

顾及设计矩阵随机误差的最小二乘组合新解法

姚宜斌¹ 孔 建^{1,2}

1 武汉大学测绘学院,湖北 武汉,430079

2 俄亥俄州立大学地球科学学院,美国哥伦布,43210

摘 要:提出了一种顾及设计矩阵随机误差的最小二乘组合解法(combined least square, CLS),该算法适用于整体最小二乘(TLS)的参数估计。给出了整体最小二乘平差新算法下的精度评定公式,解决了传统 TLS 解算方法难以进行严密的精度评定的难题,并通过算例验证了新算法的可行性和正确性。

关键词:整体最小二乘;奇异值分解法;迭代法;虚拟观测值;精度评定

中图法分类号:P207.2

文献标志码:A

空间数据模型中,观测方程系数阵也就是观测值或其函数,常带有不可避免的观测误差,即观测方程 $L = BX + d$ 中 B 也有误差。这种系数阵含有测量误差的问题,称为整体最小二乘(total least square, TLS)问题。整体最小二乘的思想最早可以追溯到上个世纪初,文献[1]完成了其数学结构的完善研究。从 90 年代中期起,国内开始有人研究整体最小二乘法,并陆续引入到相关专业。近些年,有不少测绘工作者结合平差函数模型,探索出有别于数学中 TLS 的新解法,如完全正交方法、Cholesky 分解法、迭代解法等^[2-6]。

从现有的研究成果来看,虽然国内外学者针对不同的应用需求,在不同时期对整体最小二乘问题提出了很多有效的解算方法,但是从测量数据处理角度来看,这些方法均具有一定的局限性。首先,这些方法编程实现复杂,与传统的整体最小二乘解法相比,不具有操作上的优势,这也是制约其在测量领域应用的一个重要因素,而且这些方法均没有很好地解决系数矩阵 B 中仅部分元素存在误差情况下的平差问题;另外,这些方法无法给出参数估值的精度信息,或者给出的精度评定方法存在一定程度的近似,并不是整体最小二乘解的真实精度^[7-8]。

本文提出了一种顾及设计矩阵随机误差的最小二乘组合解法,给出了新算法下的 TLS 参数估计和精度评定公式,并通过算例对算法的可行性

进行了验证。

1 顾及设计矩阵随机误差的最小二乘组合解法

本文算法的基本思想为:将设计矩阵中含有测量误差的元素当作虚拟观测值,在原有误差方程的基础上,增加以设计矩阵元素为观测向量的虚拟误差方程,同时,将设计矩阵中含误差的元素在新算法中当作参数求解。这样处理,一方面可以得到所需参数的 TLS 平差值;另一方面,这时设计矩阵是由设计矩阵参数的初值组成的,已经不再具有随机特性,这样就将 TLS 数据处理理论统一到经典最小二乘理论。同时,这种方法求得的参数是观测向量的线性函数,使得 TLS 的精度评定成为了可能。

TLS 数据处理模型为:

$$L = Bx - d \quad (1)$$

这一模型类似于经典的间接平差模型,但与经典模型不同的是,此平差模型考虑了设计矩阵的误差,即需要考虑设计矩阵中含误差的元素的影响。

在原有误差模型的基础上,增加设计矩阵中的误差项作为平差参数,可以得到观测方程:

$$L_B = x_B \quad (2)$$

其中, L_B 是设计矩阵中的观测值; x_B 是新设的参

收稿日期:2013-04-11

项目来源:国家自然科学基金资助项目(41174012, 41274022);国家 863 计划资助项目(2013AA122502);国家教育部新世纪优秀人才支持计划资助项目(NCET-12-0428)。

第一作者:姚宜斌,教授,博士生导师,现从事测量数据处理基础理论与方法研究。E-mail: ybyao@whu.edu.cn

数。综合式(2)、(3),可以得到新算法下 TLS 求解的数学模型:

$$\begin{aligned} L &= B_X x - d \\ L_B &= x_B \end{aligned} \quad (3)$$

需要说明的是, L_B 仅包含设计矩阵 B 中含误差的元素。 B_X 是由参数 x_B 的初值和一些不含误差的元素组成的。在上述模型的基础上,可以得到误差方程:

$$\begin{aligned} v &= (B_X^0 + \Delta B)(x^0 + x) - L = \\ &B_X^0 x^0 + B_X^0 x + [(x^0)^T \otimes E] \text{vec}(\Delta B) - \\ &L + \Delta B x \approx B_X^0 x + A x_B + B_X^0 x^0 - L \\ v'_B &= x_B^0 + x_B - L_B \end{aligned} \quad (4)$$

式中, $x_B = \text{vec}(\Delta B)$, x_B 为新设参数的改正数; $A = [(x^0)^T \otimes E]$, 可将 x_B 作为向量分离出来; B_X^0 是由新设参数初值 X_B^0 组成的矩阵, 式中忽略二次小项 $\Delta B x$ 。

$$\begin{aligned} \text{如果令 } V'_B &= \text{vec}(V_B), V' = \begin{bmatrix} V \\ V'_B \end{bmatrix}, l = \\ \begin{bmatrix} L + d - B_X^0 X^0 \\ L_B - X_B^0 \end{bmatrix}, B &= \begin{bmatrix} B_X^0 & A \\ 0 & E \end{bmatrix}, x' = \begin{bmatrix} x \\ x_B \end{bmatrix}, \text{则有:} \\ V' &= B x' - l \end{aligned} \quad (5)$$

式中, V' 是所有观测量的改正数向量; B 是由待估参数初值组成的设计矩阵; x' 是所有参数的改正数。此时的估计准则仍然为 $V'^2 = \min$, 等同于 $V^2 + V_B'^2 = \min$ 。这样就将整体最小二乘平差问题转化成了经典最小二乘平差问题, 可以按照经典间接平差的原理进行平差。同时, 在上述模型中, V'_B 为设计矩阵中的观测量改正数, 只针对设计矩阵 B 中有误差的部分。而且上述模型可以同时顾及观测值 L 和系数阵中含误差部分 L_B 的权, 即在估计准则 $V_L^T P V_L + V_B'^T P_B V_B' = \min$ 下进行加权参数估计, 这是目前其他整体最小二乘解算方法所实现不了的。

本文算法通过新设虚拟参数的方法, 将整体最小二乘的解算问题转化为经典最小二乘解算问题, 在模型(5)的基础上, 按经典最小二乘中间接平差的原理平差, 即可得到参数的平差解。解算流程为: ① 获取未知参数的初值 X^0 , 参数 X_B 的初值可以取为相应的观测值。② 在模型(5)的基础上, 按间接平差原理求参数改正数 $x_L = (B^T P B)^{-1} (B^T P l)$ 。③ 更新参数初值 $X^0 = X^0 + x_L$, 重新平差。④ 重复步骤 2)、3), 直到参数改正数 x_L 小于一定的阈值, 则退出迭代, 输出结果。

2 整体最小二乘的精度评定

TLS 精度评定的难点在于在平差过程中考虑了设计矩阵的误差, 即考虑到了设计矩阵的随机信息。对于奇异值分解(SVD)解法, 参数的平差值无法给出用观测数据表示的具体形式, 也就无法通过协方差传播率进行精度评定。而对于迭代法, 参数的平差值是逐步逼近得到的, 是观测数据的非线性函数, 由于非线性程度过高, 也很难通过线性化后的误差传播方法进行精度评定。

本文算法可以很容易地给出参数相应的精度信息。

2.1 单位权方差估计公式

单位权方差估计公式的确定一直是 TLS 数据处理中难以解决的问题。本文所提出的新算法将整体最小二乘问题转换成了经典最小二乘问题, 对于模型(5), 按间接平差的原理进行平差, 则 TLS 的精度评定工作完全可以在此基础上按间接平差的原理继续进行。单位权方差估计公式为:

$$\sigma_0^2 = \frac{V'^T P' V'}{\text{tr}(P' Q'_{vv})} = \frac{V'^T P' V'}{(n+u) - (t+u)} = \frac{V'^T P' V'}{n-t} \quad (6)$$

其中, n 是观测向量 L 所含观测量的个数; u 是设计矩阵 B 所含观测量(随机变量)的个数; t 为原有参数的个数。 $\text{tr}(P' Q'_{vv}) = (n+u) - (t+u)$ 是间接平差的结论, 本文直接引用。从上面的结果可以看到, TLS 平差模型相对经典最小二乘而言, 自由度没有变化。

2.2 参数协因数阵

给出参数确定的精度信息是平差的内容之一, TLS 精度评定问题一直是 TLS 数据处理理论中难于解决的问题。几十年来不少学者提出过各种不同的方法^[7-8], 但是这些方法都经过了不同程度的近似, 并不能给出求解参数值真正的精度信息。本文算法将 TLS 精度评定理论纳入到经典最小二乘精度评定理论中, 可以给出考虑设计矩阵随机信息下的参数精度信息。

在模型(5)的基础上平差, 因为此时的设计矩阵是由参数的初值组成的, 不具有随机信息, 所以精度评定仍可按间接平差的原理进行。下文仅以参数的协因数为例说明, 其他量的协因数阵可按协因数传播定律求得。

$$\begin{aligned} Q_{xx} &= (B^T P B)^{-1} B^T P Q' P' B (B^T P B)^{-1} \\ &= (B^T P B)^{-1} \end{aligned} \quad (7)$$

式(7)虽然形式上与经典最小二乘相同,但是式中的设计矩阵与经典最小二乘时组成不同,由式(7)求得的结果是 TLS 平差方法下参数的准确的精度信息,包含了参数和设计矩阵的精度信息。

3 算例分析

本文选取了某地 3 个同时具有 1980 西安坐标系以及 1954 年北京坐标系成果的公共点,分别采用不同的方法求取坐标转换参数,如表 1 所示。

表 1 不同方法计算得到的观测量改正数/m

Tab. 1 Observations Correctionsof Different Methods/m

		迭代法	CLS 法	经典最小二乘法
D001	X 坐标	0.021 5	-0.021 4	-0.042 9
(BJ54)	Y 坐标	-0.018 3	0.018 3	0.036 7
D002	X 坐标	-0.082 4	0.082 4	0.164 8
(BJ54)	Y 坐标	0.037 9	-0.037 9	-0.075 9
D003	X 坐标	0.061 0	-0.061 0	-0.121 9
(BJ54)	Y 坐标	-0.019 6	0.019 6	0.039 2
D001	X 坐标	-0.021 4	0.021 4	0
(XA80)	Y 坐标	0.018 3	-0.018 3	0
D002	X 坐标	0.082 4	-0.082 4	0
(XA80)	Y 坐标	-0.037 9	0.037 9	0
D003	X 坐标	-0.061 0	0.061 0	0
(XA80)	Y 坐标	0.019 6	-0.019 6	0

表 2 SVD 算法、迭代法与 CLS 法参数平差值

Tab. 2 Parameter Values of Different Methods

	迭代法	CLS 法	SVD 法	经典最小二乘法
Mcos a	1.000 002 624	1.000 002 624	1.000 001 056	1.000 002 624
Msin a	-0.000 008 838	-0.000 008 838	-0.000 008 67	-0.000 008 838
disX	39.865 0	39.865 0	45.323 0	39.865 1
disY	10.623 8	10.623 8	12.078	10.623 8

采用某地变形监测的实测数据,观测数据为河流沿岸观测点的水位值、温度值、位移量,拟合模型为:

$$S = a + bh + ct \quad (8)$$

其中, S 为位移量; h 为水位值; t 为温度值。 a 、 b 、 c 为待拟合的参数。为了保证设计矩阵中每个元素都含有误差,现以水位的变化为观测量参与拟合,即拟合的模型变化为:

$$S' = S - a = bh + ct \quad (9)$$

此模型的系数阵为 $[h_i \ t_i]$,系数阵中所有的元素均含有误差。

表 3 列出了 SVD 方法、CLS 法以及迭代法得到的观测值的改正数,可以看出 3 种方法得到的改正数是大致相同的。

表 4 给出了 3 种方法求得的参数值,可以看

从表 1 中可以看出,TLS 的迭代法和本文所提出的最小二乘组合新解法(CLS)得到的观测值改正数向量基本是一致的。表 1 中没有列出 SVD 方法求得的设计矩阵和观测向量的改正数,这是由于在坐标转换的函数模型中,设计矩阵中含有不含误差的常数向量,而 SVD 对设计矩阵中没有误差的元素也进行了改正,改正数已经不符合实际测量的情况,这一点可以由表 2 中不同方法求得的参数值看出。

从表 2 中可以看出,4 种不同方法中,迭代法和 CLS 法的结果相符,而与传统 SVD 方法的结果相差较大。这是由于在相似变换模型中设计矩阵只是部分含有误差,而 SVD 方法仍以 $\|[\hat{A};\hat{B}]-[A;b]\|_2 = \min$ 作为平差准则,这是不合理的;另一方面,在设计矩阵中有的坐标观测量会出现两次,这时,如果不加区分地采用 $\|[\hat{A};\hat{B}]-[A;b]\|_2 = \min$ 作为平差准则,相当于对坐标观测值进行了重复加权,这样的处理方式也是不完善的^[10]。

本文认为,在设计矩阵部分含有误差的情况下,采用传统的 SVD 解法是不合理的,解算的结果与真实的 TLS 结果也会有差异。

为了证明 SVD 方法与迭代法以及 CLS 法在上述实验中解算结果不同是由于设计矩阵 B 的部分元素含有误差引起的,本文进行了实验。

到 3 种方法的结果是一致的,从而证明了本文推论。为了进一步验证本文算法在观测值不同精度情况下的可靠性,本文引用了文献[11]中的算例,将本文算法和多类 TLS 迭代算法进行比较。

原始数据以及对应的权值见文献[11]。表 5 给出了不同方法计算得到的结果,表 6 中的准确值是文献[11]计算的结果,另外给出了 WTLS 算法计算的结果和改进 WTLS 的结果^[12],同时给出了经典最小二乘的结果。

表 6 给出的是算法和经典最小二乘给出的参数的精度信息。从表 6 中可以看出,经典最小二乘给出的精度比本文算法的精度要高,这主要是由于经典最小二乘在进行精度评定时没有考虑到设计矩阵误差的影响,给出的精度信息并不准确。

表 3 不同方法观测向量的改正数/m
Tab.3 Observations Corrections of Different Methods/m

	SVD 法			CLS 法			迭代法		
	水位 h	温度 t	位移 S	水位 h	温度 t	位移 S	水位 h	温度 t	位移 S
1	0.091 3	-0.020 8	-0.163 1	0.091 3	-0.020 8	-0.163 1	0.091 2	-0.020 8	-0.163 1
2	-0.155	0.035 3	0.277 2	-0.155 0	0.035 3	0.277 2	-0.155	0.035 3	0.277 2
3	0.016 9	-0.003 8	-0.030 2	0.016 9	-0.003 9	-0.030 2	0.016 9	-0.003 8	-0.030 2
4	0.031 7	-0.007 2	-0.056 6	0.031 7	-0.007 2	-0.056 6	0.031 7	-0.007 2	-0.056 6
5	-0.069 7	0.015 9	0.124 7	-0.069 7	0.015 9	0.124 7	-0.069 7	0.015 9	0.124 7
6	0.162 1	-0.036 9	-0.289 8	0.162 1	-0.036 9	-0.289 8	0.162 1	-0.036 9	-0.289 8
7	0.032 5	-0.007 4	-0.058	0.032 5	-0.007 4	-0.058 0	0.032 5	-0.007 4	-0.058
8	-0.164 1	0.037 4	0.293 3	-0.164 1	0.037 4	0.293 3	-0.164 1	0.037 4	0.293 3
9	0.011	-0.002 5	-0.019 7	0.011 1	-0.002 5	-0.019 8	0.011 1	-0.002 5	-0.019 8
10	0.038 7	-0.008 8	-0.069 2	0.038 7	-0.008 8	-0.069 2	0.038 7	-0.008 8	-0.069 2
11	0.090 2	-0.020 6	-0.161 3	0.090 2	-0.020 6	-0.161 2	0.090 2	-0.020 6	-0.161 2
12	0.087 4	-0.019 9	-0.156 2	0.087 4	-0.019 9	-0.156 2	0.087 4	-0.019 9	-0.156 2
13	-0.115 2	0.026 3	0.205 9	-0.115 1	0.026 3	0.205 9	-0.115 1	0.026 2	0.205 8
14	0.032 8	-0.007 5	-0.058 6	0.032 8	-0.007 5	-0.058 7	0.032 8	-0.007 5	-0.058 7
15	-0.127 7	0.029 1	0.228 2	-0.127 7	0.029 1	0.228 2	-0.127 7	0.029 1	0.228 2
16	0.035 9	-0.008 2	-0.064 2	0.035 9	-0.008 2	-0.064 2	0.035 9	-0.008 2	-0.064 2

表 4 不同方法参数的平差值/m
Tab.4 Parameter Values of Different Methods/m

	SVD 方法	CLS 法	迭代法	经典 LS 法
b	0.559 4	0.559 4	0.559 4	0.559 3
c	-0.127 5	-0.127 5	-0.127 5	-0.127 4

表 5 不同方法计算结果比较
Tab.5 Comparison of Results from Different Methods

参数	准确值	WTLS	改进 WTLS	CLS	经典最小二乘
A	-0.480 533	-0.480 533 477 684	-0.480 533 436 728	-0.480 533 41	-0.546 367 25
B	5.479 910	5.479 910 799 886 4	5.479 910 587 109 7	5.479 910 26	5.775 073 43

表 6 新算法计算结果与经典最小二乘参数精度比较

Tab.6 Comparison Between the Proposed Algorithm and Classical Total Least Square

参数精度	CLS	经典最小二乘
A	0.001 5	0.000 3
B	0.039 0	0.013 3

4 结 语

本文提出了一种顾及设计矩阵随机误差的最小二乘组合解法,可以解决考虑设计矩阵误差的平差模型解算问题。TLS 的传统 SVD 解法,具有理论上的缺陷。在设计矩阵部分含有误差的情况下,求得的参数值不可靠。本文提出的新算法可以有效地解决这一问题。本文首次从理论上严格给出了 TLS 模型下单位权方差的估计公式。从结果上可以看到,TLS 平差模型相对经典最小二乘而言自由度没有变化。本文完善了 TLS 精度评定理论,给出了 TLS 中的参数的精度信息,解决了制约 TLS 应用的瓶颈问题。

参 考 文 献

[1] van Loan G C. An Analysis of the Total Least-Squares Problem[J]. *SIAM J Numer Anal*, 1980, 17:883-893

[2] Yu Jincheng. On the Solvability of the Total Least Squares Problem[J]. *Journal of Nanjing Normal University (Nature Science)*, 1996, 19(1):13-16 (俞锦成. 关于整体最小二乘问题的可解性[J]. *南京师大学报(自然科学版)*, 1996, 19(1):13-16)

[3] Kong Jian, Yao Yibin, Wu Han. Iterative Method for Total Least-Squares[J]. *Geomatics and Information Science of Wuhan University*, 2010, 35(6): 711-714(孔建,姚宜斌,吴寒. 整体最小二乘的迭代解法[J]. *武汉大学学报·信息科学版*, 2010, 35(6):711-714)

[4] van Huffel S, Zha Hongyuan. The Total Least Squares Problem [J]. *Handbook of Statistics*, 1993, 9:377-407

[5] Hu Shengwu, Tao Benzao. Nonlinear Error Propagation and Its Application in GIS[J]. *Journal of Wuhan Technical University of Surveying and*

- Mapping*, 1997, 22(2):129-131 (胡圣武, 陶本藻. 非线性模型的误差传播及其在 GIS 中的应用[J]. 武汉测绘科技大学学报, 1997, 22(2):129-131)
- [6] Qiu Weining, Tao Benzao, Yao Yibin. The Theory and Method of Surveying Data Processing[M]. Wuhan: Wuhan University Press, 2008 (邱卫宁, 陶本藻, 姚宜斌, 等. 测量数据处理理论与方法[M]. 武汉: 武汉大学出版社, 2008)
- [7] Burkhard S. Total Least-Squares (TLS) for Geodetic Straight-Line and Plane Adjustment[J]. *Annali di Geodesia Scienze Affini*, 2006, 65(3): 141-166
- [8] Krystek M, Anton M. A Weighted Total Least-Squares Algorithm for Fitting a Straight Line[J]. *Meas Sci Technol*, 2007, 18:3 438-3 442
- [9] Ding Keliang, Ou Jikun, Zhao Chunmei. Method of Least-Squares Prthogonal Curve Fitting[J]. *Science of Surveying and Mapping*, 2007, 32(3):17-19 (丁克良, 欧吉坤, 赵春梅. 正交最小二乘曲线拟合法[J]. 测绘科学, 2007, 32(3):17-19)
- [10] Akyilmaz O. Total Least Squares Solution of Coordinate Transformation[J]. *Survey Review*, 2007(1):68-80
- [11] Neri F, Saitta G, Chiofalo S. An Accurate and Straightforward Approach to Line Regression Analysis of Error-Affected Experimental Data[J]. *J Phys E: Sci Instrum*, 1989, 22:215-217
- [12] Mahboub V. On Weighted Total Least-Squares for Geodetic Transformations[J]. *J Geod*, 2011, DOI: 10.1007/s00190-011-0524-5

A New Combined LS Method Considering Random Errors of Design Matrix

YAO Yibin¹ KONG Jian^{1,2}

¹ School of Geodesy and Geomatics, Wuhan University, 129 Luoyu Road, Wuhan 430079, China

² School of Earth Science, Ohio State University, Columbus, OH 43210, USA

Abstract: A new combined LS(CLS) method is proposed which considers the random error in a design matrix after a brief introduction of TLS and its iteration algorithm and the SVD algorithm. The new algorithm can be applied for TLS parameter estimation, so that TLS can be integrated with classical LS in theory. By proposing rigorous accuracy assessment formulas for TLS under the new algorithm, this paper solves the bottleneck problem which restricts the application of TLS, and then shows the feasibility and correctness of the new method through examples. The research results are meaningful not only for TLS theory, but also for the whole data processing theory.

Key words: TLS; SVD method; iteration method; virtual observations; accuracy assessment

First author: YAO Yibin, PhD, professor, specializes in surveying data processing. E-mail: ybyao@whu.edu.cn

Foundation support: The National Natural Science Foundation of China, Nos. 41174012, 41274022; the National 863 Program of China, No. 2013AA122502; the Ministry of Education Program for New Century Excellent Talents Project, NECT. -12-0428.