

Recent Advances in Statistical Inference - in Honor of Professor Masafumi Akahira

(2008 年 12 月 16 日 · 筑波大学)

Shrinkage estimators for covariance matrices in multivariate complex normal distributions

日本女子大学理学部 今野 良彦

December 12, 2008

この講演の目的と構成

近年，データ数よりも変量の次元が高いデータ（高次元データ）の解析のための多変量推測理論の構築が注目を集めている．本講演では，高次元データの設定のもとで多変量複素正規分布の共分散行列 (Large Covariance matrix) の推定問題を統計的決定理論の枠組みで考察した結果を報告する．

本講演の構成

- (1) 複素正規分布と複素 Wishart 分布について;
- (2) 記号と問題設定;
- (3) 先行研究について;
- (4) 推定量のクラスとリスクの評価の方針 (SURE 法);
- (5) リスクの不偏推定量 (SURE) の導出;
- (6) 改良型推定量について．

複素正規分布 (1)

★ 複素確率変数 X は

$$X = \operatorname{Re}X + \sqrt{-1}\operatorname{Im}X, \quad [X] = \begin{pmatrix} \operatorname{Re}X \\ \operatorname{Im}X \end{pmatrix};$$

$\operatorname{Re}X, \operatorname{Im}X$ は X の実部と虚部.

★ X は標準複素正規分布 $\mathbb{C}N(0, 1)$ に従うとは

$$[X] = \begin{pmatrix} \operatorname{Re}X \\ \operatorname{Im}X \end{pmatrix} \sim N_2\left(\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right).$$

★ X の確率密度関数 (w.r.t. Lebesgue measure on \mathbb{C}) は

$$f_X(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-\bar{x}x), \quad x \in \mathbb{C}, \quad \bar{x} \text{ は } x \text{ の complex conjugate.}$$

複素正規分布 (2)

★ $Z \sim \mathbb{C}N(0, 1)$, $\theta \in \mathbb{C}$, $\sigma \in \mathbb{R}_+$ に大して

$$X := \theta + \sigma Z \sim \mathbb{C}N(\theta, \sigma^2).$$

★ $\mathbf{X} \in \mathbb{C}^p$ は複素確率ベクトルとする . $\forall \mathbf{c} \in \mathbb{C}^p$, $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{C}^p$, $\boldsymbol{\Sigma} \in \text{Herm}(p, \mathbb{C})_+$ に対して ,

$$\mathbf{c}^* \mathbf{X} \sim \mathbb{C}N(\mathbf{c}^* \boldsymbol{\theta}, \mathbf{c}^* \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{c}) \iff \mathbf{X} \sim \mathbb{C}N_p(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\Sigma}).$$

ただし , \mathbf{c}^* は \mathbf{c} の transpose complex conjugate である .

★ $\mathbf{X} \sim \mathbb{C}N_p(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\Sigma})$ の確率密度関数 (w.r.t. Lebesgue measure on \mathbb{C}^p) は

$$f_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\pi^p} (\text{Det } \boldsymbol{\Sigma})^{-1/2} \exp\{-(\mathbf{x} - \boldsymbol{\theta})^* \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\theta})\}.$$

複素正規分布 (3)

★ $\mathbf{Z} \sim \mathbb{C}N_p(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\Sigma})$ のとき ,

$$[\mathbf{Z}] := \begin{pmatrix} \operatorname{Re} \mathbf{Z} \\ \operatorname{Im} \mathbf{Z} \end{pmatrix} \sim N_{2p} \left(\begin{pmatrix} \operatorname{Re} \boldsymbol{\theta} \\ \operatorname{Im} \boldsymbol{\theta} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \operatorname{Re} \boldsymbol{\Sigma} & -\operatorname{Im} \boldsymbol{\Sigma} \\ \operatorname{Im} \boldsymbol{\Sigma} & \operatorname{Re} \boldsymbol{\Sigma} \end{pmatrix} \right)$$

ただし , $\operatorname{Re} \boldsymbol{\Sigma}, \operatorname{Im} \boldsymbol{\Sigma}$ は symmetric と skew-symmetric.

複素 Wishart 分布 (1)

★ p 次元複素確率ベクトル Z_1, Z_2, \dots, Z_n は独立同一に $\mathbb{C}N_p(\mathbf{0}, \Sigma)$ に従うとする。このとき,

$$W := \sum_{i=1}^n Z_i Z_i^*$$

は母数 Σ, p, n の複素 Wishart 分布に従うといい, $\mathbb{C}W_p(\Sigma, n)$ と書く。

★ $n \geq p$ のとき, $\mathbb{P}(W \text{ は正定値}) = 1$ で, W の確率密度関数 (w.r.t. Lebesgue measure on $\text{Herm}^+(\mathbb{C}, p)$) は

$$f_W(w) = \frac{\text{Det}(w)^{n-p} \exp(-\text{Tr}(w\Sigma^{-1}))}{\text{Det}(\Sigma)^n \pi^{p(p-1)/2} \prod_{j=1}^p \Gamma(n+1-j)}, \quad w \in \text{Herm}^+(\mathbb{C}, p)$$

ただし, $\Gamma(\cdot)$ は Euler's gamma function.

記号と問題設定(1)

★ $Z_1, Z_2, \dots, Z_n \sim \mathbb{C}N_p(\mathbf{0}, \Sigma)$. 各 Z_i ($i = 1, 2, \dots, n$) は p 変量確率(縦)ベクトルで, 独立同一に p 変量複素正規分布に従う. ただし, Σ は $p \times p$ の正値エルミート行列で未知.

★ n は (標本数 - 1) で, p は変量の次元.

★ Wishart 確率行列 ($p \times p$ の行列) $W := \sum_{k=1}^n Z_k Z_k^*$. ただし, “*” はベクトルや行列の transpose complex conjugate を示す.

★ 共分散行列 Σ の推定問題を損失関数

$$L(\hat{\Sigma}, \Sigma) = \text{Tr}(\hat{\Sigma}\Sigma^{-1} - I_p)^2$$

のもとで考える. ここで, $\hat{\Sigma}$ は Σ の推定量, I_p は $p \times p$ の単位行列, Tr は行列のトレースを表す.

★ W の分布に関する損失関数 L の期待値 $R(\hat{\Sigma}, \Sigma) := \mathbb{E}[L(\hat{\Sigma}, \Sigma)]$ をリスクとよぶ. Σ に関して一様に推定量のリスクを比較したい.

記号と問題設定(2)

- ★ 平均を 0 としたことは本質的ではない;
- ★ Wishart 確率行列 W は正定値 $\iff n \geq p$;
- ★ Wishart 確率行列 W の分布は (n は正整数のとき) 常に存在するが, 確率密度関数は $n \geq p$ のとき存在;
- ★ 変換 $\hat{\Sigma} \mapsto A\hat{\Sigma}A'$; $\Sigma \mapsto A\Sigma A'$ (A は $p \times p$ の正則行列) に関して不変な損失関数:

$$L(\hat{\Sigma}, \Sigma) = \text{Tr}(\hat{\Sigma}\Sigma^{-1} - I_p)^2; L_S(\hat{\Sigma}, \Sigma) = \text{Tr}(\hat{\Sigma}\Sigma^{-1}) - \log \text{Det}(\hat{\Sigma}\Sigma^{-1}) - p.$$

ただし, Det は行列式. しかし, $n < p$ のとき, L_S は $n^{-1}W$ (L_S の期待値) を評価できない.

先行研究について (1)

推定量 $n^{-1}\mathbf{W}$ の問題点

- ★ $\mathbb{E}[n^{-1}\mathbf{W}] = \Sigma$ だが, $n^{-1}\mathbf{W}$ の固有根は, Σ の固有根よりも広がっている. (Marchenko-Pastur law).
- ★ $n < p$ のとき, Σ は正定値であるにもかかわらず, $n^{-1}\mathbf{W}$ は正定値ではない.

先行研究について (2)

$n \geq p$ の場合の先行研究

- ★ 損失関数 L_S のもとでは, $n^{-1}W$ の固有根を Shrinkage-expansion method を用いた改良型推定量. Svensson (2004), Konno (2007a, 2007b), Konno(2009).
- ★ リスクを評価するために, SURE 法が有効 — 部分積分の公式と eigenvalue-calculus → $n < p$ の場合は?
- ★ 損失関数 L のもとでは, Konno (2009)(Haff (1980)は実 Wishart の場合) の結果 → $n < p$ の場合は?

先行研究について (3)

$n < p$ の場合の実 Wishart 行列に対する先行研究

- ★ $S \sim W_p(\Sigma, n)$ とする . ただし , Σ は正定値行列である ;
- ★ Ledoit and Wolf (2004): 損失関数 $\text{Tr}(\hat{\Sigma} - \Sigma)^2$ のもとで , $n^{-1}S$ と I_p の線形結合のなかで漸近的 (n/p は有界) に最適なもの . 積率の条件のみで分布に依存しない結果 ;
- ★ Wu and Pourahmadi (2003), Bickel and Levina (2008): banding approach. 漸近的に評価 ;
- ★ Furrer and Bengtsson (2007): “tapering” ;
- ★ AOS (2009) に特集 .

問題設定の復習

★ $Z_1, Z_2, \dots, Z_n \sim \mathbb{C}N_p(\mathbf{0}, \Sigma)$. 各 Z_i ($i = 1, 2, \dots, n$) は p 変量複素正規分布 (縦) ベクトルで, 独立同一に p 変量複素正規分布に従う. ただし, Σ は $p \times p$ の正値エルミート行列で未知.

★ n は (標本数 - 1) で, p は変量の次元;

★ Wishart 確率行列 ($p \times p$ の行列) $W := \sum_{k=1}^n Z_k Z_k^*$ に基づき, 共分散行列 Σ の推定問題を損失関数

$$L(\hat{\Sigma}, \Sigma) = \text{Tr}(\hat{\Sigma}\Sigma^{-1} - I_p)^2$$

のもとで考える. ここで, $\hat{\Sigma}$ は Σ の推定量;

★ W の分布に関する損失関数 L の期待値 $R(\hat{\Sigma}, \Sigma) := \mathbb{E}[L(\hat{\Sigma}, \Sigma)]$ をリスクとよぶ. Σ に関して一様に推定量のリスクを比較したい.

推定量のクラス

★ $W = \sum_{i=1}^n Z_i Z_i^*$ を分解する : $\ell_1 \geq \dots \geq \ell_n$ は W の固有値で ,

$$W = U_1 L U_1^*, \quad L = \text{Diag}(\ell_1, \dots, \ell_n);$$

U_1 は $p \times n$ の半直交行列 s.t. $U_1^* U_1 = I_n$.

推定量のクラス

$$\hat{\Sigma} = U_1 \Psi(L) U_1^*, \quad (1)$$

ただし , $\Psi := \Psi(L) = \text{Diag}(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n)$ で $\psi_k := \psi_k(L) (k = 1, 2, \dots, n)$ は \mathbb{R}_{\geq}^n から \mathbb{R} への可微分関数.

目標

Σ に依存するリスク $\mathbb{E}[\text{Tr}(\hat{\Sigma} \Sigma^{-1} - I_p)^2]$ を評価したい!

推定量のクラスとリスクの評価の方針 (SURE 法)

★ リスク $\mathbb{E}[\text{Tr}(\hat{\Sigma}\Sigma^{-1} - I_p)^2]$ の不偏推定量 $\hat{R}(\hat{\Sigma})$ ($\varphi_1, \dots, \varphi_n$ と ℓ_1, \dots, ℓ_n を通して W のみ依存) を導出:

$$\mathbb{E}[\text{Tr}(\hat{\Sigma}\Sigma^{-1} - I_p)^2] = \mathbb{E}[\hat{R}(\hat{\Sigma})]$$

★ $\mathbb{E}[\text{Tr}(n^{-1}W\Sigma^{-1} - I_p)^2]$ は定数リスクなので,

$$\hat{R}(\hat{\Sigma}) \leq \mathbb{E}[\text{Tr}(n^{-1}S\Sigma^{-1} - I_p)^2]$$

ならば,

$$\mathbb{E}[\text{Tr}(\hat{\Sigma}\Sigma^{-1} - I_p)^2] \leq \mathbb{E}[\text{Tr}(n^{-1}W\Sigma^{-1} - I_p)^2]$$

がわかる.

SURE の導出 推定量の族 (1) に対して, リスクの不偏推定量 $\hat{R}(\hat{\Sigma})$ を導出する.

部分積分の公式と SURE 法 (1)

★ $(z_{ij})_{i=1, \dots, n; j=1, \dots, p} := [\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2, \dots, \mathbf{Z}_n]^* \sim \mathbb{C}N_{n \times p}(\mathbf{0}, \mathbf{I}_n \otimes \boldsymbol{\Sigma})$;

★ $n \times p$ の行列作用素 $\nabla_{\mathbf{Z}}$ を次で定める：

$$\nabla_{\mathbf{Z}} = \left(\frac{\partial}{\partial z_{ij}} \right)_{\substack{i=1, 2, \dots, n \\ j=1, 2, \dots, p}} = \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial(\operatorname{Re} z_{ij})} - \frac{\sqrt{-1}}{2} \frac{\partial}{\partial(\operatorname{Im} z_{ij})} \right)_{\substack{i=1, 2, \dots, n \\ j=1, 2, \dots, p}};$$

★ 行列 $\nabla_{\mathbf{Z}} \mathbf{A}$ の (i, j) 成分を

$$(\nabla_{\mathbf{Z}} \mathbf{A})_{ij} = \sum_{k=1}^p \frac{\partial a_{kj}}{\partial z_{ik}} \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, n; j = 1, 2, \dots, p.$$

部分積分の公式と SURE 法 (2)

補題 1 $[\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2, \dots, \mathbf{Z}_n]^* \sim \mathbb{C}N_{n \times p}(\mathbf{0}, \mathbf{I}_n \otimes \Sigma)$ とし, $\mathbf{W} = \sum_{i=1}^n \mathbf{Z}_i \mathbf{Z}_i^*$ とおいたとき, $p \times p$ 関数 $\mathbf{G} = \mathbf{G}(\mathbf{W})$ に対して,

$$\mathbb{E}[\Sigma^{-1} \mathbf{W} \mathbf{G}] = \mathbb{E}[n \mathbf{G} + (\mathbf{Z}' \nabla_{\mathbf{Z}})' \mathbf{G}].$$

特に,

$$\mathbb{E}[\text{Tr}(\Sigma^{-1} \mathbf{W} \mathbf{G})] = \mathbb{E}[n \text{Tr}(\mathbf{G}) + \text{Tr}(\mathbf{Z}' \nabla_{\mathbf{Z}} \mathbf{G}')].$$

ただし, ' は転置.

部分積分の公式と SURE 法 (3)

★ 補題 1 において, $G = U_1 \text{Diag}(\ell_1^{-1} \psi_1, \dots, \ell_n^{-1} \psi_n) U_1^*$ とおく :

補題 2 それぞれの期待値が存在するとき ,

$$\mathbb{E} [\Sigma^{-1} U_1 \Psi U_1^*] = \mathbb{E} \left[U_1 \Psi^{(1c)} U_1^* + \text{Tr} (L^{-1} \Psi) (I_p - U_1 U_1^*) \right].$$

ただし , $\Psi^{(1c)} = \text{Diag}(\psi_1^{(1c)}, \psi_2^{(1c)}, \dots, \psi_n^{(1c)})$ で $\psi_k^{(1c)} = \sum_{b \neq k}^n \frac{\psi_k - \psi_b}{\ell_k - \ell_b} + \frac{\partial \psi_k}{\partial \ell_k}$

($k = 1, 2, \dots, n$). 特に , complex analog of Kubokawa and Srivastava (2008)'s identity として ,

$$\mathbb{E} [\text{Tr} \{ \Sigma^{-1} U_1 \Psi U_1^* \}] = \mathbb{E} \left[\sum_{k=1}^n \left\{ (p - n) \frac{\psi_k}{\ell_k} + \frac{\partial \psi_k}{\partial \ell_k} + \sum_{b \neq k}^n \frac{\psi_k - \psi_b}{\ell_k - \ell_b} \right\} \right].$$

部分積分の公式と SURE 法 (4)

補題 3

$\widehat{\Sigma} = U_1 \Psi(L) U_1^*$ に対して,

$$\mathbb{E}[\text{Tr} \{ \Sigma^{-1} U_1 \Psi U_1^* \Sigma^{-1} U_1 \Psi U_1^* \}] = \mathbb{E}[\text{Tr} \{ \Sigma^{-1} U_1 \tilde{\Psi}^{(1)} U_1^* \}].$$

ただし, $\tilde{\Psi}^{(1)} = \text{Diag}(\tilde{\psi}_1^{(1)}, \tilde{\psi}_2^{(1)}, \dots, \tilde{\psi}_n^{(1)})$ で

$$\tilde{\psi}_k^{(1)} = (p - n) \frac{\psi_k^2}{\ell_k} + 2\psi_k \cdot \frac{\partial \psi_k}{\partial \ell_k} + 2\psi_k \cdot \sum_{b \neq k}^n \frac{\psi_k - \psi_b}{\ell_k - \ell_b}, \quad k = 1, 2, \dots, n.$$

部分積分の公式と SURE 法 (5)

定理 4 $\hat{\Sigma} = U_1 \Psi(L) U_1^*$ に対して,

$$R(\hat{\Sigma}, \Sigma) = \mathbb{E} \left[\sum_{k=1}^n \left\{ (p-n) \left(\frac{\tilde{\psi}_k^{(1)}}{\ell_k} - 2 \frac{\psi_k}{\ell_k} \right) + \left(\frac{\partial \tilde{\psi}_k^{(1)}}{\partial \ell_k} - 2 \frac{\partial \psi_k}{\partial \ell_k} \right) \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_{b \neq k}^n \frac{(\tilde{\psi}_k^{(1)} - 2\psi_k) - (\tilde{\psi}_b^{(1)} - 2\psi_b)}{\ell_k - \ell_b} \right\} + p \right].$$

ただし, $\tilde{\psi}_k^{(1)} = (p-n)\psi_k^2/\ell_k + 2\psi_k(\partial\psi_k/\partial\ell_k) + 2\psi_k \sum_{b \neq k}^n (\psi_k - \psi_b)/(\ell_k - \ell_b)$
 $(k = 1, 2, \dots, n)$.

改良型推定量 (1)

推定量の族

$n < p$ とする．つぎの推定量の族を考える：

$$\hat{\Sigma}_t = \frac{1}{p+n} \left(W + \frac{t}{\text{Tr } W^+} U_1 U_1^* \right).$$

ただし， U_1 は $p \times n$ の半直交行列で， W の正の固有値に対応する固有ベクトルを並べたもの， SW^+ は S の Moore-Penrose の逆行列， t は正の定数である．

結果 $\hat{\Sigma}_t$ のリスクの不偏推定量 (SURE) を導出し，リスクを評価することにより次の結果を得る．

$0 < t < 2(n-1)(p-n+1)/\{(p-n+1)(p-n+2)\}$ のとき，すべての Σ に対して， $R(\hat{\Sigma}_t, \Sigma) \leq R(n^{-1}W, \Sigma)$ が成立する．

改良型推定量 (2)

- ★ $\hat{\Sigma}_t$ は正定値ではない .
- ★ $\frac{1}{p+n} (\mathbf{W} + \frac{t}{\text{Tr } \mathbf{W}^+} \mathbf{U}_1 \mathbf{U}_1^*)$ を修正したもの:

$$\tilde{\Sigma}_t = \frac{1}{p+n} \left\{ \mathbf{W} + \frac{t}{\text{Tr } \mathbf{W}} \mathbf{I}_p \right\}.$$

- ★ 残念なことに , 推定量 $\tilde{\Sigma}_t$ のリスクを SURE を用いて評価できない !
- ★ 数値実験で調べたい .