29-32

一种考虑权值非负约束的克立格算法

O 221.1

胡小荣
(本溪冶金高等专科学校·本溪·117022)

基于线性规划方法提出了一种考虑权值非负约束的克立格算法,该算法既利用了线性规划求解简便、快捷的优点,又克服了其它正克立格法计算工作量大以及受主观因素影响的缺点。

关键词 克立格法 权值非负 线性规划

1 问题的提出

克立格法作为一种求最优、线性(或非线性)、无偏内插估计值的方法在地质统计学中占有重要地位,其中普通克立格法又是最常用和最基本的方法,也是其它克立格法的基础。普通克立格法指的是[1]:在某个空间变异几何域 Ω 上,如果区域化变量 $Z(x)$ 满足二阶平稳条件或内蕴条件(或者准二阶平稳条件或准内蕴条件),若对某待估域 V 的区域化变量真值 Z_v 求估计值 Z_v^*,则 Z_v^* 可以通过该待估域 V 影响范围内的 n 个有效样品信息值 $Z(x_\alpha)(\alpha=1,2,\cdots,n)$ 的线性组合得出:

$$Z_v^* = \sum_{\alpha=1}^{n}\lambda_\alpha Z(x_\alpha)$$

式中 $\lambda_\alpha(\alpha=1,2,\cdots n)$ 为估计权值。估计方差用变异函数表示时为

$$\sigma_E^2 = 2\sum_{\alpha=1}^{n}\lambda_\alpha\overline{\gamma}(x_\alpha,V) - \overline{\gamma}(V,V) - \sum_{\alpha=1}^{n}\sum_{\beta=1}^{n}\lambda_\alpha\lambda_\beta\gamma(x_\alpha,x_\beta)$$

权系数 $\lambda_\alpha(\alpha=1,2,\cdots,n)$ 根据以下条件求出:

$$\begin{cases}1)\text{估计方差最小}:\min\sigma_E^2;\\ 2)\text{估值无偏}:\sum_{\alpha=1}^{n}\lambda_\alpha=1\end{cases}$$

这样,根据拉格朗日乘数法就可以得出如下求解权值 λ_α 的普通克立格方程组:

$$\begin{cases}\sum_{\beta=1}^{n}\lambda_\beta\gamma(x_\alpha,x_\beta)+\mu=\overline{\gamma}(x_\alpha,V) \quad (\alpha=1,2,\cdots,n)\\ \sum_{\beta=1}^{n}\lambda_\beta=1\end{cases} \tag{1}$$

然而,用上述克立格方程组计算权值时由于未对权值的符号加任何限制,这样便使得计算出的权值常常出现负值。负权的存在有以下弊端[2,3]:

1)负权无物理意义;2)负权可能导致得出负的估计值,而负的估计值在实际应用中通常毫无意义;3)负权的存在可能使估计值奇异;4)负权会引起估计的高度不稳定,估值位置的微小变化就可能带来估值的显著变化。因此,在许多情况下有必要对权值 $\lambda_\alpha(\alpha=1,2,\cdots,n)$ 作非负要求,即附加 $\lambda_\alpha\geq0(\alpha=1,2,\cdots,n)$ 约束。这样,在计算权值时就不能仅依靠求解普通克立格方程组来实现,而是需要求解如下一个二次规划:

$$\min\ \sigma_E^2;$$

$$\sum_{\alpha=1}^{n}\lambda_\alpha=1,\qquad \lambda_\alpha\geq0(\alpha=1,2,\cdots,n)$$

然而在实际应用中该二次规划的求解很复杂,计算工作量很大,需要占用大量机时。为此,Barnes和Johnson[3]曾提出了一种基于 Kuhn-Tucher 条件的正克立格法——逆校正快速算法,该算法属叠代法,先求解普通克立格方程组计算权值,如果算出的权值全部满足非负条件则计算终止,否则进行附加计算,在每次附加计算中令绝对值最大的负权为零,再重新求解普通克立格方程组,直至所有权值满足非负条件。但该算法仍存在一些缺点:1)可能要进行多次叠代运算从而造成计算工作量仍然偏大;2)消除负权的方法有很大的主观性,没有理论性基础,从而使所得结果与理论最优解可能不一致[3]。本文基于线性规划的方法提出了一种考虑权值非负约束的克立格算法,该算法既能利用线性规划求解简便快捷的优点又能克服其它正克立格法计算量偏大以及受主观因素影响的缺点。

2 方法原理

由于求解普通克立格方程组的方法不能保证所有权值均能满足非负条件,而按二次规划问题来求解又十分繁杂,计算工作量大,需要占用大量机时。因此,一个折衷的方法是:在保证所有权值满足非负条件以及估值无偏这两个前提下使权值尽可能地满足普通克立格方程组。这样、就可将一个求解普通克立格方程组的问题转化成一个求解线性规划的问题。以(1)式为例,普通克立格方程组为:

本文1997年10月收到,1998年5月改回,张启芳编辑。

$$\begin{cases}\sum_{\beta=1}^{n}\lambda_\beta\gamma(x_\alpha,x_\beta)+\mu=\overline{\gamma}(x_\alpha,V) & (\alpha=1,2,\cdots,n)\\ \sum_{\beta=1}^{n}\lambda_\beta=1\end{cases}$$

令：$t_\alpha=\left|\overline{\gamma}(x_\alpha,V)-\sum_{\beta=1}^{n}\lambda_\beta\gamma(x_\alpha,x_\beta)-\mu\right|$ $(\alpha=1,2,\cdots,n)$，$\mu=\mu_1-\mu_2$，且 μ_1、$\mu_2\geqslant0$。则求解(1)式这个普通克立格方程组的问题就转化成求解如下的一个线性规划问题：

$$\min W=\sum_{\alpha=1}^{n}t_\alpha$$

满足 $t_\alpha\geqslant\overline{\gamma}(x_\alpha,V)-\sum_{\beta=1}^{n}\lambda_\beta\gamma(x_\alpha,x_\beta)-\mu_1+\mu_2$ $(\alpha=1,2,\cdots,n)$

$t_\alpha\geqslant-\{\overline{\gamma}(x_\alpha,V)-\sum_{\beta=1}^{n}\lambda_\beta\gamma(x_\alpha,x_\beta)-\mu_1+\mu_2\}$ $(\alpha=1,2,\cdots,n)$

$\sum_{\beta=1}^{n}\lambda_\beta=1$

$\lambda_\alpha\geqslant0$ $(\alpha=1,2,\cdots,n)$

$t_\alpha\geqslant0$ $(\alpha=1,2,\cdots,n)$

$\mu_1\geqslant0$

$\mu_2\geqslant0$

进一步整理可将上述线性规划写成：

$$\min W=\sum_{\alpha=1}^{n}t_\alpha$$

其中 $t_\alpha+\sum_{\beta=1}^{n}\lambda_\beta\gamma(x_\alpha,x_\beta)+\mu_1-\mu_2\geqslant\overline{\gamma}(x_\alpha,V)$ $(\alpha=1,2,\cdots,n)$

$-t_\alpha+\sum_{\beta=1}^{n}\lambda_\beta\gamma(x_\alpha,x_\beta)+\mu_1-\mu_2\leqslant\overline{\gamma}(x_\alpha,V)$ $(\alpha=1,2,\cdots,n)$

$\sum_{\beta=1}^{n}\lambda_\beta=1$

$\lambda_\alpha\geqslant0$ $(\alpha=1,2,\cdots,n)$

$t_\alpha\geqslant0$ $(\alpha=1,2,\cdots,n)$

$\mu_1\geqslant0$

$\mu_2\geqslant0$

令：$\boldsymbol{T}=(t_1,t_2,\cdots,t_n)^T$，$\boldsymbol{L}=(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)^T$，$\boldsymbol{M}=(\mu_1,\mu_2)^T$，$\boldsymbol{Y}=(\boldsymbol{L},\boldsymbol{M})^T$，$\boldsymbol{U}$ 为元素全为 1 的 n 维横向量，$\boldsymbol{\theta}$ 为元素全为零的 $n+2$ 维横向量，$\boldsymbol{I}$ 为 n 阶单位矩阵，$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 分别为：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\gamma(x_1,x_1) & \gamma(x_1,x_2) & \cdots & \gamma(x_1,x_n) & 1 & -1\\ \gamma(x_2,x_1) & \gamma(x_2,x_2) & \cdots & \gamma(x_2,x_n) & 1 & -1\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ \gamma(x_n,x_1) & \gamma(x_n,x_2) & \cdots & \gamma(x_n,x_n) & 1 & -1\end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}\overline{\gamma}(x_1,V)\\ \overline{\gamma}(x_2,V)\\ \vdots\\ \overline{\gamma}(x_n,V)\end{bmatrix}$$

则线性规划可写成如下矩阵形式：

$$\min W=(\boldsymbol{U},\boldsymbol{\theta})\begin{pmatrix}\boldsymbol{T}\\ \boldsymbol{Y}\end{pmatrix} \tag{2}$$

满足 $\boldsymbol{IT}+\boldsymbol{AY}\geqslant\boldsymbol{B}$

$-\boldsymbol{IT}+\boldsymbol{AY}\leqslant\boldsymbol{B}$

$\boldsymbol{UL}=1$

$\begin{pmatrix}\boldsymbol{T}\\ \boldsymbol{Y}\end{pmatrix}\geqslant0$

3 计算实例

为验证所提算法的可行性，现分别用求解普通克立格方程组的方法和本文所提基于线性规划的方法对以下两个算例[4]进行计算并加以对照比较。

算例 1：设有一平面空间变异几何域 Ω。假定区域化变量 $Z(x)$ 在 Ω 上满足二阶平稳条件且其二维变异函数为如下各向同性球状模型：

$$\gamma(h)=\begin{cases}0 & (h=0)\\ 2+20\left(\frac{3}{2}\cdot\frac{h}{200}-\frac{1}{2}\cdot\frac{h^3}{200^3}\right) & (0<h\leqslant200)\\ 22\end{cases}$$

若在 Ω 内 S_1、S_2、S_3、S_4 等处分别取有样品，其样品信息值分别为 Z_1、Z_2、Z_3、Z_4，如图 1 所示，则 $Z(x)$ 在 S_0 点处的估计值为 $Z_0^*=\sum_{\alpha=1}^{4}\lambda_\alpha Z_\alpha$。

用求解普通克立格方程组的方法求权值 λ_1、λ_2、λ_3、λ_4 时，可通过求解下列克立格方程组得出：

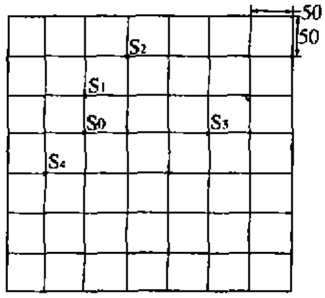

图 1 样品位置图

$$\begin{bmatrix}0 & 12.16 & 20.78 & 17.02 & 1\\ 12.16 & 0 & 19.68 & 21.72 & 1\\ 20.78 & 19.68 & 0 & 22 & 1\\ 17.02 & 21.72 & 22 & 0 & 1\\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\lambda_1\\ \lambda_2\\ \lambda_3\\ \lambda_4\\ \mu\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}9.34\\ 17.02\\ 20.28\\ 12.16\\ 1\end{bmatrix}$$

解之得：$\lambda_1=0.5181$，$\lambda_2=0.0220$，$\lambda_3=0.0886$，$\lambda_4=0.3712$，$\mu=0.912$。若用本文所提基于线性规划的方法求解权值，则(2)式中各参量分别为：$\boldsymbol{U}=(1,1,1,1)$，$\boldsymbol{\theta}=(0,0,0,0,0,0)$，$\boldsymbol{L}=(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4)^T$，$\boldsymbol{T}=(t_1,t_2,t_3,t_4)^T$，$\boldsymbol{Y}=(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4,\mu_1,\mu_2)^T$，$\boldsymbol{I}$ 为 4

阶单位矩阵，$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 分别为：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 0 & 12.16 & 20.78 & 17.02 & 1 & -1 \\ 12.16 & 0 & 19.68 & 21.72 & 1 & -1 \\ 20.78 & 19.68 & 0 & 22 & 1 & -1 \\ 17.02 & 21.72 & 22 & 0 & 1 & -1 \end{bmatrix},\ \boldsymbol{B}=\begin{bmatrix} 9.34 \\ 17.02 \\ 20.28 \\ 12.16 \end{bmatrix}$$

解之得：$\lambda_1=0.5181$，$\lambda_2=0.0220$，$\lambda_3=0.0886$，$\lambda_4=0.3712$，$\mu_1=0.912$，$\mu_2=0$，$\mu=\mu_1-\mu_2=0.912$。由此可以看出，若两种方法所求权值均满足非负条件，则计算结果是相同的。因此，本文所提算法包含了求解普通克立格方程组的方法。然而，若用普通克立格方程组求出的权值并非全部满足非负条件，则采用本文所提算法求解可取得满意结果，如算例 2 所示。

算例 2：若在算例 1 中的平面空间变异几何域 Ω 内 S_1、S_2、S_3、S_4、S_5、S_6、S_7、S_8、S_9 等处取有样品（图 2）

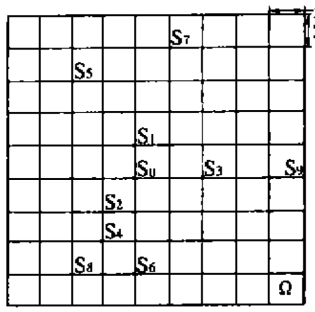

图 2　样品位置图

，其样品信息值分别为 Z_1、Z_2、Z_3、Z_4、Z_5、Z_6、Z_7、Z_8、Z_9，则 $Z(x)$ 在 S_0 点处的估计值为 $Z_0^*=\sum_{\alpha=1}^{9}\lambda_\alpha Z_\alpha$。采用求解普通克立格方程组的方法求权值 $\lambda_\alpha(\alpha=1,2,\cdots,9)$ 时，可通过求解如下普通克立格方程组得出：

$$\begin{bmatrix} 0 & 17.02 & 17.02 & 20.78 & 17.02 & 22 & 17.02 & 22 & 22 & 1 \\ 17.02 & 0 & 20.78 & 9.34 & 20.28 & 17.02 & 22 & 17.02 & 22 & 1 \\ 17.02 & 20.78 & 0 & 21.72 & 22 & 21.72 & 20.78 & 22 & 15.75 & 1 \\ 20.78 & 9.34 & 21.72 & 0 & 22 & 12.16 & 22 & 12.16 & 22 & 1 \\ 17.02 & 20.78 & 22 & 22 & 0 & 22 & 20.78 & 22 & 22 & 1 \\ 22 & 17.02 & 21.72 & 12.16 & 22 & 0 & 22 & 15.75 & 22 & 1 \\ 17.02 & 22 & 20.78 & 22 & 20.78 & 22 & 0 & 22 & 22 & 1 \\ 22 & 17.02 & 22 & 17.02 & 22 & 15.75 & 22 & 0 & 22 & 1 \\ 22 & 22 & 15.75 & 22 & 22 & 22 & 22 & 22 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \\ \lambda_4 \\ \lambda_5 \\ \lambda_6 \\ \lambda_7 \\ \lambda_8 \\ \lambda_9 \\ \mu \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 9.34 \\ 12.16 \\ 15.75 \\ 17.02 \\ 19.68 \\ 20.28 \\ 20.78 \\ 21.72 \\ 22 \\ 1 \end{bmatrix}$$

解之得：$\lambda_1=0.4914$，$\lambda_2=0.3359$，$\lambda_3=0.1954$，$\lambda_4=0.0521$，$\lambda_5=0.0117$，$\lambda_6=0.0277$，$\lambda_7=-0.0330$，$\lambda_8=-0.0603$，$\lambda_9=-0.0212$，$\mu=-0.7530$。若用本文所提法求解，则(2)式中各参量分别为：$\boldsymbol{U}=(1,1,1,1,1,1,1,1,1)$，$\boldsymbol{\theta}=(0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0)$，$\boldsymbol{L}=(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4,\lambda_5,\lambda_6,\lambda_7,\lambda_8,\lambda_9)^T$，$\boldsymbol{T}=(t_1,t_2,t_3,t_4,t_5,t_6,t_7,t_8,t_9)^T$，$\boldsymbol{M}=(\mu_1,\mu_2)^T$，$\boldsymbol{I}$ 为 9 阶单位矩阵，$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 分别为：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 0 & 17.02 & 17.02 & 20.78 & 17.02 & 22 & 17.02 & 22 & 22 & 1 & -1 \\ 17.02 & 0 & 20.78 & 9.34 & 20.28 & 17.02 & 22 & 17.02 & 22 & 1 & -1 \\ 17.02 & 20.78 & 0 & 21.72 & 22 & 21.72 & 20.78 & 22 & 15.75 & 1 & -1 \\ 20.78 & 9.34 & 21.72 & 0 & 22 & 12.16 & 22 & 12.16 & 22 & 1 & -1 \\ 17.02 & 20.78 & 22 & 22 & 0 & 22 & 20.78 & 22 & 22 & 1 & -1 \\ 22 & 17.02 & 21.72 & 12.16 & 22 & 0 & 22 & 15.75 & 22 & 1 & -1 \\ 17.02 & 22 & 20.78 & 22 & 20.78 & 22 & 0 & 22 & 22 & 1 & -1 \\ 22 & 17.02 & 22 & 17.02 & 22 & 15.75 & 22 & 0 & 22 & 1 & -1 \\ 22 & 22 & 15.75 & 22 & 22 & 22 & 22 & 22 & 0 & 1 & -1 \end{bmatrix},\quad \boldsymbol{B}=\begin{bmatrix} 9.34 \\ 12.16 \\ 15.75 \\ 17.02 \\ 19.68 \\ 20.28 \\ 20.78 \\ 21.72 \\ 22 \end{bmatrix}$$

解之得：$\lambda_1=0.4705$，$\lambda_2=0.3315$，$\lambda_3=0.1673$，$\lambda_4=0.0350$，$\lambda_5=0$，$\lambda_6=0$，$\lambda_7=0$，$\lambda_8=0.0027$，$\lambda_9=0$，$\mu_1=0.1812$，$\mu_2=0$，$\mu=\mu_1-\mu_2=0.1812$。

4　结　论

本文所提出的算法有以下特点：

1）考虑了权值非负约束条件；

2）当用普通克立格方程组计算出的权值均满足非负约束时，本文所提方法与普通克立格法计算结果相同，这说明本方法包含了普通克立格法；

3）本方法充分利用了线性规划求解简便快捷的优点，因此，与其它正克立格法相比无需进行叠代运

算，计算速度快，便于应用；

4)本方法克服了其它正克立格法在消除负权方面的主观因素影响，计算结果较准确；

5)可以将本方法基本思想与其它克立格法相结合以得出各种考虑权值非负约束的克立格算法。

本研究仅是一个初步成果，在估值精度等方面还有待于从理论上进一步探讨。

参考文献

1 侯景儒、郭光裕．矿产统计预测与地质统计学的理论及应用．北京：冶金工业出版社，1993

2 侯景儒，黄竟先．地质统计学的理论与方法．北京：地质出版社，1990．116～125

3 Herzfeld UC A note on programs performing kriging with nonnegative weights．Mathmatical Geology，1989，21(3)：391～392

4 高 谦．克立格方程组的一种有效解法．物探化探计算技术，1993，15(3)：226～231

ONE KIND ALGORITHM OF KRIGING WITH NONNEGATIVE WEIGHTS

Hu Xiaorong

The weights caculated with ordinary Kriging system always have some negative values which make the estimation impractical. A new kind algorithm of Kriging based on the Linear Programming (LP) is proposed to take the constrains of nonnegative weights into consideration, and this new method not only makes the use of LP's properties of easy and fast caculation, but also avoids the heavy caculation and subjective affection that existed in the other methods with nonnegative weights.

Key words kriging, nonnegative weights, linear programming

第一作者简介：

胡小荣 男，1964年生。1984年毕业于重庆大学采矿工程系采矿工程专业，获工学士学位，1988年在东北工学院采矿系获硕士学位。现任本溪冶金高等专科学校资建系副教授并在东北大学岩石力学专业攻读博士学位，主要从事采矿工程及岩石力学的科研和教学工作。

通讯地址：辽宁省本溪市 本溪冶金高等专科学校资建系采矿教研室 邮政编码：117022

(上接第21页)

裂形成的由石英砂岩、石英岩等沉积建造组成的"矿床构造屏弊盖层"。本区不少地段均具成矿母岩条件，但由于缺少这样的"构造屏弊盖层"，都未形成上规模、够品位的工业矿床。这类"屏弊盖层"均系NE向断层的上盘，产状是上陡下缓，规模一般长达几km～几10 km，地表宽度在几m～几100 m不等。多发生在区域沉积岩性差异较大的地层界面间。

总之，在本区寻找内生金属矿产时，首先要把"成矿母岩"与"构造屏弊盖层"结合起来加以研究，对成矿来说，二者缺一不可。另外在实际找矿时，还要注意围岩蚀变及物、化异常情况，一般说来，当C_{2+3}层位灰岩发生强烈大理岩化且叠加夕卡岩化时，若有化探异常($Cu>300\times10^{-6}$、$Zn>200\times10^{-6}$、$Cu/Zn>1$)存在，可作为本区找矿标志；Mo元素可作为本区近矿指示元素，其高异常带即预示中偏酸性岩体或Cu、W、S矿床的存在部位。

ORE－CONTROLLING FACTORS AND PROSPECTING DIRECTIONS OF THE TONGSHAN Cu－W DEPOSIT, ANHUI

Wang Chaoyi

Tongshan is a middle－sized Cu－W deposit rich in Cu, W, S, Ge, Ag and In. Based on the geology of ore deposit, the ore－controlling factors are analyzed, and suggestions proposed for prospecting in this area.

Key words Cu－W deposit, ore－controlling factors, suggestion for prospecting, Tongshan

第一作者简介：

王朝义 男，1963年生。1981年毕业于合肥工业大学地质系，获学士学位。现为冶金工业部华东地勘局综合地质大队地勘分院高级工程师。主要从事野外金属及非金属矿产勘查工作。

通讯地址：安徽省马鞍山市湖北东路 冶金工业部华东地勘局综合地质大队地勘分院 邮政编码：243000