arXiv:2601.02690v1 [math.OC] 6 Jan 2026

# 重新审视用于二维谱估计问题的快速牛顿求解器：完整海森矩阵的计算

**Ji Cheng 和 Bin Zhu** *

*中山大学智能系统工程学院，中国深圳市工厂路*66*号，邮编*518107*（电子邮箱：*chengj227@mail2.sysu.edu.cn*，*zhub26@mail.sysu.edu.cn*）

**摘要：**
谱估计在频域辨识及相关信号处理问题中发挥着基础性作用。本文重新探讨一个以凸优化形式表述的二维谱估计问题。具体而言，我们研究其对偶优化问题，并证明对偶函数的完整海森矩阵具有块托普利兹托普利兹结构，这与我们此前的研究结果一致。海森矩阵的这一特殊结构使得我们能够在通过牛顿法求解对偶优化问题时采用快速求逆算法；仿真结果展示了该算法优越的收敛速度。

关键词：二维谱估计、矩问题、凸优化、牛顿法、块托普利兹托普利兹矩阵、快速算法。

## 1. 引言

谱估计旨在根据有限数量的样本，在频域中推断随机过程/场的统计功率分布。它在许多领域有着广泛的应用，例如系统辨识（Ringh 等人，2015、2018；Zhu 和 Zorzi，2024b）、雷达信号处理（Engels 等人，2017；Zhu 等人，2019、2021b）、纹理图像生成（Lindquist 和 Picci，2016）以及岩土建模（Zhu 等人，2023）。

在各种谱估计方法中，有一系列研究围绕有理协方差扩展这一思想展开，参见 Byrnes 等人（1998、2000、2001）；Georgiou 和 Lindquist（2003）；Ferrante 等人（2008、2012）；Zorzi（2014b、a）；Zhu 等人（2021a）；Zhu 和 Zorzi（2023、2024a）。在这些研究中，谱估计被表述为等式约束优化问题，其约束是针对谱密度的三角矩方程，目标泛函通常是某种熵或与之相关的散度概念。这些优化问题之所以有效，是因为它们可以构造为适定问题，并且能够通过平滑地改变参数来调整解。

在近期的一项工作中，Zhu and Liu (2022) 使用 *Itakura-Saito* （IS）伪距离（Ferrante 等人，2012）作为优化中的目标泛函，研究了二维（2-D）随机场的谱估计问题。该问题通过对偶性求解，并且研究表明，对偶函数的海森矩阵具有托普利茨块托普利茨（TBT）结构（Wax 和 Kailath （1983））， 因此可以采用快速牛顿算法。然而，该论文只计算了完整海森矩阵的一个主子矩阵，因此严格来说，该算法应被视为拟牛顿 法（Kreutz-Delgado，2009年），而拟牛顿法通常比真正的牛顿法收敛得慢。这一发现促使我们开展本文的研究。事实上，我们证明，只要以适当的顺序收集对偶变量，完整海森矩阵仍保持 TBT 结构。因此，只需对厄米矩阵进行适当修改，即可使用 Wax 和 Kailath（1983）的快速求逆算法。此外，我们给出了数值示例，表明借助完整海森矩阵的快速求逆算法，牛顿法的收敛速度远快于 Zhu and Liu (2022) 中的拟牛顿法。

本文其余部分安排如下。第 2 节简要回顾以优化形式表述的二维谱估计问题。第 3 节刻画对偶目标函数完整海森矩阵的代数结构。第 4 节介绍一种用于结构化海森矩阵的快速求逆算法；第 5 节讨论牛顿方向的计算，即求解以海森矩阵为系数矩阵的线性方程。第 6 节给出仿真结果。第 7 节总结全文。

* 本研究部分获得国家自然科学基金（项目编号：62103453）和中山大学大学生创新训练计划（项目编号：20252496）的资助。

## 2. 二维谱估计问题回顾

我们关注复值、零均值、广义平稳二维随机场$\{y_{\mathbf{t}}$ 的谱估计问题：$\mathbf{t} = (t_1, t_2) \in \mathbb{Z}^2\}$。平稳性假设意味着，随机场$\sigma_{\mathbf{k}} := \mathbb{E}\, y_{\mathbf{t}+\mathbf{k}} y_{\mathbf{t}}$ 的（自）协方差仅是向量指标之差$\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^2$的函数。这里，$\overline{\ }$ $\mathbb{E}$ 表示数学期望，$z$ 表示 $z \in \mathbb{C}$的复共轭。随机场的（功率）谱密度由协方差函数 $\sigma_{\mathbf{k}}$的傅里叶变换得到，即

$$\Phi(\boldsymbol{\theta}) := \sum_{\mathbf{k}\in\mathbb{Z}^2} \sigma_{\mathbf{k}} e^{-\imath\langle \mathbf{k}, \boldsymbol{\theta}\rangle}, \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2)$，使得每个 $\theta_j,\ j = 1{,}2$ 都是区间

$$\mathbb{T} = [0, 2\pi \qquad \langle \quad \boldsymbol{\theta}\rangle = k_1\theta_1 + : )$$ 内的角频率，$k_2\theta_2$

$\mathbb{R}^2$

而 $\mathbf{k}$: 是 的内积。反过来，协方差$\sigma_{\mathbf{k}}$ 是 $\Phi(\boldsymbol{\theta})$ 的第 $\mathbf{k}$ 个傅里叶系数，即

$$\sigma_{\mathbf{k}} = \int_{\mathbb{T}^2} e^{\imath\langle \mathbf{k}, \boldsymbol{\theta}\rangle} \Phi(\boldsymbol{\theta}) \mathrm{d}m(\boldsymbol{\theta}), \tag{2}$$

其中 $\mathrm{d}m(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{(2\pi)^2}\mathrm{d}\theta_1\mathrm{d}\theta_2$ 是 $\mathbb{T}^2$ 上的归一化勒贝格测度。因此，$\Phi$ 表示随机场的频域描述，其中编码了所有二阶统计量。当随机场为高斯场时，谱密度实际上确定了该场中任意有限个随机变量的概率分布。

上述三角矩方程 (2) 在一类称为有理协方差扩展的谱估计方法中起着基础性作用。按照这一思路，目标是根据有限个协方差 $\{\sigma_{\mathbf{k}}\}_{\mathbf{k}\in\Lambda}$，重构一个有理谱密度 $\Phi$，使其成为方程 (2) 的解，其中 $\Lambda \subset \mathbb{Z}^2$ 是指标集。指标集的一种典型选择就是一个“矩形”，本文将始终采用这种选择：

$$\Lambda = \{\mathbf{k} = (k_1, k_2) \in \mathbb{Z}^2 : |k_j| \le n_j,\ j = 1, 2\}, \tag{3}$$

其中，$n_1$ 和 $n_2$ 是正整数。实际应用中，我们通常只能观测到随机场的一个有限实现（样本）

$$\{y_{\mathbf{t}} : t_j \in [0, T_j - 1] \cap \mathbb{Z},\ j = 1, 2\} \tag{4}$$

其中，正整数 $T_1$ 和 $T_2$ 表示样本量，协方差 $\{\sigma_{\mathbf{k}}\}_{\mathbf{k}\in\Lambda}$ 根据该实现使用标准公式进行估计，参见 Stoica 和 Moses (2005, p. 23) 以及 Zhu 等（2021b）。当每个正整数 $n_j$ 远小于 $T_j$时，这些估计是可靠的。

我们的具体问题设置取自 Zhu and Liu (2022)，该研究通过固定维度 $d = 2$，对 Zhu 等（2021b,a）的工作作了特化。更确切地说，我们将以下问题设为原始问题优化问题

$$\begin{aligned} &\min_{\Phi>0} D(\Phi, \Psi) := \int_{\mathbb{T}^2} \left[\log(\Phi^{-1}\Psi) + \Psi^{-1}(\Phi - \Psi)\right] \mathrm{d}m \\ &\text{s.t. } \sigma_{\mathbf{k}} = \int_{\mathbb{T}^2} e^{\imath\langle \mathbf{k}, \boldsymbol{\theta}\rangle} \Phi \,\mathrm{d}m \quad \forall \mathbf{k} \in \Lambda, \end{aligned} \tag{5}$$

其中，Itakura-Saito（IS）伪距离（Ferrante 等人，2012；Lindquist 和 Picci，2015）被用作目标泛函，而矩方程则作为等式约束纳入其中。该问题中的附加元素 $\Psi$ 称为 先验，包含一些先验 信息

这些信息与期望的解有关，因此需要根据 IS 伪距离，寻找一个尽可能接近 $\Psi$ 的 $\Phi$，并满足矩约束。请注意，在公式（5）及本文其余部分中，只要不会引起混淆，积分变量 $\boldsymbol{\theta}$ 将被省略。

原始问题 (5) 通过对偶性求解。更确切地说，对偶优化问题写为

$$\min_{\mathbf{Q}\in\mathscr{L}_+} J_\Psi(\mathbf{Q}) := \langle \mathbf{Q}, \boldsymbol{\Sigma}\rangle - \int_{\mathbb{T}^2} \log(\Psi^{-1} + Q)\mathrm{d}m \tag{6}$$

其中，对偶变量$\mathbf{Q} = \{q_{\mathbf{k}}\}_{\mathbf{k}\in\Lambda}$ 由拉格朗日乘子组成，使得$q_{-\mathbf{k}} = q_{\mathbf{k}}$ 对所有$\mathbf{k} \in \Lambda$和 $q_{\mathbf{0}} \in \mathbb{R}$均成立；

$\boldsymbol{\Sigma} = \{\sigma_{\mathbf{k}}\}_{\mathbf{k}\in\Lambda}$ 包含等式约束 (5) 中的所有协方差；$\langle$ — $\mathbf{Q}\ \ \boldsymbol{\Sigma}\rangle := \sum_{\mathbf{k}\in\Lambda} q_{\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}}$定义了两个以 $\Lambda$, $Q$ 为索引的对称多重序列之间的实值内积 $(\boldsymbol{\theta}) := \sum_{\mathbf{k}\in\Lambda} q_{\mathbf{k}} e^{-\imath\langle \mathbf{k}, \boldsymbol{\theta}\rangle}$ 是系数属于 $\mathbf{Q}$的对称三角多项式，而可行集由以下条件给出

$$\mathscr{L}_+ := \left\{\mathbf{Q} : (\Psi^{-1} + Q)(\boldsymbol{\theta}) > 0 \ \ \forall \boldsymbol{\theta} \in \mathbb{T}^2\right\}. \tag{7}$$

我们指出，$\mathbf{Q}$ 存在于一个实 维向量空间中，其维数为 $|\Lambda| = (2n_1 + 1)(2n_2 + 1)$，其中 $|\cdot|$ 表示集合的基数。对偶问题（6）是严格凸的^ Zhu 等（2021b）。给定对偶问题的最优解 $\mathbf{Q}$，可以恢复原始问题的最优解，即 ^ $\Phi = (\Psi^{-1} + \hat{Q})^{-1}$。

## 3. 完整海森矩阵的代数结构

本节将研究完整海森矩阵的适当代数结构，从而使真正的牛顿法能够求解对偶问题（6）。由于优化问题中使用了（3）中的特定指标集 $\Lambda$，我们可以将对偶变量识别为一个 $(2n_2 + 1) \times (2n_1 + 1)$ 复矩阵

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} q_{-n_1,-n_2} & \cdots & q_{0,-n_2} & \cdots & q_{n_1,-n_2} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ q_{-n_1,0} & \cdots & q_{0,0} & \cdots & q_{n_1,0} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ q_{-n_1,n_2} & \cdots & q_{0,n_2} & \cdots & q_{n_1,n_2} \end{bmatrix}. \tag{8}$$

为了恰当地表示对偶函数 $J_\Psi$的梯度和海森矩阵，下面引入通常对上述矩阵 $\mathbf{Q}$ 进行的向量化 操作，即将各列依次堆叠起来：第 1 列置于顶部，第 2 列置于第 1 列下方，第 3 列置于第 2 列下方，依此类推，并将该操作记为

$$\mathbf{q} := \mathrm{vec}(\mathbf{Q}). \tag{9}$$

向量 $\mathbf{q}$ 的大小为 $|\Lambda|$，而 $q_{k_1,\ k_2}$ 占据$(2n_2 + 1)(k_1 + n_1)$ 的第 $+ k_2 + n_2 + 1]$ 个分量。事实上，这对应于指标集 $\Lambda$ 的字典序。此外，我们用 $[\mathbf{q}]_j$ 表示 $\mathbf{q}$ 的第 $j$ 个分量。稍微滥用一下记号，我们将 (6) 中的对偶函数重写为 $J_\Psi$ $(\mathbf{q})$，并将梯度定义为一个 $|\Lambda|$ 维向量

$$\nabla J_\Psi(\mathbf{q}) := \frac{\partial J_\Psi(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} \text{ such that } [\nabla J_\Psi(\mathbf{q})]_j = \frac{\partial J_\Psi(\mathbf{q})}{\partial [\mathbf{q}]_j}. \tag{10}$$

对于每个 $j = 1, \ldots, |\Lambda|$，上述公式中的最后一项可表示为

$$\frac{\partial J_\Psi(\mathbf{q})}{\partial q_{\mathbf{k}}} = \sigma_{-\mathbf{k}} - \int_{\mathbb{T}^2} e^{-\imath\langle \mathbf{k},\, \boldsymbol{\theta}\rangle} (\Psi^{-1} + Q)^{-1} \mathrm{d}m \tag{11}$$

其中唯一的 $\mathbf{k} \in \Lambda$ 见 Zhu 等（2021b）。这称为 $J_\Psi$ 的 *Wirtinger* 导数 （H¨ormander, 1990）；在计算中，共轭对 $q_\mathbf{k}$ 和 $q_\mathbf{k}$ 被视为形式上相互独立的变量。

二阶偏导数可以用类似的方法计算，公式为

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 J_\Psi(\mathbf{q})}{\partial \overline{q_\boldsymbol{\ell}} \partial q_\mathbf{k}} &:= \frac{\partial}{\partial \overline{q_\boldsymbol{\ell}}}\left[\frac{\partial J_\Psi(\mathbf{q})}{\partial q_\mathbf{k}}\right] \\ &= \int_{\mathbb{T}^2} e^{\imath\langle \boldsymbol{\ell}-\mathbf{k}, \boldsymbol{\theta}\rangle}(\Psi^{-1}+Q)^{-2}\mathrm{d}m.\end{aligned} \tag{12}$$

因此，将二阶偏导数整理成一个 $|\Lambda| \times |\Lambda|$ 海森矩阵 矩阵是很自然的

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}) := \frac{\partial}{\partial \overline{\mathbf{q}}}\left[\frac{\partial J_\Psi(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}}\right] \text{ with } [\mathcal{H}(\mathbf{q})]_{jk} = \frac{\partial}{\partial \overline{[\mathbf{q}]_k}}\left[\frac{\partial J_\Psi(\mathbf{q})}{\partial [\mathbf{q}]_j}\right] \tag{13}$$

其中，每个元素 $[\mathcal{H}(\mathbf{q})]_{jk}$ 都对应于唯一的一对 $(\mathbf{k}\ \boldsymbol{\ell}) \in \Lambda^2$ 的式（12）。海森矩阵 $\mathcal{H}(\mathbf{q})$ 被证明是（厄米）正定的（Zhu 等人，2021b，第 3.1 节）。Zhu and Liu（2022，式（31））中描述的部分海森矩阵，实际上是$\mathcal{H}(\mathbf{q})$ 的一个大小为 $n_2+1+n_1(2n_2+1) \approx |\Lambda|/2$的右下角主子矩阵。

我们注意到，二阶偏导数取决于索引之差 $\boldsymbol{\ell}-\mathbf{k}$。因此，对于可行的 $\mathbf{q}$ 和任意 $\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^2$，我们可以定义一个复值函数

$$h_\mathbf{k}(\mathbf{q}) := \int_{\mathbb{T}^2} e^{\imath\langle \mathbf{k}, \boldsymbol{\theta}\rangle}(\Psi^{-1}+Q)^{-2}\mathrm{d}m. \tag{14}$$

因此，海森矩阵可以视为一个厄米块托普利茨矩阵

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_0 & \mathbf{R}_1 & \dots & \mathbf{R}_{2n_1} \\ \mathbf{R}_1^* & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \mathbf{R}_1 \\ \mathbf{R}_{2n_1}^* & \dots & \mathbf{R}_1^* & \mathbf{R}_0 \end{bmatrix} \tag{15a}$$

每行（及每列）包含 $2n_1+1$ 个块，其中每个块

$$\mathbf{R}_j = \begin{bmatrix} h_{j,0} & h_{j,1} & \dots & h_{j,2n_2} \\ h_{j,-1} & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & h_{j,1} \\ h_{j,-2n_2} & \dots & h_{j,-1} & h_{j,0} \end{bmatrix} \tag{15b}$$

都是大小为 $2n_2+1$ 的方形托普利茨矩阵。为简便起见，我们省略了式（15）中对 $\mathbf{q}$ 的依赖。这种 $\mathcal{H}$ 结构在 Wax 和 Kailath（1983）中被称为托普利茨块托普利茨结构，简称 TBT。因此，在实际计算中，只需计算海森矩阵的第一块行即可。

## 4. 结构化海森矩阵的快速求逆

为简化讨论，考虑 $n_1 = n_2 = n$ 的情形，其中 $n$ 为某个正整数，并令 $p = 2n+1$ 表示 (15b) 中每个块的大小。现在可以定义一个大小递增的矩阵序列 $\{\mathcal{H}_j\}_{j\geq 0}$，使得 $\mathcal{H}_0 = \mathbf{R}_0$, 并且

$$\mathcal{H}_j = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_0 & \mathbf{R}_1 & \dots & \mathbf{R}_{2j} \\ \mathbf{R}_1^* & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \mathbf{R}_1 \\ \mathbf{R}_{2j}^* & \dots & \mathbf{R}_1^* & \mathbf{R}_0 \end{bmatrix} \quad \text{for } j \geq 1. \tag{16}$$

显然，$\{\mathcal{H}_j\}_{j\geq 0}$ 具有嵌套结构，因为对于所有 $j \geq 0$，$\mathcal{H}_j$ 都是 $\mathcal{H}_{j+1}$ 的主子矩阵。下面给出更为精确的表述。定义

$$\underline{\mathbf{R}}_k := \begin{bmatrix} \mathbf{R}_k \\ \vdots \\ \mathbf{R}_1 \end{bmatrix}, \quad k = 1, 2, \dots, \tag{17}$$

以及一个大小递增的矩阵序列，每个矩阵大小为 $\{\mathcal{G}_k\}_{k\geq 0}$ × $\mathcal{G}_0 = \mathbf{R}_0$，并且

$$\mathcal{G}_k = \begin{bmatrix} \mathcal{G}_{k-1} & \underline{\mathbf{R}}_k \\ \underline{\mathbf{R}}_k^* & \mathbf{R}_0 \end{bmatrix}, \quad k = 1, 2, \dots. \tag{18}$$

于是我们有

$$\mathcal{H}_j = \mathcal{G}_{2j}, \quad j = 1, 2, \dots. \tag{19}$$

这种嵌套结构体现在（18）中。

Wax 和 Kailath（1983年）研究了 TBT 矩阵的快速求逆，其主要思想是对一系列嵌套的 TBT 矩阵 $\{\mathcal{G}_k\}_{k\geq 0}$ 进行求逆，并利用计算得到的 $\mathcal{G}_{k-1}$ 的逆来促进 $\mathcal{G}_k^{-1}$ 的计算。下面简要回顾该算法。注意，我们的 $\mathcal{H}_j$ 和 $\mathcal{G}_k$ 是厄米矩阵，这可以进一步节省计算量。此外，由于（19），我们的海森矩阵（15a）的求逆（鉴于（16），现为 $\mathcal{H}_n$）也遵循完全相同的过程。

TBT 矩阵的一个基本性质是，它们关于反对角线对称，即关于连接方阵左下角和右上角的对角线对称。这种性质在 Wax 和 Kailath （1983 年，引理 1）中称为反对称性，其数学表达式为

$$\mathcal{G}_k = J_{p,k+1}\mathcal{G}_k^\top J_{p,k+1}, \tag{20}$$

其中 $J_{p,\ k}$ 是 $pk \times pk$ 置换矩阵（Zohar，1969年）

$$J_{p,k} = \begin{bmatrix} & & J_p \\ & \iddots & \\ J_p & & \end{bmatrix} \tag{21a}$$

含有 $k \times k$ 个块，且每个块$J_p$ 都是 $p \times p$ 置换矩阵

$$J_p = \begin{bmatrix} & & 1 \\ & \iddots & \\ 1 & & \end{bmatrix}. \tag{21b}$$

利用分块消元，式（18）中的分块矩阵可得到分块逆矩阵

$$\mathcal{G}_k^{-1} = \begin{bmatrix} \mathcal{G}_{k-1}^{-1} + \underline{W}_k \boldsymbol{\alpha}_k^{-1} \underline{W}_k^* & \underline{W}_k \boldsymbol{\alpha}_k^{-1} \\ \boldsymbol{\alpha}_k^{-1} \underline{W}_k^* & \boldsymbol{\alpha}_k^{-1} \end{bmatrix} \tag{22a}$$

其中

$$\underline{W}_k := -\mathcal{G}_{k-1}^{-1}\underline{\mathbf{R}}_k \tag{22b}$$

and

$$\boldsymbol{\alpha}_k := \mathbf{R}_0 + \underline{W}_k^* \underline{\mathbf{R}}_k \tag{22c}$$

是舒尔补 $\mathcal{G}_k/\mathcal{G}_{k-1}$。现在让我们对公式（20）两边取逆，得到

$$\mathcal{G}_k^{-1} = J_{p,k+1}\mathcal{G}_k^{-\top}J_{p,k+1} = \begin{bmatrix} J_p\boldsymbol{\alpha}_k^{-\top}J_p & J_p\boldsymbol{\alpha}_k^{-\top}\widehat{\underline{W}}_k^{\top} \\ \widehat{\underline{W}}_k\boldsymbol{\alpha}_k^{-\top}J_p & \mathcal{G}_{k-1}^{-1}+\widehat{\underline{W}}_k\boldsymbol{\alpha}_k^{-\top}\widehat{\underline{W}}_k^{\top} \end{bmatrix}, \tag{23}$$

其中，第二个等式可由直接计算（21a）和（22a）得到，$A$ 表示矩阵 $A$的逐元素复共轭，并且

$$\widehat{\underline{W}}_k := J_{p,k}\underline{W}_k \tag{24}$$

其中 $\underline{W}_k$ 见（22b）。

根据 $\mathcal{G}_k^{-1}$ （22a）和（23）的两种表示形式，我们可以读出各分块之间的两个方程

$$\left(\mathcal{G}_k^{-1}\right)_{i,j} = \left(\mathcal{G}_{k-1}^{-1}+\underline{W}_k\boldsymbol{\alpha}_k^{-1}\underline{W}_k^*\right)_{i,j}, \quad i,j=1,\ldots,k, \tag{25}$$

and

$$\left(\mathcal{G}_k^{-1}\right)_{i+1,j+1} = \left(\mathcal{G}_{k-1}^{-1}+\widehat{\underline{W}}_k\boldsymbol{\alpha}_k^{-\top}\widehat{\underline{W}}_k^{\top}\right)_{i,j}, \quad i,j=1,\ldots,k, \tag{26}$$

其中，下标 $i$ 和 $j$ 表示分块。结合（25）和（26），可以消去 $\mathcal{G}_{k-1}^{-1}$ 的分块，从而得到 $\mathcal{G}_k^{-1}$ 各分块之间的递推关系：

$$\left(\mathcal{G}_k^{-1}\right)_{i+1,j+1} = \left(\mathcal{G}_k^{-1}\right)_{i,j}+(\mathcal{W}_k)_{i,j}, \quad i,j=1,\ldots,k. \tag{27}$$

其中 $\mathcal{W}_k := \widehat{\underline{W}}_k\boldsymbol{\alpha}_k^{-\top}\widehat{\underline{W}}_k^{\top} - \underline{W}_k\boldsymbol{\alpha}_k^{-1}\underline{W}_k^*$是一个 $k\times k$分块矩阵。如果引入新记号

$$\widehat{\mathbf{R}}_j := J_p\mathbf{R}_j, \quad j=1,2,\ldots, \tag{28a}$$

and

$$\widehat{\underline{\mathbf{R}}}_k := J_{p,k}\underline{\mathbf{R}}_k = \begin{bmatrix}\widehat{\mathbf{R}}_1 \\ \vdots \\ \widehat{\mathbf{R}}_k\end{bmatrix}, \quad k=1,2,\ldots, \tag{28b}$$

其中$\mathbf{R}_k$已在（17）中定义，根据 Wax 和 Kailath（1983）中的公式（13a）、（13c）和（17），关于 $W_k$ 和 $\boldsymbol{\alpha}_k$ 的递推关系如下：

$$\widehat{\underline{W}}_{k+1} = \begin{bmatrix}\widehat{\underline{W}}_k \\ \mathbf{0}_p\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}\underline{W}_k \\ I_p\end{bmatrix}\boldsymbol{\alpha}_k^{-\top}\boldsymbol{\beta}_k, \tag{29a}$$

and

$$\boldsymbol{\alpha}_{k+1} = \boldsymbol{\alpha}_k - \boldsymbol{\beta}_k^*\boldsymbol{\alpha}_k^{-\top}\boldsymbol{\beta}_k, \tag{29b}$$

其中

$$\boldsymbol{\beta}_k = \underline{W}_k^{\top}\widehat{\underline{\mathbf{R}}}_k + \widehat{\mathbf{R}}_{k+1}. \tag{29c}$$

我们的结构化海森矩阵求逆的伪代码见算法1。注意，由于 $\mathcal{G}_k^{-1}$ 具有厄米和反对称结构，因此大约只需计算四分之一的块；算法1也展示了这一点。

**算法1** 海森矩阵求逆 $\mathcal{H}_n = \mathcal{G}_{2n}$

**要求：** 形式为 15 的 A海森矩阵 ( ).

$\mathcal{G}_0^{-1} \leftarrow \mathbf{R}_0^{-1}$.
Compute $\underline{W}_1$, $\boldsymbol{\alpha}_1$ by (22).
Compute $\widehat{\underline{W}}_1$, $\widehat{\underline{\mathbf{R}}}_1$ by (24) and (28b), respectively.
**while** $1 \le k \le 2n-1$ **do**
  Compute $\widehat{\mathbf{R}}_{k+1}$ by (28a).
  Update $\boldsymbol{\beta}_k$ by (29c).
  Update $\boldsymbol{\alpha}_{k+1}$ by (29b).
  Update $\widehat{\underline{W}}_{k+1}$ by (29a).
**end while**
$\mathcal{G}_{2n}^{-1} \leftarrow p^2 \times p^2$ zero matrix.
按如下方式更新 $\mathcal{G}_{2n}^{-1}$ 的第一块行

$$\left(\mathcal{G}_k^{-1}\right)_{1,1} = J_p\boldsymbol{\alpha}_k^{-\top}J_p \text{ and } \left(\mathcal{G}_k^{-1}\right)_{1,2:k+1} = J_p\boldsymbol{\alpha}_k^{-\top}\widehat{\underline{W}}_k^{\top}.$$

恢复 $\underline{W}_{2n} = J_{p,2n}\underline{W}_{2n}$。
// 更新 $\mathcal{G}$ 的上四分之一部分 $_{2n}^{-1}$.
**对于** $i=1:n$ **执行**
  **for** $j=i:2n-i$ **do**
    Update $\left(\mathcal{G}_{2n}^{-1}\right)_{i+1,j+1}$ by (27).
  **end for**
**结束循环**
// 将对角线和反对角线减半 $\mathcal{G}_{2n}^{-1}$ 的元素。注意，中心块 $\left(\mathcal{G}_{2n}^{-1}\right)_{n+1,n+1}$ 被分成四等份。
**对于** $i=1:n+1$ **执行**
  $\left(\mathcal{G}_{2n}^{-1}\right)_{i,i} \leftarrow \frac{1}{2}\left(\mathcal{G}_{2n}^{-1}\right)_{i,i}$.
  $\left(\mathcal{G}_{2n}^{-1}\right)_{i,2n+2-i} \leftarrow \frac{1}{2}\left(\mathcal{G}_{2n}^{-1}\right)_{i,2n+2-i}$.
**end for**
// 通过以下方式更新 $\mathcal{G}_{2n}^{-1}$ 的右侧四分之一反对称性。
$\mathcal{G}_{2n} \leftarrow \mathcal{G}_{2n} + \left(J_{p,\ 2n+1}\mathcal{G}_{2n}^{-1}J_{p,\ 2n+1}\right)^{\top}$。
// 利用厄米性更新 $\mathcal{G}_{2n}^{-1}$ 的块下三角部分。
$\mathcal{G}_{2n}^{-1} \leftarrow \mathcal{G}_{2n}^{-1} + \left(\mathcal{G}_{2n}^{-1}\right)^*$.
**返回** $\mathcal{G}_{2n}^{-1}$。

## 5. TBT线性方程组的快速求解

Wax 和 Kailath（1983）也研究了 TBT 线性方程组的快速求解。这里我们将他们的结果略作扩展，使其适用于未知矩阵和右端矩阵的列数任意的情况。为此，考虑以下线性方程：

$$\mathcal{H}_n\underline{X}_{2n} = \underline{B}_{2n} \tag{30}$$

其中，$\mathcal{H}_n$ 是式 (15a) 中的 TBT 海森矩阵，而 $X_{2n}$ （未知）和 $B_{2n}$ （已知）是 $p^2\times q$ 矩阵。

显然，$X_{2n}$ 和 $B_{2n}$ 可以视为 $p\times 1$ 个块向量，其中每个块的大小为 $p\times q$。

注意，由于关系式(19)和嵌套结构(18)，我们可以定义一系列方程

$$\mathcal{G}_k\underline{X}_k = \underline{B}_k, \quad 0\le k\le 2n, \tag{31}$$

其中，$\mathcal{G}_k$ 已在（18）中定义，$B_k$ 由块向量 $B_{2n}$的前 $k+1$ 个块构成，而 $X_k$ 是一个大小为 $(k+1)\ p\times q$的未知矩阵。注意，一般而言，$X_k$ 不等于 $X_{2n}$的前 $k+1$ 个块；只有当 $k=2n$ 时，我们才能得到（30）的解 $X_{2n}$。利用（22），我们可以推导出以下公式

$$\underline{X}_{k+1} = \begin{bmatrix}\underline{X}_k \\ \mathbf{0}_{p\times q}\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}\underline{W}_k \\ I_p\end{bmatrix}\boldsymbol{\alpha}_k^{-1}\boldsymbol{\delta}_k \tag{32a}$$

and

$$\boldsymbol{\delta}_k = \underline{W}_k^*\underline{B}_k + B_{k+1}, \quad 0\le k\le 2n-1, \tag{32b}$$

其中，$B_k$ （不带下划线）是块向量$B_{2n}$的第（$k+1$）个块，而$W_k$ 和 $\boldsymbol{\alpha}_k$通过式（24）、（29a）和（29b）进行更新。我们在算法2中总结了快速求解TBT线性方程组的伪代码。

**算法2** 求解方程组（30）中的 TBT 系统

**要求：** 形式为（15a）的海森矩阵和一个 $p^2 \times q$ 矩阵 $B_{-2n}$.

$[X_0 \; W_1] \leftarrow \mathbf{R}_0 \setminus [B_0 \; -\mathbf{R}_1]$.

根据 (22c) 计算 $\boldsymbol{\alpha}_1$ 。

计算 $\widehat{W}_1$, $\widehat{\mathbf{R}}_1$ 分别根据 (24) 和 (28b) 计算。

**当** $1 < k \leq 2n-1$ **时**

　根据 (32b) 更新 $\boldsymbol{\delta}_k$ 由式（32a）给出。

　更新 $X_{-k}$

　计算 $\widehat{\mathbf{R}}_{k+1}$ 由式（28a）给出。

　更新 $\boldsymbol{\beta}_k$ 由式（29c）给出。

　根据（29b）更新 $\boldsymbol{\alpha}_{k+1}$ 。

　更新 $\widehat{W}_{k+1}$ 根据（29a）。

**结束循环**

根据（32b）计算 $\boldsymbol{\delta}_{2n}$ 。

计算 $X_{-2n}$ 由（32a）。

**返回** $X_{2n}$。

## 6. 仿真

本节中，我们对正定TBT矩阵的快速求逆，以及使用完整海森矩阵的牛顿法求解对偶问题（6）进行数值模拟。结果分为两个小节。

### *6.1* 测试算法*1*

第一组数值实验关于正定TBT矩阵的求逆。与前几节一致，将尺寸参数设为 $n_1 = n_2 = n$，从而得到形如（15）且满足 $p = 2n+1$的 $p^2 \times p^2$ 个TBT矩阵。每个TBT矩阵均随机生成，并通过加上单位矩阵的正倍数使其成为正定矩阵。随后，我们比较两种对这类TBT矩阵进行求逆的方法，即用于快速求逆的算法1，以及对任意方阵A使用 MATLAB 命令 A^(-1) 进行直接求逆。我们计算 $n$ 从1到40取值时的这些逆矩阵。对于每个 $n$，生成20个正定TBT矩阵，并对两种方法的运行时间取平均，结果如图1所示。请注意，我们仅展示 $20 < n \leq 40$的运行时间，因为对于 $n \leq 20$，两种方法得到的结果几乎相同。可以看到，当矩阵规模较大时，算法1优于直接求逆，尤其是在 $n \geq 30$时。快速算法的优势可以从理论上得到解释。事实上，根据 Wax 和 Kailath（1983），算法1的计算复杂度为 $O(p^5)$，另见 Akaike（1973）；而直接求逆的复杂度为 $O(p^6)$，这就是对大小为$p^2$的方阵所采用的通常的三次复杂度。

### *6.2* 牛顿法中的完整海森矩阵与四分之一海森矩阵

在本小节中，我们使用完整海森矩阵的牛顿法求解对偶问题 (6)，并将其与 Zhu and Liu (2022) 中仅涉及四分之一海森矩阵的拟牛顿法进行比较，参见式 (13) 后的讨论。

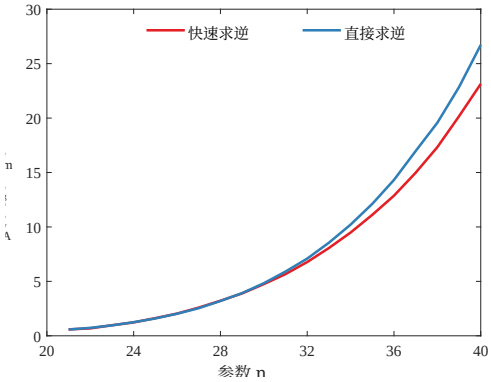


图 1. 算法1与方向法用于求逆正定 TBT 矩阵的比较： $n$ 从 21 到 40 时的平均运行时间。

在我们的实现中，对归一化勒贝格测度积分（例如式 (6)、(11) 和 (12) 中的积分）均离散化为黎曼和：

$$\int_{\mathbb{T}^2} f \mathrm{d}m \approx \frac{1}{N_1 N_2} \sum_{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{T}^2_{\mathbf{N}}} f(\boldsymbol{\theta}), \tag{33}$$

其中 $\mathbb{T}^2_{\mathbf{N}} := \left\{ \left( \frac{2\pi}{N_1} \ell_1, \frac{2\pi}{N_2} \ell_2 \right) : \ell_j \in [0, N_j - 1], \; j = 1, 2 \right\}$是由正整数 $N_1$和 $N_2$定义的 $\mathbb{T}^2$ 规则网格。所考虑的二维随机场可建模为单个复指数受到加性复高斯白噪声干扰，参见 Zhu and Liu (2022) 第 5 节。复指数的振幅与噪声标准差之比为 $1/\sqrt{2}$。随机场的样本量为 $N_1 \times N_2$，与网格 $\mathbb{T}^2_{\mathbf{N}}$的大小相同。根据样本计算标准的有偏协方差估计 $\{\hat{\sigma}_{\mathbf{k}}\}_{\mathbf{k} \in \Lambda}$ （Stoica 和 Moses，2005），并将其作为对偶问题中的 $\boldsymbol{\Sigma} = \{\sigma_{\mathbf{k}}\}_{\mathbf{k} \in \Lambda}$ 。此外，先验 $\Psi \equiv \sigma_{\mathbf{0}}$ 为常数。

在接下来给出的数值示例中，我们取$N_1 = N_2 = 30$，并令 $n_1 = n_2 = 1$，由此定义式 (3) 中的指标集 $\Lambda$ 。牛顿法使用大小为 $9 \times 9$ 的完整海森矩阵，每次迭代时通过算法2求解形式如式 (30) 的线性方程组，从而得到牛顿方向。相比之下，Zhu and Liu (2022) 中的拟牛顿法使用大小为 $5 \times 5$ 的约化海森矩阵。图 2 展示了两种方法的收敛情况随迭代次数的变化。显然，真正的牛顿法收敛速度远快于另一种方法。尽管每次迭代中完整海森矩阵的计算耗时约为四分之一海森矩阵的两倍，但当迭代点与最优点之间的距离小于 $10^{-8}$时，使用完整海森矩阵和四分之一海森矩阵的总计算时间分别约为 0.04 秒和 0.38 秒。因此，在这个示例中，牛顿法比使用四分之一海森矩阵的拟牛顿法快约一个数量级。

## 7. 结论

我们设计了一种快速牛顿求解器，用于求解一个二维谱估计问题。对对偶函数完整海森矩阵的托普利茨块托普利茨结构

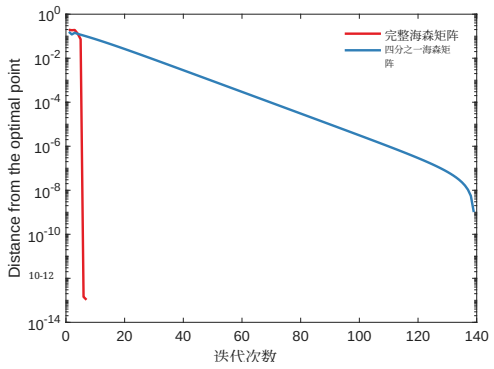


图 2. 牛顿法求解对偶问题 (6) 时完整海森矩阵与四分之一海森矩阵的比较：第 $k$ 次迭代$\mathbf{q}^k$ 与最优点$\mathbf{q}^*$之间的欧几里得距离。

加以利用，并经过适当调整后，便可采用文献中的高效求逆算法。与先前仅使用四分之一海森矩阵的拟牛顿法相比，真正的牛顿法收敛性显著更佳。

## 参考文献

Akaike, H.（1973年）。分块托普利兹矩阵求逆。*SIAM*应用数学杂志，24(2)，234–241。Byrnes, C.I., Georgiou, T.T., and Lindquist, A.（2000）。谱估计的新方法：一种可调谐的高分辨率谱估计器。*IEEE*信号处理汇刊，48(11)，3189–3205。Byrnes, C.I., Gusev, S.V., and Lindquist, A.（1998）。有理协方差扩展问题的一种凸优化方法。*SIAM* 控制与优化杂志，37(1)，211–229。Byrnes, C.I., Gusev, S.V., and Lindquist, A.（2001）。从有限协方差窗口到建模滤波器：一种凸优化方法。*SIAM*评论，43(4)，645–675。Engels, F., Heidenreich, P., Zoubir, A.M., Jondral, F.K., and Wintermantel, M.（2017）。汽车雷达的进展：一种计算高效的高分辨率频率估计框架。*IEEE*信号处理杂志，34(2)，36–46。Ferrante, A., Masiero, C., and Pavon, M.（2012）。时域与谱域相对熵：一种多变量谱估计的新方法。*IEEE* 自动控制汇刊，57(10)，2561–2575。Ferrante, A., Pavon, M., and Ramponi, F.（2008）。Hellinger 与 Kullback–Leibler 多变量谱逼近。*IEEE* 自动控制汇刊，53(4)，954–967。Georgiou, T.T. and Lindquist, A.（2003）。谱密度函数的 Kullback–Leibler 逼近。*IEEE*信息论汇刊，49(11)，2910–2917。H¨ormander, L.（1990）。多复变函数分析导论。North Holland，第3版。Kreutz-Delgado, K.（2009）。复梯度算子与 $\mathbb{CR}$-演算。arXiv 预印本：https://arxiv.org/abs/0906.4835。Lindquist, A. and Picci, G.（2015）。线性随机系统：建模与估计的几何方法与辨识，当代数学系列第1卷。Springer-Verlag 柏林海德堡。Lindquist, A. and Picci, G.（2016）。用 ARMA 表示对平稳周期时间序列进行建模。载于控制与数据科学中的优化及其应用：纪念 *Boris T. Polyak 80*岁诞辰，281–314。Springer。Ringh, A., Karlsson, J., and Lindquist, A.（2015）。多维循环有理协方差扩展问题：图像压缩中的解与应用。载于第*54*届年度决策与控制会议（*CDC*），5320–5327。IEEE。Ringh, A., Karlsson, J., and Lindquist, A.（2018）。具有近似协方差匹配的多维有理协方差扩展。*SIAM* 控制与优化杂志，56(2)，913–944。Stoica, P. and Moses, R.（2005）。信号谱分析。Pearson Prentice Hall，美国新泽西州上萨德尔河。Wax, M. and Kailath, T.（1983年）。块托普利兹托普利兹矩阵的高效求逆。*IEEE* 声学、语音与信号处理汇刊，31(5)，1218–1221。Zhu, B., Ferrante, A., Karlsson, J., and Zorzi, M.（2019）。汽车雷达系统中的传感器数据融合：一种谱估计方法。载于第*58*届 *IEEE* 决策与控制会议（*CDC 2019*），5088–5093。IEEE。Zhu, B., Ferrante, A., Karlsson, J., and Zorzi, M.（2021a）。$M^2$-谱估计：一种确保有理解的灵活方法。*SIAM* 控制与优化杂志，59(4)，2977–2996。Zhu, B., Ferrante, A., Karlsson, J., and Zorzi, M.（2021b）。$M^2$-谱估计：一种相对熵方法。*Automatica*，125。doi: 10.1016/j.automatica.2020.109404。Zhu, B. and Liu, J.（2022）。针对二维谱估计问题的快速稳健数值延续求解器。*IET* 控制理论与应用，16(9)，902–915。Zhu, B., Liu, J., Lai, Z., and Qian, T.（2023）。高斯平稳随机场的采样：一种随机实现方法。*ISA Transactions*，142，386–398。Zhu, B. and Zorzi, M.（2023）。适定的多维有理协方差与广义倒谱扩展问题。*SIAM* 控制与优化杂志，61(3)，1532–1556。Zhu, B. and Zorzi, M.（2024a）。分析正则化对 REMSE 的影响。*Automatica*，163。doi: 10.1016/j.automatica.2024.111605。Zhu, B. and Zorzi, M.（2024b）。关于广义倒谱估计器的统计一致性。*IEEE* 自动控制汇刊，69(9)，5775–5787。Zohar, S.（1969）。托普利兹矩阵求逆：W. F. Trench 算法。*ACM* 杂志，16(4)，592–601。Zorzi, M.（2014a）。一类新的高分辨率多变量谱估计器。*IEEE* 自动控制汇刊，59(4)，892–904。Zorzi, M.（2014b）。基于阿尔法散度的谱密度有理逼近。控制、信号与系统数学，26(2)，259–278。