文章编号:1671-8860(2009)02-0244-04 文献标志码:A

一种病态问题诊断的数值指标——矩阵向量正交度

王孝青[1] 党亚民[1] 薛树强[1]

(1 中国测绘科学研究院,北京市海淀区北太平路 16 号,100039)

摘 要:基于矩阵体积的概念,引入矩阵向量正交度,对病态问题的行列式诊断方法进行了推广和扩展。研究发现,矩阵向量正交度应用于病态问题诊断,克服了行列式法的诸多缺点。

关键词:病态问题;诊断;行列式;矩阵体积;正交度

中图法分类号:P207.2

不适定问题在计算数学、回归分析、最优化理论、地球物理反演、测量数据处理等诸多科研、工程领域受到广泛的关注。其中,病态问题[1-3]是大地测量中常见的一类问题,引起了许多学者的广泛关注。目前,大地测量界对病态问题的研究主要集中在两个方面:① 如何对病态问题进行诊断、分析和解释;② 寻求最佳的病态问题算法[3]。

不少学者结合大地测量的实践,对病态问题的诊断进行了系统的研究,发展出了条件数分析法、特征分析法、条件指标与方差比法等一系列方法,其中条件数分析法的应用最为广泛[3-5]。行列式理论和矩阵理论是线性代数的基础理论[6,7],已有学者将行列式的概念应用于病态问题的诊断分析,并得出了一些重要的结论[2,8,9]。

矩阵体积的几何意义明确,具有丰富的欧氏几何学内涵,在各类曲线、曲面积分、推广勾股定理、计算 n 维球面面积、概率论、降秩回归问题以及定位网几何构型分析中得到了一定的应用[10,11-16]。本文基于矩阵体积的定义和性质,定义了任意矩阵向量正交度,并将其应用于病态问题的诊断、分析和解释。

1 病态问题诊断方法

病态问题与系统的观测结构密切相关,如果处理的问题为线性问题或将非线性问题进行线性化处理转化为线性问题,通常情况下,病态问题表现为方程组系数矩阵列向量间存在或严重存在复共线关系[2-4,17]。与本文研究相关的几种病态问题诊断有如下几种:① 特征分析法。这是较早提出的一种复共线的判定技术,是基于矩阵的特征系统提出的一种病态问题诊断方法[2,17]。该方法的优点在于计算简单,且很容易给出全部的复共线性关系[2]。② 条件数法。条件数法很好地解决了特征分析法涉及到的“很接近于零”的模糊表述方面的问题,成为目前最常用的一种病态问题诊断方法[3,4]。条件数法实际上是特征分析法的一种特例,存在类似的弊端。③ 行列式法。病态问题的行列式诊断法将法方程系数矩阵 $\boldsymbol{N}$ 的行列式作为病态问题诊断的数值指标,其优点是计算简单,且能整体反映法方程系数矩阵的谱特征,但存在类似于特征分析法的致命弱点。此外,已有学者指出,行列式诊断法在很多情况下会造成病态问题诊断失败[2,5]。

2 矩阵向量正交度

研究发现,当使用行列式概念对一个病态问题进行复共线分析时,归纳起来存在两方面的问题:① 行列式多小能够断言存在复共线性;② 如

收稿日期:2008-12-26。

项目来源:地理空间信息工程国家测绘局重点实验室开放研究基金资助项目(B2531,200604)。

何解决小行列式是复共线性存在的必要而非充分条件[2]。一些学者对条件数法应用于测量平差系统病态性诊断进行过大量的研究，发现条件数法能够改进特征分析法存在的问题，但又不能完全取而代之[17]。本文结合矩阵体积的概念，引入矩阵向量正交度的概念，以扩展行列式在病态问题诊断中的应用范围。

定义 1　对于矩阵 $\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{x}_1\cdots\boldsymbol{x}_n]\in\mathbf{R}^{m\times n}$，若 $\min\|\boldsymbol{x}_i\|_2=0(i=1,2,\cdots,n)$，则矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列向量的正交度 $\mathrm{ort_{col}}(\boldsymbol{A})$ 定义为 0；否则，

$$\mathrm{ort_{col}}(\boldsymbol{A})=\mathrm{vol}_n(\boldsymbol{A})/\prod_{i=1}^{n}\|\boldsymbol{x}_i\|_2 \tag{1}$$

式中，$\prod_{i=1}^{n}\|\boldsymbol{x}_i\|_2$ 为向量的二范数；$\mathrm{vol}_n(\boldsymbol{A})=\sqrt{\det(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})}$为矩阵的体积[11,16]，其几何意义为以 $\boldsymbol{A}$ 的列向量为边的 n 维平行多面体的体积。n 维平行多面体的体积定义[18]为：

$$\mathrm{vol}_{P(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n)}=\mathrm{vol}_{P(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_{n-1})}H_{\boldsymbol{x}_n} \tag{2}$$

如图 1 所示，$H_{\boldsymbol{x}_n}$ 是向量 $\boldsymbol{x}_n$ 在 $P(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_{n-1})$ 的高，$\theta_{\boldsymbol{x}_n,\mathrm{span}(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_{n-1})}$ 为 $\boldsymbol{x}_n$ 与空间 $\mathrm{span}(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_{n-1})$ 的夹角。结合式(1)和式(2)可得：

$$\mathrm{ort_{col}}(A)=\prod_{i=1}^{n}\sin\theta_{\boldsymbol{x}_i,\mathrm{span}(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_{i-1})} \tag{3}$$

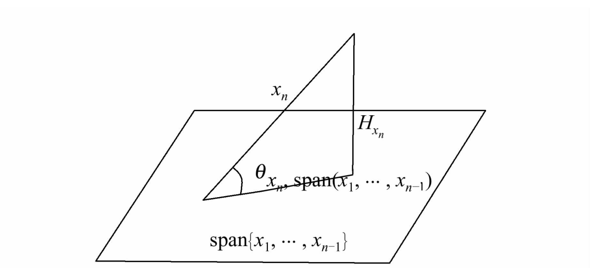

图 1　高维平行多面体的几何要素

Fig. 1　Geometric Elements of the Higher Dimentional Parallelohedron

由矩阵体积的性质[10,15,16]可得 $0\leqslant\mathrm{ort_{col}}(\boldsymbol{A})\leqslant1$，当且仅当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列向量两两正交时，$\mathrm{ort_{col}}(\boldsymbol{A})$取得最大值 1；当且仅当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列向量间存在复共线关系时，$\mathrm{ort_{col}}(\boldsymbol{A})$取得最小值 0[16]。因此，系数矩阵列向量的正交度是一个有价值的数字指标，矩阵列向量的正交度刻画了该矩阵列向量的正交(独立)程度。

事实上，对于一个亚定问题，往往更关心的是矩阵行向量之间的正交关系。类似地，可以给出矩阵行向量正交度的概念。

定义 2　矩阵 $\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{x}_1\cdots\boldsymbol{x}_m]^{\mathrm{T}}\in\mathbf{R}^{m\times n}$，若 $\min\|\boldsymbol{x}_i\|_2=0(i=1,2,\cdots,m)$，则矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行向量的正交度 $\mathrm{ort_{row}}(\boldsymbol{A})$定义为 0；否则，

$$\mathrm{ort_{row}}(\boldsymbol{A})=\mathrm{vol}_m(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})/\prod_{i=1}^{m}\|\boldsymbol{x}_i\|_2 \tag{4}$$

矩阵行向量正交度与列向量正交度具有类似的特征。结合式(3)不难发现，矩阵向量正交度是一种病态问题诊断的优良数字指标，整体上反映了矩阵向量的复共线性，具有明确的几何意义，有利于从系统观测结构的角度把握病态问题的起因。类似于矩阵的条件数，矩阵向量正交度也是一个相对数值指标，它解决了“矩阵的体积很接近零”在实际应用中难以把握的问题。矩阵条件数(矩阵最大特征值与最小特征值的比值)、矩阵体积(行列式)以及矩阵向量正交度的取值范围及其特征(以列向量为例)如表 1 所示。

表 1　矩阵条件数、矩阵体积和矩阵向量正交度的对比

Tab. 1　Comparison of Condition Number, Volume and Orthogonal Degree

数值指标	取值范围	最值条件	特征
最小特征值	[0,+∞)	矩阵列向量存在一对复共线关系	反映了向量复共线性；仅反映了矩阵谱的一端
条件数	[1,+∞)	矩阵向量两两正交为其必要条件	较好地反映向量复共线性；仅反映了矩阵谱点两极
矩阵体积	[0,+∞)	矩阵列向量至少有一对复共线关系	未能很好地反映向量复共线性；整体反映了矩阵谱特征
矩阵向量正交度	[0,1]	最小值：至少有一对复共线关系；最大值：矩阵向量两两正交	较好地反映向量复共线性；整体反映了矩阵谱特征

矩阵体积和矩阵向量正交度在整体上反映了矩阵的谱特征。结合矩阵体积投影的概念，可以对矩阵谱特征的细部进行研究[10]。需要指出的是，由于矩阵体积的概念与高维欧氏空间中高维平行多面体的体积紧密相关，因此，本文中矩阵体积的定义并没有直接与矩阵奇异值发生联系，这有利于使用矩阵体积及其矩阵向量正交度的概念从本质上理解和把握病态问题的起因。

3　算　例

下面给出 4 个线性方程组的系数矩阵，分别为：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0.0129 & 0 & 0\\ -0.0043 & 0.0122 & 0\\ -0.0043 & -0.0061 & 0.0106\\ -0.0043 & -0.0061 & -0.0106\end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}0.221 & 0.298 & 0.285\\ -0.074 & 0.181 & -0.095\\ -0.074 & -0.240 & 0.138\\ -0.074 & -0.240 & -0.327\end{bmatrix}$$

$$C=\begin{bmatrix} 0.3692 & 0.3231 & 0.0446 \\ 0.1351 & 0.1969 & -0.0615 \\ 0.1291 & -0.2020 & 0.3322 \\ -0.1031 & -0.2600 & 0.1543 \end{bmatrix}$$

$$D=\begin{bmatrix} 10 & 7 & 8 \\ 7 & 5 & 6 \\ 8 & 6 & 10 \\ 7 & 5 & 9 \end{bmatrix}$$

表2给出了使用矩阵条件数、矩阵体积以及矩阵列向量正交度对这4个矩阵态性的诊断结果。由表2可得，矩阵 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{C}$、$\boldsymbol{D}$ 的条件数依次变大，若以矩阵条件数作为衡量矩阵态性的标准，会发现以矩阵体积(行列式)大小作为病态问题度量存在的问题，即矩阵体积很小不等价于矩阵态性最差，矩阵体积大不等价于矩阵态性好，而矩阵向量正交度的大小很好地反映了矩阵向量间的复共线性，即矩阵向量正交度越小，矩阵的态性越差，矩阵向量间存在或严重存在复共线性。

表2 系数矩阵的条件数、矩阵体积和列向量正交度

Tab.2 Contrast Among Condition Number, Volume and Orthogonal Degree Coefficient Matrices

系数矩阵编号	矩阵条件数	矩阵体积	矩阵列向量正交度	态性
$\boldsymbol{A}$	1	3.3365×10^{-6}	1	最佳态
$\boldsymbol{B}$	4.5	0.0289	0.4995	良态
$\boldsymbol{C}$	336.6	4.9635×10^{-4}	6.2×10^{-3}	病态
$\boldsymbol{D}$[5]	2984.1	1	1.89×10^{-5}	严重病态

值得注意的是，病态问题诊断的条件数分析法也存在局限性，条件数为1仅仅表明解向量的超误差椭球各向同性，而系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的体积大小在一定程度上反映了超误差椭球体积的大小，表征了该线性方程组解的统计特性[2,3,15]。因此，矩阵向量正交度从整体上很好地反映了矩阵向量间的复共线性，但不能完全取代矩阵体积(行列式)法。

文献[5]中的算例表明，以系数矩阵行列式作为病态问题诊断数值指标存在另一个局限性，即矩阵体积(行列式)大并不等价于矩阵态性好。结合表2不难发现，本文引入的病态问题诊断的新数值指标——矩阵向量正交度很好地解决了这方面的问题。

4 结语

本文引入并研究了矩阵体积的概念，对其高维欧氏空间几何学背景进行了探究。研究发现，矩阵体积具有丰富的欧氏几何学内涵。这些研究为本文引入矩阵向量正交度的概念奠定了理论基础，为矩阵向量正交度应用于病态问题诊断提供了理论依据。矩阵向量正交度应用于病态问题诊断具有如下优势：① 整体反映了矩阵谱特征，具有丰富的几何学内涵，便于把握病态问题的起因；② 是一种相对数值指标，有效克服了行列式诊断法的缺点；③ 具有明确的上下界，结合矩阵体积(行列式)，可较好地把握病态问题的本质；④ 矩阵体积(行列式)的理论成熟，且其计算简单。

类似于条件数分析法，矩阵向量正交度分析法也存在一些局限性，并不能完全取代矩阵体积(行列式)法。此外，对于维数特定的矩阵，矩阵向量正交度多大可以断言该矩阵存在或严重存在病态性，还有待进一步研究。

参 考 文 献

[1] 卢秀山.病态系统分析理论及其在测量中的应用[D].武汉:中国科学院测量与地球物理研究所,1999

[2] 郭建锋.测量平差系统病态性的诊断与处理[D].郑州:信息工程大学,2002

[3] 王振杰.大地测量中不适定问题的正则化解法研究[D].武汉:中国科学院测量与地球物理研究所,2003

[4] Belsley D A. Conditioning Diagnostics: Collinearity and Weak Datain Regression[M]. NewYork: Wiley, 1991

[5] 党亚民.矩阵扰动分析及其在大地测量反演误差分析中的应用[J].地壳形变与地震,1997,17(4):3-8

[6] 同济大学数学教研室.线性代数[M].北京:高等教育出版社,1982

[7] 唐春雷.行列式与多线性泛函[J].西南师范大学学报,1995,20(3):328-330

[8] 杨大地.矩阵条件数的新定义——矩阵的非正交[J].重庆大学学报,1996,19(6):61-65

[9] 颜世建.关于条件数的一个定理[J].南京师范大学学报,2004,27(4):25-27

[10] Israel A. Generalized Inverses: Theory and Applications[M]. New York: Springer, 2002

[11] Ben-Israel A. Anapplication of the Matrix Volume in Probability[J]. Linear Algebra and Its Applications, 2000, 321: 9-25

[12] Ben-Israel A. The Change of Variables Formula Using Matrix Volume[J]. SIAM Journal on Matrix Analysis, 1999, 21: 300-312

[13] Savas B. Algorithms in Data Mining: Reduced Rank Regression and Classification by Tensor Methods[D]. Sweden: Link Pings Universitet, 2005

[14] 李明，方宜. 矩阵的体积及其应用[J]. 西北师范大学学报，2005，41(6)：86-90

[15] 薛树强，党亚民，章传银. 差分水下 GPS 定位空间网的布设研究[J]. 测绘科学，2006，31(4)：23-24

[16] 薛树强，党亚民，章传银. 矩阵体积法原理及其在差分水下 GPS 定位网图形强度设计中的应用[J]. 海洋测绘，2007，27(2)：6-10

[17] 归庆明，郭建锋，边少锋. 基于特征系统的病态性诊断[J]. 测绘科学，2002(2)：13-15

[18] 黄敏晃. 毕氏定理的一些推广[J]. 数学传播，1985，9(1)：38-42

[19] 罗德 R. 高等数学[M]. 北京：人民教育出版社，1962

第一作者简介：王孝青，硕士生。现从事 InSAR 数据处理方面的研究。

E-mail：rosery520@hotmail.com

A Numerical Value Index Applied to Diagnosis of Ill-conditioning Problems：Orthogonal Degree of Matrices

WANG Xiaoqing[1] *DANG Yamin*[1] *XUE Shuqiang*[1]

(1 Chinese Academy of Surveying and Mapping，16 Beitaiping Road，Beijing 100039，China)

Abstract：Based on the conception of the matrix volume，we presented the definition of the orthogonal degree of the matrices，generalized and extended the determinant method mentioned above. As the orthogonal degree of the matrices was applied to the ill-conditioning problems diagnostics，it is applicable to any matrices，and overcomes the drawbacks of the determinant method.

Key words：ill-conditioning；diagnostics；determinant；matrix volume；orthogonal degree

About the first author：WANG Xiaoqing，postgraduate，majors in InSAR data processing.

E-mail：rosery520@hotmail.com

(上接第 177 页)

ence field. Houlcuer the current optimal land use models have many deficiencies. We propose the land use optimal allocation model based on multi-object planning(MOP) and cellular automata(CA). Furthermore，Jiayu City was taken as an example to evaluate the model and to compare it with other models. The result shows that the integrated model based on MOP-CA has a better simulating effect. This integrated model realizs the unification of the quantitative structure and the spatial configuration optimal.

Key words：MOP；CA；quantitative structure optimal；spatial configuration optimal

About the first author：WANG Hanhua，Ph.D candidate，majors in land use planning and land evaluation.

E-mail：sunny_811@126.com