地质统计学变异函数贝叶斯模型选择方法与比较

张一凡，张璐璐*，徐加宝

上海交通大学海洋工程国家重点实验室，上海 200240

第一作者，E-mail：zhangyifan_stu@126.com

* 通信作者，E-mail：lulu_zhang@sjtu.edu.cn

2023-04-28 收稿；2023-06-27 修回；2023-07-01 接受

基金项目：中国长江三峡集团有限公司科研项目(WWKY-2020-0741)；国家自然科学基金项目(52025094; 51979158)

中图分类号：TU447　　文章编号：2096-8523(2025)02-0038-10　　doi: 10.19509/j.cnki.dzkq.tb20240202

摘　要：变异函数量化了空间 2 点地质属性的变异性，对地质统计分析至关重要。当地质数据随空间坐标呈现趋势变化时，正确选择和估计变异函数十分困难。为实现变异函数的模型选择和参数估计，提出了基于贝叶斯理论的变异函数选择方法，采用拉普拉斯近似方法将后验概率分布近似为高斯分布。首先计算出参数的后验概率分布，随后分别计算每个备选变异函数的贝叶斯模型证据，以确定最优模型。探讨了 3 种模型选择方法在变异函数选择中的适用性，包括贝叶斯模型证据(BME)、Akaike information criterion(AIC)识别准则和 Bayesian information criterion(BIC)识别准则。通过实测静力触探试验的锥端阻力数据，说明了该方法，并从模型拟合度和复杂度罚值 2 个方面比较 3 种方法在变异函数模型选择中的差异性。研究表明，给定试验数据条件下，BME 能够合理地考虑变异函数的拟合度和复杂性；而 AIC 和 BIC 识别准则在模型参数个数相同时，仅能反映不同变异函数的拟合度差异，因此，在这种情况下推荐采用 BME 选择变异函数。本研究方法能够在考虑趋势项参数条件下合理地选择地质统计学变异函数，所选最优变异函数与试验变异函数较一致，为地质统计学分析提供了有效的参考。

关键词：静力触探试验；贝叶斯理论；拉普拉斯近似；变异函数；模型选择；BME；地质统计学

受地质作用、沉积历史、环境和荷载变化等因素的影响，岩土体性质具有显著的空间变异性。空间变异性是岩土参数不确定性的主要来源之一[1-4]。准确表征场地岩土参数的空间变异性对工程设计与分析至关重要。地质统计学方法(如：克里金等方法[5])为空间变异性表征和岩土体参数估计提供了有效工具[6]，通常采用变异函数刻画空间 2 点地质属性的变异性和相关性。

确定变异函数对地质统计学分析至关重要[7-9]。常用的理论变异函数模型包括球状模型、指数模型和高斯模型等，如图 1 所示。传统地质统计学分析通常根据去趋势化的勘察数据计算试验变异函数，然后根据理论变异函数模型拟合试验变异函数点图，拟合过程中需要给定变异函数的理论模型。变异函数因场地和数据而异，勘察数据趋势项直接影响变异函数的拟合结果。然而，传统人为选择理论模型的方法无法定量地确定最适合的变异函数，亟需发展一种根据场地勘察数据自动选择变异函数的有效方法[10-11]。

CAO 等[12]提出了基于贝叶斯模型证据的岩土参数自相关函数的模型选择方法，通过不含趋势项的静力触探数据说明和验证所提方法；田密等[13]拓展了该方法，基于静力触探数据选择砂土有效内摩擦角的自相关函数类型；ZHAO 等[14]利用贝叶斯高

著录信息：张一凡，张璐璐，徐加宝. 地质统计学变异函数贝叶斯模型选择方法与比较[J]. 地质科技通报，2025，44(2)：38-47.
ZHANG Yifan，ZHANG Lulu，XU Jiabao. Bayesian methods for geostatistical variogram model selection and comparative study[J]. Bulletin of Geological Science and Technology，2025，44(2)：38-47.

© Editorial Office of Bulletin of Geological Science and Technology. This is an open access article under the CC BY-NC-ND license.　https://dzkjqb.cug.edu.cn

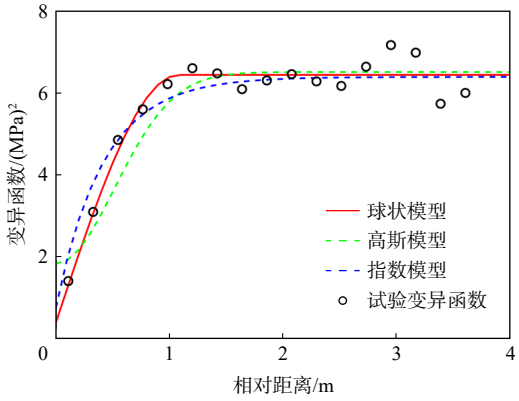


图 1　试验变异函数和常用的理论变异函数模型

Fig. 1　Experimental variation function and commonly used theoretical variation function model

斯过程回归预测岩石单轴抗压强度，通过贝叶斯模型选择提高了预测的准确性。然而，上述方法仅适用于针对不含趋势项条件的岩土参数自相关函数选择问题[15-16]，而对含趋势项条件下的空间变异函数选择问题缺乏探讨。此外，文献中的模型选择准则除了贝叶斯模型证据(BME)外，还有 Akaike information criterion(AIC)识别准则、Bayesian information criterion(BIC)识别准则[17-18]等，不同识别准则对地质统计学变异函数选择的适用性尚未可知。

本研究提出了一种基于贝叶斯理论的岩土参数变异函数的模型选择和参数估计方法，适用于含趋势项的勘察数据(比如静力触探锥尖阻力)。该方法基于拉普拉斯近似计算不同备选变异函数模型的贝叶斯模型证据(BME)，根据勘察数据和先验知识选择最可能的变异函数作为最优模型。在此基础上，对比了 3 种模型选择准则(即 BME、AIC 和 BIC)在变异函数模型选择中的适用性，将 3 种准则的评价指标分为模型拟合度和复杂度罚值，分析了模型拟合度和复杂度罚值在模型比选中的影响和作用。

1　基于贝叶斯理论的空间变异性参数识别与变异函数模型比选方法

岩土体空间变异性可以分解为趋势项和内在空间变异性[19]，本研究考虑线性空间趋势项，令 $\boldsymbol{\beta}$ 为空间趋势项模型参数。变异函数量化了空间 2 点地质属性的内在变异性，包括指数模型、高斯模型、球状模型，每种变异函数对应着各自的协方差函数，如表 1 所示。

1.1　贝叶斯参数识别与模型选择框架

令 $\boldsymbol{\theta}$ 表示空间变异性表征所需参数，包括表示趋势项函数和变异函数的参数。$\boldsymbol{\theta}$ 的先验概率分布为 $P(\boldsymbol{\theta})$。根据贝叶斯定理，给定变异函数 C 条件下，结合勘察数据 $\boldsymbol{z}$ 以及先验知识，可得 $\boldsymbol{\theta}$ 的后验概率分布 $P(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{z},C_i)$ 为[20-21]：

$$P(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{z},C_i)=kL(\boldsymbol{\theta}|C_i)P(\boldsymbol{\theta}|C_i)=kP(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta},C_i)P(\boldsymbol{\theta}|C_i),\quad(1)$$

式中：$L(\boldsymbol{\theta}|C_i)=P(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta},C_i)$，为给定 $\boldsymbol{\theta}$ 值时观测结果为 $\boldsymbol{z}$ 的可能性，称为似然函数；k 为与 $\boldsymbol{\theta}$ 无关的归一化系数。

贝叶斯模型选择方法通过计算每个备选变异函数的模型概率，并选取概率最大的模型为最优模型 $C^*(h)$。设有 N_m 个备选的变异函数 $C_i(i=1,2,...,N_m)$，根据贝叶斯公式，C_i 的后验概率 $P_r(C_i|\boldsymbol{z})$ 计算如下[22]：

$$P_r(C_i|\boldsymbol{z})=\frac{P(\boldsymbol{z}|C_i)P_r(C_i)}{P(\boldsymbol{z})},\quad(2)$$

式中：$P(\boldsymbol{z}|C_i)$ 表示在给定模型 C_i 时观测到勘察数据 $\boldsymbol{z}$ 的可能性，称为贝叶斯模型证据 BME；$P_r(C_i)$ 表示 C_i 的先验概率。在先验信息不足时通常假定每个备选变异函数的先验概率相等，均为 $1/N_m$。$P(\boldsymbol{z})=\sum_{i=1}^{N_m}P(\boldsymbol{z}|C_i)P(C_i)$ 为与 C_i 无关的归一化常数。因此，$P_r(C_i|\boldsymbol{z})$ 的相对大小取决于贝叶斯模型证据 BME，模型证据数值最大时对应的变异函数模型即为最优模型 $C^*(h)$，模型证据 $P(\boldsymbol{z}|C_i)$ 可由下式计算：

$$P(\boldsymbol{z}|C_i)=\int_{u_k}P(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta},C_i)P(\boldsymbol{\theta}|C_i)\mathrm{d}\boldsymbol{\theta}。\quad(3)$$

表 1　常用理论变异函数模型及其协方差函数公式

Table 1　Commonly used theoretical variance function model and its covariance function formula

模型	变异函数 $\gamma(h)$	协方差函数 $C(h)$
指数模型	$\begin{cases}c_0+c_1(1-\exp(-h/a)), h>0\\0, h=0\end{cases}$	$\begin{cases}c_1\exp(-h/a), h>0\\c_0+c_1, h=0\end{cases}$
高斯模型	$\begin{cases}c_0+c_1(1-\exp(-h^2/a^2)), h>0\\0, h=0\end{cases}$	$\begin{cases}c_1\exp(-h^2/a^2), h>0\\c_0+c_1, h=0\end{cases}$
球状模型	$\begin{cases}c_0+c_1, h>a\\c_0+c_1\left(1.5\frac{h}{a}-0.5\frac{h^3}{a^3}\right), 0<h\leqslant a\\0, h=0\end{cases}$	$\begin{cases}0, h>a\\c_1\left(1-1.5\frac{h}{a}+0.5\frac{h^3}{a^3}\right), h\leqslant a\\c_0+c_1, h=0\end{cases}$

注：c_0 为块金值；c_1 为偏基台值；c_0+c_1 为基台值；a 为变差距离或相关长度；h 为空间2点的距离；下同

1.2　先验分布

贝叶斯参数识别与模型选择的关键一步是确定先验分布。如前所述，不确定性参数 $\boldsymbol{\theta}$ 包括趋势项参数 $\boldsymbol{\beta}$ 和变异函数的参数 c_0，c_1 和 a，即 $\boldsymbol{\theta}=[\boldsymbol{\beta},c_0,c_1,a]$。先验分布应能够反映未获取勘察数据

时对模型参数的认知状态[23]。为了便于后验分布和模型证据计算，本研究假设先验分布为正态分布，即

$$\boldsymbol{\beta} \sim N\left(\bar{\boldsymbol{\beta}}, \omega_{\beta}\right); c_0 \sim N\left(\bar{c}_0, \omega_{c_0}\right);$$
$$c_1 \sim N\left(\bar{c}_1, \omega_{c_1}\right); a \sim N\left(\bar{a}, \omega_a\right) \quad , \tag{4}$$

式中：$\bar{\boldsymbol{\beta}}$ 表示趋势项参数的平均值；ω_{β} 表示趋势项参数的标准差；$\bar{c}_0$，$\bar{c}_1$，$\bar{a}$ 分别为 c_0，c_1 和 a 的先验平均值；ω_{c_0}，ω_{c_1} 和 ω_a 分别为 c_0，c_1 和 a 的先验标准差。

建议先验标准差取为较大值，令先验分布提供较少的先验信息，由数据确定模型参数的后验分布。块金值 c_0 表示在极短距离（理论上为 0）内变量的不规则波动或测量误差引起的方差；基台值 c_1 表示变量在较大距离（即变程）内达到稳定状态时的总体变异程度。c_0，c_1 和 a 均不可为负，采用正态分布作为先验分布时应当注意取值的合规性，在后文优化过程中在合理定义域内取值。

假设根据先验信息不同参数独立，先验分布 $P(\boldsymbol{\theta}|C_i)$ 为 $\boldsymbol{\theta}$ 的联合正态分布形式，表达如下：

$$P(\boldsymbol{\theta}|C_i) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}\omega_{\beta}\omega_{\mu}\omega_{\sigma}\omega_{\lambda}} \times \exp\left\{-\frac{1}{2\omega_{\beta}^2}(\beta-\beta_0)^2 - \frac{1}{2\omega_{\mu}^2}(\mu-\mu_0)^2 - \frac{1}{2\omega_{\sigma}^2}(\sigma-\sigma_0)^2 - \frac{1}{2\omega_{\lambda}^2}(\lambda-\lambda_0)^2\right\}, \tag{5}$$

式中：μ，μ_0 分别为先验信息的均值与高斯后验分布的均值；σ，σ_0 分别为先验信息的标准差与高斯后验分布的标准差；λ，λ_0 分别为先验信息的相关距离与高斯后验分布的相关距离。

1.3　似然函数

令 $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{G}(\boldsymbol{\theta})$ 为趋势项，$\boldsymbol{q}$ 为趋势项预测值。由于空间变异性的复杂性，趋势项函数无法准确地刻画岩土参数的空间变异性，趋势项预测值 $\boldsymbol{q}$ 与现场观测值 $\boldsymbol{z}$ 存在差别，这种差别通常被称为内在空间变异性 ε，表达如下：

$$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{G}(\boldsymbol{\theta}) + \varepsilon \tag{6}$$

采用零均值高斯随机场描述 ε [24]，则 $\boldsymbol{z}$ 服从均值向量为 $\boldsymbol{G}(\boldsymbol{\theta})$，协方差矩阵为 $\boldsymbol{C}$ 的多维高斯分布，表达式如下：

$$P(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}, C_i) = (2\pi)^{-n/2}|\det \boldsymbol{C}|^{-1/2} \times \exp\left\{-\frac{1}{2}[\boldsymbol{z}-\boldsymbol{G}(\boldsymbol{\theta})]^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}^{-1}[\boldsymbol{z}-\boldsymbol{G}(\boldsymbol{\theta})]\right\}。 \tag{7}$$

式（7）为本研究似然函数，定量反映了在给定 $\boldsymbol{\theta}$ 条件下，对应的空间变异性表征模型（包括趋势项和变异函数）和勘察数据 $\boldsymbol{z}$ 的拟合度。

1.4　后验分布

给定变异函数 $\boldsymbol{C}$ 条件下，$\boldsymbol{\theta}$ 的后验分布 $P(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{z}, C_i)$ 函数形式比较复杂，采用数值积分计算后验分布计算效率较低，通常需要借助随机模拟方法或近似求解方法[25]。本研究采用拉普拉斯近似方法计算参数后验分布，将其近似为高斯分布。基于此，当 $p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{z})$ 最大化时，$\boldsymbol{\theta}$ 的后验均值等于后验概率密度的最大后验估计，表示为 $\boldsymbol{\theta}^* = (\boldsymbol{\beta}^*, c_0^*, c_1^*, a^*)$。在拉普拉斯近似方法中，确定 $\boldsymbol{\theta}$ 的后验均值简化为在 $(\boldsymbol{\beta}, c_0, c_1, a)$ 多维空间上最小化函数 $-\ln P(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{z}, C_i)$ 确定最大后验估计。因此，定义优化目标函数 $f(\boldsymbol{\theta}) = -\ln P(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{z}, C_i)$，求出使 f 取得最小值的点 $(\boldsymbol{\beta}^*, c_0^*, c_1^*, a^*)$：

$$\boldsymbol{\theta}^* = \arg\min_{\theta} f(\boldsymbol{\theta})。 \tag{8}$$

在拉普拉斯近似方法中，逼近后验高斯概率密度函数的协方差矩阵 $\boldsymbol{H}$[26]：

$$\boldsymbol{H} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial \theta_1 \partial \theta_2} & \frac{\partial^2 f}{\partial \theta_1 \partial \theta_3} & \frac{\partial^2 f}{\partial \theta_1 \partial \theta_4} \\ & \frac{\partial^2 f}{\partial \theta_2 \partial \theta_2} & \frac{\partial^2 f}{\partial \theta_2 \partial \theta_3} & \frac{\partial^2 f}{\partial \theta_2 \partial \theta_4} \\ & & \frac{\partial^2 f}{\partial \theta_3 \partial \theta_3} & \frac{\partial^2 f}{\partial \theta_3 \partial \theta_4} \\ sym. & & & \frac{\partial^2 f}{\partial \theta_4 \partial \theta_4} \end{bmatrix}^{-1}。 \tag{9}$$

矩阵 $\boldsymbol{H}$ 的主对角线元素为参数的后验方差，非对角线元素为参数的协方差。在高斯分布假设下，$\boldsymbol{\theta}^* = (\boldsymbol{\beta}^*, c_0^*, c_1^*, a^*)$ 和 $\boldsymbol{H}$ 共同表达了 $\boldsymbol{\theta}$ 的后验分布。

2　变异函数模型选择方法

2.1　贝叶斯模型证据 BME

基于公式（3）计算贝叶斯模型证据需要计算高维积分。为避免高维积分，给定变异函数 C_i 下，根据拉普拉斯近似求得 $\boldsymbol{\theta}^*$ 和 $\boldsymbol{H}$ 后，贝叶斯模型证据 BME 近似计算如下：

$$\ln(P(\boldsymbol{z}|C_i)) = \ln(P(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}^*, C_i)) + \ln(P(\boldsymbol{\theta}^*|C_i)) + \frac{d}{2}\ln(2\pi) - \frac{1}{2}\ln(|\boldsymbol{H}|), \tag{10}$$

式中：$\ln(P(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}^*, C_i))$ 为参数最大后验估计 $\boldsymbol{\theta}^*$ 对应的对数似然函数值；$P(\boldsymbol{\theta}^*|C_i)$ 为 $\boldsymbol{\theta}^*$ 对应的先验概率分布值；d 为模型参数的数目。

贝叶斯模型选择方法中分别计算在不同变异函数对应的 *BME* 值，在先验模型概率分布 $\mathrm{P_r}(C_i)$ 为离散均匀分布条件下，选择概率 *BME* 值最大的模型为最优模型 $C^*(h)$。公式（10）中 $\ln(P(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}^*, C_i))$ 代表

模型拟合度，$-\ln(P(\boldsymbol{\theta}^*|C_i))-\frac{d}{2}\ln(2\pi)+\frac{1}{2}\ln((|\boldsymbol{H}|))$ 代表模型复杂度罚值。可见，基于 BME 进行模型选择，倾向于选择拟合度较大、罚值较小的模型[27-28]。

2.2 AIC 准则

AIC 准则是模型选择中常用的准则之一，定义如下[29]：

$$AIC=-2\ln P(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta},C_i)_{\max}+2d, \quad (11)$$

式中：$P_r(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta},C_i)_{\max}$ 为模型对应的似然函数最大值，计算所采用的值与公式(10)一致。

如表 1 中指数模型、高斯模型和球状模型均含有 3 个参数。与 BME 类似，$2\ln P_r(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta},C_i)_{\max}$ 代表模型拟合度，$2d$ 为模型复杂度罚值。由式(11)可知，拟合度越大或罚值越小，*AIC* 值越小。因此，选取 *AIC* 值最小的模型为最优模型。

2.3 BIC 准则

在模型选择中的另一个准则为 BIC 准则，定义如下[29]：

$$BIC=-2\ln P(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta},C_i)_{\max}+d\ln(N_m), \quad (12)$$

式中：N_m 为数据点个数。类似于 AIC 准则，BIC 准则中 $2\ln P_r(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta},C_i)_{\max}$ 代表模型拟合度，$d\ln(N_m)$ 代表模型复杂度罚值，最小 *BIC* 值对应最优模型。

本节介绍了 BME、AIC 识别准则和 BIC 识别准则的定义及计算方法，公式详见式(10)～(12)。表 2 总结了 3 种判别准则的拟合度与罚值，具体讨论见算例。

表 2　3 种模型比选准则

Table 2　Three model selection criteria

模型比选	拟合度	罚值
BME	$\ln(P(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}^*,C_i))$	$-\ln(\mathrm{P_r}(\theta^*|C_i))-\frac{d}{2}\ln(2\pi)+\frac{1}{2}\ln(\lvert\boldsymbol{H}\rvert)$
AIC	$2\ln P(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta},C_i)_{\max}$	$2d$
BIC	$2\ln P(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta},C_i)_{\max}$	$d\ln(N_m)$

注：表中代号含义详见正文

3　计算流程

所提地质统计学变异函数参数识别和模型选择方法计算流程主要包括以下 5 步：

(1)确定 N 个备选模型 $C_i(i=1,2,...,N)$，如指数模型、高斯模型、球状模型。

(2)根据勘测数据以及工程经验确定参数 $\boldsymbol{\theta}$ 的先验分布。

(3)对 N 个备选模型 C_i，分别通过式(4)～(9)计算参数的后验分布。

(4)根据式(10)计算 N 个备选模型 C_i 的模型证据。

(5)通过 MATLAB 软件[30-31]开发了计算程序，实现上述功能，只需要输入勘察数据、先验分布以及备选变异函数，就可以获得每个变异函数对应的后验分布和模型证据值，根据模型证据定量地选择变异函数。值得注意的是，所提方法中可以同时识别趋势项函数和变异函数参数，分析前无需进行去趋势项处理，简化了分析过程，便于应用。

4　算　例

采用国际土力学及岩土工程学会 ISSMGE TC304 数据库(304 dB)中位于美国南卡罗来纳州好莱坞场地的 25 套圆锥静力触探试验(CPT)数据说明所提方法。CPT 测试点分布如图 2 所示，25 套 CPT 的锥尖阻力 q_c 数据如图 3 所示。在每次测试中，数据间隔为 0.02 m。图 3 显示了土层的 q_c 剖面与深度的关系，在土层的顶部和底部有一些异常值。因此，本研究选择 2～13 m 无异常值的数据进行分析。岩土工程中根据场地情况，趋势函数可以假设为线性或非线性多项式，假定 q_c 与深度呈现线性趋势，采用所提方法识别趋势项参数 β，β_0 为常数项参数，β_1 为一次项参数。

首先以 P1-6 点位的 q_c 数据为例说明基于拉普拉斯近似的贝叶斯参数识别与模型选择方法，然后开展基于 BME、AIC 准则、BIC 准则的变异函数模型比较研究[32-34]。本算例中采用较为常见的 3 种模型(即指数模型、高斯模型和球状模型)，如表 1 所示。参数的先验信息，采用前文所述的正态分布(式(4))，模型参数取值见表 3。

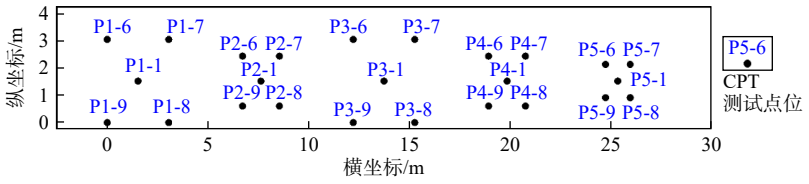


图 2　25 套圆锥静力触探试验 (CPT) 测试的空间分布

Fig. 2　Spatial distribution of 25 sets of CPT tests

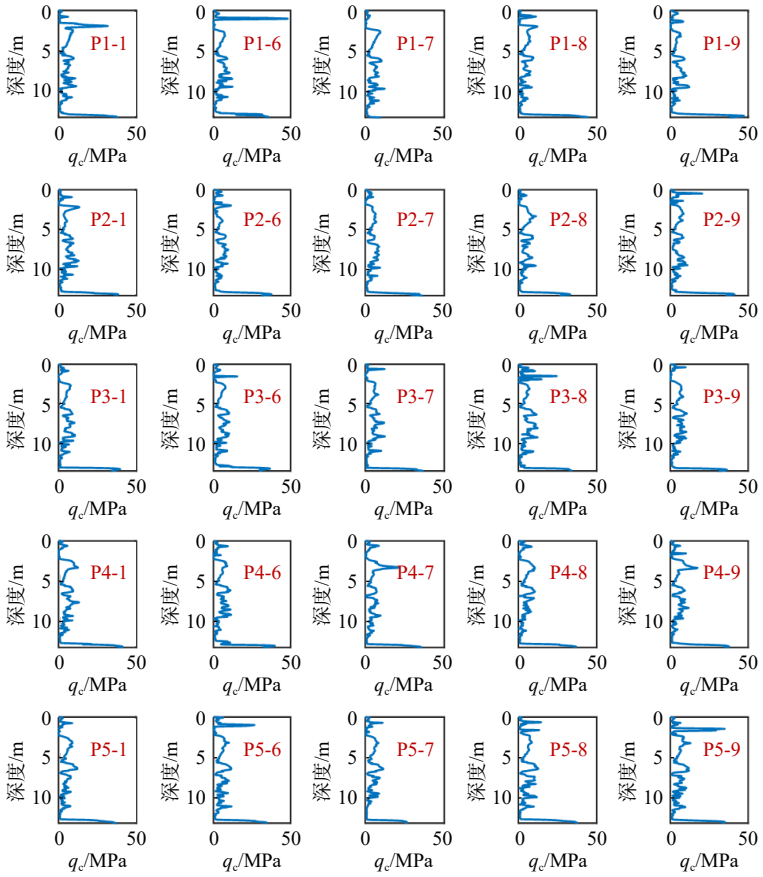


图 3　25 套 CPT 测试的锥尖阻力 q_c

Fig. 3　Cone tip resistance for 25 CPT tests

表 3　模型参数的先验分布

Table 3　Prior distribution of model parameters

模型参数	β_0	β_1	$c_0(\geqslant 0)$	$c_1(\geqslant 0)$	$a(\geqslant 0)$
平均值	0	0	5	30	5
标准差	10	10	100	200	10

注: β_0. 常数项参数; β_1. 一次项参数; 下同

4.1　贝叶斯参数识别与模型选择结果

基于 P1-6 点位 CPT 测试数据及正态分布的参数先验信息, 利用拉普拉斯近似方法计算可得到模型参数的后验分布(后验均值与标准差)和 *BME* 值(式(10))。表 4 为不同变异函数条件下后验均值、后验标准差和模型证据、模型选择概率。图 4 对比了不同变异函数条件下的模型参数先验分布(蓝色实线)和后验分布(虚线), 在相同数据条件下变异函数显著影响模型参数的后验分布。如表 4 所示, 根据 P1-6 点位的 CPT 测试数据, 球状模型对应的 *BME* 数值最大, 因此 P1-6 数据对应的最可能变异函数为球状模型。图 5 对比了 P1-6 点位 q_c 数据的试验变异函数与 3 种模型的理论变异函数, 3 种方法识别的最优模型均与试验变异函数具有较好一致性, 其中 BME 方法所得的球状模型的拟合效果更好, 尤其是在相对距离较短处(如<1 m)。

4.2　模型选择方法比较研究

前文基于先验信息及 P1-6 点位测试数据, 利用贝叶斯模型选择方法确定了该套数据对应的模型证据 BME。本节对比 BME、AIC 识别准则和 BIC 识

表 4　P1-6 点位 CPT 测试数据下 3 种模型的计算结果

Table 4　Calculation results of three models under P1-6 data

模型	后验均值					后验标准差					模型证据	模型选择概率
	β_0	β_1	c_0	c_1	a	β_0	β_1	c_0	c_1	a		
球状模型	6.39	−1.31	0.95	8.85	2.08	0.99	0.41	0.34	9.39	0.06	−122.43	0.6814
高斯模型	6.57	−0.98	1.33	8.38	1.18	0.99	0.51	0.87	15.42	0.84	−150.81	0
指数模型	6.45	−1.19	0.52	9.23	1.22	1.00	0.46	0.44	13.85	0.44	−123.19	0.3186

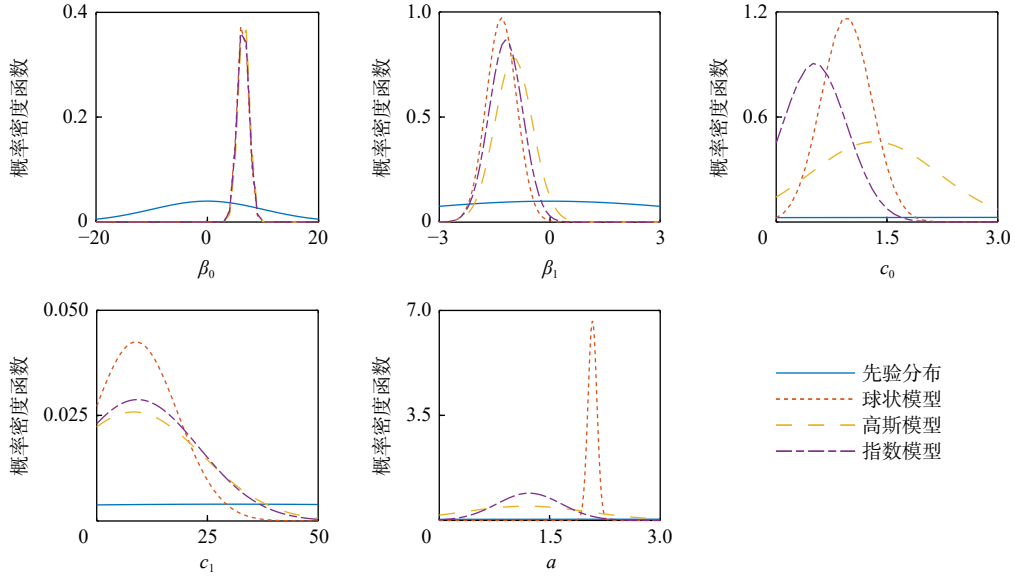


图 4　不同变异函数条件下模型参数的先验分布和后验分布

Fig. 4　Prior distribution and posterior distribution of model parameters under different variogram conditions

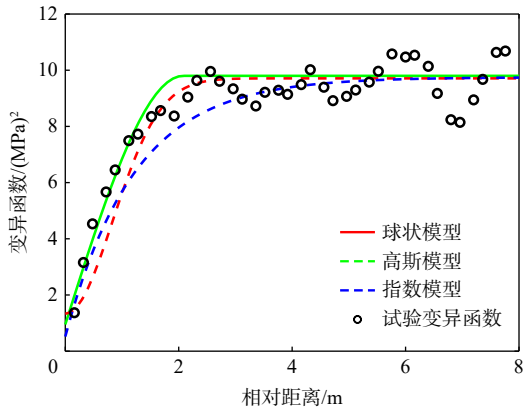


图 5　P1-6 点位试验变异函数与理论变异函数对比

Fig. 5　Comparison of experimental variance function with theoretical variance function

别准则的变异函数选择结果。与 BME 不同，AIC 和 BIC 准则中选择 *AIC* 值和 *BIC* 值最小的模型为最优模型。如表 5 所示，根据 P1-6 点位试验数据，采用 AIC 和 BIC 识别的最优模型为指数模型，在给定相同试验数据条件下 BME 和 AIC(或 BIC)选择的模型并不一致。如图 5 所示，BME 选择的球状模型和试验变异函数更加一致。

如式(11)和(12)所示，AIC 准则与 BIC 准则的拟合度一致，但是罚值不同。当模型参数数目相同且数据量一致时，不同模型的 AIC 和 BIC 惩罚项(即 $2d$ 和 $d\ln(N_m)$)相同，模型选择完全取决于拟合度(即 $2\ln P(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta},C_i)_{\max}$)。然而，对于 BME，变异函数不仅影响模型拟合度(即 $\ln(P(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}^*,C_i))$)，而且影响模型复杂度惩罚项(即 $-\ln(P(\boldsymbol{\theta}^*|C_i))+\frac{d}{2}\ln(2\pi)+\frac{1}{2}\ln((|\boldsymbol{H}|))$)。因此，尽管球状模型的拟合度略低于指数模型，由于相对更低的罚值被认为是更加合适的模型。罚值的大小体现在表 5 中的参数后验方差，当 Hessian 矩阵的行列式越小，表示后验分布的曲率越大，即后验分布较为集中。相对于 AIC 和 BIC 识别准则，BME 更加全面地考虑了模型选择过程中不同模型对空间变异性模型参数识别(如 $\boldsymbol{\theta}^*$)及其不确定性(如 $\boldsymbol{H}$)的影响。

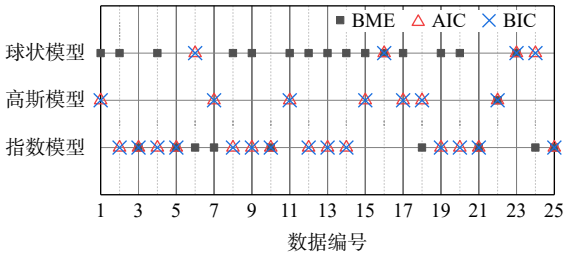
表 5　基于 P1-6 点位测试数据变异函数模型选择结果对比

Table 5　Comparison of selection results based on variation function model of P1-6 data

模型	BME			AIC识别准则			BIC识别准则		
	*BME*值	拟合度	罚值	*AIC*值	拟合度	罚值	*BIC*值	拟合度	罚值
球状	−122.43	−110.01	−12.42	230.02	220.02	10	251.09	220.02	31.07
高斯	−150.81	−137.80	−13.01	285.60	275.60	10	306.67	275.60	31.07
指数	−123.19	−109.69	−13.50	229.38	219.38	10	250.45	219.38	31.07

4.3　关于不同模型选择方法中拟合度和罚值的讨论

为了进一步探讨 3 种方法在变异函数模型选择，分别采用 304 dB 中的 25 组数据开展研究。图 6 所示为 BME、AIC 准则和 BIC 准则对应的 25 套 CPT 数据的最优变异函数模型选择结果。如图 6 所示，AIC 准则和 BIC 准则得到的最优模型完全一致，其中 14 组选择指数模型，7 组数据对应高斯模型，4 组数据对应球状模型；相反，根据 BME，15 组数据选择球状模型，1 组数据对应高斯模型，9 组数据对应指数模型。如前所述，不同模型选择方法由于拟合度和罚值不同，所选结果有所不同，但是给定模型选择



方法	球状模型	高斯模型	指数模型
BME	15	1	9
AIC	4	7	14
BIC	4	7	14

最优模型频次统计结果

图 6　25 套 CPT 数据 3 种方法选择的最优模型

Fig. 6　Optimal model selected by three methods for 25 CPT tests

方法条件下，对于同一场地的 25 套数据存在主导的变异函数。对于具体场地的地质统计学分析如何合理地确定和选择最优变异函数至关重要，BME 相较于 AIC 和 BIC 准则更加合理地考虑变异函数对参数（包含趋势项参数）识别和模型选择影响。

图 7a，b 为 25 套数据采用 3 种方法选择的最优模型的 *BME* 值、*AIC* 值和 *BIC* 值的绝对值，以及不同方法对应的拟合度绝对值。如图 7b 所示 *AIC* 和 *BIC* 值曲线与其拟合度曲线的趋势项完全一致，这是因为 AIC 准则与 BIC 准则的拟合度一致，仅罚值不同，而每组 CPT 数据参数数目相同且数据一致，使得 25 套数据的 AIC 准则或 BIC 准则的罚值也相同。如图 7 所示，*BME* 对数值和拟合度存在显著差异，*BIC* 值与其拟合度差异也较为明显，而 *AIC* 值与其拟合度差异较小，这是由于在不同方法中模型复杂度惩罚项（罚值）所占比例不同，如图 7c 所示。值得注意的是，模型罚值是模型选择指标（*BME*、*AIC* 值和 *BIC* 值）的重要组成部分，在拟合度相近的条件下，罚值在模型选择中具有关键作用。

BME 罚值包括 3 项（即 $-\ln(P(\boldsymbol{\theta}^*|C_i))-\frac{d}{2}\ln(2\pi)+\frac{1}{2}\ln((|\boldsymbol{H}|))$），第 1 项反映了最优参数在先验信息下的概率，第 2 项为与参数的维度有关，第 3 项 Hessian 矩阵的行列式的对数值反映了模型参数的后验不确

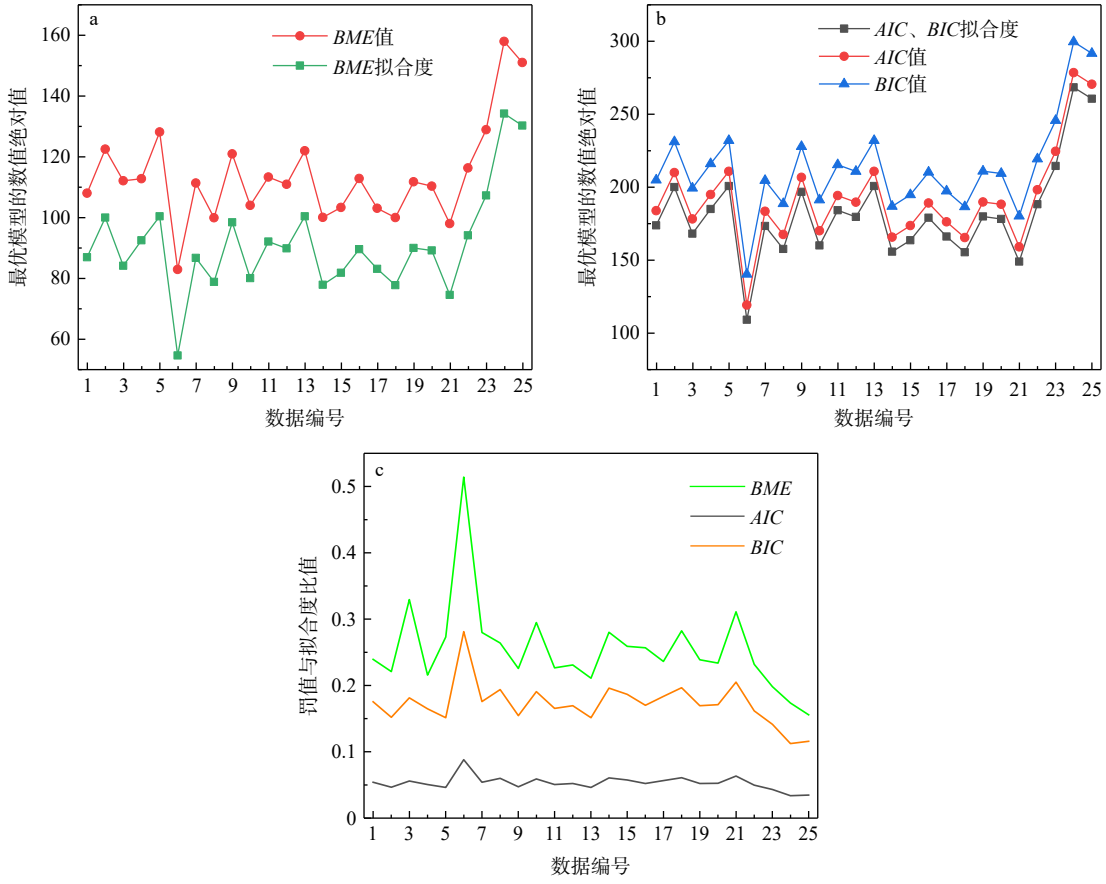


图 7　25 套 CPT 数据不同模型选择方法拟合度和罚值比例对比

Fig. 7　Comparison of fit degree and penalty ratio of different model selection methods for 25 CPT tests

定性，模型的复杂度越高，对应的罚值也就越大。即使模型参数数目相同，*BME* 罚值也可能不同。本研究所考虑的球状模型、高斯模型和指数模型的模型参数相同，在数据量相同条件下，不同模型的 *AIC* 和 *BIC* 罚值完全相同，无法在模型选择中提供惩罚作用，因此不适用于此种情况下的模型选择。该发现不仅适用于变异函数模型选择，也适用于其他类似情况（模型参数相同且数据量相同）的模型选择问题。

5 结 论

本研究建立了基于贝叶斯理论与拉普拉斯近似确定和估计存在趋势的岩土参数的变异函数的方法，并比较了贝叶斯模型选择方法 BME 与 AIC 准则、BIC 准则在变异函数模型比选的应用，由于计算方法不同，3 种方法选出的最优模型不尽相同。

（1）所提方法能够在考虑趋势项参数条件下合理地选择地质统计学变异函数，所选最优变异函数与试验变异函数较一致，为地质统计学分析提供了有效的参考。

（2）贝叶斯模型证据 BME 能够合理考虑模型选择过程中不同模型对空间变异性模型参数识别及其不确定性的影响，通过平衡模型拟合度和复杂度选择最优变异函数模型。

（3）当备选变异函数的模型参数个数相同时，根据 AIC 和 BIC 准则识别的最优模型相同，2 个识别准则的罚值均难以反映变异函数形式的影响，所选最优函数仅反映了变异函数的模型拟合度，此种情况下推荐采用 BME 选择变异函数。

（4）尽管不同模型选择方法所选最优变异函数有所差异，每种方法在给定场地的不同数据条件下选择的最优变异函数存在主导变异函数，该现象归因于同一场地条件下地质规律的连续性。

所有作者声明不存在利益冲突。

The authors declare that no competing interests exist.

参考文献：

[1] CHEN Q S, WANG C F, JUANG C H. Probabilistic and spatial assessment of liquefaction-induced settlements through multiscale random field models[J]. Engineering Geology, 2016, 211: 135-149.

[2] LI X Y, ZHANG L M, LI J H. Using conditioned random field to characterize the variability of geologic profiles[J]. Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, 2016, 142(4): 04015096.

[3] LUO N, ARWADE S R, DEGROOT D J. Probabilistic analysis of offshore geotechnical site investigation in a homogeneous stiff clay deposit[J]. Journal of Physics (Conference Series), 2020, 1452(1): 012037.

[4] 揭鸿鹊, 蒋水华, 常志璐, 等. 融合多源信息的降雨入渗边坡概率反分析及可靠度预测 [J]. 中国地质灾害与防治学报, 2024, 35(1): 28-36.
JIE H H, JIANG S H, CHANG Z L, et al. Probabilistic inverse-analysis and reliability prediction of rainfall-induced landslides for slope with multi-source information[J]. The Chinese Journal of Geological Hazard and Control, 2024, 35(1): 28-36. (in Chinese with English abstract)

[5] 汪泉娟, 孙敬锋, 杨英杰, 等. 克里金方法与深度学习方法用于浅层地下水位估计的对比研究: 以深汕特别合作区为例 [J]. 地质科技通报, 2024, 43(4): 291-301.
WANG Q J, SUN J F, YANG Y J, et al. A comparative study of Kriging and deep learning methods for shallow groundwater level estimation: A case study of the Shenzhen-Shanwei Special Cooperation Zone[J]. Bulletin of Geological Science and Technology, 2024, 43(4): 291-301. (in Chinese with English abstract)

[6] BAECHER G, CHRISTIAN J. Reliability and statistics in geotechnical engineering[M]. [S. 1.]: Wiley, 2003.

[7] CHRISTIAN J T, LADD C C, BAECHER G B. Reliability applied to slope stability analysis[J]. Journal of Geotechnical Engineering, 1994, 120(12): 2180-2207.

[8] 杨文礼, 白光顺, 孙滨, 等. 云南哀牢山地区地质灾害因子敏感性和易发性评价: 以新平县为例 [J]. 中国地质灾害与防治学报, 2024, 35(6): 145-152.
YANG W L, BAI G S, SUN B, et al. Sensitivity and susceptibility assessment of geological hazard factors: A case study of Xinping County in the Ailao Mountain area of Yunnan Province, China[J]. The Chinese Journal of Geological Hazard and Control, 2024, 35(6): 145-152. (in Chinese with English abstract)

[9] 花卫华, 宿紫莹, 朱玉华, 等. 大范围地质体分块建模方法 [J]. 地质科技通报, 2023, 42(6): 257-265.
HUA W H, SU Z Y, ZHU Y H, et al. Large-range geological block modeling method[J]. Bulletin of Geological Science and Technology, 2023, 42(6): 257-265. (in Chinese with English abstract)

[10] PHOON K K, KULHAWY F H. Characterization of geotechnical variability[J]. Canadian Geotechnical Journal, 1999, 36(4): 612-624.

[11] 夏侯云山, 张抒, 唐辉明, 等. 考虑参数空间变异结构的结构化交叉约束随机场模拟方法研究 [J]. 岩土力学, 2019, 40(12): 4935-4945.
XIAHOU Y S, ZHANG S, TANG H M, et al. Study of structural cross-constraint random field simulation method considering spatial variation structure of parameters[J]. Rock and Soil Mechanics, 2019, 40(12): 4935-4945. (in Chinese with English abstract)

[12] CAO Z J, WANG Y. Bayesian model comparison and selection of spatial correlation functions for soil parameters[J]. Structural Safety, 2014, 49: 10-17.

[13] 田密, 李典庆, 曹子君, 等. 基于贝叶斯理论的土性参数空间变异性量化方法 [J]. 岩土力学, 2017, 38(11): 3355-3362.

TIAN M, LI D Q, CAO Z J, et al. Quantification of spatial variability of soil parameters using Bayesian approaches[J]. Rock and Soil Mechanics, 2017, 38(11): 3355-3362. (in Chinese)

[14] ZHAO T Y, SONG C, LU S F, et al. Prediction of uniaxial compressive strength using fully Bayesian Gaussian process regression (FB-GPR) with model class selection[J]. Rock Mechanics and Rock Engineering, 2022, 55(10): 6301-6319.

[15] 黄宇, 杨荣森, 韩晓东, 等. 基于定向半变异函数的裂隙网络空间变异性分析 [J]. 地质科技通报, 2023, 42(2): 186-193.
HUANG Y, YANG R S, HAN X D, et al. Analysis of the spatial variability on a fracture network based on an oriented semivariogram[J]. Bulletin of Geological Science and Technology, 2023, 42(2): 186-193. (in Chinese with English abstract)

[16] 林军, 蔡国军, 邹海峰, 等. 基于随机场理论的江苏海相黏土空间变异性评价研究 [J]. 岩土工程学报, 2015, 37(7): 1278-1287.
LIN J, CAI G J, ZOU H F, et al. Assessment of spatial variability of Jiangsu marine clay based on random field theory[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2015, 37(7): 1278-1287. (in Chinese with English abstract)

[17] 宋超, 赵腾远, 许领. 基于贝叶斯高斯过程回归与模型选择的岩石单轴抗压强度估计方法 [J]. 岩土工程学报, 2023, 45(8): 1664-1673.
SONG C, ZHAO T Y, XU L. Estimation of uniaxial compressive strength based on fully Bayesian Gaussian process regression and model selection[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2023, 45(8): 1664-1673. (in Chinese with English abstract)

[18] 王继玲, 周维博, 孙梨梨, 等. 石川河富平地下水库渗透系数空间变异性研究 [J]. 水文地质工程地质, 2023, 50(3): 34-43.
WANG J L, ZHOU W B, SUN L L, et al. Study on the spatial vriability of hydraulic conductivity of underground reservoir in Fuping section of Shichuan River[J]. Hydrogeology & Engineering Geology, 2023, 50(3): 34-43. (in Chinese with English abstract)

[19] STUEDLEIN A W, KRAMER S L, ARDUINO P, et al. Geotechnical characterization and random field modeling of desiccated clay[J]. Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, 2012, 138(11): 1301-1313.

[20] UZIELLI M, MAYNE P W. Probabilistic assignment of effective friction angles of sands and silty sands FROM CPT using quantile regression[J]. Georisk (Assessment and Management of Risk for Engineered Systems and Geohazards), 2019, 13(4): 271-275.

[21] PHOON K K, QUEK S T, AN P. Identification of statistically homogeneous soil layers using modified Bartlett statistics[J]. Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, 2003, 129(7): 649-659.

[22] 张国萍, 王林, 曹子君, 等. 考虑不确定性的土水特征曲线模型确定方法比较研究 [J]. 自然灾害学报, 2018, 27(4): 151-158.
ZHANG G P, WANG L, CAO Z J, et al. Comparative study of different methods for determining the soil water characteristic curve model considering uncertainty[J]. Journal of Natural Disasters, 2018, 27(4): 151-158. (in Chinese with English abstract)

[23] XU J B, ZHANG L L, LI J H, et al. Probabilistic estimation of variogram parameters of geotechnical properties with a trend based on Bayesian inference using Markov chain Monte Carlo simulation[J]. Georisk (Assessment and Management of Risk for Engineered Systems and Geohazards), 2021, 15(2): 83-97.

[24] YUEN K V. Recent developments of Bayesian model class selection and applications in civil engineering[J]. Structural Safety, 2010, 32(5): 338-346.

[25] 左自波, 张璐璐, 程演, 等. 基于 MCMC 法的非饱和土渗流参数随机反分析 [J]. 岩土力学, 2013, 34(8): 2393-2400.
ZUO Z B, ZHANG L L, CHENG Y, et al. Probabilistic back analysis of unsaturated soil seepage parameters based on Markov chain Monte Carlo method[J]. Rock and Soil Mechanics, 2013, 34(8): 2393-2400. (in Chinese with English abstract)

[26] CAO Z J, WANG Y. Bayesian model comparison and characterization of undrained shear strength[J]. Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, 2014, 140(6): 04014018.

[27] 郭秋麟, 任洪佳, 于京都, 等. 基于贝叶斯网络的油气勘探风险预测方法: 以准噶尔盆地腹部侏罗系三工河组为例 [J]. 中国石油勘探, 2023, 28(1): 108-119.
GUO Q L, REN H J, YU J D, et al. Prediction method of petroleum exploration risks based on Bayesian network: A case study of the Jurassic Sangonghe Formation in the hinterland of Junggar Basin[J]. China Petroleum Exploration, 2023, 28(1): 108-119. (in Chinese with English abstract)

[28] 李建文, 赵文, 吴振坤, 等. 煤矿采空区覆岩“三带”智能识别方法 [J]. 煤田地质与勘探, 2024, 52(4): 164-171.
LI J W, ZHAO W, WU Z K, et al. Intelligent identification method for overburden three zones of a goaf[J]. Coal Geology & Exploration, 2024, 52(4): 164-171. (in Chinese with English abstract)

[29] CAO Z J, WANG Y, LI D Q. Quantification of prior knowledge in geotechnical site characterization[J]. Engineering Geology, 2016, 203: 107-116.

[30] 钟世英, 刘长飞, 时文浩. MATLAB 工具箱自动识别探地雷达空洞图像技术 [J]. 计算机辅助工程, 2024, 33(4): 8-14.
ZHONG S Y, LIU C F, SHI W H. MATLAB toolbox automatic recognition of GPR cavity image technology[J]. Computer Aided Engineering, 2024, 33(4): 8-14. (in Chinese with English abstract)

[31] 张闻宇, 张智刚, 颜小挺, 等. AI 大模型在 MATLAB 课程教学中的应用 [J]. 现代信息科技, 2024, 8(24): 195-198.
ZHANG W Y, ZHANG Z G, YAN X T, et al. Application of AI big model in MATLAB course teaching[J]. Modern Information Technology, 2024, 8(24): 195-198. (in Chinese with English abstract)

[32] 邹鹤民. 基于贝叶斯网络的公路隧道围岩失稳风险评估及系统开发 [J]. 地质科技通报, 2024, 43(6): 89-101.
ZOU H M. Risk assessment and system development of surrounding rock instability in highway tunnel based on Bayesian network[J]. Bulletin of Geological Science and Technology, 2024, 43(6): 89-101. (in Chinese with English abstract)

[33] 朱悦, 彭荣华, 胡祥云, 等. 基于变维度贝叶斯反演的地热黏土盖层音频大地电磁探测能力研究 [J]. 地质科技通报, 2024, 43(3): 341-350.
ZHU Y, PENG R H, HU X Y, et al. Research on audio-frequency magnetotelluric detection capability of geothermal clay cap based on trans-dimensional Bayesian inversion[J]. Bulletin of Geological

Science and Technology, 2024, 43(3): 341-350. (in Chinese with English abstract)

[34] 杨灿, 刘磊磊, 张遗立, 等. 基于贝叶斯优化机器学习超参数的滑坡易发性评价 [J]. 地质科技通报, 2022, 41(2): 228-238.
YANG C, LIU L L, ZHANG Y L, et al. Machine learning based on landslide susceptibility assessment with Bayesian optimized the hyperparameters[J]. Bulletin of Geological Science and Technology, 2022, 41(2): 228-238. (in Chinese with English abstract)

Summary for “地质统计学变异函数贝叶斯模型选择方法与比较”

Bayesian methods for geostatistical variogram model selection and comparative study

ZHANG Yifan，ZHANG Lulu*，XU Jiabao

State Key Laboratory of Ocean Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China

First author，E-mail：zhangyifan_stu@126.com

* Corresponding author， E-mail：lulu_zhang@sjtu.edu.cn

Abstract：[**Objective**] The variogram quantifies the variability of geological attributes between two spatial points and is of crucial significance for geostatistical analysis. When geological data exhibit a trend variation along spatial coordinates, the accurate selection and estimation of the variogram become exceptionally difficult. [**Methods**] To realize the model selection and parameter estimation of the variogram, this paper presents a variogram selection approach based on Bayesian theory, employing the Laplace approximation method to approximate the posterior probability distribution as a Gaussian one. Firstly, the posterior probability distribution of the parameters is computed, and subsequently, the Bayesian model evidence (BME) of each alternative variogram is calculated respectively to determine the optimal model. This study investigates the applicability of three model selection methods in the selection of variograms, encompassing Bayesian model evidence (BME), Akaike information criterion (AIC), and Bayesian information criterion (BIC). [**Results**] The proposed method is elucidated through the measured cone tip resistance data from static cone penetration tests, and the disparities among the three methods in the selection of variogram models are compared from the perspectives of model fitting and complexity penalty.[**Conclusion**] The research reveals that, under the given experimental data conditions, BME can rationally take into account the fitting degree and complexity of the variogram; while the AIC and BIC identification criteria can merely reflect the fitting degree differences of different variograms when the number of model parameters is the same. Consequently, in such circumstances, BME is recommended for the selection of variograms. The method proposed in this study is capable of reasonably selecting the geostatistical variogram considering the trend term parameters, and the selected optimal variogram is relatively consistent with the experimental variogram, providing an effective reference for geostatistical analysis.

Key words: cone penetration test； Bayesian theory； Laplace approximation； variogram； model selection； BME； geostatistic

Received：2023-04-28；Revised：2023-06-27；Accepted：2023-07-01

doi: 10.19509/j.cnki.dzkq.tb20240202