

找矿预测中神经网络与模糊聚类的 联合应用^①

王硕儒 汪炳柱 赵举孝
(青岛海洋大学海洋地质系, 青岛 266003)

摘 要

采用神经网络与模糊模式识别相结合以及有监督的学习与无监督的学习相结合的方式, 进行了金属矿的找矿预测, 实践效果很好, 并提出可用各自预测的矿集合求其并集的办法, 确定最终的矿集合。

关键词: 找矿预测 神经网络 模糊聚类 BP 算法 Isodata 法

找矿的统计预测以往大多建立在概率论的基础上, 而通常所说的概率论又是以普通集合论为基础的。自从 1965 年 Zadeh 首次提出模糊集合的概念及其数学表示法以来, 模糊集合论在找矿预测上也得到了一定的应用。这在一定程度上是由于预测本身就带有一定的模糊性, 是一个模糊事件。然而, 在预测中通常所用的标准模式是固定不变的, 这未免又有些脱离客观实际; 既使在一定的区域内, 一种找矿类型, 标准模式, 特别是用数值向量表示的模式并不是一成不变的。因此选择一种固定的标准模式有方法问题, 标准问题。以往至少存在两个选择途径^[1]: 一是采用聚类分析的方法, 如用 Isodata 法的聚类中心即可作为标准模式, 但是聚类结果要经专家分析才能下结论或者还需进一步修整计算; 二是在已知样属类别的基础上, 例如取同类样的平均值组成的向量作为该类标准模式。能否有一种方法不需要作上述变换呢? 1986 年 Rumelhart 等提出的反向传播神经网络算法(BP 算法)克服了初始线性感知

机的严重缺陷从而大大推动了神经网络的研究, 在模式识别中引进神经网络进行非线性系统的辨识具有很大的潜力, 它在解决这样的问题上能力较之模糊数学的贴近度法要强。然而神经网络学习算法^[2]是一种基于最优化法的算法, 有它自身的局限性。这就是采用神经网络与模糊聚类相结合, 采用有监督的学习识别与无监督的学习识别相结合的原因。

1 方法计算步骤

1.1 神经网络法

神经网络用于模式识别是基于它的学习功能。将各种不同的标准模式输入网络进行训练, 直至实际输出与期望输出的误差达到要求为止。这时网络即已训练好, 可以接受待识别的模式, 输出结果就是对该模式识别的解答。

神经网络有联想型网络, 分层网络, 自组织型网络和函数型网络等类型。其中分层模型

^① 于 1993 年 7 月 3 日收到初稿

的反向传播网络颇具代表性,它的结构如图1所示。输入模式先正向往隐层的神经元传播。神经元是神经网络的基本单元,它的功能是将输入模式的各种信息经加权求和

$$S_j = \sum_i W_{ji} O_i + \theta_j$$

后,经一激励函数而输出向下层的神经元(通常输出 $O_i = \frac{1}{1+e^{-s_i}}$),如此正向传递直到输出。如果输出层神经元的实际输出与期望输出之差不能满足误差要求,则反向传播调整各层连接权重直到输出满足误差要求为止。

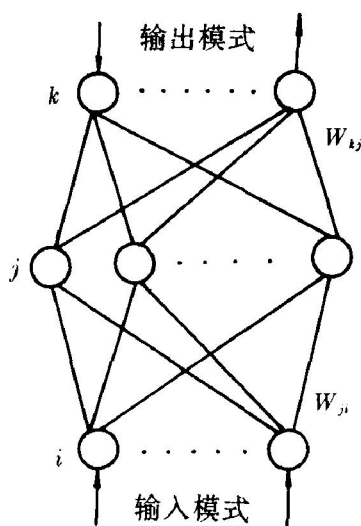


图1 分层网络构造示意图

反向传播神经网络的学习算法(BP算法)中连接权重的改变量基本公式如下^[3]:

$$\Delta W_{ji}(t+1) = \eta \delta_j O_i + \alpha \Delta W_{ji}(t)$$

$$\Delta W_{kj}(t+1) = \eta \delta_k O_j + \alpha \Delta W_{kj}(t)$$

式中

$$\delta_k = (t_k - O_k) O_k (1 - O_k)$$

$$\delta_j = O_j (1 - O_j) \sum_k \delta_k W_{kj}$$

其中 t_k —期望输出; $t+1$ 表示 $t+1$ 次迭代; α —阻尼系数; η —学习步长; 下标 k 表示输出层, j 为隐层(可多层), i 为输入层。该算法步骤为:

(1) 随机给出非等的初始权重 $W_{ji}(0)$ 和

阈值 $\theta_j(0)$;

(2) 提供训练用的学习样本模式, 输入向量与目标输出;

(3) 计算网络的实际输出和训练误差;

(4) 修正权值和阈值(阈值的修正规则与权值修正规则相同);

(5) 判断指标是否满足精度要求 $E \leq \varepsilon$ ($E = 1/2 \sum (t_k - O_k)^2$, ε 为很小的正数)。若满足则转(6), 否则转到(2);

(6) 停止

1.2 模糊聚类法

模糊聚类的方法主要有两类, 一是建立在模糊关系基础上的系统聚类, 另一类则是建立在最小二乘自动迭代基础上的模糊 Isodata 聚类。前者由于现有模糊算子容易损失大量信息, 且模糊关系需从相似关系改造成等价关系, 这就难免会使得两种关系相距甚远。后者是建立在样本 X 与聚类中心 V 按欧氏距离进行误差估计的自动校正法。大量实例(如文献^[4])表明它的应用效果较前者为好。

模糊 Isodata 法的基本公式为

$$u_{ji} = \frac{1}{\sum_{l=1}^c \left(\frac{d_{ji}}{d_{li}} \right)^{2/(m-1)}}$$

和

$$v_{jk} = \frac{\sum_{i=1}^n u_{ji}^m \cdot x_{ik}}{\sum_{i=1}^n u_{ji}^m}$$

式中 $d_{ji} = [(x_{i1}-v_{j1})^2 + (x_{i2}-v_{j2})^2 + \dots + (x_{is}-v_{js})^2]^{1/2}$; $i = 1, 2, \dots, n$; $j = 1, 2, \dots, c$; $k = 1, 2, \dots, s$ 。 c 为分类数; n 为样品数; s 为变量(因素)数。所有的 $\{U_{ji}\}$ 构成最终分划矩阵。

该算法步骤如下:

(1) 随意给出一初始分划矩阵 U_0 , 但其选择必须使 $X_i \neq V_j$;

(2) 按 U_0 计算 V_j ;

(3) 将 V_j 代入 u_{ji} 式, 算出新的分划矩阵 U_1 ;

(4) 检查 $\max_{i,j} \{|U_{ji}^{(1)} - U_{ji}^{(0)}|\}$ 是否小于

给定的一个很小的正数 ε 。若满足, 则 U_1 为最终分划矩阵, 否则让 $U_0 = U_1$, 转回(2)。

2 岩体含金性的评价

新疆西北部的哈图(Hatu)地区是一个金矿远景区。该区金矿主要为石英脉型, 次为破碎带蚀变岩型。后一类金矿产于区域断裂两侧的次级断裂破碎带中。含金矿化岩石有超基性岩, 辉绿岩(或玄武岩)和闪长玢岩。由此, 对上述岩体的含矿性评价就成为今后勘探工作选择靶区的重要依据。

从初选的与金矿化关系密切的 24 个标志中利用信息量法筛选的前 8 个标志可以分为三类特征因素。其中最主要的是与金有关的化学

元素组合即占前 6 项。为此, 取岩石中微量元素组成 18 个变量(包括一组合变量)作为评价的模式选择。

表 1 列出了 11 个岩体(其中两个金矿, 两个非矿)的化学分析原始数据。

神经网络采用 18-36-2 结构进行训练和识别, 输入模式为 18 个变量的归一化值。输出模式训练时规定: 如地质体为已知金矿, 则输出向量为(1,0); 如为非矿, 输出为(0,1)。隐层只选了一层, 这可以使计算简便省时, 而且只要调整好神经元的个数, 网络的非线性程度即能适应复杂的输入、输出函数关系的识别; 此外, Lippman 的研究结果也认为: “在复杂区域内, 只有三层(输入层, 隐层, 输出层)的网络就能构成所需要的任意复杂的判别函数”^[5]。

表 1 Hatu 金矿区岩体微量元素含量平均值表

岩体编号	I 矿	II 矿	A1	A2	A3	A4	A5	A6	A7	玄武岩	凝灰质砂岩
样品数	17	29	8	14	10	5	16	10	9	12	5
Au	5.934	4.213	0.196	0.082	0.028	0.154	0.253	0.003	0.001	0.002	0.003
Hg	109.5	81.5	11.0	43.6	29.9	22.0	68.5	28.0	101.0	9.9	12.2
Ag	0.63	0.26	0.47	0.06	0.02	0.16	0.83	0.087	0.04	<0.02	0.05
As	3 561.6	1 269.3	50.0	491.6	100.9	71.5	249.0	60.6	6.4	1.6	4.2
Sb	49.54	27.29	0.25	12.83	6.81	0.87	1.87	20.21	0.42	0.46	0.44
B	58.9	153.4	13.8	230.0	134.0	14.0	37.9	55.5	9.8	9.2	30.0
Cu	97.8	45.2	62.5	49.9	79.5	12.0	59.5	39.0	16.3	143.6	48.6
Pb	2.7	17.2	11.1	4.3	7.3	9.2	15.4	7.5	10.4	<2	7.6
Zn	55.9	115.3	13.1	55.4	68.5	17.0	32.0	51.0	49.4	84.2	61.0
Mo	0.59	0.83	1.81	1.90	3.33	1.20	0.89	3.50	1.26	<0.5	0.9
Bi	0.19	0.18	0.58	0.19	0.30	0.46	0.43	0.35	0.45	0.13	0.11
Cr	135.6	69.2	166.2	47.6	82.0	85.0	212.8	66.0	43.6	90.0	78.0
Ni	100.6	17.7	6.7	53.8	30.0	6.2	10.4	4.5	10.4	70.8	26.0
Co	65.0	19.3	2.5	21.0	11.7	2.5	4.3	3.3	4.1	30.0	8.4
Sn	16.1	3.8	16.0	4.6	2.4	6.7	13.2	1.4	5.1	<2	9.2
V	199.4	76.0	5.4	87.9	74.0	18.0	16.8	54.5	52.5	133.3	39.0
Ti	1 756.3	1 579.3	393.8	3 928.6	3 650.0	870.0	856.3	2 750.0	1 666.7	4 791.7	1 820.0
Ag · Hg · B	36.25	21.76	0.07	1.38	0.10	0.09	5.63	0.11	0.07	0.03	0.18
Mo · Bi · 10 ³											

注: Hg 单位为 10^{-6} g/kg, 其余元素单位均为 10^{-3} g/kg

为了提高网络的识别功能，我们在隐层中选用了较多的神经元(36个)。在训练时，考虑到训练集并不复杂，故系数 η 和 α 都选得较大(分别为0.9和0.7)，这样确实加快了学习过程，又不会引起学习曲线的振荡。在规定单个模式最大均方差为 10^{-3} 的情况下，迭代75次就使网络的连接权重调整到实际输出与期望输出不超过5%而收敛，而且是单调地收敛。

网络训练和识别结果如表2所示。按计算的输出向量 (a, b) 值大小关系可以将待识别岩样划分三个等级：第一类 $a > b$ 是有希望的勘探靶区；第二类 $a < b$ ，但两者差别不大，可认为是介于矿与非矿之间的岩体，也值得进一步的勘探；第三类 $a \ll b$ ，这类岩体与我们选择的金矿的标准模式对比相距甚远，无多大意义，不值得进一步勘探。

表2 神经网络计算结果

序号	样本	训练(或计算)输出	确切结果及评价
1	I 矿	(0.991, 0.008)	(1, 0)
2	II 矿	(0.970, 0.030)	(1, 0)
3	玄武岩	(0.007, 0.993)	(0, 1)
4	凝灰质砂岩	(0.031, 0.970)	(0, 1)
5	A1	(0.111, 0.862)	找金无意义
6	A2	(0.215, 0.818)	更次靶区
7	A3	(0.063, 0.935)	找金无意义
8	A4	(0.117, 0.860)	找金无意义
9	A5	(0.564, 0.382)	重点靶区, 可能金矿
10	A6	(0.129, 0.842)	找金无意义
11	A7	(0.330, 0.635)	次靶区

对11个岩体用模糊 Isodata 聚类，取 $C=2$ ，得最终分别矩阵为

$$U = \begin{pmatrix} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 0.61 & 0.62 & 0.45 & 0.33 & 0.48 & 0.40 \\ 0.39 & 0.38 & 0.55 & 0.67 & 0.52 & 0.60 \\ 7 & 8 & 9 & 10 & 11 \\ 0.30 & 0.35 & 0.57 & 0.28 & 0.40 \\ 0.70 & 0.65 & 0.43 & 0.71 & 0.60 \end{pmatrix}$$

按最大隶属原则，划分为两类：

$$I = \{I \text{ 矿}, II \text{ 矿}, A5\},$$

$$II = \{\text{玄武岩}, \text{凝灰质砂岩},$$

$$A1, A2, A3, A4, A6, A7\}.$$

根据神经网络和模糊聚类的识别结果，可以综合评价如下：A5岩体应当作为今后详细勘探工作的第一靶区。

上述结论从微量元素的分布特征定性看，A5的Au, Hg, Ag, As及组合变量 $Ag \cdot Hg \cdot B / Mo \cdot Bi \cdot 10^3$ 皆为高值，显示了它具有最良好的含矿性。

3 结束语

神经网络与模糊聚类的配合，监督学习模式识别与无监督学习模式识别的联合应用，对于提高地质体含矿性的预测的可靠性无疑比用单一方法要好。实际应用中，可以根据各自预测的靶区求交集或并集作为最后预测结果。关于求并集的估计可能更具一般性，因为各方法结果可互补，效果会更好。最后，虽然我们并不知道A5岩体是否含矿，但其原生晕的金异常是最高的，且作为预测成果提供决策人员作布局考虑想必是有用的。

参考文献

- 1 王硕儒等. 地质与勘探, 1990, 26(4).
- 2 Mc Cormack MD. Extended Abstracts, 60th SEG Annual Meeting, 1990: 321-324
- 3 包约翰. 自适应模式识别与神经网络. 北京: 中国科学出版社, 1992: 117-124.
- 4 王硕儒等, 黄渤海海洋, 1986, 4(2).
- 5 Lippman RP. IEEE Assp Magazine, 1987, 4: 4-22.