关于多个指标之间值的转换*

杨 自 强

（中国科学院计算中心）

ON TRANSFORMATION OF VALUES AMONG SEVERAL VARIABLES

Yang Zi-qiang

(Computing Center, Academia Sinica)

Abstract

Suppose that a research object is described by p variables, and their n observations x_{k1}, x_{k2}, …, x_{kp}, $k=1$, …, n, have been obtained. We are to find some formulae of transformation of values among several variables. This problem is proposed in quantitative transformation in many fields. For some reasons, such as the observation data are with errors or the transformation formulae are unfitting, the value x_j obtained from direct transformation (say, $x_i \to x_j$) may be different from the value x_j obtained from indirect transformation (say, $x_i \to x_l \to x_j$). In the present paper, the author employs the Generalized Model of Least Squares (GMLS)[1-4] to set up the transformation formulae which make the transformation values consistent. This algorithm has been used for a practical problem and the result is satisfactory.

§1. 引　　言

假设研究对象可以用 p 个指标来描述，记为 $x_1, x_2, \cdots, x_p$. 进一步假设这些指标之间两两存在着单值连续函数关系，当然其确切的函数形式尚未知道．今得到这 p 个指标的 n 个样本值

$$
\begin{array}{c}
x_{11}x_{12}\cdots x_{1p},\\
x_{21}x_{22}\cdots x_{2p},\\
\cdots\quad\cdots\\
x_{n1}x_{n2}\cdots x_{np},
\end{array}
$$

其中 x_{ki} 表示第 k 个样本的第 i 个指标值．要求根据这 n 个样本值建立 p 个指标值之间的转换关系式，以实现指标值之间的相互转换．例如 $x_i \to x_j$ 或 $x_i \to x_l \to x_j$.

在很多应用领域中都会提出这类问题，如各种硬度与强度值的换算．但是由于数据

* 1984 年 11 月 1 日收到.

有随机误差以及拟合的转换关系式不完全精确等原因，把 x_i 直接转换为 x_j 所得的结果一般不同于先把 x_i 转换为 x_l，然后再由 x_l 转换为 x_j。这种矛盾现象给实际应用带来麻烦，至今未见有好的处理方法。

本文将使用作者讨论过的广义最小二乘模型 (GMLS)[1-4] 来建立转换关系式。这种方法能统一处理剩余误差，使值的转换过程不再出现矛盾现象。

§2. 多个指标之间值的转换

构造一个辅助指标 y，它有 n 个分量分别与 p 指标的 n 个样本对应，其值待定，记为 $\underset{\sim}{y}=(y_1,y_2,\cdots,y_n)'$。分别建立 y 与各指标 x_i 的关系式，记为

$$y=f_i(x_i,\underset{\sim}{b}_i)+e_i,\quad i=1,2,\cdots,p.$$

函数 f_i 的形式已知，只是参数 $\underset{\sim}{b}_i$（通常是一个向量）待定，e_i 是误差。我们要求 $\underset{\sim}{b}_i$ 或 $\underset{\sim}{y}$ 满足某种约束下使得加权剩余平方和最小，即

$$\begin{cases}Q(\underset{\sim}{b},\underset{\sim}{y})=\sum_{i=1}^{p}\sum_{k=1}^{n}w_{k_i}(y_k-f_i(x_{k_i},\underset{\sim}{b}_i))^2\to\min,\\ \underset{\sim}{b}\text{ 或 }\underset{\sim}{y}\text{ 满足某种约束，}\end{cases}\tag{2.1}$$

其中 $w_{k_i}\geqslant 0$，$k=1,2,\cdots,n,i=1,2,\cdots,p$ 是已知的权系数。

为使问题容易解决，本文只讨论 $f_i(x_i,\underset{\sim}{b}_i)$ 是 x_i 的 s 阶多项式情形。这时

$$f_i(x_i,\underset{\sim}{b}_i)=\sum_{t=1}^{s}x_i^t b_{ti},\quad i=1,2,\cdots,p,\tag{2.2}$$

$\underset{\sim}{b}_i=(b_{1i},b_{2i},\cdots,b_{si})'$，并且假设各 x_i 指标已标准化为 $0\leqslant x_i\leqslant 1$。于是待定参数 $\underset{\sim}{b}_i$，$\underset{\sim}{y}$ 的元素共有 $ps+n$ 个。

模型(2.1)不同于一般的最小二乘模型，其特点是 $\underset{\sim}{y}$ 的值在计算之前未知，需要与 $\underset{\sim}{b}^i$ 一起求解。我们称为广义最小二乘模型 (GMLS)，有关模型的约束和解法将放在 §3 讨论。这里指出，如果已经解出 $\underset{\sim}{y}$ 与 $\underset{\sim}{b}_1,\underset{\sim}{b}_2,\cdots,\underset{\sim}{b}_p$，那么 y 与 p 个指标 $x_1,x_2,\cdots,x_p$ 的关系便已一一建立。各指标之间的换算都可以通过辅助指标 y 进行。例如

$$x_i\xrightarrow{\text{计算 }S\text{ 阶多项式的值}}y\xrightarrow{\text{求解 }S\text{ 次方程式的根}}x_j.$$

记

$$\vartheta_{k_i}=\sum_{t=1}^{s}x_{k_i}^t b_{ti},\quad k=1,2,\cdots,n,\quad i=1,2,\cdots,p.\tag{2.3}$$

由于数据误差和公式误差，一般而言，$\vartheta_{k_1},\vartheta_{k_2},\cdots,\vartheta_{k_p}$ 中的每一个都不等于从模型(2.1)解出的 y_k。为了迴避矛盾，今取 y_k 代替 $\vartheta_{k_1},\vartheta_{k_2},\cdots,\vartheta_{k_p}$，并从(2.3)中解出与观测值 x_{k_i} 最靠近的根 $\mathscr{X}_{k_i}$ 代替 x_{ki}。由于

$$y_k=\sum_{t=1}^{s}\mathscr{X}_{k_i}^t b_{ti},\quad k=1,2,\cdots,n,\quad i=1,2,\cdots,p,\tag{2.4}$$

因此用解 $\mathscr{X}_{k_i}$ 代替观测值 x_{k_i} 后，这批数据就不会有矛盾，其换算误差可以由 $\mathscr{X}_{k_i}$ 与 x_{k_i} 之间的差异来衡量。当发现差异过大时，可适当提高多项式的阶数 s。如果只是个别

样本差异大，还可以调整权系数 w_{k_i} 使最大偏差下降。

在 §3 中，我们将会看到，y_k 是 $\hat{y}_{k_1}, \hat{y}_{k_2}, \cdots, \hat{y}_{k_n}$ 的加权平均值，即

$$y_k = \sum_{i=1}^{p} w_{k_i}\hat{y}_{k_i} \Big/ \sum_{i=1}^{p} w_{k_i}, \quad k = 1, 2, \cdots, n. \tag{2.5}$$

因此，对于一个新的样本，如果知道了其中的 q 个指标值（$q \leqslant p$，譬如说是 $x_{01}, x_{02}, \cdots, x_{0q}$），相应的 y_0 值就是

$$y_0 = \sum_{i=1}^{q} w_{0_i}\left(\sum_{t=1}^{s} x_{0_i}^t b_{t_i}\right) \Big/ \sum_{i=1}^{q} w_{0_i}.$$

有了 y_0 之后就可以解方程得到 $\mathscr{X}_{01}, \mathscr{X}_{02}, \cdots, \mathscr{X}_{0p}$。

s 次方程式的根通常可以用牛顿法求解。因为解 $\mathscr{X}_{k_i}$ 的精度通常不要求太高，且样本值 x_{k_i} 又是一个很好的初值，迭代次数不会太多。实例计算表明，大多数情况下仅需 3～5 次迭代就能得到解。当然，在实际应用时，如果精度要求不高还可以把 p 个函数 $f_i(x_i, b_i)$ 都画在同一张图上，用作图的方法实现各指标值的转换而不一定用迭代法求根（见 §4）。

§3. 广义最小二乘模型的求解方法

为讨论方便，引入记号

$$X_i = \begin{pmatrix} x_{1i} & x_{1i}^2 & \cdots & x_{1i}^s \\ x_{2i} & x_{2i}^2 & \cdots & x_{2i}^s \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ x_{ni} & x_{ni}^2 & \cdots & x_{ni}^s \end{pmatrix},$$

$$\hat{\underset{\sim}{y}}_i = X_i \underset{\sim}{b}_i = (\hat{y}_{1i}, \hat{y}_{2i}, \cdots, \hat{y}_{ni})',$$

$$\underset{\sim}{b} = (\underset{\sim}{b}_1', \underset{\sim}{b}_2', \cdots, \underset{\sim}{b}_p')',$$

$$W_i = \mathrm{diag}(w_{1i}, w_{2i}, \cdots, w_{ni}),$$

$$W = \sum_{i=1}^{p} W_i,$$

$$W_{i_j} = W_i W^{-1} W_j.$$

（一）二次约束下的广义最小二乘模型

这时模型(2.1)变为

$$\begin{cases} Q(\underset{\sim}{b}, \underset{\sim}{y}) = \sum_{i=1}^{p} (\underset{\sim}{y} - X_i\underset{\sim}{b}_i)' W_i (\underset{\sim}{y} - X_i\underset{\sim}{b}_i) \to \min \\ \sum_{i=1}^{p} \underset{\sim}{b}_i' X_i' W_i X_i \underset{\sim}{b}_i = 1. \end{cases} \tag{3.1}$$

各 $\hat{\underset{\sim}{y}}_i$ 的加权长度之和是

$$\sum_{i=1}^{p} \hat{\underset{\sim}{y}}_i' W_i \hat{\underset{\sim}{y}}_i = \sum_{i=1}^{p} \underset{\sim}{b}_i' X_i' W_i X_i \underset{\sim}{b}_i = 1, \tag{3.2}$$

这就是约束的含义。用拉格朗日乘子法，模型(3.1)化为

$$\varphi = \sum_{i=1}^{p}(\underset{\sim}{y} - X_i\underset{\sim}{b}_i)'W_i(\underset{\sim}{y} - X_i\underset{\sim}{b}_i) + \lambda\left(\sum_{i=1}^{p}\underset{\sim}{b}_i'X_iW_iX_i\underset{\sim}{b}_i - 1\right) \to \min. \tag{3.3}$$

定理 3.1. 模型(3.1)的解为

$$\begin{cases} A\underset{\sim}{b} - \mu C\underset{\sim}{b} = 0, & (3.4) \\ \underset{\sim}{y} = W^{-1}\sum_{i=1}^{p} W_iX_i\underset{\sim}{b}_i, & (3.5) \end{cases}$$

$$Q(\underset{\sim}{b}, \underset{\sim}{y}) = \lambda = 1 - \mu, \tag{3.6}$$

其中

$$A = \begin{pmatrix} X_1'W_{11}X_1 & X_1'W_{12}X_2 & \cdots & X_1'W_{1p}X_p \\ X_2'W_{21}X_1 & X_2'W_{22}X_2 & \cdots & X_2'W_{2p}X_p \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ X_p'W_{p1}X_1 & X_p'W_{p2}X_2 & & X_p'W_{pp}X_p \end{pmatrix}, \tag{3.7}$$

$$C = \begin{pmatrix} X_1'W_1X_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & X_2'W_2X_2 & & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & & X_p'W_pX_p \end{pmatrix}. \tag{3.8}$$

它们都是 ps 维方阵。

(3.4)是广义特征值问题,由模型的意义（Q 最小），最大特征值 μ 对应的特征向量 $\underset{\sim}{b}$ 就是我们所求的多项式系数。

证明： 令 φ 对 $\underset{\sim}{y}$ 和 $\underset{\sim}{b}_i$ 的偏导数为零,得

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{p} W_i(\underset{\sim}{y} - X_i\underset{\sim}{b}_i) = 0, & (3.9) \\ X_i'W_i(\underset{\sim}{y} - X_i\underset{\sim}{b}_i) + \lambda X_i'W_iX_i\underset{\sim}{b}_i = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, p. & (3.10) \end{cases}$$

由(3.9)得

$$\sum_{i=1}^{p} W_i\underset{\sim}{y} = \sum_{i=1}^{p} W_iX_i\underset{\sim}{b}_i, \quad \underset{\sim}{y} = W^{-1}\sum_{i=1}^{p} W_iX_i\underset{\sim}{b}_i.$$

代入(3.10)得

$$X_i'W_iW^{-1}\sum_{j=1}^{p} W_jX_j\underset{\sim}{b}_j - (1-\lambda)X_i'W_iX_i\underset{\sim}{b}_i = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, p.$$

注意(3.7)、(3.8)等记号,上式就是

$$A\underset{\sim}{b} - \mu C\underset{\sim}{b} = 0.$$

下面,将证明最大特征值 μ 对应着最小的加权剩余平方和 Q. 由定义

$$Q = \sum_{i=1}^{p}(\underset{\sim}{y} - X_i\underset{\sim}{b}_i)'W_i(\underset{\sim}{y} - X_i\underset{\sim}{b}_i) = \sum_{i=1}^{p}\underset{\sim}{y}'W_i(\underset{\sim}{y} - X_i\underset{\sim}{b}_i)$$

$$- \sum_{i=1}^{p}\underset{\sim}{b}_i'X_i'W_i(\underset{\sim}{y} - X_i\underset{\sim}{b}_i) \overset{\text{见(3.9)}}{=} -\sum_{i=1}^{p}\underset{\sim}{b}_i'X_i'W_i(\underset{\sim}{y} - X_i\underset{\sim}{b}_i)$$

$$\overset{\text{见(3.10)}}{=} \lambda\sum_{i=1}^{p}\underset{\sim}{b}_i'X_i'W_iX_i\underset{\sim}{b}_i \overset{\text{见约束}}{=} \lambda = 1 - \mu \text{（证毕）}.$$

（二）线性约束下的广义最小二乘模型

这时模型(2.1)变为

$$\begin{cases} Q(\underset{\sim}{b}, \underset{\sim}{y}) = \sum_{i=1}^{p} (\underset{\sim}{y} - X_i\underset{\sim}{b}_i)' W_i (\underset{\sim}{y} - X_i\underset{\sim}{b}_i) \to \min, \\ \sum_{i=1}^{p} \underset{\sim}{b}_i' X_i' W_i \mathbf{1} = \alpha, \end{cases} \tag{3.11}$$

其中 $\mathbf{1}$ 表示元素全为 1 的 n 维向量．约束条件意味着 ϑ_{k_i} 的加权和为常数 α，即

$$\sum_{i=1}^{p} \sum_{k=1}^{n} w_{k_i} \vartheta_{k_i} = \sum_{i=1}^{p} \mathbf{1}'_i W_i \underset{\sim}{\vartheta} = \sum_{i=1}^{p} \underset{\sim}{b}_i' X_i' W_i \mathbf{1} = \alpha. \tag{3.12}$$

由拉格朗日乘子法，模型(3.11)变为

$$\varphi = \sum_{i=1}^{p} (\underset{\sim}{y} - X_i\underset{\sim}{b}_i)' W_i (\underset{\sim}{y} - X_i\underset{\sim}{b}_i) + 2\lambda \left(\sum_{i=1}^{p} \underset{\sim}{b}_i' X_i' W_i \mathbf{1} - \alpha \right) \to \min. \tag{3.13}$$

定理 3.2. 模型(3.11)的解为

$$\begin{cases} T\underset{\sim}{b} = \lambda \underset{\sim}{d}, & (3.14) \\ \underset{\sim}{y} = W^{-1} \sum_{i=1}^{p} W_i X_i \underset{\sim}{b}_i, & (3.15) \end{cases}$$

其中

$$T = C - A \quad (C, A \text{ 矩阵定义同前}), \tag{3.16}$$

$$\underset{\sim}{d} = (\mathbf{1}'W_1X_1, \mathbf{1}'W_2X_2, \cdots, \mathbf{1}'W_pX_p)'. \tag{3.17}$$

证明．证明过程类似定理 3.1．φ 对 $\underset{\sim}{y}$ 和 $\underset{\sim}{b}_i$ 微分得

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{p} W_i (\underset{\sim}{y} - X_i\underset{\sim}{b}_i) = 0, & (3.18) \\ X_i' W_i (\underset{\sim}{y} - X_i\underset{\sim}{b}_i) + \lambda X_i' W_i \mathbf{1} = 0. & (3.19) \end{cases}$$

由(3.18)得

$$\underset{\sim}{y} = W^{-1} \sum_{i=1}^{p} W_i X_i \underset{\sim}{b}_i.$$

代入(3.19)得

$$X_i' W_i \left(W^{-1} \sum_{j=1}^{p} W_j X_j \underset{\sim}{b}_j - X_i \underset{\sim}{b}_i \right) + \lambda X_i W_i \mathbf{1} = 0, \; i = 1, 2, \cdots, p. \tag{3.20}$$

根据有关各式引入的符号的含义，上式为

$$(A - C)\underset{\sim}{b} = -\lambda \underset{\sim}{d}, \quad T\underset{\sim}{b} = \underset{\sim}{d} \text{（证毕）}.$$

因为 λ 是个比例因子，所以不影响拟合效果．为求解方便，可令 α 取某特殊值以使 $\lambda = 1$．事实上，用 $\underset{\sim}{b}_i'$ 左乘(3.20)并对 i 求和，注意约束条件得

$$\sum_{i=1}^{p} \left[\underset{\sim}{b}_i' X_i' W_i \left(X_i \underset{\sim}{b}_i - W^{-1} \sum_{j=1}^{p} W_j X_j \underset{\sim}{b}_j \right) \right] = \lambda \alpha. \tag{3.21}$$

仿照定理3.1的证明，不难得

$$Q = \sum_{i=1}^{p} (\underset{\sim}{y} - X_i\underset{\sim}{b}_i)' W_i (\underset{\sim}{y} - X_i b_i) = \lambda \sum_{i=1}^{p} \underset{\sim}{b}_i' X_i' W_i \mathbf{1}$$

$$= \lambda\alpha = \sum_{i=1}^{p} \underset{\sim}{b}_i' X_i' W_i \left(X_i \underset{\sim}{b}_i - W^{-1} \sum_{j=1}^{p} W_j X_j \underset{\sim}{b}_j \right). \tag{3.22}$$

§4. 数字例子

本例是 3 个指标 15 次观测（$p = 3$，$n = 15$），数据如表 1 所示：

表 1 观测数据（$p = 3$，$n = 15$）

k	x_1	x_2	x_3
1	0.00000	0.00000	0.00000
2	0.07243	0.04024	0.12782
3	0.14200	0.08405	0.23310
4	0.21271	0.13126	0.32492
5	0.28586	0.18258	0.40801
6	0.35886	0.23838	0.48537
7	0.42671	0.29810	0.55298
8	0.50229	0.36338	0.61991
9	0.57329	0.43419	0.68113
10	0.64257	0.51091	0.74033
11	0.71471	0.59353	0.79617
12	0.78771	0.68348	0.84998
13	0.85671	0.78183	0.90178
14	0.93043	0.88555	0.95156
15	1.00000	1.00000	1.00000

表中的数据实际上是经过极差法标准化处理过的，即用

$$(x_{k_i} - x_{\min,i})/(x_{\max,i} - x_{\min,i})$$

代替原来的数据 x_{k_i}，其中

$$x_{\max,i} = \max_{1 \leqslant k \leqslant n} x_{k_i}, \quad x_{\min,i} = \min_{1 \leqslant k \leqslant n} x_{k_i}.$$

使用一般回归法建立转换方程（三阶多项式）时，各观测点的误差如表 2 所示。表中还给出了剩余平方和与最大剩余。根据一般回归法建立的方程，从 x_1 直接转换到 x_3($x_1 \to x_3$) 以及从 x_1 经过 x_2 间接转换到 x_3($x_1 \to x_2 \to x_3$) 的误差已列于表 3 中，其中最后一列是 $x_1 \to x_2 \to x_3$ 与 $x_1 \to x_3$ 所得的两个 x_3 之差，从数字看，它们的差异是很大的。以第 9 次观测值为例，直接转换（$x_1 \to x_3$）所得的 $x_3 = 0.68442$，间接转换（$x_1 \to x_2 \to x_3$）得到 $x_3 = 0.69424$，两者之差为 0.00982。此外，从表 2 也可以知道，若 $x_2 \to x_3$，所得的 $x_3 = 0.69357$，与 $x_1 \to x_3$ 所得的 x_3 之差也很大（0.00915）。如果 x_3 的观测值未知，那么在众多的 x_3 值中到底要取哪个？这确实是个很麻烦的问题。

使用等权的广义最小二乘模型（GMLS），在多项式阶数 $s = 3$，约束条件为二次的情况下得到广义特征值 $\mu = 0.99998$（剩余平方和是 $1-\mu$）。相应的特征向量为

$$\begin{array}{ccc} -0.428966 & -0.161633 & 0.008402 \\ -0.789751 & 0.272621 & -0.065468 \\ -0.214878 & -0.230591 & -0.137048. \end{array}$$

表 2　一般回归法建立转换方程的误差

k	$x_1\to x_2$	$x_1\to x_3$	$x_2\to x_1$	$x_2\to x_3$	$x_3\to x_1$	$x_3\to x_2$
1	0.00054	−0.00661	−0.00346	−0.02637	−0.00056	0.00311
2	−0.00095	0.00346	0.00129	0.00546	0.00129	−0.00389
3	0.00006	0.00646	0.00111	0.01574	−0.00014	−0.00301
4	0.00057	0.00416	0.00103	0.01562	−0.00077	−0.00049
5	−0.00024	−0.00077	0.00208	0.01012	0.00033	0.00163
6	−0.00088	−0.00291	0.00211	0.00348	−0.00011	0.00183
7	0.00204	−0.00272	−0.00238	−0.00604	−0.00143	0.00364
8	−0.00140	−0.00466	0.00038	−0.01007	0.00110	0.00161
9	−0.00082	−0.00329	−0.00097	−0.01244	0.00135	0.001[illegible]6
10	0.00159	0.00105	−0.00318	−0.00935	−0.00136	−0.00110
11	0.00035	0.00240	−0.00124	−0.00279	−0.00031	−0.00261
12	−0.00179	0.00273	0.00185	0.00576	0.00124	−0.00339
13	0.00241	0.00447	0.00022	0.01190	−0.00124	−0.00196
14	−0.00259	0.00020	0.00364	0.01035	0.00130	−0.00083
15	0.00111	−0.00394	−0.00245	−0.01137	−0.00070	0.00441
剩余平方和	0.000027	0.000209	0.000075	0.002163	0.000015	0.000098
最大剩余	0.00259	0.00661	0.00364	0.02637	0.00143	0.00441

表 3　一般回归法中直接与间接转换的差别

k	x_3	$x_1\to x_3$ 误差	$x_1\to x_2\to x_3$ 误差	前二列之差
1	0.00000	−0.00661	−0.02502	0.01841
2	0.12782	0.00346	0.00329	0.00017
3	0.23310	0.00646	0.01587	−0.00941
4	0.32492	0.00416	0.01668	−0.01252
5	0.40801	−0.00077	0.00972	−0.01049
6	0.48537	−0.00291	0.00226	−0.00517
7	0.55298	−0.00272	−0.00361	0.00089
8	0.61991	−0.00466	−0.01145	0.00679
9	0.68113	−0.00329	−0.01311	0.00982
10	0.74033	0.00105	−0.00830	0.00935
11	0.79617	0.00240	−0.00260	0.00500
12	0.84998	0.00273	0.00491	−0.00218
13	0.90178	0.00447	0.01302	−0.00855
14	0.95156	0.00020	0.00895	−0.00875
15	1.00000	0.00394	0.01059	0.00665
最大剩余		0.00661	0.02502	0.01841

通常，计算机程序算出的特征向量与我们所需的多项式系数 b 相差一个比例因子。这个比例因子不影响各指标值之间的转换。因此为了方便，我们干脆把它看作是所需的多项式系数(此处是 b_{11}, b_{21}, b_{31}; b_{12}, b_{22}, b_{32}; b_{13}, b_{23}, b_{33})，并据此计算辅助指标 y 的值。表 4

表 4 广义最小二乘模型(二次约束)解的误差

k	$\mathscr{X}_1-x_1$	$\mathscr{X}_2-x_2$	$\mathscr{X}_3-x_3$
1	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)
2	−0.00072(2)	0.00033(2)	0.00026(2)
3	0.00038(2)	−0.00022(2)	−0.00006(2)
4	0.00068(2)	−0.00041(2)	−0.00011(2)
5	−0.00026(2)	0.00000(1)	0.00029(2)
6	−0.00048(2)	0.00067(2)	0.00035(2)
7	0.00106(2)	−0.00080(2)	−0.00014(2)
8	−0.00101(2)	0.00076(2)	0.00018(2)
9	−0.00077(2)	0.00021(2)	0.00048(2)
10	0.00098(2)	−0.00053(2)	−0.00040(2)
11	0.00032(2)	−0.00018(2)	−0.00014(2)
12	−0.00072(2)	0.00055(2)	0.00023(2)
13	0.00106(2)	−0.00107(2)	−0.00022(2)
14	−0.00102(2)	0.00112(2)	0.00020(2)
15	0.00033(2)	−0.00036(2)	−0.00007(2)
最大误差	0.00106	0.00112	0.00048

表 5 指标转换值(解 $\mathscr{X}_{ki}$)及 y

k	$\mathscr{X}_1$	$\mathscr{X}_2$	$\mathscr{X}_3$	y
1	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
2	0.07171	0.04056	0.12807	−0.03159
3	0.14238	0.08383	0.23303	−0.06433
4	0.21340	0.13085	0.32481	−0.09882
5	0.28560	0.18258	0.40829	−0.13550
6	0.35837	0.23904	0.48502	−0.17410
7	0.42778	0.29731	0.55283	−0.21242
8	0.50128	0.36413	0.62009	−0.25459
9	0.57251	0.43440	0.68161	−0.29699
10	0.64355	0.51038	0.73993	−0.34076
11	0.71504	0.59335	0.79603	−0.38629
12	0.78699	0.68402	0.85021	−0.43360
13	0.85778	0.78076	0.90156	−0.48158
14	0.92941	0.88667	0.95177	−0.53156
15	1.00033	0.99963	0.99993	−0.58244

列出解 $\mathscr{X}_{ki}$ 与原观测值 x_{ki} 的差，括号内的数值表示 Newton 迭代次数 (x_{ki} 为初始值)．表 5 是解 x_{ki} (转换值),最后一列是辅助指标 y．从表 4 可以看出，广义最小二乘模型解的误差要比一般回归法好得多．当然，最重要的是广义最小二乘模型构造了一个辅助指标 y，且指标之间值的转换都通过 y 进行，从而使转换过程不产生矛盾．

在实际应用中，如果精度要求不高，可以把 p 根 $x_i \sim y$ 曲线画在同一张图上，并用作图方法实现指标值之间的转换（见图 1），即用水平线与各曲线交点的横坐标作为转换值，而不用迭代法．

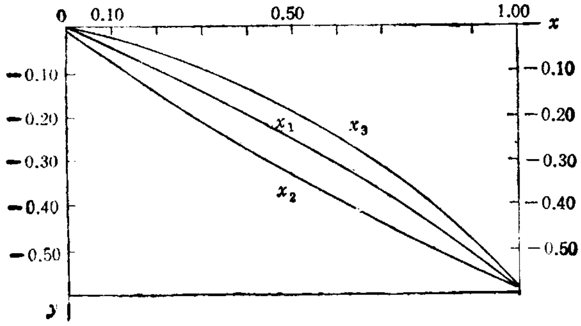

图 1　指标转换曲线

§5. 结　尾

作者已编制了上述方法的计算机程序，在实际课题的计算中都得到令人满意的结果．下面作几点补充说明：

(1) 上例中用牛顿法求转换值时，以 0.00001 为允许误差，迭代次数都不超过 2 次．对于一般问题，通常需要 3～5 次迭代．但是当 $x_i \sim y$ 曲线有拐点存在时，在拐点附近牛顿法不适用，需作处理（如改用区间分半法）．

(2) 上例中仅给出广义最小二乘模型在二次约束下的解．根据 §3 的论述，线性约束下的解归结为线代数方程组的解，远比二次约束情形需解广义特征值问题简单．计算经验表明，它们之间的结果常常没有多大差别，如上例在 $s=2$ 的情形就是如此．不过需要注意，指标值之间的换算常在关系密切的变量之间进行，而且用多项式模型，它们之间有较高的相关，从而导致计算中出现病态甚至退化现象．如上例中 $s=3$ 时的线性约束模型就因 T 矩阵退化而无法计算．在一般情况下，s 越大上述病态现象就越严重，因此不要把 s 值取得过大．

通过上述讨论可知，使用广义最小二乘模型来解决多指标之间值的转换问题是可行的．作者在使用回归模型作判别分类[1-3]以及使用星座图方法作分类[4]时，也导出了类似的广义最小二乘模型，获得了较好的效果．因此这种引进待定的辅助变量 y，并在某些约束下把 y 与参数 b 一起解出的广义最小二乘模型（GMLS）是十分有用的，应该引起我们的注意．

参　考　文　献

[1] 杨自强，用回归模型作多类判别的一种数量化方法，计算数学，**3**: 4 (1981), 340–350.

[2] 杨自强，广义最小二乘模型与判别分类，物化探电子计算技术，No. 3(1981)23–28.

[3] Yang Ziqiang, Applications of the Generalized Model of Least Squares, Kexue Tongbao, **27**:9 (1982), 930–935.

[4] 杨自强，周士波，多指标数据的星座图表示和分类，数值计算与计算机应用，**5**: 1 (1984), 54–57.