地质观测点的分布对趋势面分析的影响

罗 晓 春

(成都地质学院)

在以往的趋势面分析研究和应用中,人们只是泛泛地指出了观测点的不规则分布对趋势面的畸变和对正规方程组的病态影响,却都未注意到一种十分广泛的观测点分布——K线分布对趋势面分析的影响。所谓观测点的K线分布特性是指观测点沿K条平行线分布,这在规则测网中表现得最为突出。本文介绍了观测点的K线分布特点,并且提出和推导了观测点呈K线分布的K次以上趋势面分析必为奇异的结论。还分析了坐标选取对趋势面的影响,并以新疆某铜镍矿区为例对上述问题做了详细研究。最后提出了对观测点分布和坐标选取的改进措施。

关键词: 趋势面分析; 观测点分布; K线分布特征

数学地质

问题的提出

趋势面分析方法是地质问题研究中应用最广的多元分析方法之一,它着重研究地质特征的空间分

布规律,并把这些规律用趋势部分和剩余部分展示出来。

在进行趋势面分析的大量实践中,人们早已发现,在趋势面方程求解过程中常常会出现病态溢出的情况,使得研究工作难以为继。究其原因,一般认为有以下3个方面^[1]:

(1) 观测点分布的不均匀性。这主要是指某些点彼此靠得很近而其他点疏离很远,容易造成正规方程组的病态;(2) 高次趋势面容易造成病态。这一方面是由于趋势面次数K愈高,趋势面项数M就越大, $M = (K + 1) \cdot (K + 2) / 2$,若是M超过了观测点数N,即 $M > N$,显然会导致病态;另一方面当趋势面次数K越高, x_i^k 和 y_i^k 的值就越大。

这里 x_i 和 y_i 分别表示第 i 个观测点的横坐标和纵坐标,一般有 $x_i, y_i \geq 1$ 。根据线性代数的理论,正规方程组的病态程度由其条件数 $\text{CON}(A^T A)$ 所决定。设 $A = [a_1, a_2, \dots, a_m]$, 则有

$$\text{CON}(A^T A) \geq \frac{\max \|a_i\|^2}{\min \|a_i\|^2} \quad (1)$$

就趋势面分析而言,一般有 $x_i, y_i > 1$, 不失一般性,设 $x_i > y_i$, 则 $\text{CON}(A^T A) = \sum_{i=1}^n (x_i^k)^2 / n$ 。由此可见,趋势面次数K越高,正规方程组的病态也就越严重;(3) 坐标原点选取失当,使坐标值很大,根据前面的讨论,自然也会增加条件数,从而加大病态程度。

现在的问题是,若是在研究中注意并且摒除了上述因素的影响,那么趋势面分析还会出现病态问题吗?

我们曾做过如图1所示的规则测网的3次趋势面分析。按照一般的看法^[2],图1的

观测点结构是效果最好的测点分布，又是低次趋势，而且 $\max(x_i, y_i) \leq 20$ ，应该说这些条件都是比较满意的，然而在计算中仍然出现了病态溢出的情况。

图 1 观测点分布示意图

于是我们不得不怀疑，是否还有其他影响趋势面分析的因素。

观测点的K线分布结构

为了后面讨论方便，我们先作如下定义：若全部 N 个观测点都分布在 K 条平行线上，则称观测点具有 K 线分布结构，或观测

图 2 服从K线分布的观测点示意图

点分布呈 K 线分布。

如图 2 所示，(a) 是平行于 x 轴的 3 线分布，(b) 是平行于 y 轴的 3 线分布，而 (c) 则是斜交于坐标轴的 3 线分布。

若是将第 i 个观测点的坐标表示为 (x_i, y_i) ，则对于 (b) 的情形，有 $x_1 = x_2 = \dots = x_{m_1}, x_{m_1+1} = x_{m_1+2} = \dots = x_{m_1+m_2}, x_{m_1+m_2+1} = x_{m_1+m_2+2} = \dots = x_{m_1+m_2+m_3}$ ，其中 m_j 是在第 j 条平行线上的观测点数， $j = 1, 2, 3, m_1 + m_2 + m_3 = n$ 。同理可以表示出 (a)、(c) 的数学特征。容易看出，对于 (a)、(c) 两种情况，只需做一下坐标轴的角度转换，就变成了 (b) 的情形，因此下面只针对平行坐标轴 y 的 K 线分布展开讨论。

对于 K 线分布，有 $x_1 = x_2 = \dots = x_{m_1}, x_{m_1+1} = x_{m_1+2} = \dots = x_{m_1+m_2}, \dots, x_{m_1+m_2+\dots+m_{k-1}+1} = x_{m_1+m_2+\dots+m_{k-1}+2} = \dots = x_{m_1+m_2+\dots+m_{k-1}+m_k}$ 。其中 $m_1 + m_2 + \dots + m_k = n$ ， m_j 是在第 j 条平行线上的观测点数。

其实对于任何一种观测点分布，我们都可以把它视为是一种 K 线分布，只要 K 取得足够的大（接近于 n ）。不过真正具有实际意义的，主要还是规则测网的情况，这时容易形成 K 值很低的 K 线分布情形（如图 1，图 2）。

观测点K线分布对趋势面的影响

根据趋势面分析的理论，正规方程组

$$A^T A b = A^T Z$$

的病态问题取决于矩阵 $A^T A$ 的性质。由线性代数的知识，可知正规方程且奇异的充要条件是 $A^T A$ 为降秩阵。对于 K 次趋势面，其系数阵 A 为 $n \times m$ 阵，其中 $m = (k+1) \cdot (k+2)/2$ ，则由秩 $(A^T A) = \text{秩}(A)$ ，可知正规方程组为奇异的充要条件是阵 A 的 m 个列向量线性相关，即秩 $(A) < m$ 。

那么观测点的 K 线分布与正规方程组的奇异性有什么联系呢？下面首先给出本文的

结论: [定理]: 如果观测点呈K线分布, 则其K次趋势面的正规方程组必是奇异的。

要得到上述结论, 只需证得系数阵A的m个列向量线性相关即可。

对K次趋势面方程, 有

$$Z = b_0 + b_1x + b_2x^2 + \dots + b_kx^k + b_{k+1}xy + \dots + b_{m-1}y^k$$

于是系数阵A可记为以下形成:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^k & \dots & y_1^k \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^k & \dots & y_2^k \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^k & \dots & y_n^k \end{pmatrix}$$

其中前K+1个列向量可组成短阵A₁。当观测点呈K线分布时,

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & x_{m_1} & x_{m_1}^2 & \dots & x_{m_1}^k \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{m_1} & x_{m_1}^2 & \dots & x_{m_1}^k \\ 1 & x_{m_2} & x_{m_2}^2 & \dots & x_{m_2}^k \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{m_2} & x_{m_2}^2 & \dots & x_{m_2}^k \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{m_k} & x_{m_k}^2 & \dots & x_{m_k}^k \end{pmatrix}, \quad m_1 + m_2 + \dots + m_k = n$$

K+1列

可见秩(A₁)=K, 也即秩(A)≤m-1。

∴秩(A^TA)≤秩(A)≤m-1<m。

∴正规方程组的系数矩阵A^TA为降秩矩阵, 即上述定理成立。证毕。

本定理说明了以下事实: 对呈K线分布的数据点集进行K次以上趋势面分析研究是毫无意义的。

实例分析

我们曾对新疆某铜镍矿区的土壤次生晕Cu进行了趋势面分析研究。挑选平行于y轴的第8测线和第11测线的15个观测数据进行分析, 由于一开始选取的坐标原点是经纬

坐标系, 结果不仅二次以上的趋势做不出来, 就连一次趋势也出现了计算溢出的情况(此时第一个样本的坐标是4308, 9602)。为此我们对坐标进行了平移, 即有

$$x_i^{(1)} = x_i^{(0)} - 3000$$

$$y_i^{(1)} = y_i^{(0)} - 3000$$

由此得到的一次趋势面分析结果见表1。为了进行比较, 又做了第二次坐标平移:

$$x_i^{(2)} = x_i^{(1)} - 1000$$

$$y_i^{(2)} = y_i^{(1)} - 6000$$

其一次趋势面分析结果见表2。最后又对坐标进行了第三次平移:

$$x_i^{(3)} = x_i^{(2)} - 300$$

$$y_i^{(3)} = y_i^{(2)} - 600$$

由此得到的一次趋势面分析结果见表3。

趋势面分析结果 表 1

样本号	x-坐标	y-坐标	观测值	趋势值	剩余值
1	1308.0	6602.0	64.20	51.21	12.99
2	1308.0	6603.0	44.10	48.86	-4.76
3	1308.0	6606.0	71.50	41.82	29.68
4	1308.0	6608.0	22.50	37.13	-14.63
5	1308.0	6609.0	30.10	34.78	-4.68
6	1308.0	6611.0	16.10	30.08	-13.98
7	1308.0	6612.0	23.60	27.73	-4.13
8	1311.0	6605.0	51.10	48.51	2.59
9	1311.0	6608.0	23.40	41.47	-18.07
10	1311.0	6610.0	20.20	36.77	-16.57
11	1311.0	6611.0	33.40	34.42	-1.02
12	1311.0	6612.0	54.40	32.08	22.32
13	1311.0	6613.0	44.20	29.73	14.47
14	1311.0	6614.0	12.50	27.38	-14.88
15	1311.0	6615.0	35.70	25.03	10.67

趋势方程系数 13657.92 1.4469 -2.3477

拟合优度 = 23.46% F 检验值 = 1.8390 剩余方差 = 16.2594

经过3次坐标平移, 其拟合优度由表1的23.46%改进到表2的29.97%, 最后达到表3的29.99%。根据趋势面分析的特点, 坐标平移并不影响趋势分析的结果, 因此由以上分析可以看出, 当平移后的坐标越接近于1, 其拟合效果就越好, 计算误差也越小。

因而在趋势面分析之前，应首先进行坐标平移，尽量减小计算误差。

其实计算误差不但会降低拟合效果，有时还会产生一些“虚象”。例如我们另选了

趋势面分析结果 表 2

样本号	x 坐标	y 坐标	观测值	趋势值	剩余值
1	308.0	602.0	64.20	53.60	10.60
2	308.0	603.0	44.10	50.81	-6.71
3	308.0	606.0	71.50	42.46	29.04
4	308.0	608.0	22.50	36.89	-14.39
5	308.0	609.0	30.10	34.10	-4.00
6	308.0	611.0	16.10	28.53	-12.43
7	308.0	612.0	23.60	25.74	-2.14
8	311.0	605.0	51.10	51.07	0.03
9	311.0	608.0	23.40	42.72	-19.32
10	311.0	610.0	20.20	37.14	-16.94
11	311.0	611.0	33.40	34.36	-0.96
12	311.0	612.0	54.40	31.57	22.83
13	311.0	613.0	44.20	28.79	15.41
14	311.0	614.0	12.50	26.00	-13.50
15	311.0	615.0	35.70	23.22	12.48

趋势方程系数 1131.9230 1.9431 -2.7854

拟合优度 = 29.97% F-检验值 = 2.5676 剩余方差 = 16.1783

趋势面分析结果 表 3

样本号	x-坐标	y-坐标	观测值	趋势值	剩余值
1	8.0	2.0	64.20	53.60	10.60
2	8.0	3.0	44.10	50.81	-6.71
3	8.0	6.0	71.50	42.45	29.05
4	8.0	8.0	22.50	36.88	-14.38
5	8.0	9.0	30.10	34.09	-3.99
6	8.0	11.0	16.10	28.52	-12.42
7	8.0	12.0	23.60	25.73	-2.13
8	11.0	5.0	51.10	51.08	0.02
9	11.0	8.0	23.40	42.72	-19.32
10	11.0	10.0	20.20	37.15	-16.95
11	11.0	11.0	33.40	34.36	-0.96
12	11.0	12.0	54.40	31.58	22.82
13	11.0	13.0	44.20	28.79	15.41
14	11.0	14.0	12.50	26.00	-13.50
15	11.0	15.0	35.70	23.22	12.48

趋势方程系数 43.5965 1.9473 -2.7868

拟合优度 = 29.99% F-检验值 = 2.5696 剩余方差 = 16.1783

趋势面分析结果 表 4

样本号	x-坐标	y-坐标	观测值	趋势值	剩余值
1	5.0	3.0	31.50	27.85	3.65
2	5.0	5.0	21.30	25.02	-3.72
3	5.0	6.0	14.20	19.97	-5.77
4	5.0	7.0	18.60	14.15	4.45
5	5.0	8.0	10.20	8.81	1.39
6	8.0	2.0	64.20	56.31	7.89
7	8.0	3.0	44.10	61.75	-17.65
8	8.0	6.0	71.50	51.28	20.22
9	8.0	8.0	22.50	34.46	-11.96
10	8.0	9.0	30.10	26.83	3.27
11	8.0	11.0	16.10	19.39	-3.29
12	8.0	12.0	23.60	22.07	1.53
13	11.0	5.0	51.10	48.48	2.62
14	11.0	8.0	23.40	29.95	-6.55
15	11.0	10.0	20.20	16.27	3.93

趋势方程系数 -118.6795 24.0373 26.0534 0.6002
-2.0708 -3.4683 -0.1709 .02281
-0.1314 0.2079

拟合优度 = 77.18% F-检验值 = 1.8786 剩余方差 = 14.8100

趋势面分析结果 表 5

样本号	x-坐标	y-坐标	观测值	趋势值	剩余值
1	8.2	2.0	64.20	61.94	2.26
2	8.2	3.0	44.10	50.43	-6.33
3	8.0	6.0	71.50	54.28	17.22
4	8.0	8.0	22.50	38.16	-15.66
5	8.0	9.0	30.10	31.35	-1.25
6	8.0	11.0	16.10	20.23	-4.13
7	8.0	12.0	23.60	15.93	7.67
8	11.0	5.0	51.10	46.37	4.73
9	11.0	8.0	23.40	34.62	-11.22
10	11.0	10.0	20.20	30.95	-10.75
11	11.0	11.0	33.40	30.37	3.03
12	11.0	12.0	54.40	30.62	23.78
13	11.0	13.0	44.20	31.71	12.49
14	11.0	14.0	12.50	33.63	-21.13
15	11.0	15.0	35.70	36.39	-0.69

趋势方程系数 5242.7390 -1117.360 -26.0599
58.1064 1.5197 0.4172

拟合优度 = 50.04% F-检验值 = 1.8030 剩余方差 = 15.2959

3条测线的15个点进行趋势面分析,竟得到了三次趋势分析的结果见表4。后来我们对此计算过程进行了详细分析,才发现这是计算误差所致。

为了提高表3的计算结果,我们对其坐标值稍稍进行了一点技术处理,令

$$x_1 = x_1 + 0.2$$

$$x_2 = x_2 + 0.2$$

其余不变。这样处理的结果是不但提高了一次趋势分析的效果,而且还得出了二次趋势分析的计算结果见表5。

比较表3与表5可以看出,进行技术处理后的趋势面分析的拟合效果得到了大大提高,拟合优度由以前的29.99%一跃达到处理后的50.04%。这种技术处理实质上是将原来分布在两条测线的数据变成分布在3条测线上(只是其中的两条相距很近而已),这样便可进行二次趋势分析。这一计算结果应证了本文理论分析的正确性。

结 论

观测点的分布形态对趋势面分析的影响极大,它主要是通过其K线分布特征表示出来。观测点的K线分布特征在地质工作中是十分常见的,因为我们往往是沿着一些剖面

线进行数据收集和分析工作。当采样的剖面线很少时,就很容易导致趋势面分析的病态结果。虽然本文在讨论时是以二维趋势面为例,但三维问题的讨论方式与二维是完全相同的,因而三维趋势面也会(并且更容易)出现K线分布的问题。总而言之,观测点的K线分布特征对趋势面分析的影响是在工作中经常遇到而且必须提醒大家注意的问题。为了避免出现这些问题,一方面应当使采样的剖面线不能太少;另一方面,如果采样剖面线不能增加而又需要做较高次的趋势面分析,也可以对个别观测点做一定的技术处理,使其坐标位置稍微偏离一点剖面线,又不影响计算效果即可。

另外,根据前面的理论分析和实例研究可以看出,坐标值的大小对趋势面分析的病态程度有很大的影响:坐标值取得越大,病态就越严重。所以在进行趋势面分析之前应首先进行坐标平移变换,使坐标值尽量接近于1。对于高次趋势分析而言,坐标选取的好坏对计算结果的影响尤为突出。

参 考 文 献

- [1] 陈天与、吴锡生,《数学地质方法》,吉林人民出版社,1980年。
- [2] 西安矿业学院数学教研室,《数学地质基础与方法》,煤炭工业出版社,1981年。

The Effect of Geological Observation Point Distribution on Trend Surface Analysis

Lu Xiao-chun

An irregular distribution of geological observation points will exert an influence on trend surface analysis with the result that a distortion trend surface and an ill-conditioned system of normal equations are caused. It is noted that a very peculiar distribution of observation points, called 'k line distribution', in which observation points are distributed along k parallel lines, has an effect on trend surface analysis, especially to the regular net of observation. In this paper features of the 'k line distribution' are described. After a derivation it is concluded that for a trend surface analysis of an order higher than k, a singular or ill-conditioned solution will be obtained. Taking a Cu-Ni deposit in Xingjiang as an example, the above-mentioned influence is discussed in detail. In addition, as for the observation point distribution and coordinate selection, some measures for improvement are suggested.