

多端元模式下的 A, B, C 端元*

范守志 毛彦平

(中国科学院海洋研究所)

在多参数样品群的对比分类中,端元相关法的实质是先确定尽可能少的几个特征端元,再把各样品分别与这几个端元加以对比,以避免逐一对比各对样品之间的相关程度。

基于双端元模式的 $A-B$ 相关法已有讨论^[1,2,3]。本文进而讨论三端元模式以及在多端元模式下确定三个端元的方法。

文中用 X 表示向量 $\mathbf{X}$ 的模;用 $Q(\mathbf{X}, \mathbf{Y})$ 表示向量 $\mathbf{X}$ 和 $\mathbf{Y}$ 间的夹角的余弦 (Q 因子),有时也用 Q_{XY} 表之。

一、 A, B 端元

我们来证明,在双端元模式下确定 A, B 端元的最小 Q 因子方法^[3]仍然成立,即有:

定理一 设 N 个样品向量 $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_N$ 中的每一个都是 m 个端元向量 $\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \dots, \mathbf{A}_m$ 的线性组合:

$$\mathbf{X}_i = \sum_{K=1}^m k_{iK} \mathbf{A}_K \quad (1)$$

其中 $k_{iK} \geq 0$ ($i = 1, 2, \dots, N; K = 1, 2, \dots, m$),

则对一切 $i, j = 1, 2, \dots, N$, 恒有

$$Q(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) \geq \min_{1 \leq r, s \leq m} [Q(\mathbf{A}_r, \mathbf{A}_s)]. \quad (2)$$

为了证明(2),先证下述的引理。

引理一 设有 $m+1$ 个 n 维向量 $\mathbf{X}, \mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \dots, \mathbf{A}_m$, 以及 m 个非负实数 $k_1, k_2, \dots, k_m$,

则
$$Q\left(\mathbf{X}, \sum_{i=1}^m k_i \mathbf{A}_i\right) \geq \min_{1 \leq i \leq m} [Q(\mathbf{X}, \mathbf{A}_i)]. \quad (3)$$

事实上,由 Q 因子的定义,我们有

$$Q\left(\mathbf{X}, \sum_{i=1}^m k_i \mathbf{A}_i\right) = \frac{\left(\mathbf{X}, \sum_{i=1}^m k_i \mathbf{A}_i\right)}{|\mathbf{X}| \cdot \left|\sum_{i=1}^m k_i \mathbf{A}_i\right|}$$

* 中国科学院海洋研究所调查研究报告第 729 号。
本刊编辑部收到稿件日期: 1980 年 10 月 8 日。

$$\begin{aligned}
 &= \frac{\sum_{i=1}^m k_i A_i Q(\mathbf{X}, \mathbf{A}_i)}{\left| \sum_{i=1}^m k_i \mathbf{A}_i \right|} \geq \frac{\sum_{i=1}^m k_i A_i Q(\mathbf{X}, \mathbf{A}_i)}{\sum_{i=1}^m k_i A_i} \\
 &\geq \min_{1 \leq i \leq m} [Q(\mathbf{X}, \mathbf{A}_i)].
 \end{aligned}$$

这其中我们假定了各个 Q 均为非负。

对于(2), 现在我们有

$$Q(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) = Q\left(\mathbf{X}_i, \sum_{K=1}^m k_{iK} \mathbf{A}_K\right) \geq \min_{1 \leq K \leq m} [Q(\mathbf{X}_i, \mathbf{A}_K)],$$

即

$$\begin{aligned}
 Q(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) &\geq \min_{1 \leq K \leq m} \left[Q\left(\sum_{s=1}^m k_{is} \mathbf{A}_s, \mathbf{A}_K\right) \right] \\
 &\geq \min_{1 \leq K, s \leq m} [Q(\mathbf{A}_s, \mathbf{A}_K)],
 \end{aligned}$$

证明完毕。

定理一表明, 在多端元模式(1)之下, 各对样品向量之间的 Q 值均大于或等于某对端元向量之间的 Q 值。由 Q 因子的判别意义可知, 这对具有最小 Q 值的端元是最不相似的, 称为理想的 A, B 端元。

因而, 对于给定的一组实测资料 $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_N$ 而言, 可由下式从中挑选出一对 A, B 端元来:

$$Q(\mathbf{A}, \mathbf{B}) = \min_{1 \leq i, j \leq N} [Q(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j)]. \quad (4)$$

这式易于在电子计算机上实行。

二、三端元模式中的 C 端元

如何确定第三个端元?

定理二 设 N 个向量中的每一个, 如 $\mathbf{X}$, 均可表为某三个端元向量 $\mathbf{A}, \mathbf{B}$, 和 $\mathbf{C}$ 的线性组合

$$\mathbf{X} = k_1 \mathbf{A} + k_2 \mathbf{B} + k_3 \mathbf{C},$$

$k_1, k_2, k_3 \geq 0$, 则 $\mathbf{C}$ 端元具有如下特征:

$$\cos^{-1} Q(\mathbf{A}, \mathbf{X}) + \cos^{-1} Q(\mathbf{B}, \mathbf{X}) \leq \cos^{-1} Q(\mathbf{A}, \mathbf{C}) + \cos^{-1} Q(\mathbf{B}, \mathbf{C}) \quad (5)$$

证明 记

$$y = \cos^{-1} Q(\mathbf{A}, \mathbf{X}) + \cos^{-1} Q(\mathbf{B}, \mathbf{X}).$$

(情况一) $k_3 \neq 0$,

记

$$m = \frac{k_1 A}{k_3 C}, \quad n = \frac{k_2 B}{k_3 C},$$

则 $m, n \geq 0$.

因为
$$Q(A, X) = \frac{1}{Y} [m + nQ(A, B) + Q(A, C)],$$

$$Q(B, X) = \frac{1}{Y} [mQ(A, B) + n + Q(B, C)],$$

其中 $Y = \sqrt{m^2 + n^2 + 1 + 2mnQ(A, B) + 2mQ(A, C) + 2nQ(B, C)},$

都是 m, n 的二元函数, 所以

$$y = y(m, n)$$

也是 m, n 的二元函数。

因为
$$y(0, 0) = \cos^{-1}Q(A, C) + \cos^{-1}Q(B, C), \quad (6)$$

所以, $m = n = 0$ 时式(5)成立且取等号。

又,

$$\begin{aligned} \frac{\partial y}{\partial m} &= \frac{-1}{\sqrt{1 - Q^2(A, X)}} \cdot \frac{\partial Q(A, X)}{\partial m} + \frac{-1}{\sqrt{1 - Q^2(B, X)}} \\ &\quad \cdot \frac{\partial Q(B, X)}{\partial m} = \frac{1}{Y} \left[-\sqrt{1 - Q^2(A, X)} \right. \\ &\quad \left. + \frac{Q(A, X)Q(B, X) - Q(A, B)}{\sqrt{1 - Q^2(B, X)}} \right]. \end{aligned}$$

但已证明^[2], 对任意三个 n 维向量 A, B 和 X , 恒有

$$Q(A, X)Q(B, X) - Q(A, B) \leq \sqrt{1 - Q^2(A, X)} \cdot \sqrt{1 - Q^2(B, X)},$$

因此

$$\frac{\partial y}{\partial m} \leq 0.$$

同理可证

$$\frac{\partial y}{\partial n} \leq 0, \quad (7)$$

因而, 对一切 $m, n \geq 0$ 均有

$$y(m, n) \leq y(0, 0).$$

再由(6)知, 式(5)对一切 $k_1, k_2 (\geq 0)$ 及 $k_3 > 0$ 成立。(情况二) $k_3 = 0$,

此时

$$X = k_1 A + k_2 B,$$

记

$$y = y(k_1, k_2)$$

因为

$$Q(A, X) = \frac{1}{X} [k_1 A + k_2 B Q(A, B)],$$

$$Q(B, X) = \frac{1}{X} [k_1 A Q(A, B) + k_2 B],$$

所以

$$\frac{\partial y}{\partial k_1} = \frac{A}{X} \left[-\sqrt{1 - Q^2(A, X)} + \frac{Q(A, X)Q(B, X) - Q(A, B)}{\sqrt{1 - Q^2(B, X)}} \right],$$

但此时用直接代入的方法可以得到

$$Q(A, X)Q(B, X) - Q(A, B) = \sqrt{1 - Q^2(A, X)} \cdot \sqrt{1 - Q^2(B, X)},$$

因而

$$\frac{\partial y}{\partial k_1} = 0.$$

同理可证

$$\frac{\partial y}{\partial k_2} = 0.$$

于是

$$y = y(k_1, k_2) = \text{常数}.$$

由于

$$y(0, 1) = \cos^{-1}Q(A, B) + \cos^{-1}Q(B, B),$$

因此

$$y = \cos^{-1}Q(A, B). \quad (8)$$

对比(5)及(8)式知,现在仅须证明

$$\cos^{-1}Q(A, B) \leq \cos^{-1}Q(A, C) + \cos^{-1}Q(B, C). \quad (9)$$

当各 Q 值在 $[-1, 1]$ 中取值时, (9) 式中各项取值范围均为 $[0, \pi]$, 右方取值范围是 $[0, 2\pi]$ 。当右式在 $[\pi, 2\pi]$ 中取值时, (9) 式自然成立。而当右式在 $[0, \pi]$ 中取值时, 在(9)式两边同时取余弦并由文章^[2]的附录一知其成立。

于是定理二成立。

三、多端元模式下的 C 端元

我们来证明, 在多端元模式(1)成立时, 对于任意的 A, B , 都有

$$\cos^{-1}Q(A, X_i) + \cos^{-1}Q(B, X_i) \leq \max_{1 \leq k \leq m} [\cos^{-1}Q(A, A_k) + \cos^{-1}Q(B, A_k)], \quad (10)$$

这里假定各 Q 值均为非负的。

因此, 若由式(4)确定出 A, B 端元后, 由(10)式知, 可由下式确定第三个端元 C :

$$\cos^{-1}Q(A, C) + \cos^{-1}Q(B, C) = \max_{1 \leq i \leq N} [\cos^{-1}Q(A, X_i) + \cos^{-1}Q(B, X_i)]. \quad (11)$$

很明显, 这式易于在计算机上实行。

为了证明式(10), 须先证明如下定理:

引理二 若 A, B, C 和 D 是任意四个 n 维向量, 又

$$X = kC + lD,$$

其中 $k, l \geq 0$,

则 $\cos^{-1}Q_{AX} + \cos^{-1}Q_{BX} \leq \max[\cos^{-1}Q_{AC} + \cos^{-1}Q_{BC}, \cos^{-1}Q_{AD} + \cos^{-1}Q_{BD}]$,

假定各 Q 值均为非负。

〔证明〕 不失一般性,可设

$$\cos^{-1}Q_{AC} + \cos^{-1}Q_{BC} \leq \cos^{-1}Q_{AD} + \cos^{-1}Q_{BD} \quad (12)$$

则须证 $\cos^{-1}Q_{AX} + \cos^{-1}Q_{BX} \leq \cos^{-1}Q_{AD} + \cos^{-1}Q_{BD}$ (13)

因诸 Q 非负,故(12),(13)各与下面(14),(15)等价:

$$Q_{AC}Q_{BC} - \sqrt{1-Q_{AC}^2}\sqrt{1-Q_{BC}^2} \geq Q_{AD}Q_{BD} - \sqrt{1-Q_{AD}^2}\sqrt{1-Q_{BD}^2} \quad (14)$$

$$Q_{AX}Q_{BX} - \sqrt{1-Q_{AX}^2}\sqrt{1-Q_{BX}^2} \geq Q_{AD}Q_{BD} - \sqrt{1-Q_{AD}^2}\sqrt{1-Q_{BD}^2} \quad (15)$$

注意今有 $Q_{AX} = \frac{1}{X} [kCQ_{AC} + lDQ_{AD}]$,

$$Q_{BX} = \frac{1}{X} [kCQ_{BC} + lDQ_{BD}],$$

$$X = \sqrt{(kC)^2 + (lD)^2 + 2klCDQ_{CD}},$$

因此 $l=0$ 时式(15)即是(14)。

当 $l \neq 0$ 时,记 $m = kC/lD$, $m \geq 0$,

$$\left. \begin{aligned} Q_{AX} &= \frac{1}{V} [mQ_{AC} + Q_{AD}], \\ Q_{BX} &= \frac{1}{V} [mQ_{BC} + Q_{BD}], \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

其中 $V = \sqrt{m^2 + 2mQ_{CD} + 1}$ 。

由(16)且利用^[2]的附录一,可有

$$\left. \begin{aligned} 1 - Q_{AX}^2 &\leq \frac{1}{V^2} [m\sqrt{1-Q_{AC}^2} + \sqrt{1-Q_{AD}^2}]^2, \\ 1 - Q_{BX}^2 &\leq \frac{1}{V^2} [m\sqrt{1-Q_{BC}^2} + \sqrt{1-Q_{BD}^2}]^2, \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

由(16),(17)可得

$$Q_{AX}Q_{BX} - \sqrt{1-Q_{AX}^2}\sqrt{1-Q_{BX}^2} \geq \frac{K}{V^2}, \quad (18)$$

其中 $K = m^2[Q_{AC}Q_{BC} - \sqrt{1-Q_{AC}^2}\sqrt{1-Q_{BC}^2}] + [Q_{AD}Q_{BD} - \sqrt{1-Q_{AD}^2}\sqrt{1-Q_{BD}^2}] + m[Q_{AC}Q_{BD} - \sqrt{1-Q_{AC}^2}\sqrt{1-Q_{BD}^2}] + m[Q_{AD}Q_{BC} - \sqrt{1-Q_{AD}^2}\sqrt{1-Q_{BC}^2}]$ 。

由(14),得

$$\begin{aligned} K &\geq (m^2 + 1)[Q_{AD}Q_{BD} - \sqrt{1-Q_{AD}^2}\sqrt{1-Q_{BD}^2}] \\ &\quad + m[Q_{AC}Q_{BD} - \sqrt{1-Q_{AC}^2}\sqrt{1-Q_{BD}^2}] \end{aligned}$$

$$+ m[Q_{AD}Q_{BC} - \sqrt{1 - Q_{AD}^2}\sqrt{1 - Q_{BC}^2}], \quad (19)$$

由(18),(19)知,欲证(15),

仅须证

$$Q_{AC}Q_{BD} - \sqrt{1 - Q_{AC}^2}\sqrt{1 - Q_{BD}^2} + Q_{AD}Q_{BC} - \sqrt{1 - Q_{AD}^2}\sqrt{1 - Q_{BC}^2} \\ \geq 2Q_{CD}[Q_{AD}Q_{BD} - \sqrt{1 - Q_{AD}^2}\sqrt{1 - Q_{BD}^2}],$$

引入记号 $\theta_{AC} = \cos^{-1}Q_{AC}$, $\theta_{BD} = \cos^{-1}Q_{BD}$, 等等,则所待证者为

$$\cos \frac{\theta_{AC} + \theta_{BD} + \theta_{AD} + \theta_{BC}}{2} \cdot \cos \frac{\theta_{AC} - \theta_{AD} + \theta_{BD} - \theta_{BC}}{2} \\ \geq \cos \theta_{CD} \cdot \cos(\theta_{AD} + \theta_{BD}), \quad (20)$$

但由(12)知

$$\cos \frac{\theta_{AC} + \theta_{BD} + \theta_{AD} + \theta_{BC}}{2} \geq \cos(\theta_{AD} + \theta_{BD}),$$

因此若能证

$$\cos\left(\frac{\theta_{AC} - \theta_{AD}}{2} + \frac{\theta_{BD} - \theta_{BC}}{2}\right) \geq \cos \theta_{CD} \quad (21)$$

则(20)即成立,因为 $\cos \theta_{CD}$ 非负。

这可由

$$-\frac{\pi}{2} \leq \frac{\theta_{AC} - \theta_{AD}}{2}, \frac{\theta_{BD} - \theta_{BC}}{2} \leq \frac{\pi}{2}$$

得

$$\cos\left(\frac{\theta_{AC} - \theta_{AD}}{2} + \frac{\theta_{BD} - \theta_{BC}}{2}\right) \\ \geq \sqrt{\frac{1 + \cos(\theta_{AC} - \theta_{AD})}{2}} \cdot \sqrt{\frac{1 + \cos(\theta_{BD} - \theta_{BC})}{2}} \\ - \sqrt{\frac{1 - \cos(\theta_{AC} - \theta_{AD})}{2}} \cdot \sqrt{\frac{1 - \cos(\theta_{BD} - \theta_{BC})}{2}}$$

再由[2]之附录一,总有

$$1 \geq \cos(\theta_{AC} - \theta_{AD}) \geq \cos \theta_{CD}, \\ 1 \geq \cos(\theta_{BD} - \theta_{BC}) \geq \cos \theta_{CD},$$

因而得到

$$\cos\left(\frac{\theta_{AC} - \theta_{AD}}{2} + \frac{\theta_{BD} - \theta_{BC}}{2}\right) \geq \frac{1 + \cos \theta_{CD}}{2} - \frac{1 - \cos \theta_{CD}}{2}.$$

这正是(21)式。引理二于是得证。

由引理二,并采用数学归纳法,知 m 为任意正整数时,(10)均成立。

(10)式的几何意义是: 对任意给定的 A 和 B , 在多端元模式(1)之下, 从诸端元 $A_1, A_2, \dots, A_m$ 中总可以找到一个端元, 它到 A, B 的角距离之和是最大的。

四、讨 论

在实际应用时,首先从资料阵

$$\mathbf{X} = (X_{iK})_{N \times M}$$

中依(4)及(11)式确定 $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, $\mathbf{C}$ 端元, $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ 之间的角距离是最大的, $\mathbf{C}$ 是到 $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ 的角距离之和最大的。 X_{iK} 是第 i 站中第 K 种参数的测定值。

进行 Q 型分析时,资料阵的第 i 行相应于(4),(11)中的 $\mathbf{X}_i$; 作 R 型分析时,资料阵中的第 i 列相应于(4),(11)中的 $\mathbf{X}_i$ 。

式(4),(11)表明,这样来确定 $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, $\mathbf{C}$ 的计算量很小,而且占用计算机的存储单元也是很少的。

虽然本文详细证明了方法的数学基础,但它的有效性须由应用实践来检验。曾用此法分析了东海海底沉积物的重矿物资料(235 站,44 种重矿物),作的是 Q 型分析。结果是令人满意的^[4]。

参 考 文 献

- [1] 范守志,1979。应用 Q 因子进行样品分类的 A - B 相关法。海洋与湖沼 10(4): 319—328。
- [2] 范守志,1981。应用 Q 因子进行样品分类的 A - B 相关法的信任椭圆。海洋与湖沼论文集。科学出版社 123—136 页。
- [3] 范守志,1982。 A - B 相关法中的 A , B 端元。海洋与湖沼 13(1): 60—65。
- [4] 陈丽蓉、范守志、毛彦平,东海沉积物中重矿物组合的统计分析。海洋科学集刊(第 21 集)(排印中)。

THE A, B, C END-MEMBERS IN THE MULTI-END-MEMBERS MODEL

Fan Shouzhi and Mao Yanping
(*Institute of Oceanology, Academia Sinica*)

ABSTRACT

This paper is a development of a previous one^[3].

It has been proved that if each one of N sample vectors $X_1, X_2, \dots, X_N$ may be written as

$$X_i = \sum_{s=1}^m k_{is} A_s$$

where $k_{is} \geq 0$ and $A_1, A_2, \dots, A_m$ are m end-member samples, then

$$Q(X_i, X_j) \geq \min[\{Q(A_r, A_s)\}]; \quad (1)$$

$$\begin{aligned} & \cos^{-1} Q(A, X_i) + \cos^{-1} Q(B, X_i) \\ & \leq \max[\{\cos^{-1} Q(A, A_r) + \cos^{-1} Q(B, A_r)\}] \\ & \quad \left(\begin{matrix} i, j = 1, 2, \dots, N \\ r, s = 1, 2, \dots, m \end{matrix} \right) \end{aligned} \quad (2)$$

where the $Q(X_i, X_j)$ is cosine of the angle between the vectors X_i and X_j , and $0 \leq Q(A_r, A_s) \leq 1$.

On the basis of the formulas (1) and (2) above, therefore, we can select the end-member samples A, B and C from among a given set of data samples $X_1, X_2, \dots, X_N$.

There is a successful example of this method described in a previous paper^[4].