中国科学：地球科学 SCIENTIA SINICA Terrae 2026 年 第 56 卷 第 4 期： 1553–1564
论 文
《中国科学》杂志社
SCIENCE CHINA PRESS

# 基于多尺度Transformer-图注意力网络的地球化学勘查

杨帆帆[1]，左仁广[2*]，龙登红[3]

1. 中国地质大学(武汉)未来技术学院，武汉 430074
2. 中国地质大学(武汉)地质过程与成矿预测全国重点实验室，武汉 430074
3. 甘肃省地质矿产勘查开发局第一地质矿产勘查院，天水 741020
* 通讯作者，E-mail：zrguang@cug.edu.cn

2025-09-01收稿，2025-11-14修回，2025-12-22接受，2026-03-09网络版发表
国家自然科学基金项目(42530801、42425208)和国际数学地球科学协会自然资源研究学生研究基金资助

**摘要** 地球化学异常识别是地球化学勘查的重要任务。近年来，深度学习算法因其能够学习谱特征(地球化学元素浓度和元素组合)和空间模式(地球化学异常的空间尺度和结构)，在地球化学异常识别中受到越来越多的关注。然而，由于地球化学异常通常表现为复杂的元素组合特征和空间异质性，传统的地球化学异常识别深度学习算法在联合建模长程特征关联和多尺度空间模式方面面临挑战。本研究提出了一种多尺度Transformer-图注意力网络(multiscale Transformer-graph attention network，MSTGAT)来解决上述难题。具体而言，采用Transformer作为谱分支以提取元素序列中的长程关联信息，同时构建多尺度图注意力网络(multiscale graph attention network，MSGAT)作为空间分支以提取不同尺度的空间结构特征并表征复杂的空间异质性。MSTGAT被应用于识别中国西秦岭造山带东段的天子坪-太阳寺地区的矿致地球化学异常。定量评估结果表明，该模型的识别性能优于基于单一谱分支或空间分支构建的模型。此外，本研究对Transformer和MSGAT的注意力权重进行可视化，以揭示关键地球化学指示以及空间耦合模式，从而有助于理解模型的运行机制。本研究识别的异常区可为研究区未来的找矿勘查提供指导。

**关键词** 地球化学异常识别，深度学习算法，多尺度Transformer-图注意力网络，注意力权重

## 1 引言

地球化学异常识别是地球化学勘查的基础任务，有助于发现新的矿床并解释地质过程(Grunsky，2010；Xu等，2025；左仁广，2025)。在特定的温度、压力和pH环境下，地球化学元素在热液流体运移过程中发生淋滤与富集，在地表或近地表形成地球化学特征，从而为矿产勘查提供地球化学指示(Chen和Zuo，2025；王学求，2025)。

地球化学异常识别旨在从地球化学背景中识别出异常信号(Chen和Cheng，2018；毛先成等，2022)。然而，由于岩浆侵入、构造演化、风化侵蚀以及矿体埋深等多种地质因素的叠加影响，与成矿相关的原始地球化学信息可能会被削弱或掩盖(Zuo等，2016；Esmaeiloghli等，2024)，影响了矿致地球化学异常识别的有效性。随着大数据时代的到来，人工智能的发展为提升地球化学异常识别能力提供了新的机遇(肖克炎等，2015；成秋明，2025)。作为人工智能的重要分支，深度学习算法在地质灾害(Ma和Mei，2021)、地球物理(Monteiro等，2024)和矿产勘查(Yang等，2024)等领域已展现出优异的预测性能。在勘查地球化学数据处理中，深度学习算法同样展现出显著优势，能够有效提取元素组合关系并识别地球化学异常(Yin等，2021；Sabbaghi和Tabatabaei，2023；Yu等，2024)。借助多层堆叠的网络结构，深度学习能够逐层从勘查地球化学数据中提取潜在和抽象模式(LeCun等，2015)。地球化学异常识别深度学习算法主要包括两类：一类基于地球化学元素的频率分布及其组合特征(基于谱特征)，另一类基于地球化学元素的空间分布模式

中文引用格式：杨帆帆, 左仁广, 龙登红. 2026. 基于多尺度Transformer-图注意力网络的地球化学勘查. 中国科学: 地球科学, 56(4): 1553–1564, doi: 10.1360/N072025-0491
英文引用格式：Yang F, Zuo R, Long D. 2026. A multiscale Transformer-graph attention network for geochemical prospecting. Science China Earth Sciences, 69(4): 1517–1527, https://doi.org/10.1007/s11430-025-1808-1

© 2026《中国科学》杂志社

(基于空间特征)(Zuo和Xu，2024；Xu等，2025)。

多元勘查地球化学数据具有高维特征谱。基于谱特征的深度学习算法能够有效捕捉元素间的非线性协同变化，从而揭示其背后的地球化学行为(Wang等，2024)。一维卷积神经网络能够提取多元素地球化学数据的频率分布特征(Zuo和Xu，2024)。循环神经网络可将多元素地球化学数据视为序列，通过其循环结构学习不同地球化学元素的浓度特征并提取多元素组合关系(Xu等，2025)。这些能力已经在地球化学异常识别和高光谱遥感影像分类任务中得到验证(Zhang等，2022；Agrawal和Govil，2023；Xu等，2024)。然而，一维卷积神经网络主要关注局部特征提取，而循环神经网络在处理长程依赖关系时存在局限性(Vaswani等，2017)。Transformer通过多头自注意力机制对序列数据中的依赖关系进行建模，使每个地球化学元素均能够关注序列中所有其他元素(Yu等，2024)，从而同时提取短程与长程依赖关系(左仁广，2025)。

基于空间特征的深度学习算法已广泛应用于学习地球化学空间模式，以识别地球化学异常。例如，二维卷积神经网络能够借助卷积操作有效地从地球化学栅格图中提取空间特征。这推动了二维卷积神经网络及其变体在地球化学异常识别中的广泛应用(Yang等，2023；Liu等，2024)。然而，由于二维卷积神经网络对不规则数据的适用性较弱，其在自适应提取几何特征方面能力有限(Wan等，2020)。因此，图神经网络被引入用于在非欧几里得数据中学习几何特征(Guan等，2022；Shi和Zuo，2026)。已有研究对地球化学异常识别图神经网络进行改进，以适用不同的地球化学异常识别场景，例如用于减少对标注数据依赖的图自监督模型(Chen和Zuo，2025)，以及用于提升模型泛化能力的图迁移学习模型(Shi和Zuo，2025)。值得注意的是，勘查地球化学数据具有空间尺度依赖特征(Cheng，2008)，不同尺度中异常的空间邻域信息存在差异。然而，上述基于空间特征的地球化学异常识别深度学习算法尚未充分整合跨尺度的地球化学异常几何特征。因此，如何增强模型对多尺度空间特征的学习能力仍有待进一步解决。

地球化学异常不仅受元素浓度及其组合关系(谱特征)的控制，还受空间尺度和几何结构(空间特征)的影响。因此，仅依赖基于谱特征或空间特征的深度学习算法难以从积累的勘查地球化学数据中充分识别矿致地球化学异常。已有多项研究探索了能够联合提取谱特征和空间特征的地球化学异常识别深度学习模型结构的优势(Zuo和Xu，2024；Xu等，2024，2025)。

本研究构建了一种多尺度Transformer-图注意力网络(multiscale Transformer-graph attention network，MSTGAT)以联合提取勘查地球化学数据的谱特征和空间模式(图1A)。在谱特征提取方面，采用Transformer以学习地球化学序列中的长程依赖关系，并通过注意力权重的可视化揭示元素组合关系。在空间特征提取方面，设计了多尺度图注意力网络(multiscale graph attention network，MSGAT)以表征不同尺度下地球化学异常的几何特征。此外，对MSGAT在不同尺度图中的边权重进行分析，以解释该模型在地球化学异常识别中的空间特征学习机制。以中国西秦岭造山带东段的天子坪-太阳寺地区为例开展矿致地球化学异常识别，以验证所提出MSTGAT的有效性。

## 2　方法

MSTGAT由三个模块组成：谱特征提取、空间特征提取以及谱-空间特征融合(图1B)。单个包含多个地球化学元素浓度的像素可视为一个序列。Transformer分支用于提取序列中不同地球化学元素之间的潜在关联。MSGAT分支能够并行提取多尺度图中的几何特征。随后，将提取的谱特征与空间模式进行融合，以识别地球化学异常。为解释各模块在地球化学异常识别中的运行机制，对谱特征提取模块和空间特征提取模块中的注意力权重进行可视化。此外，本研究结合MSTGAT的损失函数开发了一种数据增强方法，以生成充足的训练样本。

### 2.1　数据增强策略

由于地球化学元素具有空间自相关性，矿床邻域可能呈现出不同强度的异常信号(Pirajno，2009)。基于此，矿床的一跳邻域可被视为成矿有利区域。为将这一先验知识融入模型学习过程中，设计了如下加权损失函数$L_\mu$：

$$L_\mu = \frac{\sum_j \mu_j \left[-\hat{y}_j \log \hat{p}_j - \left(1-\hat{y}_j\right)\log\left(1-\hat{p}_j\right)\right]}{\sum_j \mu_j} \tag{1}$$

其中，若第$j$个样本为矿床点，则$\mu_j$=1；若第$j$个样本为矿床点的一跳邻居，则$\mu_j$=$q$，$q$为可调参数。$\hat{y}_j$为第$j$个样本的真实标签值，$\hat{p}_j$为模型对第$j$个样本的预测概率。

### 2.2　谱特征提取

本研究采用Transformer编码器结构(Vaswani等，2017)。地球化学序列首先经过线性投影以获得输入嵌入，然后与位置编码相加：

$$Z = XW_X + P \tag{2}$$

其中$Z$为Transformer编码器的输入特征，$X$表示原始序列特征，$W_X$为线性变换的权重矩阵，$P$为可学习的位置

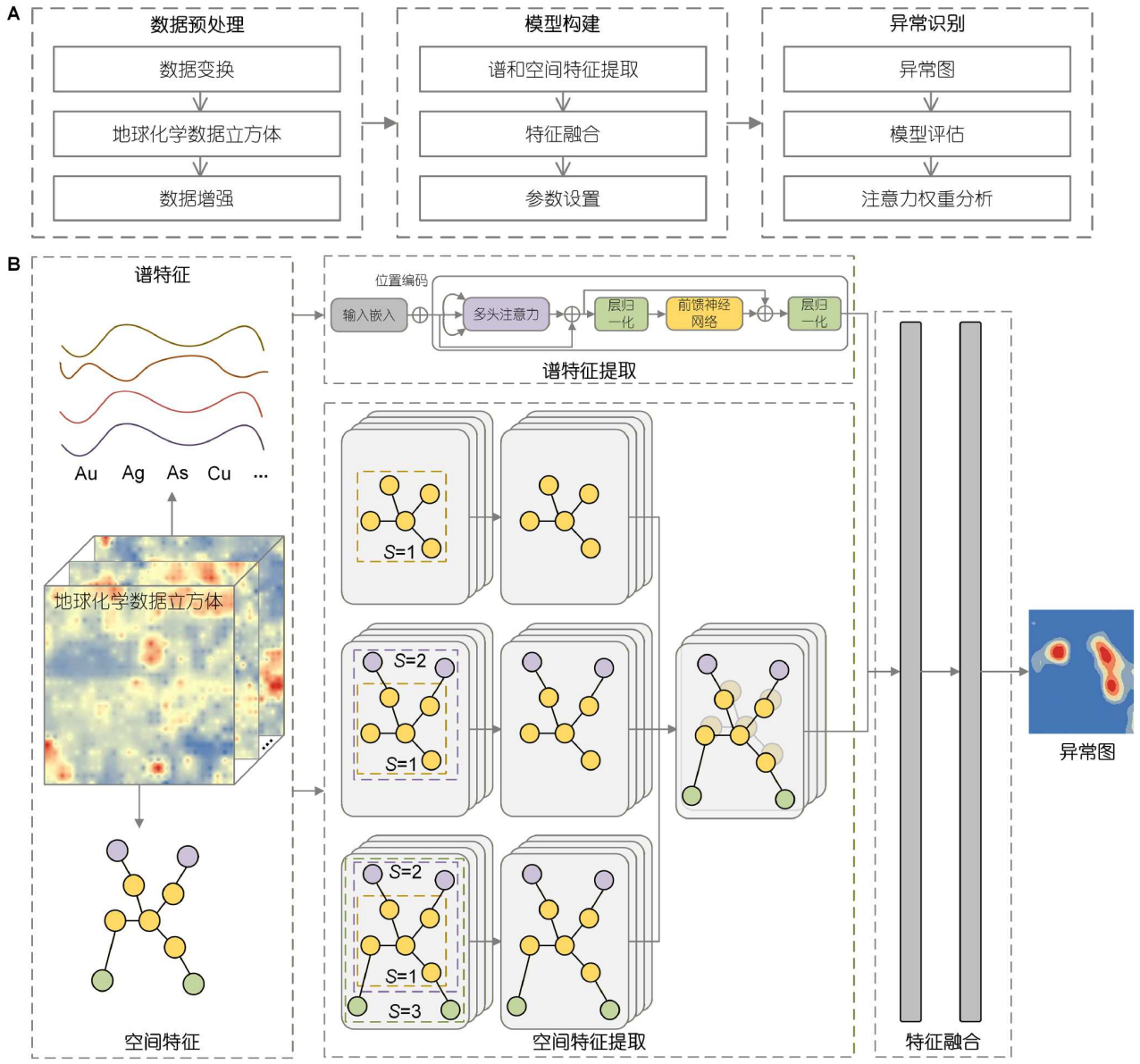



**图1** MSTGAT模型的工作流程和结构。(A) MSTGAT模型地球化学异常识别工作流程，包括数据预处理、模型构建和异常识别; (B) MSTGAT模型结构简图，包括基于地球化学数据立方体谱和空间特征提取模块以及特征融合模块

编码。

将生成的综合特征输入至Transformer编码器。该编码器包含多头注意力机制和前馈神经网络(Turner, 2023)，并结合残差连接和层归一化以稳定模型训练。具体而言，首先将包含位置信息的输入特征输入至多头注意力，以建模序列特征及其内部依赖关系。$Z$通过线性变换映射为查询($Q$)、键($K$)和值($V$)：

$$Q = ZW_Q \tag{3}$$

$$K = ZW_K \tag{4}$$

$$V = ZW_V \tag{5}$$

其中，$W_Q$、$W_K$和$W_V$为线性变换的投影矩阵，$Q$、$K$和$V$被用于计算单个注意力头的注意力系数：

$$\text{Attention}(Q,K,V) = \text{softmax}\left(\frac{QK^T}{\sqrt{d_k}}\right)V \tag{6}$$

其中，$d_k$为$K$的维度。可视化过程利用$Q$和$K$之间的交互以揭示地球化学元素之间的依赖关系。Transformer通过多头注意力机制从不同的特征子空间联合提取信息并将其拼接：

$$\text{Multihead}(Q,K,V) = [\text{head}_1 \,||\, \text{head}_2 \,||\, \cdots \,||\, \text{head}_m]W_m \tag{7}$$

其中，$\text{head}_m=\text{Attention}_m(Q,K,V)$，$m$表示注意力头的数量，$||$为特征拼接操作，$W_m$表示权重矩阵。随后，利用前

馈神经网络进一步提取特征：

$$\mathrm{FFN}(Z') = \max(0, Z'W_1 + b_1)W_2 + b_2 \tag{8}$$

其中，$Z'$表示经多头注意力机制、残差连接和层归一化变换后得到的特征表示，$W_1$和$W_2$为两个线性变换的权重矩阵，$b_1$和$b_2$为其对应的偏置项，两个线性变换之间采用ReLU激活函数。

### 2.3　空间特征提取

地球化学元素浓度的栅格图可以表示为一个拓扑图$G$=($N$,$E$)，其中$N$表示节点集，$E$表示边集(Kipf和Welling，2016)。为了利用不同尺度的空间信息，本研究构建了多尺度地球化学图。在尺度$s$中，节点$n_i$的邻居集合$R_s(n_i)$定义如下(Wan等，2020)：

$$R_s(n_i) = R_{s-1}(n_i) \cup R_1\left(R_{s-1}(n_i)\right) \tag{9}$$

其中，$R_0(n_i)$=$n_i$；$R_1(n_i)$为节点$n_i$的一跳邻居集合。据此，可构建不同尺度的地球化学图。多尺度图中的边权重依赖于MSGAT中的多头注意力机制，该机制能够在训练过程中动态更新并学习边权重。在MSGAT中的单个注意力头中，节点$n_x$与其邻居节点$n_y$之间的注意力系数$\psi_{n_x n_y}$计算方式如下(Veličković等，2017)：

$$\begin{aligned}\psi_{n_x n_y} &= \mathrm{softmax}_{n_y \in R(n_x)}\left(aw_{n_x n_y}\right) \\ &= \frac{\exp\left(\mathrm{LeakyReLU}\left(aw_{n_x n_y}\right)\right)}{\sum_{n_k \in R(n_x)} \exp\left(\mathrm{LeakyReLU}\left(aw_{n_x n_k}\right)\right)}\end{aligned} \tag{10}$$

其中，$aw_{n_x n_y} = \alpha\left[WF_x \,\|\, WF_y\right]$，$\alpha$为权重向量，$W$为线性变换的权重矩阵，$F_x$和$F_y$分别为节点$n_x$和$n_y$的特征。随后可得到每个注意力头的聚合特征：

$$F'_{x_t} = \sigma\left(\sum_{n_y \in R(n_x)} \psi^t_{n_x n_y} W^t F_y\right) \tag{11}$$

其中，$F'_{x_t}$表示在第$t$个注意力头中融合邻域信息后的更新特征，$\sigma$表示非线性激活函数，$\psi^t_{n_x n_y}$和$W^t$分别表示第$t$个注意力头的注意力系数和权重矩阵。随后将多个并行注意力头学习到的特征进行拼接，以生成联合的特征表示。

### 2.4　特征融合

将Transformer提取的谱特征与MSGAT提取的空间特征进行拼接，并通过全连接层对特征进行融合，以识别地球化学异常。

## 3　研究区和数据集

研究区天子坪-太阳寺地区位于中国西秦岭造山带东段，是西秦岭重要的金矿集区之一(Mao等，2002；Teng等，2025)。区内已经发现了天子坪、九条沟(柳永刚等，2020)和花崖沟(Teng等，2025)等金矿床。近年来勘查发现表明该区进一步找矿潜力良好(宋欣等，2024；唐源壑等，2024)。

研究区断裂构造发育，包括东峪-太阳寺、麻沿河-高桥等主要断裂以及次级断裂，这些断裂控制了金矿床的空间分布。研究区岩体出露广泛，包括天子山、八卦山、太白和磨扇沟等岩体(图2)(Chen等，2020；Li等，2021)。多个金矿床分布于这些岩体的边缘(He等，2021)。区内赋矿地层主要包括下古生界李子园群和太阳寺组，以及泥盆系大草滩群和舒家坝群(刘家军等，2019；张家瑞等，2024)。在九条沟-八卦庙地区，Au、As、Pb和Sb元素呈现较强的分异特征(杜宛鸽等，2024)；在花崖沟地区，Au、Ag、As和Sb的地球化学异常与断裂及赋矿地层呈现密切的空间相关性(张家瑞等，2024)。

研究区勘查地球化学数据比例尺为1：50000(图3)。采集的水系沉积物经分析获得16种地球化学微量元素的浓度，包括Ag、As、Au、Bi、Cd、Co、Cr、Cu、Hg、Mo、Ni、Pb、Sb、Sn、W和Zn，其分析过程的详细信息可参考Xie等(1997)。利用反距离加权方法对离散的地球化学采样点进行插值，生成空间分辨率为500 m×500 m的16张地球化学元素浓度栅格图。勘查地球化学数据属于成分数据(Filzmoser和Hron，2009)，因此采用中心对数比变换以消除闭合效应(Aitchison，1986；Carranza，2011)。此外，基于大数据分析思想，本研究使用16种地球化学元素作为输入特征(Zuo和Xiong，2018)。

## 4　结果

### 4.1　多尺度Transformer-图注意力网络模型构建

MSTGAT旨在利用多元素勘查地球化学数据识别矿致地球化学异常(图1B)。表1展示了模型结构的详细信息。在谱特征提取方面，输入序列包含16种地球化学元素浓度，其嵌入维度为32。谱特征提取分支采用两层Transformer编码器对每个像素的序列进行建模，以提取元素浓度特征及其组合关系。随后，通过平均池化层对序列信息进行聚合，获得32维的谱特征表示。在空间特征提取方面，构建多尺度图结构作为模型输入。通过计算全局莫兰指数量化地球化学空间特征，以确定多尺度图中边连接关系。图4显示，16种地球化学元素的全局莫兰指数随距离的增加逐渐减小，在2 km距离范围内均表现出较强的空间自相关性。因此，结合栅格大小与空间自相关特征，构建了三种尺度的多尺度图：尺度1包含一

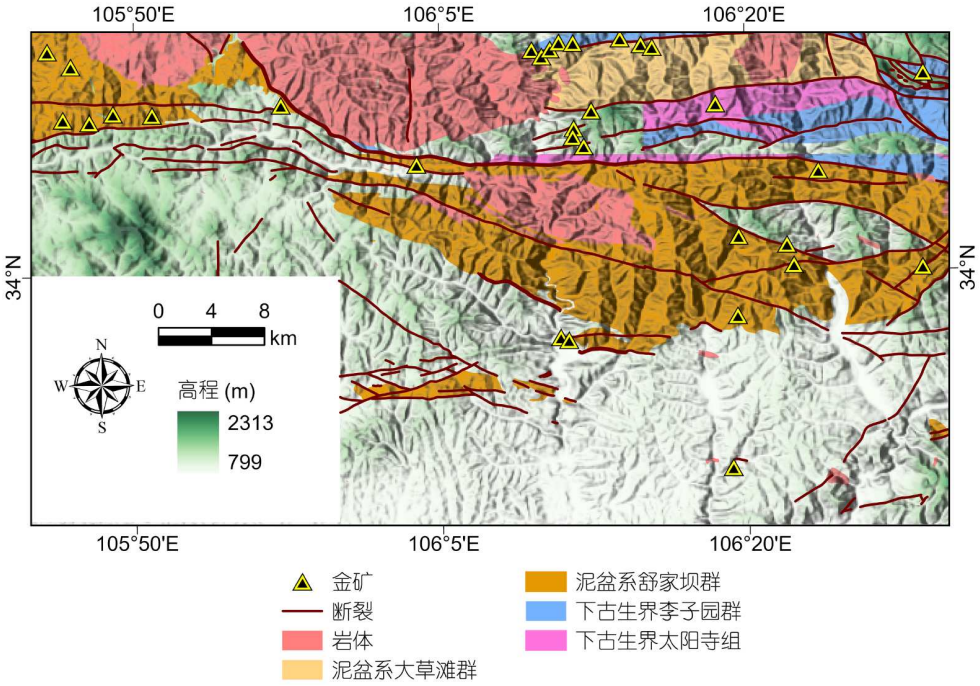



图 2　研究区地质简图(修改自甘肃省地质矿产勘查开发局)

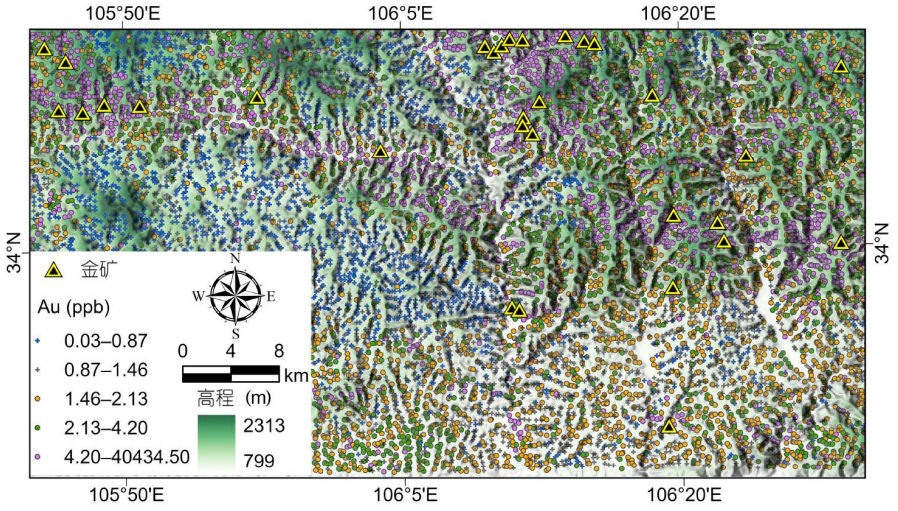



图 3　研究区金元素浓度空间分布图

跳邻居集合，尺度2包含一跳与二跳邻居集合，尺度3则进一步扩展至三跳邻居。多尺度图中的边权重通过多头注意力机制实现动态学习。在每个空间尺度上构建两层MSGAT，以并行提取空间结构特征，从而充分学习多尺度空间模式。随后，将提取的不同尺度空间特征进行拼接以融合多尺度空间信息，并将整合后的96维特征进一步映射为32维特征表示。在特征融合阶段，将Transformer提取的谱特征与MSGAT提取的多尺度空间结构信息进行融合，从而识别地球化学异常。

## 4.2　数据增强效果分析

为MSTGAT模型生成足够的训练样本，本研究设计了一种加权损失函数以同时整合已知成矿样本和数据增强生成的样本。具体而言，已知成矿样本权重设为1.0；而增强样本的权重需要进一步确定。为评估增强样本权重对识别结果的影响，对比了权重设置为0.6、0.7、0.8、0.9和1.0时模型性能。模型在上述权重取值下对应的受试者工作特征曲线下面积(area under the receiver operating characteristic curve，AUC)分别为0.931、0.942、0.914、

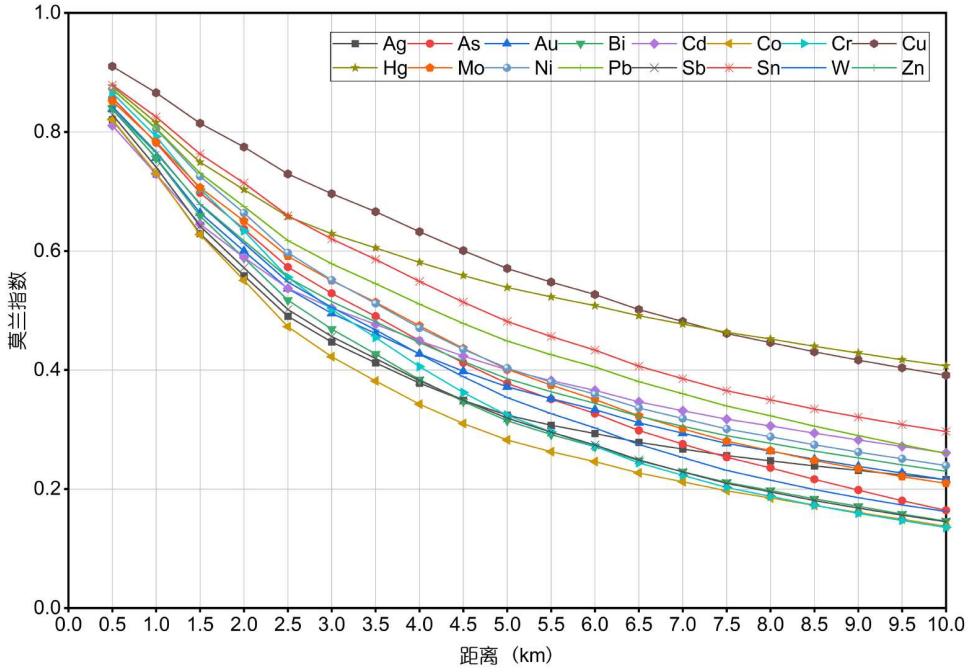



图 4　16种地球化学元素的莫兰指数随距离变化趋势

表 1　MSTGAT模型结构详细信息

| 分支 | 层 | 输入 | 输出 |
|---|---|---|---|
| 谱特征提取 | Transformer-编码器 | [16,32] | [16,32] |
| | Transformer-编码器 | [16,32] | [16,32] |
| | 平均池化 | [16,32] | 32 |
| 空间特征提取 | 尺度1-MSGAT | 16 | 32 |
| | 尺度1-MSGAT | 32 | 32 |
| | 尺度2-MSGAT | 16 | 32 |
| | 尺度2-MSGAT | 32 | 32 |
| | 尺度3-MSGAT | 16 | 32 |
| | 尺度3-MSGAT | 32 | 32 |
| | 全连接层 | 96 | 32 |
| 特征融合 | 全连接层 | 64 | 2 |

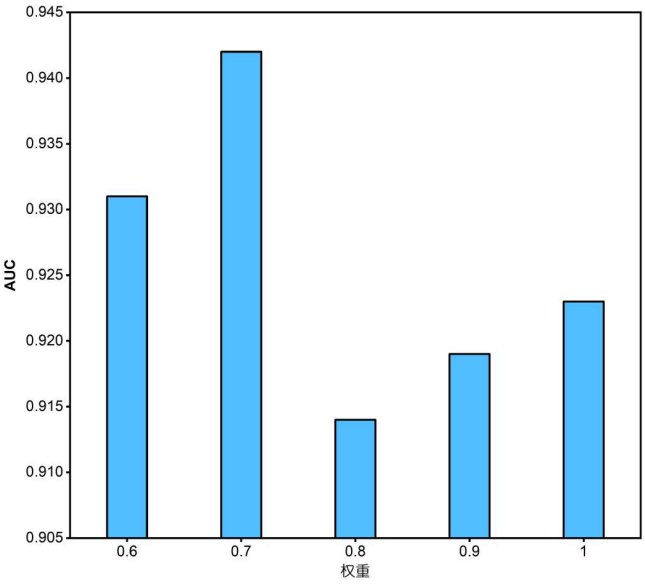



图 5　不同数据增强权重下模型AUC值柱状图

0.919和0.923(图5)。其中，权重设置为0.7时模型获得了最高的AUC值，表明其识别性能优于其他权重设置。因此，增强样本的权重选定为0.7。研究区共有31个已知金多金属矿床点，其中仅有25个用于模型训练。随后，将每个用于训练的金多金属矿床点的一跳邻域作为矿致地球化学异常的有利位置以生成增强样本。

### 4.3　矿致地球化学异常识别

为进一步分析谱特征和空间特征对地球化学异常识别的影响，本研究分别采用谱模型(Transformer)、空间模型(MSGAT)以及谱-空间联合模型(MSTGAT)开展了三组对比实验。图6展示了三种模型的地球化学异常识别结果。采用第90、75和50百分位数作为阈值，将异常划分为高异常、中异常、低异常与背景四类。谱模型通过捕捉地球化学序列中元素浓度及其组合关系来识别地球化学异常。尽管所识别的高异常区与多数已知金多金属矿床呈现空间相关性，但其结果受椒盐噪声影响，导致空间连续性较差(图6A)。图6B为空间模型识别的地球化学异常图。MSGAT能够学习不同尺度的地球化学空间结构特征，相比谱模型，其识别结果的空间连续性提高，并

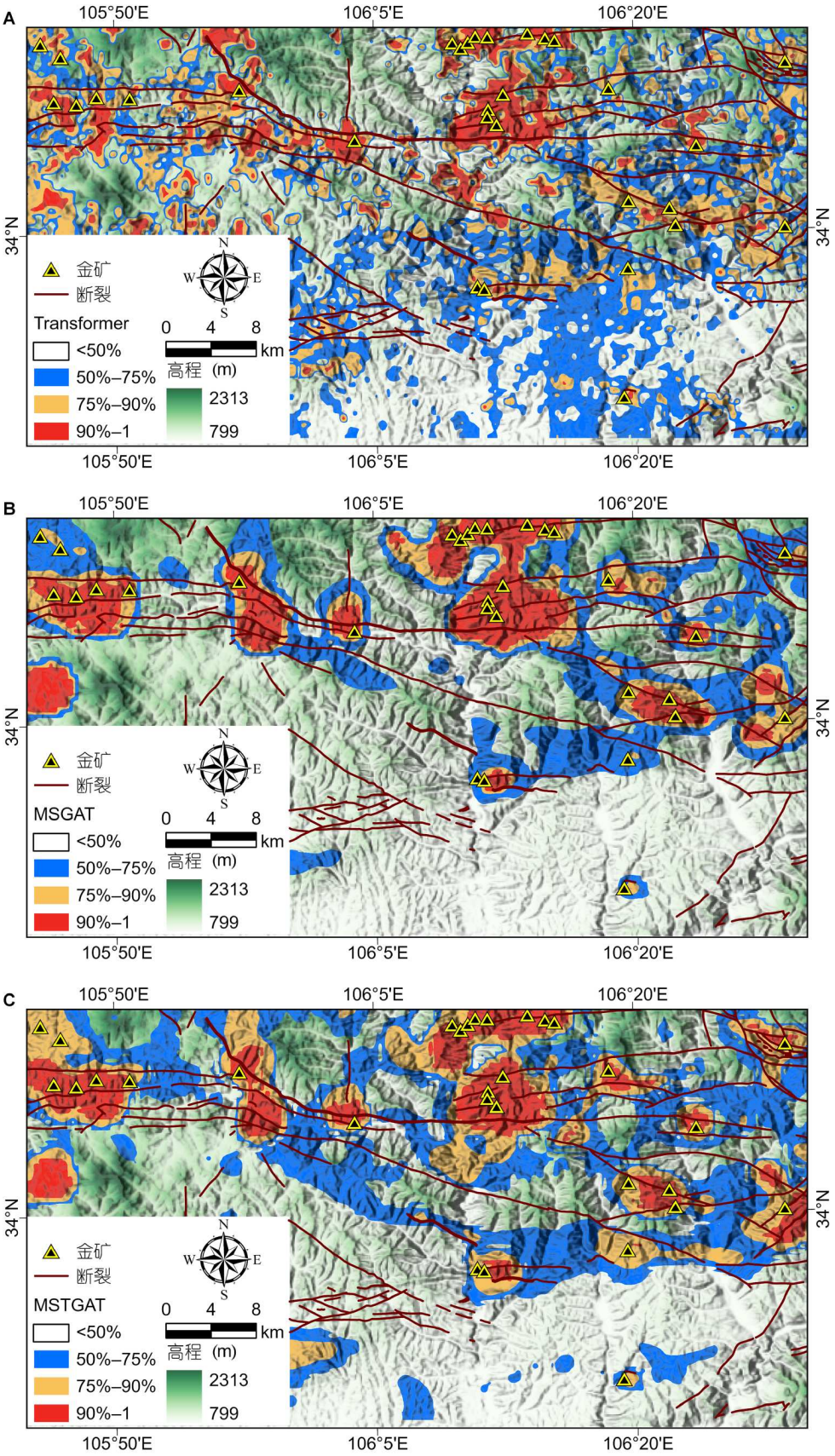



图 6　不同模型识别的地球化学异常图。（A）Transformer模型；（B）MSGAT模型；（C）MSTGAT模型

主要呈带状分布。然而，谱模型和空间模型仍将部分已知金矿床位置识别为低异常区。图6C展示了谱-空间联合模型的矿致地球化学异常识别结果。通过融合Transformer提取的谱特征与MSGAT提取的多尺度空间特征，联合模型不仅使识别的高异常区和中异常区与已知金多金属矿床呈现更强的空间相关性，还展现出更优的空间连续性(图6C)。

上述三种模型识别出的异常区域与断裂分布呈现出空间相关性(图6)，这进一步表明三个模型能够从数据驱动的角度识别潜在的成矿模式。此外，这些结果也揭示了在地球化学异常识别中联合建模谱特征和空间特征的优势。缺少谱信息或空间信息可能导致异常识别的遗漏。

### 4.4　模型性能评估

采用定量指标AUC值和成功率曲线评价MSTGAT模型在矿致地球化学异常识别的性能(图7)。AUC值越接近1，表明模型的判别能力越强。对比实验结果表明，三个模型的AUC值分别为0.909、0.926和0.942(图7A)，其中MSTGAT在识别矿致地球化学异常中AUC值最高。该结果表明融合谱信息和多尺度空间信息能够有效地区分地球化学异常与背景。成功率曲线反映了模型识别的异常区与已知金矿床之间的空间耦合程度。结果表明，使用谱模型、空间模型和谱-空间联合模型圈定80%的已知金矿床分别需要研究区约14%、13%和10%的面积(图7B)。与单一谱模型或空间模型相比，谱-空间联合模型所需勘查面积最小。谱特征和空间特征的融合能够有效提升模型的异常识别性能。

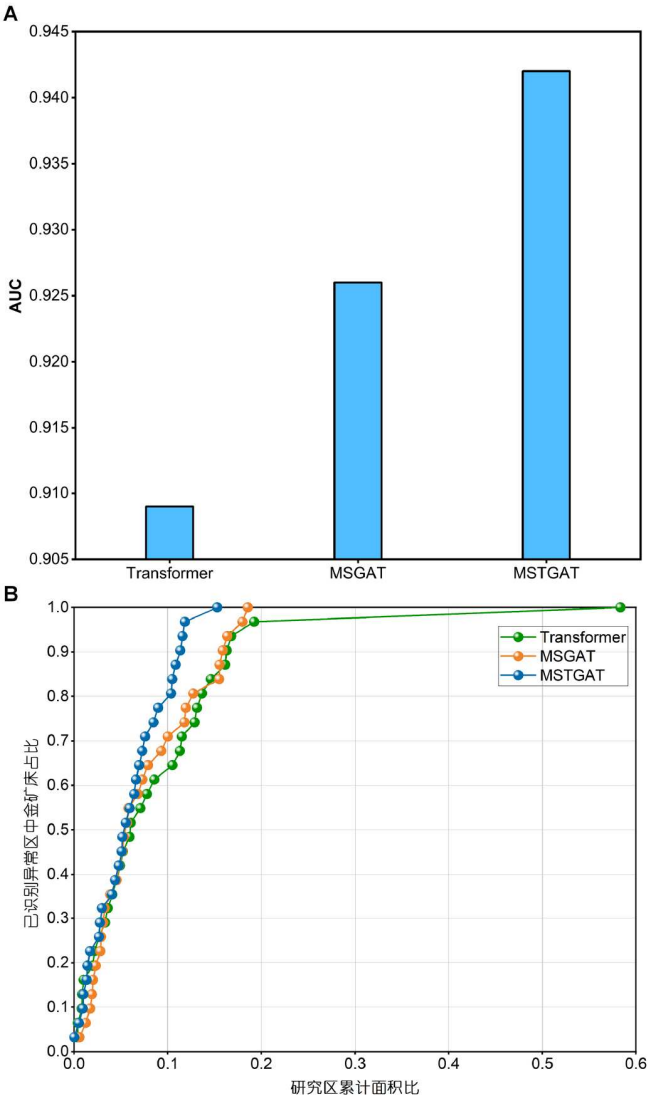



图 7　Transformer、MSGAT和MSTGAT矿致地球化学异常识别性能评估。(A) AUC值柱状图；(B) 成功率曲线

### 4.5　注意力权重可视化

在MSTGAT中，多头注意力机制是谱特征提取模块和空间特征提取模块中的重要组成。通过可视化不同模块的注意力权重，能够分析MSTGAT在地球化学异常识别中的决策过程。对于谱特征提取模块，Transformer中的多头注意力机制能够并行地从多个特征子空间提取元素组合关系，因此其注意力权重能够有效表征地球化学元素之间的关联关系。图8展示了矿床点的平均注意力权重热图，其中横轴表示键，纵轴表示查询。热图中的数值表示当某一地球化学元素作为查询时，其对应键的注意力权重。可以观察到，当Au作为查询时，Ag、As、Cr、Cu、Pb和Zn的注意力权重较高(图8)。这一结果与前人研究一致(杜宛鸽等，2024；张家瑞等，2024)。Au-Ag-As-Cr-Cu-Pb-Zn的元素组合能够反映研究区金多金属矿床的地球化学特征，是金矿勘查的重要地球化学指示。

对于空间特征提取模块，图9展示了三种尺度图结构的边权重分布。由于MSGAT中注意力机制的归一化操作，每个中心节点分配给其邻居节点的注意力系数之和为1。因此，随着邻居节点数量的增加，分配给每条边的注意力权重通常会相应减小。图9表明随着邻域范围的扩大，整体上边注意力权重呈下降趋势。与尺度1相比，尺度2和尺度3的图结构包含更远距离的邻居节点，使图结构更加复杂、信息更加丰富。在此情况下，模型将注意力分散到扩展后的邻域，从而有助于捕捉更大范围的空间模式。此外，可以观察到三个尺度中的边权重均呈现偏态分布，少数边获得较高的注意力权重。这表明MSGAT能够学习空间异质性并识别关键的空间邻接关系。

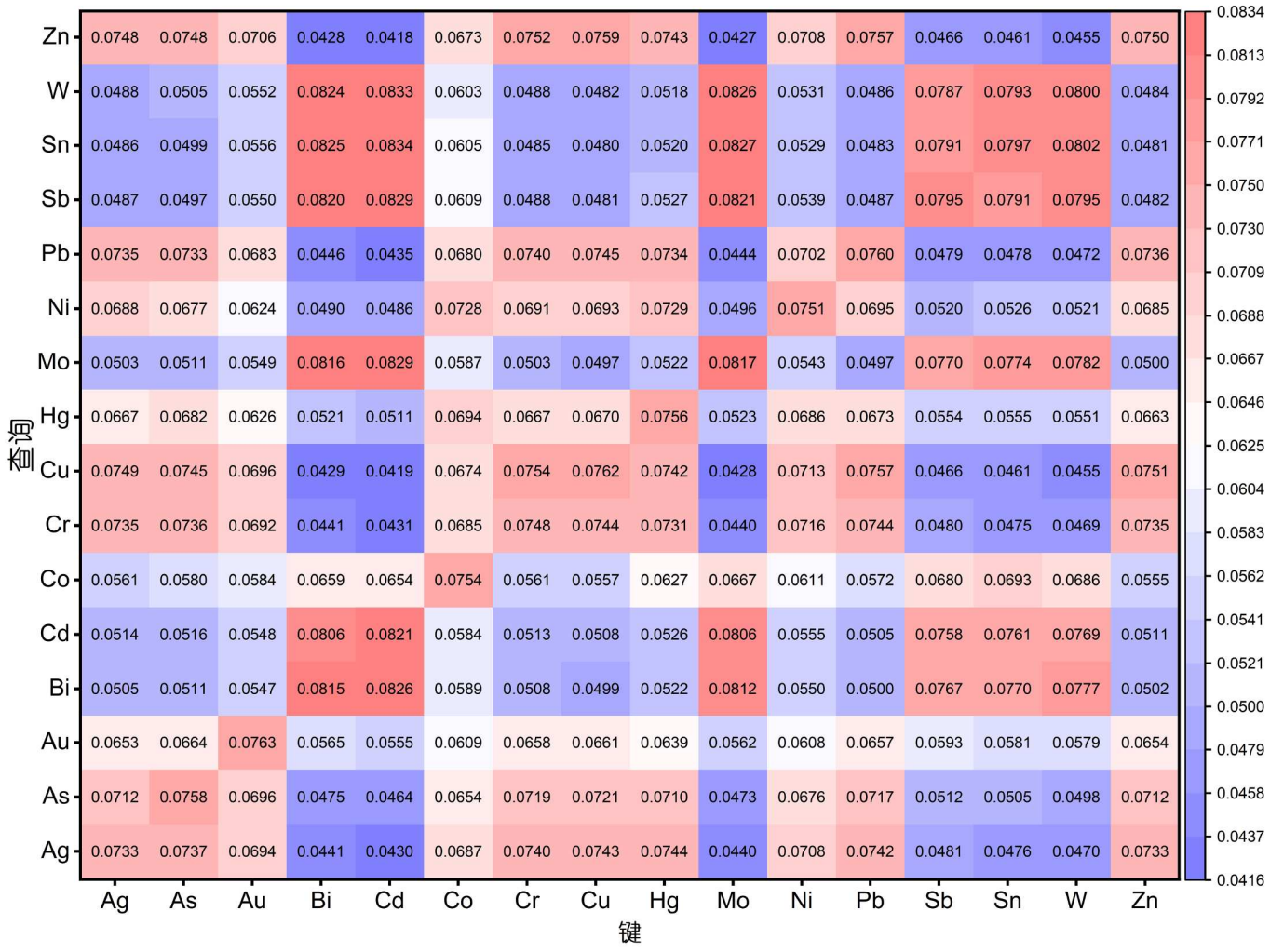



图 8　Transformer注意力权重热图

### 4.6　基于识别高异常区的地球化学勘查

以第90百分位数作为阈值，本研究结合四种方法圈定高异常区：Au单元素异常、谱模型、空间模型以及谱-空间联合模型(图10)，共识别出四处A级异常区和四处B级异常区，为后续找矿勘查提供指导。A1(天子坪-九条沟异常区)位于八卦山岩体的边缘，单元素地球化学异常与三种模型识别的多元地球化学异常均表现为高异常，其异常呈带状分布，与近东西向断裂空间分布一致，区内已发现天子坪、九条沟等金矿床。A2(水洞沟-湘潭子异常区)位于天子山岩体以东，在单元素与多元地球化学异常识别中均表现为高异常，其高异常区与区内断裂空间分布密切相关，区内已发现湘潭子、水洞沟等金矿床。A3(东峪异常区)位于太白岩体北侧，区内已发现东峪、黑水沟等金矿床。A4(花崖沟异常区)断裂发育，区内已发现花崖沟、金厂沟等金矿床；在尚未发现金矿床的断裂交汇处，单元素地球化学异常与多元地球化学异常均表现为高异常特征。这一现象与前人研究揭示的成矿规律一致(Teng等，2025)，表明这些位置可能成为未来勘查的有利区域。

对于B级异常区，B1和B2尚未发现金矿床，但在这些区域均识别出了单元素和多元地球化学高异常。B2位于天子山岩体的边缘，断裂发育，具有有利的成矿条件。在B3和B4区域内已发现金矿点，其邻域在单元素和谱模型识别结果中均表现为高异常，并且这些异常主要沿断裂分布。

## 5　讨论

在MSTGAT模型中应用了数据增强技术，以生成足够的训练样本，缓解成矿样本稀缺的问题。需要指出数据增强样本能够表征基于已知成矿样本推断出的潜在有利位置的特征。因此，在模型训练过程中应为这些增强

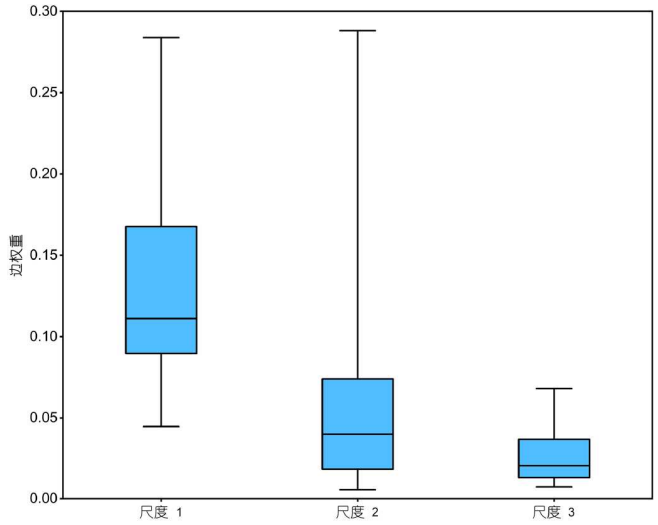



**图 9**　三种尺度图中边权重的箱形图，下须和上须分别表示最小值和最大值，蓝色箱体表示从第1百分位数至第99百分位数的区间，箱体内的线表示中位数

样本分配适当的权重，以避免模型对其过度关注，从而影响对成矿模式的有效学习。未来，可通过引入新的学习策略进一步提升模型在已知矿床数量有限场景下的适用性，例如将现有模型与自监督学习框架相结合(Cheng等，2024；Chen和Zuo，2025)。

矿致地球化学异常是多种地球化学元素在不同空间尺度上富集与亏损共同作用的结果。MSTGAT模型通过提取并融合谱特征与多尺度空间特征，能够有效识别复杂的异常信号。在谱特征学习方面，Transformer在提取地球化学元素间潜在元素组合关系方面具有优势，能够有效地学习地球化学序列中的依赖关系并提取关键特征。注意力权重的可视化不仅增强了谱特征模块的可解释性，还揭示了数据驱动的地球化学指示。在空间特征学习方面，引入多尺度图结构能够增强模型学习不同尺度空间模式的能力。在多头注意力机制的作用下，MSGAT能够对多尺度图中的边权重进行差异化和动态建模，从而增强空间结构特征表征能力。这种自适应机制能够有效地捕捉空间异质性，有助于将地球化学异常从背景中分离出来。所提出的模型能够有效识别矿致地球化学异常，并可推广应用于其他类型矿床的地球化学异常识别。此外，识别出的高异常区对研究区未来的找矿勘查具有指导意义。

## 6　结论

联合建模谱特征与空间特征在矿致地球化学异常识别中至关重要。本研究构建了MSTGAT模型，通过提取和融合元素组合关系和多尺度空间特征，以识别地球化学异常。定性和定量对比结果表明，MSTGAT在矿致地球化学异常识别方面优于单一谱模型和空间模型，识别出的高异常区可为研究区进一步找矿勘查提供指导。此外，谱特征提取模块识别的元素组合可作为研究区金矿勘查的地球化学指示，而空间特征提取模块中的注意力权重分析能够揭示模型学习空间异质性的能力。这些信息有助于理解模型的内部运行机制，并增强其识别结果的可信度。总体而言，MSTGAT在地球化学勘查中具有良好的应用前景。

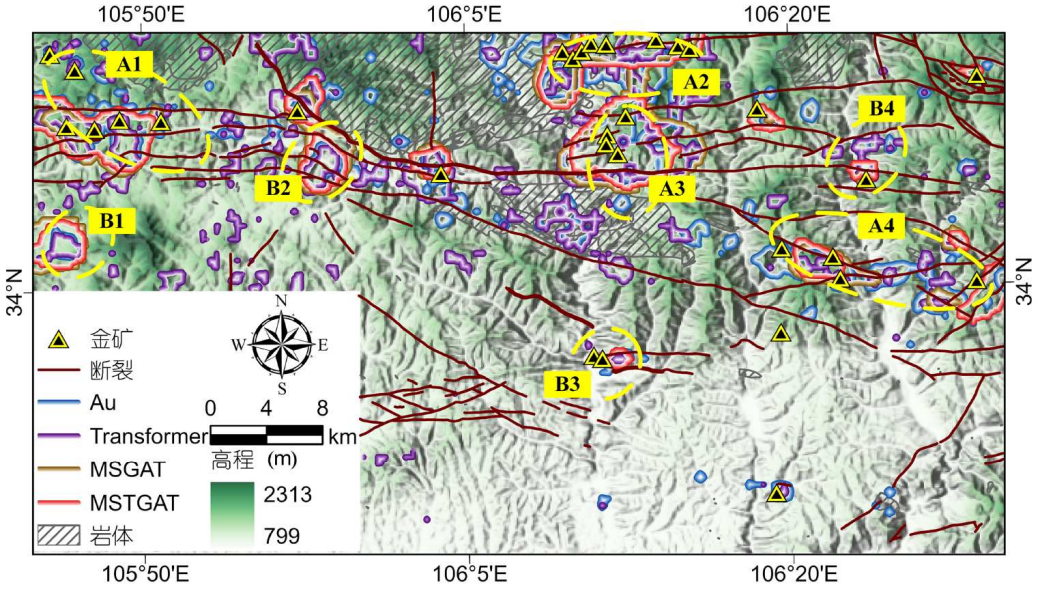



**图 10**　基于Au单元素和多元地球化学异常(第90百分位数)的高异常图，其中黄色虚线表示圈定的有利位置

## 参考文献


成秋明. 2025. 面向人类智能与人工智能融合的矿产资源预测新范式. 地学前缘, 32: 1–19

杜宛鸽, 严康, 高永宝, 等. 2024. 西秦岭花崖沟一带金矿找矿新进展. 中国地质调查, 11: 9–15

刘家军, 刘冲昊, 王建平, 等. 2019. 西秦岭地区金矿类型及其成矿作用. 地学前缘, 26: 1–16

柳永刚, 杨玉平, 李建军, 等. 2020. 西秦岭造山带天子坪金矿床成矿时代及成因.地质通报, 39: 1212–1220

毛先成, 张显洋, 刘占坤, 等. 2022. 胶西北金矿集区地球化学多重分形模型与异常识别. 物探化探计算技术, 44: 213–223

宋欣, 严康, 王超, 等. 2024. 西秦岭湘潭子金矿深部找矿取得新发现(6.358 t). 中国地质, 51: 2105–2106

唐源壑, 高永宝, 严康, 等. 2024. 西秦岭东段花崖沟地区新发现一处具大型远景金矿床. 中国地质, 51: 1791–1792

王学求. 2025. “化学地球”大科学计划: 全球关键元素分布与循环. 地学前缘, 32: 1–10

肖克炎, 孙莉, 李楠, 等. 2015. 大数据思维下的矿产资源评价. 地质通报, 34: 1266–1272

张家瑞, 高永伟, 张忠平, 等. 2024. 甘肃西秦岭地区重要金矿预测模型的建立及资源潜力预测. 西北地质, 57: 88–105

左仁广. 2025. 智能矿产预测的技术挑战与解决方案. 中国科学: 地球科学, 55: 3104–3119

Aitchison J. 1986. The statistical analysis of compositional data. London: Chapman & Hall

Agrawal N, Govil H. 2023. A deep residual convolutional neural network for mineral classification. Adv Space Res, 71: 3186–3202

Carranza E J M. 2011. Analysis and mapping of geochemical anomalies using logratio-transformed stream sediment data with censored values. J Geochem Explor, 110: 167–185

Chen G, Cheng Q. 2018. Fractal-based wavelet filter for separating geophysical or geochemical anomalies from background. Math Geosci, 50: 249–272

Chen S, Wang Y, Yu J, et al. 2020. Petrogenesis of Triassic granitoids in the Fengxian-Taibai ore cluster, Western Qinling Orogen, central China: Implications for tectonic evolution and polymetallic mineralization. Ore Geol Rev, 123: 103577

Chen Z, Zuo R. 2025. Geological-knowledge-guided graph self-supervised pretraining framework for identifying mineralization-related geochemical anomalies. Comput Geoscis, 199: 105913

Cheng Q M. 2008. Modeling local scaling properties for multiscale mapping. Vadose Zone J, 7: 525–532

Cheng S, Wang Y, Zhang Q, et al. 2024. A self-supervised learning framework for seismic low-frequency extrapolation. J Geophys Res, 1: e2024JH000157

Esmaeiloghli S, Tabatabaei S H, Hosseini S, et al. 2024. Blind source separation of spectrally filtered geochemical signals to recognize multi-depth ore-related enrichment patterns. Math Geosci, 56: 1255–1283

Filzmoser P, Hron K. 2009. Correlation analysis for compositional data. Math Geosci, 41: 905–919

Grunsky E C. 2010. The interpretation of geochemical survey data. Geochem Explor Env A, 10: 27–74

Guan Q, Ren S, Chen L, et al. 2022. Recognizing multivariate geochemical anomalies related to mineralization by using deep unsupervised graph learning. Nat Resour Res, 31: 2225–2245

He C G, Li J W, Zu B, et al. 2021. Sericite $^{40}Ar/^{39}Ar$ and zircon U-Pb dating of the Liziyuan gold deposit, West Qinling orogen, central China: Implications for ore genesis and tectonic setting. Ore Geol Rev, 139: 104531

Kipf T N, Welling M. 2016. Semi-supervised classification with graph convolutional networks. arXiv: 1609.02907

LeCun Y, Bengio Y, Hinton G. 2015. Deep learning. Nature, 521: 436–444

Li X, Dong G, Yu X, et al. 2021. Evidence for magma mixing during Triassic magmatism in West Qinling, China: Constraints from petrology, geochemistry, U-Pb zircon geochronology, and Sr-Nd-Hf isotopic of the Baguashan pluton. Geol J, 56: 5255–5274

Liu Q, Wu G, Liu Z, et al. 2024. Local phase-constrained convolutional autoencoder network for identifying multivariate geochemical anomalies. Comput Geoscis, 191: 105679

Ma Z, Mei G. 2021. Deep learning for geological hazards analysis: Data, models, applications, and opportunities. Earth-Sci Rev, 223: 103858

Mao J, Qiu Y, Goldfarb R, et al. 2002. Geology, distribution, and classification of gold deposits in the western Qinling belt, central China. Miner Depos, 37: 352–377

Monteiro B A A, Canguçu G L, Jorge L M S, et al. 2024. Literature review on deep learning for the segmentation of seismic images. Earth-Sci Rev, 258: 104955

Pirajno F. 2009. Hydrothermal processes and mineral systems. Dordrecht: Springer Netherlands

Sabbaghi H, Tabatabaei S H. 2023. Regimentation of geochemical indicator elements employing convolutional deep learning algorithm. Front Environ Sci, 11: 1076302

Shi L, Zuo R. 2025. Geological knowledge-embedding transfer-learning architecture for geochemical anomaly identification. Math Geosci, 57: 821–844

Shi Z, Zuo R. 2026. Improving geochemical anomaly recognition associated with mineralization via geological knowledge interacting reinforcement learning. Math Geosci, 58: 175–194

Teng F, Yan K, Yang K, et al. 2025. Geological characteristics and geochronology of the Huayagou Au deposit, Western Qinling: Implication for regional ore genesis. Ore Geol Rev, 178: 106456

Turner R E, 2023. An introduction to Transformers. arXiv: 2304.10557

Vaswani A, Shazeer N, Parmar N, et al. 2017. Attention is all you need. In: Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems. 30: 5998–6008

Veličković P, Cucurull G, Casanova A, et al. 2017. Graph attention networks. arXiv: 1710.10903

Wan S, Gong C, Zhong P, et al. 2020. Multiscale dynamic graph convolutional network for hyperspectral image classification. IEEE Trans Geosci Remote Sens, 58: 3162–3177

Wang J, Zuo R, Liu Q. 2024. Mapping geochemical anomalies by accounting for the uncertainty of mineralization-related elemental associations. Solid Earth, 15: 731–746

Xie X J, Mu X Z, Ren T X. 1997. Geochemical mapping in China. J Geochem Explor, 60: 99–113

Xu Y, Shi L, Zuo R. 2024. Geologically constrained unsupervised dual-branch deep learning algorithm for geochemical anomalies identification. Appl Geochem, 174: 106137

Xu Y, Zuo R, Chen Z, et al. 2025. Recent advances and future research directions in deep learning as applied to geochemical mapping. Earth-Sci Rev, 270: 105209

Yang F, Zuo R, Xiong Y, et al. 2023. An interpretable attention branch convolutional neural network for identifying geochemical anomalies related to mineralization. J Geochem Explor, 252: 107274

Yang F, Zuo R, Kreuzer O P. 2024. Artificial intelligence for mineral exploration: A review and perspectives on future directions from data

science. Earth-Sci Rev, 258: 104941

Yin B, Zuo R, Xiong Y, et al. 2021. Knowledge discovery of geochemical patterns from a data-driven perspective. J Geochem Explor, 231: 106872

Yu S, Deng H, Liu Z, et al. 2024. Identification of geochemical anomalies using an end-to-end Transformer. Nat Resour Res, 33: 973–994

Zhang C, Yi M, Ye F, et al. 2022. Application and evaluation of deep neural networks for airborne hyperspectral remote sensing mineral mapping: A case study of the Baiyanghe uranium deposit in Northwestern Xinjiang, China. Remote Sens, 14: 5122

Zuo R, Xiong Y. 2018. Big data analytics of identifying geochemical anomalies supported by machine learning methods. Nat Resour Res, 27: 5–13

Zuo R, Xu Y. 2024. A physically constrained hybrid deep learning model to mine a geochemical data cube in support of mineral exploration. Comput Geoscis, 182: 105490

Zuo R, Carranza E J M, Wang J. 2016. Spatial analysis and visualization of exploration geochemical data. Earth-Sci Rev, 158: 9–18

（责任编委：陈华勇）