Shrinkage estimators in multivariate normal distributions with block compound symmetry covariance structures [1]

今野 良彦 (KONNO Yoshihiko) [2]

大阪公立大学

2025 年 9 月 21 日

[1]研究集会「複雑・高次元データの統計科学の新展開：深化と融合」
東北大学青葉山キャンパス（情報科学研究科棟 2 階大講義室）
2025 年 9 月 21 日（日）～ 23 日（火）

[2]email: konno@fc.jwu.ac.jp
homepage: `https://mcm-www.jwu.ac.jp/~konno/talk.html`

本日の発表の内容

多変量正規分布の分散共分散行列が block compound symmetry(簡単な場合) と呼ばれる制約下にあるときに, 平均ベクトルの推定問題を統計的決定理論の立場から考察したことを報告する.

目次

- Quick review: . 多変量正規分布の平均ベクトルの同時推定問題
- 問題設定（block compound symmetry covariance のもとでの平均ベクトルの同時推定問題）
- 推定問題の変換と推定量の導出
- 数値実験
- 補足説明: 不変多変量正規分布モデルと分散共分散構造

多変量正規分布の平均ベクトルの同時推定問題 ($\mathbf{\Sigma} = \mathbf{I}_d$)

独立の場合: $X \sim \mathrm{N}_d(\xi, \mathbf{I}_d)$ とする. ただし, $\xi \in \mathbb{R}^d$ で, $\mathbf{I}_d$ は d 次の単位行列.

James and Stein (1961)

$d \geq 3$ かつ $n \geq d$ とする. James-Stein 推定量

$$\widehat{\xi}^{\mathrm{JS}}(X) = \left(1 - \frac{d-2}{X^\top X}\right)X$$

は, 2 乗損失関数のもとで X を一様に改良する. すなわち

$$\mathrm{E}[(\widehat{\xi}^{\mathrm{JS}} - \xi)^\top(\widehat{\xi}^{\mathrm{JS}} - \xi)] \leq \mathrm{E}[(X - \xi)^\top(X - \xi)] \quad (\forall \xi \in \mathbb{R}^d).$$

さらに

$$d = \mathsf{E}[(X-\xi)^\top (X-\xi)] = \inf_{\widehat{\xi}} \max_{\xi \in \mathbb{R}^d} \mathsf{E}[(\widehat{\xi}^{\mathrm{JS}} - \xi)^\top (\widehat{\xi}^{\mathrm{JS}} - \xi)]$$

となっている. ただし, inf は ξ の任意に推定量 $\widehat{\xi}$ に関して infimum limit を取っている. d はミニマックスリスク.

多変量正規分布の平均ベクトルの同時推定問題 (Σ は未知)

分散業分散行列が未知の場合: X と $\mathbf{S}$ は独立で

$$X \sim \mathrm{N}_d(\xi, \Sigma), \qquad \mathbf{S} \sim \mathrm{W}_d(n, \Sigma)$$

とする. ただし, Σ は $d \times d$ の未知の分散共分散行列で, $\mathrm{W}_d(n, \Sigma)$ は自由度 n, スケール行列 Σ の d の Wishart 分布を表す. なので, $\mathrm{E}[\mathbf{S}] = n\Sigma$ となる. 損失関数

$$\mathrm{L}(\widehat{\xi}, \xi | \Sigma) = (\widehat{\xi} - \xi)^\top \Sigma^{-1} (\widehat{\xi} - \xi) \tag{1}$$

を考える. ただし, $\widehat{\xi}$ は $(X, \mathbf{S})$ に基づく ξ の推定量である.

Wishart 分布

- $\Sigma \in \mathrm{Sym}^{++}(d; \mathbb{R})$ に対して, $\Sigma = AA^\top$ と分解し, $Z_1, Z_2, \ldots, Z_n \overset{\text{i.i.d.}}{\sim} N_d(0_d, I_d)$ とする. このとき

$$A\Bigl(\sum_{j=1}^{n} Z_j Z_j^\top\Bigr)A^\top \in \mathrm{Sym}^{+}(d; \mathbb{R})$$

  の分布を $W_d(n, \Sigma)$ と記す.
- $\mathrm{Sym}^{+}(d, \mathbb{R})$ は $d \times d$ の半正定値行列全体の集合である. すなわち, $\mathrm{Sym}^{++}(d; \mathbb{R})$ の閉包である.
- $n > d$ のとき, $\mathrm{Sym}(d; \mathbb{R})$ 上の Lebesgue 測度に関する density は存在しない. ただし, $\mathrm{Sym}(d; \mathbb{R})$ は $d \times d$ の対称行列全体の集合.

James and Stein (1961)

$d \geq 3$ かつ $n \geq d$ とする. James-Stein 推定量

$$\widehat{\xi}^{\mathrm{JS}}(X) = \left(1 - \frac{d-2}{(n-d+3)X^\top S^{-1} X}\right) X \tag{2}$$

は損失 (1) のもとで X を一様に改良する. すなわち

$$\mathbf{E}[(\widehat{\xi}^{\mathrm{JS}} - \xi)^\top \Sigma^{-1} (\widehat{\xi}^{\mathrm{JS}} - \xi)] \leq \mathbf{E}[(X-\xi)^\top \Sigma^{-1}(X-\xi)] = d$$
$$(\forall \xi \in \mathbb{R}^d, \Sigma \in \mathrm{Sym}^{++}(d; \mathbb{R})).$$

ただし, Sym_d^{++} は $d \times d$ の正定値行列全体の集合である.

推定量 (2) の導出のアイディア:

- Σ を既知として, $X \sim \mathrm{N}_d((\xi, \Sigma)$ に基づき, ξ の推定問題を損失
$$\mathrm{L}(\widehat{\xi}, \xi | \Sigma) = (\widehat{\xi} - \xi)^\top \Sigma^{-1} (\widehat{\xi} - \xi)$$
で考える. 不変性を用いると推定量
$$\widehat{\xi}^{JS}(X) = \left(1 - \frac{d-2}{X^\top \Sigma^{-1} X}\right) X \tag{3}$$
は X を改良することがわかる.
- Σ は未知で, 観測 $\mathbf{S} \sim \mathrm{W}_d(n, \Sigma)$ をしたとき, (3) の Σ の最尤推定量（乗数倍）または Σ^{-1} の不偏推定量を plug-in する. すると, 推定量
$$\widehat{\xi}^{\mathrm{JS}}(X) = \left(1 - \frac{c}{X^\top \mathbf{S}^{-1} X}\right) X$$
を得る. ただし, c は未知母数に依存しない定数.

Chételat and Wells (2012)

$n \geq 3$ かつ $d > n$ とする. 推定量

$$\widehat{\xi}^{\mathrm{CW}}(X) = \left(\mathrm{I}_d - \frac{n-2}{(d-n+3)X^\top \mathrm{S}^\dagger X}\mathrm{S}\mathrm{S}^\dagger\right)X$$
$$= \left(\mathrm{I}_d - \mathrm{S}\mathrm{S}^\dagger\right)X + \left(1 - \frac{n-2}{(d-n+3)X^\top \mathrm{S}^\dagger X}\right)\mathrm{S}\mathrm{S}^\dagger X$$

は損失 (1) のもとで X を一様に改良する. ただし, $\mathrm{S}^\dagger$ は S の Moore-Penrose の一般化逆行列である. すなわち

$$\mathsf{E}[(\widehat{\xi}^{\mathrm{CW}} - \xi)^\top \Sigma^{-1}(\widehat{\xi}^{\mathrm{CW}} - \xi)] \leq \mathsf{E}[(X-\xi)^\top \Sigma^{-1}(X-\xi)] = d$$
$$(\forall \xi \in \mathbb{R}^d,\ \Sigma \in \mathrm{Sym}^{++}(d;\ \mathbb{R})).$$

コメント

- $$\widehat{\xi}^{\mathrm{CW}}(X) = \left(\mathbf{I}_d - \mathbf{S}\mathbf{S}^{\dagger}\right)X + \left(1 - \frac{n-2}{(d-n+3)X^{\top}\mathbf{S}^{\dagger}X}\right)\mathbf{S}\mathbf{S}^{\dagger}X$$

  $\mathbf{S}\mathbf{S}^{\dagger}$ は $\mathbf{S}$ の列ベクトルによって張られる $\mathbb{R}^d$ の n 次元平面 $(n < d)$ への射影である. X をこの平面に射影して縮小する. この平面と直交する X についてはなにもしない.

- $\widehat{\xi}^{\mathrm{CW}}$ の positive-part 推定量は

  $$\widehat{\xi}^{\mathrm{PCW}}(X) = \left(\mathbf{I}_d - \mathbf{S}\mathbf{S}^{\dagger}\right)X + \left(1 - \frac{n-2}{(d-n+3)X^{\top}\mathbf{S}^{\dagger}X}\right)_+ \mathbf{S}\mathbf{S}^{\dagger}X.$$

  ただし, $(\cdot)_+ = \max(\cdot, 0)$.

問題設定

X と $\mathbf{S}$ は独立で, $X \sim \mathrm{N}_d(\xi, \Sigma)$, かつ $\mathbf{S} \sim \mathrm{W}_d(n, \Sigma)$ とする. ただし, Σ は $d \times d$ の分散共分散行列で

$$\Sigma = \sigma^2\{(1-\rho)\mathrm{I}_d + \rho \mathbf{1}_d \mathbf{1}_d^\top\} = \sigma^2 \begin{pmatrix} 1 & \rho & \cdots & \rho \\ \rho & 1 & \cdots & \rho \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho & \cdots & \rho & 1 \end{pmatrix} \quad (4)$$

と書けるとする. ただし, $\sigma^2 > 0$ は未知, $-\frac{1}{d-1} < \rho < 1$ は未知とする. また, $\mathbf{1}_d^\top = \underbrace{(1, 1, \ldots, 1)}_{d\text{ 個}}$ である. このとき, 損失関数

$$\mathrm{L}(\widehat{\xi}, \xi | \Sigma) = (\widehat{\xi} - \xi)^\top \Sigma^{-1} (\widehat{\xi} - \xi)$$

のもとで ξ の推定問題を考える. ただし, $\widehat{\xi}$ は ξ の推定量である.

分散共分散構造 (4) の注意 (1)

- $\pi \in \mathfrak{S}_d$ に対して
$$R(\pi) := \sum_{j=1}^{d} E_{\pi(j)j}$$
とおく. ただし, E_{ij} は (i, j) 成分が 1 であとは 0 の $d \times d$ の正方行列.
- $\mathcal{Z} = \{\mathrm{A} \in \mathrm{Sym}(d; \mathbb{R});\ R(\pi)\mathrm{A}R(\pi)^\top = \mathrm{A}\ (\forall \pi \in \mathfrak{S}_d)\}$ とおく.
- $\Sigma \in \mathcal{Z} \cap \mathrm{Sym}^{++}(d; \mathbb{R})$ のとき
$$\Sigma = \tau_1 \mathrm{I}_d + \tau_2 \mathbf{1}_d \mathbf{1}_d^\top, \qquad \left(\tau_1 > 0,\ \tau_2 > -\frac{d}{d-1}\tau_1\right)$$
と書ける. ただし, $\mathbf{1}_d^\top = \underbrace{(1, 1, \ldots, 1)}_{d\text{ 個}}$.

分散共分散構造 (4) の注意 (2)

- 第 1 行目が $\frac{1}{\sqrt{d}}\mathbf{1}_d^\top$ である直交行列を $\mathbf{U}$ と書く. すると

$$\mathbf{U}\Sigma\mathbf{U}^\top = \sigma^2 \begin{pmatrix} 1+(d-1)\rho & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1-\rho & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 1-\rho \end{pmatrix}$$

となる.

推定問題の変換

- $\mu = \mathbf{U}\xi$, $\Psi = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{U}^\top$, $Z = \mathbf{U}\mathbf{X}$, $\mathbf{W} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{U}^\top$ とおく.
- Z と $\mathbf{W}$ は独立で, $Z \sim \mathrm{N}_d(\mu, \Psi)$, $\mathbf{W} \sim \mathrm{W}_d(n, \Psi)$ となる.
- $\widehat{\mu} = \mathbf{U}\widehat{\xi}$ とおくと, 推定問題は $(Z, \mathbf{W})$ にもとづき, 損失関数

$$\mathrm{L}(\widehat{\mu}, \mu | \Psi) = (\widehat{\mu} - \mu)^\top \Psi^{-1} (\widehat{\mu} - \mu)$$

  のもとで μ の推定問題に帰着できる.
- $\widehat{\Psi}$ を Ψ の最尤推定量としたとき, 推定量

$$\left(1 - c\frac{d-2}{Z^\top \widehat{\Psi}^{-1} Z}\right) Z$$

  を考える.

推定量の導出 (1)

- $\mathbf{W} = (w_{ij})_{i,j=1,2,\dots d}$ としたとき

$$\widehat{\Psi} = \mathrm{diag}\left(\frac{w_{11}}{n}, \underbrace{\frac{\sum_{j=2}^{d} w_{jj}}{n(d-1)}, \dots, \frac{\sum_{j=2}^{d} w_{jj}}{n(d-1)}}_{(d-1)\text{ 個}}\right)$$

から, $(1 - \frac{d-2}{Z^\top \Psi^{-1} Z})Z$ に $\widehat{\Psi}$ を plug-in した推定量

$$\widehat{\mu}(c) = \left(1 - \frac{c}{Z^\top \widehat{\Psi}^{-1} Z}\right) Z$$

を考える. ただし, c は未知母数に依存しない定数とする.

推定量の導出 (2)

- 多変量正規分布に関する部分積分の公式を用いることで

$$\mathrm{R}(\widehat{\mu}(c), \mu | \Psi) := \mathrm{E}[(\widehat{\mu}(c) - \mu)^\top \Psi^{-1} (\widehat{\mu}(c) - \mu)]$$
$$\leq \mathrm{E}[(Z - \mu)^\top \Psi^{-1} (Z - \mu)] + \{\cancel{n} c^2 - 2(d-2)c\} \mathrm{E}\left[\frac{1}{Z^\top \widehat{\Psi}^{-1} Z}\right]$$

をえる.

定理 1

$d \geq 3$ かつ $n \geq 1$ とする. 任意の $\mu \in \mathbb{R}^d$ と $0 < \psi_2 < \psi_1 < \infty$ に対して

$$0 \leq c \leq 2(d-2) \Rightarrow \mathrm{R}(\widehat{\mu}(c), \mu | \Psi) \leq \mathrm{R}(Z, \mu | \Psi).$$

推定量の導出 (3)

定理 1 の結果をもとの設定に戻す. $c = d - 2$ とする. ξ の James-Stein 型推定量とその positive-part はそれぞれ

$$\widehat{\xi}^{\mathrm{JS}} = \left(1 - \frac{d-2}{X^\top \widetilde{\Sigma}^{-1} X}\right) X,$$
$$\widehat{\xi}^{\mathrm{PJS}} = \left(1 - \frac{d-2}{X^\top \widetilde{\Sigma}^{-1} X}\right)_+ X$$

で与えられる. ただし

$$\widetilde{\Sigma} = \frac{1}{(d-1)n}\left\{\left(\mathrm{Tr}\,\mathbf{S} - \frac{1}{d}\mathbf{1}_d^\top \mathbf{S}\mathbf{1}_d\right)\mathbf{I}_d + \frac{\mathbf{1}_d^\top \mathbf{S}\mathbf{1}_d - \mathrm{Tr}\,\mathbf{S}}{d}\mathbf{1}_d\mathbf{1}_d^\top\right\}.$$

推定量の導出 (4)

定理 2

任意の $\xi \in \mathbb{R}^d$ と $\sigma > 0$, $-\frac{1}{d-1} < \rho < 1$ に対して

$$\mathrm{R}(\widehat{\xi}^{\mathrm{PJS}}, \xi \,|\, \Sigma) \leq \mathrm{R}(\widehat{\xi}^{\mathrm{JS}}, \xi \,|\, \Sigma) \leq \mathrm{R}(X, \xi \,|\, \Sigma).$$

数値実験 (1)

- $$\widehat{\xi}^{\mathrm{mJS}} = \left(1 - \frac{d-2}{X^\top \widetilde{\Sigma}^{-1} X}\right) X; \quad \widehat{\xi}^{\mathrm{PmJS}} = \left(1 - \frac{d-2}{X^\top \widetilde{\Sigma}^{-1} X}\right)_+ X.$$

  ただし, $\widetilde{\Sigma} = \frac{1}{(d-1)n}\left\{(\mathrm{Tr}\,\mathrm{S} - \frac{1}{d}\mathbf{1}_d^\top \mathrm{S}\mathbf{1}_d)\mathrm{I}_d + \frac{\mathbf{1}_d^\top \mathrm{S}\mathbf{1}_d - \mathrm{Tr}\,\mathrm{S}}{d}\mathbf{1}_d\mathbf{1}_d^\top\right\}.$
- $n \geq d$ のとき, $\widehat{\xi}^{\mathrm{JS}}(X) = \left(1 - \frac{d-2}{(n-d+3)X^\top \mathrm{S}^{-1} X}\right) X$ とその positive-part $\widehat{\xi}^{\mathrm{PJS}}$.
- $n < d$ のとき,

  $\widehat{\xi}^{\mathrm{CW}}(X) = \left(\mathrm{I}_d - \mathrm{S}\mathrm{S}^\dagger\right) X + \left(1 - \frac{n-2}{(d-n+3)X^\top \mathrm{S}^\dagger X}\right) \mathrm{S}\mathrm{S}^\dagger X$ とその positive-part $\widehat{\xi}^{\mathrm{PCW}}$.

数値実験 (2)

$p = 5,\ n = 10$ の場合. $(\mathrm{R}(X, 0_5 | I_d) = 5)$. Repetition=10,000

推定量	$\widehat{\xi}^{\mathrm{mJS}}$	$\widehat{\xi}^{\mathrm{PmJS}}$	$\widehat{\xi}^{\mathrm{JS}}$	$\widehat{\xi}^{\mathrm{PJS}}$
Risk in reduction	0.56	0.69	0.44	0.55

$$\text{Risk in reduction} = \frac{5 - (\mathrm{R}(\widehat{\xi}, 0_5 | I_5))}{5}.$$

数値実験 (3)

$p = 10,\ n = 5$ の場合. $(\mathrm{R}(X, 0_{10} | I_{10}) = 10)$. Repetition=10,000

推定量	$\widehat{\xi}^{\mathrm{mJS}}$	$\widehat{\xi}^{\mathrm{PmJS}}$	$\widehat{\xi}^{\mathrm{CW}}$	$\widehat{\xi}^{\mathrm{PCW}}$
Risk in reduction	0.75	0.84	0.21	0.26

$$\text{Risk in reduction} = \frac{10 - (\mathrm{R}(\widehat{\xi}, 0_{10} | I_{10})}{10}.$$

正則凸錐 (分散共分散行列が住んでいる世界)

用語 (1)

- $\mathbf{Sym}(d, \mathbb{R})$ 上の内積を $\langle \mathbf{A}, \mathbf{B} \rangle = \mathbf{Tr}\,(\mathbf{AB})\,(\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbf{Sym}(d, \mathbb{R})$ で定める.
- $\mathcal{C} \subset \mathbf{Sym}(d, \mathbb{R})$ は凸 $\Leftrightarrow$, $s\mathbf{A} + (1 - s)\mathbf{B} \in \mathcal{C}\,(\forall 0 < s < 1, \mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathcal{C})$.
- $\mathcal{C}$ は錐 $\Leftrightarrow$ $s\mathbf{A} \in \mathcal{C}\,(s > 0, \mathbf{A} \in \mathcal{C})$.
- 凸錐 $\mathcal{C}$ は正則 $\Leftrightarrow$ $\overline{\mathcal{C}} \cap -\overline{\mathcal{C}} = \{0\}$ かつ $\mathcal{C}$ の内部は空ではない. ただし, $\mathbf{0}$ は零行列 で, $\overline{\mathcal{C}}$ は $\mathcal{C}$ の閉包で, $-\mathcal{C} = \{-\mathbf{C};\ \mathbf{C} \in \mathcal{C}\}$.
- 開凸錐 $\mathcal{C}$ に対して, その双対錐 $\mathcal{C}^{\vee}$ を

$$\mathcal{C}^{\vee} := \left\{\mathbf{B};\ \langle \mathbf{A}, \mathbf{B} \rangle > 0\,(\forall \mathbf{A} \in \overline{\mathcal{C}} \setminus \{\mathbf{0}\})\right\}.$$

用語 (2)

- 開凸錐 C は自己双対 $\Leftrightarrow$ $C = C^{\vee}$.
- 凸錐 C は等質 $\Leftrightarrow$ 任意の $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in C$ に対して, ある $g \in G(C)$ が存在して
$$g\mathbf{A}g^{\top} = \mathbf{B}$$
とできる. ただし, $G(C) := \{g \in \mathbf{GL}(d, \mathbb{R});\ gC = C\}$ で, $gC = \{g\mathbf{A}g^{\top};\ \mathbf{A} \in C\}$ である.
- 凸錐 C は対称錐 (symmetric cones) $\Leftrightarrow$ C は自己双対かつ等質.
- 対称錐の例: 正値対称行列全体の集合（その閉包）, 複素エルミーと行列全体の集合, 四元数エルミーと行列全体の集合, degree 2 の光錐 (Lorentz cones) を含む 5 種類.

用語の続き (3)

- 対称錐の閉包は simple Euclidean Jordan 代数 (EJA) の元の $\mathbf{2}$ 乗で書ける.
- $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbf{Sym}(d, \mathbb{R})$ にに対して, Jordan 積 $\circ$ を

$$\mathbf{A} \circ \mathbf{B} := \frac{1}{2}(\mathbf{AB} + \mathbf{BA})$$

  と定めると $(\mathbf{Sym}(d, \mathbf{R}), \circ)$ は単純 EJA となる. $\mathbf{AB}$ は行列の通常の積で, $\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$ であるが, $\mathbf{A} \circ \mathbf{B} = \mathbf{B} \circ \mathbf{A}$ となっている. しかし, Jordan 積は結合律をみたしていない.
- Jordan 代数の計算ルールで対称錐に関わる計算が同じようにできる.

Invarinat Normal Statistical Models

対称性（不変性）を用いて, 多変量正規分布の分散共分散行列を構造化する.

記号

- $\mathbf{Mat}(r, \mathbb{R})$ を $d \times d$ 正方行列全体の集合.
- $\mathbf{GL}(d, \mathbb{R})$ を $d \times d$ の正則行列全体の集合.
- $\mathbf{Sym}^{++}(d, \mathbb{R})$ を $d \times d$ の正定値行列全体の集合.
- $\mathbf{Skew}(d, \mathbb{R}) = \{\mathbf{A} \in \mathbf{Mat}(r, \mathbb{R});\ \mathbf{A}^\top = -\mathbf{A}\}$.

分散共分散行列の基本構造

- 実正定値行列構造 $\boldsymbol{\Sigma} \in \mathbf{Sym}^{++}(d, \mathbb{R})$.
- 複素 Hermite 行列構造

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma} & \mathbf{A} \\ -\mathbf{A} & \boldsymbol{\Sigma} \end{pmatrix} \in \mathbf{Sym}^{++}(2d, \mathbb{R}).$$

- 四元数エルミーと行列構造

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma} & \mathbf{A} & \mathbf{B} & \mathbf{C} \\ -\mathbf{A} & \boldsymbol{\Sigma} & \mathbf{C} & -\mathbf{B} \\ -\mathbf{B} & -\mathbf{C} & \boldsymbol{\Sigma} & \mathbf{A} \\ -\mathbf{C} & \mathbf{B} & -\mathbf{A} & \boldsymbol{\Sigma} \end{pmatrix} \in \mathbf{Sym}^{++}(4d, \mathbb{R})$$

ただし, $\boldsymbol{\Sigma} \in \mathbf{Sym}^{++}(d, \mathbb{R})$ と $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C} \in \mathbf{Skew}(d, \mathbb{R})$ である.

Linear in both the Covariance Matrix and the Precision Matrix

- Linear in the Covariance

$L \subset \mathrm{Sym}(d, \mathbb{R})$ を r 次元線型部分空間 (既知) とする. ただし,
$1 \leq r < \dfrac{d(d+1)}{2} = \dim(\mathrm{Sym}(d, \mathbb{R}))$.

$$\Sigma \text{ は linear in covariance } \Leftrightarrow \Sigma \in L \cap \mathrm{Sym}^{++}(d, \mathbb{R})).$$

$\boxed{\text{例}}$ $G_j \in \mathrm{Sym}^{+}(d, \mathbb{R}))$ は線型部分空間 L の基底で,
$\sigma_j > 0\ (j = 1, 2, \ldots, r)$ は未知とし

$$\Sigma = \sum_{j=1}^{r} \sigma_j G_j \in \mathrm{Sym}^{++}(d, \mathbb{R}))$$

- Linear in the inverse of Covariance

  $L \subset \mathrm{Sym}(d, \mathbb{R})$ を r 次元線型部分空間 (既知) とする. ただし, $1 \leq r < \dfrac{d(d+1)}{2} = \dim(\mathrm{Sym}(d, \mathbb{R}))$.

$$\mathrm{K} := \Sigma^{-1} \text{ は linear in covariance} \;\Leftrightarrow\; \mathrm{K} \in L \cap \mathrm{Sym}^{++}(d, \mathbb{R}).$$

$\boxed{\text{例}}$ $d = 3$ とし

$$\mathrm{K} = \begin{pmatrix} \kappa_{11} & \kappa_{12} & \kappa_{13} \\ \kappa_{21} & \kappa_{22} & 0 \\ \kappa_{31} & 0 & \kappa_{33} \end{pmatrix} \in \mathrm{Sym}^{++}(3, \mathbb{R}) \;\Leftrightarrow\; 2 \perp\!\!\!\perp 3 \,|\, 1$$

これは, 自己双対ではない等質錐の例で Vinberg 錐と呼ばれている.

Jensen (1986)

L を $\mathbf{Sym}(d, \mathbb{R})$ の線型部分空間とし, $\boldsymbol{\Theta} = L \cap \mathbf{Sym}^{++}(d, \mathbb{R})$ とおく. さらに, $\underline{\mathbf{I}_d \in \boldsymbol{\Theta}}$ とする. このとき

$$\boldsymbol{\Sigma} \in \boldsymbol{\Theta} \text{ は linear in the inverse of covariance}$$

$$\Leftrightarrow \mathbf{A} \circ \mathbf{B} = \frac{1}{2}(\mathbf{AB} + \mathbf{BA}) \in L \, (\forall \mathbf{A}, \mathbf{B} \in L).$$

さらに, この場合, $\boldsymbol{\Theta} = \boldsymbol{\Theta}^{-1} := \{\mathbf{C}^{-1}; \mathbf{C} \in \boldsymbol{\Theta}\}$ である.

例

$$\boldsymbol{\Sigma} = \tau_1 \mathbf{I}_d + \tau_2 \mathbf{1}_d \mathbf{1}_d^\top, \qquad \left(\tau_1 > 0, \tau_2 > -\frac{d}{d-1}\tau_1\right).$$

ただし, $\mathbf{1}_d^\top = \underbrace{(1, 1, \ldots, 1)}_{d \text{ 個}}$.

例の続き $\mathfrak{S}_d$ を対称群とする. すなわち, d 個の元のすべての置換からなる群である. すると

$$
\begin{aligned}
&\{\Sigma \in \mathrm{Sym}^{++}(d, \mathbb{R});\ g\Sigma g^\top = \Sigma\ (\forall g \in \mathfrak{S})\} \\
&\quad = \left\{\Sigma = \tau_1 \mathrm{I}_d + \tau_2 \mathbf{1}_d;\ \tau_1 > 0,\ \tau_2 > -\frac{d}{d-1}\tau_1\right\}.
\end{aligned}
$$

置換群に関して不変なモデル

記号

- $\pi \in \mathfrak{S}_d$ に対して

$$R(\pi) := \sum_{j=1}^{d} E_{\pi(j)j}$$

とおく. ただし, E_{ij} は (i, j) 成分が 1 であとは 0 の $d \times d$ の正方行列.

- Γ を $\mathfrak{S}_d$ の部分群とし,

$$\mathcal{Z}_\Gamma = \{A \in \mathrm{Sym}(d; \mathbb{R});\ R(\pi) A R(\pi)^\top = A\ (\forall \pi \in \Gamma)\}$$

とおく.

Graczyk *et al.* (2022)

Γ を $\mathfrak{S}_d$ の部分群とし, $\mathbf{A} \in \mathcal{Z}_\Gamma$ とする. このとき, $d \times d$ のある直交行列 $\mathbf{U}_\Gamma$ が存在して, $\mathbf{U}_\Gamma^\top \mathbf{A} \mathbf{U}_\Gamma$ をブロック対角化でき, 各ブロックは実対称行列, 複素 Hermite 行列, 四元数 Hermite 行列のいずれかの構造を持つ.

$\boxed{\text{例}}$ $\mathbf{\Sigma} = \sigma^2\{(1-\rho)\mathbf{I}_d + \rho \mathbf{1}_d \mathbf{1}_d^\top$ とする. $\mathbf{U}$ を第 1 行が $\frac{1}{\sqrt{d}}\mathbf{1}_d^\top$ の直交行列とする. すると

$$\mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{U}^\top = \sigma^2 \begin{pmatrix} 1+(d-1)\rho & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1-\rho & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 1-\rho \end{pmatrix}.$$

- 謝辞

この研究をすすめるにあたり, 伊師英之教授（大阪公立大学）から多くのご助言をうけたことを感謝します.

- 下記に訂正をした予稿とスライドをポストしておきました.

  https://mcm-www.jwu.ac.jp/~konno/talk.html

- ご清聴ありがとうございます.