

总体最小二乘方法的适用性研究^{* 1}

王乐洋^{1,2)} 余 航¹⁾

(1) 东华理工大学测绘工程学院,南昌 330013
(2) 江西省数字国土重点实验室,南昌 330013)

摘 要 从数据拟合的角度探讨总体最小二乘方法的适用性,给出总体最小二乘残差距离与最小二乘残差距离之间的关系表达式并推广到多维情形;研究总体最小二乘准则、数据最小二乘准则和最小二乘准则之间的关系,给出适用场合;通过模拟计算分析,得出有益结论。

关键词 总体最小二乘;数据最小二乘;最小二乘;数据拟合

中图分类号:P207

文献标识码:A

STUDY ON THE APPLICABILITY OF TOTAL LEAST SQUARES METHOD IN SURVEYING ADJUSTMENT

Wang Leyang^{1,2)} and Yu Hang¹⁾

(1) Faculty of Geomatics, East China Institute of Technology, Nanchang 330013
(2) Jiangxi Province Key Lab for Digital Land, Nanchang 330013)

Abstract The applicability of total least squares studied systematically with data fitting. The relationship formula between total least squares residual distance and least squares residual distance was obtained and extended to the multi-dimensional cases. According to the relationship among the criterion of least squares (LS), data least squares (DLS) and total least squares (TLS), the applicability was determined.

Key words: total least squares; data least squares; least squares; data fitting

近年来,总体最小二乘理论在测量数据处理领域得到广泛应用^[1-9],但某些情况下其解与最小二乘解在估值和精度方面相差不大^[6]。因此,总体最小二乘与最小二乘在适用性等方面需要进一步探讨和分析。本文从数据拟合的角度探讨了总体最小二乘方法的适用性,定义与残差距离有关的角度,绘制最小二乘、数据最小二乘和总体最小二乘准则的几何关系图,通过模拟算例给出相关的分析和结论。

1 总体最小二乘残差距离与最小二乘残差距离

当以 y 为观测值时,最小二乘拟合的残差距离为:

$$\bar{d}_1 = \sqrt{(\mathbf{y}^{\text{obs}} - \mathbf{y}^{\text{fit}})^T (\mathbf{y}^{\text{obs}} - \mathbf{y}^{\text{fit}})} \quad (1)$$

式中, $\mathbf{y}^{\text{obs}} = [y_1^{\text{obs}} \cdots y_n^{\text{obs}}]^T$ 为观测值, $\mathbf{y}^{\text{fit}} = [y_1^{\text{fit}} \cdots y_n^{\text{fit}}]^T = \hat{k}_x$ 为拟合值。当以 x 为观测值时,最小二乘拟合的残差距离为:

* 收稿日期:2014-01-02

基金项目:国家自然科学基金项目(41204003,41161069,41304020);江西省自然科学基金项目(20132BAB216004);江西省教育厅项目(GJJ13456,KJLD12077);地理空间信息工程国家测绘地理信息局重点实验室项目(201308);东华理工大学博士科研启动基金项目(DHBK201113);东华理工大学研究生创新专项资金项目(DYCA13001)。

作者简介:王乐洋,男,1983生,博士,讲师,研究方向为大地测量反演及总体最小二乘平差的理论与应用。E-mail:wleyang@163.com。

$$\bar{d}_2 = \sqrt{(\mathbf{x}^{\text{obs}} - \mathbf{x}^{\text{fit}})^T (\mathbf{x}^{\text{obs}} - \mathbf{x}^{\text{fit}})} \quad (2)$$

式中, $\mathbf{x}^{\text{obs}} = [x_1^{\text{obs}} \cdots x_n^{\text{obs}}]^T$ 为观测值, $\mathbf{x}^{\text{fit}} = [x_1^{\text{fit}} \cdots x_n^{\text{fit}}]^T$ 为拟合值。

总体最小二乘拟合的残差距离为:

$$\bar{d}_3 = \frac{\sqrt{(\mathbf{y}^{\text{obs}} - \bar{\mathbf{y}}^{\text{fit}})^T (\mathbf{y}^{\text{obs}} - \bar{\mathbf{y}}^{\text{fit}})}}{\sqrt{1 + \bar{k}^2}} \quad (3)$$

式中, $\mathbf{y}^{\text{obs}} = [y_1^{\text{obs}} \cdots y_n^{\text{obs}}]^T$ 为观测值, $\bar{\mathbf{y}}^{\text{fit}} = [\bar{y}_1^{\text{fit}} \cdots \bar{y}_n^{\text{fit}}]^T$ 为拟合值。最小二乘和总体最小二乘拟合残差距离的关系见图 1。

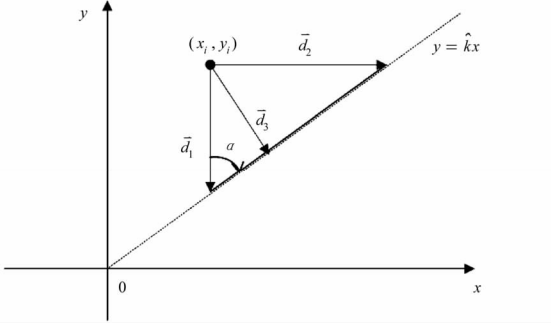


图 1 直线拟合的残差距离示意图

Fig. 1 Sketch of residual distance with linear fitting

在实际的直线拟合或参数估计问题中,以 y 为观测值的最小二乘拟合、以 x 为观测值的最小二乘拟合与总体最小二乘拟合得到的直线是不相同的,向量 \bar{d}_1 、 \bar{d}_2 和 \bar{d}_3 并不会构成图 1 所示的直角三角形。若以向量 \bar{d}_1 和向量 \bar{d}_2 为直角边构成一个直角三角形(见图 1),设其中一个角为 α ,则有:

$$\tan \alpha = \frac{\bar{d}_2}{\bar{d}_1} = \frac{\sqrt{(\mathbf{x}^{\text{obs}} - \mathbf{x}^{\text{tru}})^T (\mathbf{x}^{\text{obs}} - \mathbf{x}^{\text{tru}})}}{\sqrt{(\mathbf{y}^{\text{obs}} - \mathbf{y}^{\text{tru}})^T (\mathbf{y}^{\text{obs}} - \mathbf{y}^{\text{tru}})}} = \frac{|\bar{d}_2|}{|\bar{d}_1|} \quad (4)$$

式中, $0^\circ \leq \alpha \leq 90^\circ$, $\mathbf{y}^{\text{obs}} = [y_1^{\text{obs}} \cdots y_n^{\text{obs}}]^T$ 为 y 的观测值, $\mathbf{y}^{\text{tru}} = [y_1^{\text{tru}} \cdots y_n^{\text{tru}}]^T$ 为 y 的真值, $\mathbf{x}^{\text{obs}} = [x_1^{\text{obs}} \cdots x_n^{\text{obs}}]^T$ 为 x 的观测值, $\mathbf{x}^{\text{tru}} = [x_1^{\text{tru}} \cdots x_n^{\text{tru}}]^T$ 为 x 的真值。

在参数估计(直线拟合)时,分析如下:

1) 当 $\alpha = 0^\circ$ 时, $\bar{d}_2 = 0$, 即以 x 的误差为零,是以 y 为观测值的最小二乘拟合。

2) 当 $0^\circ < \alpha < 45^\circ$ 时, $0 < \tan \alpha = \bar{d}_2/\bar{d}_1 < 1$, 即以 y 的误差为主要误差源。在参数精度要求不高时,仍可忽略 x 的误差,以 y 为观测值进行最小二乘拟合;若要求较高,则必须使用总体最小二乘估计同时考虑 x 和 y 的误差。

3) 当 $\alpha = 45^\circ$ 时, $\bar{d}_2 = \bar{d}_1$, x 与 y 的误差相等,在进行参数估计(直线拟合)时必须同时加以考虑,即进行总体最小二乘拟合。

4) 当 $45^\circ < \alpha < 90^\circ$ 时, $1 < \tan \alpha = \bar{d}_2/\bar{d}_1 < +\infty$,

即以 $\bar{d}_2 > \bar{d}_1$, x 的误差大于 y 的误差,以 x 的误差为主要误差源。参数精度要求不高时,可忽略 y 的误差,以 x 为观测值进行最小二乘拟合;若精度要求较高,则必须使用总体最小二乘估计同时考虑 x 和 y 的误差。

5) 当 $\alpha = 90^\circ$ 时, $\bar{d}_1 = 0$, 即以 y 的误差为零,是以 x 为观测值的最小二乘拟合。

在多维情况下,若有如下线性估计函数模型:

$$\mathbf{A}\mathbf{X} \approx \mathbf{b} \quad (5)$$

式中, $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m \times n}$ ($m > n$) 为列满秩系数矩阵; $\mathbf{X} \in \mathbf{R}^{n \times 1}$ 为待估计参数; $\mathbf{b} \in \mathbf{R}^{m \times 1}$ 为观测值。则:

$$\tan \alpha = \frac{\sqrt{(\text{vec}(\mathbf{A}^{\text{obs}} - \mathbf{A}^{\text{tru}}))^T (\text{vec}(\mathbf{A}^{\text{obs}} - \mathbf{A}^{\text{tru}}))}}{\sqrt{(\mathbf{b}^{\text{obs}} - \mathbf{b}^{\text{tru}})^T (\mathbf{b}^{\text{obs}} - \mathbf{b}^{\text{tru}})}} \quad (6)$$

式中, $0^\circ \leq \alpha \leq 90^\circ$; $\mathbf{b}^{\text{obs}} = [b_1^{\text{obs}} \cdots b_n^{\text{obs}}]^T$ 为 b 的观测值, $\mathbf{b}^{\text{tru}} = [b_1^{\text{tru}} \cdots b_n^{\text{tru}}]^T$ 为 b 的真值; $\text{vec}(\cdot)$ 为矩阵拉直算子,即将矩阵按列拉直得到的列向量; \mathbf{A}^{obs} 为系数矩阵 \mathbf{A} 的观测值, \mathbf{A}^{tru} 为 \mathbf{A} 的真值。

多维情况下同样可得出上述结论。

2 总体最小二乘准则与最小二乘准则

对于式(5)的线性模型,估计准则如下。

1) 最小二乘准则:

$$\varphi_{ls} = (\mathbf{b} - \hat{\mathbf{b}})^T (\mathbf{b} - \hat{\mathbf{b}}) = \|\mathbf{b} - \hat{\mathbf{b}}\|^2 = \min \quad (7)$$

2) 数据最小二乘准则:

$$\varphi_{dls} = (\text{vec}(\mathbf{A} - \hat{\mathbf{A}}))^T (\text{vec}(\mathbf{A} - \hat{\mathbf{A}})) = \|\text{vec}(\mathbf{A} - \hat{\mathbf{A}})\|^2 = \min \quad (8)$$

3) 总体最小二乘准则:

$$\varphi_{tls} = \|\mathbf{b} - \hat{\mathbf{b}}\|^2 + \|\text{vec}(\mathbf{A} - \hat{\mathbf{A}})\|^2 = \min \quad (9)$$

上述准则的关系见图 2。当系数矩阵 \mathbf{A} 的误差逐渐减小,直到 $\|\text{vec}(\mathbf{A} - \hat{\mathbf{A}})\|^2 = 0$, 即 $\mathbf{A} - \hat{\mathbf{A}} = 0$ 时, $\|\text{vec}([\mathbf{A} \mathbf{b}] - [\hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{b}}])\|^2 = \|\mathbf{b} - \hat{\mathbf{b}}\|^2$, 总体最小二乘逐渐变为最小二乘;当观测值 \mathbf{b} 的误差逐渐减小,直到 $\|\mathbf{b} - \hat{\mathbf{b}}\|^2 = 0$, 即 $\mathbf{b} - \hat{\mathbf{b}} = 0$ 时, $\|\text{vec}([\mathbf{A} \mathbf{b}] - [\hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{b}}])\|^2 = \|\text{vec}(\mathbf{A} - \hat{\mathbf{A}})\|^2$, 总体最小二乘逐渐变为数据最小二乘。大部分线性模型的系数阵并非常数阵,而是由其他方法计算得到的或者由观测数据组成的、具有一定误差的变量矩阵,因而为了提高参数估计的精度,必须选用考虑了系数阵误差的总体最小二乘方法。当系数阵误差较小时,得到的 TLS 结果应该与 LS 相差不大^[10]。

3 TLS 适用性实验与分析

3.1 实验方案与结果

模拟直线 $y = \xi_1 + \xi_2 x$, 直线的设计模型为 $y = 10$

-x,自变量在0.00~7.40、因变量在2.60~10.00范围内共模拟10个点的数据(表1)。按表2的不同方案,在表1的x和y坐标上分别添加服从正态分布 $e_x \sim (0, \sigma_{01}^2 I)$ 和 $e_y \sim (0, \sigma_{02}^2 I)$ 的随机误差;为避免随机误差的影响,每个方案模拟计算100次取平均值(表3)。表中 $\|\Delta X\|$ 为估值与真值的差值范数, d_1 、 d_2 和 α 对应于式(4)及相应的分析。

3.2 结果分析

从方案2与方案4可以看出,无论y的误差大于x的误差,还是x的误差大于y的误差,总体最小二

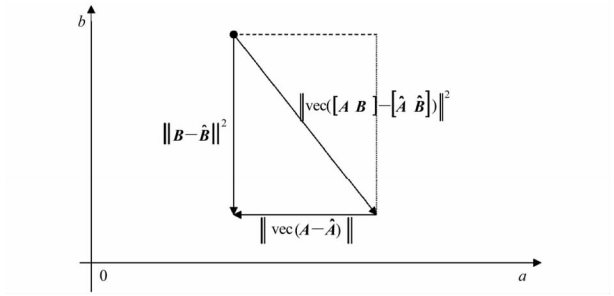


图2 最小二乘与总体最小二乘准则的几何关系
Fig.2 Geometrical relationship between LS norm and TLS norm

表1 模拟观测点真值					
Tab.1 True values of simulated data					
点号	x	y	点号	x	y
1	0	10.000 0	6	4.400 0	5.600 0
2	0.900 0	9.100 0	7	5.200 0	4.800 0
3	1.800 0	8.200 0	8	6.100 0	3.900 0
4	2.500 0	7.500 0	9	6.500 0	3.500 0
5	3.300 0	6.700 0	10	7.400 0	2.600 0

表3 各方案拟合结果								
Tab.3 Results of each scheme								
方案	方法	斜率估值	截距估值	单位权中误差估值	$\ \Delta X\ $	d_1	d_2	$\alpha/(^{\circ})$
1	LS	-1.000 938 50	10.029 676 47	0.687 314 33	0.331 653 81	2.153 677 10	0	0
	LS	-1.021 013 50	10.069 969 72	0.730 265 54	0.422 591 90			
2	DLS	-1.101 011 98	10.374 107 07	2.189 765 51	0.510 464 83	2.210 836 16	0.709 527 87	18.705 013 51
	MWTLS	-1.028 539 93	10.098 599 01	0.694 329 03	0.427 772 05			
	LS	-0.928 358 79	9.745 296 65	0.960 527 45	0.516 429 77			
3	DLS	-1.068 452 71	10.280 613 59	0.973 084 04	0.548 336 99	2.213 921 74	2.217 865 82	45.051 080 85
	MWTLS	-0.995 438 06	10.001 799 75	0.692 930 81	0.491 339 83			
	LS	-0.945 927 84	9.785 769 01	2.170 190 63	0.395 643 54			
4	DLS	-1.017 404 17	10.056 674 45	0.703 093 04	0.371 756 48	0.671 427 70	2.168 523 77	72.163 375 14
	MWTLS	-1.010 644 86	10.031 077 01	0.670 464 62	0.367 625 94			
5	DLS	-1.030 680 97	10.109 181 12	0.673 749 68	0.395 544 29	0	2.148 172 51	90

表 4 加入不同随机误差的结果														
Tab.4 Results of adding different stochastic error														
$\alpha/(^{\circ})$	σ_{01}^2	σ_{02}^2	单位权中误差估值			斜率估值			截距估值			$\ \Delta x\ $		
			LS	DLS	TLS	LS	DLS	TLS	LS	DLS	TLS	LS	DLS	TLS
0.000 0	0	0.5	0.687 3			-1.000 9			10.029 7			0.331 7		
5.052 1	0.004	0.5	0.689 6	7.521 3	0.686 9	-0.998 0	-1.069 1	-0.998 6	10.018 2	10.288 9	10.020 3	0.349 3	0.421 8	0.349 4
10.050 8	0.015	0.5	0.692 2	3.882 4	0.682 0	-1.001 1	-1.072 8	-1.003 2	10.030 0	10.303 1	10.037 9	0.348 6	0.434 4	0.349 7
15.048 4	0.03	0.5	0.687 2	2.716 9	0.667 3	-1.001 3	-1.071 6	-1.005 3	10.022 0	10.290 4	10.037 2	0.301 6	0.386 5	0.302 9
20.049 9	0.06	0.5	0.717 5	1.988 6	0.676 9	-1.009 5	-1.085 2	-1.017 7	10.017 4	10.304 9	10.048 5	0.324 3	0.416 9	0.327 7

续表 4

$\alpha/(^{\circ})$	σ_{01}^2	σ_{02}^2	单位权中误差估值			斜率估值			截距估值			$\ \Delta X\ $		
			LS	DLS	TLS	LS	DLS	TLS	LS	DLS	TLS	LS	DLS	TLS
25.050 8	0.1	0.5	0.722 8	1.582 1	0.660 0	-0.988 5	-1.068 4	-1.001 7	9.958 7	10.262 5	10.008 7	0.389 9	0.454 7	0.391 5
30.048 9	0.15	0.5	0.749 0	1.344 9	0.657 9	-0.982 1	-1.066 1	-1.001 1	9.924 2	10.244 4	9.996 4	0.408 7	0.428 5	0.398 4
35.047 8	0.25	0.5	0.816 7	1.142 6	0.669 6	-0.974 5	-1.077 2	-1.007 6	9.855 9	10.247 7	9.981 9	0.452 7	0.473 2	0.445 5
40.049 1	0.35	0.5	0.870 6	1.039 3	0.674 3	-0.952 2	-1.067 0	-0.997 8	9.834 4	10.268 8	10.007 1	0.474 3	0.545 8	0.472 9
45.051 1	0.5	0.5	0.960 5	0.973 1	0.692 9	-0.928 4	-1.068 5	-0.995 4	9.745 3	10.280 6	10.001 8	0.516 4	0.548 3	0.491 3
50.053 0	0.5	0.35	1.041 0	0.872 7	0.675 7	-0.946 7	-1.067 0	-1.016 7	9.797 0	10.255 1	10.063 3	0.452 8	0.513 8	0.459 8
55.052 1	0.5	0.25	1.181 6	0.851 4	0.697 2	-0.936 9	-1.044 2	-1.007 0	9.791 4	10.201 5	10.059 4	0.466 2	0.449 0	0.429 9
60.046 8	0.5	0.15	1.408 1	0.778 4	0.685 8	-0.946 2	-1.038 1	-1.016 5	9.787 4	10.136 9	10.054 9	0.365 9	0.365 9	0.344 6
65.051 7	0.5	0.1	1.620 2	0.739 4	0.675 4	-0.948 3	-1.028 8	-1.014 9	9.772 8	10.077 9	10.025 2	0.424 8	0.401 8	0.397 4
70.046 8	0.5	0.06	2.054 4	0.728 4	0.688 7	-0.946 5	-1.023 5	-1.014 8	9.782 9	10.074 9	10.042 1	0.393 1	0.363 3	0.358 4
75.052 1	0.5	0.03	2.677 0	0.684 5	0.664 0	-0.931 9	-0.994 9	-0.991 0	9.731 0	9.970 4	9.955 8	0.390 3	0.338 1	0.339 2
80.042 4	0.5	0.015	3.781 2	0.678 7	0.668 5	-0.939 8	-1.004 7	-1.002 7	9.772 3	10.018 2	10.010 6	0.419 3	0.353 9	0.353 9
85.054 4	0.5	0.003	8.439 4	0.673 6	0.671 6	-0.941 9	-1.005 3	-1.004 9	9.792 0	10.034 2	10.032 7	0.319 2	0.308 9	0.308 6
90.000 0	0.5	0		0.673 7			-1.030 7			10.109 2			0.395 5	

注: σ_{01}^2 、 σ_{02}^2 分别为对 x 、 y 加入服从正态分布的误差的单位权方差; $\|\Delta X\|$ 为残差范数;斜率和截距真值分别为 -1 和 10。

参 考 文 献

1

Golub G H, Van Loan C F. An analysis of the total least squares problem[J]. SIAM J Numer Anal, 1980, 17: 883 – 893.

2

Schaffrin B, Wieser A. On weighted total least-squares adjustment for linear regression[J]. Journal of Geodesy, 2008, 82(7): 415 – 421.

3

Tong Xiaohua, Jin Yanmin, Li Lingyun. An improved weighted total least squares method with applications in linear fitting and coordinate transformation[J]. Journal of Surveying Engineering, 2011, 137(4): 120 – 128.

4

Shen Yunzhong, Li Bofeng, Chen Yi. An iterative solution of weighted total least – squares adjustment[J]. Journal of Geodesy, 2011, 85(4): 229 – 238.

5

Xu Caijun, Wang Leyang, Wen Yangmao, et al. Strain rates in the Sichuan-Yunnan region based upon the total least squares heterogeneous strain model from GPS data[J]. Terr Atmos Ocean Sci, 2011, 22(2): 133 – 147.

6

王乐洋. 基于总体最小二乘的大地测量反演理论及应用研究[D]. 武汉: 武汉大学, 2011. (Wang Leyang. Research

7

on theory and application of total least squares in geodetic inversion[D]. Wuhan: Wuhan University, 2011)

7

王乐洋, 许才军, 鲁铁定. 病态加权总体最小二乘平差的岭估计解法[J]. 武汉大学学报: 信息科学版, 2010, 35(11): 1 346 – 1 350. (Wang Leyang, Xu Caijun, Lu Tieding. Ridge estimation method in ill-posed weighted total least squares adjustment[J]. Geomatics and Information Science of Wuhan University, 2010, 35(11): 1 346 – 1 350)

8

王乐洋, 许才军, 鲁铁定. 边长变化反演应变参数的总体最小二乘方法[J]. 武汉大学学报: 信息科学版, 2010, 35(2): 181 – 184. (Wang Leyang, Xu Caijun, Lu Tieding. Inversion of strain parameter using distance changes based on total least squares[J]. Geomatics and Information Science of Wuhan University, 2010, 35(2): 181 – 184)

9

王乐洋, 许才军. 附有相对权比的总体最小二乘平差[J]. 武汉大学学报: 信息科学版, 2011, 36(8): 887 – 890. (Wang Leyang, Xu Caijun. Total least-squares adjustment with weighting scaling factor[J]. Geomatics and Information Science of Wuhan University, 2011, 36(8): 887 – 890)

10

Stewart G W. On the invariance of perturbed null vectors under column scaling[J]. Numer Math, 1984, 44: 61 – 65.

(上接第 120 页)

5

程峰. 基准站变化对基于 CORS 系统的 RTK 数据质量影响[J]. 城市勘测, 2011(2): 75 – 76. (Cheng Feng. Influence of base station change on quality of RTK data based on CORS[J]. Urban Geotechnical Investigation & Surveying, 2011(2): 75 – 76)

6

Langley R, Peeters J, Bisnath S. The GPS broadcast orbits: An accuracy analysis[C]. 33rd COSPAR Scientific Assembly, Warsaw, Poland, 2000.

7

楼益栋, 戴晓蕾, 宋伟伟. 站间距对 GPS 卫星高精度钟差估计的影响分析[J]. 武汉大学学报: 信息科学版, 2011, 36(4): 397 – 400. (Lou Yidong, Dai Xiaolei, Song Weiwei. Research on the Influence of stations’ distance on high-accuracy GPS satellite clock bias estimation[J]. Geomatics and Information Science of Wuhan University, 2011, 36(4): 397 – 400)

8

Hauschild A, Montenbruck O. Kalman-filter-based GPS clock estimation for near real-time positioning[J]. GPS Solutions, 2009, 13: 173 – 182.