

Eksempler på databehandling af geologiske problemer ved hjælp af vektor- og matrixregning

TOMMY JØRGART

Jørgart, T.: Eksempler på databehandling af geologiske problemer ved hjælp af vektor- og matrixregning. *Dansk geol. Foren., Årsskrift for 1978*, side 23–31. København, ? januar 1979.

The solution of a variety of problems related to mineralogy and petrology may profit from vector and matrix calculus. To show the principles, the technique and the scope of the method a few worked examples have been treated. The intentions are to demonstrate the superiority of the method in several respects. Among the most notable advantages are clarity and suitability for electronic computing. A vector interpretation of a principle component analysis of 50 granites from Bornholm is outlined. The interpretation favors an origin by partial melting for these granites.

Tommy Jørgart, Roskilde Universitetscenter, 4000 Roskilde, 5. oktober 1978.

En del databehandling indenfor mineralogi og petrologi er baseret på, at data er af en sådan type, at de kan indordnes i en tabel. De fleste tabeller svarer til, hvad matematikerne kalder en matrix, d.v.s. en samling tal med rækker og søjler. Her kan vi specielt tænke på et antal kemiske analyser af bjergarter eller mineraler analyseret for vigtige komponenter som SiO_2 , TiO_2 , Al_2O_3 etc. Hver af analyserne kan vi opfatte som en vektor. Tolkningen af den indbyrdes sammenhæng mellem analyserne (søjlevektorerne) i en sådan tabel (matrix) er som regel ikke lige ved hånden, hvorfor en geolog vil forsøge sig med forskellige midler: plotte variationsdiagrammer, beregne normative sammensætninger, finde gennemsnit og standardafvigelser og måske benytte multivariate statistiske metoder. Alle disse manøvrer kan imidlertid formuleres i vektor- og matrixsprog. Artiklen vil gennem nogle få simple eksempler vise, hvorledes metoden virker og demonstrere nogle af de fordele, man opnår ved dens anvendelse.

Omregning fra kemisk analyse til mineralogisk sammensætning

For at vise lidt om tankegangen bag vektor-beregningerne sætter vi os den opgave, at omregne en kemisk analyse af en olivin (Tab. 1) til mængder af endeledele forsterit og fayalit. Sædvanligvis er man interesseret i at opgive disse mængder i mol procent. Vi vil dog i dette demonstrations-

eksempel udregne olivinenes sammensætning som $f_{\text{O}_1}f_{\text{A}_2}$, idet x_1 og x_2 er massebrøken af henholdsvis forsterit, Mg_2SiO_4 , og fayalit, Fe_2SiO_4 , i den pågældende olivin-analyse. Opgaven er begrænset hertil for ikke at overbebyrde eksemplet med for mange vektorrum.

1. *formulering*: Problemet kan formuleres i vektorsprog på følgende måde. I et rum, hvor mineralerne opfattes som vektorer kan sammensætningen af en blandingskrystal formuleres som en lineær kombination af »endeledsvektorer«, f.eks.

$$\bar{x} = x_1\bar{f}_O + x_2\bar{f}_A = (x_1, x_2),$$

Tab. 1. Kemisk analyse af olivin. Udplukket blandt de analyser Deer et al. (1966) har samlet fra litteraturen.

SiO_2	34.04
TiO_2	.43
Al_2O_3	.91
Fe_2O_3	1.46
FeO	40.37
MnO	.68
MgO	20.32
CaO	.81
H_2O	.09
Total	99.11

Det mineralogiske vektorrum

Det kemiske vektorrum

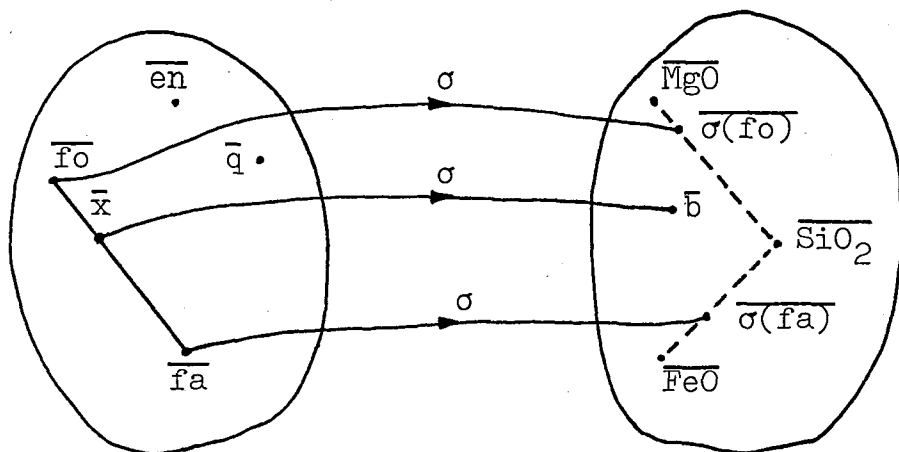


Fig. 1. Skematisk fremstilling af lineære transformationer mellem to vektorrum. Den nærmere forklaring er givet i teksten.

hvor $\bar{x}$ således er en blandingsolivin sammensat af endeleddene $\bar{fo}$ (forsterit) og $\bar{fa}$ (fayalit). I vektorsprog betegnes disse endeled som basisvektorer og x_1 og x_2 er koordinater i forhold til disse. Det vektorrum, der udspændes af samtlige mineralendeled vil vi kalde det mineralogiske vektorrum (fig. 1). Rum, der udspændes af et mindre antal basisvektorer f.eks. $\bar{fo}$ - $\bar{fa}$ -rummet (-planet) kaldes underrum. I vor formulering er $\bar{x}$ en ukendt vektor, hvis koordinater opgaven går ud på at finde. Det ses, at den kemiske analyse, vi går ud fra, ikke uden videre kan passes ind i det mineralogiske rum. Vi kan imidlertid konstruere et nyt rum, hvis basisvektorer er de kemiske komponenter SiO_2 , TiO_2 , Na_2O etc. I dette rum kan vor analyse repræsenteres som

$$\bar{b} = m_{\text{SiO}_2} \overline{\text{SiO}_2} + m_{\text{TiO}_2} \overline{\text{TiO}_2} + \dots + m_{\text{H}_2\text{O}} \overline{\text{H}_2\text{O}}$$

Det ses da, at de ni poster i den kemiske analyse kan opfattes som koordinater i forhold til de kemiske basisvektorer, der udspænder et 9-dimensionalt underrum af, hvad vi vil kalde det kemiske vektorrum (fig. 1). Det er klart, at der er en eller anden forbindelse mellem $\bar{x}$ og $\bar{b}$, og det forekommer også rimeligt at antage, at denne forbindelse er af en så generel karakter, at den kan udstrækkes til et større antal vektorer i de to rum. Nærmere studier viser, at der matematisk set er tale om en lineær transformation, der afbilder vektorer i det mineralogiske vektorrum på vek-

torer i det kemiske rum. Betegnes den lineære transformation σ , betyder $\sigma(\bar{fo})$ den vektor i det kemiske rum, der er overført fra $\bar{fo}$ i det mineralogiske rum (fig. 1). $\sigma(\bar{fo})$ siges at være billedet af $\bar{fo}$. Hvis det hele skal have nogen mening, må $\sigma(\bar{fo})$ være den kemiske analyse af olivinendeledet forsterit. På samme måde er $\sigma(\bar{fa})$ en fayalit-analyse, og det er muligt at skaffe oplysninger om $\sigma(\bar{fo})$'s og $\sigma(\bar{fa})$'s koordinater.

På helt tilsvarende måde er $\sigma(\bar{x})$ den olivin-analyse, vi har som udgangspunkt for disse beregninger. Det er altså den analyse vi kender, og som vi betegner $\bar{b}$. Det er derfor muligt at formulere vor problemstilling således:

»Find $\bar{x}$ således, at

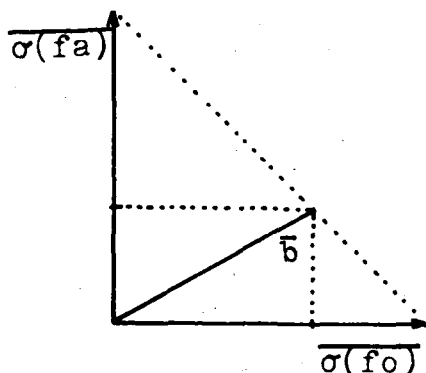
$$\sigma(\bar{x}) = \bar{b}.$$

Et problem på denne form kaldes et lineært problem. Problemet er imidlertid ikke modent til løsning på denne form.

2. *formulering.* En vektor fra det mineralogiske vektorrum, f.eks. $\bar{x} = x_1 \bar{fo} + x_2 \bar{fa}$ kan overføres til det kemiske vektorrum på følgende måde:

$$\begin{aligned} \sigma(\bar{x}) &= \sigma(x_1 \bar{fo} + x_2 \bar{fa}) \\ &= x_1 \sigma(\bar{fo}) + x_2 \sigma(\bar{fa}), \end{aligned}$$

idet det er en definitions-mæssig egenskab ved lineære transformationer, at de må operere bag om koordinaterne. Korrespondancen mellem de to



$$\bar{b} = x_1 \overline{\sigma(fo)} + x_2 \overline{\sigma(fa)}$$

Fig. 2. Den kemiske analyse $\bar{b}$ opløst efter de to endelede $\overline{\sigma(fo)}$ og $\overline{\sigma(fa)}$. Denne fremstilling er overforenkelt, jf. teksten og fig. 3.

rum virker på rummenes struktur, hvorved man kan opnå, at korresponderende vektorer i de to rum udtrykkes ved de samme koordinater. Vi kan nu give en ny formulering af problemet:

»Find $\bar{x} = (x_1, x_2)$ således, at

$$x_1 \overline{\sigma(fo)} + x_2 \overline{\sigma(fa)} = \bar{b}.$$

Hvis vi tænker på olivinendeledene som to vektorer $\overline{\sigma(fo)}$ og $\overline{\sigma(fa)}$ i det kemiske rum er det naturligt at forestille sig olivin-analysen $\bar{b}$ som en tredje vektor, vi gerne ser udtrykt ved disse to. $\overline{\sigma(fo)}$ og $\overline{\sigma(fa)}$ udspejler naturligvis et 2-dimensionalt underrum, selvom de begge opgives med 9 koordinater (fig. 2). Forholdet bliver yderligere klart, hvis vi skriver vektorligningen ud med alle detaljer:

	$\overline{\sigma(fo)}$	$\overline{\sigma(fa)}$	$\bar{b}$
SiO ₂	42.70	29.50	34.04
TiO ₂	0	0	.43
Al ₂ O ₃	0	0	.91
Fe ₂ O ₃	0	0	1.46
FeO	0	70.50	40.37
MnO	0	0	.68
MgO	57.30	0	20.32
CaO	0	0	.81
H ₂ O	0	0	.09

$$x_1 \begin{bmatrix} 42.70 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 57.30 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} 29.50 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 70.50 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 34.04 \\ .43 \\ .91 \\ 1.46 \\ 40.37 \\ .68 \\ 20.32 \\ .81 \\ .09 \end{bmatrix},$$

hvor vi har indført søjlevektor-notation. Denne ligning minder meget om det sæt af ligninger,

man kunne tænke sig opstillet til opgavens løsning selv uden brug af vektorrumsteori.

Den detaljerede formulering afdækker imidlertid et problem. Det fremgår nemlig, at $\bar{b}$ ikke helt kan repræsenteres af $\overline{\sigma(fo)}$ og $\overline{\sigma(fa)}$, da disse vektorer fuldstændig mangler komponenter langs med 6 af de 9 vektorer, medens $\bar{b}$ har opgivet koordinater i forhold til dem alle. Men dette er kun den mest iøjnefaldende, men ikke den principielt vigtigste side af problemet. Da $\bar{b}$ er 9-dimensionalt og skal repræsenteres i det 2-dimensionale rum udspejlet af $\overline{\sigma(fo)}$ og $\overline{\sigma(fa)}$, er der hele 7 dimensioner, der går tabt. I forhold til de 6 indlysende er der altså endnu én, den interessanteste.

Vi skal snart vise en teknik til bearbejdning af problemet uanset hvor mange dimensioner, der er i overskud. Denne teknik er altså helt generel og kan anvendes direkte på det ovenfor viste 9-dimensionale problem. Af hensyn til plads og overskuelighed i det følgende vil vi dog simplificere problemet til

$$x_1 \begin{bmatrix} \overline{\sigma(fo)} \\ 42.70 \\ 0 \\ 57.30 \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} \overline{\sigma(fa)} \\ 29.50 \\ 70.50 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{b} \\ 34.04 \\ 40.37 \\ 20.32 \end{bmatrix}. \quad (1)$$

Herved er problemet blevet reduceret med 6 dimensioner, men den interessanteste ekstra dimension er bibeholdt. Problemet rummer derfor de samme principielle aspekter: Stadigvæk er $\bar{b}$ opgivet med for mange dimensioner (nu 3) i forhold til det rum, den skal passes ind i (stadig 2-dimensionalt). Det 3-dimensionale vektorproblem (1) er derfor en tilfredsstillende model for det 9-dimensionale problem, og vi vil fuldføre beregningerne på dette.

3. formulering. Inden vi går over til at vise, hvorledes problemet løses, vil vi formulere problemet på matrixform:

$$\begin{bmatrix} \overline{\sigma(fo)} \\ 42.70 \\ 0 \\ 57.30 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overline{\sigma(fa)} \\ 29.50 \\ 70.50 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{b} \\ 34.04 \\ 40.37 \\ 20.32 \end{bmatrix}$$

eller:

$$A\bar{x} = \bar{b}.$$

Sammenlignes med
 $\sigma(\bar{x}) = \bar{b}$

ses det, at matricen A repræsenterer σ . A betegnes ofte som en operatormatrix, idet det er bekvemt at tænke på A som en operator, der overfører $\bar{x}$ fra det mineralogiske (under)rum til $\bar{b}$ i det kemiske (under)rum. Operatormatricens søjler udgøres af nogle ganske specielle vektorer i det kemiske rum nemlig billederne af den basis i det mineralogiske rum, som $\bar{x}$ ønskes beregnet i forhold til. Denne egenskab gør det let at fremstille en konkret operatormatrix svarende til et givent problem. Dette vil vi vende tilbage til.

Løsning af problemet ved mindste kvadraters metode

Hvis der havde været lige mange dimensioner i $\bar{x}$ og $\bar{b}$ ville udtrykket svarende til (1) have været identisk med et antal ligninger med et tilsvarende antal ubekendte. Problemet ville derfor have været til at løse uden særlige foranstaltninger. Som forholdene er nu, kan vi imidlertid ikke forvente, at $\bar{b}$ skal kunne repræsenteres eksakt af $\sigma(\bar{f}_0)$ og $\sigma(\bar{f}_a)$. Sagt med andre ord: en løsning af problemet $\sigma(\bar{x}) = \bar{b}$ eksisterer ikke. Det kan imidlertid formodes, at der findes en tilnærmelse $\bar{x} = (x_1, x_2)$, der vil være løsningen på et beslægtet problem

$$\sigma(\bar{x}) = \bar{b}',$$

hvor $\bar{b}'$ er en vektor i det plan, der udspændes af $\sigma(\bar{f}_0)$ og $\sigma(\bar{f}_a)$ og som er tættest muligt på $\bar{b}$. Denne situation beskrives af fig. 3.

For at finde den nærmeste vektor $\bar{b}'$ i det omtalte plan skal vi blot gøre $\bar{d} = \bar{b} - \bar{b}'$ så lille som muligt, hvilket kan vises at være tilfældet, når $\bar{d}$ står vinkelret på det af $\sigma(\bar{f}_0)$ og $\sigma(\bar{f}_a)$ udspændte rum. Dette resultat kan ses ud fra rent geometriske forestillinger.

Betingelsen for at to vektorer står vinkelret på hinanden (= er orthogonale) er, at cosinus til den mellemliggende vinkel er 0. I vektorsprog formuleres dette:

$$\bar{u} \cdot \bar{v} = u_1v_1 + u_2v_2 + \dots + u_nv_n = 0,$$

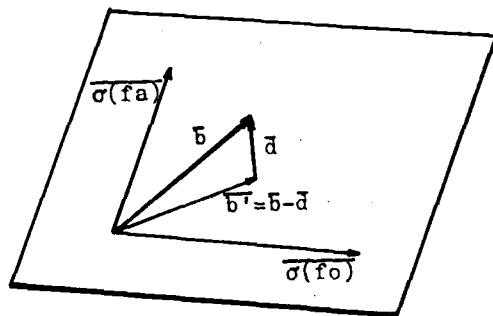


Fig. 3. Beliggenheden af den kemiske analyse $\bar{b}$ i forhold til planet udspændt af $\sigma(\bar{f}_0)$ og $\sigma(\bar{f}_a)$. Vektoren $\bar{b}'$, der er projiceret fra $\bar{b}$ vinkelret på planet bruges i stedet for $\bar{b}$ i beregningerne.

hvor $\bar{u}$ og $\bar{v}$ er to n -dimensionale vektorer, hvis koordinater angives som henholdsvis u_i og v_i . For at finde $\bar{d}$ benyttes, at $\bar{d}$ er vinkelret på samtlige vektorer i underrummet udspændt af $\sigma(\bar{f}_0)$ og $\sigma(\bar{f}_a)$. Det er imidlertid tilstrækkeligt at opstille orthogonalitetsbetingelsen for basisvektorerne:

$$\bar{d} \cdot \sigma(\bar{f}_0) = (\bar{b} - \bar{b}') \cdot \sigma(\bar{f}_0) = 0$$

$$\bar{d} \cdot \sigma(\bar{f}_a) = (\bar{b} - \bar{b}') \cdot \sigma(\bar{f}_a) = 0$$

Men

$$\begin{aligned} \bar{b}' &= x_1 \sigma(\bar{f}_0) + x_2 \sigma(\bar{f}_a) \\ &= x_1 \bar{a}_1 + x_2 \bar{a}_2, \end{aligned}$$

hvor den sidste linie fremkommer, idet vi bruger, at $\sigma(\bar{f}_0)$ og $\sigma(\bar{f}_a)$ er søjler i matricen A . Indsætter vi dette, kan betingelserne omformes til:

$$(\bar{b} - x_1 \bar{a}_1 - x_2 \bar{a}_2) \cdot \bar{a}_1 = 0$$

$$(\bar{b} - x_1 \bar{a}_1 - x_2 \bar{a}_2) \cdot \bar{a}_2 = 0.$$

Efter multiplikation led for led og en rokade fås:

$$\begin{aligned} (\bar{a}_1 \cdot \bar{a}_1) x_1 + (\bar{a}_1 \cdot \bar{a}_2) x_2 &= \bar{a}_1 \cdot \bar{b} \\ (\bar{a}_2 \cdot \bar{a}_1) x_1 + (\bar{a}_2 \cdot \bar{a}_2) x_2 &= \bar{a}_2 \cdot \bar{b}. \end{aligned} \quad (2)$$

Udregningen af de skalære produkter foregår således:

$$(\bar{a}_1 \cdot \bar{a}_1) = (42.70)^2 + 0^2 + (57.30)^2 = 5106.58$$

$$\begin{aligned} (\bar{a}_1 \cdot \bar{a}_2) &= 42.70 \cdot 29.50 + 0 + 0 = 1259.22 \\ &\text{etc.} \end{aligned}$$

Det ender således med ligningssystemet

$$5106.58x_1 + 1259.22x_2 = 2617.84$$

$$1259.22x_1 + 5839.91x_2 = 3849.92.$$

Dette ligningssystem kan vi løse ved ordinære midler. Løsningen er

$$x_1 = .3697$$

$$x_2 = .5795.$$

Der findes således 36.97 vægt % forsterit og 57.95 vægt % fayalit i analysen. Summen af disse to er 94.92. De sidste ca. 5 % omfatter Ca-olivin, oxideret fayalit eller skyldes urenheder. Vektorrummetoden kan meget let inddrage disse forhold i beregningerne.

Løsningen formuleret i matrixprog
Ligningssystemet (2) hedder på matrixform

$$A^T A \bar{x} = A^T \bar{b},$$

hvor A^T , som kaldes den transponerede af A , er opstået udfra A ved at ombytte rækker og søjler. Løsningen kan skrives kompakt som:

$$\bar{x} = (A^T A)^{-1} A^T \bar{b},$$

hvor vi benytter os af matrixinversion. Inversion er defineret på følgende måde: Hvis der til en matrix M eksisterer en matrix N således at

$$MN = I,$$

hvor I er en matrix bestående af lutter 1 taller på diagonalen og nulle for resten, kaldes N den inverterede af M og betegnes M^{-1} . I kaldes identitetsmatricen, idet multiplikation med denne intet ændrer. Inversion er således matrixregningens form for division. Visse betingelser skal være opfyldt for at inversion er tilladt. I det ovenfor løste problem er betingelserne opfyldt.

Den færdige løsning omfatter en operatormatrix $(A^T A)^{-1} A^T$. Denne operatormatrix vil være den samme for enhver problem vedrørende omregning af en olivin-analyse til endelédene forsterit og fayalit. Er denne matrix udregnet én gang, kan den anvendes igen og igen for vilkårlige sammensætninger $\bar{b}$. Udover den begrebsmæssige landvinding, der ligger heri, er det også klart, at der ligger betydelige fordele i forbindelse med

beregninger, hvad enten disse udføres ved hjælp af en lommeregner eller med EDB.

Til slut et par ord om løsningens karakter. Løsningen er en såkaldt »least square« løsnings. Navnet kommer af, at længden af vektoren $\bar{d} = \bar{b} - \bar{b}'$ kan udtrykkes som:

$$\text{Længde}(\bar{d}) = \sqrt{\bar{d} \cdot \bar{d}} = (d_1^2 + d_2^2 + \dots)^{1/2}.$$

Den løsning, hvor $\bar{b}'$ er nærmest ved $\bar{b}$, d.v.s. den, der gør $\bar{d}$ mindst, er altså tillige den løsning, der gør summen af kvadraterne på $\bar{d}$'s koordinater mindst. På dansk taler man om mindste kvadraters metode.

Tolkning af lineære transformationer

I dette afsnit skal vi give en kort fremstilling af begrebsapparatet med det primære sigte at vise, hvorledes man med simple overvejelser kan fremme forståelsen og eliminere en eventuel usikkerhed.

Vi har set, hvorledes et udtryk som

$$A\bar{c} = \bar{b}$$

kan fortolkes på den måde, at operatormatricen A sender en vektor $\bar{c}$ fra det mineralogiske rum over i en vektor $\bar{b}$ fra det kemiske rum. Vi har også set, at A 's søjler består af billederne af basisvektorerne fra det mineralogiske rum. Dette er let nok at bekræfte i konkrete tilfælde ved blot at tage de pågældende basisvektorer og lade A operere på dem. I vort forrige eksempel benyttede vi mineral-basisvektorerne:

$$\bar{f}_0 = 1 \bar{f}_0 + 0 \bar{f}_a = (1,0)$$

$$\bar{f}_a = 0 \bar{f}_0 + 1 \bar{f}_a = (0,1)$$

Idet vi indfører notationen $A = [\bar{a}_1 \bar{a}_2]$ kan vi skrive operationen som:

$$A \bar{f}_0 = [\bar{a}_1 \bar{a}_2] \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \bar{a}_1$$

$$A \bar{f}_a = [\bar{a}_1 \bar{a}_2] \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \bar{a}_2,$$

hvilket rummer al information om karakteren af A 's kolonner. Man kan således direkte forvisse

sig om, at A's første kolonne $\bar{a}_1$ virkelig kan betegnes som $A \bar{f}_0$, og altså følgelig er billedet $\bar{\sigma}(\bar{f}_0)$ af den første mineralbasisvektor. Tilsvarende gælder for den anden kolonne.

For en tilfældig olivin $\bar{c} = c_1 \bar{f}_0 + c_2 \bar{f}_a = (c_1, c_2)$ fås i samme notation:

$$A\bar{c} = \begin{bmatrix} \bar{a}_1 & \bar{a}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = c_1 \bar{a}_1 + c_2 \bar{a}_2.$$

Denne ligning udgør sammen med de to ovenstående et let opbygge og let tolkeligt skelet til hjælp for forståelsen af lineære transformationer.

Lineær transformation af mange vektorer

I det følgende vil vi frigøre os fra bindingen til de specielle vektorrum, vi har benyttet hidtil. Vi vil desuden lade A operere på et større antal vektorer på én gang. Herved fås

$$A \begin{bmatrix} \bar{c}_1 & \bar{c}_2 & \dots & \bar{c}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{b}_1 & \bar{b}_2 & \dots & \bar{b}_n \end{bmatrix}.$$

Til hver vektor $\bar{c}_i$ i rum U svarer altså en vektor $\bar{b}_i$ i rum V. På matrixform skrives dette udtryk

$$AC = B.$$

Størrelsen af de tre matricer er indbyrdes afhængig. Hvis A er m gange r (m rækker og r søjler), er C af størrelsen r gange n, og B af størrelsen m gange n. Det er vigtigt at holde sig vektorrumsforklaringen for øje: De n søjlevektorer, der udgør C, er r-dimensionale. De kan derfor repræsenteres af r basisvektorer. Billederne af disse basisvektorer er opført som de r kolonner i operatormatricen A. Da det nye rum er m-dimensionalt er der m rækker i A. Den transformation, som A således udfører, bringer de n r-dimensionale vektorer i C over i de m-dimensionale vektorer i B. Overvejelserne viser, at vektorerne i A og B ligger i samme vektorrum, men dette kan ses allerede af dimensionen. Ved overvejelser af denne type er det muligt at etablere en vis fortrolighed med begrebsapparatet.

Matrixudtrykket $AC = B$ kan eksemplificeres ved:

$$\begin{bmatrix} \bar{a}_1 & \bar{a}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{c}_1 & \bar{c}_2 & \bar{c}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{b}_1 & \bar{b}_2 & \bar{b}_3 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 3 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 7 & 7 \\ 2 & 6 & 2 \\ 2 & 5 & 4 \end{bmatrix}$$

Her er C en samling 2-dimensionale vektorer $\bar{c}_1$, $\bar{c}_2$ og $\bar{c}_3$, der opereres (transformeres) ved hjælp af A, hvorefter en ny samling vektorer $\bar{b}_1$, $\bar{b}_2$ og $\bar{b}_3$ opstår i det 3-dimensionale rum. Dette sker uden, at den indbyrdes sammenhæng mellem vektorerne forstyrres, idet

$$\bar{b}_3 = \bar{b}_1 - \bar{b}_2$$

og

$$\bar{c}_3 = \bar{c}_1 - \bar{c}_2.$$

Dette er karakteristisk for enhver lineær transformation. Med nogen forsigtighed vil vi betragte det passerende som et koordinatskift. I så fald kan vi forestille os, at vektorerne $\bar{b}_i$ og $\bar{c}_i$ er de samme, blot angivet i forskellige koordinatsystemer, d.v.s. $\bar{b}_i$ angivet i forhold til det gamle, $\bar{c}_i$ i forhold til det nye system. Dette fører til, at A's søjler $\bar{a}_1$ og $\bar{a}_2$ kan opfattes som de gamle basisvektorer opgivet i forhold til det nye koordinatsystem (fig. 4).

Perspektivet i denne form for matrixalgebra er, at tolkningen af vektorerne i matrix B gøres mulig eller lettere ved at studere vektorerne i matrix C. Hvis B's søjlevektorer f.eks. er 11-dimensionale kemiske analyser, er der store fordele at hente ved at betragte de samme vektorer i et rum med et langt ringere antal dimensioner. Om dette kan lade sig gøre, er naturligvis et spørgsmål om, hvordan de kemiske analyser fordeler sig i det 11-dimensionale rum. I praksis viser det sig som regel, at der eksisterer et få-dimensionalt under-rum evt. et plan, hvor en meget stor del, f.eks. over 80 % af al variation er indeholdt. Den slags oplysninger kan fremskaffes ved at udføre en hovedkomponent faktor-analyse (principal component analysis, forkortet PCA).

Hovedkomponent faktor-analyse (PCA)

Uden at foretage nogen reduktion i antallet af dimensioner kan følgende opløsning (decomposition) altid gøres:

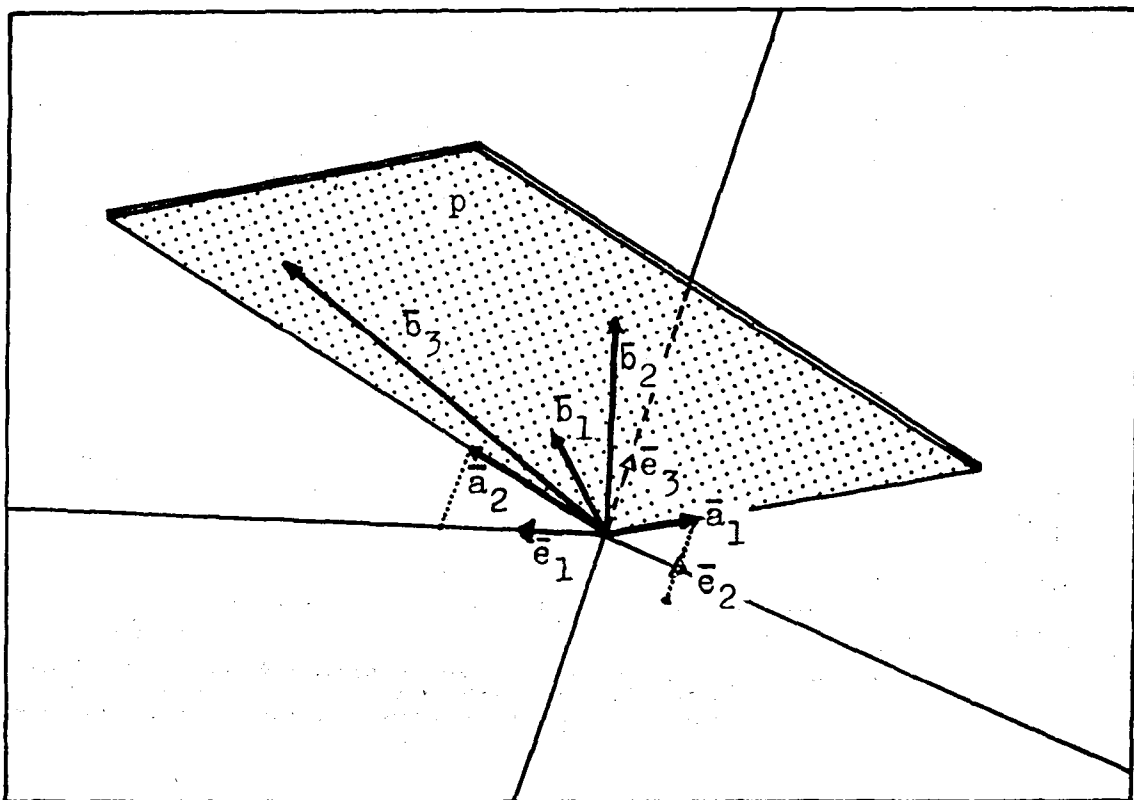


Fig. 4. Geometrisk tolkning af taleksemplet i teksten. Vektorerne betegnet $\bar{b}_i$ er her de samme som de eksemplet anførte $\bar{c}_i$ blot udtrykt i forhold til forskellige baser, henholdsvis $\bar{a}_i$ og $\bar{e}_i$.

$$B = AC,$$

hvor de indgående matricer kan karakteriseres på følgende måde: B er en m gange n matrix, der udgøres af de data, der ønskes behandlet. A er en matrix bestående af m m-dimensionale vektorer, der er orthonormale, d.v.s. orthogonale og af længden 1. C er ligesom B en n gange m matrix, men søjlevektorerne er opbygget på en speciel måde, idet koordinaterne er ordnet fra toppen efter faldende betydning, vel at mærke faldende betydning for sættet af vektorer som helhed.

Dette indebærer, at optimale forenklinger kan foretages ved at bibeholde de første r koordinater og sætte de sidste m-r koordinater lig med 0. Herved bliver det også muligt at se bort fra de sidste m-r vektorer i A, da disse herefter kun vil blive multipliceret med nuller. Det er derfor tilladt at fjerne de »overskydende« dimensioner helt og holdent. Herved ændres størrelsen af A og C således, at A bliver m gange r og C r gange n,

hvor r er dimensionen i det nye underrum. I forhold til de oprindelige data i B er det fremkomne underrum den bedste »mindste kvadraters tilnærmelse« (least square fit).

Som et eksempel er behandlet 50 analyser af bornholmske graniter. Analyserne, der omfatter 11 hovedelementer, er bestemt med røntgenfluorescens af Ib Sørensen, GGU. Hovedkomponent analysen er udført med et program udarbejdet af Davis (1973). Programmerne omregner analyserne således, at B består af de 50 kemiske analyser opgivet i forhold til deres gennemsnit. C består derfor af de samme 50 analyser projiceret på det nærmeste r-dimensionale underrum, hvor vi, i overensstemmelse med det ovenfor sagte, selv kan vælge r. Davis udskrift giver oplysning om, at 97.44 % af variationen er repræsenteret, hvis $r=2$. Alene den første hovedvektor tager sig af 92.40 % af variationen.

Fig. 5 afbilder de 50 graniter i forhold til første og anden hovedvektor. Det er tydeligt at se,

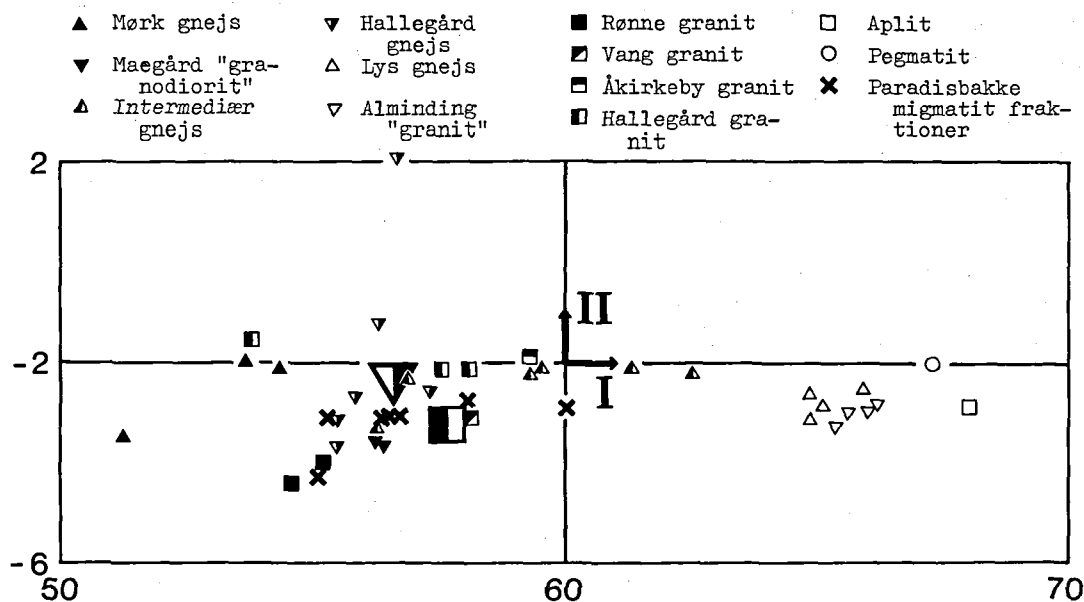


Fig. 5. Variationsdiagram for de bornholmske graniter, idet første og anden hovedakse er benyttet som basis. Tallene langs med akserne fremkommer, idet Davis programmer noget uhen-

sigtsmæssigt angiver slutresultatet i forhold til det oprindelige 0-punkt. Store symboler er brugt i tilfælde af sammenfald af fire eller flere analyser.

hvorledes den første hovedvektor optager langt hovedparten af variationen. Første hovedakse kommer herved til at afspejle den mest dominerende differentiationsproces, der har virket i det bornholmske grundfjeld.

At dømme efter placeringen af mafiske graniter til venstre i diagrammet og leucocratiske graniter, aplit og pegmatit til højre i diagrammet er der tydeligvis tale om den opsmeltningssproces, der tidligere er benyttet til at forklare de bornholmske graniters variation (Jørgart 1968, 1977). Den endelige test fås imidlertid direkte fra hovedkomponent analysen.

I tabel 2 er første hovedvektor $\bar{I}$ sammenlignet med koordinaterne for en vektor $\bar{d}$, som er et udtryk for differensen mellem sammensætningen af en eksperimentelt bestemt smelte og dens udgangssammensætning (Brown et al., 1970, run no. 122). $\bar{I}$ udskrives af Davis programmer og er som tidligere omtalt normeret til længden 1. For sammenligningens skyld er $\bar{d}$ også normeret (ved en form for Pythagoras). Under disse omstændigheder kan vinklen ϕ mellem $\bar{I}$ og $\bar{d}$ findes som

$$\cos\phi = \bar{I} \cdot \bar{d} = .93975,$$

hvilket svarer til en vinkel på 19.99° . De to vektorer er altså i nogen grad ens orienterede, hvad der kan støtte, at de bornholmske graniters variation skyldes opsmeltning.

Afslutning

Vektorrumsmetodikken stiller et begrebsapparat til rådighed, som gør det nemt at udtrykke omfattende og komplicerede relationer i en kompakt matrixnotation. Det er tilstrækkeligt at henvise

Tab. 2. Første hovedvektor for de bornholmske graniter sammenlignet med en eksperimentel bestemt smelte-differens-vektor.

	$\bar{I}$	$\bar{d}$
SiO ₂	.9062	.8665
TiO ₂	-.0719	-.0721
Al ₂ O ₃	-.1359	-.0405
Fe ₂ O ₃	-.1683	-.0407
FeO	-.2447	-.2105
MgO	-.0846	-.2013
CaO	-.1901	-.3336
Na ₂ O	-.0551	.0495
K ₂ O	.1344	.0578

til, hvor store mængder information, der kan udtrykkes i ganske simple formler af typen: $B = AC$, $X = (A^T A)^{-1} A^T B$ etc. Den fulde forståelse for disse formalismer opnås først efter nogen øvelse, men når erfaringen først melder sig, forbløffes man over, hvor omfattende tolkninger, det er muligt at udføre på grundlag heraf. Samtidig er formlerne uhyre beregningsvenlige, specielt til beregninger med EDB. I Davis (1973) findes en stamme af programmer, der kan danne udgangspunkt for sådanne beregninger.

Litteratur

- Brown, G. C. & Fyfe, W. S., 1970: The production of granitic melts during ultrametamorphism. *Contr. Mineral. Petrol.* 28, 310–318.
- Deer, W. A., Howie, R. A. and Zussman, J., 1966: *An introduction to rock-forming minerals*. Longmans.
- Davis, J. C., 1973: *Statistics and data analysis in geology*. Wiley.
- Jørgart, T., 1968: Hallegaard-granitens petrologi. Upubliceret eksamensarbejde. *Københavns Universitet*.
- Jørgart, T., 1977: Geologi på Bornholm. Kapitel 1: Prækambrium. *Varv*.