

地球化学数据 处理与图件编制方法流程

编写人:刘红杰

QQ:498236930

内蒙古第三地质矿产勘查开发院

一、指导思想

成矿地质背景地球化学研究就是从地球化学特征出发,借助已建立的地球化学信息提取技术,充分利用地球化学调查所获得的海量数据信息,提取有关反应成矿地质背景条件的地球化学信息,并编制相应地球化学图及相应的推断解释图件,为资源潜力评价有关成矿地质背景的研究提供地球化学支撑。

二、工作内容

(一) 基础图件

成矿地质背景条件的地球化学信息提取首先是要编制有关基础地球化学图件。主要有:

1. 单元素(化合物)地球化学图
2. 地球化学组合异常图
3. 地球化学综合异常图

(二) 解释推断图件

地球化学解释推断图件,内容包括:

1. 地球化学推断解译地质图
2. 地球化学找矿预测图

三、工作方法

(一) 数据校正处理

1|数据检查的必要性,因为实验室的分析报告还是手工输入的,还是存在录入错误的,我们重点检查的是“>”,数据中间的空格等录入错误问题;另外还有畸变检查,数据的特大值,比如超过 10 倍变差,一般对这样的分析值实验室会很重视的,你也可以提出让他们再确认一下,做到心中有数。另一类错误可能会是我们录入样号或者坐标时出现的错误,如:“56b” 写成 “56 b”,程序是以空格分开数据的,数据如果写成这样就会产生错误结果,有时在完成处理后才可能发现,这样一来我们前面的工作就作废了。所以数据检查是非常必要的。

2|异常下限值的确定采用逐渐剔除法：①计算全区各元素原始数据的均值(X)和标准偏差(S)；②按 $X \pm 3S$ 的条件剔除一批高值后获得一个新数据集,再计算此数据集的均值(X2)和标准偏差(S2)；③重复第二步，直至无特高值点存在，求出最终数据集的均值(X)和标准偏差(S),则 X 做为背景平均值，S 为标准离差，T(异常下限值)= X (背景平均值)+2S(标准离差)求出理论异常下限值，再结合地球化学等量线、地质背景及圈定效果确定出实用异常下限值。

3|重复样品合格率统计野外重采样品以密码样形式插入样品中进行了分析，结果(C₂)与第一次分析结果(C₁)进行了比对。计算两次分析值之间的相对偏差 (RE%)，具体计算采用如下公式： $RE\% = |C_1 - C_2| / (C_1 + C_2) \times 100\%$ ，当 RE<33.3% 时为合格，合格率=合格样品/总样品数×100%。总合格率大于 80%。

推荐软件：GeoExpl, MapGIS, Geoipal.64 .Suffer

(二) 坐标投影变换

在坐标投影变换和成图时经常出现的是将“源数据投影参数”的单位、比例尺弄错的情况，比如把数据直接转换成结果投影的单位等，这些是不需要做的，我们一般工作默认用的投影参数就是我们的地图参数，比如“投影平面直角坐标，北京 54，高斯-克吕格投影坐标系”或者“投影平面直角坐标，西安 80，高斯-克吕格投影坐标系”，实际工作的坐标单位一般用米，比如我们要成 5 万图，那参数设置就是：

源数据投影参数，比例尺：1，坐标单位：米，21 度带

结果投影参数，比例尺：50000，坐标单位：毫米，21 度带

推荐软件：GeoExpl, MapGIS ,Geoipal.64

(三) 数据网格化

离散数据网格化处理是空间数据插值的一种，即把无规则分布的空间数据内插为规则分布的空间数据集。网格数据是编制地球化学图件的重要数据源。

网格化处理一般包括这样几个过程：①空间几何属性的确定；②插值方法(模型)的选择；③空间数据的探索分析，包括对数据的均值、方差、协方差、独立性和变异函数的估计等；④插值方法评价；⑤重新选择内插方法，直到合理。

网格化数据处理中要确定主要参数包括：

1. 网格距：根据采样密度确定,一般网格距应与采样密度一致；
2. 数据搜索半径：一般选择网格距的 2.5 倍；
3. 数据计算模式：最近点或距离指数加权；

参数数据的选择可根据不同研究目的改变。一个工区的数据都要统一网格化，如计算模型、搜索范围和网格化参数，程序已经设置成批处理，可以一次全部做完。这主要是为了方了满足便组合异常，叠加处理时数据要求统一的要求。

推荐软件系统：GeoExpl, MapGIS ,Geoipas1.64

(四) 基础图件编制

1. 单元素地球化学图

编图要素

(1) 等值线图通常是取 $\log 0.1$ 间隔，如果变化不大，线很少，比如氧化物，我们会加密取 $\log 0.05$ 的间隔。地球化学图的轮廓左侧放置全区和各地层子区的元素含量分布直方图，直方图含量坐标一律取对数，其组距采用 $0.11 \mu\text{g/g}$ 或 ng/g 。地球化学图轮廓右侧放置制图方法数据表。内容包括样品性质、分析方法、分析检查限等参数。

(2) 1:20 化探规范上要求为 7 级色标，1:5 化探规范上要求的是 5 级色阶。

(3) 分级色阶选取：以冷色调（兰色）作为低值区，随着数据增大，颜色变暖，由兰(62)－浅蓝(61)－浅黄(127)－淡红(171)－深红(174)。各省可根据本省元素地球化学特征和推断解释的需要作适当调整。

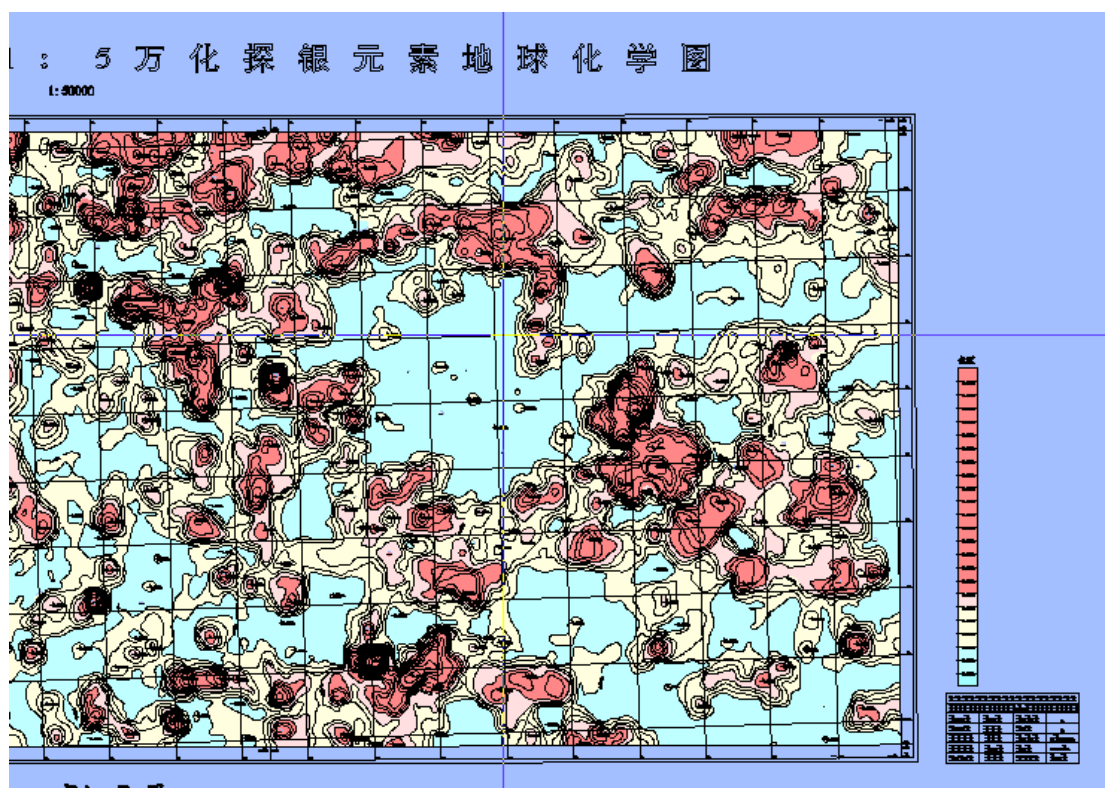
(4) 如 Au 的最高值为 38.4，可在对数色阶时值域为 8。填不到 38.4，因为网格化后的最大最小值就不是原来的那个值了，因为网格化会对数据有一个削峰。比如极值，我们可以手动加上这个极值；

(5) $\log 0.1$ 的间隔是指对数是按 0.1 来做，我们实际上应用时是按原始值，比如在 0.001-10000 范围内的值，我们标注的等值线值如下：

0.001 0.0012 0.0015 0.002 0.0025 0.003 0.004 0.005 0.006 0.008
0.01 0.012 0.015 0.02 0.025 0.03 0.04 0.05 0.06 0.08
0.1 0.12 0.15 0.2 0.25 0.3 0.4 0.5 0.6 0.8
1.0 1.2 1.5 2.0 2.5 3.0 4.0 5.0 6.0 8.0
10 12 15 20 25 30 40 50 60 80
100 120 150 200 250 300 400 500 600 800
1000 1200 1500 2000 2500 3000 4000 5000 6000 8000 10000

推荐软件系统: Surfer GeoExpl, MapGIS ,Geoipas1.64

图件样例:



图一 单元素地球化学图样式

2. 组合异常图

编图要素

(1) 聚类分析谱系图是一个化探元素相关性的关系图，我们可以按照相关性好的来组合异常，另外我们主要还是考虑到通常的元素组合分组情况。

(2) 元素按迭代法确定异常下限。

一张图上可选择 3-5 个元素，以异常下限为基准，可划分 2-3 条浓度带，每种元素通过不同颜色的线区别。

3. 因子分析及聚类分析谱系图

全区地层数据用聚类分析统计元素相关性，异常区用因子分析统计数值与地质地层，岩浆岩侵入关系相关联，更好的揭示元素的共生组合特点。

(1) 因子分析

利用元素原始数据集对元素进行因子分析，取特征根较大且累计贡献率达 80%~85% 以上的前若干因子选做主要因子。

对选定前若干因子模型做最大方差旋转，确定主因子模型。

推荐软件系统：GeoExpl, SPSS, SAS, Geoipas1.64

GeoExpl 软件应用示范：

在 GeoExpl 软件的“数据处理分析”模块中，选择“多元分析”—>“因子分析”功能（如图二）。

在多元素数据表中，选择分析元素（不少于 3 个，可根据研究目的选择元素组合。不要选择元素以外的变量，如坐标、ID 等），设定好横、纵坐标，点击“特征值输入”设置分析结果的保存位置，最后点击“因子分析”，系统将自动计算因子元素特征值，即元素特征根和特征根百分比。运算完成后将弹出“确定因子个数”的窗口，推荐按特征根累计百分比大于 80% 的个数输入（如图三）。



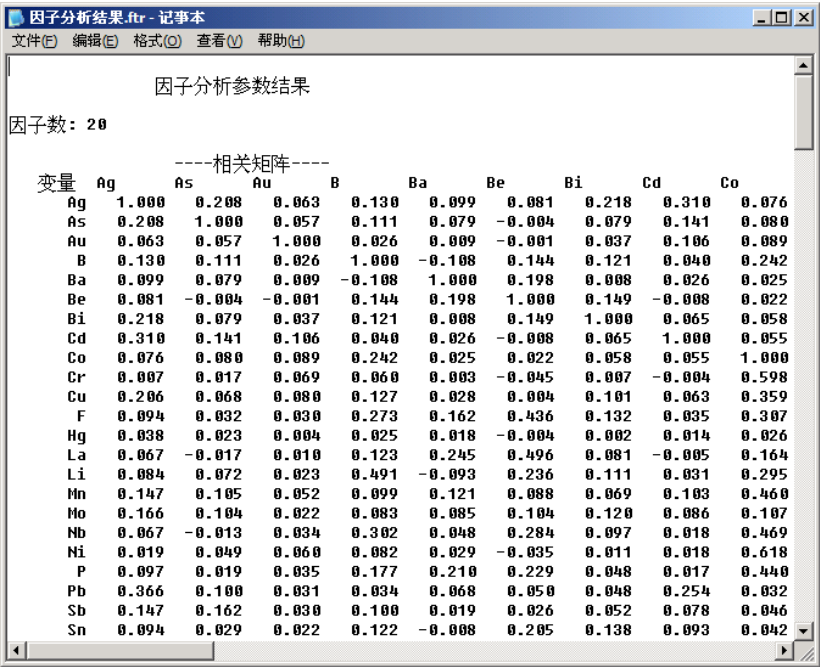
图二 因子分析模块



图三 确定因子个数

确定后软件将自动进行因子分析处理计算，计算结果将输出相关矩阵、特征根、特征向量、初始因子矩阵和旋转因子（载荷）矩阵，以及初始因子得分和旋转因子得分表。（旋转因子与初始因子的差别主要在于旋转因子使复杂的矩阵变

得更简单，分组更明显，易于地质解释，因此一般采用旋转因子的结果进行解释分析)。分析结果将保存为 **flr** 文件，该文件可以用记事本等文本工具直接打开(如图四)。



图四 因子分析参数结果

将“旋转因子矩阵”导入 Excel 表中得到更为直观的结果（如图五）。

	A	B	C	D	E	F	G	H	
1	序号	变量	因子1	因子2	因子3	因子4	因子5	因子6	因
2	1	Ag	0.042	-0.005	-0.075	-0.544	-0.066	0.114	-0.
3	2	As	0.182	-0.059	-0.024	-0.048	-0.357	0.106	0.
4	3	Au	0.117	-0.006	-0.015	-0.007	-0.043	0.012	0.
5	4	B	0.225	0.005	0.049	0.039	-0.851	0.01	-0.
6	5	Ba	0.06	-0.072	0.117	-0.261	0.03	-0.033	-0.
7	6	Be	-0.225	-0.215	0.227	-0.054	-0.095	0.084	0.
8	7	Bi	-0.007	-0.087	-0.003	-0.186	-0.023	0.086	0.
9	8	Cd	0.029	-0.005	-0.548	-0.408	0.073	0.059	0.
10	9	Co	0.9	-0.067	-0.14	-0.045	-0.049	0.084	0.
11	10	Cr	0.849	0.086	-0.036	0.056	-0.228	0.047	0.
12	11	Cu	0.283	0.039	-0.018	0.008	0.02	0.879	-0.
13	12	F	0.084	-0.515	-0.074	-0.168	-0.305	0.125	0.
14	13	Hg	0.017	0.055	0.001	-0.039	0.001	-0.01	0.
15	14	La	-0.053	-0.756	0.129	0.065	0.049	-0.01	0.
16	15	Li	0.233	-0.267	-0.275	-0.16	-0.57	-0.008	-0.
17	16	Mn	0.734	-0.264	-0.023	-0.169	0.078	0.03	-0.
18	17	Mo	0.053	-0.172	-0.092	-0.039	0.07	0.089	-0.
19	18	Nb	0.293	-0.816	-0.022	-0.047	-0.068	0.014	-0.
20	19	Ni	0.87	0.057	-0.094	0.048	-0.25	0.05	0.
21	20	P	0.473	-0.598	-0.076	-0.045	-0.184	0.047	-0.
22	21	Pb	0.026	-0.062	0.02	-0.809	-0.021	0.021	0.
23	22	Sb	-0.011	0.018	-0.091	-0.014	-0.022	0.005	0.
24	23	Sn	-0.036	-0.173	-0.06	-0.18	-0.081	0.693	0.

图五 旋转因子矩阵

利用因子载荷矩阵，确定各因子的组合，一般来说，对应元素因子载荷越大，对这个因子的贡献也越大，并说明包含该元素的信息量越多。按照载荷值大小对元素排序，一般取载荷绝对值 >0.5 或 >0.6 的元素作为该因子元素组合。

(2) 编制聚类分析谱系图,以 SPSS 为例:

聚类分析数据 - SPSS Data Editor

File Edit View Data Transform Analyze Graphs Utilities Window Help

11 : 锶 0.331

	铝	钙
1	4.51	3.79
2	4.76	4.39
3	5.49	4.83
4	4.55	4.39
5	5.11	4.16
6	4.97	4.26
7	5.02	4.23
8	4.41	4.07
9	4.69	5.48
10	5.20	5.01
11	4.97	4.61
12	4.85	4.13

Reports
Descriptive Statistics
Tables
Compare Means
General Linear Model
Mixed Models
Correlate
Regression
Loglinear
Classify
Data Reduction
Scale
Nonparametric Tests
Time Series
Survival
Multiple Response
Missing Value Analysis...

TwoStep Cluster...
K-Means Cluster...
Hierarchical Cluster...
Discriminant...

13 3.19 5.72
10 3.09 4.96
16 3.33 3.68
17 2.89 5.35
18 2.88 4.84
12 3.03 4.84
17 3.06 4.39
11 2.85 4.99
15 2.75 4.38

11 : 锶 0.3311

File Edit View Data Transform Analyze Graphs Utilities Window Help

11 : 锶 0.3311

Hierarchical Cluster Analysis

Variable(s):
铝
钙
铁
钾
镁
钠

Label Cases by:

Cluster
☐ Cases ☒ Variables

Display
☒ Statistics ☒ Plots

Statistics... Plots... Method... Save...

19 6.94 5.61 9.39 2.05 6.07
20 7.20 6.03 11.04 2.23 5.92
21 6.84 5.86 10.84 1.80 5.54

磷 钡 锰 锶 钛

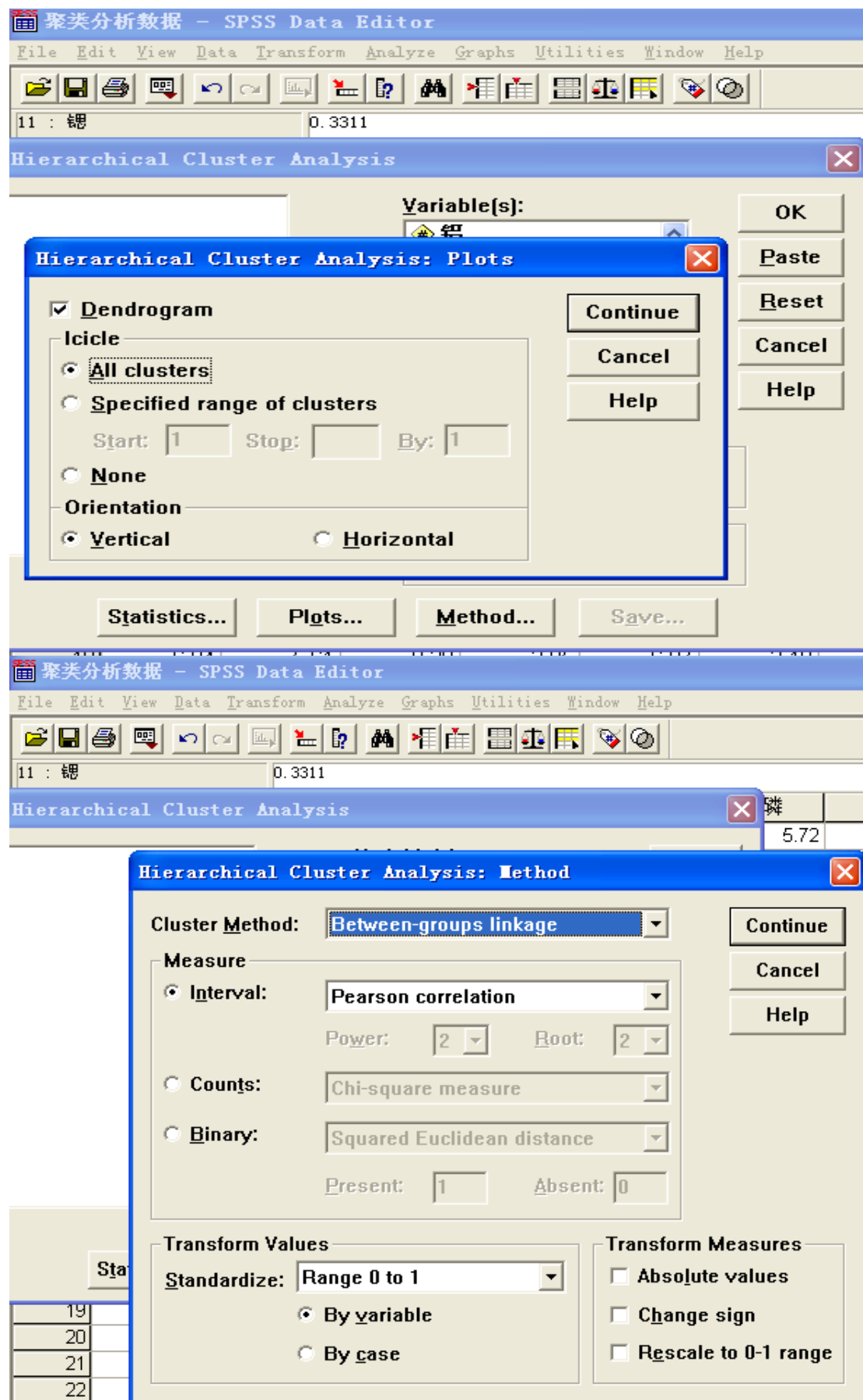
5.72	.47	1.18	.36	2.21
4.96	.53	.98	.37	2.26
3.68	.56	.97	.38	2.62
5.35	.46	1.13	.35	2.51
4.81	.52	1.07	.35	2.31
4.59	.50	1.09	.34	2.61
3.68	.47	1.00	.33	2.38
2.98	.44	.85	.30	2.02
4.64	.48	1.17	.35	2.70

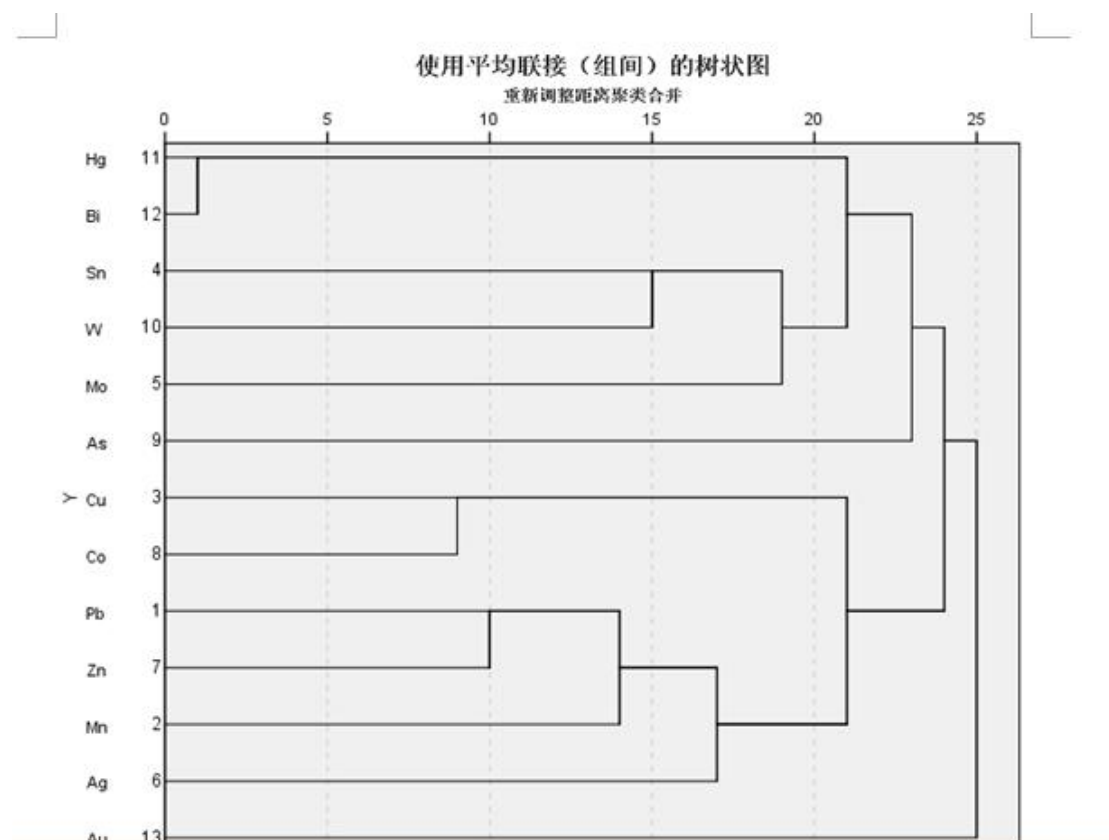
Hierarchical Cluster Analysis: Statistics

☒ Agglomeration schedule
☒ Proximity matrix

Cluster Membership
☐ None
☒ Single solution: 4 clusters
☐ Range of solutions: From through clusters

Continue
Cancel
Help





注:SPSS 软件生成的谱系图的量纲系统默认为 25,数值各改为 0-1 即可。

4. 综合异常图

编图要素

- (1) 简化地理图（以素图的方式表示）；
- (2) 地质矿产简化图；
- (3) 按多元素的综合方法确定综合异常。

综合异常图是通过应用数据处理结果（如多元素叠加、空间分析）和对多元素异常综合解释按照相关规则圈定的综合性图件。综合地球化学异常图是圈定预测区的基础。

可以根据不同的组合方式，构成不同表达形式的综合异常图（图九）。

- 多元素异常空间逻辑与的叠加，确定异常元素的异常下限，按元素最大空间范围圈定异常。

- 多元素异常空间逻辑和的叠加，确定异常元素的异常下限，按元素交积圈定异常。

- 累加、累乘元素组合叠加，根据元素的组合关系，按累加累乘的结果，圈定异常，异常的表达方式可以参考单元素异常的表示方法。

- 多元素归一（标准化）加权叠加，选择相关元素分别进行归一化处理，根据元素的主次关系，分别赋以权重计算。

- 多元统计分析处理综合，应用多元统计数据处理方法，如因子分析的因子得分，二维聚类分析的分类值，表达方式可以根据不同的处理方法和要突出的地质矿产特征，参考组合异常图的表达方式。

推荐软件系统：GeoExpl，MapGIS

图件样例：

（五）推断解释图件编制

1. 推断解译地质图

编图要素

- （1）简化地理图（以素图的方式表示）；
- （2）地质矿产简化图；
- （3）推断构造；
- （4）推断岩体。

地球化学资料解释推断地质构造和岩性，主要是根据成矿元素，伴生元素和造岩元素的分布规律，元素组合特征，在研究已知地质构造和岩性元素组合模式的基础上，开展未知地区地质构造和岩性的解释推断工作。

地球化学推断地质构造，主要根据特征元素或元素组异常轴线、高低背景界限、元素值变化梯度较大的线性分布或特征区来推断地质构造。地球化学元素及元素组合反映构造的基本特征：

- （1）反映大断裂或区域性断裂构造的特征线，多数是地球化学异常组的界线；

- （2）反映含矿地层和特征地质体的特征线，多是地球化学富集区高背景区域特征元素组合异常区；

- （3）反映控制矿床分布的特征线，多是已知矿异常的轴线。后两种除相当部分是断裂带，韧性剪切带外，还有各种侵入体接触带及某些地球化学专属性强的岩体、岩脉或岩性

- （4）应用 B、P、F 等岩浆射气元素的富集规律，推断断裂带和构造岩浆带分布区。

- （5）应用 Cu、Pb、Zn、Cd 等成矿元素的富集规律，推断含矿断裂带，和

矿化带分布。

(6) 应用 Au、Ag、As、Sb、Hg 等成矿元素的富集规律，推断矿化断裂构造有关矿化带。

(7) 利用亲壳元素 Si、K 和亲核族元素 Fe、Ni、Cr、Ti、Co、V，推断陆块区地质构造和造山区的地质构造边界

地球化学推断岩体，其理论依据是不同的岩石类型有不同的元素分配特征，可划分为不同的成岩元素序列。

在岩浆岩中，超基性岩相对富集 Fe、Mg、Ni、Cr、Pt 等；基性岩相对富集 Ca、(Al)、Ti、V、Mn、Cu、Sc 等；酸性岩石相对富集 K、Na、Si、Li、Ba、Rb、Cs、Ti、Sr、Ba、Y、TR、Zr、Hf、U、Th、Nb、Ta、W、Mo、Sn、Pb、B、F、Cl 等。

(1) 应用 Ni、Cr、Co、V、Ti、Fe、Mg 等铁族元素的组合富集规律，推断基性、超基性岩、玄武岩和太古代、元古代绿岩分布区

(2) 应用 Ca、Sr、B 等造岩元素的组合富集规律，推断碳酸盐岩和钙碱性花岗岩分布区。

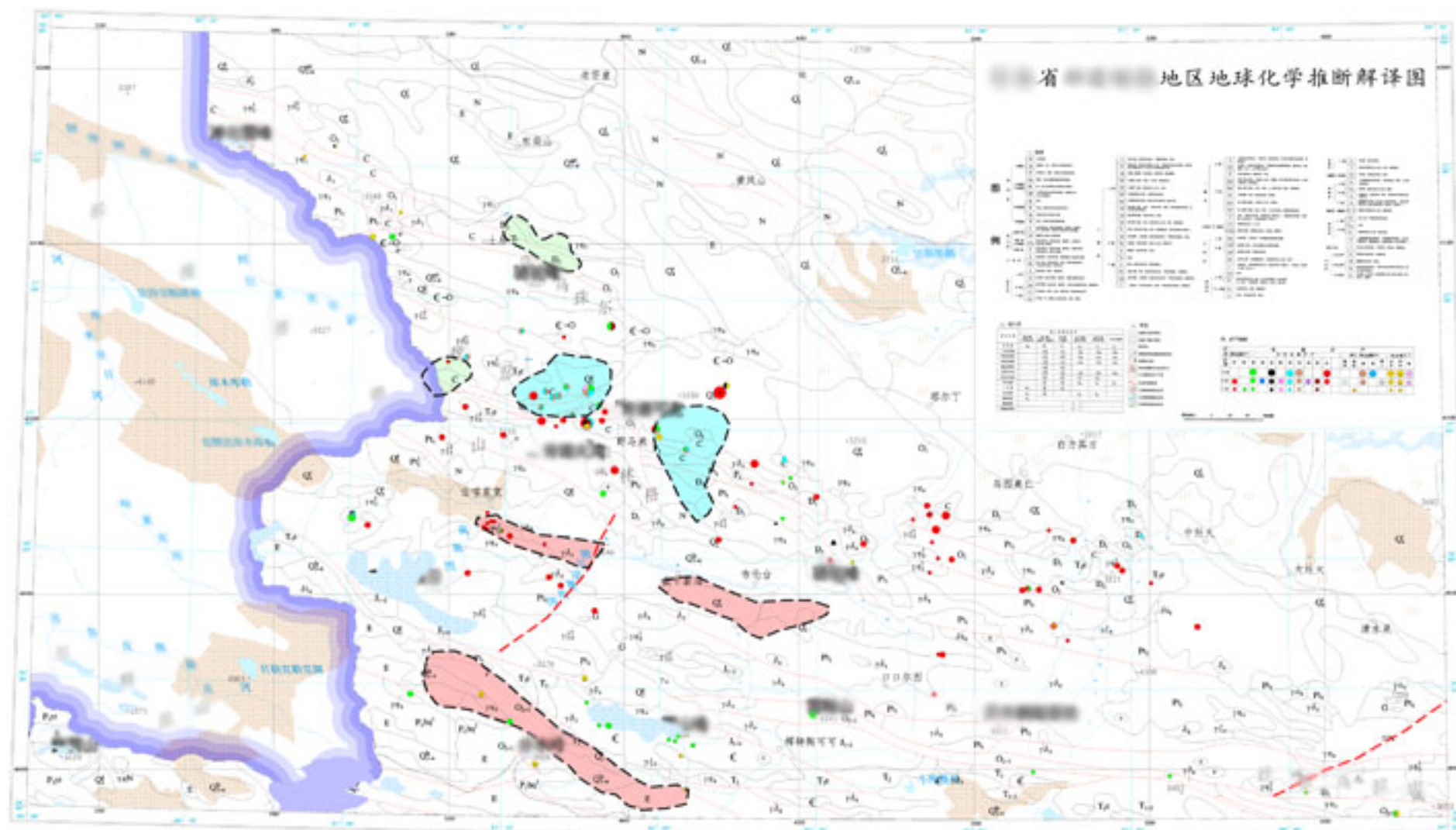
(3) 应用 Th、La、Rb、Zr 等稀土元素的分布规律，推断花岗岩分布区。

(4) 应用 Be、Li、Y 等稀有元素的富集，推断钾长石花岗岩和燕山期偏酸性花岗岩分布区。

在沉积岩中，砂岩相对富集 Si、Zr、Gd；碳酸盐岩相对富集 Ca、Mg、Mn；页岩中相对富集的元素如 Al、Li、Be、V、Ti、Sc、Fe、Co、Ni、Cu、Pb、Zn、Mo、Sn、Sb、Hg、U、Th 等。

推荐软件系统：GeoExpl，MapGIS

图件样例：



图十 推断解译地质图

2. 地球化学找矿预测图

编图要素

- (1) 简化地理图（以素图的方式表示）；
- (2) 地质矿产简化图；
- (3) 依据地球化学异常分类评价结果、地球化学异常组合与空间分布（分带）规律等综合因素，圈定的地球化学找矿预测区。

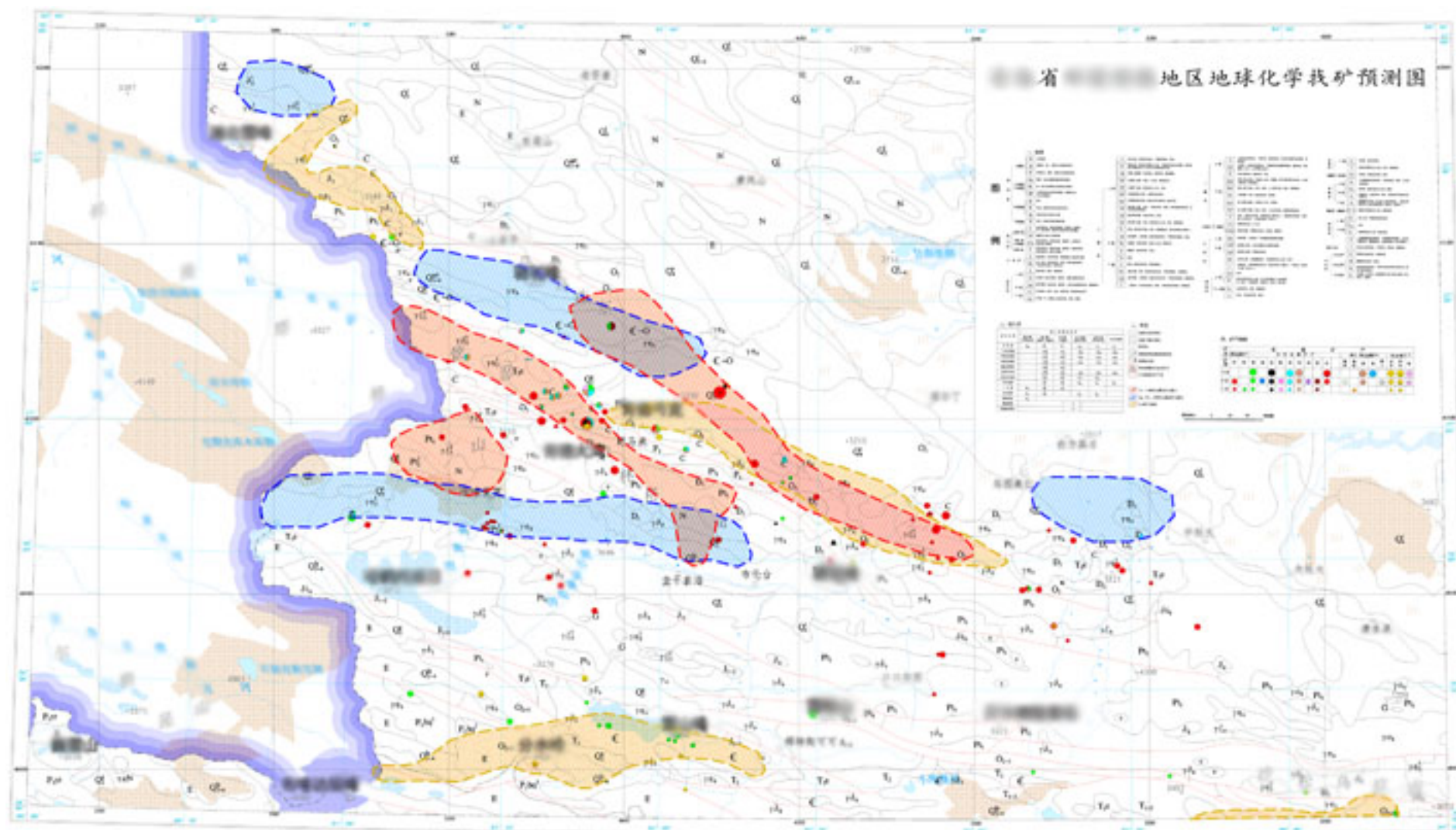
地球化学找矿预测靶区在综合异常分类、评序、评价的基础上，结合地质矿产资料、异常查证结果和找矿模型等评价要素，分矿种分别圈定。圈定原则：

(1) 以地球化学异常的平面分布（分区）、元素组合、成因分类为依据，参考成矿区（带）、地球化学区（带）、地质构造区（带）的划分成果和地球化学推断地质构造成果，圈定找矿预测区。

(2) 以同类异常的数量和找矿意义分类结果（或每个异常资源量定量预测结果）为依据对找矿预测区进行分级。

推荐软件系统：GeoExpl, MapGIS

图件样例：



图十一 找矿预测

