文章编号:1673-5005(2010)01-0175-05

三种度量向量组数值线性相关性方法的关系

张华仁[1,2], 李维国[1]

(1. 中国石油大学 数学与计算科学学院,山东 东营 257061;
2. 中国科学院 青岛生物能源与过程研究所,山东 青岛 266101)

摘要:讨论度量向量组的相对相关性指标、线性相关指标和最小相对范数指标。证明线性相关性指标和相对相关性指标的等价性,并建立最小相对范数指标与线性相关性指标的关系表达式。应用实例结果验证了所得结论的正确性。

关键词:数值线性相关性; Gram 行列式; 秩

中图分类号:O 241.6 **文献标志码**:A

Relationship of three methods for measuring numerical linear dependence of vectors

ZHANG Hua-ren[1,2], LI Wei-guo[1]

(1. *College of Mathematics and Computational Sciences in China University of Petroleum, Dongying* 257061, *China*;
2. *Qingdao Institute of BioEnergy and BioProcess Technology, Chinese Acedemy of Science, Qingdao* 266101, *China*)

Abstract: Relative dependence index, linear dependence index and the minimum relative norm index for measuring numerical linear dependence of vectors were researched. The equivalent property of the linear dependence index and the relative dependence index was proved and the relational expression of the minimal relative norm index and linear dependence index was founded. Numerical examples show the practicability of the results.

Key words: numerical linear dependence; Gram determinant; rank

1 问题的提出

向量组的数值线性相关性在数值计算的过程中具有非常重要的作用。基于古典的线性相关性理论在数值计算过程中存在缺陷,1978 年何旭初[1-4]首先给出了向量组数值相关性程度的一种定量刻画,分别给出了向量组的总体线性相关性和相对线性相关性的定义,讨论了两者之间的关系,并给出了它们的一系列应用。此后,何旭初所提出的数值相关性理论得到了发展,其中朱慈幼[5]将它应用在了病态线性方程组的条件预优解中,李维国等[6]提出了区间向量的数值线性相关性理论。但是,在 1996 年王泽辉[7]给出了度量向量组线性相关性程度的 ε-相(无)关的概念,并将其用于求解线性方程组的 PABS 方法当中;在 2003 年卢秀山等[8]给出了度量向量组线性相关性程度的最小相对范数法。何旭初、王泽辉和卢秀山等都对数值相关性这一重要理论给出了讨论,但出发点不同且各有特点,另外三者之间的关系至今尚不明确。

为了讨论的方便,考虑 n 个 m 维的非零向量 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ 的线性相关性问题。以它们为列构成一个 $m\times n$ 阶的矩阵 $\boldsymbol{A}$,即 $\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n]$,这里仅限定讨论 $m \geqslant n$,且假定向量组 $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n\}$ 在古典的线性相关性理论下是线性独立的,从而其子组 $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_k\}$ 也是线性独立的。

收稿日期:2009-04-19

基金项目:国家自然科学基金项目(60971132);教育部人才计划项目(K080810B)

作者简介:张华仁(1984-),男(汉族),山东昌乐人,研究实习员,硕士,主要研究方向为数值代数与数值软件。

2 三种度量向量组数值线性相关性方法

2.1 向量组的总体数值线性相关性和相对数值线性相关性

古典的线性相关性理论严密可靠，是线性代数的基础而重要的内容，但在数值计算中显现了它的缺陷。何旭初首先提出了向量组的总体数值线性相关性和相对数值线性相关性的概念。

设 $\max\limits_{1\leqslant k\leqslant n}\|\boldsymbol{a}_k\|=1$，并且 $G[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]$ 表示为向量组 $\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k\}$ 的 Gram 行列式，即 $G[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]=\det\boldsymbol{A}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_k=\det(\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}_j)$，显然 $0\leqslant G[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]\leqslant 1$，并且

1) 当且仅当向量组 $\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k\}$ 为一标准直交系时，$G[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]=1$；

2) 当且仅当向量组 $\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k\}$ 线性相关时，$G[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]=0$。

定义 1[1] （总体数值线性相关性）设 ε 为给定的正小数，$0<\varepsilon<1$，若 $G^{\frac{1}{2}}[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]\leqslant\varepsilon$，称向量组 $\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k\}$ 为 ε- 线性相关；若对某一正数 δ，$0<\delta\leqslant 1$，有 $G^{\frac{1}{2}}[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]\geqslant\delta$，称向量组 $\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k\}$ 为 δ- 线性独立。

定义 2[1] （相对数值线性相关性）假定向量组 $\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n\}$ 为古典意义下线性独立（已规范化，即 $\max\limits_{1\leqslant i\leqslant n}\|\boldsymbol{a}_i\|=1$）。规定

$$E[\boldsymbol{a}_{k+1}\mid\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]=\left\{\frac{G[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k,\boldsymbol{a}_{k+1}]}{G[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]}\right\}^{1/2}$$

为向量 $\boldsymbol{a}_{k+1}$ 关于向量组 $\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k$ 的相对数值相关性指标。设 ε 为给定的正小数，$0<\varepsilon<1$，若 $E[\boldsymbol{a}_{k+1}\mid\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]\leqslant\varepsilon$，称向量 $\boldsymbol{a}_{k+1}$ 关于向量组 $\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k\}$ 为 ε- 线性相关；若对某一正数 δ，$0<\delta\leqslant 1$，有 $E[\boldsymbol{a}_{k+1}\mid\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]\geqslant\delta$，称向量 $\boldsymbol{a}_{k+1}$ 关于向量组 $\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k\}$ 为 δ- 线性独立。

2.2 向量组的线性 ε- 相关性

向量组的线性 ε- 相关的概念由王泽辉提出，这一概念与总体数值线性相关性的概念关系密切，其定义如下：

定义 3[7] （线性 ε- 相（无）关）规定 $P[\boldsymbol{a}_{k+1}\mid\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]=\min\limits_{c_i\in R}\left\|\boldsymbol{a}_{k+1}-\sum\limits_{i=1}^{k}c_i\boldsymbol{a}_i\right\|$ 为 $\boldsymbol{a}_{k+1}$ 关于向量组 $\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k$ 之 P 线性相关指标对于给定的小正数 $\varepsilon>0$，若 $P[\boldsymbol{a}_{k+1}\mid\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]\leqslant\varepsilon$，称 $\boldsymbol{a}_{k+1}$ 与 $\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k$ 在 ε 意义下线性相关，或称 $\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_{k+1}$ 线性 ε- 相关；反之，若 $P[\boldsymbol{a}_{k+1}\mid\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]>\varepsilon$，则称 $\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_{k+1}$ 线性 ε- 无关。

2.3 最小相对范数法

卢秀山等提出了度量观测方程系数矩阵复共线性的最小相对范数法，该法用指标 Kf 来刻画向量组的线性相关程度，其中 Kf 的定义如下：矩阵 $\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n]$，其中 $\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n$ 为 m 维的列向量。按照 Gram-Schmit 正交化的方法[9-10] 将 $\boldsymbol{A}$ 按列正交化，得到矩阵 $\boldsymbol{B}=[\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2,\cdots,\boldsymbol{b}_n]$，其中 $\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2,\cdots,\boldsymbol{b}_n$ 为 m 维的列向量，且 $\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2,\cdots,\boldsymbol{b}_n$ 之间两两正交。分别求矩阵 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 的列向量的范数[11]，组成向量 $\bar{\boldsymbol{A}}=(\|\boldsymbol{a}_1\|,\ \|\boldsymbol{a}_2\|,\cdots,\ \|\boldsymbol{a}_n\|)$，$\bar{\boldsymbol{B}}=(\|\boldsymbol{b}_1\|,\ \|\boldsymbol{b}_2\|,\cdots,\ \|\boldsymbol{b}_n\|)$，令 $k_i=\dfrac{\|\boldsymbol{b}_i\|}{\|\boldsymbol{a}_i\|}$，则有向量 $\bar{\boldsymbol{K}}=(k_1,k_2,\cdots,k_n)$，$Kf$ 的定义为 $Kf=\min(k_1,k_2,\cdots,k_n)$。

由上所述，可以给出 $Kf=\dfrac{b_p}{a_p}$，Kf 的大小取决于 b_p。由 Gram-Schmit 正交化过程的特性可以判定，$\|\boldsymbol{b}_p\|$ 的大小不仅反映 $\boldsymbol{a}_p$ 与其他 $\boldsymbol{a}$ 的共线程度，而且与 $\boldsymbol{a}_p$ 的排序有关。将 $\boldsymbol{A}$ 的某一列向量 $\boldsymbol{a}_1$ 置于不同的位置，用 $\boldsymbol{a}_1$ 的序号 j 标记 A 的每一次排列 $A_{(j)}$，分别计算 $k_j=\dfrac{\|\boldsymbol{b}_j\|}{\|\boldsymbol{a}_j\|}$，则由 Gram-Schmit 正交化的特性有 $k_n=\dfrac{\|\boldsymbol{b}_n\|}{\|\boldsymbol{a}_n\|}\leqslant(k_1,k_2,\cdots,k_{n-1})$，对于不同的 $A_{(j)}$ 对应着不同的 k_n，记为 $k_{n(j)}$，因此 Kf 的实用计算公式为 $Kf=\min(k_{n(1)},k_{n(2)},\cdots,k_{n(n)})$。

取 K_{01},K_{02} 为阀值，其中 K_{01} 是 Kf 的上指标，K_{02} 是 Kf 的下指标。若 $Kf\leqslant K_{01}$，则矩阵列向量间存在严重的复共线性，称矩阵病态；若 $Kf\geqslant K_{02}$，则称矩阵为良态；若 $K_{01}\leqslant Kf\leqslant K_{02}$，是一种中间状态。值得注意的是，$K_{01}$ 和 K_{02} 的大小需视具体问题而定。

3 主要结果及应用实例

考虑向量组 $\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_{k+1}\}(k\leqslant n-1)$ 的数值线性相关性问题。在向量组规范化的前提下，由定义 1 及定义 2 可得 $0\leqslant G^{\frac{1}{2}}[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]\leqslant 1$ 和 $0\leqslant E[\boldsymbol{a}_{k+1}\mid\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]\leqslant 1$，而由 2.2 及 2.3 可直接得 $P[\boldsymbol{a}_{k+1}\mid\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]\in[0,+\infty)$ 和 $0\leqslant Kf\leqslant 1$。由于将向量组规范化并不影响古典线性相关性，故在计算 $\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_{k+1}\}$ 的 P 线性相关指标 $P[\boldsymbol{a}_{k+1}\mid\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]$ 时，可参照定义 1 和定义 2 的做法，先将 $\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_{k+1}\}$ 规范化，然后再进行相

应的计算，则 $0 \leqslant P[\boldsymbol{a}_{k+1} \mid \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_k] \leqslant 1$。为此，可以得到下面的结果。

定理 1 若向量组 $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_{k+1}\}$ 古典线性独立，则 $P[\boldsymbol{a}_{k+1} \mid \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_k] = E[\boldsymbol{a}_{k+1} \mid \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_k]$。

证明 由定义 3，

$$P[\boldsymbol{a}_{k+1} \mid \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_k] = \min_{c_i \in R} \left\| \boldsymbol{a}_{k+1} - \sum_{i=1}^{k} c_i \boldsymbol{a}_i \right\|. \tag{1}$$

对 $P[\boldsymbol{a}_{k+1} \mid \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_k]$ 的求解等价于求解线性最小二乘问题：$\min\limits_{C \in R^k} f(\boldsymbol{C})$。其中 $f(\boldsymbol{C}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{a}_{k+1} - \boldsymbol{A}_k \boldsymbol{C})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{a}_{k+1} - \boldsymbol{A}_k \boldsymbol{C})$，向量 $\boldsymbol{C} = (c_1, c_2, \cdots, c_k)^{\mathrm{T}}$，矩阵 $\boldsymbol{A}_k = (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_k)$。

求解 $\nabla f(\boldsymbol{C}) = 0$ 得：$\boldsymbol{A}_k^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A}_k \boldsymbol{C} = \boldsymbol{A}_k^{\mathrm{T}} \boldsymbol{a}_{k+1}$。因此问题(1) 的最小二乘解为

$$\boldsymbol{C} = (\boldsymbol{A}_k^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A}_k)^{-1} \boldsymbol{A}_k^{\mathrm{T}} \boldsymbol{a}_k. \tag{2}$$

其中 $\boldsymbol{A}_k^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A}_k$ 和 $\boldsymbol{A}_k^{\mathrm{T}} \boldsymbol{a}_{k+1}$ 分别为

$$\boldsymbol{A}_k^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A}_k = \begin{pmatrix} (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_1) & (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2) & \cdots & (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_k) \\ (\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_1) & (\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_2) & \cdots & (\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_k) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_1) & (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_2) & \cdots & (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_k) \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{A}_k^{\mathrm{T}} \boldsymbol{a}_{k+1} = \begin{pmatrix} (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_{k+1}) \\ (\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_{k+1}) \\ \vdots \\ (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_{k+1}) \end{pmatrix}.$$

可用 Gramer 法则来求解式(2) 中的未知量 $\boldsymbol{C}$，其分量具体如下：

$$c_j = \frac{1}{G_k} \det \begin{pmatrix} (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_1) & \cdots & (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_{j-1}) & (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_{k+1}) & (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_{j+1}) & \cdots & (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_k) \\ (\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_1) & \cdots & (\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_{j-1}) & (\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_{k+1}) & (\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_{j+1}) & \cdots & (\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_k) \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_1) & \cdots & (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_{j-1}) & (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_{k+1}) & (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_{j+1}) & \cdots & (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_k) \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{k-j} \Delta_j}{G_k}. \tag{3}$$

其中

$$\Delta_j = \det \begin{pmatrix} (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_1) & \cdots & (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_{j-1}) & (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_{j+1}) & \cdots & (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_k) & (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_{k+1}) \\ (\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_1) & \cdots & (\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_{j-1}) & (\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_{j+1}) & \cdots & (\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_k) & (\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_{k+1}) \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_1) & \cdots & (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_{j-1}) & (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_{j+1}) & \cdots & (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_k) & (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_{k+1}) \end{pmatrix}, G_k = \det(\boldsymbol{A}_k^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A}_k).$$

从而由式(1) ~ (3) 可得

$$P^2[\boldsymbol{a}_{k+1} \mid \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_k] = \|\boldsymbol{a}_{k+1} - \boldsymbol{A}_k(\boldsymbol{A}_k^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A}_k)^{-1} \boldsymbol{A}_k^{\mathrm{T}} \boldsymbol{a}_{k+1}\|^2 =$$

$$\boldsymbol{a}_{k+1}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{a}_{k+1} - \boldsymbol{a}_{k+1}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A}_k (\boldsymbol{A}_k^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A}_k)^{-1} \boldsymbol{A}_k^{\mathrm{T}} \boldsymbol{a}_{k+1} =$$

$$\frac{1}{G_k}\left((\boldsymbol{a}_{k+1}, \boldsymbol{a}_{k+1}) G_k + \sum_{j=1}^{k} (-1)^{k-j+1} (\boldsymbol{a}_j, \boldsymbol{a}_{k+1}) \Delta_j\right) =$$

$$\frac{1}{G_k} \det \begin{pmatrix} & & & (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_{k+1}) \\ & \boldsymbol{A}_k^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A}_k & & \cdots \\ & & & (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_{k+1}) \\ (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_{k+1}) & \cdots & (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_{k+1}) & (\boldsymbol{a}_{k+1}, \boldsymbol{a}_{k+1}) \end{pmatrix} =$$

$$G[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_{k+1}] / G_k = E^2[\boldsymbol{a}_{k+1} \mid \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_k].$$

又因 $P[\boldsymbol{a}_{k+1} \mid \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_k] > 0$ 及 $E[\boldsymbol{a}_{k+1} \mid \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_k] > 0$，故有

$$P[\boldsymbol{a}_{k+1} \mid \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_k] = E[\boldsymbol{a}_{k+1} \mid \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_k].$$

定理 2 若向量组 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_k$ 古典线性独立，其对应的单位化向量组为 $\boldsymbol{a}_1', \boldsymbol{a}_2', \cdots, \boldsymbol{a}_k'$，则

$$Kf = \min\{1, P[\boldsymbol{a}_2' \mid \boldsymbol{a}_1'], P[\boldsymbol{a}_3' \mid \boldsymbol{a}_1', \boldsymbol{a}_2'], \cdots, P[\boldsymbol{a}_k' \mid \boldsymbol{a}_1', \boldsymbol{a}_2', \cdots, \boldsymbol{a}_{k-1}']\},$$

若考虑 Kf 的实用计算公式，则

$$Kf = \min\{P[\boldsymbol{a}_1' \mid \boldsymbol{a}_2', \cdots, \boldsymbol{a}_{k-1}'], P[\boldsymbol{a}_2' \mid \boldsymbol{a}_1', \boldsymbol{a}_3', \cdots, \boldsymbol{a}_{k-1}'], P[\boldsymbol{a}_3' \mid \boldsymbol{a}_1', \boldsymbol{a}_2', \boldsymbol{a}_4', \cdots, \boldsymbol{a}_{k-1}'], \cdots, P[\boldsymbol{a}_k' \mid \boldsymbol{a}_1', \boldsymbol{a}_2', \cdots, \boldsymbol{a}_{k-1}']\}.$$

证明 令 $\boldsymbol{S}_{i-1} = \mathrm{span}(\boldsymbol{a}_1', \boldsymbol{a}_2', \cdots, \boldsymbol{a}_{i-1}')$，由定义知，$P[\boldsymbol{a}_i' \mid \boldsymbol{a}_1', \boldsymbol{a}_2', \cdots, \boldsymbol{a}_{i-1}']\ (i \geqslant 2)$ 是 $\boldsymbol{a}_i'$ 到子空间 S_{i-1} 的最短距离，即 $\boldsymbol{a}_i'$ 在 $\boldsymbol{S}_{i-1}$ 的直交补 $\boldsymbol{S}_{i-1}^{\perp}$ 上的投影的范数，若设向量 $\boldsymbol{y}$ 为 $\boldsymbol{a}_i'$ 在 $\boldsymbol{S}_{i-1}$ 的直交补 $\boldsymbol{S}_{i-1}^{\perp}$ 上的投影，则 $P[\boldsymbol{a}_1' \mid \boldsymbol{a}_1', \boldsymbol{a}_2', \cdots, \boldsymbol{a}_{i-1}'] = \|\boldsymbol{y}\|$.

假设对 $(\boldsymbol{a}_1', \boldsymbol{a}_2', \cdots, \boldsymbol{a}_i')$ 实施 Gram-Schmit 正交化得 $(\boldsymbol{b}_1', \boldsymbol{b}_2', \cdots, \boldsymbol{b}_i')$，其中 $\boldsymbol{b}_i'$ 有如下表示：

$$\boldsymbol{b}_i' = \boldsymbol{a}_i' - \frac{(\boldsymbol{a}_i', \boldsymbol{b}_1')}{(\boldsymbol{b}_1', \boldsymbol{b}_1')} \boldsymbol{b}_1' - \cdots - \frac{(\boldsymbol{a}_i', \boldsymbol{b}_{i-1}')}{(\boldsymbol{b}_{i-1}', \boldsymbol{b}_{i-1}')} \boldsymbol{b}_{i-1}', i \geqslant 2,$$

则 $\boldsymbol{b}_i'$ 均与 $\boldsymbol{a}_1', \boldsymbol{a}_2', \cdots, \boldsymbol{a}_{i-1}'$ 正交，即 $\boldsymbol{b}_i' \in \boldsymbol{S}_{i-1}^{\perp}$。

根据指标 Kf 的计算过程，可得

$$\boldsymbol{b}_1 = \boldsymbol{a}_1,\ \boldsymbol{b}_i = \boldsymbol{a}_i - \frac{(\boldsymbol{a}_i, \boldsymbol{b}_1)}{(\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_1)} \boldsymbol{b}_1 - \frac{(\boldsymbol{a}_i, \boldsymbol{b}_2)}{(\boldsymbol{b}_2, \boldsymbol{b}_2)} \boldsymbol{b}_2 - \cdots - \frac{(\boldsymbol{a}_i, \boldsymbol{b}_{i-1})}{(\boldsymbol{b}_{i-1}, \boldsymbol{b}_{i-1})} \boldsymbol{b}_{i-1}, i \geqslant 2.$$

从而有

$k_1 = \|b_1\| / \|a_1\| = 1$,

$k_i = \|b_i\| / \|a_i\| =$

$$\frac{\left\| a_i - \frac{(a_i,b_1)}{(b_1,b_1)}b_1 - \frac{(a_i,b_2)}{(b_2,b_2)}b_2 - \cdots - \frac{(a_i,b_{i-1})}{(b_{i-1},b_{i-1})}b_{i-1} \right\|}{\|a_i\|} =$$

$$\left\| a_i' - \frac{(a_i',b_1)}{(b_1,b_1)}b_1 - \frac{(a_i',b_2)}{(b_2,b_2)}b_2 - \cdots - \frac{(a_i',b_{i-1})}{(b_{i-1},b_{i-1})}b_{i-1} \right\| =$$

$\|b_i'\| = P[a_i' \mid a_1', a_2', \cdots, a_{i-1}'], i \geqslant 2.$

因此由 Kf 的定义,可以得到

$Kf = \min(k_1, k_2, \cdots, k_k) = \min\{1, P[a_2' \mid a_1'], P[a_3' \mid a_1', a_2'], \cdots, P[a_k' \mid a_1', a_2', \cdots, a_{k-1}']\}$.

若考虑 Kf 的实用计算公式,则

$Kf = \min\{P[a_1' \mid a_2', \cdots, a_{k-1}'], P[a_2' \mid a_1', a_3', \cdots, a_{k-1}'], P[a_3' \mid a_1', a_2', a_4', \cdots, a_{k-1}'], \cdots, P[a_k' \mid a_1', a_2', \cdots, a_{k-1}']\}$.

推论 1 若向量组 $a_1, a_2, \cdots, a_k$ 古典线性独立,其对应的单位化向量组为 $a_1', a_2', \cdots, a_k'$,则

$Kf = \min\{1, E[a_2' \mid a_1'], E[a_3' \mid a_1', a_2'], \cdots, E[a_k' \mid a_1', a_2', \cdots, a_{k-1}']\}$,

若考虑 Kf 的实用计算公式,则

$Kf = \min\{E[a_1' \mid a_2', \cdots, a_{k-1}'], E[a_2' \mid a_1', a_3', \cdots, a_{k-1}'], E[a_3' \mid a_1', a_2', a_4', \cdots, a_{k-1}'], \cdots, E[a_k' \mid a_1', a_2', \cdots, a_{k-1}']\}$.

证明 由定理 1 和定理 2 即得所需结论。

推论 2 若向量组 $a_1, a_2, \cdots, a_k$ 古典线性独立,其对应的单位化向量组为 $a_1', a_2', \cdots, a_k'$,且考虑 Kf 的实用计算公式,则度量其数值线性相关程度的线性相关指标有如下关系:

$G[a_1', a_2', \cdots, a_k'] \leqslant Kf \leqslant E[a_k' \mid a_1', a_2', \cdots, a_{k-1}'] = P[a_k' \mid a_1', a_2', \cdots, a_{k-1}']$.

证明 由定理 1 及定理 2 可直接得到

$$Kf \leqslant E[a_k' \mid a_1', a_2', \cdots, a_{k-1}'] = P[a_k' \mid a_1', a_2', \cdots, a_{k-1}']. \tag{4}$$

设存在下标 $i \in Z$,使得

$$Kf = \frac{G[a_1', a_2', \cdots, a_k']}{G[a_1', \cdots, a_{i-1}', a_{i+1}', \cdots, a_k']}.$$

由 $0 \leqslant G[a_1', \cdots, a_{i-1}', a_{i+1}', \cdots, a_k'] \leqslant 1$ 得

$$G[a_1', a_2', \cdots, a_k'] \leqslant Kf. \tag{5}$$

由式(4) 和(5) 可得

$G[a_1', a_2', \cdots, a_k'] \leqslant Kf \leqslant E[a_k' \mid a_1', a_2', \cdots, a_{k-1}'] = P[a_k' \mid a_1', a_2', \cdots, a_{k-1}']$.

例 1 已知向量

$a_1 = (19.5, 24.7, 30.7, 29.8, 19.1, 25.6, 31.4, 27.9, 22.1, 25.5)^{\mathrm{T}}$,

$a_2 = (43.1, 49.8, 51.9, 54.3, 42.2, 53.9, 58.4, 52.2, 49.9, 53.5)^{\mathrm{T}}$,

$a_3 = (29.1, 28.2, 37.0, 31.1, 30.9, 23.7, 27.6, 30.6, 23.2, 24.8)^{\mathrm{T}}$,

其对应的单位化向量组为 a_1', a_2', a_3'。考虑 Kf 的实用计算公式,比较 $G[a_1', a_2', a_3']$ 和 Kf 的大小。

解 记矩阵 $A_3 = [a_1', a_2', a_3']$,并计算其 QR 分解得

$\tilde{R} = \begin{bmatrix} R_3 \\ 0 \end{bmatrix}$,

$$R_3 = \begin{bmatrix} -1.0000 & -0.9958 & -0.9849 \\ 0 & -0.0916 & -0.0390 \\ 0 & 0 & -0.1688 \end{bmatrix}.$$

所以 $A_3^{\mathrm{T}} A_3 = (Q_3^{\mathrm{T}} A_3)^{\mathrm{T}} (Q_3^{\mathrm{T}} A_3) = R_3^{\mathrm{T}} R_3$,从而

$G[a_1', a_2', a_3'] = \det(R_3^{\mathrm{T}} R_3) = 2.3890 \times 10^{-4}$.

同理可求得

$G[a_2', a_3'] = 0.0311$; $G[a_1', a_3'] = 0.0300$; $G[a_1', a_2'] = 0.0084$.

从而由定义 1 得

$E[a_1' \mid a_2', a_3'] = 0.0876$, $E[a_2' \mid a_1', a_3'] = 0.0892$, $E[a_3' \mid a_1', a_2'] = 0.1688$.

故可得

$\min\{E[a_1' \mid a_2', a_3'], E[a_2' \mid a_1', a_3',], E[a_3' \mid a_1', a_2']\} = 0.0876$.

因此考虑 Kf 实用计算公式,可得 $Kf = 0.0876$.

故有

$$G[a_1', a_2', a_3'] \leqslant Kf.$$

例 2 考察向量$(1, -1)$ 和$(10^8, 10^8)$ 分别在 $G[a_1, a_2, \cdots, a_k]$ 和 Kf 意义下的线性相关性。

解 令 $a_1 = (1, -1)^{\mathrm{T}}, a_2 = (10^8, 10^8)^{\mathrm{T}}$,将其进行规范化得到

$$b_1 = 10^{-8}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2}\right), b_2 = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}\right).$$

分别依据 $G[a_1, a_2, \cdots, a_k]$ 和 Kf 的求解过程,可得

$$G^{\frac{1}{2}}[b_1, b_2] = 10^{-8}, Kf = 1.$$

因此按照定义 1,向量系(a_1, a_2) 接近 1 - 相关;而以 Kf 度量(a_1, a_2) 的线性相关性,向量系(a_1, a_2) 是完全独立的。由此可见,向量组的总体线性相关性既考虑了向量之间的夹角对线性相关性的影响,也考虑了向量的长度对线性相关性的影响,而 Kf 只

考虑了向量之间的夹角对线性相关性的影响。

值得注意的是,在定理 1 的讨论中,若事先假定向量组 $\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_{k+1}\}$ 已单位化,则不但结论 $P[\boldsymbol{a}_{k+1}\mid \boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]=E[\boldsymbol{a}_{k+1}\mid \boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]$ 成立,而且仍就有 $0\leqslant G^{\frac{1}{2}}[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]\leqslant 1$ 和 $0\leqslant E[\boldsymbol{a}_{k+1}\mid \boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]\leqslant 1$;若向量组 $\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_{k+1}\}$ 既没有单位化,也没有规范化,则结论 $P[\boldsymbol{a}_{k+1}\mid \boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]=E[\boldsymbol{a}_{k+1}\mid \boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]$ 依然成立,不同的是 $G^{\frac{1}{2}}[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]\in\left[0,+\infty\right)$ 和 $E[\boldsymbol{a}_{k+1}\mid \boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k]\in\left[0,+\infty\right)$.

参考文献:

[1] 何旭初. 数值相关性理论及其应用[J]. 高等学校计算数学学报,1979(1):11-19.
HE Xu-chu. Theory of numerical linear dependence and its Applications[J]. Numerical Mathematics A Journal Chinese Universities, 1979(1):11-19.

[2] 何旭初. 广义逆矩阵的连续性问题——数值相关性理论的应用[J]. 高等学校计算数学学报,1979(1):168-172.
HE Xu-chu. On the continuity of generilized inverse—application of the theory of numerical dependence[J]. Numerical Mathematics A Journal Chinese Universities, 1979(1):168-172.

[3] 何旭初. 略论奇异性和病态性及有关问题[J]. 高等学校计算数学学报,1984(1):74-85.
HE Xu-chu. On singularity, Ill-conditionness and related problems[J]. Numerical Mathematics A Journal Chinese Universities, 1984(1):74-85.

[4] 何旭初. 广义逆矩阵的基本理论和计算方法[M]. 上海:上海科学技术出版社,1985:123-143.

[5] 朱慈幼. 病态线性方程组的条件预优解法——数值相关性理论的一个应用[J]. 高等学校计算数学学报,1981(2):97-106.
ZHU Ci-you. The pre-conditioning method for solving Ill-posed linear equations—an application of the theory of numerical Dependence[J]. Numerical Mathematics A Journal Chinese Universities, 1981(2):97-106.

[6] 李维国,沈祖和. 区间向量的数值线性相关性[J]. 石油大学学报:自然科学版,1999,23(4):88-91.
LI Wei-guo, SHEN Zu-he. Numerical linear dependence of the interval vectors[J]. Journal of the University of Petroleum, China (Edition of Natural Science), 1999,23(4):88-91.

[7] 王泽辉. 线性 ε-相关及求解线性方程组的 PABS 方法[J]. 中山大学学报论丛,1996(5):189-192.
WANG Ze-hui. ε-linear correlation and PABS method for linear system[J]. Supplement to the Journal of Sun Yatsen University, 1996(5):189-192.

[8] 卢秀山,欧吉坤,宋淑丽,等. 度量观测方程系数矩阵复共线性的最小相对范数法[J]. 测绘通报,2003(6):11-13.
LU Xiu-shan, OU Ji-kun, SONG Shu-li, et al. The minimum relative norm method of measuring the multi-collinearity of the coefficient matrix of an observation equation[J]. Bulletin of Surveying and Mapping, 2003(6):11-13.

[9] 蒋正新,施国梁. 矩阵理论及其应用[M]. 北京:北京航空学院出版社,1988:24-31.

[10] 卫宗礼. 矩阵引论[M]. 西安:陕西科学技术出版社,2004:47-56.

[11] 柳重堪. 应用泛函分析[M]. 北京:国防工业出版社,1986:31-52.

(编辑　修荣荣)