为了保证式 (3.4.2) 和式 (3.4.5) 所示的分解相等，令

$$\frac{N(z)}{A(z)}=\frac{\sum\limits_{i=0}^{p}n_i z^{-i}}{\sum\limits_{i=0}^{p}a_i z^{-i}}=\sum_{i=0}^{\infty}\rho(k)z^{-k} \tag{3.4.7}$$

然后用 $\sum\limits_{i=0}^{p}a_i z^{-i}$ 同乘式 (3.4.7) 两边，并比较相同幂次项的系数，即得到

$$n_k=\sum_{i=0}^{p}a_i\rho(k-i),\quad k=0,1,\cdots,p \tag{3.4.8}$$

综上所述，Cadzow 谱估计子的关键是确定 AR 阶数 p 和估计 AR 参数，因为系数 n_k 可以利用式 (3.4.8) 直接计算．这种方法避免了 MA 阶数的确定、MA 参数和激励白噪声方差的估计．

2. Kaveh 谱估计子

ARMA 功率谱密度表示式 (3.4.1) 也可以改写为

$$P_x(z)=\sigma^2\frac{B(z)B(z^{-1})}{A(z)A(z^{-1})}=\frac{\sum\limits_{k=-q}^{q}c_k z^{-k}}{A(z)A(z^{-1})}=\sum_{l=-\infty}^{\infty}C_x(l)z^{-l} \tag{3.4.9}$$

为了保证第二个等号成立，系数 c_k 与 MA 参数之间应该满足关系式

$$\sigma^2B(z)B(z^{-1})=\sum_{k=-q}^{q}c_k z^{-k} \tag{3.4.10}$$

由此可以看出，系数 c_k 具有对称性，即 $c_{-k}=c_k$。

从式 (3.4.9) 的第三个等式，又可以得到

$$\sum_{k=-q}^{q}c_k(k)z^{-k}=A(z)A(z^{-1})\sum_{l=-\infty}^{\infty}C_x(l)z^{-l} \tag{3.4.11}$$

注意到 $A(z)A(z^{-1})=\sum\limits_{i=0}^{p}\sum\limits_{j=0}^{p}a_i a_j^* z^{-i+j}$，并比较式 (3.4.11) 两边同幂次项的系数，可

得系数 c_k 的计算公式:

$$c_k = \sum_{i=0}^{p}\sum_{j=0}^{p} a_i a_j^* C_x(k-i+j),\quad k=0,1,\cdots,q \tag{3.4.12}$$

Kaveh 提出的 ARMA 谱估计子为

$$P_x(\omega) = \left.\frac{\sum\limits_{k=-q}^{q} c_k z^{-k}}{\left|1+\sum\limits_{i=1}^{p} a_i z^{-i}\right|^2}\right|_{z=e^{j\omega}} \tag{3.4.13}$$

显然，Kaveh 谱估计子也不需要白噪声方差 σ^2 和 MA 参数 b_i，但需要已知 MA 阶数。

3.4.2 修正 Yule-Walker 方程

在 Cadzow 谱估计子和 Kaveh 谱估计子中，都需要已知 AR 阶数和 AR 参数。在实际场合，它们可以根据观测数据进行估计。为此，需要推导 AR 参数所服从的线性方程组。

根据定理 3.2.3 知，因果 ARMA 过程 $\{x(n)\}$ 具有惟一的平稳解

$$x(n) = \sum_{i=0}^{\infty} h(i)e(n-i) \tag{3.4.14}$$

其相关函数为

$$\begin{aligned} R_x(\tau) &= \mathrm{E}\{x(n)x(n+\tau)\} \\ &= \mathrm{E}\left\{\left[\sum_{i=0}^{\infty} h(i)e(n-i)\right]\left[\sum_{k=0}^{\infty} h(k)e(n+\tau-k)\right]\right\} \\ &= \sum_{i=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{\infty} h(i)h(k)\mathrm{E}\{e(n-i)e(n+\tau-k)\} \end{aligned} \tag{3.4.15}$$

由于 $e(n)$ 是白噪声，故

$$\mathrm{E}\{e(n-i)e(n+\tau-k)\} = \begin{cases} \sigma^2, & k=\tau+i \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

将此结果代入式 (3.4.15)，即可得到

$$R_x(\tau) = \sigma^2 \sum_{i=0}^{\infty} h(i)h(i+\tau) \tag{3.4.16}$$

这一描述相关函数与冲激响应之间关系的公式是重要的，它在后面将经常用到。

我们知道，线性系统的冲激响应 $h(n)$ 就是用冲激信号 $\delta(n)$ 激励该系统时的输出响应，故由 ARMA 过程的定义式，直接有

$$\sum_{i=0}^{p} a_i h(n-i) = \sum_{k=0}^{q} b_k \delta(n-k) = b_n \tag{3.4.17}$$

于是，利用公式 (3.4.16) 和式 (3.4.17)，立即得到

$$\begin{aligned}\sum_{i=0}^{p} a_i R_x(l-i) &= \sigma^2 \sum_{k=0}^{\infty} h(k) \cdot \sum_{i=0}^{p} a_i h(k+l-i) \\ &= \sigma^2 \sum_{k=0}^{\infty} h(k) b_{k+l}\end{aligned} \tag{3.4.18}$$

注意，对于一个 ARMA(p,q) 过程而言，其 MA 参数 $b_i = 0, i > q$，故当 $l > q$ 时，式 (3.4.18) 恒等于零，即有

$$R_x(l) + \sum_{i=1}^{p} a_i R_x(l-i) = 0, \quad \forall l > q \tag{3.4.19}$$

这一法方程就是著名的修正 Yule-Walker 方程，有时简称 MYW 方程。

特别地，对于一个 AR(p) 过程，式 (3.4.19) 简化为

$$R_x(l) + \sum_{i=1}^{p} a_i R_x(l-i) = 0, \quad \forall l > 0 \tag{3.4.20}$$

这一法方程称为 Yule-Walker 方程，有时简称 YW 方程。

既然修正 Yule-Walker 方程对所有 $l > q$ 均成立，那么是不是需要求解无穷多个方程才能确定 AR 参数 $a_1, \cdots, a_p$ 呢？这个问题就是第 2 章中提到的参数惟一可辨识性问题。下面的定理给出了这一问题的答案，它是 Gersch[72] 于 1970 年解决的。

定理 3.4.1 (AR 参数的可辨识性) 若 ARMA(p,q) 模型的多项式 $A(z)$ 和 $B(z)$ 无可对消的公共因子，且 $a_p \neq 0$，则该模型的 AR 参数 $a_1, \cdots, a_p$ 可由 p 个修正 Yule-Walker 方程

$$\sum_{i=1}^{p} a_i R_x(l-i) = -R_x(l), \quad l = q+1, \cdots, q+p \tag{3.4.21}$$

惟一确定或辨识。

证明 令 $\boldsymbol{R}$ 是一个 $p\times p$ 维 Hankel 矩阵，即

$$\boldsymbol{R}=\begin{bmatrix}R_x(q+1-p) & R_x(q+2-p) & \cdots & R_x(q)\\ R_x(q+2-p) & R_x(q+3-p) & \cdots & R_x(q+1)\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\ R_x(q) & R_x(q+1) & \cdots & R_x(q+p-1)\end{bmatrix} \tag{3.4.22a}$$

并定义 $p\times 1$ 向量

$$\boldsymbol{a}=[a_p,\cdots,a_1]^{\mathrm{T}} \tag{3.4.22b}$$

$$\boldsymbol{r}=[R_x(q+1),\cdots,R_x(q+p)]^{\mathrm{T}} \tag{3.4.22c}$$

则修正 Yule-Walker 方程可以矩阵形式写成

$$\boldsymbol{R}\boldsymbol{a}=-\boldsymbol{r} \tag{3.4.23}$$

于是，本定理的证明等价于证明矩阵 $\boldsymbol{R}$ 非奇异。为此，我们考虑矩阵

$$\boldsymbol{R}_\infty \doteq \begin{bmatrix}R_x(q+1-p) & R_x(q+2-p) & \cdots & R_x(q)\\ R_x(q+2-p) & R_x(q+3-p) & \cdots & R_x(q+1)\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\ R_x(q) & R_x(q+1) & \cdots & R_x(q+p-1)\\ R_x(q+1) & R_x(q+2) & \cdots & R_x(q+p)\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\end{bmatrix}$$

首先，由修正 Yule-Walker 方程知

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}_{p+1}&=-a_1\boldsymbol{r}_p-a_2\boldsymbol{r}_{p-1}-\cdots-a_p\boldsymbol{r}_1\\ \boldsymbol{r}_{p+2}&=-a_1\boldsymbol{r}_{p+1}-a_2\boldsymbol{r}_p-\cdots-a_p\boldsymbol{r}_2\\ &\ \ \vdots\end{aligned}$$

式中 $\boldsymbol{r}_i$ 代表矩阵 $\boldsymbol{R}_\infty$ 的第 i 行向量。上式表明，矩阵 $\boldsymbol{R}_\infty$ 的第 $p+1$ 行是第一行到第 p 行的线性组合，第 $p+2$ 行是第二行到第 $p+1$ 行的线性组合，依此类推。换言之，矩阵 $\boldsymbol{R}_\infty$ 的非奇异性仅决定于最上面的 p 行。用反证法可以证明这 p 行不可能线性相关。假定行向量 $\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_p$ 线性相关。由于业已证明 $\boldsymbol{r}_{p+1}$ 与 $\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_p$ 线性相关，而 $\boldsymbol{r}_{p+2}$ 与 $\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_{p+1}$ 线性相关等，所以在这种情况下，矩阵 $\boldsymbol{R}_\infty$ 只有前面

$p-1$ 行线性独立。这意味着可以找到一个 $(p-1)\times 1$ 维参数向量 $\boldsymbol{u}=[u_1,\cdots,u_{p-1}]^{\mathrm{T}}$ 使得法方程

$$\sum_{i=1}^{p-1} u_i R_x(l-i) = -R_x(l), \quad l=q+1,q+2,\cdots$$

成立。这就导致了 $a_p=0$ 的结论，与假设条件相矛盾。这说明矩阵 $\boldsymbol{R}$ 的前面 p 行必然是线性独立的。又因为矩阵 $\boldsymbol{R}$ 是对称矩阵，所以它的 p 列也是线性独立的。综上所述，矩阵 $\boldsymbol{R}$ 是个非奇异矩阵。这就完成了本定理的证明。 ■

定理 3.4.1 告诉我们，当 ARMA(p,q) 过程 $\{x(n)\}$ 的真实 AR 阶数 p 和自相关函数 $R_x(\tau)$ 已知时，只需要求解 p 个修正 Yule-Walker 方程，便可辨识出 AR 参数。然而，在实际应用中，AR 阶数和自相关函数都是未知的。我们该如何解决这个问题呢？

不妨仍然假定自相关函数 $R_x(\tau)$ 已知，但 AR 阶数 p 未知。在这种情况下，我们将原 ARMA(p,q) 过程 $\{x(n)\}$ 视为一具有扩展 AR 阶数 $p_e \geqslant p$ 的 ARMA(p_e,q) 过程，则在 p 被 p_e 代替，并且取 $l>q_e$ (其中 $q_e \geqslant q$) 后，修正 Yule-Walker 方程式 (3.4.19) 仍然成立。不妨将它写成

$$\boldsymbol{R}_e \boldsymbol{a}_e = 0 \tag{3.4.24}$$

式中

$$\boldsymbol{R}_e = \begin{bmatrix} R_x(q_e+1) & R_x(q_e) & \cdots & R_x(q_e+1-p_e) \\ R_x(q_e+2) & R_x(q_e+1) & \cdots & R_x(q_e+2-p_e) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ R_x(q_e+M) & R_x(q_e+M-1) & \cdots & R_x(q_e+M-p_e) \end{bmatrix} \tag{3.4.25a}$$

$$\boldsymbol{a}_e = [1,a_1,\cdots,a_p,a_{p+1},\cdots,a_{p_e}]^{\mathrm{T}} \tag{3.4.25b}$$

这里，$M \gg p$。因此，式 (3.4.24) 是一超定方程组。现在的问题是矩阵 $\boldsymbol{R}_e$ 的秩是否仍然等于 p？下面的命题给出了这个问题的答案。

命题 3.4.1[31] 若 $M \geqslant p_e, p_e \geqslant p, q_e \geqslant q$，且 $q_e-p_e \geqslant q-p$，则 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{R}_e)=p$。

这一命题表明，若真实自相关函数 $R_x(\tau)$ 已知，则矩阵 $\boldsymbol{R}_e$ 的 p_e+1 个奇异值，只有 p 个不等于零，其余皆为零。因此，利用矩阵 $\boldsymbol{R}_e$ 的奇异值分解，即可确定 AR 阶数 p。

然而，在实际应用中，不仅 AR 阶数未知，而且真实自相关函数也未知，只有 N 个观测数据 $x(1),\cdots,x(N)$ 可以利用。因此，需要先计算出样本自相关函数 $\hat{R}_x(\tau)$，然后用它代替矩阵 $\boldsymbol{R}_e$ 中的元素 $R_x(\tau)$。一个自然会问的问题是：一个时间平均的样

本自相关函数 $\hat{R}_x(\tau)$ 能否用以代替真实的总体自相关函数 $R_x(\tau)=\mathrm{E}\{x(n)x^*(n-\tau)\}$ 呢？下面的二阶均方遍历定理肯定地回答了这个问题。

定理 3.4.2 (二阶均方遍历定理) 令 $\{x(n)\}$ 是一个零均值的高斯 (广义) 平稳的复过程。若真实或总体自相关是平方可求和的，即

$$\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1}|R_x(k)|^2=0 \tag{3.4.26}$$

则对于任一固定的 $\tau=0,\pm1,\pm2,\cdots$，均有

$$\lim_{N\to\infty}\mathrm{E}\{[\hat{R}_x(\tau)-R_x(\tau)]^2\}=0 \tag{3.4.27}$$

式中，$\hat{R}_x(\tau)$ 是样本自相关函数，由

$$\hat{R}_x(\tau)=\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}x(n)x^*(n-\tau) \tag{3.4.28}$$

估计。

证明 参见文献 [98]。

3.4.3 AR 阶数确定的奇异值分解方法

确定一个 ARMA 模型阶数的方法可以分成两类：信息量准则法和线性代数法。

在信息量准则法中最著名的是最终预测误差 (FPE) 法 [1] 和 AIC 准则法 [2]，它们是日本数理统计学家赤池分别于 1969 和 1974 年提出的。

FPE 准则选择使信息量

$$\mathrm{FPE}(p,q)\stackrel{\mathrm{def}}{=}\hat{\sigma}_{wp}^2\left(\frac{N+p+q+1}{N-p-q-1}\right) \tag{3.4.29}$$

最小的 (p,q) 作为 ARMA 模型的阶数，其中 $\hat{\sigma}_{wp}^2$ 是线性预测误差的方差，可按公式

$$\hat{\sigma}_{wp}^2=\sum_{i=0}^{p}\hat{a}_i\hat{R}_x(q-i) \tag{3.4.30}$$

计算。

在 AIC 准则里，ARMA 模型阶数 (p,q) 的选择准则是使信息量

$$\mathrm{AIC}(p,q)\stackrel{\mathrm{def}}{=}\ln\hat{\sigma}_{wp}^2+2(p+q)/N \tag{3.4.31}$$

最小，式中 N 为数据长度 (也叫样本容量)。显然，不论是使用 FPE 准则还是采用 AIC 准则，都需要事先用最小二乘方法拟合各种可能阶数的 ARMA 模型，然后根

据“吝啬原则”，确定一个尽可能小的阶数组合 (p,q) 作为 ARMA 模型阶数。当样本容量 N 趋于无穷大时，信息量 $\mathrm{FPE}(p,q)$ 和 $\mathrm{AIC}(p,q)$ 等价。Kashyap[99] 证明了，当 $N\to\infty$ 时，AIC 准则选择正确阶数的错误概率并不趋于零。从这个意义上讲，AIC 准则是统计非一致估计。

AIC 准则的改进形式叫做 BIC 准则，它选择 (p,q) 的原则是使信息量

$$\mathrm{BIC}(p,q)\stackrel{\text{def}}{=}\ln\hat{\sigma}_{wp}^2+(p+q)\frac{\ln N}{N}\tag{3.4.32}$$

最小。

由 Rissanen[157] 提出的另一种信息量准则是用最小描述长度（MDL）来选择 ARMA 模型阶数 (p,q)，其中信息量定义为

$$\mathrm{MDL}(p,q)\stackrel{\text{def}}{=}N\ln\hat{\sigma}_{wp}^2+(p+q)\ln N\tag{3.4.33}$$

还有一种常用的信息量准则，简称 CAT(准则自回归传递) 函数准则，它是由 Parzen 于 1974 年提出的 [145]。CAT 函数定义为

$$\mathrm{CAT}(p,q)\stackrel{\text{def}}{=}\left(\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{p}\frac{1}{\bar{\sigma}_{k,q}^2}\right)-\frac{1}{\bar{\sigma}_{p,q}^2}\tag{3.4.34}$$

式中

$$\bar{\sigma}_{k,q}^2=\frac{N}{N-k}\hat{\sigma}_{k,q}^2\tag{3.4.35}$$

阶数 (p,q) 的选择应使 $\mathrm{CAT}(p,q)$ 最小。

MDL 信息量准则是统计一致的。实验结果显示，对一个短的数据长度，AR 阶数应选择在 $N/3\sim N/2$ 范围内才会有好的结果。Ulrych 与 Clayton[192] 证明了，对于一个短的数据段，FPE, AIC 和 CAT 中没有一个工作得好。

典型的线性代数定阶法有行列式检验算法 [45]、Gram-Schmidt 正交法 [40] 和奇异值分解法。这里介绍奇异值分解方法。

奇异值分解 (SVD) 主要用于求解线性方程组。与该方程组相关联的矩阵不仅表征所期望的解的特征，而且还常常传达动态性能的信息。因此，有必要研究此特征矩阵的特性。下述定理中概括的矩阵的奇异值分解能够出色地起到这一作用。

定理 3.4.3 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $m\times n$ 的复数矩阵，则存在一个 $m\times m$ 酉矩阵 $\boldsymbol{U}$ 和 $n\times n$ 酉矩阵 $\boldsymbol{V}$，使得 $\boldsymbol{A}$ 可以分解为

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Sigma V}^{\mathrm{H}}\tag{3.4.36}$$

式中，上标 H 表示复数矩阵的共轭转置，Σ 是一个 $m\times n$ 维对角阵，其主对角线上的元素是非负的，并按下列顺序排列：

$$\sigma_{11}\geqslant\sigma_{22}\geqslant\cdots\geqslant\sigma_{hh}\geqslant 0 \tag{3.4.37}$$

式中

$$h=\min(m,n)$$

上述定理的证明可以在很多线性代数或矩阵论的著作中找到，例如参考文献[90]、[79] 和 [228] 等。

一个复数矩阵 $\boldsymbol{B}$ 称为酉矩阵，若 $\boldsymbol{B}^{-1}=\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}$。特别地，一个实的酉矩阵称为正交矩阵，即有 $\boldsymbol{B}^{-1}=\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}$。对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的主对角线上的元素 σ_{kk} 称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值，酉矩阵 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 分别叫做矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的左奇异矩阵和右奇异矩阵，而 $\boldsymbol{U}=[\boldsymbol{u}_1,\cdots,\boldsymbol{u}_m]^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{V}=[\boldsymbol{v}_1,\cdots,\boldsymbol{v}_n]^{\mathrm{T}}$ 的列向量 $\boldsymbol{u}_i$ 和 $\boldsymbol{v}_j$ 分别称作矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的左奇异向量和右奇异向量。

奇异值 σ_{kk} 包含了有关矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩的特性的有用信息。在实际应用中，常常需要求 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 在 Frobenious 范数意义下的最佳逼近 $\hat{\boldsymbol{A}}$。

保留 Σ 的前 k 个奇异值不变，同时将其他奇异值置零，并将这一矩阵记为 Σ_k，则 $\boldsymbol{\Sigma}_k$ 称为 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的秩 k 的逼近。现在，即可用

$$\boldsymbol{A}^{(k)}=\boldsymbol{U}\Sigma_k\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} \tag{3.4.38}$$

逼近矩阵 $\boldsymbol{A}$。这一逼近的质量用矩阵差 $\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}^{(k)}$ 的 Frobenious 范数

$$\left\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}^{(k)}\right\|_{\mathrm{F}}=\left\|\boldsymbol{U}\Sigma\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}-\boldsymbol{U}\Sigma_k\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\right\|_{\mathrm{F}} \tag{3.4.39}$$

衡量。利用范数的运算及注意到对于 $m\times m$ 酉矩阵 $\boldsymbol{U}$ 和 $n\times n$ 酉矩阵 $\boldsymbol{V}$，它们的范数 $\|\boldsymbol{U}\|_{\mathrm{F}}=\sqrt{m}$ 和 $\|\boldsymbol{V}\|_{\mathrm{F}}=\sqrt{n}$，故式 (3.4.39) 可简化为

$$\begin{aligned}\left\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}^{(k)}\right\|_{\mathrm{F}}&=\|\boldsymbol{U}\|_{\mathrm{F}}\cdot\|\boldsymbol{\Sigma}-\Sigma_k\|_{\mathrm{F}}\cdot\left\|\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\right\|_{\mathrm{F}}\\&=\sqrt{mn}\|\boldsymbol{\Sigma}-\Sigma_k\|_{\mathrm{F}}\\&=\sqrt{mn}\left[\sum_{i=k+1}^{\min(m,n)}\sigma_{ii}^2\right]^{1/2}\end{aligned} \tag{3.4.40}$$

这表明，矩阵 $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 逼近 $\boldsymbol{A}$ 的精确度取决于被置零的那些奇异值的平方和。显然，若 k 越大，则 $\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}^{(k)}\|_{\mathrm{F}}$ 越小，并在 $k=h=\min(m,n)$ 时最终等于零。很自然地，我们希望当 k 取某个合适值 p 时，逼近误差向量 $\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}^{(k)}$ 的 Frobenious 范数

已足够小，并且当 $k > p$ 时，该范数不再明显减小。这一 p 值称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的“有效秩”。确定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有效秩的这一方法可以用下列方法实现。定义归一化比值

$$\nu(k) = \frac{\|\boldsymbol{A}^{(k)}\|_{\mathrm{F}}}{\|\boldsymbol{A}\|_{\mathrm{F}}} = \left[\frac{\sigma_{11}^2 + \cdots + \sigma_{kk}^2}{\sigma_{11}^2 + \cdots + \sigma_{hh}^2}\right]^{1/2}, \quad 1 \leqslant k \leqslant h \tag{3.4.41}$$

并预先确定一个非常接近于 1 的阈值 (例如 0.995)。于是，当 p 是 $\nu(k)$ 大于或等于该阈值的最小整数时，就可以认为前面 p 个奇异值是“主要的” (称为主奇异值)，而后面的所有奇异值则是“次要的” (称为次奇异值)，从而将 p 确定为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的有效秩。

除了使用归一化比值 $\nu(k)$ 外，也可以利用归一化奇异值确定一个矩阵的有效秩。归一化的奇异值定义为

$$\bar{\sigma}_{kk} \stackrel{\text{def}}{=} \sigma_{kk}/\sigma_{11}, \quad 1 \leqslant k \leqslant h \tag{3.4.42}$$

显然 $\bar{\sigma}_{11} = 1$。与使用归一化比值 $\nu(k)$ 的情况相反，利用归一化奇异值确定有效秩时，选择一个接近于零的正数作阈值 (例如 0.05 等)，并把 $\bar{\sigma}_{kk}$ 大于此阈值的最大整数 k 取为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的有效秩 p。

在式 (3.4.25a) 中用样本相关函数 $\hat{R}_x(\tau)$ 代替总体相关函数 $R_x(\tau)$，得到

$$\boldsymbol{R}_e = \begin{bmatrix} \hat{R}_x(q_e+1) & \hat{R}_x(q_e) & \cdots & \hat{R}_x(q_e+1-p_e) \\ \hat{R}_x(q_e+2) & \hat{R}_x(q_e+1) & \cdots & \hat{R}_x(q_e+2-p_e) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \hat{R}_x(q_e+M) & \hat{R}_x(q_e+M-1) & \cdots & \hat{R}_x(q_e+M-p_e) \end{bmatrix} \tag{3.4.43}$$

利用归一化比值 $\nu(k)$ 或归一化奇异值 $\bar{\sigma}_{kk}$ 确定上述矩阵的有效秩，即可得到 ARMA 模型的 AR 阶数的估计。

3.4.4 AR 参数估计的总体最小二乘法

一旦 AR 阶数 p 确定，如何求出 p 个 AR 参数的估计值呢？直观的想法是利用最小二乘方法，但这会带来两个问题：其一，必须重新列出法方程组，使它只包含 p 个未知数；其二，求解 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 的最小二乘方法只认为 $\boldsymbol{b}$ 含有误差，但实际上系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ (这里为样本相关矩阵) 也含有误差。因此，一种比最小二乘法更合理的处理方法应该同时考虑 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 二者的误差或扰动。不妨令 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的误差矩阵为 $\boldsymbol{E}$，向量 $\boldsymbol{b}$ 的误差向量为 $\boldsymbol{e}$，即考虑矩阵方程

$$(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{E})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} + \boldsymbol{e} \tag{3.4.44}$$

的最小二乘解。由于考虑了总体的误差，所以这种最小二乘方法称为总体最小二乘 (total least squares, TLS) 方法。

式 (3 4.44) 可等价写作

$$\left([-\boldsymbol{b} \ \vdots \ \boldsymbol{A}] + [-\boldsymbol{e} \ \vdots \ \boldsymbol{E}]\right) \begin{bmatrix} 1 \\ \cdots \\ \boldsymbol{x} \end{bmatrix} = \boldsymbol{0} \tag{3 4.45a}$$

或

$$(\boldsymbol{B}+\boldsymbol{D})\boldsymbol{z} = \boldsymbol{0} \tag{3.4.45b}$$

式中

$$\boldsymbol{B} = [-\boldsymbol{b} \ \vdots \ \boldsymbol{A}], \quad \boldsymbol{D} = [-\boldsymbol{e} \ \vdots \ \boldsymbol{E}], \quad \boldsymbol{z} = \begin{bmatrix} 1 \\ \boldsymbol{x} \end{bmatrix}$$

这样一来，求解方程组 (3 4 44) 的 TLS 方法可以表述为：求解向量 $\boldsymbol{z}$ 使得

$$\|\boldsymbol{D}\|_{\mathrm{F}} = \min \tag{3 4.46}$$

式中

$$\|\boldsymbol{D}\|_{\mathrm{F}} = \left(\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} d_{ij}^2\right)^{1/2} \tag{3.4.47}$$

为扰动矩阵 $\boldsymbol{D}$ 的 Frobenious 范数。这里考虑超定方程的求解，即假定 $m > n+1$。

TLS 方法的基本思想是使来自 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 的噪声扰动影响最小，具体步骤是：求一具有最小范数的扰动矩阵 $\boldsymbol{D} \in R^{m\times(n+1)}$ 使得 $\boldsymbol{B}+\boldsymbol{D}$ 是非满秩的 (如果满秩，则只有平凡解 $\boldsymbol{z}=\boldsymbol{0}$)。奇异值分解可用于实现这一目的。令

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} \tag{3.4.48}$$

且奇异值仍按递减次序排列：

$$\sigma_{11} \geqslant \sigma_{22} \geqslant \cdots \geqslant \sigma_{n+1,n+1} \geqslant 0$$

令 $m\times(n+1)$ 矩阵 $\hat{\boldsymbol{B}}$ 是 $\boldsymbol{B}$ 的最佳逼近，并且矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的有效秩为 p，则由前面的讨论知，最佳逼近 $\hat{\boldsymbol{B}}$ 为

$$\hat{\boldsymbol{B}} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}_p\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} \tag{3.4.49}$$

其中 $\boldsymbol{\Sigma}_p$ 的前 p 个奇异值与矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的前 p 个奇异值相同，而其他奇异值为零。

令 $m\times(p+1)$ 维矩阵 $\hat{\boldsymbol{B}}(j,p+j)$ 是 $m\times(n+1)$ 维最佳逼近矩阵 $\hat{\boldsymbol{B}}$ 中的一个子矩阵，定义为

$$\hat{\boldsymbol{B}}(j,p+j) \overset{\text{def}}{=} \text{由 } \hat{\boldsymbol{B}} \text{ 的第 } j \text{ 列到第 } p+j \text{ 列组成的子矩阵} \tag{3.4.50}$$