

统计地球化学及其应用

蒋 志 著

北 京

冶金工业出版社

2006

内 容 简 介

本书基本上是对地球化学在新方向上的理论发展,其出发点是原子在地质体中的随机运动,从而建立起地质体中化学元素转移概率方程,给出元素的空间分布公式、元素含量分布公式和元素聚集量分布公式;同时引入发现原理,建立发现过程,从而使发现这个主客观耦合过程成为理论的一个有机组成部分。这些理论构成使得统计地球化学有了种种应用。

本书既可以供从事地球化学的研究者参考,也可供地球化学专业的研究生和高年级的本科生参考,更可供从事矿产勘查的地球化学工作者参考。

图书在版编目(CIP)数据

统计地球化学及其应用/蒋志著. —北京:冶金工业出版社, 2006. 2

ISBN 7-5024-3909-9

I. 统... II. 蒋... III. 地球化学: 统计学 - 研究
IV. P59-32

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2006) 第 002815 号

出版人 曹胜利 (北京沙滩嵩祝院北巷 39 号, 邮编 100009)

责任编辑 王之光 美术编辑 李 心

责任校对 白 迅 李文彦 责任印制 牛晓波

北京兴华印刷厂印刷; 冶金工业出版社发行; 各地新华书店经销

2006 年 2 月第 1 版, 2006 年 2 月第 1 次印刷

850mm × 1168mm 1/32; 3.75 印张; 100 千字; 109 页; 1—2000 册

15.00 元

冶金工业出版社发行部 电话: (010) 64044283 传真: (010) 64027893

冶金书店 地址: 北京东四西大街 46 号 (100711) 电话: (010) 65289081

(本社图书如有印装质量问题, 本社发行部负责退换)

前 言

2005 年的春天，笔者先是在中国科学院研究生院为研究生们开了这门课，并且是世界上首次开这门课。然后笔者又应邀去吉林大学地球科学学院做了一周的同样内容的讲学，对象也是研究生。最近，中国科学院研究生院又通知我，要我继续讲授这一课程。因此，在黄金指挥部领导和黄金地质研究所的支持下，决定出版这本讲义，既便于教，也便于学，又便于理论上展开讨论。

作为一个新学科，本书是笔者约三分之一世纪的心血结晶。所以这样说，是因为本书最初的思想萌芽可以远推到笔者大学四年级第二学期的时候。那是 1963 年的初春，在中国科学技术大学地球化学系的一个自习室里，我们班级的一些同学出了一期墙报，专门讨论地球化学的未来。

学生自然是梦如春云，聚散不定，飘忽无踪，各说其是，杂言纷呈，主要是对地球化学现状的不满。起因大约有两个，一是无知，二是知之太多。

所谓无知，是由地球化学这门学科的特点决定的。课堂上可能只学到了它的一小部分内容，它的一大部分内容是要到野外的实际中去学。误把局部当全体，自然要自以为是地发许多无知的议论。

所谓知之太多，是由当时的学校环境决定的。当时的中国科学技术大学，有十几个系，专业分得很细，却都是当时的所谓尖端科学，地球化学当然也是当时的尖端科学。为我们授课的又都是当时中国的顶尖科学家，国际上也很有名，如为我们讲授分析化学的就是当时的科学院学部委员（即今天的科学院院士）梁树权先生，当时国际原子量表中铁的原子量，就是用他的测定值。不要说给地球化学专业上分析化学课，就是给分析化学专业上分析化学课，他也是顶级的。

学了一知半解，就敢纵论天下，还以为识穷天下，实在有些不自量力。而我也滥竽其中，并且同样狂妄，写了一篇文章，想用方程描写地球中原子的运动。

谁知这样一次看似青春期躁动的活动，却产生了影响，25年后，在澳大利亚墨尔本的一次学术会上，一位女士向我走来，问我认识老同学不？我确实不认得，但怎敢当面说不认识老同学呢！就睁大了近视眼，看她会议证上的名字：“啊！您是周家馨”。其实我是按拼音念出来的，周家馨是谁我也不知道。她大概也看出问题来了，就主动地说他们念一年级的時候，看到我们四年级出的墙报，纵论地球化学，印象深极了。

我当然记得，亏她还记得这样牢！

说实在的话，快毕业的四年级学生对入学不久的一年级学生，当时就不曾认得过，几十年后就更无从认起。可是，不久后在北京的一次学术会上，他们年级的孙宝田又跟我谈起了我们班的那次墙报。可见，那次墙报给人的印象是如何的深！

在一定意义上讲，本书也只不过是用一套方程描写地球中的原子运动。差别只在于，四十多年前，墙报上我的文章只是一种哲学猜想；四十多年后，本书则是一个已成熟的新问题，如此而已。

本书的最大特点是从运动学的角度理解地球化学过程，并毫不犹豫地使用数学方法。这里，想就这两点说几句话。

首先，本书侧重地球化学的运动学。

初一听，谁不知道地球化学讲地球中的原子运动，还用你来吹成一个新学科么！确实，世界上的确也没有不讲原子运动的地球化学工作。其实不然，我们的着眼点不在于讲不讲原子运动，而在于怎样讲原子运动，是原则地讲还是具体地讲原子运动。

从原则上讲原子的地球化学运动的文章非常多，但是，从具体上讲原子的地球化学运动的文章则非常稀少，就像凤毛麟角那样难逢难见。问题出在哪里呢？显然出在目前地球化学研究的理论基础和前提上。众所周知，地球化学的理论基础是热力学和物理化学。而热力学和物理化学过程是在坛坛罐罐中进行的，最讲究的是反应条件而不是反应路径。因为时间和空间已被坛坛罐罐

规定好了，变化的只是温度、压力、组分浓度、氧逸度、酸碱度和氧化还原电位等。这在岩石地球化学、化学地球动力学以及只管原子运动条件的那部分矿床地球化学研究中，自是举足轻重，成果丰富。但对勘查地球化学和环境地球化学的大量观测，以及关注原子运动路径的那部分矿床地球化学研究中，关于原子原则运动的论述就显得苍白无力，无足轻重了。而在这几个方面，却有着无与伦比丰富的观测资料，正等待着理论去挖掘！

其次，关于毫不犹豫地使用数学方法问题。

不仅是地球化学，几乎是所有的地学，以观察描述为主的传统太强烈了，以至于在这个领域中的工作者，虽大都具备了大学理工科本科的数学训练，却仍把在自己工作中应用数学方法视为畏途，更不要说毫不犹豫地使用数学方法了！

其实，任何一门学科都有两件事要做：一是形成概念，二是建立联系。近代辩证法大师黑格尔，专门研究了概念的形成和发展，形成了他自己的逻辑学，有人称其为辩证逻辑。古代哲学大师亚里士多德，专门研究了概念之间的联系，形成了现今通用的逻辑学，就是所说的形式逻辑。

概念的形成和变化，概念之间联系的形成，没有什么妙招，只有实践论中指出的在实践中形成的一条途径。但概念之间的联系方式却有两种。一是概念之间直接的形式逻辑联系，实际上是质的联系。二是概念之间形式逻辑联系的变形——数学联系，实际上是量上的联系。

前一种联系是任何认识都躲不开的，没有这种联系就形不成为认识。后一种联系有时却是可以躲开的，当然也就失去了联系的精确性。一门学问要想具有相当的精确性，就要尽可能地寻求概念之间的数学联系，除非所论的概念之间不可能有这种联系。已经有条件寻求这种联系而不去寻求，其实是一种懒汉，却搪塞说不可能有这种联系。

应当指出的是，科学家用数学和数学家研究的数学是有区别的。

科学家是在他的研究中发现数学，提出并不一定能解决的数学问题。数学家用他的假设研究数学，提出并解决数学问题。例

如，牛顿作为物理学家，提出了质点运动的数学表述问题；作为数学家，他发现了微积分，解决了质点运动的数学表述问题。在数学家那里，有各种各样想像出来的微分方程等待解决或已经解决。在科学家那里，可能多年的工作才发现了一个方程，这个方程是真实过程的描写，不是头脑里的想像，既可能是数学家早已解决了的老问题，也可能是令数学家也挠头的新问题，更可能是数学家一时也解决不了的难题。

也就是说，科学家是在自己的工作发现数学关系。如何处理这种数学关系，可以是自己的任务，自己变成数学家去想办法解决；也可以是数学家的任务，干脆提给数学家去想办法解决。这种问题有时甚至简单到只是查一查已有的数学表，因为数学家早已做了大量的想像中的工作，可以供我们应用。

所以，科学家面对的数学问题，不是处理数学问题的能力和技巧，而是在自己的工作发现数学关系，或是用数学方法描述自己的科学发现。这个工作是数学家代替不了的，是在事实和数学之间寻求实在的关系，不是在数学关系之间进行繁复的推导。数学的难度不是很大，倒是要学会用数理的方式进行思维，特别是要善于发现事物之间的微分联系。因为微分联系比积分联系更具有广泛性。

最后，在这里感谢在本书形成和出版过程中所有给予帮助的朋友们！

作 者

2005 年 12 月

目 录

1 引论	1
1.1 数理思维方式	1
1.2 地球化学的能量背景	2
1.3 地球化学的动力学背景	4
1.3.1 相对论的推论	4
1.3.2 统计力学新原理	4
1.3.3 地球化学中的动力学背景	5
1.4 地球化学的运动学背景	5
1.4.1 地球化学中运动学问题的重要性	5
1.4.2 粒子和光子的相互作用	6
1.4.3 粒子和光子的布朗运动	6
1.4.4 统计地球化学	6
2 理论	8
2.1 地质体中元素转移概率方程	8
2.1.1 随机运动机制	8
2.1.2 元素转移概率方程——柯尔莫戈罗夫方程	11
2.2 地质体中元素空间分布公式	18
2.3 地质体中元素含量分布公式	19
2.3.1 地球化学测量中的不确定性关系	20
2.3.2 地球化学采样模型	21
2.3.3 样品元素含量分布	23
2.4 资源量/储量分布公式	29
2.5 矿床发现过程	30
3 应用	32
3.1 地质矿床研究	32

3.1.1	同一地质体中元素空间分布	32
3.1.2	接触带上元素空间分布	32
3.1.3	脉状矿化元素空间分布	33
3.1.4	面状矿化元素空间分布	35
3.1.5	典型的元素空间分布	37
3.1.6	稳定的元素空间分布	37
3.1.7	成矿过程模型	39
3.1.8	吸积成矿模式	42
3.1.9	矿卷成矿模式	42
3.1.10	成矿元素比值关系	44
3.1.11	比值的空间变化	46
3.1.12	回归系数的空间变化	48
3.1.13	原生晕的位置判别	49
3.1.14	元素对含量比值的分布	50
3.1.15	矿体长宽厚的分布	51
3.2	矿产勘查布局	52
3.2.1	品位-吨位关系	52
3.2.2	矿床规模的统计划分	53
3.2.3	区域矿化率公式	54
3.2.4	区域成矿率公式	55
3.2.5	勘查成本与成矿能力的关系	55
3.2.6	矿床发现时间阶段	56
3.2.7	矿产地发现和资源量发现	56
3.3	异常判别和解释	59
3.3.1	异常下界	59
3.3.2	异常滤波	60
3.3.3	异常反演	61
3.3.4	根据负异常推测成矿规模	61
3.3.5	反射壁条件下的晕函数	62
3.3.6	吸收壁条件下的晕函数	63
3.3.7	吸收-反射壁条件下的晕函数	63
3.3.8	矿化率填图方法	64

3.4	勘查工程选择	66
3.4.1	采样不确定关系	66
3.4.2	分样的切乔特公式	67
3.4.3	工程孔径公式	67
3.4.4	工程网度的判别	68
3.4.5	工程网度的预测	69
3.4.6	网度控矿率公式	71
3.5	资源量/储量估计	73
3.5.1	品位平均值公式	73
3.5.2	品位变异度计算	74
3.5.3	理论变异函数	74
3.5.4	广义克立格方程	75
3.6	资源量/储量评价	75
3.6.1	资源量/储量与边界品位关系的统计公式	75
3.6.2	资源量/储量与边界品位关系的积分公式	78
3.6.3	利润函数	80
3.6.4	工业指标优化方法	82
3.6.5	品位系数与矿物颗粒度的理论关系	83
4	结束语	85
4.1	方程参数问题	85
4.2	同位素分馏问题	85
4.3	环境地球化学问题	85
附录	附录	86
附录1	斯特林公式及其近似式	86
附录2	平均值计算与值的分布	87
附录3	2^n 统计格与正态分布反函数的应用	93
附录4	经验分布函数的统计离析	95
附录5	正态分布的中心距	96
附录6	对数正态分布的原点距	97
附录7	多项式系数和	97

附录 8	概率积分 $\Phi(x)$ 表	98
附录 9	概率积分反函数 $x(\Phi)$ 表	101
附录 10	欧拉积分 $F(x) = \int_0^x r^{\frac{1}{2}} e^{-r} dr$ 表	104
参考文献		107

1 引 论

1.1 数理思维方式

类比思维方式在地学中居统治地位，原因是地学是在现在时空观测过去的时空陈迹，中间缺失了时空的连续性，也就缺失了严格的逻辑联系，不得不用类比。有严格逻辑联系的工作，能够包含时空缺失阶段的工作，如同位素等时线年龄公式，就又可以有严格的逻辑联系。因为其中含有时间积分，细节虽然不得而知，总效应却是显而易见的。

数理思维方式在数理科学中居统治地位，有严格的用数学表示的逻辑联系。原因是事件时空与观测时空基本上是重合的，即使是天文学，也因为由光信号联系，而基本上没有时空缺失。

数理科学中也不是没有类比思维，如陈念贻的量子力学隐参数，是人们对所面对的事物还不认识，或认识不深刻。

因此，要想在地学中用数理思维方式的关键是，找到像等时线法那样包含缺失时空的理论表述，或者说对现在现象的描述，应当含有对地质历史的累积。对地质历史累积的最简单表述，是对时间的积分。因此，在地学中应用数理思维方式的任务是，寻找在对地质现象描述中包含时间积分的表述。

实际上，我们观测到的地质现象，都是地质历史的累积。地质历史的累积，就是地质历史的时间积分。

由于观测都是具体的，必然包含环境特点、初始特点和边界特点。因此，要追求略去这些特点的一般表示——微分表示。

对应用来说，写出方程不是数学家的任务，是具体观测实验的科学家的任务，是观测和试验结果的数学表述，表述的是在不同变量之间所发现的数学关系。

具有数学思维素质，不一定具有数学技巧。爱因斯坦写出

了引力方程，却是别人给出了解；海森堡写出了矩阵方程，却不明白那就是矩阵方程；只有牛顿写出了又解出了力学方程。看你学谁？统计地球化学不是数学地质，譬如对热的观察，用数学方法处理数据是第一个阶段；根据经验关系建立热力学是第二个阶段；用统计力学解释热力学是第三个阶段。统计地球化学不是数学地质，对地质体中原子时空运动来讲，数据处理相当第一个阶段；数学模型相当第二个阶段；统计地球化学相当第三个阶段。

1.2 地球化学的能量背景

地球中的主要能量是引力能和热能。引力能随时间变化，要用到爱因斯坦方程或其近似——达朗伯方程。热能中随时间变化的部分，主要是放射性元素的核转变能。我们是用爱因斯坦方程的近似式——达朗伯方程描写地球，并将时间变量改写为放射能积累散逸的时间积分——波数。

第一个假设：引力位和密度有同样的波数变化。因此把达朗伯方程变为空间方程和波数方程。并从波数方程得到地球脉动解。

第二个假设：脉动频率因积存能变化而变化，应与地球的总辐射能成正比；而地球的总辐射能与地球温度的四次方成正比；地球温度又与地球积存能成正比；从而得到地球脉动频数公式。

应用地球脉动波数公式，解释了陆壳生长过程，建立了理论地质年表。

第三个假设：引力位和密度有同样的经度和纬度变化。则前述空间方程变为三个方程：径向方程、经向方程和纬向方程。用后两个方程可得到地球经纬方向上的球谐函数表示。

第四个假设：固体地球外的质量密度近似为 0。得到地球表面引力位解，从而得到大地重力测量的基本公式。

第五个假设：根据地内密度特点，地心密度与引力位比值趋于无穷；地表以外密度与引力位比值趋于零，有地内密度与引力位比值与地心距成反比。从而得到地内引力位的如下解

答^[12]：

$$U = \frac{GM}{r_0} \sum_{n=1}^{n_r} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=0}^l \sum_{j=0}^l A_j \left(\frac{r}{r_0} \right) R_n^l(r) Y_l^m(\theta, \phi) \times \exp \left[ij \left(\zeta(t) - \frac{2r_0}{na_0} \right) \right] \quad (1-1)$$

式中，G为引力常数；M为地球质量； r_0 为地球既不膨胀也不收缩时的平均半径； θ 为地球的纬度； ϕ 为地球的经度； r 为地心距； t 为时间； a_0 为地球半径的十五分之一； $Y_l^m(\theta, \phi)$ 为通常的球谐函数； n 为正整数； i 为虚数单位； $R_n^l(r)$ 和 $\zeta(t)$ 分别为如下径向引力位解和地球脉动波数：

$$R_n^l(r) = \left(\frac{2r_0}{na_0} \right)^l \left(\frac{r}{r_0} \right)^l \exp \left(- \frac{r - r_0}{na_0} \right) \sum_{i=0}^{n-l-1} \alpha_i \left(- \frac{2r}{na_0} \right)^i \quad (1-2)$$

$$\alpha_i = (-1)^i \frac{(n-l-1)!(2l+1)!}{i!(n-l-1-i)!(2l+1+i)!} \alpha_0$$

和

$$\zeta(t) = 2\pi k_0 \int_{t_0}^t \left[B \exp(-kt') - \sum_{i=1}^4 \frac{\beta_i}{\lambda_i - k} \exp(-\lambda_i t') \right]^5 dt' + 2\pi \eta_0 \quad (1-3)$$

式(1-3)中的常数数值表如下：

序号 i	长寿期放射性同位素	衰变常数 $\lambda_i / \text{Ga}^{-1}$	现在地球产能比率 β_i
1	^{235}U	0.984850	0.0137
2	^{238}U	0.155125	0.3977
3	^{232}Th	0.049475	0.4324
4	^{40}K	0.496200	0.1562

参数： $k_0 = 0.0002475 \text{ Ga}^{-6}$ ； $\eta_0 = -5.02897$ ； $B = 7.17617 \text{ Ga}$ 。

地球散能常数 $k = 0.105134 \text{ Ga}^{-1}$ 。

地内引力位解的特点是，时间上为脉动解；经纬方向上为球谐函数解；径向上不同圈层有整数平方关系，并有不同的脉动位相。

解的地质意义：地球脉动和理论地质年表；圈层界限地心距

的整数平方减一定律；地史上地球自转公式；古温度变化公式；古陆生长和演化模式；核幔差异旋转与理论地磁极性年表；地震平均周期与地球高频脉动；地壳演化八重态模式；成矿幕和成矿域；中国的大地构造和成矿的主要特点^[2]。

1.3 地球化学的动力学背景

1.3.1 相对论的推论

根据相对论，经典质量 m_0 可称为静质量，电磁质量 m_1 可称为动质量，质量 m 是这二者之和，即

$$m = m_0 + m_1, m_1 = m - m_0 \quad (1-4)$$

同时有

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \beta = \frac{u}{c} \quad (1-5)$$

以及

$$\begin{aligned} E &= E_0 + T, E = mc^2 \\ E_0 &= m_0 c^2, T = m_1 c^2 \end{aligned} \quad (1-6)$$

说明粒子运动能量 E 是两种能量之和：静能 E_0 和电磁能或动能 T 之和。或者说，粒子运动的本质是动质量负载静质量运动，或静质量搭乘动质量运动^[3]。

这是个很重要的结论，特别是当普朗克的能量子说和爱因斯坦的光子说都被证实后，这个结论既蕴含着统计力学的新原理，也蕴含着粒子和光子的布朗运动^[3]。

1.3.2 统计力学新原理

迄今为止的统计力学，其基本原理是所谓粒子的能级遍历原理。这个原理是说，粒子只有经历了所有的能级，才能占有应占

有的能级。这是个漏洞百出的原理，粒子为什么要经历了所有的能级后才能占有应占有的能级？

统计力学中还有一个并不明晰却广泛应用的概念——能源或无限大热源。其实所要用的概念只是无限大特性，以保证热力学过程在平衡或准平衡条件下进行。

换一个角度看问题^[3]，既然光子负载粒子运动，那么，光子的能级分布就是能源的能级分布，粒子无非是搭乘某个能级上的光子而同时占有其热力学几率罢了。根据普朗克的发现或玻色的统计，供粒子搭载的光子具有各种各样的能级并以一定的几率存在。或者说，不是粒子的能级遍历，而是光子的能级遍在。这显然是一个统计力学新原理。

问题只剩下粒子搭乘光子的方式了。不搭乘或只能搭乘一个光子的粒子，是费米子，服从费米-狄拉克统计；不搭乘或能搭乘任意个光子的粒子，是玻色子，服从玻色-爱因斯坦统计；不搭乘或搭乘能级连续的任意个光子的粒子，是经典子，服从麦克斯韦-玻耳兹曼统计。

1.3.3 地球化学中的动力学背景

用统计力学可以写出热力学基本方程，从而给出热力学的一切结论，也就给出了目前地球化学研究的理论前提之一。

在这个前提指导下的研究，侧重在地球化学中的能量状态，如温度、压力、组分浓度、酸碱度、氧化-还原电位、氧逸度，等等，这其实研究的都是地球中粒子的动力学。由于这样的研究在目前地球化学理论研究中居于重要地位，因此我们认为这是地球化学研究中的动力学背景。

1.4 地球化学的运动学背景

1.4.1 地球化学中运动学问题的重要性

从热机、试管、烧杯和反应釜中发展出的热力学，侧重于动

力学研究是理所当然的。因为时间和空间都被规定好了，变化的只是能量状态。地球中的化学却不这样简单，以人做标尺，任何热机、试管、烧杯和反应釜的大小都不能和地球的大小相比较。因此，研究地球中的化学，除了要注意它的动力学方面外，还要注意它的时间-空间特性，也就是说要注意它的运动学问题。这不但是这门学科所要求的，还是矿产勘查所必需的。

1.4.2 粒子和光子的相互作用

既然光子负载粒子运动或粒子搭乘光子运动，就必然存在着如何负载或如何搭乘的问题。众所周知，粒子吸收光子而获得能量，发射光子而失去能量。显然，粒子吸收光子和发射光子的方向都是不确定的，粒子从吸收到发射光子的弛豫时间也是不确定的，粒子吸收和发射光子时产生的反冲也是不确定的，粒子吸收或发射光子的两次反冲之间的自由程更是不确定的。粒子和光子之间的作用与反作用，使得光子也具有了与粒子同样的运动特点^[3]。

1.4.3 粒子和光子的布朗运动

粒子和光子相互作用所产生的运动，带有共同的特色：时间、方向、速度和自由程长短都不确定。这是一种与牛顿运动不同的布朗运动。对这种运动，虽然不能精确地描写其路径，却可以给出运动质点在不同时空部位出现的概率。描写这个过程所用的方程是柯尔莫戈罗夫方程，对于光子来说，是能量的扩散问题，这个方程就被称为热传导方程；对于粒子来说，是物质的扩散问题，这个方程又被称为物质扩散方程^[3]。

1.4.4 统计地球化学

作为粒子运动的特例，地球中的化学元素运动也遵从柯尔莫戈罗夫方程。研究地球中的化学元素运动，是地球化学中早就确定的方向，并且在勘查地球化学和环境地球化学中有了大量的实

践，但在理论上认真描写其时空运动特点，还很少进行。统计地球化学就是想认真做这件事。统计二字，主要不表示数据处理方法，主要表示的是地球化学过程中的随机运动机制^[4]，如果说统计力学表述的是动力学上的随机机制，那么，统计地球化学表述的则是运动学上的随机机制。柯尔莫戈罗夫方程也就变成了地质体中元素转移概率方程^[3]。