ISSN 1004-9037, CODEN SCYCE4
Journal of Data Acquisition and Processing Vol. 30, No. 4, Jul. 2015, pp. 802－809
DOI: 10.16337/j.1004-9037.2015.04.011

http://sjcj.nuaa.edu.cn
E-mail: sjcj@nuaa.edu.cn
Tel/Fax: ＋86-025-84892742

混合总体最小二乘的迭代解算算法

鲁铁定[1,2]　周世健[1,3]　王乐洋[1]

（1.东华理工大学测绘工程学院，南昌，330013；2.长安大学地测学院，西安，710054；3.江西省科学院，南昌，330029）

摘　要：总体最小二乘估计能够同时顾及线性模型中系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和观测向量 $\boldsymbol{L}$ 的误差，平差理论相对更为严密。如果系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的部分元素没有误差，这种总体最小二乘模型为混合总体最小二乘模型。针对混合总体最小二乘（Least squares-total least squares，LS-TLS）解算问题，应用测量平差中的原理和方法，推导了混合总体最小二乘的迭代逼近解算公式，通过与奇异值分解法分析比较，分析了两种解算方法具有等价性，最后通过实验数据分析得出迭代算法的有效性和合理性。

关键词：混合总体最小二乘；奇异值分解；迭代算法；测量平差

中图分类号：P207　　　**文献标志码**：A

Iterative Algorithm for Mixed LS-TLS Estimation

Lu Tieding[1,2], Zhou Shijian[1,3], Wang Yueyang[1]

(1. School of Geomatics, East China Institute of Technology, Nanchang, 330013, China; 2. School of Geology Engineering and Geomatics, Chang′an University, Xi′an, 710054, China; 3. Jiangxi Academy of Science, Nanchang, 330029, China)

Abstract: The total least squares (TLS) approximation estimates a parameter matrix from a linear model considering errors in both the observation vector $\boldsymbol{L}$ and the data matrix $\boldsymbol{A}$. The TLS theory is more rigorous than the standard least squares. If some columns of $\boldsymbol{A}$ can be known exactly, the problem is defined as the mixed least squares—TLS problem. An iterative algorithm is derived to solve the LS-TLS problem by using the principle of indirect adjustment. Compared with the method based on singular-value decomposition(SVD) QR decompositon, the iterative algorithm coincides with the SVD algorithm. The calculated example proves that the iterative algorithm is valid and rational.

Key words: LS-TLS; singular-value decomposition (SVD); iterative algorithm; surveying adjustment

引　　言

线性模型的测量平差与数据处理，其实质是考虑测量的随机模型，按一定的准则求出观测方程中参数的最优解。在经典的高斯-马尔柯夫模型中，通常情况下假设是偶然误差仅存在于观测向量中，而系数矩阵不含误差。然而由于观测条件的限制，观测向量、系数矩阵都有可能存在误差。陈义等[1]讨论了

基金项目：国家自然科学基金（41464001，41204003，41374007，41161069）资助项目；江西省自然科学基金（20132BAB216004）资助项目；地球空间环境与大地测量教育部重点实验室开放基金（100106）资助项目；江西省教育厅科研规划重点（GJJ10022）资助项目；江西省科技落地计划（KJLD12077）资助项目；江西省教育厅科技（GJJ13457，GJJ13456）资助项目；中国博士后基金（94773）资助项目；江西省中青年教师发展计划访问学者专项（赣财指 2012－132）资助项目；江西科协远航工程资助项目。

收稿日期：2013-12-12；**修订日期**：2014-01-30

共线方程解算外方位元素考虑矩阵 $\boldsymbol{A}$ 中的误差,但在算法方面应用由 Golub 等[2]提出的奇异值分解方法。Schaffrin 等[3-7]在解算算法研究方面作了大量研究工作。鲁铁定等[8]探讨了线性回归的总体最小二乘解算算法。在测量数据处理实践中,会遇到方程式系数矩阵部分有误差的情况,这种总体最小二乘问题的解算称为混合总体最小二乘(Least squares-total least squares,LS-TLS)问题[9],陆珏、陈义等[10]讨论了三维坐标转换中顾及系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 部分的误差和观测向量 $\boldsymbol{b}$ 的误差,但在算法上采用的是 Van Huffel 和 Vandewalle 等[11]提出的基于基于矩阵分解的奇异值分解解法。奇异值分解方法相对比较复杂,在一定程度上限制了其在测量数据处理方面的推广应用。Schaffrin 等[7]推导的加权总体最小二乘的迭代解算公式可以用来解决混合总体最小二乘问题,但推导过程和公式形式都比较复杂,且没有论证解算和奇异值分解在结果方面的关系。本文基于测量数据处理中原理和方法,推导了混合总体最小二乘的解算公式,并分析了其解法与 Van Huffel & Vandewalle 等提出的奇异值分解解法的关系,为混合总体最小二乘用于解决测量数据处理问题提供了一种新的迭代算法,与 Shaffrin 等推导过程不同的是本文的推导过程简单。

1 混合总体最小二乘问题及其解算

设函数模型为

$$\boldsymbol{AX} \approx \boldsymbol{L} \tag{1}$$

将矩阵分块为

$$\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{A}_1 \quad \boldsymbol{A}_2],\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{X}_1^{\mathrm{T}} \quad \boldsymbol{X}_2^{\mathrm{T}}]^{\mathrm{T}} \tag{2}$$

式中 $\boldsymbol{A}_1 \in \mathbf{R}^{n\times m_1}$,$\boldsymbol{A}_2 \in \mathbf{R}^{n\times m_2}$,$\boldsymbol{X}_1 \in \mathbf{R}^{m_1}$,$\boldsymbol{X}_2 \in \mathbf{R}^{m_2}$,$m = m_1 + m_2$,n,m 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行和列。

假定矩阵 $\boldsymbol{A}_1$ 没有误差影响,且 $R(\boldsymbol{A}_1) = m_1$,$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{A}_2) = m_2$。则式(1)可表示为

$$\boldsymbol{AX} = [\boldsymbol{A}_1 \quad \boldsymbol{A}_2]\begin{bmatrix}\boldsymbol{X}_1\\ \boldsymbol{X}_2\end{bmatrix} = \boldsymbol{A}_1\boldsymbol{X}_1 + \boldsymbol{A}_2\boldsymbol{X}_2 \approx \boldsymbol{L} \tag{3}$$

考虑系数矩阵和观测向量误差,混合总体最小二乘模型为

$$\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{X}_1 + (\boldsymbol{A}_2 + \boldsymbol{\Delta}_{A_2})\boldsymbol{X}_2 = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{\Delta}_L \tag{4}$$

设误差向量的均值向量和协方差矩阵为

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Delta}_L\\ \mathrm{vec}(\boldsymbol{\Delta}_{A2})\end{bmatrix} \sim \left(\begin{bmatrix}0\\0\end{bmatrix},\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_L & 0\\ 0 & \boldsymbol{\Sigma}_{A_2}\otimes \boldsymbol{I}_n\end{bmatrix} = \boldsymbol{\Sigma}_0 \otimes \boldsymbol{I}_n\right)$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_0 = \begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_L & 0\\ 0 & \boldsymbol{\Sigma}_{A_2}\end{bmatrix} = \sigma_0^2\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & I_{m_2}\end{bmatrix} = \sigma_0^2 \cdot \boldsymbol{I}_{1+m_2} \tag{5}$$

式中:vec(·)表示矩阵的拉直变换,$\otimes$ 表示矩阵的直积(或 Kronecker 乘积),$\boldsymbol{\Delta}_L$ 和 $\boldsymbol{\Delta}_{A_2}$ 为随机误差矩阵。求解上述方程的混合总体最小二乘的准则为[9]

$$\min_{\boldsymbol{\Delta}_{A_2},\boldsymbol{\Delta}_L} \|(\boldsymbol{\Delta}_{A_2},\boldsymbol{\Delta}_L)\|_{\mathrm{F}} \tag{6}$$

式中 $\|\cdot\|_{\mathrm{F}}$ 是矩阵的 Fronenius 范数。

将式(4)表示为误差方程式形式

$$\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{X}_1 + (\boldsymbol{A}_2 + \boldsymbol{E}_{A_2})\boldsymbol{X}_2 = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{e} \tag{7}$$

改写为矩阵形式

$$[\boldsymbol{A}_2 + \boldsymbol{E}_{A_2} \quad \boldsymbol{L} + \boldsymbol{e}]\cdot\begin{bmatrix}\boldsymbol{X}_2\\ -1\end{bmatrix} = ([\boldsymbol{A}_2 \quad \boldsymbol{L}] + \boldsymbol{E})\cdot\begin{bmatrix}\boldsymbol{X}_2\\ -1\end{bmatrix} = -\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{X}_1 \tag{8}$$

式中 $\boldsymbol{E} = \lfloor \boldsymbol{E}_{A_2} \ \boldsymbol{e}\rfloor$,用其表示的限制约束条件为[3]

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{E}^{\mathrm{T}}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{E}_{A_2}\boldsymbol{E}_{A_2}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{ee}^{\mathrm{T}}) = \mathrm{vec}(\boldsymbol{E}_{A_2})^{\mathrm{T}}\mathrm{vec}(\boldsymbol{E}_{A_2}) + \boldsymbol{e}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{e} = \min \tag{9}$$

式中 tr(·)表示矩阵的迹。

根据 Van Huffel 和 Vandewalle 等[9,11]给出的解算方法，对 $\boldsymbol{A}_1$ 实施 QR 分解可以得到

$$\boldsymbol{A}_1=\boldsymbol{QR}=\boldsymbol{Q}\begin{array}{c}\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}_{11}\\ \boldsymbol{0}\end{bmatrix}\end{array}\begin{array}{l}m_1\\ n-m_1\end{array} \tag{10}$$

式中 $\boldsymbol{Q}$ 为 $n\times n$ 矩阵；$\boldsymbol{R}_{11}$ 为 $m_1\times m_1$ 矩阵；$\boldsymbol{0}$ 为 $(n-m_1)\times m_1$ 矩阵。

对式(3)实施变换[9]

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}[\boldsymbol{A}_1\quad \boldsymbol{A}_2]\boldsymbol{X}\approx\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L} \tag{11}$$

将矩阵表示为分块形式，令

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}[\boldsymbol{A}_1\quad \boldsymbol{A}_2]=\begin{bmatrix}\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}[\boldsymbol{A}_1\quad \boldsymbol{A}_2]=\begin{bmatrix}\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_1 & \boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2\\ \boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_1 & \boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2\end{bmatrix}=\begin{array}{cc}\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}_{11} & \boldsymbol{R}_{12}\\ \boldsymbol{0} & R_{22}\end{bmatrix}\\ \begin{array}{cc}m_1 & m_2\end{array}\end{array}\begin{array}{l}m_1\\ n-m_1\end{array} \tag{12a}$$

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}L=\begin{bmatrix}\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}L\\ \boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}L\end{bmatrix}=\begin{array}{c}\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}_{1L}\\ \boldsymbol{R}_{2L}\end{bmatrix}\\ 1\end{array}\begin{array}{l}m_1\\ n-m_1\end{array} \tag{12b}$$

式(11)可表示为

$$\boldsymbol{R}_{11}\boldsymbol{X}_1+\boldsymbol{R}_{12}\boldsymbol{X}_2\approx\boldsymbol{R}_{1L} \tag{13a}$$

$$\boldsymbol{R}_{22}\boldsymbol{X}_2\approx\boldsymbol{R}_{2L} \tag{13b}$$

根据文献[9]提出的解算理论，对式(13b)的增广矩阵进行奇异值分解

$$[\boldsymbol{R}_{22}\quad \boldsymbol{R}_{2L}]=\widetilde{\boldsymbol{U}}\widetilde{\boldsymbol{\Sigma}}\widetilde{\boldsymbol{V}}^{\mathrm{T}} \tag{14}$$

其中

$$\widetilde{\boldsymbol{V}}=\begin{array}{c}\begin{bmatrix}\widetilde{\boldsymbol{V}}_{11} & \widetilde{\boldsymbol{V}}_{12}\\ \widetilde{\boldsymbol{V}}_{21} & \widetilde{\boldsymbol{V}}_{22}\end{bmatrix}\\ \begin{array}{cc}m_2 & 1\end{array}\end{array}\begin{array}{l}m_2\\ 1\end{array}=[\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_{m_2+1}]\in\mathbf{R}^{(m_2+1)\times(m_2+1)} \tag{15a}$$

$$\widetilde{\boldsymbol{\Sigma}}=\begin{array}{c}\begin{bmatrix}\widetilde{\boldsymbol{\Sigma}}_1\\ 0\end{bmatrix}\\ m_2+1\end{array}\begin{array}{l}m_2+1\\ n-m_1-m_2+1\end{array},\widetilde{\boldsymbol{\Sigma}}_1=\operatorname{diag}(\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_{m_2},\sigma_{m_2+1})$$

$$\sigma_1>\sigma_2>\cdots>\sigma_{m_2}>\sigma_{m_2+1} \tag{15b}$$

于是总体最小二乘解为[9]

$$\hat{\boldsymbol{X}}_2=-\widetilde{\boldsymbol{V}}_{12}\cdot\widetilde{\boldsymbol{V}}_{22}^{-1}=\frac{-1}{\tilde{v}_{m_2+1,m_2+1}}\widetilde{\boldsymbol{V}}_{12} \tag{16}$$

参数 $\hat{X}_1$ 的估值为[9]

$$\hat{\boldsymbol{X}}_1=\boldsymbol{R}_{11}^{-1}(\boldsymbol{R}_{1L}-\boldsymbol{R}_{12}\hat{\boldsymbol{X}}_2) \tag{17}$$

如果矩阵 $\boldsymbol{A}_1$ 是列满秩矩阵，矩阵 $\boldsymbol{R}_{22}$ 的最小奇异值大于矩阵 $[\boldsymbol{R}_{22}\quad \boldsymbol{R}_{2L}]$ 的最小奇异值，则混合总体最小二乘解存在且唯一[9]。根据 Van Huffel 和 Vandewalle[9]的分析，如果矩阵 $[\boldsymbol{R}_{22}\quad \boldsymbol{R}_{2L}]$ 的最小奇异值为 σ_{m_2+1}，在混合总体最小二乘解存在和唯一情况下，有

$$\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{X}}_1\\ \hat{\boldsymbol{X}}_2\end{bmatrix}=\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}-\sigma_{m_2+1}^2\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & \boldsymbol{I}_{m_2}\end{bmatrix}\right)^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}=\left(\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_1 & \boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2\\ \boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_1 & \boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2-\sigma_{m_2+1}^2\boldsymbol{I}_{m_2}\end{bmatrix}\right)^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}\\ \boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}\end{bmatrix} \tag{18}$$

上式证明参考文献[9]。

2 混合总体最小二乘(LS-TLS)的逼近解法

将式(7)表示为

$$\bar{e}=\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{X}_1+\boldsymbol{A}_2\boldsymbol{X}_2-\boldsymbol{L} \tag{19}$$

式中 $\bar{e}=[\boldsymbol{I}_n \quad -\boldsymbol{X}_2^{\mathrm{T}}\otimes\boldsymbol{I}_n]\begin{bmatrix}\boldsymbol{e}\\ \boldsymbol{e}_{A_2}\end{bmatrix}=e-\boldsymbol{E}_{A_2}\boldsymbol{X}_2$，$\boldsymbol{e}_{A_2}=\mathrm{vec}(\boldsymbol{E}_{A_2})$。由协因数传播律，容易得到协因数阵的关系为[12]

$$\boldsymbol{Q}_{\bar{e}}=[\boldsymbol{I}_n \quad -\boldsymbol{X}_2^{\mathrm{T}}\otimes\boldsymbol{I}_n]\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_n & 0\\ 0 & \boldsymbol{I}_{m_2}\otimes\boldsymbol{I}_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_n\\ -\boldsymbol{X}_2\otimes\boldsymbol{I}_n\end{bmatrix}=\boldsymbol{I}_n+\boldsymbol{X}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_2\otimes\boldsymbol{I}_n=(1+\boldsymbol{X}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_2)\boldsymbol{I}_n \tag{20}$$

混合总体最小二乘的目标函数式(9)等价于

$$\bar{\boldsymbol{e}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_{\bar{e}}^{-1}\bar{\boldsymbol{e}}=\min \tag{21}$$

求解目标函数的自由极值得

$$\frac{\partial\,\hat{\bar{\boldsymbol{e}}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_{\bar{e}}^{-1}\hat{\bar{\boldsymbol{e}}}}{\partial\hat{\boldsymbol{X}}}=2\,\hat{\bar{\boldsymbol{e}}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_{\bar{e}}^{-1}\boldsymbol{A}-\frac{2\,\hat{\bar{\boldsymbol{e}}}^{\mathrm{T}}\hat{\bar{\boldsymbol{e}}}}{(1+\hat{\boldsymbol{X}}_2^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{X}}_2)^2}[0 \quad \hat{\boldsymbol{X}}_2^{\mathrm{T}}]=0 \tag{22}$$

转置整理得

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_{\bar{e}}^{-1}\hat{\bar{\boldsymbol{e}}}-\begin{bmatrix}0\\ \hat{\boldsymbol{X}}_2\end{bmatrix}\frac{\hat{\bar{\boldsymbol{e}}}^{\mathrm{T}}\hat{\bar{\boldsymbol{e}}}}{(1+\hat{\boldsymbol{X}}_2^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{X}}_2)^2}=0 \tag{23}$$

将式(19,20)代入(23)得

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}}-\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}=\begin{bmatrix}0\\ \hat{\boldsymbol{X}}_2\end{bmatrix}\bar{\boldsymbol{e}}^{\mathrm{T}}\hat{\bar{\boldsymbol{e}}}/(1+\hat{\boldsymbol{X}}_2^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{X}}_2) \tag{24}$$

将 $\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{A}_1 \quad \boldsymbol{A}_2]$，$\boldsymbol{X}=[\boldsymbol{X}_1^{\mathrm{T}} \quad \boldsymbol{X}_2^{\mathrm{T}}]^{\mathrm{T}}$ 代入式(24)得

$$\boldsymbol{N}_{11}\hat{\boldsymbol{X}}_1+\boldsymbol{N}_{12}\hat{\boldsymbol{X}}_2-\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}=0 \tag{25a}$$

$$\boldsymbol{N}_{21}\hat{\boldsymbol{X}}_1+\boldsymbol{N}_{22}\hat{\boldsymbol{X}}_2-\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}=\hat{\boldsymbol{X}}_2\cdot(\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}}-\boldsymbol{L})^{T}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}-\boldsymbol{L})/(1+\hat{\boldsymbol{X}}_2^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{X}}_2) \tag{25b}$$

式中 $\boldsymbol{N}_{11}=\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_1$，$\boldsymbol{N}_{12}=\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2$，$\boldsymbol{N}_{21}=\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_1$，$\boldsymbol{N}_{22}=\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2$。

矩阵 $\boldsymbol{A}_1$ 列满秩，所以 $\boldsymbol{N}_{11}$ 为满秩方阵，其逆存在且唯一，由式(25a)可以得到

$$\hat{\boldsymbol{X}}_1=-\boldsymbol{N}_{11}^{-1}(\boldsymbol{N}_{12}\hat{\boldsymbol{X}}_2-\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}) \tag{26}$$

式(26)代入(25b)整理，可以得到

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{X}}_2=&(\boldsymbol{N}_{22}-\boldsymbol{N}_{21}\boldsymbol{N}_{11}^{-1}\boldsymbol{N}_{12})^{-1}[\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}-\boldsymbol{N}_{21}\boldsymbol{N}_{11}^{-1}\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}+\hat{\boldsymbol{X}}_2\cdot(\boldsymbol{A}\hat{X}-\boldsymbol{L})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}-\boldsymbol{L})/(1+\hat{\boldsymbol{X}}_2^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{X}}_2)]=\\ &(\boldsymbol{N}_{22}-\boldsymbol{N}_{21}\boldsymbol{N}_{11}^{-1}\boldsymbol{N}_{12})^{-1}[\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}-\boldsymbol{N}_{21}\boldsymbol{N}_{11}^{-1}\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}+\hat{\boldsymbol{X}}_2\cdot\hat{\boldsymbol{v}}]\end{aligned} \tag{27}$$

式中 $\hat{\boldsymbol{v}}=(\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}}-\boldsymbol{L})^{T}(\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}}-\boldsymbol{L})/(1+\hat{\boldsymbol{X}}_2^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{X}}_2)$。式(27)可以通过迭代解算得到参数估值。

根据上面分析可以得到混合总体最小二乘的迭代计算步骤如下：

① $\hat{\boldsymbol{v}}=0$，$\hat{\boldsymbol{X}}^{(1)}=\boldsymbol{N}^{-1}c$，$\boldsymbol{N}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$，$c=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}$ (28a)

② $\hat{\boldsymbol{v}}^{(i)}=(\boldsymbol{L}-\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}}^{(i)})^{T}(L-\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}}^{(i)})/(1+(\hat{\boldsymbol{X}}_2^{(i)})^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{X}}_2^{(i)})$ (28b)

③ $\hat{\boldsymbol{X}}_2^{(i+1)}=(\boldsymbol{N}_{22}-\boldsymbol{N}_{21}\boldsymbol{N}_{11}^{-1}\boldsymbol{N}_{12})^{-1}[\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}-\boldsymbol{N}_{21}\boldsymbol{N}_{11}^{-1}\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}+\boldsymbol{X}_2^{(i)}\cdot\boldsymbol{v}^{(i)}]$ (28c)

④ $\hat{\boldsymbol{X}}_1^{(i+1)}=-\boldsymbol{N}_{11}^{-1}(\boldsymbol{N}_{12}\hat{\boldsymbol{X}}_2^{(i)}-\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L})$ (28d)

⑤ 当 $\|\hat{\boldsymbol{X}}_2^{(i+1)}-\hat{\boldsymbol{X}}_2^{(i)}\|<\varepsilon$ 时，计算结束。

单位权方差以及参数的协方差矩阵[3]

$$\sigma_0^2(TLS)=\frac{\hat{\boldsymbol{v}}}{n-m} \tag{29}$$

由式(27)易得

$$D(\hat{\boldsymbol{X}}_2)=\sigma_0^2(\boldsymbol{N}_{22}-\boldsymbol{N}_{21}\boldsymbol{N}_{11}^{-1}\boldsymbol{N}_{12}-\hat{\boldsymbol{v}}I_{m_2})^{-1}\boldsymbol{N}_{22}(\boldsymbol{N}_{22}-\boldsymbol{N}_{21}\boldsymbol{N}_{11}^{-1}\boldsymbol{N}_{12}-I_{m_2}\hat{\boldsymbol{v}})^{-1} \tag{30}$$

$$\hat{\boldsymbol{X}}_1=-\boldsymbol{N}_{11}^{-1}(\boldsymbol{N}_{12}\hat{\boldsymbol{X}}_2-\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L})=-\boldsymbol{N}_{11}^{-1}[\boldsymbol{N}_{12}(\boldsymbol{N}_{22}-\boldsymbol{N}_{21}\boldsymbol{N}_{11}^{-1}\boldsymbol{N}_{12}-\hat{\boldsymbol{v}}I_{m_2})^{-1}\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}-\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}]\boldsymbol{L}=\boldsymbol{F}\boldsymbol{L} \tag{31}$$

$$D(\hat{\boldsymbol{X}}_1)=\sigma_0^2\boldsymbol{F}\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}} \tag{32}$$

或

$$D(\hat{\boldsymbol{X}})=\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}-\hat{\boldsymbol{v}}\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & I_{m_2}\end{bmatrix}\right)^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}-\hat{\boldsymbol{v}}\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & I_{m_2}\end{bmatrix}\right)^{-1} \tag{33}$$

3 混合总体最小二乘的逼近解法与矩阵分解法关系

将解算结果代入(19)得

$$\bar{\boldsymbol{e}}=[\boldsymbol{I}_n,\hat{\boldsymbol{X}}_2^{\mathrm{T}}\otimes I_n]\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{e}}\\ \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{A}_2}\end{bmatrix}=\hat{\boldsymbol{e}}-\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{A}_2}\hat{\boldsymbol{X}}_2=\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}}-\boldsymbol{L} \tag{34}$$

根据式(9)的混合总体最小二乘准则,应用条件平差原理容易得法方程式

$$[\boldsymbol{I}_n \quad -\hat{\boldsymbol{X}}_2^{\mathrm{T}}\otimes \boldsymbol{I}_n]\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_n\\ -\hat{\boldsymbol{X}}_2\otimes \boldsymbol{I}_n\end{bmatrix}\boldsymbol{K}=\bar{\boldsymbol{e}}=\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}}-\boldsymbol{L} \tag{35}$$

解算可以得联系数向量矩阵 $\boldsymbol{K}$ 为

$$\boldsymbol{K}=(1+\hat{\boldsymbol{X}}_2^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{X}}_2)^{-1}\bar{\boldsymbol{e}}=(1+\hat{\boldsymbol{X}}_2^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{X}}_2)^{-1}(\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}}-\boldsymbol{L}) \tag{36}$$

式(36)代入式(35)整理可得

$$\bar{\boldsymbol{e}}=(1+\hat{\boldsymbol{X}}_2^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{X}}_2)^{-1}(\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}}-\boldsymbol{L}) \tag{37a}$$

$$\bar{\boldsymbol{e}}_{A_2}=(-\hat{\boldsymbol{X}}_2\otimes \boldsymbol{I}_n)(1+\hat{\boldsymbol{X}}_2^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{X}}_2)^{-1}(\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}}-\boldsymbol{L}) \tag{37b}$$

由 Kronecker 积的性质易知,式(37b)可表示为如下形式

$$\hat{\boldsymbol{E}}_{A_2}=-(1+\hat{\boldsymbol{X}}_2^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{X}}_2)^{-1}(\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}}-\boldsymbol{L})\hat{\boldsymbol{X}}_2^{\mathrm{T}} \tag{38}$$

于是

$$\begin{aligned}\bar{\boldsymbol{v}}=(\boldsymbol{L}-\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}})^{T}(\boldsymbol{L}-\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}})/(1+\hat{\boldsymbol{X}}_2^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{X}}_2)=\bar{\boldsymbol{e}}^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{e}}+\bar{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}}\bar{\boldsymbol{e}}_{A_2}=\\ [\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{L}-\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}})-\hat{\boldsymbol{X}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{L}-\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}})]/(1+\hat{\boldsymbol{X}}_2^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{X}}_2)=\\ [\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{L}-\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}})+\hat{\boldsymbol{X}}^{\mathrm{T}}(\begin{bmatrix}0\\ \hat{\boldsymbol{X}}_2\end{bmatrix}\bar{\boldsymbol{v}})]/(1+\hat{\boldsymbol{X}}_2^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{X}}_2)=\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}-(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L})^{T}\hat{\boldsymbol{X}}\end{aligned} \tag{39}$$

将 $\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{A}_1 \quad \boldsymbol{A}_2]$, $\boldsymbol{X}=[\boldsymbol{X}^1\boldsymbol{T} \quad \boldsymbol{X}_2^{\mathrm{T}}]$ 代入式(39),并与式(25)联立可以表示为

$$\left\{\begin{aligned}&\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_1\hat{\boldsymbol{X}}_1+\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2\hat{\boldsymbol{X}}_2-\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}=0 &(40\mathrm{a})\\ &\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_1\hat{\boldsymbol{X}}_1+\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2\hat{\boldsymbol{X}}_2-\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}=\hat{\boldsymbol{X}}_2\hat{\boldsymbol{v}} &(40\mathrm{b})\\ &(\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L})^{T}\hat{\boldsymbol{X}}_1+(\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L})^{T}\hat{\boldsymbol{X}}_2-\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}=-\hat{\boldsymbol{v}} &(40\mathrm{c})\end{aligned}\right.$$

由式(40a)可得

$$\hat{\boldsymbol{X}}_1=(\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_1)^{-1}(\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}-\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2\hat{\boldsymbol{X}}_2)=-(\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_1)^{-1}\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2\hat{\boldsymbol{X}}_2+(\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_1)^{-1}\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L} \tag{41}$$

所以式(40b)和(40c)可整理为

$$\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{A}_1(\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_1)^{-1}\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}})\boldsymbol{A}_2\hat{\boldsymbol{X}}_2-\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{A}_1(\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_1)^{-1}\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}})\boldsymbol{L}=\hat{\boldsymbol{X}}_2\hat{\boldsymbol{v}} \tag{42a}$$

$$\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{A}_1(\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_1)^{-1}\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}})\boldsymbol{A}_2\hat{\boldsymbol{X}}_2-\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{A}_1(\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_1)^{-1}\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}})\boldsymbol{L}=-\hat{\boldsymbol{v}} \tag{42b}$$

设 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{A}_1(\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_1)^{-1}\boldsymbol{A}_1$, $\boldsymbol{H}=\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{J}$,容易验证 $\boldsymbol{JJ}=\boldsymbol{J}$, $\boldsymbol{HH}=\boldsymbol{H}$,所以矩阵 $\boldsymbol{J}$ 和矩阵 $\boldsymbol{H}$ 均为幂等矩阵。其秩分别为 $R(J)=\mathrm{tr}(J)=m_1$, $R(H)=\mathrm{tr}(H)=n-m_1$ 。由幂等矩阵的性质知,矩阵 $\boldsymbol{H}$ 的秩为 $n-m_1$,所以 $\boldsymbol{H}$ 有 $n-m_1$ 个特征值 1 和 m_1 个特征值 0。其奇异值分解为

$$\boldsymbol{H}=\boldsymbol{U}\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_{n-m_1} & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{U}_{11} & \boldsymbol{U}_{12}\\ \boldsymbol{U}_{21} & \boldsymbol{U}_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}I_{n-m_1} & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{U}_{11} & \boldsymbol{U}_{12}\\ \boldsymbol{U}_{21} & \boldsymbol{U}_{22}\end{bmatrix}^{T}=\boldsymbol{U}_{11}\boldsymbol{U}_{11}^{\mathrm{T}} \tag{43}$$

于是式(42a)和式(42b)可表示为

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}_{11}\boldsymbol{U}_{11}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}_{11}\boldsymbol{U}_{11}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}\\ \boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}_{11}\boldsymbol{U}_{11}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}_{11}\boldsymbol{U}_{11}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{X}}_2\\ -1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{X}}_2\\ -1\end{bmatrix}\hat{\boldsymbol{v}} \tag{44}$$

根据 Golub, Hoffman 和 Stewartd[9] 等提出的解算理论,对式(13b)的增广矩阵进行奇异值分解,用最小奇异值对应的右特征向量可以来求解其总体最小二乘解,即 $\hat{\boldsymbol{X}}$ 应满足特征向量方程[9]

$$[\boldsymbol{R}_{22},\boldsymbol{R}_{2L}]^{\mathrm{T}}[\boldsymbol{R}_{22},\boldsymbol{R}_{2L}]\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{X}}_2\\-1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{X}}_2\\-1\end{bmatrix}\sigma_{m_2+1}^2 \tag{45}$$

由式(12)知,$\boldsymbol{R}_{22},\boldsymbol{R}_{2L}$ 为正交变换得到,式(45)中 $\sigma_{m_2+1}^2$ 为矩阵 $[\boldsymbol{R}_{22},\boldsymbol{R}_{2L}]^{\mathrm{T}}[\boldsymbol{R}_{22},\boldsymbol{R}_{2L}]=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}Q_2\boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}Q_2\boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}\\\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}Q_2\boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}Q_2\boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}\end{bmatrix}$ 的最小特征值。由矩阵的奇异值性质可知,矩阵的奇异值具有酉不变性(或正交不变性)[13],所以矩阵 $\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}_{11}\boldsymbol{U}_{11}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}_{11}\boldsymbol{U}_{11}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}\\\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}_{11}\boldsymbol{U}_{11}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}_{11}\boldsymbol{U}_{11}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}\end{bmatrix}$ 与 $\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_2\boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_2\boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}\\\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_2\boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_2\boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}\end{bmatrix}$ 具有相同的奇异值。所以式(44)为特征值问题[13],参数的总体最小二乘解为最小特征值对应的特征向量[14],这和 Golub, Hoffman 和 Stewart 提出的方法完全一致[9]。

4 算例分析

4.1 算例 1

根据平面方程式为 $Z=X+2Y+3$ 模拟 16 组观测数据,观测噪声 $e\sim N(0,\sigma^2\boldsymbol{I})$,$\sigma=0.1$,$\boldsymbol{I}$ 为单位阵,观测数据如表 1,设平面方程为 $Z=aX+bY+c$,用两种方法确定平面方程。

表 1 平面方程观测样本值

Table 1 Observation sample data of plane equation

编号	X	Y	Z	编号	X	Y	Z
1	1.00	1.05	5.95	9	4.96	1.08	10.16
2	1.02	2.92	10.01	10	4.96	2.92	13.86
3	1.17	4.99	14.03	11	5.01	4.94	17.85
4	0.79	7.06	18.09	12	4.96	7.01	21.99
5	3.01	1.02	8.05	13	6.94	1.00	12.01
6	2.89	3.26	12.02	14	7.08	2.99	15.92
7	2.84	4.87	15.86	15	6.92	4.84	19.94
8	3.06	7.10	20.10	16	6.97	7.17	23.99

最小二乘法解算结果为 $\hat{a}=0.998\ 7$, $\hat{b}=1.997\ 1$, $\hat{c}=3.005\ 0$,所得拟合平面为 $Z=0.998\ 7X+1.997\ 1Y+3.005\ 0$。混合总体最小二乘解算,根据最小二乘结果计算得到 $\bar{\boldsymbol{v}}^{(1)}=(\boldsymbol{L}-\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}}^{(1)})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{L}-\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}}^{(1)})/(1+(\hat{\boldsymbol{X}}_2^{(1)})^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{X}}_2^{(1)})=0.099\ 274\ 063\ 159\ 798\ 2$,解算得到 $\hat{a}=1.000\ 0$, $\hat{b}=1.999\ 5$, $\hat{c}=2.990\ 0$,再次代入式(28b)解算 $\hat{\boldsymbol{v}}^{(2)}=0.099\ 171\ 140\ 383\ 559\ 9$,得到 $\hat{a}=1.000\ 0$, $\hat{b}=1.999\ 5$, $\hat{c}=2.990\ 0$,所得拟合平面为 $Z=1.000X+1.999\ 5Y+2.990\ 0$。

从解算结果可以看出,混合总体最小二乘结果比最小二乘更接近真值,拟合效果更好。

4.2 算例 2

以文献[15]例 5-2 数据为样本观测值,共计 25 个点,假设回归直线为 $y=a+bx$ 或 $x=c+dy$。表 2 为所有的样本点数据。

4.2.1 方案 1

以 x 为自变量,y 为因变量建立回归方程 $y=a+bx$,应用本文提出的迭代算法,首先根据最小二乘计算得到参数的近似值,代入公式

$$\bar{\boldsymbol{v}}^{(i)}=(\boldsymbol{L}-\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}}^{(i)})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{L}-\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}}^{(i)})/(1+(\hat{\boldsymbol{X}}_2^{(i)})^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{X}}_2^{(i)}) \tag{46}$$

可得 $\nu^{(1)}=18.068\ 54$。

代入公式

$$\hat{\boldsymbol{X}}_2^{(i+1)}=(\boldsymbol{N}_{22}-\boldsymbol{N}_{21}\boldsymbol{N}_{11}^{-1}\boldsymbol{N}_{12})^{-1}[\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}-\boldsymbol{N}_{21}\boldsymbol{N}_{11}^{-1}\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}+\hat{\boldsymbol{X}}_2^{(i)}\cdot\bar{\boldsymbol{v}}^{(i)}] \tag{47}$$

可得 $\hat{b}^{(2)}=-0.080\ 125$。

表 2 直线方程观测样本值

Table 2 Observation sample data of straight line equation

编号	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Y	10.98	11.13	12.51	8.40	9.27	8.73	6.36	8.50	7.82	9.14	8.24	12.19	11.88
X	35.3	29.7	30.8	58.8	61.4	71.3	74.4	76.6	70.7	57.5	46.4	28.9	28.1
编号	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	
Y	9.57	10.94	9.58	10.09	8.11	6.83	8.88	7.68	8.47	8.86	10.38	11.08	
X	39.1	46.8	48.5	59.3	70.0	70.0	74.5	72.1	58.1	44.6	33.4	28.6	

代入公式

$$\hat{\boldsymbol{X}}_1^{(i+1)}=-\boldsymbol{N}_{11}^{-1}(\boldsymbol{N}_{12}\hat{\boldsymbol{X}}_2^{(i)}-\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}) \tag{48}$$

计算可得 $\hat{a}^{(2)}=13.639\ 06$。所以回归方程为 $y=13.639\ 0-0.080\ 1x$。

4.2.2 方案 2

以 y 为自变量，x 为因变量建立回归方程 $x=c+dy$，应用本文提出的迭代算法，首先根据最小二乘计算得到参数的近似值，代入公式

$$\bar{\boldsymbol{v}}^{(i)}=(\boldsymbol{L}-\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}}^{(i)})^{T}(\boldsymbol{L}-\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{X}}^{(i)})/(1+(\hat{\boldsymbol{X}}_2^{(i)})^{T}\hat{\boldsymbol{X}}_2^{(i)}) \tag{49}$$

可得 $\nu^{(1)}=25.110\ 578$。

代入公式

$$\hat{\boldsymbol{X}}_2^{(i+1)}=(\boldsymbol{N}_{22}-\boldsymbol{N}_{21}\boldsymbol{N}_{11}^{-1}\boldsymbol{N}_{12})^{-1}[\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}-\boldsymbol{N}_{21}\boldsymbol{N}_{11}^{-1}\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}+\hat{\boldsymbol{X}}_2^{(i)}\cdot\bar{\boldsymbol{v}}^{(i)}] \tag{50}$$

可得 $\hat{d}^{(2)}=-12.468\ 071$。

代入公式

$$\hat{\boldsymbol{X}}_1^{(i+1)}=-\boldsymbol{N}_{11}^{-1}(\boldsymbol{N}_{12}\hat{\boldsymbol{X}}_2^{(i)}-\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}) \tag{51}$$

计算可得 $\hat{c}^{(2)}=170.105\ 073$。经过迭代后得到回归方程为 $x=170.221\ 2-12.480\ 4y$，将其表示成和方案 1 相同的形式为 $y=13.639\ 0-0.080\ 1x$。

从方案 1 和方案 2 的解算结果可以看出解算结果相同，本文提出的迭代算法解决了用 x 拟合 y 和用 y 拟合 x 不一致问题，检验了算法的正确性。

5 结束语

奇异值分解算法是一种常用的混合总体最小二乘的解算方法，本文应用测量数据处理的方法推导了混合总体最小二乘的解算公式，通过与奇异值分解解法的关系分析，论证了文中的解算方法与奇异值分解算法具有等价性。文中给出的解算公式对于解决测量实践的数据处理问题具有参考价值，它避开了数学中解决此问题的矩阵分解解法。本文中考虑的情况为独立等精度情形下的公式，如果观测向量和系数矩阵为不等精度或相关情形还需要进一步分析研究。

参考文献：

[1] 陈义，陆珏，郑波. 总体最小二乘方法在空间后方交会中的应用[J]. 武汉大学学报·信息科学版，2008，33(12)：1271-1274.
Chen Yi, Lu Jue, Zheng Bo. Application of total least squares to space resection[J]. Geomatics and Information Science of Wuhan University, 2008, 33(12): 1271-1274.

[2] Golub G H, Lan Loan F C. An analysis of the total least squares problem[J]. SIAM Journal on Numerical Analysis,1980, 17(6):883-893.
[3] Schaffrin B, Yaron A. Felus. On the multivariate total least-squares approach to empirical coordinate transformations: Three algorithms [J]. J Geod,2008,82:373-383.
[4] Schaffrin B, Felus A Y . Multivariate total least-squares adjustment for empirical affine transformations[J]. Proceedings of the 6th Hotine-Marussi Symposium for Theoretical and Computational Geodesy. Berlin:Springer, 2007.
[5] Schaffrin B, Lee I P, Felus Y A, et al. Total least-squares (TLS) for geodetic straight-line and plane adjustment[J]. Boll Geod Sci Affini,2006,65(3):141-168.
[6] Schaffrin B. A note on constrained total least-squares estimation[J]. Linear Algebra Appl, 2006,417(1):245-258.
[7] Schaffrin B, Wieser A. On weighted total least-squares adjustment for linear regression [J]. J Geod, 2008, 82:415-421.
[8] 鲁铁定,陶本藻,周世健. 基于整体最小二乘法的线性回归建模和解法[J]. 武汉大学学报·信息科学版, 2008, 33(5):504~507.
Lu Tieding,Tao Benzao,Zhou Shijian. Modeling and algorithm of linear regression based on total least squares[J]. Geomatics and Information Science of Wuhan University,2008,33(5):504-507.
[9] Van Huffel S, Vandewalle J. The total least-squares problem computational aspects and analysis[M]. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 1991.
[10] 陆珏,陈义,郑波. 总体最小二乘方法在三维坐标转换中的应用[J]. 大地测量与地球动力学,2008,l28(5):77-81.
Lu Jue, Chen Yi, Zheng Bo. Applying total least squares to three-dimensional datum transformation[J]. Journal of Geodesy and Geomatics,2008,l28(5):77-81.
[11] Van Huffel S, Vandewalle J. Analysis and properties of the generalized total least squares problem AX=B when some or all columns of A are subject to errors[J]. SIAM J, Matrix Anal, Appl,1989,10:294-315.
[12] 周世健,鲁铁定. 双变量线性回归的解算[J]. 江西科学, 2008, 26(1):109-111.
Zhou Shijian, Lu Tieding. The computation for linear regression of bi-variable[J]. Jiangxi Science,2008, 26(1):109-111.
[13] 张贤达著. 矩阵分析与应用[M]. 北京:清华大学出版社,2004.
Zhang Xianda. Matrix analysis and applicaitions[M]. Beijing: Tsinghua University Press,2004.
[14] Strang G. Linear algebra and its applications[M]. 3rd edition. San Diego: Harcourt Brace Jovanovich, 1988.
[15] 腾素珍,冯敬海编著. 数理统计学[M]. 大连:大连理工大学出版社,2005.
Teng Suzhen, Meng Jinghai. Mathematical statistics[M]. Dalian: Dalian University of Technology Press,2005.
[16] 陈志非,孙进才,侯宏. 基于奇异值分解的方向估计改进方法[J]. 数据采集与处理,2011,26(5):1-5.
Chen Zhifei,Sun Jincai,Hou Hong. Modified method for bearing estimation based on singular value decomposition[J]. Journal of Data Acquisition and Processing,2011,26(5):1-5.
[17] 鲁铁定, 宁津生. 总体最小二乘平差理论及其应用[M]. 北京: 中国科学技术出版社,2011.
Lu Tieding,Ning Jinsheng. Total least squares theory and its applications [M]. Beijing:China Science and Technology Press, 2011.

作者简介:

鲁铁定(1974-),男,博士后,教授,研究方向:误差理论与测量数据处理,E-mail:tdlu@whu. edu. cn。

周世健(1966-),男,博士,教授,研究方向:空间数据处理,E-mail: zhoushijian@jxas. ac. cn。

王乐洋(1983-),男,博士,副教授,研究方向:大地测量反演理论,E-mail: wleyang@163. com。