クロネッカー積共分散構造の最尤推定量の存在・非存在
— あるテンソルランク最小化問題

Mathias Drton (University of Washington), 栗木哲 (統計数理研究所)

ベクトル値正規分布 $N_m(0, \Sigma)$ から n 個の iid サンプル $Y_1, \dots, Y_n \in \mathbb{R}^m$ が得られているとする。 Σ の MLE $\hat{\Sigma} \in PD(m)$ (正定値行列錐) が確率 1 で存在するための必要十分条件は $n \geq m$ である。一方 Σ がより少ない次元のパラメータで記述されている場合は、その限りではない。ここでは、共分散行列がクロネッカー直積構造を持つモデル $Y_1, \dots, Y_n \sim N_{m_1 m_2}(0, \Sigma_1 \otimes \Sigma_2)$ ($m_1 \geq m_2$) において、MLE の存在条件を論ずる。以下では $Y_i \in \mathbb{R}^{m_1 \times m_2}$ ($m_1 \times m_2$ 行列) と考える。

簡単な考察から MLE は $m_1 m_2 \leq n$ とし一意に存在、 $n m_2 = m_1$ のとき存在するが非一意、 $n m_2 < m_1$ のときは尤度が発散し MLE は存在しないことがわかる。残された場合は $m_2 \leq m_1 < n m_2$ であるが、矛盾する結果が報告されている。

定理 1. $m_2 \leq m_1 \leq n m_2$ とする。 $X \in \mathbb{R}^{k \times m_2}$ ($1 \leq k < m_2$) を用いて

$$r_n(m_1, m_2, k) = \min_{\text{rank}(X)=k} \text{rank} \begin{pmatrix} XY_1^T \\ \vdots \\ XY_n^T \end{pmatrix}_{nk \times m_1}, \quad S_n(m_1, m_2) = \min_{1 \leq k < m_2} \{m_2 r_n(m_1, m_2, k) - m_1 k\}$$

とおく。MLE は $S_n(m_1, m_2) > 0$ のとき一意に存在、 $S_n(m_1, m_2) < 0$ のとき存在しない。

以下では $n = 2$ の場合の MLE の存在・非存在の条件を明示的に与える。

命題 1 (Ten Berge and Kiers, 1999; クロネッカーの標準形). 一般の位置にある $Y_1, Y_2 \in \mathbb{R}^{m_1 \times m_2}$ ($m_1 > m_2$) に対して正則行列 S, T が存在し $SY_1T = \begin{pmatrix} I_{m_2} \\ O \end{pmatrix}_{m_1 \times m_2}$, $SY_2T = \begin{pmatrix} O \\ I_{m_2} \end{pmatrix}_{m_1 \times m_2}$.

命題 1 の変換は $r_2(m_1, m_2, k)$ を変えないので、確率 1 で $Y_1 = \begin{pmatrix} I_{m_2} \\ O \end{pmatrix}$, $Y_2 = \begin{pmatrix} O \\ I_{m_2} \end{pmatrix}$ とできる。

補題 1 ($n = 2, m_2 < m_1 < 2m_2$ の場合). $l = \left\lceil \frac{m_2}{m_1 - m_2} \right\rceil - 1 \geq 1$, $n_a = (l + 1)m_2 - l m_1 > 0$, $n_b = (l + 1)m_1 - (l + 2)m_2 \geq 0$ とおく。

$$r_2(m_1, m_2, k) = \min\{k + a_1 + b_1 \mid 0 \leq a_1 \leq n_a, 0 \leq b_1 \leq n_b, k \leq a_1(l + 1) + b_1 l\}.$$

補題 2 ($n = 2, m_1 = m_2 = m$ の場合). $r_2(m, m, k) = k$ (k は偶数, または $Y_1^{-1}Y_2$ の固有値は実); $= k + 1$ (それ以外).

補題 1, 2 を用いて $S_2(m_1, m_2)$ を陽に与え、MLE の存在・非存在の判定ができる。

定理 2. $n = 2, m_2 \leq m_1 < 2m_2$ とする。確率 1 で以下がなりたつ。

$S_2(m_1, m_2) = 0$ ($m_1 = m_2 \geq 3$); $= 0$ ($m_1 = m_2 = 2$ かつ $Y_1^{-1}Y_2$ は実固有値を持つ); $= 1$ ($m_1 = m_2 = 2$ かつ $Y_1^{-1}Y_2$ は複素固有値を持つ); $= 1$ ($m_1 = m_2 + 1$); $= 0$ ($m_1 > m_2 + 1$ かつ $m_1 - m_2 \nmid m_2$); $= -n_a n_b$ ($m_1 - m_2 \nmid m_2$).

すなわち、 $m_1 = m_2 + 1$ あるいは “ $m_1 = m_2 = 2$ かつ $Y_1^{-1}Y_2$ が複素固有値を持つ” とき MLE は一意に存在し、 $m_1 - m_2 \nmid m_2$ のとき MLE は存在しない。

注意 1. 2×2 行列 Y_1, Y_2 の各要素が独立な標準正規変量であるとき、 $Y_1^{-1}Y_2$ が実固有値を持つ確率は $\pi/4 \doteq 0.785$.

具体的に与えられた m_1, m_2 に対して $r_2(m_1, m_2)$ の値はグレブナー基底計算で具体的に求めることができ、補題 1 の証明の過程では Mathematica を用いた実験を多く行っている。