

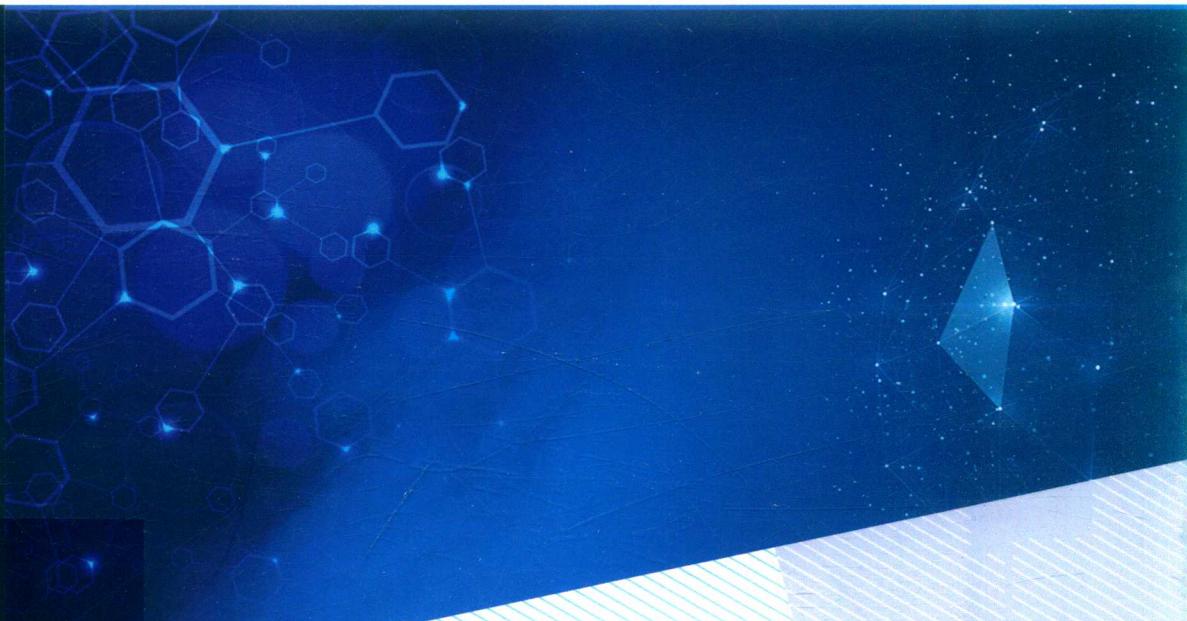


智 能

科/学/技/术/著/作/丛/书

随机系统总体最小二乘参数 估计理论与应用

孔祥玉 冯大政 著



科学出版社

智能科学技术著作丛书

随机系统总体最小二乘参数 估计理论与应用

孔祥玉 冯大政 著



科学出版社

北京

内 容 简 介

本书主要讨论随机系统总体最小二乘参数估计涉及的各种算法及其应用。全书可分为三个部分：第一部分介绍随机系统参数估计理论、最小二乘估计、偏最小二乘估计等方法；第二部分研究随机系统总体最小二乘问题和方法，重点介绍总体最小二乘递归估计、总体最小二乘迭代与随机估计、约束总体最小二乘和结构总体最小二乘估计、特征提取类总体最小二乘方法等内容；第三部分研究广义特征信息提取方法、参数估计算法的性能分析和总体最小二乘参数估计方法的应用。

本书适合电子、通信、自动控制、计算机、系统工程、模式识别、信号处理等学科教师、研究生和相关研究人员使用。

图书在版编目(CIP)数据

随机系统总体最小二乘参数估计理论与应用/孔祥玉, 冯大政著. —北京: 科学出版社, 2019. 9

(智能科学技术著作丛书)

ISBN 978-7-03-062161-0

I. ①随… II. ①孔…②冯… III. ①随机系统-最小二乘法-参数估计-估计理论-研究 IV. ①O241. 5②O211. 67

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2019)第 181915 号

责任编辑: 魏英杰 / 责任校对: 彭珍珍

责任印制: 吴兆东 / 封面设计: 铭轩堂

科学出版社出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

北京中石油彩色印刷有限责任公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2019年9月第 一 版 开本:B5(720×1000)

2019年9月第一次印刷 印张:18 3/4

字数:376 000

定价: 128.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

《智能科学技术著作丛书》编委会

名誉主编: 吴文俊

主 编: 涂序彦

副 主 编: 钟义信 史忠植 何华灿 何新贵 李德毅
蔡自兴 孙增圻 谭 民 韩力群 黄河燕

秘 书 长: 黄河燕

编 委: (按姓氏汉语拼音排序)

蔡庆生(中国科学技术大学)	蔡自兴(中南大学)
杜军平(北京邮电大学)	韩力群(北京工商大学)
何华灿(西北工业大学)	何 清(中国科学院计算技术研究所)
何新贵(北京大学)	黄河燕(北京理工大学)
黄心汉(华中科技大学)	焦李成(西安电子科技大学)
李德毅(中国人民解放军总参谋部第六十一研究所)	
李祖枢(重庆大学)	刘 宏(北京大学)
刘 清(南昌大学)	秦世引(北京航空航天大学)
邱玉辉(西南师范大学)	阮秋琦(北京交通大学)
史忠植(中国科学院计算技术研究所)	
孙增圻(清华大学)	
谭 民(中国科学院自动化研究所)	
谭铁牛(中国科学院自动化研究所)	
涂序彦(北京科技大学)	王国胤(重庆邮电学院)
王家钦(清华大学)	王万森(首都师范大学)
吴文俊(中国科学院数学与系统科学研究院)	
杨义先(北京邮电大学)	于洪珍(中国矿业大学)
张琴珠(华东师范大学)	赵沁平(北京航空航天大学)
钟义信(北京邮电大学)	庄越挺(浙江大学)

《智能科学技术著作丛书》序

“智能”是“信息”的精彩结晶，“智能科学技术”是“信息科学技术”的辉煌篇章，“智能化”是“信息化”发展的新动向、新阶段。

“智能科学技术”(intelligence science&technology, IST)是关于“广义智能”的理论方法和应用技术的综合性科学技术领域，其研究对象包括：

- “自然智能”(natural intelligence, NI)，包括“人的智能”(human intelligence, HI)及其他“生物智能”(biological intelligence, BI)。
- “人工智能”(artificial intelligence, AI)，包括“机器智能”(machine intelligence, MI)与“智能机器”(intelligent machine, IM)。
- “集成智能”(integrated intelligence, II)，即“人的智能”与“机器智能”人机互补的集成智能。
- “协同智能”(cooperative intelligence, CI)，指“个体智能”相互协调共生的群体协同智能。
- “分布智能”(distributed intelligence, DI)，如广域信息网、分散大系统的分布式智能。

“人工智能”学科自 1956 年诞生的，五十余年来，在起伏、曲折的科学征途上不断前进、发展，从狭义人工智能走向广义人工智能，从个体人工智能到群体人工智能，从集中式人工智能到分布式人工智能，在理论方法研究和应用技术开发方面都取得了重大进展。如果说当年“人工智能”学科的诞生是生物科学技术与信息科学技术、系统科学技术的一次成功的结合，那么可以认为，现在“智能科学技术”领域的兴起是在信息化、网络化时代又一次新的多学科交融。

1981 年，“中国人工智能学会”(Chinese Association for Artificial Intelligence, CAAI)正式成立，25 年来，从艰苦创业到成长壮大，从学习跟踪到自主研发，团结我国广大学者，在“人工智能”的研究开发及应用方面取得了显著的进展，促进了“智能科学技术”的发展。在华夏文化与东方哲学影响下，我国智能科学技术的研究、开发及应用，在学术思想与科学方法上，具有综合性、整体性、协调性的特色，在理论方法研究与应用技术开发方面，取得了具有创新性、开拓性的成果。“智能化”已成为当前新技术、新产品的发展方向和显著标志。

为了适时总结、交流、宣传我国学者在“智能科学技术”领域的研究开发及应用成果，中国人工智能学会与科学出版社合作编辑出版《智能科学技术著作丛书》。需要强调的是，这套丛书将优先出版那些有助于将科学技术转化为生产力以及对社会和国民经济建设有重大作用和应用前景的著作。

我们相信,有广大智能科学技术工作者的积极参与和大力支持,以及编委们的共同努力,《智能科学技术著作丛书》将为繁荣我国智能科学技术事业、增强自主创新能力、建设创新型国家做出应有的贡献。

祝《智能科学技术著作丛书》出版,特赋贺诗一首:

智能科技领域广

人机集成智能强

群体智能协同好

智能创新更辉煌

涂序彦

中国人工智能学会荣誉理事长

2005年12月18日

前　　言

众所周知,现实世界中一切随时间变化的过程往往都受到某些不确定因素的作用。这些不确定因素往往又服从某种统计规律,人们把这种具有统计规律的不确定因素称为随机因素。随机系统就是指用于描述这类受随机因素作用的时间过程的一类数学模型。随机系统理论范围极其广泛,包括随机系统分析、随机系统状态估计、随机系统辨识与参数估计、随机系统自适应及最优控制、随机系统预测、随机系统信号特征信息提取等,这些理论得到人们的广泛研究和应用。本书重点研究随机系统参数估计理论,最小二乘估计是最常用的随机系统参数估计方法。最小二乘估计有一些基础性假设,即零均值的高斯白噪声只存在于输出向量而不存在于输入数据向量;否则,最小二乘估计解从统计观点看就不再是最优的。当输入与输出数据均存在噪声时,如何得到最优估计解就成为我们要重点解决的问题。

全书共十一章。第1章绪论,概述随机系统的特点和随机系统理论的主要研究内容,简要讨论随机系统辨识与参数估计的含义、总体最小二乘方法的发展历程;第2章是最小二乘方法的基础,阐述随机系统参数估计理论,主要讨论参数估计问题、最小二乘估计、递推参数估计等经典参数估计方法;第3章研究随机系统偏最小二乘估计算法;第4章研究经典总体最小二乘问题的由来、解析解,以及问题与方法的分类情况;第5章讨论总体最小二乘各种递归估计算法;第6章讨论总体最小二乘迭代与随机估计算法;第7章研究约束总体最小二乘和结构总体最小二乘估计;第8章研究特征提取类总体最小二乘方法;第9章研究随机系统广义特征信息提取方法;第10章研究参数估计算法的性能分析;第11章介绍总体最小二乘参数估计方法的应用。

全书主要内容是孔祥玉和冯大政两人的学术研究成果,同时还参考了大量的国内外有关矩阵理论、特征提取、参数估计等方向的著作。特别参考了在上述研究领域成绩卓著的清华大学张贤达教授、四川大学章毅教授、香港中文大学徐雷教授等发表在国际权威期刊上的相关研究论文,也参考了国际上 Golub、Van Loan、Van Huffel、Dunne、Cirrincione 等几位学者的学术论文。为了知识的系统性和完整性,在部分章节中也将上述多位学者的研究成果列入书中,在此向几位学者表示衷心的感谢!

在本书出版过程中,得到了西安交通大学韩崇昭教授、曹建福教授、段战胜教授,空军工程大学魏瑞轩教授,火箭军工程大学理学院邵军勇院长、丁兴俊主任、马红光教授,山西师范大学安秋生教授等的热情推荐和帮助,在此深表感谢! 特别要

感谢火箭军工程大学国家教学名师、长江学者特聘教授、国家杰出青年科学基金获得者胡昌华教授,本书的部分研究工作是第一作者在胡昌华教授指导下从事博士后研究期间完成的。此外,还要感谢第一作者的博士研究生高迎彬、冯晓伟等同学,他们的部分研究成果也融入书中。

衷心感谢国家自然科学基金面上项目(61673387、61374120、61903375、61833016),陕西省自然科学基金面上项目(2016JM6015)等课题的资助。

限于作者水平,不足之处在所难免,敬请广大读者批评指正。

胡昌华

目 录

《智能科学技术著作丛书》序

前言

第1章 绪论	1
1.1 随机系统	1
1.2 随机系统辨识与参数估计	2
1.3 随机系统偏最小二乘估计	3
1.4 随机系统总体最小二乘估计	4
1.5 本章小结	6
参考文献	6
第2章 最小二乘估计	10
2.1 参数估计问题及其一般描述	10
2.2 最小二乘参数估计	11
2.2.1 经典最小二乘估计	11
2.2.2 加权最小二乘估计	12
2.2.3 正则化最小二乘估计	14
2.2.4 递推最小二乘估计	15
2.2.5 最小均方误差估计	16
2.3 线性差分模型最小二乘参数估计	18
2.3.1 单输入单输出系统的最小二乘参数估计	18
2.3.2 滤波型加权最小二乘估计与广义最小二乘算法	20
2.3.3 相关型加权最小二乘估计与辅助变量法	24
2.3.4 多输入输出系统的最小二乘参数估计	25
2.4 离散差分模型的递推参数估计	26
2.4.1 用于参数估计的递推最小二乘算法	26
2.4.2 渐消记忆的递推最小二乘算法	28
2.4.3 适用于有色噪声的改进递推最小二乘算法	30
2.5 本章小结	33
参考文献	33
第3章 偏最小二乘估计	34
3.1 引言	34

3.2 偏最小二乘.....	35
3.3 核偏最小二乘.....	37
3.4 改进的核偏最小二乘.....	38
3.4.1 随机梯度 Boosting 算法	39
3.4.2 核纯净信号分析	40
3.4.3 改进的核偏最小二乘方法	41
3.5 仿真实验.....	42
3.5.1 数值仿真实验	42
3.5.2 混凝土抗压强度	47
3.6 本章小结.....	53
参考文献	53
第4章 总体最小二乘问题	56
4.1 最小二乘估计方法.....	56
4.2 总体最小二乘问题.....	57
4.2.1 预备知识	58
4.2.2 正交最小二乘问题.....	58
4.2.3 基本 TLS 问题	59
4.2.4 多维 TLS 问题	62
4.2.5 特殊单维 TLS 问题	63
4.2.6 混合 OLS-TLS 问题	65
4.2.7 OLS 与 TLS 之间的代数比较	65
4.2.8 统计特性和有效性.....	66
4.2.9 基本数据最小二乘问题	68
4.3 总体最小二乘求解方法.....	69
4.3.1 部分 TLS 算法	69
4.3.2 迭代计算方法	69
4.3.3 神经元计算方法	69
4.4 本章小结.....	70
参考文献	70
第5章 总体最小二乘递归估计	73
5.1 引言.....	73
5.2 总体最小二乘递归类方法.....	74
5.2.1 Davila's FIR RTLS 算法	74
5.2.2 Davila's IIR RTLS 算法.....	77

5.3 一种新型快速 RTLS 算法	81
5.3.1 Feng's RTLS 算法	81
5.3.2 Feng's AIP 算法	92
5.4 本章小结	101
参考文献	101
第6章 总体最小二乘迭代与随机估计	105
6.1 引言	105
6.1.1 直接方法与迭代计算方法	105
6.1.2 逆迭代方法	106
6.1.3 Chebyshev 迭代	106
6.1.4 Lanczos 方法	107
6.1.5 瑞利商迭代	107
6.2 瑞利商最小化的非神经元和神经元方法	108
6.3 TLS 神经网络方法	109
6.3.1 GAO's TLS 神经元方法	109
6.3.2 TLS EXIN 神经元方法	111
6.3.3 Bruce's 混合 LS-TLS 算法	112
6.4 总体最小均方算法	117
6.4.1 总体最小均方算法的导出	117
6.4.2 算法的稳定性分析	120
6.4.3 算法的性能仿真分析	122
6.4.4 算法性能的进一步讨论	124
6.5 改进的总体最小二乘线性核及其自稳定算法	124
6.5.1 确定性连续时间系统的性能分析	127
6.5.2 随机离散时间系统的性能分析	129
6.5.3 计算机仿真实验	132
6.6 本章小结	134
参考文献	135
第7章 约束总体最小二乘和结构总体最小二乘估计	137
7.1 引言	137
7.2 约束总体最小二乘	138
7.2.1 约束总体最小二乘问题	138
7.2.2 约束总体最小二乘算法	141
7.3 结构总体最小二乘	142

7.3.1	结构总体最小二乘问题的例子	143
7.3.2	结构总体最小二乘问题的历史	145
7.3.3	结构总体最小二乘问题和求解	146
7.4	约束与结构总体最小二乘的等价性	150
7.5	一个新的总体最小二乘问题公式化表示	152
7.5.1	加权总体最小二乘问题	152
7.5.2	加权总体最小二乘算法	154
7.6	本章小结	155
	参考文献	155
第8章 特征提取类总体最小二乘方法		159
8.1	引言	159
8.2	神经网络次成分特征提取	160
8.2.1	Hopfield 网络 MCA 算法	160
8.2.2	Xu-Oja MCA 算法	166
8.2.3	MCA EXIN 算法	167
8.2.4	MCA 自稳定算法	168
8.2.5	正交 MCA 算法	170
8.3	一种自稳定的次成分分析算法	172
8.4	一种自稳定神经网络次成分特征提取	174
8.4.1	一种自稳定的 MCA 算法	174
8.4.2	算法的收敛性能	174
8.4.3	算法的发散性能	175
8.4.4	算法自稳定特性	175
8.4.5	次子空间跟踪算法	176
8.5	本章小结	182
	参考文献	182
第9章 广义特征信息提取方法		185
9.1	广义 Hermitian 特征值问题	185
9.2	广义特征信息提取神经网络算法	188
9.2.1	基于牛顿和拟牛顿法的广义特征向量提取算法	188
9.2.2	基于幂法的快速广义特征向量提取算法	189
9.2.3	基于递归最小二乘法的广义特征向量提取算法	190
9.2.4	成对广义特征向量提取算法	193
9.3	一种快速和自适应的耦合广义特征对提取分析算法	195

9.3.1 GMCA 和 GPCA 算法的耦合广义系统 ······	196
9.3.2 耦合广义系统的自适应实现 ······	199
9.3.3 收敛性能分析 ······	201
9.3.4 数值仿真例子 ······	203
9.3.5 结论 ······	209
9.4 本章小结 ······	215
参考文献 ······	215
第 10 章 参数估计算法的性能分析 ······	218
10.1 引言 ······	218
10.2 确定性连续时间系统方法 ······	219
10.2.1 随机近似逼近理论条件 ······	219
10.2.2 确定性连续时间方法 ······	219
10.2.3 李雅普诺夫函数方法 ······	222
10.3 随机性离散时间系统 ······	222
10.3.1 普通发散现象 ······	222
10.3.2 突然发散现象 ······	225
10.3.3 不稳定发散现象 ······	227
10.3.4 数值发散现象 ······	232
10.4 确定性离散时间系统 ······	233
10.4.1 新的自稳定 MCA 学习算法的提出 ······	233
10.4.2 确定性 DDT 系统的收敛性能分析 ······	233
10.4.3 确定性 DDT 系统的稳定性能分析 ······	239
10.4.4 计算机仿真实验 ······	241
10.5 不动点分析方法 ······	243
10.5.1 收缩映射理论 ······	243
10.5.2 循环神经网络体系结构中的稳定性 ······	245
10.6 本章小结 ······	255
参考文献 ······	256
第 11 章 总体最小二乘参数估计方法的应用 ······	257
11.1 引言 ······	257
11.2 经典总体最小二乘方法应用 ······	257
11.2.1 在曲线与曲面拟合中的应用 ······	257
11.2.2 在自适应滤波中的应用 ······	259
11.2.3 在频率估计中的应用 ······	261

11.2.4 在系统参数估计中的应用	264
11.2.5 在系统故障诊断中的应用	267
11.3 约束总体最小二乘方法应用	272
11.3.1 在谐波信号的超分辨恢复中的应用	272
11.3.2 约束总体最小二乘图像恢复应用	274
11.4 结构总体最小二乘方法应用	279
11.5 本章小结	282
参考文献	282

第1章 绪论

人们关于系统随机性质的理论及应用研究源自 200 多年前,高斯(Gauss)、勒让德(Legendre)等曾经做出了开拓性贡献,但是直到 20 世纪中叶,费希尔(Fisher)、科尔莫戈罗夫(Kolmogorov)和维纳(Wiener)等才建立了较完善的随机系统经典理论。20 世纪 60 年代以来,以卡尔曼(Kalman)为代表的科学家丰富和发展了随机系统理论,Anderson、Bryson、Gelb、Lewis 及 Åström 等做出了特别的贡献。这标志着现代意义上随机系统理论的建立,形成了随机系统滤波、随机控制、自校正控制等基本理论或技术^[1]。近 20 年来,随着人们对非线性系统和复杂系统的深入研究,涌现出一批关于随机系统理论的新成果。

随机系统理论范围广泛,包括随机系统分析、随机系统状态估计、随机系统辨识与参数估计、随机系统自适应及最优控制、随机系统预测、随机系统信号特征信息提取等,这些理论得到人们的广泛研究和应用。随机系统辨识与参数估计是随机系统理论的重要内容,其中最小二乘估计方法、最大似然估计方法、贝叶斯估计方法等是重要的随机系统参数估计方法。最小二乘估计方法因其计算简单而受到人们的普遍重视,然而这种方法也有不足,总体最小二乘正是为了弥补其不足而发展起来的一种参数估计方法。本书旨 在全面系统地介绍随机系统总体最小二乘方法及其应用。

1.1 随机系统

了解随机系统,需要从随机因素讲起。现实世界中一切随时间变化的过程,往往都要受到某些不确定因素的影响。例如,在工业生产过程中,用于表征该过程运行状态的变量(如温度、压力等)除了受到一些人为调节的控制量(如燃料流量、排气阀开度等)的影响,同时还受到某些不确定因素(如环境温度、外界气流等)的影响。在经济决策问题中,除了已知一些常规的量外,还存在大量不确定因素的作用,使经济系统的运行往往具有很大的未知性^[1]。如果这些不确定因素又服从某种统计规律,则把这种具有统计规律的不确定因素称为随机因素。

所谓随机系统,就是指用于描述这类受随机因素作用的时间过程的一类数学模型,这类数学模型一般是某些含随机过程的差分方程或微分方程^[1]。一般来说,任何一个随机系统都应包含用于描述系统与外部联系的输入输出对,以及用于描述随机因素作用于系统的随机干扰。设 t 时刻系统有一组输入和输出,用 $(u(t),$

$y(t)$) 表示输入输出对, 随机干扰 $\xi(t)$ 表示环境的不确定因素对系统的作用。

随机系统理论首先要研究对各类随机系统的正确描述。所谓正确描述, 一是指建立的模型与实际过程在统计意义上具有等价的输入输出关系; 二是指建立的模型满足因果性假设等逻辑关系^[1]。随机系统的描述可以分为时域描述和频域描述, 输入输出描述和状态空间描述等。在随机系统各种描述的基础上, 随机系统理论需要包括对系统在输入和随机干扰共同作用下对输出响应的研究。由于随机系统固有的不确定性, 系统的状态和输出都表现为具有某种统计特性的随机过程。因此, 一般情况下, 尝试准确测量系统在某个时刻的状态, 或精确预报系统状态和输出在未来时刻的变化都是不可能的。这样, 随机系统理论需要借助数理统计中的估计理论来研究对系统状态或输出的估计。

研究随机系统的目的在于对系统施加控制, 使之按人们预期的目标发展。随机系统应研究如何选择控制策略或控制律, 使某个目标函数在统计意义上达到最优, 这是随机最优控制理论要研究的内容^[1]。

实际上, 对实际过程的估计或控制, 都有赖于获得对该过程正确的数学描述。对于一些简单的实际过程, 这些数学模型可以根据物理定律或经济学规律来建立。但是, 绝大多数实际过程的作用机理却不能为人们精确了解, 这就需要通过实验数据来构造模型。系统辨识和参数估计就是随机系统理论中研究如何建立模型的一个分支^[1]。

除此之外, 自适应控制、随机系统仿真、随机系统检测理论及技术、动态系统状态估计的多源信息融合^[2]、随机系统信号的特征信息提取等均是随机系统理论需要研究的内容。

1.2 随机系统辨识与参数估计

确定性系统理论总假定系统的数学模型是已知的。对于随机系统而言, 所谓模型已知包含两方面的意思: 一是模型的结构和参数已知, 包括变量维数、输入输出方程或状态空间方程的具体形式及其包含的参数等; 二是所有随机量的统计特性已知, 包括初态和噪声的先验分布或均值函数、协方差函数阵等。事实上, 对于每一个实际系统, 如工程系统、生态系统、交通运输系统、社会经济系统等, 当人们着手研究时, 其数学模型往往并不是已知的, 甚至是一无所知。系统辨识就是研究如何获得必要的输入输出数据, 包括实验设计和数据采集等, 以及如何由获得的数据构造一个相对真实地反映客观对象的数学模型^[1]。

1962年, Zadeh 曾给系统辨识下了一个定义: 辨识就是在输入和输出的基础上由规定的一类系统(模型)确定一个系统(模型), 使之与被测系统等价^[3]。这个定义中所说的一类系统(模型)是指规定的连续时间模型或离散时间模型、输入输

出模型或状态空间模型、确定性模型或随机模型、线性模型或非线性模型等。模型类的规定是根据人们对实际系统的了解,以及建立模型的目的而定。规定模型类之后,再由输入输出数据按结构辨识方法确定系统的结构参数,如线性模型的阶、结构不变量等,并且用参数估计方法估计系统参数。根据定义,我们建立的模型还必须与被测系统在某种意义上等阶。

如上所述,参数估计是系统辨识的重要步骤。实际上,随机系统参数估计问题广泛存在于众多科学与工程学科,如信号处理、自动控制、系统理论等。在许多实际工程问题中,常会遇到有用的信号被噪声污染的情况,假设 $x(t)$ 是一个有用的信号, $v(t)$ 是随机噪声, $y(t) = x(t) + v(t)$ 则是有用信号与噪声叠加的量测信号。现实的问题有时是要求根据一组量测数据 $\mathbf{y}^N(t) = \{\mathbf{y}(t_1), \mathbf{y}(t_2), \dots, \mathbf{y}(t_N)\}$ 对 $x(t)$ 做出估计。通常,有用信号 $x(t)$ 可能是不随时间变化的常量,也可能是一个时间常数,或者是一个随机过程;量测信号 $y(t)$ 也不一定表现为有用信号与噪声叠加的简单关系;噪声本身既可能是平稳随机过程,也可能是非平稳随机过程;既可能是独立的随机过程,也可能非独立的随机过程。因此,出现了各种各样的参数估计算法,其中最小二乘估计方法、最大似然估计方法、贝叶斯估计方法等是重要的随机系统参数估计方法,每个方法又根据具体的使用环境出现了许多改进算法。一般情况下,最小二乘参数估计因其计算简单而受到人们的普遍重视,各种改进的最小二乘算法各有其优缺点,必须根据实际情况选择应用。最大似然参数估计方法通常具有较高的估计精度,但算法比较复杂。线性无偏最小方差估计在系统状态估计中有重要应用^[1]。

1.3 随机系统偏最小二乘估计

通常情况下,最小二乘估计可以得到随机系统数据的最小方差无偏估计,然而当数据中存在较强的相关性或者观测数据较少时,采用最小二乘估计往往得不到满意的效果。偏最小二乘(partial least square, PLS)是一种新型的多元统计数据方法^[4]。长期以来,模型式方法和认识性方法之间的界限十分清楚,而 PLS 则把它们有机地结合起来,在一个算法下可以同时实现回归建模、数据结构简化,以及两组变量之间的相关性分析,因此 PLS 又被称为第二代回归分析方法^[5]。PLS 采用降维技术可提取出能最大限度反映自变量 \mathbf{X} 和因变量 \mathbf{Y} 之间关系的隐变量,并根据这些隐变量建立回归模型。PLS 估计特别适用于数据向量具有很强的相关性,测量数据中含有噪声、变量维数很高或观测数据少于预测数据等场合^[6]。

然而,PLS 只适用于描述线性数据,对于非线性数据不能取得很好的预测效果。为了有效地应对非线性数据,很多学者提出一些解决方案。这些方案主要分