是理论变异函数值 $\gamma(h)$ 的估计值。

- 变异函数及变异曲线



a

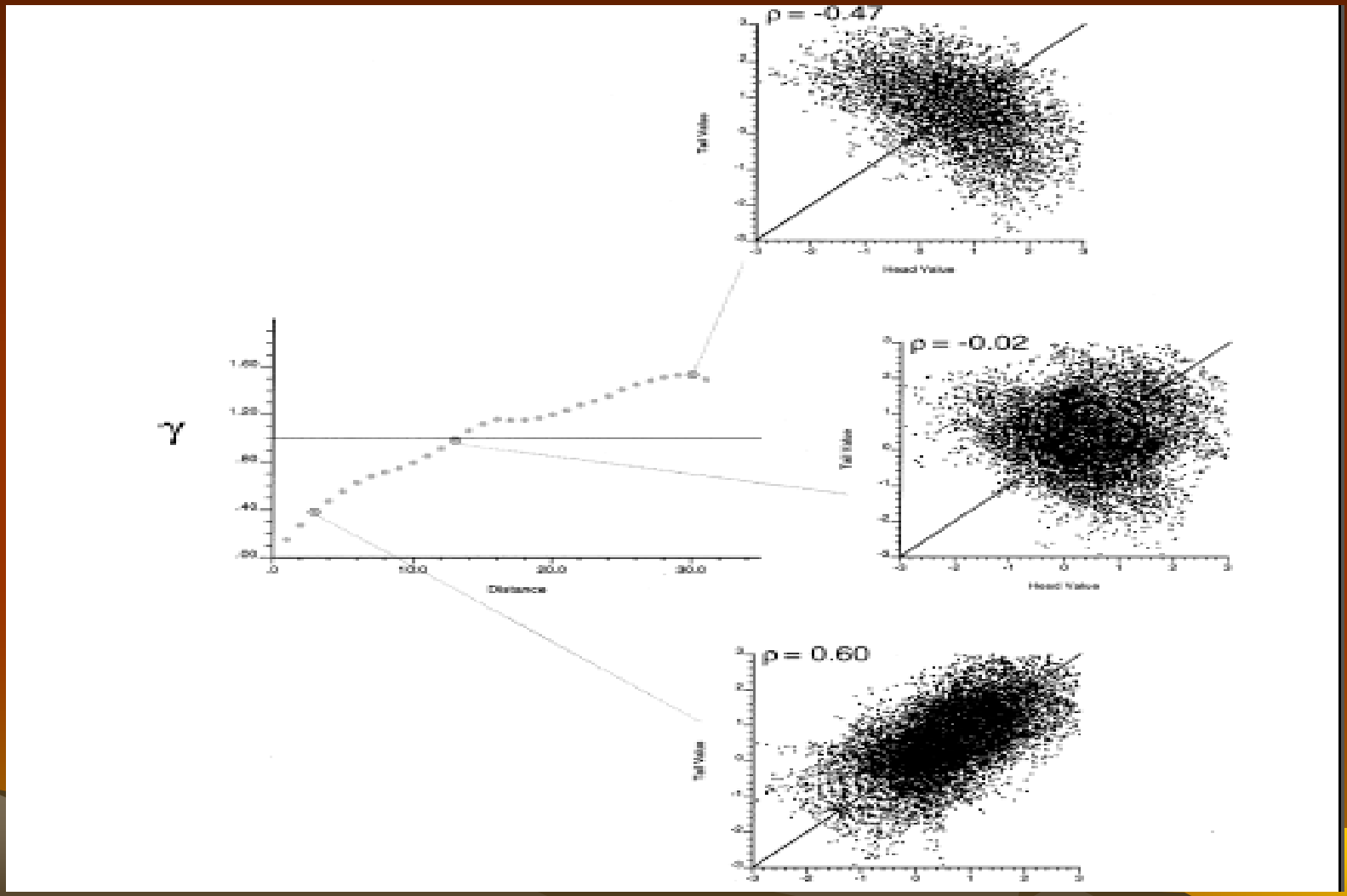


b

图 3-4-4 用$\gamma^*(h)$表示矿区的结构异向性

a—表示透镜体矿床；b—各方向变异性

Z(x)和Z(x+h)的相关与变异函数的关系



•变异函数与协方差之间的关系

我们已经知道变异函数表征为：

$$2\gamma(h)=E[Z(x)-Z(x+h)]^2$$
$$=E[Z(x)]^2+E[Z(x+h)]^2$$
$$-2E[Z(x)Z(x+h)] \qquad (3\text{-}4\text{-}9)$$

在二阶平稳条件下，当$h=0$时

$$\mathrm{Var}[Z(x)]=C(0),\ \forall\ x,\ 即$$
$$C(0)=\mathrm{Var}[Z(x)]$$
$$=E[Z(x)]^2-\{E[Z(x)]\}^2$$
$$=E[Z(x)]^2-m^2$$

从而有

$$E[Z(x)]^2=C(0)+m^2 \qquad (3\text{-}4\text{-}10)$$
$$E[Z(x+h)]^2=C(0)+m^2 \qquad (3\text{-}4\text{-}11)$$

此外，

$$\mathrm{Cov}\{Z(x),\ Z(x+h)\}=E[Z(x)Z(x+h)]$$
$$-E[Z(x)]E[Z(x+h)]$$
$$=E[Z(x)Z(x+h)]-m^2=C(h)$$

从而有 $$E[Z(x)Z(x+h)]=C(h)+m^2 \qquad (3\text{-}4\text{-}12)$$

将式 (3-4-10)、(3-4-11)、(3-4-12) 代入式 (3-4-9) 得

$$2\gamma(h)=[C(0)+m^2]+[C(0)+m^2]-2[C(h)+m^2]$$
$$=2C(0)-2C(h)$$

所以 $$\gamma(h)=C(0)-C(h) \qquad (3\text{-}4\text{-}13)$$

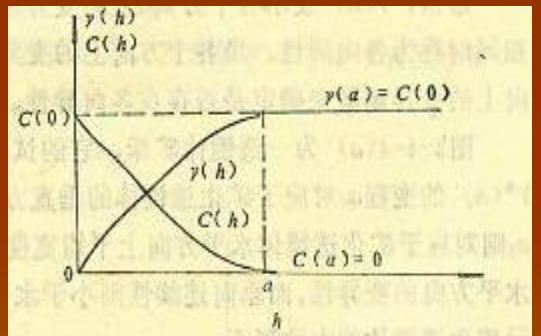
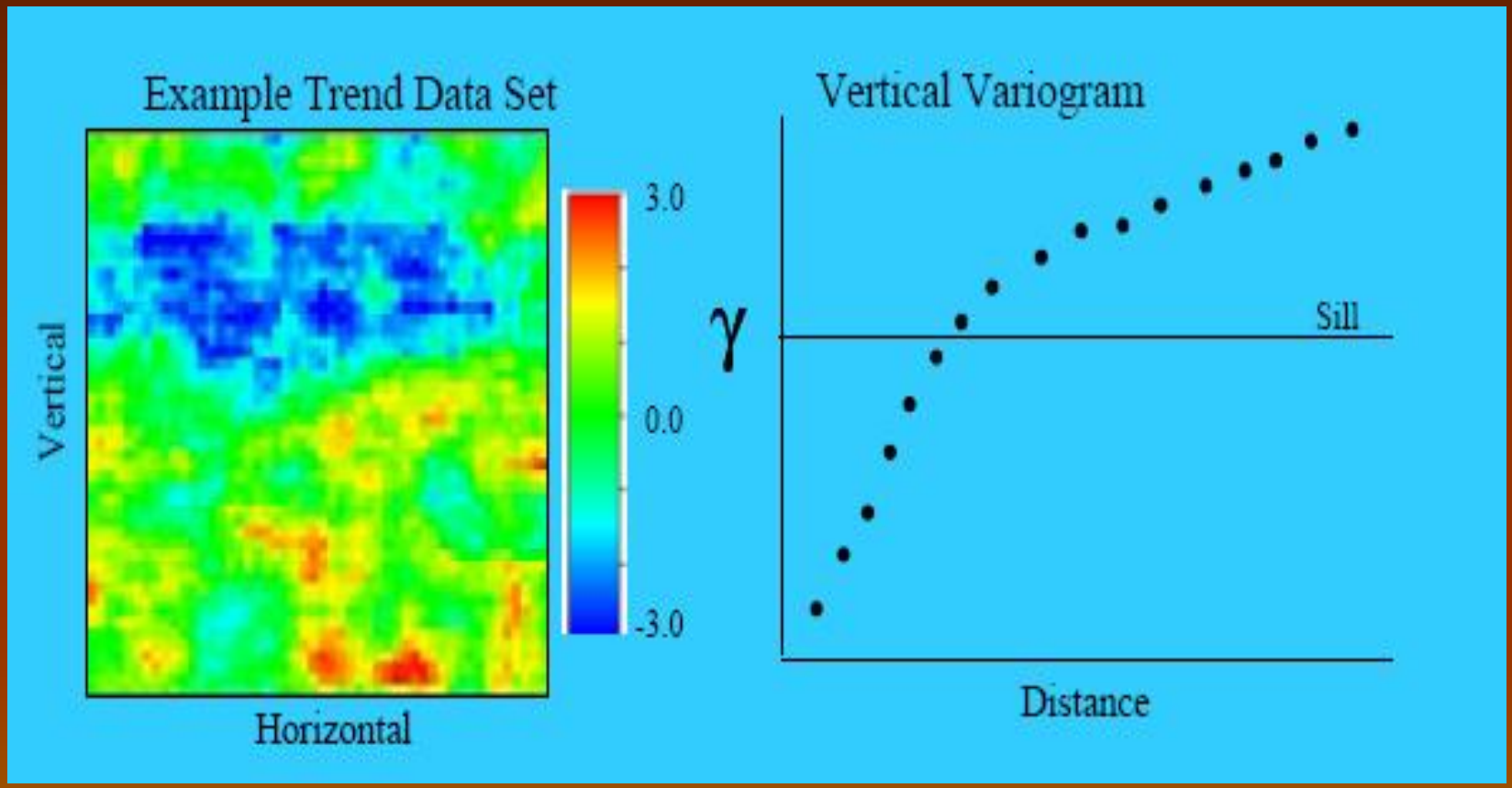
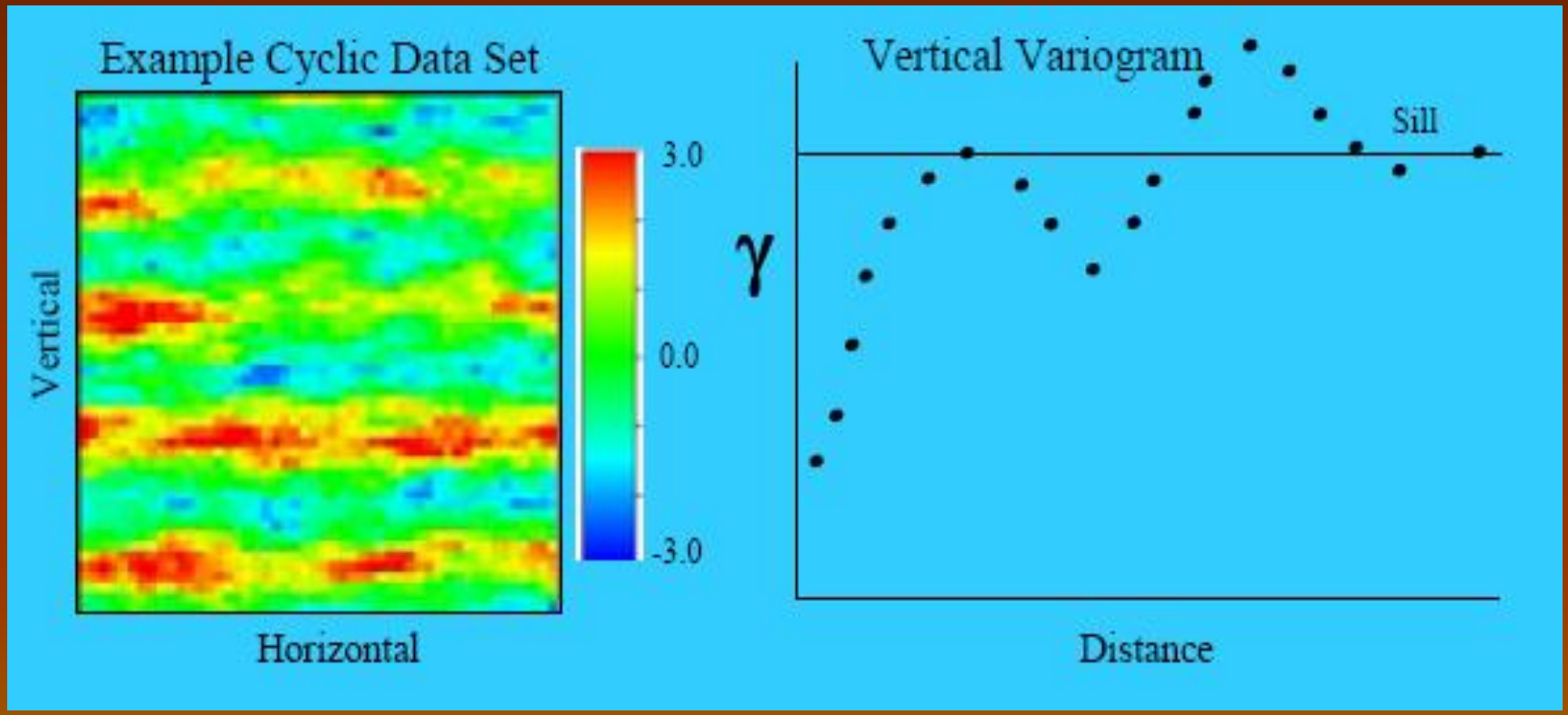


图 3-4-3　$\gamma(h)$与$C(h)$关系图

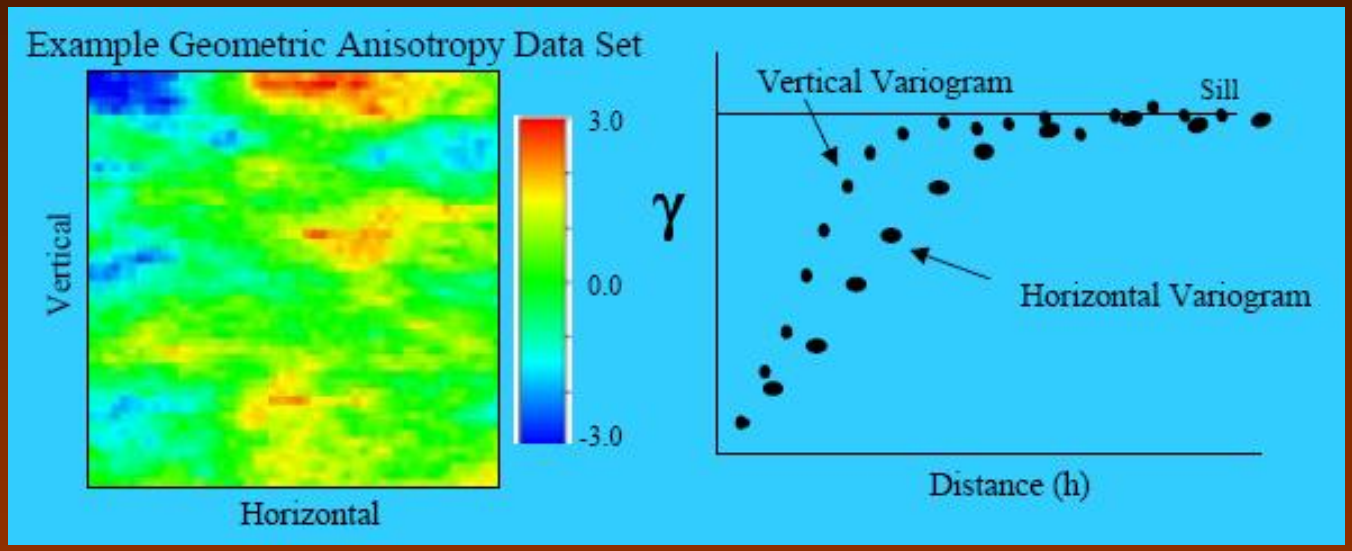
- 存在趋势的变异函数

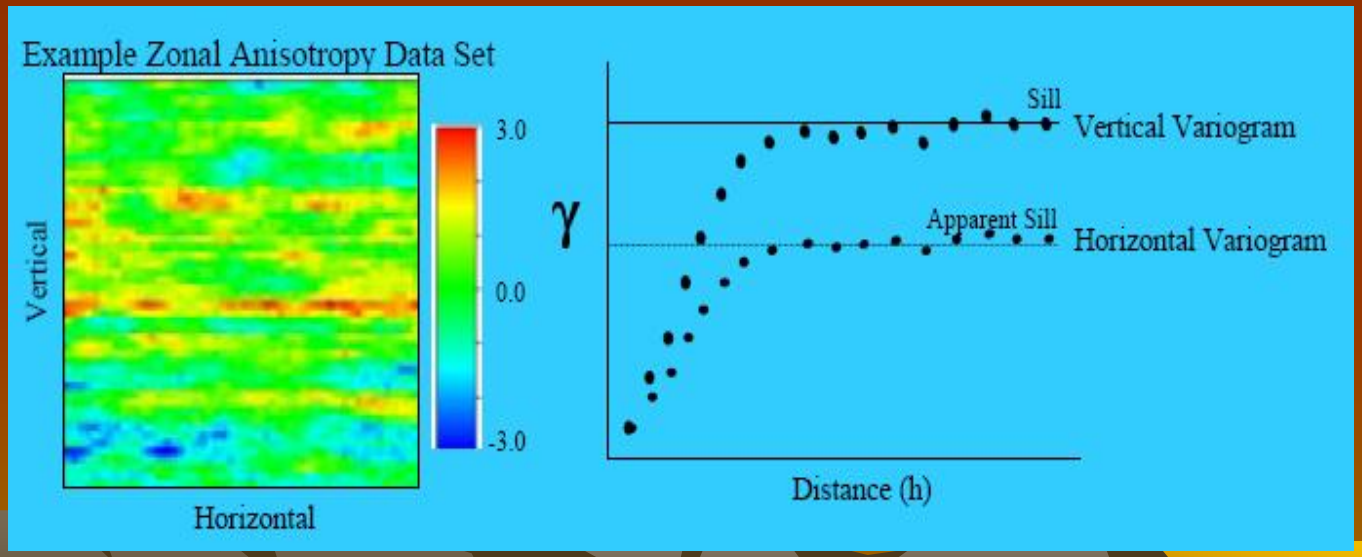

Example Trend Data Set
Vertical
Horizontal
3.0
0.0
-3.0
Vertical Variogram
γ
Sill
Distance

•具有空穴效应的变异函数



•几何异向性和带状异向性比较





• 变异函数在原点处的性状

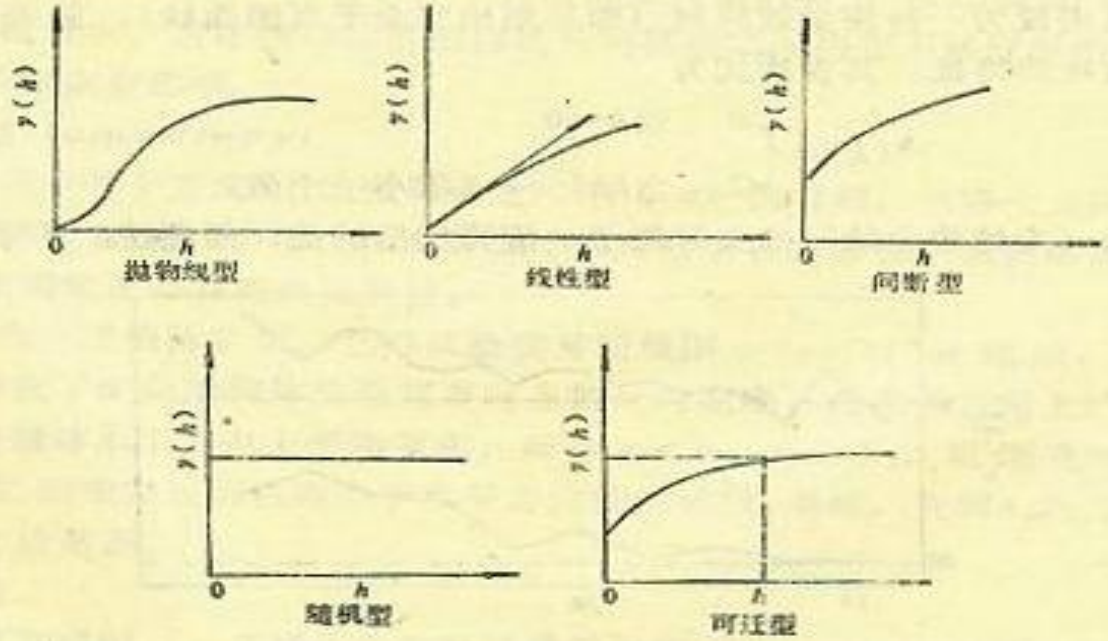
（1）抛物线型（*Parabolic type*）。当$|h|\Rightarrow 0$时，$\gamma(h)\Rightarrow A|h|^2$，（其中$A$为常数）即$\gamma(h)$曲线在原点处呈一抛物线型，它表示区域化变量的高度连续性（如矿层厚度）。

（2）线性型（*linear type*）。当$|h|\Rightarrow 0$时，$\gamma(h)\Rightarrow A|h|$，（$A$为常数），即$\gamma(h)$在原点处有斜向的切线存在，它反映区域化变量有平均的连续性（如金属品位）。

（3）间断型（*discontinuous type*）。$\gamma(h)$在原点处间断，它反映有C_0存在，连续性差，当h变大时，$\gamma(h)$又变得较为连续了。

（4）随机型（*random type*）。这种$\gamma(h)$呈现出纯块金效应。

（5）过渡型或可迁型（*transition type*）。



• 变异函数的理论模型

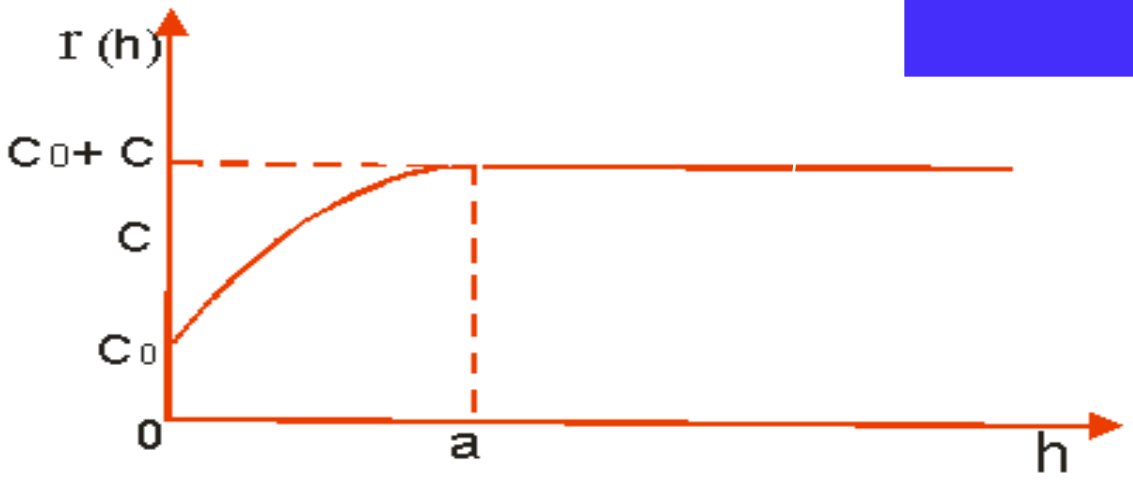
变异函数一般用变异曲线来表示。其常用的模型有：球状模型、高斯模型及指数模型。

1） 球状模型公式为

$$\gamma(h)=\begin{cases}0 & h=0\\ C_0+C\left(\frac{3h}{2a}-\frac{1h^3}{2a^3}\right) & 0<h\le a\\ C_0+C & h>a\end{cases}$$

Co-块金常数
a—变程
Co+C—基台

球状模型在地质采矿中应用最为广泛，如图所示。



• 变异函数的理论模型

2） 高斯模型：其通式为

$$\gamma(h)=\begin{cases}0 & h=0\\ C_0+C(1-e^{-\frac{h^2}{a^2}}) & h>0\end{cases}$$

必须注意：式中a不是变程，由于当 $h=\sqrt{3}a$ 时，$1-e^{-\frac{h^2}{a^2}}=1-e^{-3}\approx 0.95\approx 1$，即当 $h=\sqrt{3}a$ 时，$\gamma(h)\approx C_0+C$，所以，该模型的变程为 $\sqrt{3}a$。

3） 指数模型：一般公式为

$$\gamma(h)=\begin{cases}0 & h=0\\ C_0+C(1-e^{-\frac{h}{a}}) & h>0\end{cases}$$

由于当 h=3a 时，$1-e^{-\frac{3a}{a}}=1-e^{-3}\approx 0.95\approx 1$，即当 h=3a 时，$\gamma(h)\approx C_0+C$，所以该模型的变程约为 3a。

•三种有基台值标准模型比较

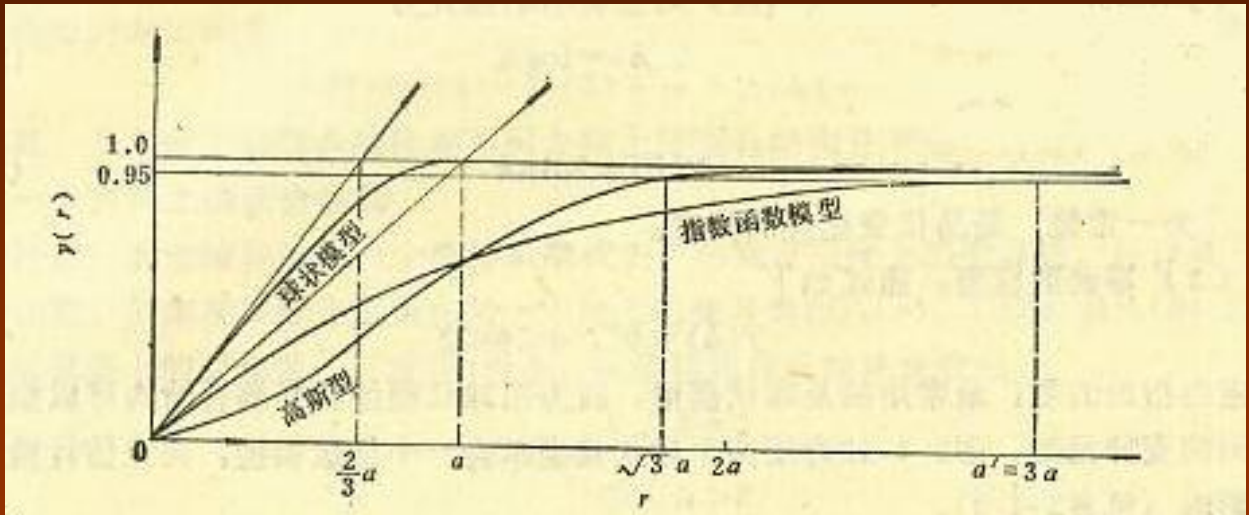


图 3-4-10　三种有基台值的变异函数模型的比较图

表 3-4-2　三种有基台值标准模型比较表

模　型	通过原点的切线与基台值线交点的横坐标	变　程	原点处的性状
球　状	$\frac{2}{3}a$	a	直　线
指数函数	a	$3a$	直　线
高　斯	无 交 点	$\sqrt{3}a$	抛 物 线

- 具有空穴效应的变异函数

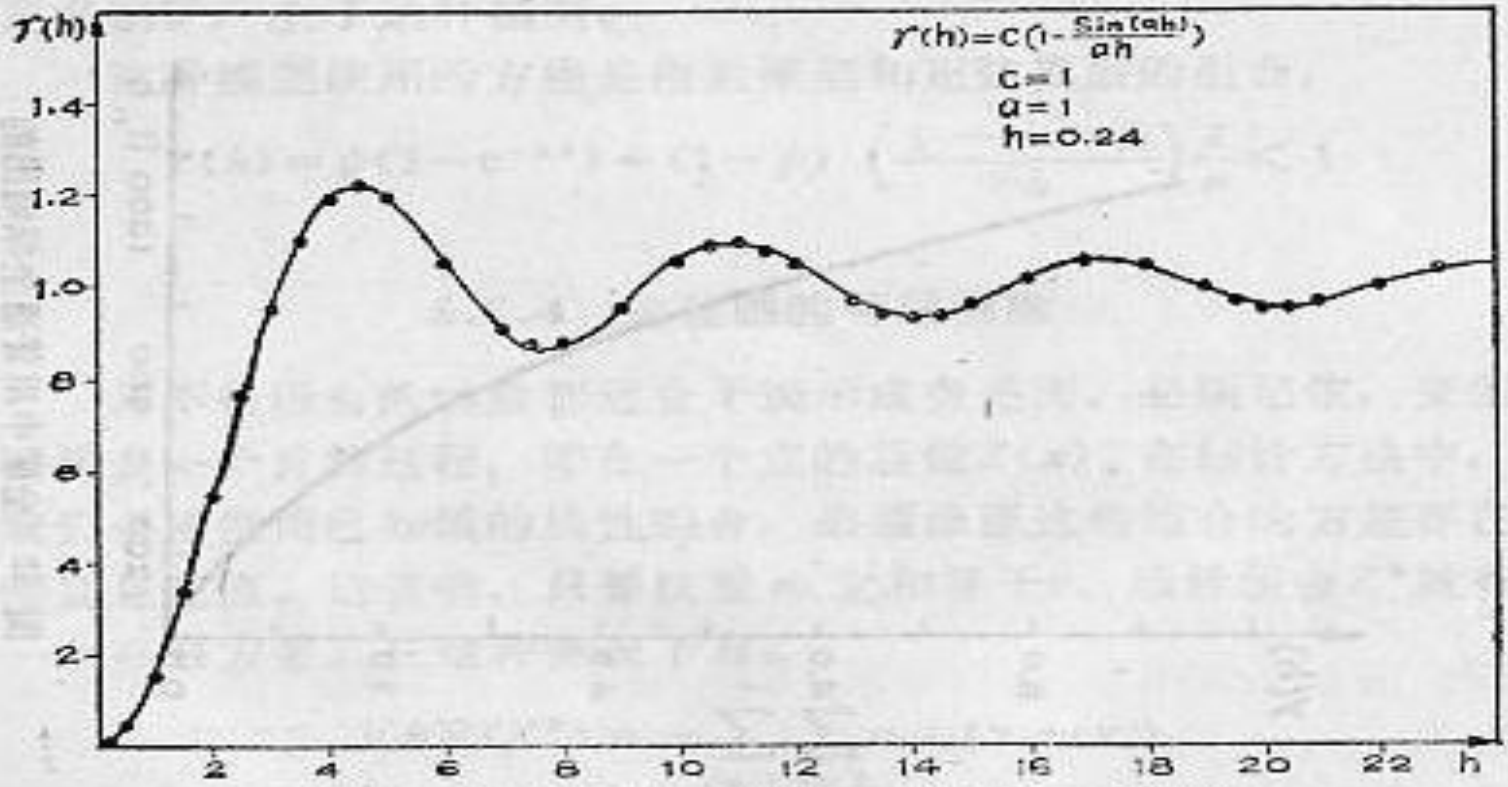
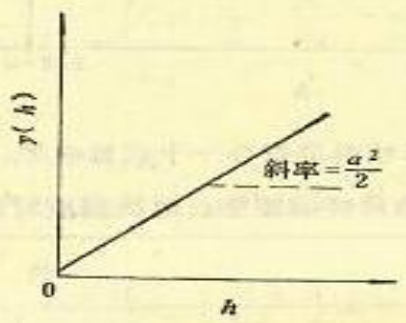


图 88 表示增长缓慢和有周期性孔穴效应的理论变差图
$\gamma(h) = C[1 - \sin(ah)/ah]$ 的图形

• 无基台值标准模型

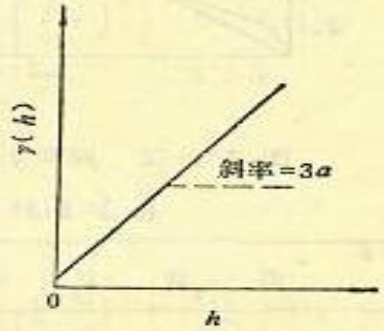
当区域化变量 $Z(x)$ 不满足二阶平稳时，它既无协方差函数，也无先验方差，这时，$\gamma(h)$ 在很大距离 h 内，不可能达到一个确定的值（即无基台值）。

$\gamma(h)=\frac{a^2}{2}h$



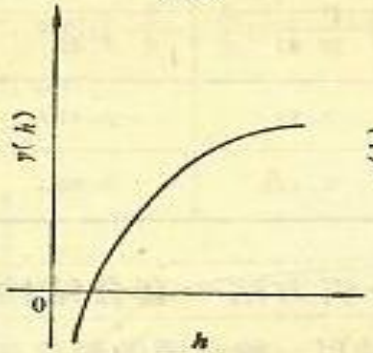
（a）

$\gamma(h)=\log h$

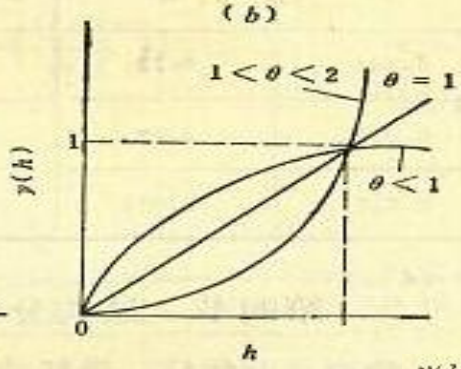


（b）

$\gamma(h)=3a\ln h$



（c）



（d）

$\gamma(h)=h^{\theta}$，$0<\theta<2$

无基台模型

• 变异函数结构分析

二、不同方向上的套合结构

以上讨论的是一个方向上各个结构的套合，当在几个方向上研究区域化变量时，就必须研究各个方向上的变异函数或协方差函数。

当一个矿化现象在各个方向上性质相同时称各向同性，反之称各向异性，它表现在$\gamma^*(h)$的不同方向上的差异。

1．各向异性的分类及其特征

各向异性按性质分为几何异向性及带状异向性两种。

（1）几何异向性（*geometric anisotropy*）。当区域化变量在不同方向上表现出变异程度相同而连续性不同时称为几何异向性，由于这种异向性可以经过简单的几何图形变换化为各向同性而得名。几何异向性具有相同的基台值C（设$C_0=0$）而变程a不同。见图（3-4-14*a*），不同方向上变异性之差可以变程之比表示之：

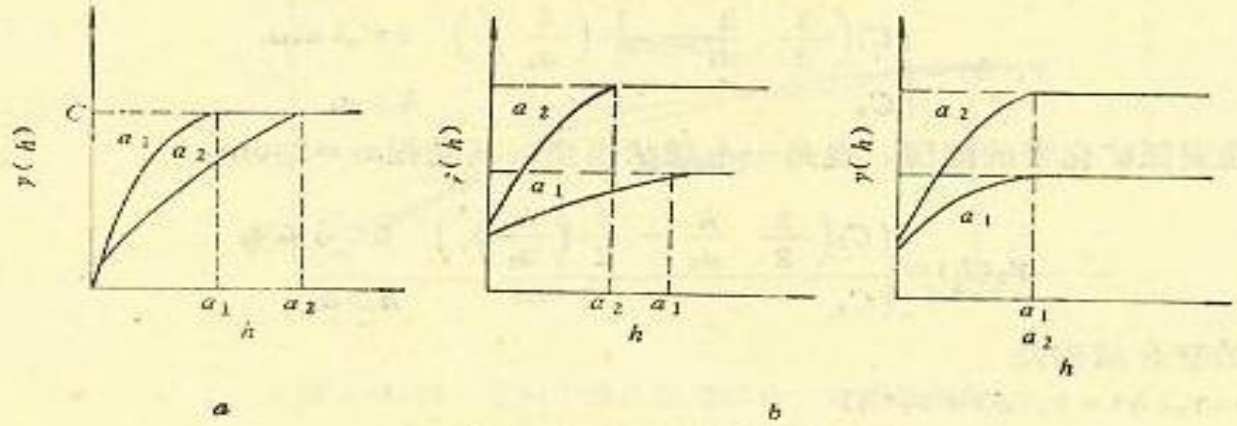


图 3-4-14　各向异性图

a—几何异向性；*b*—带状异向性

• 几何异向性结构的套合

几何异向性结构的套合

让我们以图（3-4-17）和图（3-4-18）为例来说明如何对几何异向性进行套合。

若以方向α_4的变程a_{α_4}为基础，则其余方向的变异与其相差的数值为：对于α_1，$K_1=a_{\alpha_1}/a_{\alpha_4}$；对于$\alpha_2$，$K_2=a_{\alpha_2}/a_{\alpha_4}$；对于$\alpha_3$，$K_3=a_{\alpha_3}/a_{\alpha_4}$。把这些差异引进理论模型中，就表现在矢量$h$的分量的差异上，考虑到图3-4-18($b$)为一椭圆，因此，只考虑长、短轴之间的差异，即$\alpha_4$与$\alpha_1$方向变异之差。

令α_4为u方向，α_1为v方向，且u与v互相垂直，这时，矢量h可以转换为：

$$h'=\sqrt{h_u^2+(K_1h_v)^2}$$

引入变换矩阵

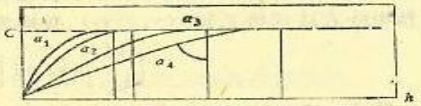


图 3-4-17　不同方向的半变异函数

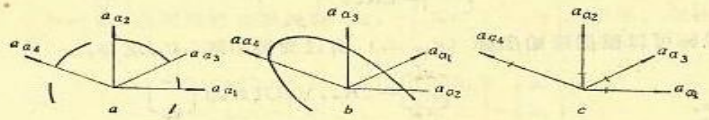


图 3-4-18　变程方向图

a—各向同性，b—几何异向性；c—带状异向性

$$A=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & K_1\end{bmatrix}$$

则

$$h'(h'_u,h'_v)=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & K_1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}h_u\\ h_v\end{bmatrix}$$

当用球状模型拟合时，可写成

$$\gamma(h')=C\left(\frac{3}{2}\frac{h'}{a_{\alpha_4}}-\frac{1}{2}\left(\frac{h'}{a_{\alpha_4}}\right)^3\right)$$

若存在块金效应，上式变成

$$\gamma(h')=C_0+C\left(\frac{3}{2}\frac{h'}{a_{\alpha_4}}-\frac{1}{2}\left(\frac{h'}{a_{\alpha_4}}\right)^3\right)$$

在新坐标h'下，可用一个统一的球状模型来拟合这4个几何异向性模型

$$\gamma(h')=\begin{cases}0 & h'=0\\ C_0+C\left[\frac{3}{2}\frac{h'}{a_{\alpha_3}}-\frac{1}{2}\left(\frac{h'}{a_{\alpha_3}}\right)^3\right] & 0<h'\leqslant a_{\alpha_3}\\ C_0+C & h'>a_{\alpha_3}\end{cases}$$

式中　$h'=\sqrt{h_u'^2+h_v'^2}=\sqrt{h_u^2+(K_1h_v)^2}$

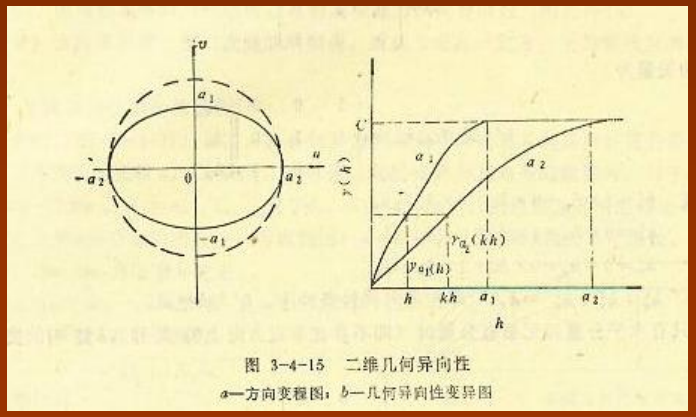


图 3-4-15　二维几何异向性

a—方向变程图；b—几何异向性变异图

•带状异向性结构的套合

（1）把垂向及水平方向的结构各自当作独立成分进入套合结构式，而在该结构模型中用变换矩阵区别不同方向上的变异函数值。具体做法是：先对垂向结构 $\gamma_1(h_w)$ 的坐标

$h=\begin{bmatrix}h_u\\h_v\\h_w\end{bmatrix}$ 选用线性变换矩阵 $A_w=\begin{bmatrix}0&0&0\\0&0&0\\0&0&1\end{bmatrix}$，于是，变换后的坐标 $h'=\begin{bmatrix}h'_u\\h'_v\\h'_w\end{bmatrix}=$

$\begin{bmatrix}0&0&0\\0&0&0\\0&0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}h_u\\h_v\\h_w\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\h_w\end{bmatrix}$，即 $h'_u=0$，$h'_v=0$，$h'_w=h_w$，这样，$\gamma_1(h')=\gamma_1(h'_u,\ h'_v,\ h'_w)$

$=\gamma_1(0,0,h_w)=\gamma_1(h_w)=\gamma_1(\sqrt{h'^2_u+h'^2_v+h'^2_w})=\gamma_1(|h'|)$ 就是三维各向同性的。

对于水平方向二维各向同性结构 $\gamma_2(\sqrt{h_u^2+h_v^2})$，可对其坐标

$h=\begin{bmatrix}h_u\\h_v\\h_w\end{bmatrix}$ 选用线性变换矩阵 $A_{uv}=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{bmatrix}$，于是，变换后的坐标为

$$h''=\begin{bmatrix}h''_u\\h''_v\\h''_w\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}h_u\\h_v\\h_w\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}h_u\\h_v\\0\end{bmatrix}$$

即 $h''_u=h_u$，$h''_v=h_v$，$h''_w=0$，则

$$\begin{aligned}\gamma_2(h'')&=\gamma_2(h''_u,h''_v,h''_w)=\gamma_2(h_u,h_v,0)\\&=\gamma_2(h_u,h_v)=\gamma_2(\sqrt{h_u^2+h_v^2})\\&=\gamma_2(\sqrt{h''^2_u+h''^2_v+h''^2_w})\\&=\gamma_2(|h''|)\end{aligned}$$

就是三维各向同性的了。

最后，把两者进行套合构成一个统一的各向同性结构

$$\begin{aligned}\gamma(h)&=\gamma_1(|h'|)+\gamma_2(|h''|)\\&=\gamma_1(h_w)+\gamma_2(\sqrt{h_u^2+h_v^2})\end{aligned}$$

•比例效应

6.4.4 比例效应

以斑岩钼矿的研究为代表（6.4.2节），比例效应概略地叙述为当样品的平均值增大时变差图的基台（即样品的方差）也增加。这种关系更实际的观察可由作图得到，对每个变差图（每个钻孔情况），用计算变差图的那些样品的平均品位相对同样样品的标准差去点图。由图130可以看出在m和σ之间存在线性关系，换句话说，变异系数σ/m显然是个常数。

许多矿床中都遇到了类似的情况。图131中的16个点对应于斑岩铜矿中每个大约10×10^6t的16个矿带。很显然，一个带内的样品的标准差直接正比于它们的平均品位。图132表示了一个不同类型钼矿床类似关系。还有许多其它的例子。这就是通常所说的比例效应，而且它可能和样品品位的对数正态分布有关系。

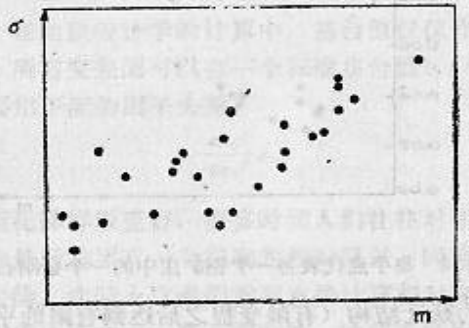


图 130 检验钼矿床中，一组金刚石钻孔样品平均值关于样品标准差的图形，表示比例效应

考虑整个矿床，我们可以写成：

$$\sigma^2(0/D)=Am_0^2$$

其中m_0是总体平均值，A是常数。

对于一个子集合i，我们有：

$$s^2(0/i)=Am_i^2 \qquad A=\sigma^2(0/D)/m_0^2$$

如果我们写$\sigma^2(0/D)=\sigma_0^2$，则可以重新写$\gamma_i(h)$：

$$\gamma_i(h)=s^2(0/i)\left(\frac{3h}{2a}-\frac{1h^3}{2a^3}\right)=\frac{m_i^2}{m_0^2}\left\{\sigma_0^2\left(\frac{3h}{2a}-\frac{1h^3}{2a^3}\right)\right\}$$

今后，在地质统计学的计算中，基台值仅仅作为乘数因子出现。因此，所有变差图可以有一个标准基台值1，个别的结果无论如何总要用下面的因子去乘：

$$\frac{m_i^2}{m_0^2}\sigma_0^2$$

- 相对变异函数改正

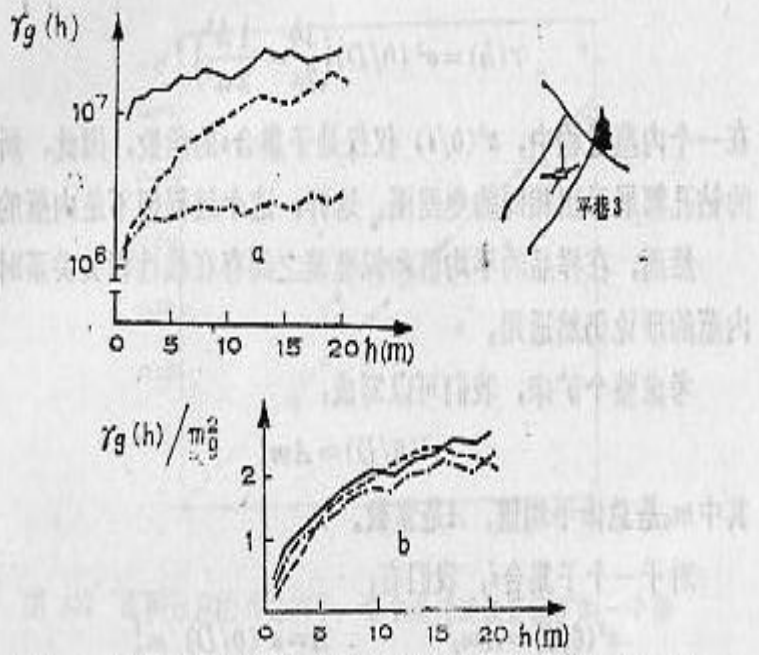


图 133 由于比例效应的出现而产生各向异性，在这个例子中容易修正，例子取自意大利诺瓦扎铀矿床，a表示原始数值变差图，b表示相对值的变差图

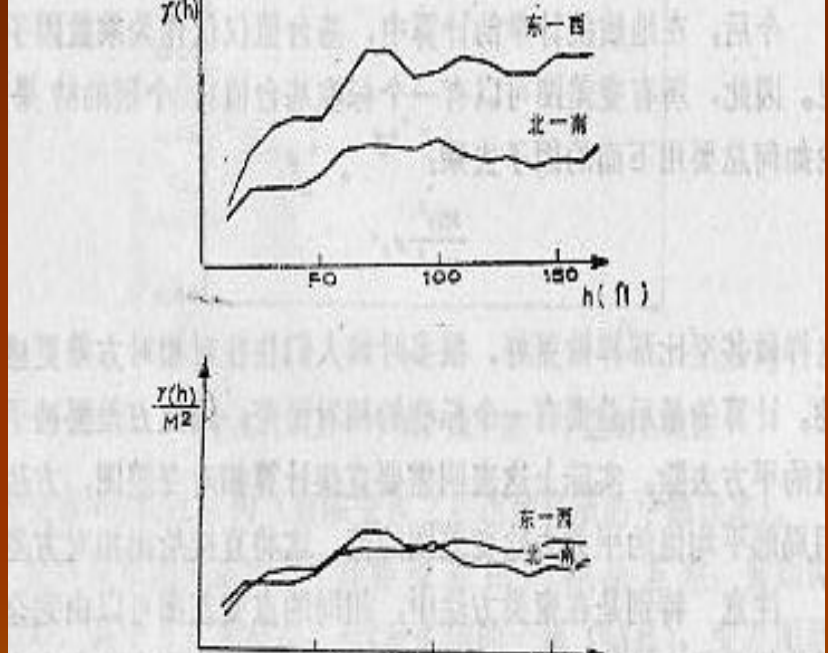


图 134 说明同图133，数据取自加拿大斑岩铜矿

• 变异函数的套合

在实际工作中区域化变量的变化很复杂，它可能在不同的方向上有不同的变化性,或者在同一方向包含着不同尺度上的多层次的变化性，因此无法用一种理论模型来拟合它，为了全面地了解区域化变量的变异性，就必须进行结构分析。所谓结构分析就是构造一个变异函数模型，对全部有效结构信息作定量化的概括，以表征区域化变量的主要特征。结构分析的主要方法是套合结构，就是把分别出现在不同距离 h 上和不同方向上同时起作用的变异性组合起来。套合结构可以表示为多个变异函数之和,每一个变异函数代表一种特定尺度上的变异性，其表达式为：

$$\gamma(h)=\gamma_0(h)+\gamma_1(h)+\cdots+\gamma_n(h)$$

在几个方向上研究区域化变量时，当一个矿化现象在各个方向上性质相同时称各向同性，反之称各向异性，它表现为变异函数在不同方向上的差异。各向异性按性质可划分为几何异向性和带状异向性两种。

• 普通克立格法(Ordinary Kriging)

对于任何一种估计方法，都不能要求计算的平均品位估计值 Z^* 和它的实际值 Z 完全一样，也就是说，偏差 $\phi = Z - Z^*$ 将是不可避免的，然而，我们要求一种估计方法应当满足下面两点：

（1）所有估计块段的实际值 Z 与其估计值 Z^* 之间的偏差平均为 0，即估计误差的期望应该等于 0：

$$E(Z - Z^*) = 0$$

我们称这种估计是无偏的。无偏是指：平均说来品位的任何过高或过低的估计，以及由此引起矿石储量的过高或过低都是危险的，因此应该尽量避免。

（2）块段的估计品位与实际品位之间的单个偏差应该尽可能小，即误差平方的期望值（估计方差）

$$\delta^2 = Var(Z - Z^*) = E[(Z - Z^*)^2]$$ 应该尽可能的小。

• 普通克立格方程组

$$\begin{cases} \sum_{\beta=1}^{n} \lambda_\beta \bar{C}(v_\alpha, v_\beta) - \mu = \bar{C}(v_\alpha, V) \\ \sum_{\alpha=1}^{n} \lambda_\alpha = 1 \end{cases} \qquad (\alpha = 1,2,\cdots, n)$$

它是一个 n+1 个未知数（n 个λ_α和一个 μ），n+1 个方程的方程组。在内蕴假设下，式（3--5）

可用$\gamma(h)$表示如下：

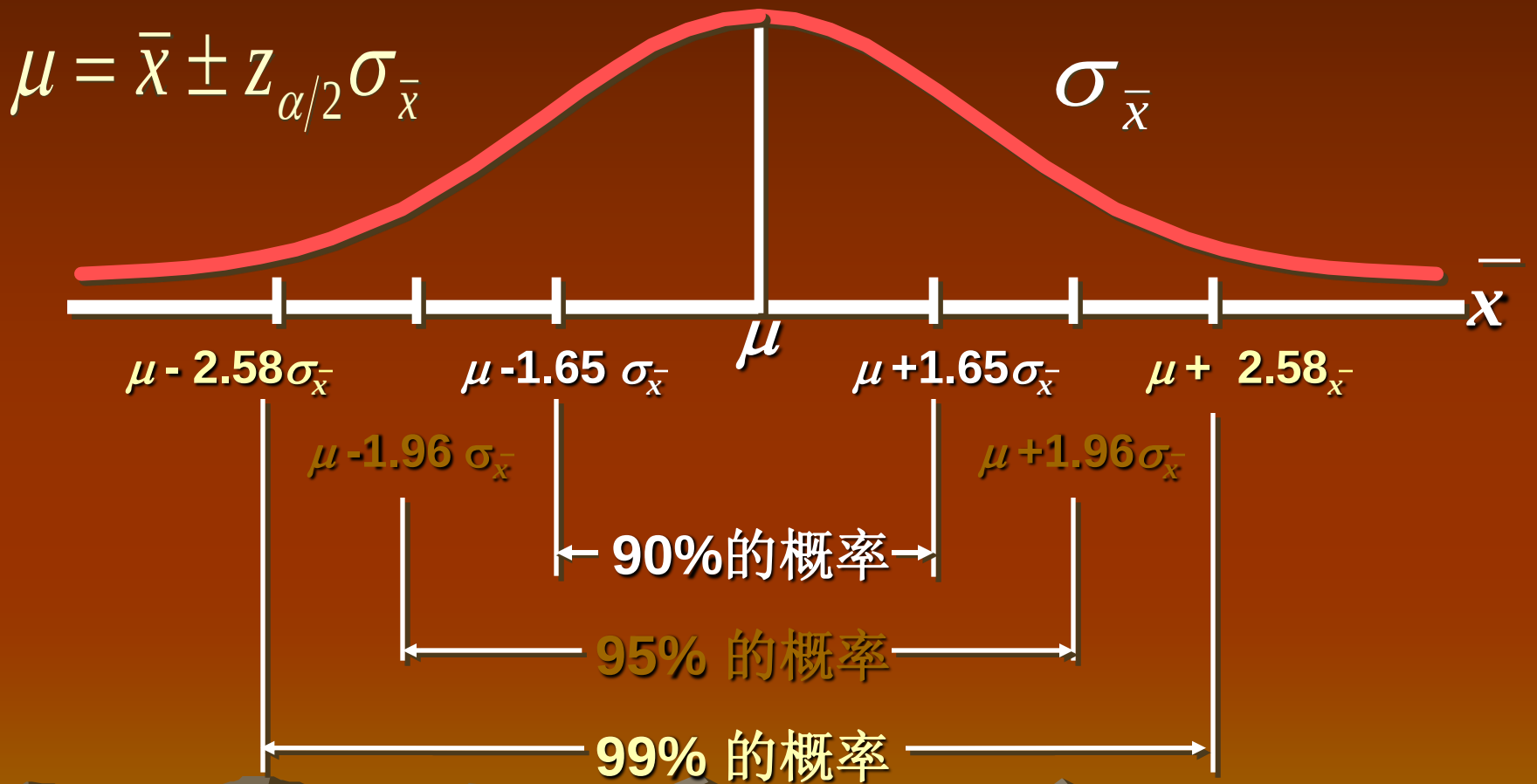
$$\begin{cases} \sum_{\beta=1}^{n} \lambda_\beta \bar{\gamma}(v_\alpha, v_\beta) + \mu = \bar{\gamma}(v_\alpha, V) \\ \sum_{\beta=1}^{n} \lambda_\beta = 1 \end{cases} \qquad (\alpha = 1,2,\cdots, n)$$

克立格方差，记为δ_K^2

$$\delta_K^2 = \bar{C}(V,V) - \sum_{\alpha=1}^{n} \lambda_\alpha \bar{C}(V, v_\alpha) + \mu$$

若用$\gamma(h)$表示，则为：$\delta_K^2 = \sum_{\alpha=1}^{n} \lambda_\alpha \bar{\delta}(V, v_\alpha) + \mu - \bar{\gamma}(V,V)$

正态分布的误差图示


$\mu = \bar{x} \pm z_{\alpha/2}\sigma_{\bar{x}}$
$\sigma_{\bar{x}}$
$\bar{x}$
μ
μ - 2.58$\sigma_{\bar{x}}$
μ -1.65 $\sigma_{\bar{x}}$
μ +1.65$\sigma_{\bar{x}}$
μ + 2.58$_{\bar{x}}$
μ -1.96 $\sigma_{\bar{x}}$
μ +1.96$\sigma_{\bar{x}}$
90%的概率
95% 的概率
99% 的概率

泛克立格法(Universal Kriging)

与普通克里格方程组及方差的推导类似，我们可以得到估计 $Z(x)$ 的泛克里格方程组

$$\begin{cases}\sum_{\beta=1}^{n}\lambda_\beta C(x_\alpha,x_\beta)-\sum_{l=0}^{k}\mu_l f_l(x_\alpha)=C(x_\alpha,x) \\ \sum_{\alpha=1}^{n}\lambda_\alpha f_l(x_\alpha)=1\end{cases} \quad (\alpha=1,2,\ldots,n),(l=0,1,2,\ldots,k)$$

相应的泛克里格方差为

$$\sigma_{UK}^2=C(x,x)-\sum_{\alpha=1}^{n}\lambda_\alpha C(x_\alpha,x)+\sum_{l=0}^{k}\mu_l f_l(x)$$

漂移一般用多项式表示

$$m(x)=\sum_{l=0}^{k}a_l f_l(x)$$

普通克立格方程组

$$\begin{cases}\sum_{\beta=1}^{n}\lambda_\beta \overline{C}(v_\alpha,v_\beta)-\mu=\overline{C}(v_\alpha,V) \\ \sum_{\alpha=1}^{n}\lambda_\alpha=1\end{cases} \quad (\alpha=1,2,\cdots,n)$$

克立格方差记为 δ_K^2

$$\delta_K^2=\overline{C}(V,V)-\sum_{\alpha=1}^{n}\lambda_\alpha\overline{C}(V,v_\alpha)+\mu$$

当为线性漂移时，在一维条件下

$$m(x)=a_0+a_1x$$

在二维条件下

$$m(x,y)=a_0+a_1x+a_2y$$

在三维条件下

$$m(x,y,z)=a_0+a_1x+a_2y+a_3z$$

当为二次漂移时，一维、二维、三维分别表示为：

$$m(x)=a_0+a_1x+a_2y$$

$$m(x,y)=a_0+a_1x+a_2y+a_3xy+a_4x^2+a_5y^2$$

$$m(x,y,z)=a_0+a_1x+a_2y+a_3z+a_4xy+a_5xz+a_6yz+a_7x^2+a_8y^2+a_9z^2$$

在采矿实践中，使用线性漂移就足够了。

• 指示克立格法(Indicator Kriging)

在地质、物化探数据处理及矿产储量计算中影响计算精度的因素有很多，但主要有以下几个问题：

（1） 特异值的出现，所谓特异值是指那些比全部数值的平均值或中位数高得多的数值，它既非分析误差所致，也非采样方法等人为误差引起，而是实际存在于所研究的母体之中。这些特异值只占全部数据的极少部分，但却控制了总金属资源量的很大比例。

（2） 在一个研究区域或一个矿床中存在几个不同类型的矿化作用，这也影响了品位和储量的精确估计。

为了解决上述问题，指示克立格法应运而生，它是在不必去掉重要而实际存在的高值数据的条件下来处理不同的现象，而且给出在一定风险概率条件下未知量 Z(x)的估计值及空间分布。

指示克里格法是一种非参数地质统计学方法。 它是根据一系列的临界值（threshold）例如边界品位 z，先对原始数据 Z(x) 如下公式进行转换

$$i(x;z)=\begin{cases}1, & Z(x)\le z\\ 0, & Z(x)>z\end{cases}$$

然后对转换后的数值求变异函数、进行克立格估值。

• 指示克立格法(Indicator Kriging)

$$i(x;z)=\begin{cases}1, & Z(x)\le z\\ 0, & Z(x)>z\end{cases}$$

在边界品位 z 的条件下，随机函数 I(x，z)服从二项分布，其期望值是：

$$E\{I(x,z)\}=\text{Prob}\{Z(x)\leqslant z\}$$

变异函数为：$\gamma_I(h;z)=\frac{1}{2}E\{[I(x+h,z)-I(h;z)]^2\}$

$$=C_I(0;z)-C_I(h;z)$$

待估点的指示估计值表示为：

$$i^*(x;z)=\sum_{\alpha=1}^{n}\lambda_\alpha(z)i(x_\alpha;z)$$

$i^*(x;z)$ 的值介于 0 和 1 之间，表示为随机变量 $Z(x)\le z$ 的概率。

指示克立格方程组：

$$\begin{cases}\sum_{\beta=1}^{n}\lambda_\beta(z)C_i(x_\alpha,x_\beta;z)+\mu=C_i(x_\alpha,x;z)\\ \sum_{\alpha=1}^{n}\lambda_\beta(z)=1 \qquad\qquad \alpha=1,2,\cdots,n\end{cases}$$

指示克立格方差：

$$\sigma_{IK}^2=C(x,x;z)-\sum_{\alpha=1}^{n}\lambda_\alpha C(x_\alpha,x;z)+\mu$$

•协同克里格法（Co-Kriging）

以上克立格估值方法都只考虑用一个变量对未知点进行估值。在某些情况下，一个数据集往往含有多个变量，当某一个变量的取样量不足以获得所需精度的估计量，而其它变量却有较充足的取样量时，如果前者和后者存在空间相关性，则前者称为主变量，后者称为次级变量。协同克里格法就是通过研究主变量与次级变量之间的空间相互关系，借助次级变量的样品信息以提高对主变量的估计精度。例如在地质、采矿及其他自然现象的研究中，在一个区域的地球化学观测中，Au、Ag、As 的含量呈正相关，即在样品中 Au 含量高，Ag 和 As 的含量也不同程度的增高。由于一些样品中缺少 Au 的化验值，这时可利用 Ag 或 As 的化验值对 Au 进行估计。Au、Ag、As 是在同一空间领域中定义的区域化变量，它们之间既有空间相关性，又有统计相关性，则称 Au、Ag、As 是同时区域化的。所谓协同区域化是指那些在统计意义及空间位置上均具有某种程度相关，并且定义于同一空间域中的区域化变量。

协同区域化变量可以用一组 K 个相关的区域化变量 $\{Z_1(x), Z_2(x), \cdots Z_k(x)\}$ 来表示，即它是一个随机场。研究协同区域化变量的空间相关关系使用互变异函数。

对于每一个区域化变量 $Z_k(x)$ 及 $Z_{k'}(x)$ $(k, k' = 1, 2, \cdots K)$ 之间的互变异函数为：

$$\gamma_{k'k}(h) = \frac{1}{2} E\{[Z_{k'}(x+h) - Z_{k'}(x)] \cdot [Z_k(x+h) - Z_k(x)]\}$$

其中：$h, h' = 1, 2, \cdots, K$

• 协同克里格法（Co-Kriging）

协同克立格法的任务是应用估计邻域内定义于支撑$\{v_{\alpha_1}\}$上的有效数据$\{Z_{\alpha_k}, \alpha_k = 1, 2, \cdots, n_k\}$。来估计中心点在$x_0$的待估域$V(x_0)$的估计值$Z_{V_{k0}}^*$：

$$Z_{V_{k0}}^* = \sum_{k=1}^{K} \sum_{\alpha_k=1}^{n_k} \lambda_{\alpha_k} Z_{\alpha_k}$$

•协同克里格法（Co-Kriging）

协同克立格方程组为：

$$
\begin{cases}
\sum_{k'=1}^{K}\sum_{\beta_{k'}=1}^{n_{k'}}\lambda_{\beta_{k'}}C_{k'k}(v_{\beta_{k'}},v_{\alpha_k})-\mu_k=C_{k_0k}(V_{k0},v_{\alpha_k}) \\
\qquad\qquad \alpha_k=1,2,\cdots n,k=1,2,\cdots,k \\
\sum_{\beta_{k0}}^{n_{k0}}\lambda_{\beta_{k0}}=1 \\
\sum_{\beta_k}^{n_k}\lambda_{\beta_k}=0 \qquad\qquad k\neq k_0
\end{cases}
$$

•协同克里格法（Co-Kriging）

协同克立格估计方差为：

$$\sigma^2_{v_{k0}} = C_{k_0k_0}(V_{k_0}, V_{k_0}) + \mu_{k_0} - \sum_{k=1}^{K}\sum_{\alpha_k=1}^{n_k} \lambda_{\alpha_k} C_{k_0k}(V_{k_0}, v_{\alpha_k})$$