arXiv:2603.02191v1 [math.ST] 2 Mar 2026

¨多元极值中 Hüsler–Reiss 图模型的代数统计学

CARLOS AM´ENDOLA[1], JANE IVY COONS[2], ALEXANDROS GROSDOS[3], AND FRANK R¨OTTGER [4]

ABSTRACT. 极值统计致力于对稀有事件进行建模和预测。在 H¨üsler–Reiss 图模型中，图表示随机变量之间的极值条件独立（CI）关系。这些模型是以图拉普拉斯矩阵为参数的指数族，被视为极值情形下多元高斯模型的对应模型。我们从代数几何的角度研究这些模型。将 CI 关系转化为参数中的多项式约束后，我们定义了极值 CI 理想，并找到了其生成元的行列式表示。在参数推断方面，我们将极值最大似然度视为条件负定矩阵补全问题的解的数量来研究。我们还定义并分析了 H¨üsler–Reiss 图模型的极值最大似然阈值；该阈值根据点构型的维数提供了一项证书，用以判断是否存在替代最大似然估计，其中该点构型实现了作为欧氏距离矩阵的底层汇总统计量。全文突出展示了这些模型与高斯图模型之间许多有趣的相似之处，也指出了它们的差异。

1. INTRODUCTION

代数统计方法已被证明非常适合解决高斯图模型化中的问题（Sullivant，2018年；Maathuis 等人，2019年）。这主要是因为这些模型具有组合特征，并且能够将统计陈述自然地转化为多项式（不）等式。事实上，图模型化已成为代数统计学的支柱之一，至今仍是一个非常活跃的研究领域，例如参见Drton 等人 （2020年）；Misra 和 Sullivant （2021年）；Am´endola 等人（2023年），此处仅举数例。近期多元极值领域令人振奋的进展，成功将图模型与统计学中的极值理论联系起来。Engelke 和 Hitz （2020）的突破性论文开启了一条充满活力的研究路线，使得对极端依赖结构进行强大且具有可解释性的建模成为可能。在本文中，我们提出一个新的研究方向，旨在引入代数和几何工具，以更好地理解极值图模型。

多元极值的一种常见处理方法是研究阈值超越：当一条多元观测的至少一个维度超过极高阈值时，就将其视为极端观测。这里一个重要的参数族是*H¨usler–Reiss* 分布。对于 d维随机向量，这个指数族由 d顶点图上的加权图拉普拉斯矩阵参数化。H¨usler–Reiss 族被视为多元高斯分布的极值类比，其中加权拉普拉斯矩阵对应于高斯分布的精度矩阵。根据 Fiedler 恒等式（Devriendt，2022a），这些拉普拉斯矩阵与 $d \times d$ 变差函数矩阵一一对应，参见例如R¨ottger 等人(2023年，附录 A）。变差函数矩阵是一个对称矩阵 Γ，其元素

[1]INSTITUTE OF MATHEMATICS, TECHNISCHE UNIVERSITÄT BERLIN, GERMANY[2]DEPARTMENT OF MATHEMATICAL SCIENCES, WORCESTER POLYTECHNIC INSTITUTE, WORCESTER, MA, USA[3]INSTITUTE OF MATHEMATICS, UNIVERSITY OF AUGSBURG, AUGSBURG, GERMANY[4]DEPARTMENT OF APPLIED MATHEMATICS, UNIVERSITY OF TWENTE, ENSCHEDE, THE NETHERLANDS

对应于一个（$d-1$）单纯形各顶点之间的平方欧氏距离，因此也可以将其解释为欧几里得距离矩阵。

发展代数理论的关键在于观察到，变差函数矩阵 Γ 在高斯情形中充当协方差矩阵的类比。回顾一下，对于协方差矩阵为$\mathbf{X}$ Σ的高斯随机向量，条件独立陈述$\mathbf{X}_A \perp\!\!\!\perp \mathbf{X}_B \mid \mathbf{X}_C$ 对于任意互不相交的子集 A，B，$C \subset [d]$ 当且仅当子矩阵$\Sigma_{A\cup C,\ B\cup C}$的秩为 $\#C$时成立，参见Drton 等人 (2009，命题 3.1.13）。这在代数上转化为协方差矩阵σ_{ij} 各元素中的多项式方程，这些方程来自所有大小为 $\#$ 的子式$C+1$。因此，将图模型的条件独立理想定义为由上述矩阵子式多项式生成的理想，其中涵盖图所蕴含的所有条件独立陈述。

标准的条件独立概念不适用于 H¨usler–Reiss 向量 $\mathbf{Y}$，因为其支撑集不是乘积空间。 Engelke 和 Hitz (2020) 提出了一种替代概念：对于任意互不相交的 A，B，$C \subset [d]$，若相应的经典条件独立陈述对$\mathbf{Y}_A$ 成立，则称其在给定 $\mathbf{Y}_B$的条件下与$\mathbf{Y}_C$($\mathbf{Y}_A \perp_e \mathbf{Y}_B \mid \mathbf{Y}_C$) 极值条件独立；这里的经典条件独立陈述要求$\mathbf{Y}$限制在所有正半空间上都成立，详情参见定义 2.3 。

与高斯分布情形类似，已有研究表明，H¨usler– Reiss 分布的极值条件独立性可以用参数化方式编码（ Hentschel等人，2025年；Devriendt 等人，2026）。特别是，R¨ottger 等人（(2023年，命题 3.3）证明了

$$Y_i \perp_e Y_j | \mathbf{Y}_C \iff \det \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\Gamma_{\{i\}\cup C,\{j\}\cup C} & \mathbf{1} \\ \mathbf{1}^\top & 0 \end{pmatrix} = 0$$

对于任意单元素集合 i，$j \in [d]$ 以及互不相交的 $C \subset [d]$。我们在定理 $\mathbf{Y}_A \perp_e \mathbf{Y}_B | \mathbf{Y}_C$ 3.2中将这一结果推广到所有一般形式的极值条件独立陈述。特别地，我们证明，此类条件独立陈述等价于 $\operatorname{rank}(\mathrm{CM}(\Gamma_{A\cup C,\ B\cup C})) = \#C+1$，其中 *Cayley–Menger* 矩阵 定义为 $\mathrm{CM}(\Gamma) := \begin{pmatrix} -\Gamma/2 & \mathbf{1} \\ \mathbf{1}^\top & 0 \end{pmatrix}$.

Cayley–Menger 矩阵的秩约束可直接转化为关于 Γ 各项的多项式方程，因此引出了图 G 的极值条件独立理想的定义

$$\mathrm{eCI}_G := \sum_{A \perp_e B | C} \langle (\#C+2) \times (\#C+2) \text{ minors of } \mathrm{CM}(\Gamma_{A\cup C, B\cup C}) \rangle.$$

有趣的是，我们在定理 3.6 中证明，该理想已经由以下元素生成

$$\langle \det \mathrm{CM}(\Gamma_{A',B'}) \mid A' \subset A\cup C,\ B' \subset B \cup C,\ \#A' = \#B' = \#C+1 \rangle.$$

对于高斯数据，高斯图模型中的最大似然估计问题可以重新表述为一个正定矩阵补全问题（ Dempster，1972年）。类似的方法可为 H¨usler–Reiss 图模型提供替代最大似然估计量（ Hentschel等人，2025年）。对于来自 H¨usler–Reiss 分布的数据（或者更实际地说，来自其吸引域的数据），可以得到一个经验变差函数矩阵Γ （Engelke和Volgushev，2022）。给定一个无向图 G，由此得到的矩阵补全问题是：对于所有边（ Γ， $\Gamma_{ij} = \Gamma_{ij}$ ）对应的项 i，j），部分矩阵 G 是否存在与 G所诱导模型相容的欧几里得距离矩阵补全；也就是说，补全后对应的 H¨usler–Reiss 精度矩阵在 G的所有非边位置上均为零。这是一个半代数问题，由结构零所对应的代数方程以及将范围限制为欧几里得距离矩阵所产生的不等式构成。

我们的另一项主要贡献是研究欧几里得距离矩阵补全问题的极值最大似然度，也就是底层代数方程的复数解的数量。这一模型不变量与高斯最大似然度直接对应；后者最早由Sturmfels 和 Uhler （2010年）研究；Uhler （2012年），并由此开辟了一条富有成果的

代数统计学研究路线（例如，Coons 等人（2020）；Micha-lek 等人（2021）；Am´endola 等人（2024））。结果表明，由弦图定义的模型的极大似然度和极值最大似然度均为 1；我们还在定理 4.7 中给出了替代最大似然估计的闭式公式。此外，我们证明，对于由两个图沿一个公共团粘合而成的图，其极值最大似然度可以因式分解。通过示例我们发现，极值最大似然度小于或等于高斯最大似然度，并猜想（猜想 4.12）这一结论始终成立。

最后，我们引入极值最大似然阈值，给出关于汇总统计量的秩条件，使得补全问题的解在一般情形下存在。这是高斯图模型经典最大似然阈值的类似物（Gross 和 Sullivant，2018年）。该阈值很重要，因为它描述了最大似然估计量几乎必然存在的条件。对于高斯分布，此类秩条件是针对样本协方差矩阵的，而对于 H¨usler–Reiss 分布，极值最大似然阈值来自对经验变异函数矩阵的约束。这两种情形似乎密切相关，因为定理5.2中由最大团数和树宽给出的界在高斯情形中是众所周知的，而在极值情形中，将这些界减 1 后同样成立，见定理 5.3。

本文结构如下。第2 节回顾变差函数、极值条件独立性以及 H¨usler-Reiss 分布的必要背景。第3.2和3.6定理给出了刻画极值条件独立理想的首批结果，相关内容见第3节。第4节研究极大似然估计问题，并在定理4.7 中明确描述了弦图的极值极大似然估计量，在定理4.4中证明了极值最大似然次数的乘法性。第5节讨论极值最大似然阈值，并在定理5.3 中给出界，在定理5.4中给出代数判据。附录汇集了变差函数矩阵的一些有用性质。

2. Preliminaries

我们首先介绍 H¨usler-Reiss 图模型，并回顾拉普拉斯矩阵、变差函数矩阵（或欧几里得距离矩阵）的基本事实和定义，以及二者之间的关系。在第2.2节，我们介绍多元帕累托分布，并在这一一般框架下定义极值条件独立性的概念。最后，在第2.3节，我们定义本文研究的核心对象：H¨usler-Reiss 图模型。这类模型是由图拉普拉斯矩阵参数化的多元帕累托分布的例子，属于指数族，因此适合从代数角度加以研究。

2.1. 变差函数与拉普拉斯矩阵。我们用 $\mathbb{S}^d$ 表示所有实对称 $d \times d$ 矩阵的集合，用 $\mathbb{S}^d_0 \subset \mathbb{S}^d$ 表示其中零对角线矩阵的子集。我们用 $\mathbb{S}^d_{\succeq} \subseteq \mathbb{S}^d$ 表示半正定矩阵的子集，用 $\mathbb{S}^d_{\succ}$ 表示正定矩阵的集合。设 $G = (V, E)$ 为一个简单无向图，其顶点集为 V，边集为 $E \subset V \times V$，其中通常有 $V = [d] = \{1, \dots, d\}$。我们为图 G 配备加权邻接矩阵 $Q \in \mathbb{S}^d_0$，使得对每个 $(i, j) \notin E$，其第 ij 个元素为 $Q_{ij} = 0$。令 D 为具有 $D_{ii} = \sum_{i \neq j} Q_{ij}$ 的 $d \times d$ 对角矩阵。我们称 $\Theta = D - Q$ 为符号拉普拉斯矩阵，并用 $\mathbb{U}^d = \{\Theta \in \mathbb{S}^d_{\succeq} : \Theta\mathbf{1} = \mathbf{0}\}$ 为所有半正定符号拉普拉斯矩阵的集合。我们用 $\Sigma = \Theta^+$ 表示符号拉普拉斯矩阵 Θ 的 Moore–Penrose伪逆。设 $\mathbf{p} = \frac{1}{2}\Theta d_\Sigma + \frac{1}{d}\mathbf{1}$ 且 $R^2 = \frac{1}{4} d_\Sigma^\top \Theta d_\Sigma + \frac{1}{d}\mathbf{1}^\top d_\Sigma$，其中 d_Σ 表示以向量形式表示的 Σ 的对角线。Fiedler–Bapat 恒等式（ Devriendt，2022b ）指出

$$\begin{pmatrix} \Theta & \mathbf{p} \\ \mathbf{p}^\top & R^2 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} -\Gamma/2 & \mathbf{1} \\ \mathbf{1}^\top & 0 \end{pmatrix} =: \mathrm{CM}(\Gamma) \tag{1}$$

其中 Γ 是欧氏距离矩阵或变差函数矩阵。给定欧氏空间中的 d 个点构成的点构型，它们的欧氏距离矩阵是一个对称的 $d \times d$ 矩阵，其 ij 元素为第 i 个点与第 j 个点之间的平方欧氏距离。这类矩阵也称为变差函数矩阵。在本文中，我们交替使用这些术语，通常采用“变差函数矩阵”，但在需要强调矩阵源自此类点构型时，也会使用“欧氏距离矩阵”。为了给出欧氏距离矩阵的等价刻画，我们引入条件负定矩阵锥。首先，如果一个矩阵属于集合

$$\mathcal{C}^d := \{\Gamma \in \mathbb{S}_0^d : v^\top \Gamma v < 0 \text{ for all } v \neq \mathbf{0} \text{ such that } v \perp \mathbf{1}\}.$$

该锥闭包中的矩阵，$\bar{\mathcal{C}}^d$，若满足 $v^\top \Gamma v \leq 0$ 对所有此类 v，则称为条件负定（CND）。Schoenberg准则（Schoenberg，1935年；Young 和 Householder，1938年）指出，当且仅当一个矩阵是某个点构型的欧氏距离矩阵时，它才是条件负定的。

令 $\theta(\Gamma) = \Theta$ 表示将 Γ映射为符号拉普拉斯矩阵 Θ 的映射。映射 θ在严格条件负定矩阵集合 $\mathcal{C}^d$ 与连通图的秩为 $d-1$ 的半正定符号拉普拉斯矩阵集合之间建立一一对应。CND变差函数矩阵 Γ 也可以通过映射直接由 Σ（ Θ的 Moore–Penrose伪逆）得到：

$$\gamma(\Sigma) = d_\Sigma \mathbf{1}^\top + \mathbf{1} d_\Sigma^\top - 2\Sigma. \tag{2}$$

其逆映射为

$$\sigma(\Gamma) = (I - \frac{1}{d}\mathbf{1}\mathbf{1}^\top)\left(-\frac{\Gamma}{2}\right)(I - \frac{1}{d}\mathbf{1}\mathbf{1}^\top), \tag{3}$$

另见 R¨ottger 等人（2023年，附录 A）。注意，由于向量 $\mathbf{1}$ 属于投影矩阵的核 $I - \frac{1}{d}\mathbf{1}\mathbf{1}^\top$，因此对每个变差函数矩阵 Γ，都有 $\mathbf{1} \in \ker(\sigma(\Gamma))$。

有时考虑矩阵 $\Theta^{(k)}$ 也很有用，它是从 Θ 中删除第 k 行和列后得到的矩阵。由于 Θ 的秩为 $d-1$，它是可逆的，因此我们定义 $\Sigma^{(k)} = \left(\Theta^{(k)}\right)^{-1}$。我们还可以通过协方差映射从 Γ 恢复 $\Sigma^{(k)}$

$$\Sigma_{ij}^{(k)} = \frac{1}{2}(\Gamma_{ik} + \Gamma_{jk} - \Gamma_{ij}), \tag{4}$$

参见 R¨ottger 等人（2023年，公式 (9)）。

例 2.1。设

$$\Gamma = \begin{pmatrix} 0 & \Gamma_{12} & \Gamma_{13} \\ \Gamma_{12} & 0 & \Gamma_{23} \\ \Gamma_{13} & \Gamma_{23} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 9 & 25 \\ 9 & 0 & 16 \\ 25 & 16 & 0 \end{pmatrix}$$

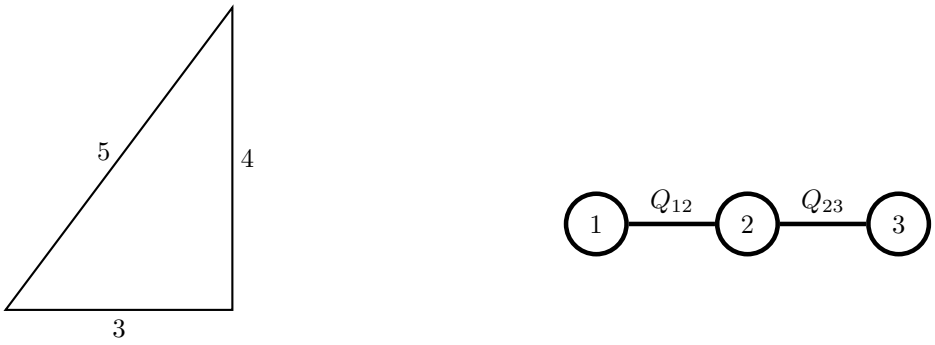
为图1中 2-单形的欧氏距离矩阵。方程（1）中的 Fiedler–Bapat恒等式形式如下：

$$\mathrm{CM}(\Gamma)^{-1} = \left(\begin{array}{ccc|c} 0 & -\frac{9}{2} & -\frac{25}{2} & 1 \\ -\frac{9}{2} & 0 & -8 & 1 \\ -\frac{25}{2} & -8 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 0 \end{array}\right)^{-1} = \left(\begin{array}{ccc|c} \frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & 0 & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{9} & \frac{25}{144} & -\frac{1}{16} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{16} & \frac{1}{16} & \frac{1}{2} \\ \hline \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \frac{25}{4} \end{array}\right).$$

请注意，左上角的 3×3 块 Θ 是图1中路径图的符号拉普拉斯矩阵，其中 $Q_{12}=\frac{1}{9}$ 且 $Q_{23}=\frac{1}{16}$。矩阵 Θ 的 Moore–Penrose伪逆为

$$\Sigma=\Theta^{+}=\frac{1}{9}\begin{pmatrix}52 & -2 & -50\\ -2 & 25 & -23\\ -50 & -23 & 73\end{pmatrix}.$$

我们看到，应用映射 γ 到 Σ 确实可以恢复 $\Gamma=\gamma(\Sigma)$。



(A) 直角三角形　　(B) 路径图

FIGURE 1. 对应于 Γ 的直角三角形，以及对应于邻接矩阵的路径图 Q，参见示例 2.1。

给定一个 $d\times d$ 欧氏距离矩阵 Γ，假设 $\sigma(\Gamma)=\Sigma$ 的秩为 m。那么我们可以将其分解为 $\Sigma=B^{\top}B$，其中 B 是一个 $m\times d$ 矩阵。由等式 (2) 可知，d 的列 B 构成一个点构型，其成对平方欧氏距离就是 Γ的各个元素；Σ 称为该点构型的格拉姆矩阵。

定义 2.2。设 Γ 是一个 $d\times d$欧氏距离矩阵。 Γ的维数是满足以下条件的最小值：m 使得 Γ是由 d 个点在 m 维空间中构成的欧氏距离矩阵。换言之，它等于 $\sigma(\Gamma)$的秩。

Gower 根据 Γ 的秩以及实现它的点构型的几何性质，刻画了其维数（Gower，1985，定理 6）。特别地，若 $\operatorname{rank}(\Gamma)=r$，则其维数为 $r-2$ 或 $r-1$。在命题A.1中，我们证明，当 $r<d$时，一个秩为 $r-2$ 的典型 Σ 会得到一个秩为 $r(\Sigma)$ 的变差函数矩阵 γ。

2.2. **极值条件独立性**。 本节将在极值统计的背景下介绍多元 Pareto 分布。我们先概述这一一般框架下极值条件独立性的统计学基础，再于第¨2.3 节专门讨论 Hüsler-Reiss设定。

设$\mathbf{X}$ 为一个 d 维随机向量，其中每个边缘 X_i 都服从累积分布函数为 F_i 的绝对连续概率分布。二元极值相关系数 $\chi_{ij}:=\lim_{q\to 0}\mathbb{P}(F_i(X_i)>1-q\mid F_j(X_j)>1-q)$，假设该极限存在，它可用于刻画极值相依。当对所有成对的 $i,\ j\in[d]$ 均有 $\chi_{ij}>0$ 时，我们称$\mathbf{X}$ 为渐近相依。

在极值依赖建模中，通常假设 $\mathbf{X}$ 具有标准化边缘，即所有边缘都服从相同的一元分布。这简化了依赖建模，因为

边缘不会影响潜在的依赖结构。因此，本文假设所有 X_i 都服从标准指数分布。多元极值理论中一种常用的方法是：当数值超过某个较高阈值时，将其视为极端值。在至少一个 $\mathbf{X}$ 分量超过阈值 $u > 0$ 的条件下，可以通过阈值超越的极限分布 $\mathbf{X} - u\mathbf{1}$（其中 $\mathbf{1}^\top = (1, \ldots, 1)$）将其形式化。在渐近依赖的假设下，该极限

$$\mathbb{P}(\mathbf{Y} \leq \mathbf{y}) := \lim_{u \to \infty} \mathbb{P}(\mathbf{X} - u\mathbf{1} \leq \mathbf{y} \mid \mathbf{X} \not\leq u\mathbf{1}) \tag{5}$$

阈值超越会产生一个概率分布 $\mathbb{P}(\mathbf{Y} \leq \mathbf{y})$，其中 $\mathbf{Y}$的支撑集为 $\mathcal{L} := \{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^d : \mathbf{y} \not\leq \mathbf{0}\}$。这个分布通常称为（广义）多元帕累托分布（Rootz´en 和 Tajvidi，2006）。任何多元帕累托分布都由定义在 Λ 上的指数测度 $[-\infty, \infty)^d \setminus -\infty$所刻画，使得

$$\mathbb{P}(\mathbf{Y} \leq \mathbf{y}) = \frac{\Lambda^c(\mathbf{y} \wedge \mathbf{0}) - \Lambda^c(\mathbf{y})}{\Lambda^c(\mathbf{0})},$$

其中 $\wedge$ 表示逐分量最小值，而 $\Lambda^c(\mathbf{y}) := \Lambda([-\infty, \infty)^d \setminus [-\infty, \mathbf{y}])$。若假设 Λ 绝对连续，则它具有勒贝格密度 λ，因此 $\mathbf{Y}$ 的密度为 $f_Y(\mathbf{y}) = \lambda(\mathbf{y})/\Lambda(\mathcal{L})$。对于任意半空间 $\mathcal{L}^k := \{\mathbf{y} \in \mathcal{L} : y_k \geq 0\}$，有 $\Lambda(\mathcal{L}^k) = 1$，且 $\mathbf{Y}^k := \mathbf{Y} | \{Y_k > 0\}$ 在其支撑集 $\mathcal{L}^k$上具有概率密度 λ。

对于某个 $C \subseteq [d]$，令 $\lambda_C(\mathbf{y}_C) := \int_{\mathbb{R}^{d-\#C}} \lambda(\mathbf{y}_{\setminus C}) d\mathbf{y}_{\setminus C}$。边缘随机向量 $\mathbf{Y}_C^k$ 在其支撑集上的概率密度为 $\lambda_C(\mathbf{y}_C)$，对所有 $k \in C$均成立。此外，λ_C 是式 (5) 中 $\mathbf{X}_C$ 的阈值超越极限的指数测度密度。我们将所得的多元帕累托向量记为 $\mathbf{Y}^{(C)}$。通常，$\mathbf{Y}^{(C)}$ 与边缘向量 $\mathbf{Y}_C$的分布并不相同。

Engelke 和 Hitz (2020) 提出了多元帕累托分布中条件独立的概念。假设 Λ 具有密度 λ，或者等价地，$\mathbf{X}$ 渐近相依，则定义如下：

定义 2.3。设 $\mathbf{Y}$ 为指数测度密度为 λ 的多元帕累托向量，且 A、B、C 是 $[d]$的互不相交子集。若$\mathbf{Y}_A$ 在给定$\mathbf{Y}_C$ 的条件下与$\mathbf{Y}_B$ 满足极值条件独立，则称

$$\lambda_{ABC}(\mathbf{y}_{ABC})\lambda_C(\mathbf{y}_C) = \lambda_{AC}(\mathbf{y}_{AC})\lambda_{BC}(\mathbf{y}_{BC}) \tag{6}$$

对所有 $\mathbf{y} \in \mathcal{L}$ 均成立。我们将此陈述简写为 $\mathbf{Y}_A \perp_e \mathbf{Y}_B \mid \mathbf{Y}_C$。

由于 λ 在半空间 $\mathcal{L}^k$ 上的限制是$\mathbf{Y}^k$的概率密度，这意味着$\mathbf{Y}_A \perp_e \mathbf{Y}_B \mid \mathbf{Y}_C$ 等价于

$$\mathbf{Y}_A^k \perp\!\!\!\perp \mathbf{Y}_B^k \mid \mathbf{Y}_C^k, \quad \forall k \in C.$$

令 $\lambda(\mathbf{y}_A|\mathbf{y}_C) := \frac{\lambda_{AC}(\mathbf{y}_{AC})}{\lambda_C(\mathbf{y}_C)}$ 为条件指数测度密度。极值条件独立性也可以改述为条件指数测度密度的因子分解$\lambda(\mathbf{y}_{AB}|\mathbf{y}_C)$，即方程（6）可写为

$$\lambda(\mathbf{y}_{AB}|\mathbf{y}_C) = \lambda(\mathbf{y}_A|\mathbf{y}_C)\lambda(\mathbf{y}_B|\mathbf{y}_C). \tag{7}$$

在所有多元帕累托分布中，H ¨usler– Reiss 分布这一参数族特别适用于极值依赖建模，因为它具有许多与多元高斯分布相同的性质。下一节将介绍如何用变差函数或拉普拉斯矩阵对 H ¨usler–Reiss 模型进行参数化，并概述在此情形下对成对条件独立性的一种代数解释。

2.3. H¨usler–Reiss 分布。H¨usler–Reiss 分布构成多元帕累托分布的一个参数子族。在多元极值领域，它们被视为多元高斯分布的类比。在渐近依赖假设下，它们由条件负定变差函数矩阵 $\Gamma \in \mathcal{C}^d$ 参数化，并具有如下指数测度密度

$$\lambda(\mathbf{y}) = c_1 \exp\left(-\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\mathbf{y}^\top & 1\end{pmatrix} \mathrm{CM}(\Gamma)^{-1} \begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ 1\end{pmatrix}\right),$$

其中 $c_1 = \frac{1}{\sqrt{-\det(\mathrm{CM}(2\pi\Gamma))}} = \left(\det\begin{pmatrix}-\pi\Gamma & \mathbf{1}\\ -\mathbf{1}^\top & 0\end{pmatrix}\right)^{-1/2}$ (Hentschel等人，2025年；Engelke等人，2025年）。H¨usler–Reiss 边际分布 $\mathbf{Y}^{(C)}$ 仍然是参数为 $\Gamma_{C,\,C}$ 的 H¨usler–Reiss 分布。条件指数测度密度实际上是高斯密度。对于任意互不相交的 $A,\ C \subset V$ 它是

$$\lambda(\mathbf{y}_A \mid \mathbf{y}_C) = \frac{1}{\sqrt{\det(2\pi\Sigma^*)}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{y}_A - \mu^*)^\top (\Sigma^*)^{-1}(\mathbf{y}_A - \mu^*)\right),$$

其中

$$\Sigma^* = -\frac{1}{2}\Gamma_{A,A} - \begin{pmatrix}-\frac{1}{2}\Gamma_{A,C} & \mathbf{1}\end{pmatrix} \mathrm{CM}(\Gamma_{C,C})^{-1} \begin{pmatrix}-\frac{1}{2}\Gamma_{C,A}\\ \mathbf{1}^\top\end{pmatrix}$$

and

$$\mu^* = \begin{pmatrix}-\frac{1}{2}\Gamma_{A,C} & \mathbf{1}\end{pmatrix} \mathrm{CM}(\Gamma_{C,C})^{-1} \begin{pmatrix}\mathbf{y}_C\\ 1\end{pmatrix}.$$

$(\mathbf{y}_A \mid \mathbf{y}_C)$ 的高斯性¨解释了 H¨usler–Reiss 分布的一些吸引人的性质。例如，R¨ottger 等人(2023年)证明了

$$Y_i \perp_e Y_j | \mathbf{Y}_C \iff \det\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}\Gamma_{\{i\}\cup C,\{j\}\cup C} & \mathbf{1}\\ \mathbf{1}^\top & 0\end{pmatrix} = 0,$$

也就是说，给定一个非空集合时，两个单元素集合之间的极值条件独立性等价于 Cayley–Menger 矩阵 CM(Γ) 的某个近主子式为零。这尤其意味着以下等价关系

$$Y_i \perp_e Y_j | \mathbf{Y}_{V\setminus\{i,j\}} \iff \Theta_{ij} = 0,$$

这一结果最早由 Hentschel等人 (2025年) 证明。这意味着，成对马尔可夫性质可以通过 H¨usler–Reiss 精度矩阵 Θ中的零元素来刻画，从而为无向极值图模型带来了新的参数化方法。有关更多细节，请参阅 Engelke等人(2024) 的综述文章。

因此，我们可以将任意 H¨usler–Reiss 图模型定义为如下几何对象。

定义 2.4. 设 $G = ([d], E)$ 为一个无向图。与 相关联的 H*H ¨usler–Reiss* 变差函数模型为

$$\mathcal{M}_G = \{\Gamma \in \mathcal{C}^d : \theta(\Gamma)_{ij} = 0 \text{ for all } (i,j) \notin E\} \subset \mathcal{C}^d, \tag{8}$$

也就是说，由关于 G 满足马尔可夫性质的 H¨usler–Reiss 分布所产生的变差函数矩阵集合。

在正则条件独立性的背景下，具有正密度的随机向量（例如高斯分布）满足全局马尔可夫性与成对马尔可夫性等价（Sullivant，2018年，定理13.1.4）。由于多元帕累托向量的极值条件独立性 $\mathbf{Y}$ 可以通过随机向量$\mathbf{Y}^k,\ k \in [d]$的正则条件独立性来刻画，因此，对于具有正指数测度密度的 H¨usler-Reiss 分布，（极值）成对马尔可夫性与全局马尔可夫性也等价。极值全局马尔可夫性质指出，若 $A,\ B$ 和 C 是 $[d]$的互不相交子集，

使得从 G 中移除 C 后， A 中的顶点与 B中的顶点彼此分离，那么极值条件独立性陈述$\mathbf{Y}_A \perp_e \mathbf{Y}_B \,|\mathbf{Y}_C$ 成立。

H ̈usler–Reiss 分布的变差函数矩阵可通过任意 $k \in [d]$ 获得，

$$\Gamma_{ij} = \mathrm{Var}[Y_i^k - Y_j^k]. \tag{9}$$

这种表示法产生了一个 Γ的估计量。对于独立同分布观测$\mathbf{y}_1$，.. ., $\mathbf{y}_n \in \mathcal{L}$，经验变差函数（Engelke和Volgushev，2022）对9）在$\mathbf{Y}$的支撑集内所有典范半空间中的样本版本取平均。对于每个 $k \in [d]$，令 $J_k := \{\ell \in [n]\colon \mathbf{y}_\ell \in \mathcal{L}^k\}$。H ̈usler–Reiss 分布的经验变差函数定义如下：

$$\overline{\Gamma}_{ij} = \frac{1}{d}\sum_{k=1}^{d} \widehat{\mathrm{Var}}\left(y_{\ell,i} - y_{\ell,j} : \ell \in J_k\right), \tag{10}$$

其中 Var 表示样本方差。这给出了变差函数的一个相合估计量，并且可以视为作为 H ̈usler–Reiss 模型中的汇总统计量。

在实践中，我们无法直接观测极限模型$\mathbf{Y}$，只能观测其底层数据生成过程$\mathbf{X}$。因此，为了获得$\mathbf{Y}$的近似样本，通常会使用$\mathbf{X}$的标准化边缘的一个高分位数对数据进行阈值筛选。在这种方法中，$\mathbf{Y}$ 的近似样本由所有满足$\mathbf{x}_i - u\mathbf{1}$ 且 $\max \mathbf{x}_i > u$的样本组成，其中 u 是标准指数分布的某个高分位数。在这里，阈值的选择可视为一个超参数，它会影响样本量与近似样本准确性之间的权衡。

3. The Extremal Conditional Independence Ideal

以下事实 Θ 对于 G 是一个符号拉普拉斯矩阵， Θ会施加线性约束Θ ；特别是， G具有与 G 的非边相对应的稀疏模式，且其所有行和均为 0。根据 Fiedler-Bapat恒等式（方程（1））， 可知这进而施加了多项式约束于变差函数矩阵 Γ。本节从图分离的角度考察这些代数约束。从代数角度看，可以将变量 γ_{ij} 上的一个多项式理想与 $\mathcal{M}_G$相关联：

$$I_G := \mathcal{I}(\mathcal{M}_G) \subset \mathbb{C}[\gamma_{ij} \mid 1 \le i < j \le n],$$

由.....组成 由所有在 $\mathcal{M}_G$ 上消失的多项式组成。我们称之为与 G 相关联的 极值理想 .

例 3.1。 考虑一个三变量 H ̈usler–Reiss 模型，其变差函数矩阵为 Γ ，该模型关于图 1(B) 中的路径图是马尔可夫的。1。根据 Fiedler–Bapat 恒等式（公式（1）），我们得到

$$\theta(\Gamma)_{13} = \frac{1}{\det(\mathrm{CM}(\Gamma))}(\Gamma_{13} - \Gamma_{12} - \Gamma_{23}).$$

事实上，我们计算得出其极值理想是主线性理想

$$I_G = \langle \gamma_{12} + \gamma_{23} - \gamma_{13} \rangle \subset \mathbb{C}[\gamma_{12}, \gamma_{13}, \gamma_{23}].$$

如果将矩阵 Γ解释为欧氏距离矩阵，根据勾股定理的逆定理，我们可以得出结论：相应的 2-单形必为直角三角形，参见例 2.1和图 1。

聚焦于条件独立性，我们可以为 G 关联另一个自然的理想。代数统计学中的一个关键事实是，对于多元高斯分布，条件独立性陈述等价于协方差矩阵上的代数约束。具体而言，若$\mathbf{X} \sim \mathcal{N}(\mu,\ \Sigma)$，则

$$\mathbf{X}_A \perp\!\!\!\perp \mathbf{X}_B \,|\, \mathbf{X}_C \iff \mathrm{rank}(\Sigma_{A\cup C, B\cup C}) = \#C. \tag{11}$$

此前，对于非单元素的 $\mathbf{H}\mathbf{Y}_A \perp_e \mathbf{Y}_B \mid \mathbf{Y}_C$ H¨斯勒–赖斯分布，其极端条件独立性陈述已知的唯一参数化描述，是通过受多信息启发的集合函数的模性给出的（Devriendt 等人，2026）。现在我们证明，对于 H11H¨斯勒–赖斯分布，也存在一个与（11）对应的极端情形类比。

定理3.2。 设$\mathbf{Y}$ 是具有变差函数 Γ 的 *H ¨USLER–REISS* 随机向量，且 A、B、$C \subset [d]$ 互不相交。那么，给定$\mathbf{Y}_C$ 时，$\mathbf{Y}_A$ 与$\mathbf{Y}_B$ 极值条件独立，当且仅当

$$\operatorname{rank}(\mathrm{CM}(\Gamma_{A\cup C,B\cup C})) = \#C + 1.$$

证明。通过边缘化，不失一般性地设 $A\cup B\cup C = [d]$。根据公式（7），$\mathbf{Y}_A \perp_e \mathbf{Y}_B \mid \mathbf{Y}_C$ 等价于 $\lambda(\mathbf{y}_{AB}|\mathbf{y}_C) = \lambda(\mathbf{y}_A|\mathbf{y}_C)\lambda(\mathbf{y}_B|\mathbf{y}_C)$。还要注意，对于任意非空的 $D \subseteq [d]\setminus C$ 和 $k \in C$，$\mathbf{Y}_D^k \mid \{\mathbf{Y}_C^k = \mathbf{y}_C\} \sim \lambda(\mathbf{y}_D|\mathbf{y}_C)$。因此，这些是高斯随机向量。于是，我们要寻找一个具有协方差的 #(A∪B) 维高斯随机向量的因子分解

$$-\frac{1}{2}\Gamma_{AB,AB} - \begin{pmatrix}-\frac{1}{2}\Gamma_{AB,C} & \mathbf{1}\end{pmatrix} \mathrm{CM}(\Gamma_{C,C})^{-1} \begin{pmatrix}-\frac{1}{2}\Gamma_{C,AB}\\ \mathbf{1}^\top\end{pmatrix}.$$

因此，$\mathbf{Y}_A \perp_e \mathbf{Y}_B \mid \mathbf{Y}_C$ 当且仅当

$$-\frac{1}{2}\Gamma_{A,B} - \begin{pmatrix}-\frac{1}{2}\Gamma_{A,C} & \mathbf{1}\end{pmatrix} \mathrm{CM}(\Gamma_{C,C})^{-1} \begin{pmatrix}-\frac{1}{2}\Gamma_{C,B}\\ \mathbf{1}^\top\end{pmatrix} = \mathbf{0}. \tag{12}$$

注意，(12) 的左侧是 CM(Γ$_{AC,BC}$) 中 $-\frac{1}{2}\Gamma_{A,B}$块的舒尔补。由于根据假设，CM(Γ$_{C,C}$) 可逆，由 Guttman秩可加公式可得

$$\operatorname{rank}(\mathrm{CM}(\Gamma_{AC,BC})) = \#C + 1$$

当且仅当（12）成立。 □

这种对极值条件独立性的刻画使我们能够根据 CM(Γ) 的消失子式，用模型的极值条件独立理想来定义该理想。

定义3.3。 模型的极值条件独立理想是 G 理想

$$\mathrm{eCI}_G := \sum_{A\perp_e B|C} \langle (\#C+2)\times(\#C+2) \text{ minors of } \mathrm{CM}(\Gamma_{A\cup C,B\cup C})\rangle \subset \mathbb{C}[\gamma_{ij} \mid 1 \le i < j \le n].$$

换言之，这是 CM(Γ) 的所有子式构成的理想；根据G中的分离陈述，由定理3.2和全局马尔可夫性质保证，这些子式均消失。

事实上，并非所有这些子式都是生成极值条件独立理想所必需的。在定理 3.6中，我们证明，Cayley-Menger型的行列式就足以构成一个生成集。我们利用以下引理来证明这一点。

引理 3.4。 设 $M = (m_{ij})_{i,j=1}^n$ 是一个 $n\times n$ 矩阵。对于每个 j，令 D_j 表示将 M 的第 j列替换为全 *1* 列后所得矩阵的行列式。则

$$\det(M) = \sum_{j=1}^n m_{1j} D_j.$$

证明。 首先，回顾一下

$$\det(M) = \sum_{\tau\in S_n} \operatorname{sgn}(\tau) \prod_{i=1}^n m_{\tau(i)i} \qquad \text{and} \qquad D_j = \sum_{\tau\in S_n} \operatorname{sgn}(\tau) \prod_{\substack{i=1\\ i\neq j}}^n m_{\tau(i)i}.$$

$m_{1j}D_j$ 中同时也是 det(M) 的项，对应于满足$\tau(j) = 1$的置换 $\tau \in S_n$。因此，det(M) 的每一项都恰好是多项式 $m_{1j}D_j$之一中的一项。还需证明，这些多项式中的其他项彼此抵消。

固定 j 以及一个置换 $\tau \in S_n$，使得 $\tau^{-1}(1) = k$，其中 $k \neq j$。与 τ 对应的 $m_{1j}D_j$ 项为

$$\operatorname{sgn}(\tau) m_{1j} m_{1k} \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j,k}}^{n} m_{\tau(i)i}.$$

现在考虑与置换 $\tau' = (j\ k)\tau$ 对应的 $m_{1k}D_k$ 项。此置换满足：$\operatorname{sgn}(\tau') = -\operatorname{sgn}(\tau)$，$\tau'(j) = 1$，$\tau'(k) = \tau(j)$，且对所有 $i \neq j,\ k$，都有 $\tau'(i) = \tau(i)$。因此，对应的 $m_{1k}D_k$ 项为

$$-\operatorname{sgn}(\tau) m_{1j} m_{1k} \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j,k}}^{n} m_{\tau(i)i}.$$

最后，$(j\ k)\tau' = \tau$。由此可在多项式 $m_{1j}D_j$ 中那些不是 det(M) 项的项之间建立一个反号对合。因此，这些项在表达式 $\sum_{j=1}^{n} m_{1j}D_j$ 中相互抵消，而该和等于 det(M)。□

引理 3.5。设 M 和 D_j 如引理 *3.4*所述。对于每个 $i \in [n]$，令 D_{ij} 为矩阵的行列式，其中 $k\ell$ 项为

$$\begin{cases} m_{k\ell} & \text{if } k \neq i \text{ and } \ell \neq j \\ 1 & \text{if } k = i \text{ and } \ell \neq j \\ 1 & \text{if } k \neq i \text{ and } \ell = j, \text{ and} \\ 0 & \text{if } k = i \text{ and } \ell = j. \end{cases}$$

固定某个 $j \in [n]$ 和某个 $x \in [n] \setminus \{j\}$。则 $D_j = \sum_{i=1}^{n} m_{ix} D_{ij}$。

证明。不失一般性，设 $j > 1$ 并令 $x = 1$。我们有

$$D_j = \sum_{\tau \in S_n} \operatorname{sgn}(\tau) \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq \tau^{-1}(j)}}^{n} m_{k\tau(k)} \qquad \text{and} \qquad D_{ij} = \sum_{\substack{\tau \in S_n \\ \tau^{-1}(j) \neq i}} \operatorname{sgn}(\tau) \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i, \tau^{-1}(j)}}^{n} m_{k\tau(k)}.$$

设 $\tau \in S_n$并令 $i = \tau^{-1}(1)$。由于 $j \neq 1$，我们有 $i \neq \tau^{-1}(j)$；因此 τ在 D_j 和 $m_{i1}D_{ij}$中均有对应项。该项为

$$\operatorname{sgn}(\tau) m_{i1} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i, \tau^{-1}(j)}}^{n} m_{k\tau(k)}.$$

注意，这不是任何其他 $m_{s1}D_{sj}$ 中的项，因为对于 $s \neq i$，m_{s1} 不能整除它。因此，接下来只需证明多项式 $m_{i1}D_{ij}$ 的所有其他项彼此抵消。

固定某个 $i \in [n]$，并令 τ为一个置换，使得 $i \neq \tau^{-1}(1)$。反之，假设对于某个 $s \neq i$，$\tau^{-1}(1) = s$。进一步假设 $\tau^{-1}(j) \neq i$，因此 τ 对应于 D_{ij}中的一项。注意，由于 $\tau^{-1}(1) = s$且 $j \neq 1$，我们还有 $\tau^{-1}(j) \neq s$。因此，$m_{i1}D_{ij}$ 中的对应项为

$$\operatorname{sgn}(\tau) m_{i1} m_{s1} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i,s, \tau^{-1}(j)}}^{n} m_{k\tau(k)}.$$

现在令 $\tau' = (i\ s)\tau$。那么 τ' 满足：$\tau'(i) = 1$，$\tau'(s) = \tau(i) \neq j$，并且对于所有其他 $k \neq i, s$，$\tau'(k) = k$。由于 $\tau'(s) \neq j$，τ' 在 $m_{s1}D_{sj}$ 中有一项对应项，即

$$\operatorname{sgn}(\tau')m_{s1}m_{i1} \prod_{\substack{k=1 \\ k\neq i,s,(\tau')^{-1}(j)}}^{n} m_{k\tau(k)}.$$

由于 $\tau^{-1}(j) = t$ 对于某个 $t \neq i, s$，根据上述观察，我们也有 $(\tau')^{-1}(j) = t$。我们还有 $\operatorname{sgn}(\tau') = -\operatorname{sgn}(\tau)$。因此，这一项等于

$$-\operatorname{sgn}(\tau)m_{i1}m_{s1} \prod_{\substack{k=1 \\ k\neq i,s,\tau^{-1}(j)}}^{n} m_{k\tau(k)}.$$

最后，$(s\ i)\tau' = \tau$。由此，在多项式 $m_{i1}D_{ij}$ 中不是 D_j 的项之间建立了一个反号对合。因此，这些项在表达式 $\sum_{i=1}^{n} m_{i1}D_{ij}$ 中相互抵消，这个和等于 D_j。□

现在我们可以证明关于极端条件独立理想的生成元的主定理。

定理3.6。 设 A、B、$C \subset [d]$ 互不相交。则由 $(\#C+2) \times (\#C+2)$ 子式 $\operatorname{CM}(\Gamma_{A\cup C, B\cup C})$ 生成的理想等于

$$\langle \det \operatorname{CM}(\Gamma_{A',B'}) \mid A' \subset A \cup C,\ B' \subset B \cup C,\ \#A' = \#B' = \#C + 1 \rangle. \tag{13}$$

因此，极值条件独立理想等于

$$\mathrm{eCI}_G = \sum_{A \perp_e B \mid C} \langle \det \operatorname{CM}(\Gamma_{A',B'}) \mid A' \subset A \cup C,\ B' \subset B \cup C,\ \#A' = \#B' = \#C + 1 \rangle.$$

证明。 为简化以下证明，我们引入 Cayley–Menger 矩阵的一个变体，

$$\widetilde{\operatorname{CM}}(\Gamma) := \operatorname{CM}(-2\Gamma) = \begin{pmatrix} \Gamma & \mathbf{1} \\ \mathbf{1}^\top & 0 \end{pmatrix}. \tag{14}$$

注意，将 $\operatorname{CM}(\Gamma)$ 的每一行缩放 -2，并将最后一列缩放 $-1/2$，可得

$$\det(\widetilde{\operatorname{CM}}(\Gamma)) = (-2)^{d-1} \det(\operatorname{CM}(\Gamma)).$$

因此，$\operatorname{CM}(C+2) \times (C+2)$ 的所有子式所生成的理想等于 $\operatorname{CM}(\Gamma_{A\cup C, B\cup C})$ 的子式所生成的理想 $\Gamma_{A\cup C, B\cup C}$），并且如果将方程（13）中的每个 $\operatorname{CM}(\Gamma_{A',B'})$ 替换为 $\operatorname{CM}(\Gamma_{A',B'})$，所得理想仍然相同。

方程（13）中的每个生成元都是 $\operatorname{CM}(C+2) \times (C+2)$ 的一个子式的标量倍。因此，只需证明所有其他此类子式都可以写成方程（13）中多项式的理想组合。

首先考虑变量矩阵 $M = (m_{ij})_{i,\ j=1}^{n}$ 并令 $M_{\setminus i,\ \setminus j}$ 表示 M 在去掉其第 i 行和第 j 列之后。令 D_j 和 D_{ij} 如引理 3.4 和 3.5 中所述。注意，通过将第 i 行移至最后一行，并将第 j 列移至最后一列，我们有

$$D_{ij} = (-1)^{n-i}(-1)^{n-j} \det(\widetilde{\operatorname{CM}}(M_{\setminus i,\setminus j})) = (-1)^{i+j} \det(\widetilde{\operatorname{CM}}(M_{\setminus i,\setminus j})).$$

将这一事实与引理 3.4 和3.5相结合，我们看到

$$\det(M) \in \langle D_j \mid j \in [n] \rangle \subset \langle D_{ij} \mid i, j \in [n] \rangle = \langle \det(\widetilde{\operatorname{CM}}(M_{\setminus i,\setminus j})) \mid i, j \in [n] \rangle. \tag{15}$$

现在我们专门考虑 M 是 $\operatorname{CM}(C+2, \times)$ 的一个 $(\#C+2)$ 子式的情形。令 $\Gamma_{A\cup C,\ B\cup C}$ 表示方程（J 13）中的理想。那么特别地，对于所有15，$\det(\operatorname{CM}(M_{\setminus i,\setminus j})) \in J$ 成立。这一事实与方程（i，j）一起推出 $\det$(15) M，$\in J$ 正如所需。

第二个结论直接由极值条件独立理想的定义得出。□

每个非边 $(i,\ j)$ 对应的饱和陈述的子式 $i \perp_e j \mid [d] \setminus \{i,j\}$ 都包含在 eCI_G 中。因此，若 Γ 是簇 $\mathcal{V}(\mathrm{eCI}_G)$ 与严格条件负定锥 $\mathcal{C}^d$ 的交集中的一个矩阵，则当 $(i,\ j)$ 是 G 的非边时，$\mathrm{CM}(\Gamma)^{-1}$ 的 ij 项等于 0。因此， Γ 是由 G 指定的模型中的一个变差函数矩阵。换言之，该模型中的变差函数矩阵集合等于 $\mathcal{V}(\mathrm{eCI}_G)$ 与 $\mathcal{C}^d$ 的交集。

然而，在消失理想层面上，情况未必相同，因为 eCI_G 不一定是素理想。它可能具有一些关联素理想，其簇与开锥 $\mathcal{C}^d$ 不相交，因此在统计上无关。现在我们说明如何从 eCI_G 得到该模型的消失理想。

命题3.7。 设 G 是一个连通图。则

$$I_G = \sqrt{\mathrm{eCI}_G : (\det \mathrm{CM}(\Gamma))^\infty}.$$

证明。 考虑簇 $\mathcal{V}(\mathrm{eCI}_G) = W_1 \cup \cdots \cup W_m$的一个不可约分解。由于 I_G 是素理想且$\mathrm{eCI}_G \subset I_G$，因此 $V(I_G)$包含于这些不可约分支之一。由于$V(I_G)$是 $\mathcal{M}_G$的Zariski闭包，记为$\mathcal{M}_G$，不失一般性，我们可以假设$\mathcal{M}_G \subset W_1$。

首先，我们断言，对所有 $l > 1$, $W_l \subset \mathcal{V}$，(det CM(Γ))。 事实上，令 $X \in \mathcal{V}(\mathrm{eCI}_G)$为一个矩阵，使得CM($X$)可逆。接着考虑CM($X$)$^{-1}$。注意，如果$(i,\ j)$不是 G中的一条边，那么极值条件独立陈述 $\{i\} \perp_e \{j\} \mid [d] \setminus \{i,j\}$ 在该模型中成立。因此，从CM(X)中删除 i 行和 j 列所得的子式属于eCI_G。于是，该子式在 X处消失，且CM(X)$^{-1}$ 的 ij 项为0。因此， X 是对应于 G 的带权符号拉普拉斯矩阵的变差函数矩阵，因而属于$\mathcal{M}_G$。所以 X 属于 W_1 ，而 $\mathcal{V}(\mathrm{eCI}_G)$的所有其他不可约分支都包含于det(CM(Γ))的零点集。

这一论证还表明$W_1 = \mathcal{M}_G$。事实上，它表明 W_1 中的每个变差函数都由 G的加权拉普拉斯矩阵得到。因此，饱和 $\mathrm{eCI}_G : (\det \mathrm{CM}(\Gamma))^\infty$ 的簇等于 W_1 ，根据（Cox 等人，2025年，第4章第4节定理10(iii)）。由 Hilbert零点定理，我们得出

$$\mathcal{I}(\mathcal{M}_G) = I_G = \sqrt{\mathrm{eCI}_G : (\det \mathrm{CM}(\Gamma))^\infty}. \qquad \square$$

例3.8。 直接找出一个满足 $I_G \neq \mathrm{eCI}_G$ 的例子并不容易，因为对于标准 Gr¨obner 基方法能够快速终止的图，等式总是成立。然而，我们可以改编一个高斯图模型中的例子，得到一个满足此条件的极值例子。考虑一个有向图，其中两个父节点 $\{6,7\}$ 指向所有节点 $\{1,2,3,4,5\}$。由 d-分离得出的条件独立陈述与其道德化后的图相同，即对应于一个完全二部图并在父节点6和7之间多加一条边的无向图：$H := K_{5,\ 2} \cup \{(6,\ 7)\}$。对于这个模型，五元式， f_{pentad}，见（Sullivant，2018年，例14.2.6），属于由H 给出的无向高斯图模型的消失理想，但它不属于高斯条件独立性理想 CI_H。

现在我们考虑 $G := H * \{8\}$ 作为悬挂图，其中节点 8 与其他每个节点都相连。考虑 H Θ usler–Reiss 图模型中由¨指定的加权拉普拉斯矩阵G。删除第 8 行和第 8 列后，得到 7×7 由 H 指定的高斯图模型中的精度矩阵，因为每个对角线元素都独立于所有其他元素。因此， $\Sigma^{(8)}$ 是该高斯模型中的协方差矩阵，并且五元式 f_{pentad}在 $\Sigma^{(8)}$上消失。事实上，H¨usler–Reiss 模型 I_G 的理想等于由 H指定的高斯模型的消失理想经方程（4）中的协方差映射变换后的结果。如果我们考虑变换后的

五元式，

$$\begin{aligned}\tilde{f} = &-(-g_{23}+g_{28}+g_{38})(-g_{14}+g_{18}+g_{48})(-g_{34}+g_{38}+g_{48})(-g_{15}+g_{18}+g_{58})(-g_{25}+g_{28}+g_{58})\\ &+(-g_{13}+g_{18}+g_{38})(-g_{24}+g_{28}+g_{48})(-g_{34}+g_{38}+g_{48})(-g_{15}+g_{18}+g_{58})(-g_{25}+g_{28}+g_{58})\\ &+(-g_{23}+g_{28}+g_{38})(-g_{14}+g_{18}+g_{48})(-g_{24}+g_{28}+g_{48})(-g_{15}+g_{18}+g_{58})(-g_{35}+g_{38}+g_{58})\\ &-(-g_{12}+g_{18}+g_{28})(-g_{24}+g_{28}+g_{48})(-g_{34}+g_{38}+g_{48})(-g_{15}+g_{18}+g_{58})(-g_{35}+g_{38}+g_{58})\\ &-(-g_{13}+g_{18}+g_{38})(-g_{14}+g_{18}+g_{48})(-g_{24}+g_{28}+g_{48})(-g_{25}+g_{28}+g_{58})(-g_{35}+g_{38}+g_{58})\\ &+(-g_{12}+g_{18}+g_{28})(-g_{14}+g_{18}+g_{48})(-g_{34}+g_{38}+g_{48})(-g_{25}+g_{28}+g_{58})(-g_{35}+g_{38}+g_{58})\\ &-(-g_{13}+g_{18}+g_{38})(-g_{23}+g_{28}+g_{38})(-g_{24}+g_{28}+g_{48})(-g_{15}+g_{18}+g_{58})(-g_{45}+g_{48}+g_{58})\\ &+(-g_{12}+g_{18}+g_{28})(-g_{23}+g_{28}+g_{38})(-g_{34}+g_{38}+g_{48})(-g_{15}+g_{18}+g_{58})(-g_{45}+g_{48}+g_{58})\\ &+(-g_{13}+g_{18}+g_{38})(-g_{23}+g_{28}+g_{38})(-g_{14}+g_{18}+g_{48})(-g_{25}+g_{28}+g_{58})(-g_{45}+g_{48}+g_{58})\\ &-(-g_{12}+g_{18}+g_{28})(-g_{13}+g_{18}+g_{38})(-g_{34}+g_{38}+g_{48})(-g_{25}+g_{28}+g_{58})(-g_{45}+g_{48}+g_{58})\\ &-(-g_{12}+g_{18}+g_{28})(-g_{23}+g_{28}+g_{38})(-g_{14}+g_{18}+g_{48})(-g_{35}+g_{38}+g_{58})(-g_{45}+g_{48}+g_{58})\\ &+(-g_{12}+g_{18}+g_{28})(-g_{13}+g_{18}+g_{38})(-g_{24}+g_{28}+g_{48})(-g_{35}+g_{38}+g_{58})(-g_{45}+g_{48}+g_{58})\end{aligned}$$

˜我们看到， $f \in I_G \setminus \mathrm{eCI}_G$。事实上，顶点 6 和 7 没有出现在变量˜的任何下标中 f。但是，这些顶点出现在 G的每个分离陈述中，因此˜eCI_G 中的每个多项式的每一项都必须含有一个以下标为 6 或 7 的变量。所以， f 不属于 eCI_G。

4. Matrix Completion and the Extremal Maximum Likelihood Degree

°设 $G = (V,\ E)$ 为一个无向图。我们称一个对称矩阵 Γ 为相对于 的部分指定条件负定变差函数， G如果其对角线为零，并且对应于 G的团的所有主子矩阵都是条件负定的。我们称矩阵°是部分指定的，因为在下面的讨论中，我们只考虑 Γ 中与 G 的边相对应的条目，并将与非边相对应的条目“遗忘”。这些“被遗忘”的条目用占位符“?”表示。对于 $\mathring{\mathbb{R}} = \mathbb{R} \cup \{?\}$，我们记作 $\mathring{\Gamma} \in \mathring{\mathbb{R}}^{\#V \times \#V}$。给定一个部分指定的 CND变差函数，Hentschel等人 (2025年，定义 4.1) 定义如下的矩阵补全问题。

°**定义 4.1**。设 $G = (V,\ E)$ 为一个无向图，且 Γ 是相对于 G 的部分指定条件负定矩阵。我们称满足以下条件的条件负定矩阵 Γ（其对应的符号拉普拉斯矩阵为 Θ）为

$$\begin{aligned}\Gamma_{ij} &= \mathring{\Gamma}_{ij}, \qquad \forall (i,j) \in E,\\ \Theta_{ij} &= 0, \qquad \forall (i,j) \notin E,\end{aligned}$$

°由 G 和 Γ 给出的矩阵补全问题的一个解。

Hentschel等人 (2025年) 表明，定义 4.1 中的矩阵补全问题与退化高斯分布的最大似然估计相关，其中协方差被限制为符号拉普拉斯矩阵。事实上，对于连通无向图 $G = (V,\ E)$ 以及某个样本变差函数矩阵 Γ ,–该矩阵会产生一个部分指定的条件负定变差函数；矩阵补全问题的解就是与下列方程的唯一解相对应的变差函数：

$$\max_{\Theta \in \mathbb{U}^d} \left\{ \log \mathrm{Det}(\Theta) + \frac{1}{2} \operatorname{tr}\left(\Theta\overline{\Gamma}\right) \right\}, \qquad \text{s.t. } \Theta_{ij} = 0 \ \ \forall (i,j) \notin E, \tag{16}$$

其中，Det 表示伪行列式。

退化高斯对数似然与 H¨usler–Reiss 指数测度密度 λ 之间的相似性，为参数估计提供了一种颇具吸引力的选择，因为 H¨usler–Reiss 对数似然由于其归一化常数而难以处理（Hentschel 等，2025；R¨ottger 等，2023）。这里，样本变差函数选为经验变差函数（见（10）），它是 H¨usler–Reiss 分布的变差函数参数的相合估计量。一个关键观察是，对于所有 $i \neq j$，$\log \mathrm{Det}(\Theta) + \frac{1}{2}\mathrm{tr}\left(\Theta\Gamma\right)\} = -\Gamma_{ij}$（R¨ottger 等，2023，命题 A.5）。因此，（16）的临界点由具有部分指定条件负定矩阵 Γ的矩阵补全问题给出。这意味着，定义 4.1 中的矩阵补全问题的解（此时 Γ 是 Engelke 和 Volgushev（2022）的经验变差函数）是关于 G的 H¨usler–Reiss 图模型的替代最大似然估计量。

定义中的矩阵补全问题4.1 是一个半代数问题，因为我们要在解满足条件负定这一约束下，求解一个多项式方程组。若不考虑定性约束，这就是一个纯代数问题，因此交换代数中的方法有助于分析该问题的解空间。由此，自然可以作出如下定义。

定义 4.2. 设 Γ 是一个关于图 $G = (V, E)$ 的一般部分指定条件负定矩阵。我们将定义 4.1中的矩阵补全问题的复数解个数，或等价地，优化问题（16）的复数临界点个数（不受条件负定性的限制），称为极值（替代）最大似然度。记作 eMLD(G)。

例4.3。 设 $G = K_d$ 为顶点集为 d 的完全图。那么， Γ 是定义 4.1中矩阵补全问题的解，它完全由条件负定变差函数 Γ确定，因为相应的 Θ不受任何约束。因此，对任意 K_d， $= 1$ 均为 d。

我们为可分解为两个分量的图的极值最大似然度推导出一个乘法公式。

定理 4.4。 设 $G = (V, E)$ 是一个由集合 A、B和分离团 C分解的连通图，且 $A \cup B \cup C = V$。那么

$$\mathrm{eMLD}(G) = \mathrm{eMLD}(G[A \cup C]) \cdot \mathrm{eMLD}(G[B \cup C]). \tag{17}$$

证明。 由 Engelke 和 Taeb (2025年，定理 2) 可知，边缘分布的 H¨usler–Reiss 精度矩阵 AC 和 BC 为

$$\theta(\Gamma_{A\cup C, A\cup C}) = \Theta_{AC,AC} - \Theta_{AC,B}\Theta_{B,B}^{-1}\Theta_{B,AC},$$
$$\theta(\Gamma_{B\cup C, B\cup C}) = \Theta_{BC,BC} - \Theta_{BC,A}\Theta_{A,A}^{-1}\Theta_{A,BC}.$$

由于 C 是一个分离集，我们观察到 $\Theta_{A,\ B} = \mathbf{0}$，由此可以得出

$$\theta(\Gamma_{A\cup C, A\cup C}) = \begin{pmatrix} \Theta_{A,A} & \Theta_{A,C} \\ \Theta_{C,A} & * \end{pmatrix}, \qquad \theta(\Gamma_{B\cup C, B\cup C}) = \begin{pmatrix} * & \Theta_{C,B} \\ \Theta_{B,C} & \Theta_{B,B} \end{pmatrix}. \tag{18}$$

假设给定一个一般的汇总统计量 Γ。G的补全问题的方程为：对于所有的 $(i, j) \in E$，有 $\Gamma_{ij} = \Gamma_{ij}$；对于所有的 $(i, j) \notin E$，有 $\Theta_{ij} = 0$。由刻画式 (18) 可知，具有变差函数 $\Gamma_{A\cup C, A\cup C}$ 的边缘的补全问题因此为：对于所有的 $(i, j) \in E[A\cup C]$，有 $\Gamma_{ij} = \Gamma_{ij}$；对于所有的 $(i, j) \notin E[A\cup C]$，有 $\Theta_{ij} = 0$。现在令 Γ 表示关于 G 的矩阵补全问题的解，其中汇总统计量 Γ 是任意给定的。则 $\Gamma_{A\cup C, A\cup C}$ 满足关于 $G[A\cup C]$ 的边缘补全问题，而 $\Gamma_{B\cup C, B\cup C}$ 满足关于 $G[B\cup C]$ 的边缘补全问题。显然，边缘补全解在区块 $\Gamma_{C,C}$ 上一致，因为它们

°在那里都等于$\Gamma_{C,\,C}$。因此，给定两个边缘问题的解后，我们可以通过求解以下问题，得到原补全问题的一个解

$$\Gamma = \begin{pmatrix} \widehat{\Gamma}_{A,A} & \widehat{\Gamma}_{A,C} & ? \\ \widehat{\Gamma}_{C,A} & \widehat{\Gamma}_{C,C} & \widehat{\Gamma}_{C,B} \\ ? & \widehat{\Gamma}_{B,C} & \widehat{\Gamma}_{B,B} \end{pmatrix} \qquad \Theta = \begin{pmatrix} * & * & \mathbf{0} \\ * & * & * \\ \mathbf{0} & * & * \end{pmatrix}.$$

这意味着，边缘补全问题的每一对解都会产生原始补全问题的一个解，其意义在于 Θ 完全由（18）中的边缘解所确定。由于函数 $\Gamma = \gamma(\Theta^+)$ 是双射，相应的变差函数 Γ 也被完全确定。因此，解的总数可以表示为一个乘积。□

作为推 论，定理4.4，我们得出弦图的极值最大似然次数为1。

推论 4.5. 设 G 为一个弦图。则$\mathrm{eMLD}(G) = 1$。

证明。 每个弦图都可以通过依次粘合团得到。每个团都是完全图，其极值最大似然次数为1，见例4.3。通过应用定理4.4 并对团的个数使用归纳法，结论随之成立。 □

接下来，我们将推导弦图上条件负定矩阵补全问题的闭式解。对于某个 $d \times d$矩阵 M 以及某个满足$\#V = d$的指标集 $A \subset V$，令 $\left[M_{A,A}\right]^d$为 $d \times d$矩阵，它等于$M_{i,j}$（当 $i, j \in A$时），而在其余位置为零。我们提醒读者，对于某个条件负定变差函数矩阵 Γ，函数 $\theta(\Gamma)$返回相应的符号拉普拉斯矩阵。此外，注意 $\theta([\Gamma_{ii}]) = [0]$ 对所有 $i \in V$成立。首先，我们研究连通图仅由两个团构成的情形。

引理4.6。 设 $G = (V, E)$ 是一个连通图，且$\#V = d$ 由两个团 A, B°组成，其中 $A \cup B = V$。设 Γ 是相对于 G的部分指定条件负定变差函数。那么，矩阵补全问题的解为

$$\Theta = \left[\theta(\mathring{\Gamma}_{A,A})\right]^d + \left[\theta(\mathring{\Gamma}_{B,B})\right]^d - \left[\theta(\mathring{\Gamma}_{A\cap B,A\cap B})\right]^d$$

证明。 设 $k \in A \cap B$，并设 $G_k = (V \setminus \{k\}, E_k)$为从 G 中移除节点 k 后得到的子图。定义双射 $\varphi_k(\Gamma) = \frac{1}{2}(\Gamma_{ik} + \Gamma_{jk} - \Gamma_{ij})_{i,j \in V\setminus\{k\}}$，并设$S^{(k)} = \varphi_k(\mathring{\Gamma})$。正定矩阵补全问题

$$\begin{aligned} \Sigma^{(k)}_{ij} &= S^{(k)}_{ij}, \qquad \forall (i,j) \in E_k, \\ \Theta^{(k)}_{ij} &= 0, \qquad \forall (i,j) \notin E_k, \end{aligned}$$

当 $S^{(k)}_A{}_{,A} = \varphi_k(\mathring{\Gamma}_{A,A})$和 $S^{(k)}_B{}_{,B} = \varphi_k(\mathring{\Gamma}_{B,B})$均为正定矩阵时，有唯一解 $\Sigma^{(k)}$。由于 φ_k 将严格条件负定矩阵映射为正定矩阵（Hentschel 等，2025），因此该条件成立。对任意 $D \subset V$，令 $K_{[D]} := (S^{(k)}_{D\,D})^{-1}$，但 $D = \{k\}$除外；对于 $D = \{k\}$，令 $K_{[k]} = 0$。根据Lauritzen（1996，命题5.6），该解满足

$$\Theta^{(k)} = (\Sigma^{(k)})^{-1} = \left[K_{[A]}\right]^{d-1} + \left[K_{[B]}\right]^{d-1} - \left[K_{[A\cap B]}\right]^{d-1}.$$

根据Hentschel等人（2025年，引理4.3）， $\Gamma = \varphi_k^{-1}(\Sigma^{(k)})$是条件负矩阵补全问题的解。此外，注意到对于 $k \in D \subseteq V$，它是 $\theta^{(k)}(\mathring{\Gamma}_{D,D}) = K_{[D]}$。因此，

$$\Theta^{(k)} = \left[\theta^{(k)}(\mathring{\Gamma}_{A,A})\right]^{d-1} + \left[\theta^{(k)}(\mathring{\Gamma}_{B,B})\right]^{d-1} - \left[\theta^{(k)}(\mathring{\Gamma}_{A\cap B,A\cap B})\right]^{d-1},$$

现在，由于

$$\Theta_{ij} = \begin{cases} \Theta^{(k)}_{ij}, & i \neq k, j \neq k, \\ -\sum_{u \neq k} \Theta^{(k)}_{iu}, & i \neq k, j = k, \\ \sum_{u \neq k, v \neq k} \Theta^{(k)}_{uv}, & i = k, j = k, \end{cases}$$

是一个线性映射，因此结论成立。 □

由此引出以下定理。

定理 4.7. 设 $G = (V, E)$ 是一个弦连通图，其极大团集合为 $\#V = d$，记为 $\mathring{\mathcal{C}}$；分离团集合为 $\mathcal{S}$。设 Γ是相对于 G的部分指定条件负定变差函数。那么，相应的矩阵补全问题可由以下方法求解

$$\Theta = \sum_{C \in \mathcal{C}} \left[\theta(\mathring{\Gamma}_{C,C})\right]^d - \sum_{S \in \mathcal{S}} \nu(S) \left[\theta(\mathring{\Gamma}_{S,S})\right]^d,$$

其中， $\nu(S)$ 是分离团 S 在一个完美序列中出现的次数 $e.$

证明。 根据 Lauritzen(1996，命题 2.17），任意弦图的团都满足运行交性质，也就是说，这些团可以按如下顺序排列： $C_1, \ldots, C_m$，满足 $m = \#\mathcal{C}$，使得对每个 $j = 2, \ldots m$，都存在一个 $i < j$ 满足

$$C_j \cap \bigcup_{\ell=1}^{j-1} C_\ell = C_j \cap C_i.$$

这意味着与序列中所有先前出现的团的交集仅位于一个团中。非空交集构成分离团集合 $\mathcal{S}$。按照 Hentschel等人（2025年），令$\Gamma_1 = \mathring{\Gamma}_{C_1,\ C_1}$、 $V_n = C_1 \cup \ldots \cup C_n$和 $K_n = V_n \times V_n$。对于 $n = 2,$ ……， m，令 $\mathring{\Gamma}_n \in \mathring{\mathbb{R}}^{\#V_n \times \#V_n}$的对角线为零，其余由下式给出

$$(\mathring{\Gamma}_n)_{ij} = \begin{cases} (\Gamma_{n-1})_{ij}, & (i,j) \in K_{n-1}, \\ \mathring{\Gamma}_{ij}, & (i,j) \in E|_{V_n} \setminus K_{n-1}, \\ ?, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

°令 Γ_n 表示部分指定条件负定矩阵 Γ_n与图 G_n =（V_n，$K_{n-1} \cup E_{|V_n}$）的矩阵补全问题的解。由引理4.6，H¨usler–Reiss精度矩阵对应于 Γ_n 为

$$\begin{aligned} \theta(\Gamma_n) &= \left[\theta((\mathring{\Gamma}_n)_{V_{n-1},V_{n-1}})\right]^{\#V_n} + \left[\theta((\mathring{\Gamma}_n)_{C_n,C_n})\right]^{\#V_n} - \left[\theta((\mathring{\Gamma}_n)_{V_{n-1}\cap C_n, V_{n-1}\cap C_n})\right]^{\#V_n} \\ &= \left[\theta(\Gamma_{n-1})\right]^{\#V_n} + \left[\theta(\mathring{\Gamma}_{C_n,C_n})\right]^{\#V_n} - \left[\theta(\mathring{\Gamma}_{V_n\cap C_n, V_n\cap C_n})\right]^{\#V_n}. \end{aligned}$$

现在，由Hentschel等人（2025年，命题4.4）， Γ_m 存在，并且是补全°问题在部分指定条件负定矩阵 Γ 与图 G下的唯一解。通过递归应用该解，本定理得证。□

我们给出以下例子来说明定理 4.7。

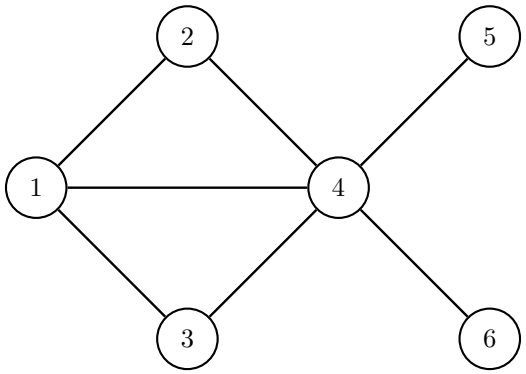


FIGURE 2. 一个可分解图

例 4.8。 设 G 为图 2 中的图，并假设给定了一个部分指定的°关于 Γ的条件负定变差函数矩阵 G。该图模型的参数矩阵为

$$\Theta = \begin{pmatrix} \Theta_{11} & \Theta_{12} & \Theta_{13} & \Theta_{14} & 0 & 0 \\ \Theta_{21} & \Theta_{22} & 0 & \Theta_{24} & 0 & 0 \\ \Theta_{31} & 0 & \Theta_{33} & \Theta_{34} & 0 & 0 \\ \Theta_{41} & \Theta_{42} & \Theta_{43} & \Theta_{44} & \Theta_{45} & \Theta_{46} \\ 0 & 0 & 0 & \Theta_{54} & \Theta_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Theta_{64} & 0 & \Theta_{66} \end{pmatrix},$$

其零元素由 G 中的缺失边指定。图 G 有团

$$C_1 = \{1,2,4\}, \qquad C_2 = \{1,3,4\}, \qquad C_3 = \{4,5\}, \qquad C_4 = \{4,6\},$$

以及分离团

$$S_1 = \{1,4\}, \qquad S_2 = \{4\}$$

及其重数

$$\nu(S_1) = 1, \qquad \nu(S_2) = 2.$$

根据定理 4.7，我们得到矩阵补全问题的以下公式。为方便起见° ，我们记 Γ_C 而非 $\Gamma_{C,C}$。

$$\widehat{\Theta} = \begin{pmatrix} \theta_{11}(\mathring{\Gamma}_{C_1}) & \theta_{12}(\mathring{\Gamma}_{C_1}) & 0 & \theta_{14}(\mathring{\Gamma}_{C_1}) & 0 & 0 \\ \theta_{12}(\mathring{\Gamma}_{C_1}) & \theta_{22}(\mathring{\Gamma}_{C_1}) & 0 & \theta_{24}(\mathring{\Gamma}_{C_1}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \theta_{14}(\mathring{\Gamma}_{C_1}) & \theta_{24}(\mathring{\Gamma}_{C_1}) & 0 & \theta_{44}(\mathring{\Gamma}_{C_1}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \theta_{11}(\mathring{\Gamma}_{C_2}) & 0 & \theta_{13}(\mathring{\Gamma}_{C_2}) & \theta_{14}(\mathring{\Gamma}_{C_2}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \theta_{13}(\mathring{\Gamma}_{C_2}) & 0 & \theta_{33}(\mathring{\Gamma}_{C_2}) & \theta_{34}(\mathring{\Gamma}_{C_2}) & 0 & 0 \\ \theta_{14}(\mathring{\Gamma}_{C_2}) & 0 & \theta_{34}(\mathring{\Gamma}_{C_2}) & \theta_{44}(\mathring{\Gamma}_{C_2}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$+ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \theta_{44}(\mathring{\Gamma}_{C_3}) & \theta_{45}(\mathring{\Gamma}_{C_3}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \theta_{45}(\mathring{\Gamma}_{C_3}) & \theta_{55}(\mathring{\Gamma}_{C_3}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \theta_{44}(\mathring{\Gamma}_{C_4}) & 0 & \theta_{46}(\mathring{\Gamma}_{C_4}) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \theta_{46}(\mathring{\Gamma}_{C_4}) & 0 & \theta_{66}(\mathring{\Gamma}_{C_4}) \end{pmatrix}$$

$$-1\begin{pmatrix}\theta_{11}(\mathring{\Gamma}_{S_1}) & 0 & 0 & \theta_{14}(\mathring{\Gamma}_{S_1}) & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ \theta_{14}(\mathring{\Gamma}_{S_1}) & 0 & 0 & \theta_{44}(\mathring{\Gamma}_{S_1}) & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix}-2\begin{pmatrix}0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0\end{pmatrix}.$$

命题 4.9。 完全二部图$K_{2,\ n}$ 的极值最大似然次数为 $2n$.

本证明沿用了Uhler (2012年，定理4.3)的证明中所使用的论证，其中$K_{2,\ n}$ 的高斯最大似然度被证明为 $2n+1$。解的数目之差是由于H ¨usler–Reiss模型中使用的矩阵CM(Γ)被增广了一行和一列1-向量，并在新的对角线位置上放置了一个0。因此，所关注子式的次数比高斯分布情形减少了一。

$\widetilde{\ }$证明。 我们不再使用矩阵CM(Γ)的标准形式，而再次使用形式CM(Γ)，如(14)所示。与(1)类似的公式由R ¨ottger等人 (2023年，方程11)给出，即

$$\widetilde{\mathrm{CM}}(\Gamma)\ =\ -2\begin{pmatrix}\Theta & *\\ * & *\end{pmatrix}^{-1},$$

其中星号是关于 Γ的元素的有理函数。

我们将矩阵 $\widetilde{\mathrm{CM}}(\Gamma)$ 写成分块形式，将 $A=\{1,\dots,n\}$ 设为对应于二部图前 n 个节点（它们之间没有边）的元素，并将 $B=\{n+1,n+2\}$设为剩余两个变量以及矩阵的最后一行/列。我们用 g_{ij} 表示 CM(Γ) 中对应于边 (i,j) 的（已知）$\widetilde{\ }$元素，并将对角线填为零；而用 y 表示$\widetilde{\ }$元素 $(n+1,n+2)$，用 z_{ij} 表示其余所有非边。因此，CM(Γ) 具有如下分块形式

$$\widetilde{\mathrm{CM}}(\Gamma)=\left(\begin{array}{cccc|ccc}0&z_{12}&\cdots&z_{1n}&g_{1n+1}&g_{1n+2}&1\\z_{12}&0&\cdots&z_{2n}&g_{2n+1}&g_{2n+2}&1\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots\\z_{13}&z_{23}&\cdots&0&g_{34}&g_{35}&1\\\hline g_{14}&g_{24}&\cdots&g_{3n}&0&y&1\\g_{15}&g_{25}&\cdots&g_{3n}&y&0&1\\1&1&\cdots&1&1&1&0\end{array}\right).$$

目标是求未知数 y 和 z_{ij}所对应的矩阵补全数量。舒尔补

$$\Gamma_{A,A}-\begin{pmatrix}\Gamma_{A,B} & \mathbf{1}\end{pmatrix}\widetilde{\mathrm{CM}}(\Gamma_{B,B})^{-1}\begin{pmatrix}\Gamma_{B,A}\\ \mathbf{1}^{\top}\end{pmatrix}$$

与逆矩阵 $\widetilde{\mathrm{CM}}(\Gamma)^{-1}$ 的 (A,A) 部分具有相同的零元素。由于 Θ_{AA} 是一个对角矩阵，上述舒尔补的所有非对角元素均为零。由此得到方程 (19)

$$z_{ij}=\tfrac{1}{2}(-y+g_{i,n+1}+g_{i,n+2}+g_{j,n+1}+g_{j,n+2}-\frac{g_{i,n+1}g_{j,n+1}-g_{i,n+1}g_{i,n+2}-g_{i,n+2}g_{j,n+1}+g_{i,n+2}g_{j,n+2}}{y})$$

对于除（$i,\ j$）以外的所有非边（$n+1,\ n+2$）。此外，$\Theta_{n+1,\ n+2}=0$，因此子式$\widetilde{\ }\det(\mathrm{CM}(\Gamma_{\setminus(n+1),\ \setminus(n+2)}))$ 为零，从而得到一个关于 z_{ij} 的齐次多项式，其次数为 n。将该多项式乘以 y^n，并利用方程（19）（仅用 yz_{ij} 中的二次多项式替换次数为 2 的项）消去 z_{ij}，得到一个关于 y 的次数为 $2n$的方程。剩余项z_{ij} 随后可以通过线性方式恢复。□

例 4.10。 设 $G = C_4$ 为无向 4-环。这是最小的非弦图，并且可以解释为完全二部图 $K_{2,\,2}$，其部集为 $\{1,3\}$ 和 $\{2,4\}$。因此，作为命题 4.9 在 $n = 2$时的特殊情形，我们得到 4-环的极值最大似然次数现在为 $2{\cdot}2 = 4$，而高斯最大似然度为 5。这意味着，4-环的极值最大似然估计问题可以用根式求解，而高斯最大似然估计问题则不能。

变差函数矩阵的矩阵补全问题（参见定义4.1）总是可以改写为关于 $\Sigma^{(k)}$ 和 $\Theta^{(k)}$ 的多项式方程与不等式，适用于任意 $k \in V$。我们还对精度矩阵施加行和为零形式的线性约束。然而，若 k 与所有其他节点都相连，这等价于关于 $G \setminus k$ 的正定矩阵补全问题。事实上，对于悬挂图，我们可以如下将极值最大似然次数与高斯问题的最大似然度联系起来。我们用 MLD(G) 表示与 G 相关联的高斯图模型的最大似然度；这就是相应的正定矩阵补全问题的度数，如Sturmfels 和 Uhler (2010年)所述。

命题 4.11。 对于任意图 G，其悬挂图的极值最大似然次数等于其高斯最大似然度：

$$\mathrm{eMLD}(G \cup \{0\}) = \mathrm{MLD}(G).$$

证明。 在图 $G \cup \{0\} = (V_0,\ E_0)$ 中，节点 0 与其他所有节点都相连。因此，对于所有 $i \in V$，$\Gamma_{i0} = \overline{\Gamma}_{i0}$ 均成立；也就是说，Θ 的第 0 行和第 0 列没有施加任何零约束。由此可知，矩阵补全问题

$$\begin{aligned} \Gamma_{ij} &= \overline{\Gamma}_{ij}, \qquad \forall (i,j) \in E_0, \\ \Theta_{ij} &= 0, \qquad \forall (i,j) \notin E_0, \end{aligned}$$

等价于补全问题

$$\begin{aligned} \Sigma^{(0)}_{ij} &= S^{(0)}_{ij}, \qquad \forall (i,j) \in E, \\ \Theta^{(0)}_{ij} &= 0, \qquad \forall (i,j) \notin E, \end{aligned}$$

其中 $\Sigma^{(0)} = \varphi_0(\Gamma)$ 且 $S^{(0)} = \varphi_0(\Gamma)^{-}$ 后者是相对于 G 的正定矩阵补全问题。因此，悬挂图 $G \cup \{0\}$ 的极值最大似然次数等于 G 的极大似然度。□

以上例子引出了以下猜想。

猜想 4.12 猜想。 对于任意图 G，其极值最大似然次数不超过其高斯最大似然度：

$$\mathrm{eMLD}(G) \le \mathrm{MLD}(G). \tag{20}$$

注意，在（20）中，根据推论 4.5，对于弦图等号成立（两边均为 1）；而且，不等式也可能是严格的，命题$K_{2,\,n}$ 的情形便是如此（根据命题4.9，两边相差 1）。此外，我们注意到，这两个极大似然度之差可能随 n 呈指数级增长：

命题 4.13。 对于任意 $n \ge 3$，以下结果适用于 n-圈 C_n 的高斯最大似然度和极值最大似然次数：

(i) $\mathrm{MLD}(C_n) - \mathrm{eMLD}(C_n) = 2^{n-2}(n-5) + n + 1$
(ii) $\mathrm{MLD}(C_n) = \mathrm{eMLD}(C_n)^2 - \mathrm{eMLD}(C_{n-1}) \cdot \mathrm{eMLD}(C_{n+1})$.

证明。 这两个结论都可通过直接计算得出，具体而言，使用两个 ML 度的精确值即可：

$$\mathrm{MLD}(C_n) = (n-3)2^{n-2} + 1, \tag{21}$$

$$\mathrm{eMLD}(C_n) = 2^{n-1} - n. \tag{22}$$

方程（21）由 Drton 等人 （2009）提出猜想，并由 Dinu 和 Vodi˘cka （2025年）近期证明。方程（22）则由（Cox 等人，2024，定理 2.13）在同构多项式的语境下以另一种语言证明。□

命题 4.13（ii）表明，两个循环最大似然度之间存在深层联系，且两组序列之间可能存在某种行列式变换。我们还注意到，我们的猜想 4.12将蕴含（Cox 等，2024，猜想 2.17），这等价于如下表述：一个图是弦图，当且仅当其极值最大似然度为 1。只有弦图的高斯最大似然度为 1，这一事实见于（Sturmfels 和 Uhler，2010年，定理 3），完整证明见Am´endola 等人 （2024）。

5. 极值最大似然阈值

在高斯情形下，图的最大似然阈值 是能够保证最大似然估计量一般存在的数据点数量。换言之，它是使得对于秩为 r 的一般样本协方差矩阵，最大似然估计量存在的最小 r。在 H¨usler-Reiss 图模型中，替代最大似然估计所用的样本统计量是经验变异函数，见公式（10）。经验变异函数是在 H¨usler–Reiss 分布的支撑集上每个正典范半空间对应的子样本中计算样本变差函数后取其平均值得到的。然而，由于观测值通常包含在多个典范半空间中，因此没有明确的公式能够确定经验变异函数的维数与数据点总数之间的关系。不过，对于一般数据点，随着数据点数量增加，经验变异函数的维数不会降低。也就是说，经验变异函数的维数关于一般数据点数量至少是弱单调的。因此，我们将极值最大似然阈值定义为经验变异函数矩阵的最小维数，使得替代最大似然估计量作为定义4.1中矩阵补全问题的解，以概率 1 存在。

变差函数的维数可以通过经验协方差矩阵的秩轻松计算得出。如果计算经验变差函数矩阵的维数后发现其大于或等于极值最大似然阈值，这就证明替代最大似然估计几乎必然存在。另一方面，如果维数小于极值最大似然阈值，则可能需要更多数据点，才能确保替代最大似然估计存在。这在多元极值的情形下尤其重要，因为极端数据点较难获得。

定义 5.1. G的极值最大似然阈值 记为 eMLT(G)，它是使得维数为 m 的典型经验变差函数矩阵存在严格条件负定补全的最小 m 。弱最大似然阈值是使得存在一个维数为 m 的经验变差函数矩阵 Γ_0 ，且该矩阵存在严格条件负定补全的最小 m。

极值最大似然阈值可以解释为使得对于维数为 m的典型经验变差函数矩阵，替代 H¨usler–Reiss 最大似然估计存在的最小 m。类似地，如果弱最大似然阈值小于或等于 m，那么对于某个维数为 m的经验变差函数矩阵欧几里得开集，替代最大似然估计均存在。

现在，我们建立图的极值最大似然阈值的一些界。我们需要以下图论定义。对于图 G， G 的最大完全子图中的顶点数称为 G 的团数，记作 $q(G)$。 $G=(V,E)$的弦覆盖是指一个图 $G'=(V,E')$，其顶点集与 G 相同，且 $E\subset E'$，并且 G' 是弦图。令 G' 为 G中团数最小的弦覆盖。那么，G的树宽

为 tw(G) = q(G′) − 1。这些值按如下方式界定高斯情形下的最大似然阈值。

定理 5.2 (Buhl(1993), 推论 3.3)。 在由 G指定的高斯图模型中，最大似然阈值有如下界：

$$q(G) \le \mathrm{MLT}(G) \le \mathrm{tw}(G) + 1.$$

本节中，我们证明极值情形下的类似界。下界的证明完全类似。不过，将 Γ 解释为欧氏距离矩阵，使得极值情形下上界的证明更为简洁。

定理 5.3。 设 G 是一个含有 d 个顶点且非完全图的连通图。在由 G 指定的 ***H ¨usler-Reiss*** 图模型中，极值最大似然阈值有如下界：

$$q(G) - 1 \le \mathrm{eMLT}(G) \le \mathrm{tw}(G).$$

证明。由于 G 不是完全图，因此有 $q(G) < d$。设 Σ 是一个秩为 r 的一般样本协方差矩阵，并设 $\Gamma = \gamma(\Sigma)$，使得 Γ 是一个维数为 r 的一般样本变差函数。假设$r < q(G) - 1$。设 C 是 G 中大小为 $q(G)$ 的一个团。考虑 Σ 的 $C \times C$ 子矩阵，其秩至多为 $q(G) - 2$。因此，由命题 A.2，$\Gamma_{C,C}$ 不是严格条件负定的。因此，由命题 A.3，不存在满足 $\Gamma_{C,C} = \Gamma_{C,C}$ 的严格条件负定矩阵 Γ 。换言之，该矩阵补全问题没有严格条件负定解，且 $\Gamma_{C,C}$ 的最大似然估计不存在。因此，eMLT(G) ≥ q(G) − 1.

现在我们将注意力转向上界，并断言 eMLT(G) ≤ tw(G)。令 $G' = (V, E')$ 为 G 的一个团数最小的弦覆盖，使得 tw(G) = q(G′) − 1。由于 G 不是完全图，G' 也不是完全图，因为对于 G 的任意非边 f，图 $([d], \binom{[d]}{2} - \{f\})$ 都是 G 的一个弦覆盖。因此 tw(G) < d − 1。令 Γ 为一个维数为 tw(G) 的一般（不一定严格条件负定）条件负定矩阵。如果 tw(G) + 2 ≥ d，那么 Γ 是严格条件负定矩阵，且我们知道它的最大似然估计存在。因此我们假设 tw(G) < d − 2。我们有 $\Gamma = \gamma(\Sigma)$，其中 Σ 是一个秩为 tw(G) 的半正定矩阵。

我们对 d 进行归纳。由于 G' 是弦图，它可分解为 $A \cup C$ 和 $B \cup C$，其中 C 是一个团，将 A 与 B 分隔开。由于 Σ是秩为 tw(G) 的一般矩阵，我们有

$$\mathrm{rank}(\Sigma_{A\cup C, A\cup C}) = \min\{\#(A \cup C), \mathrm{tw}(G)\}.$$

我们声称，这至少等于诱导子图 $G[A \cup C]$ 的树宽。事实上，#(A ∪ C) 是该诱导子图的顶点数，大于其树宽。对于第二个界，注意对任意 $S \subset [d]$， $G'[S]$ 都是 $G[S]$ 的弦覆盖。令 H 为 $G[S]$ 的团数最小的弦覆盖。则 $q(H) \le q(G'[S])$。因此

$$\mathrm{tw}(G[S]) \le q(G'[S]) - 1 \le q(G') - 1 = \mathrm{tw}(G).$$

因此，$\mathrm{rank}(\Sigma_{A\cup C,\ A\cup C}) \ge \mathrm{tw}(G[A \cup C])$， $B \cup C$ 也同理。

考虑样本变差函数矩阵 $\Gamma_{A\cup C,\ A\cup C}$ 和 $\Gamma_{B\cup C,\ B\cup C}$ 的限制。根据归纳法，分别存在它们的最大似然估计 $\hat{\Gamma}^A$ 和 $\hat{\Gamma}^B$ ，且均为严格条件负定矩阵。它们都是单形 $\Delta_{A\cup C} \subset \mathbb{R}^{A\cup C}$ 和 $\Delta_{B\cup C} \subset \mathbb{R}^{B\cup C}$ 各顶点的欧几里得距离矩阵，其维数分别为 #(A ∪ C) 和 #(B ∪ C)。由于 C 是一个团，$\hat{\Gamma}^A_{C,\ C} = \Gamma_{C,\ C} = \hat{\Gamma}^B_{C,\ C}$。因此， $\Delta_{A\cup C}$ 和 $\Delta_{B\cup C}$ 中与 C 的元素相对应的面（分别记作 $\Delta^C_{A\cup C}$ 和 $\Delta^C_{B\cup C}$ ）是同构的。我们可以施加刚性变换，使得

$$\Delta^C_{A\cup C} \subset \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{A\cup C} \mid x_i = 0 \text{ for all } i \in A\}, \text{ and}$$
$$\Delta^C_{B\cup C} \subset \{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{B\cup C} \mid y_i = 0 \text{ for all } i \in B\},$$

因此， $\Delta_{A\cup C}$ 和 $\Delta_{B\cup C}$ 中由 C 索引的坐标相等。

通过在适当的坐标位置补零来扩展 $\Delta_{A\cup C}$ 和 $\Delta_{B\cup C}$ 的顶点，我们可以将它们嵌入 $\mathbb{R}^{A\cup C\cup B}$ 中，使其在对应于 C中元素的顶点上相一致。取它们的凸包得到 $\mathbb{R}^{A\cup C\cup B}$ 中的一个单纯形 Δ，其维数为 $\#(A\cup C\cup B)-1$。因此， Δ、 Γ^{Δ}的欧氏距离矩阵是严格条件负定的，并且对于每个 $(i,\ j)\ \in\ E'$ 都具有 $\Gamma^{\Delta}_{ij}\ =\ \Gamma_{ij}$ 。特别地，对于 G中的所有边，它都与 Γ 一致。因此， Γ^{Δ} 是 Γ的严格条件负定补全。根据Hentschel等人（2025年，命题4.6），由于存在这样的补全，最大似然估计也存在。□

在 Uhler （2011年）中，消元判据 给出了最大似然估计以概率 1 存在的代数条件。我们在极值情形下推导出一种消元判据，它涉及从一个不同的行列式理想中消去变量。我们将该理想定义如下：

$$J_{G,r}\subset\mathbb{C}[\gamma_{ij}\mid 1\leq i<j\leq d]$$

首先，我们定义

$$I_r\subset\mathbb{C}[\sigma_{ij}\mid 1\leq i\leq j\leq d]$$

为一般对称矩阵 $r+1$ 的所有（ $\times$ ）$r+1$（ Σ）子式所生成的理想。其簇由所有秩至多为 r 的对称矩阵构成。接着，令 J_r 由 I_r 经过线性坐标变换得到，该变换将 Γ映射为 σ（Γ），见公式 3。最后，通过消去 J_r 中所有满足 $(i,\ j)$ 不是图的边的变量 γ_{ij}，得到 $J_{G,\ r}$。

定理 5.4。 设 $r\ <\ d$。如果 $J_{G,\ r}$ 是零理想，那么对于维数为 r 的一般样本变差函数矩阵，最大似然估计以概率 *1* 存在。

证明。令 $\mathcal{V}(J_{G,r-2})$ 表示理想 $J_{G,r}$ 的簇。它是将 $\mathcal{V}(J_r)$ 投影到充分统计量锥 $\mathcal{C}_G$ 上所得结果的 Zariski闭包，即将 CND 矩阵锥投影到 G 的边所对应的元素上。令 $\dim(\mathcal{V}(J_{G,r}))\ =\ k$，并令 μ 为一个 k 维的 Lebesgue测度。我们声称，若 $\mu(\mathcal{V}(J_{G,r})\cap\partial\mathcal{C}_G)\ =0$，则对于维数为 r 的样本变差函数矩阵，最大似然估计以概率 1 存在。事实上，令 Γ 为一个一般的维数为 r 的样本变差函数矩阵。则 $\sigma(\Gamma)$ 的秩为 r，且属于 $\mathcal{V}(J_r)$。由于 $\mu(\mathcal{V}(J_{G,r})\cap\partial\mathcal{C}_G)\ =0$，其在 $\mathcal{C}_G$ 上的投影几乎必然位于 $\mathcal{C}_G$ 的内部，因此它具有严格条件负定补全。根据 Hentschel等人 (2025年，命题4.6)，其最大似然估计存在。

现在假设 $J_{G,\ r}$ 是零理想，因此其簇是整个环境空间。那么$V(J_{G,\ r})\cap\partial\mathcal{C}_G=\partial\mathcal{C}_G$，其维数并不满。特别是，在这种情况下， $\mu(\mathcal{V}(J_{G,\ r})\cap\partial\mathcal{C}_G)\ =0$，因此对于一般维数 r 的样本变差函数矩阵，最大似然估计存在。□

命题5.5 和推论5.6 确立了 4-环的极值弱最大似然阈值和极值最大似然阈值（参见例4.10）；特别地，我们证明这两个阈值并不相同。

命题 5.5. *4*-环的极值弱最大似然阈值为1 .

证明。 我们证明：对于仅含单个元素的样本，正方形图的矩阵补全问题有解的概率严格介于0与1之间。对于任意给定的图，将样本中的所有元素按任意非零实数进行缩放，并不会改变经验变异函数矩阵具有条件负定补全这一性质。事实上，按标量 c 进行缩放会使原始经验变差函数乘以正数 c^2。于是，将原始补全乘以 c^2 便得到缩放后变差函数的一个条件负定补全。因此，不失一般性，我们假设样本由单个元素$\{(1,\ x_2,\ x_3,\ -(1+x_2+x_3))^\top\}$组成。

由该样本得到的变差函数矩阵为

$$\Gamma = \begin{pmatrix} 0 & \gamma_{12} & (1-x_3)^2 & (2+x_2+x_3)^2 \\ \gamma_{12} & 0 & (x_2-x_3)^2 & (1+x_3)^2 \\ (1-x_3)^2 & (x_2-x_3)^2 & 0 & \gamma_{34} \\ (2+x_2+x_3)^2 & (1+x_3)^2 & \gamma_{34} & 0 \end{pmatrix}.$$

根据正方形中缺失的对角线，我们得到两个由相应子矩阵的行列式导出的方程。以 CM(Γ) 的行列式为饱和对象后，得到一个理想，其关于字典序的 Gr¨obner 基由以下两个多项式给出

$$\begin{aligned} g_1 &= \gamma_{34}^3 + \frac{-21\,x_2^2 - 4\,x_2\,x_3 - 4\,x_3^2 - 26\,x_2 - 4\,x_3 - 21}{3}\gamma_{34}^2 + \frac{9\,x_2^4 + 60\,x_2^3 + 118\,{x_2}^2 + 60\,x_2 + 9}{3}\gamma_{34} \\ &\quad + \frac{9\,x_2^6 + 36\,x_2^5 x_3 + 36\,x_2^4 x_3^2 + 78\,x_2^5 + 276\,x_2^4 x_3 + 240\,x_2^3 x_3^2 + 247\,x_2^4 + 712\,x_2^3 x_3}{3} \\ &\quad + \frac{472\,x_2^2 x_3^2 + 356\,x_2^3 + 712\,x_2^2 x_3 + 240\,x_2\,x_3^2 + 247\,x_2^2 + 276\,x_2\,x_3 + 36\,x_3^2 + 78\,x_2 + 36\,x_3 + 9}{3} \\ g_2 &= \gamma_{12} + \frac{-3}{6\,x_2^2 + 20\,x_2 + 6}\gamma_{34}^2 + \frac{12\,x_2^2 + 2\,x_2\,x_3 + 2\,x_3^2 + 18\,x_2 + 2\,x_3 + 12}{3\,x_2^2 + 10\,x_2 + 3}\gamma_{34} \\ &\quad + \frac{-9\,x_2^2 - 4\,x_2\,x_3 - 4\,x_3^2 - 18\,x_2 - 4\,x_3 - 9}{2}. \end{aligned}$$

该方程组的三个解是补全的候选解。当且仅当左上角元素、左上2×2块的行列式以及矩阵的整体行列式 $\Sigma^{(4)}$ 均为正时，补全才是条件负半定的。与这些条件对应的 γ_{12}，γ_{34} 多项式为

$$\begin{aligned} h_1 &= (x_2+x_3+2)^2, \\ h_2 &= \frac{-1}{4}(\gamma_{12} - 9x_2^2 - 12x_2x_3 - 4x_3^2 - 18x_2 - 12x_3 - 9)(\gamma_{12} - x_2^2 + 2x_2 - 1), \\ h_3 &= \frac{-1}{4}(\gamma_{12}^2\gamma_{34} + \gamma_{12}\gamma_{34}^2 + (-6x_2^2 - 4x_2x_3 - 4x_3^2 - 8x_2 - 4x_3 - 6)\gamma_{12}\gamma_{34} + (3x_2^4 + 12x_2^3x_3 + 12x_2^2x_3^2 \\ &\quad + 16x_2^3 + 52x_2^2x_3 + 40x_2x_3^2 + 26x_2^2 + 52x_2x_3 + 12x_3^2 + 16x_2 + 12x_3 + 3)\gamma_{12} + (3x_2^4 - 4x_2^3x_3 \\ &\quad - 4x_2^2x_3^2 + 4x_2^2x_3 + 8x_2x_3^2 - 6x_2^2 + 4x_2x_3 - 4x_3^2 - 4x_3 + 3)\gamma_{34} - 2x_2^6 - 4x_2^5x_3 + 12x_2^4x_3^2 + 32x_2^3x_3^3 \\ &\quad + 16x_2^2x_3^4 - 8x_2^5 - 20x_2^4x_3 - 16x_2^3x_3^2 - 32x_2^2x_3^3 - 32x_2x_3^4 + 2x_2^4 + 24x_2^3x_3 + 8x_2^2x_3^2 - 32x_2x_3^3 + 16x_3^4 \\ &\quad + 16x_2^3 + 24x_2^2x_3 - 16x_2x_3^2 + 32x_3^3 + 2x_2^2 - 20x_2x_3 + 12x_3^2 - 8x_2 - 4x_3 - 2). \end{aligned}$$

对于仅含单个元素 $\{(1,\ 0,\ 2,\ -3)^\top\}$ 的样本，我们找到一个满足这些方程 $g_1 = g_2 = 0$ 的补全，且三个不等式均为正。由于极值弱最大似然阈值必须为正，我们得出它等于 1。□

现在我们可以应用定理 5.4 中的消元判据，计算 4-环的极值最大似然阈值。

推论 5.6. *4-环的极值最大似然阈值为 2，即* $\mathrm{eMLT}(C_4) = 2$.

证明。 首先，我们证明极值最大似然阈值不等于 1。我们找到一个维数为 1 的部分指定变差函数矩阵开集，其中的矩阵都不存在严格条件负定补全。回顾命题 5.5 证明中的方程和不等式，我们找到$\{(1,\ 0,\ _{12},\ -\tfrac{3}{2})^\top\}$，对于它，$g_1 = g_2 = 0$的所有解都给出 $h_3 < 0$，这意味着该样本周围存在一个（欧几里得）开区域，其中没有任何补全。因此，极值最大似然阈值不等于 1。

使用 Macaulay2，我们计算得出，若 $G = C_4$，则 $J_{G,\,2}$ 是零理想。因此，根据定理 5.4， G的极值最大似然阈值至多为 2。由于 4-环的极值最大似然阈值不等于 1，我们得出其阈值为 2。 □

根据定理 5.3 和推论5.6，我们猜想图的极值最大似然阈值与最大似然阈值之间存在以下关系。

猜想 5.7。 对于任意无向图 G，有

$$\mathrm{eMLT}(G) = \mathrm{MLT}(G) - 1.$$

拟阵理论和刚性理论已被证明有助于找到高斯图模型最大似然阈值的更紧界限。过去十年中的几篇论文利用图 G 的刚性和着色性质来界定或精确计算图的高斯最大似然阈值（Bernstein 等人，2023年，2024；Gross 和 Sullivant，2018年；Højsgaard 和 Lauritzen，2024）。未来研究自然可以从这一角度探讨极值最大似然阈值问题。

Acknowledgements

这项研究得到了 Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach 于 2024 年通过 *Oberwolfach* 研究员计划 提供的资助。

References

Am´endola, C.、R. A. Dinu、M. Micha·lek 和 M. Vodiˇcka（2024）。论高斯图模型的最大似然度。预印本 arXiv:2410.07007。Am´endola, C.、M. Drton、A. Grosdos、R. Homs 和 E. Robeva（2023年）。线性非高斯图模型的三阶矩簇。《信息与推断：*IMA*期刊》*12*(3)，1405–1436。Bernstein, D. I.、S. Dewar、S. J. Gortler、A. Nixon、M. Sitharam 和 L. Theran（2023年）。利用图刚性计算最大似然阈值。代数统计学 *14*(2)，287–305。Bernstein, D. I.、S. Dewar、S. J. Gortler、A. Nixon、M. Sitharam 和 L. Theran（2024）。经由图刚性的最大似然阈值。《应用概率年刊》*34*(3)，3288–3319。Buhl, S. L.（1993）。论图高斯模型最大似然估计量的存在性。《斯堪的纳维亚统计学杂志》*20*，263–270。Coons, J. I.、O. Marigliano 和 M. Ruddy（2020）。二维线性高斯协方差模型的最大似然度。代数统计学 *11*(2)，107–123。Cox, D. A.、J. Little 和 D. O'Shea（2025年）。理想、簇与算法——计算代数几何与交换代数导论 （第五版）。《数学本科生教材》。施普林格，查姆。Cox, S.、P. Misra 和 P. Semnani（2024）。同构多项式与最大似然度为1的高斯模型。代数统计学 *15*(2)，167–198。Dempster, A. P.（1972年）。协方差选择。《生物统计学》，157–175。Devriendt, K.（2022a）。有效电阻不仅仅是距离：拉普拉斯矩阵、单形与舒尔补。《线性代数及其应用》*639*，24–49。Devriendt, K.（2022b）。由有效电阻得到的图几何。博士论文，牛津大学。Devriendt, K.、I. Echave-Sustaeta Rodr´ıguez 和 F. R¨ottger（2026）。经由模函数的H¨usler–Reiss分布的极值条件独立性。预印本 arXiv:2601.21931。Dinu, R. A. 和 M. Vodiˇcka（2025年）。Drton、Sturmfels 和 Sullivant关于环的高斯图模型最大似然度的一个猜想的证明。预印本 arXiv:2503.02704。

Drton, M.、E. Robeva 和 L. Weihs（2020）。高斯图模型中的嵌套协方差行列式与受限trek分离。*Bernoulli 26*(4)，2503 – 2540。Drton, M.、B. Sturmfels 和 S. Sullivant（2009）。代数统计学讲义，*Oberwolfach*研讨班第39卷。Birkh¨auser Verlag，巴塞尔。Engelke, S.、N. Gnecco 和 F. R¨ottger（2025年）。结构因果模型的极值。预印本 arXiv:2503.06536。Engelke, S.、M. Hentschel、M. Lalancette 和 F. R¨ottger（2024）。多元极值的图模型。预印本 arXiv:2402.02187。Engelke, S. 和 A. S. Hitz（2020）。极值的图模型。皇家统计学会期刊。*B*辑。统计方法论 *82*(4)，871–932。附讨论。Engelke, S. 和 A. Taeb（2025年）。经由凸优化的含潜变量极值图建模。机器学习研究期刊 *(JMLR) 26*，论文编号 [42], 68。Engelke, S. 和 S. Volgushev（2022）。极值树模型的结构学习。皇家统计学会期刊。*B*辑。统计方法论 *84*(5)，2055–2087。Gower, J. C.（1985）。欧几里得距离矩阵与非欧氏距离矩阵的性质。《线性代数及其应用》*67*，81–97。Gross, E. 和 S. Sullivant（2018年）。图的最大似然阈值。*Bernoulli 24*(1)，386–407。Hentschel, M.、S. Engelke 和 J. Segers（2025年）。通过矩阵补全对H¨usler–Reiss图模型进行统计推断。美国统计协会期刊 *120*(550)，909–921。Højsgaard, S. 和 S. Lauritzen（2024）。论高斯图模型中估计的若干算法。*Biometrika 111*(4)，1201–1219。Lauritzen, S.（1996）。图模型。牛津统计科学丛书。Clarendon Press。Maathuis, M.、M. Drton、S. Lauritzen 和 M. Wainwright（编）（2019）。图模型手册。Chapman & Hall/CRC现代统计方法手册。CRC Press，博卡拉顿，佛罗里达州。Micha·lek, M.、L. Monin 和 J. A. Wisniewski（2021）。最大似然度、完全二次曲面与 $\mathbb{C}^*$-作用。*SIAM*应用代数与几何期刊 *5*(1)，60–85。Misra, P. 和 S. Sullivant（2021）。具有环面消失理想的高斯图模型。统计数学研究所纪事 *73*(4)，757–785。Rootz´en, H. 和 N. Tajvidi（2006）。多元广义帕累托分布。*Bernoulli 12*，917–930。R¨ottger, F.、S. Engelke 和 P. Zwiernik（2023年）。多元极值中的全正性。《统计学年刊》*51*(3)，962–1004。R¨ottger, F.、J. I. Coons 和 A. Grosdos（2023年）。极值图模型中的参数与非参数对称性。预印本 arXiv:2306.00703。Schoenberg, I. J.（1935年）。对Maurice Fr´echet文章“Sur la d´efinition axiomatique d’une classe d’espace distanci´es vectoriellement applicable sur l’espace de Hilbert”的评注。《数学年刊》。第二辑 *36*(3)，724–732。Sturmfels, B. 和 C. Uhler（2010年）。多元高斯、半正定矩阵补全与凸代数几何。统计数学研究所纪事 *62*(4)，603–638。Sullivant, S.（2018年）。代数统计学，数学研究生丛书第194卷。美国数学会，普罗维登斯，罗得岛州。Uhler, C.（2011年）。高斯图模型中最大似然估计的几何。ProQuest LLC，安娜堡，密歇根州。博士论文——加利福尼亚大学伯克利分校。Uhler, C.（2012年）。高斯图模型中最大似然估计的几何。《统计学年刊》*40*(1)，238–261。

Young, G. 和 A. S. Householder（1938年）。以点之间的相互距离来描述一组点。*Psychometrika 3*(1), 19–22。

Appendix A. Properties of the Variogram Matrix

设 Σ 为一个半正定 $d \times d$ 矩阵，并设 d_Σ 为一个 d 维向量，其分量为 Σ 的对角线元素。我们考虑由 2 给出的变换 $\gamma(\Sigma) = d_\Sigma \mathbf{1}^\top + \mathbf{1} d_\Sigma - 2\Sigma$。

Prop命题 A.1。 设 $\Sigma \in \mathbb{S}^d_{\geq}$ 为一个秩为 $r > 0$ 的一般半正定矩阵。 n

$$\operatorname{rank}(\gamma(\Sigma)) = \min(r + 2, d).$$

证明。 首先注意，$\operatorname{rank}(\gamma(\Sigma)) \leq r + 2$。事实上， $\gamma(\Sigma)$ 的表达式将 $\gamma(\Sigma)$ 写成 Σ 与两个秩为 1 的矩阵之和。其中 Σ 的秩为 r。因此，其秩至多为 $r + 2$。

对于每个 r，我们都会给出一个秩为 r 的 Σ 示例，其核中包含全 1 向量，且满足 $\operatorname{rank}(\gamma(\Sigma)) = r + 2$. 。由于满足 $\operatorname{rank}(\gamma(\Sigma)) = r + 2$ 是关于 Σ 各项的泛性条件，这便证明了结论。核中含有$\mathbf{1}$ 的秩至多为 r 的对称矩阵所构成的簇是不可约的，因为它可由 r 个形如$\mathbf{v}\mathbf{v}^\top$、其中$\mathbf{v} \cdot \mathbf{1} = 0$的秩一矩阵之和参数化。因此，只需找到任意一个这样的 Σ 示例（不一定是正定的）。不失一般性，我们可以假设 $d \leq r + 2$。事实上，如果 $d > r + 2$，在给定示例中添加全零的行和列，即可得到适当维数的所需示例。

我们先考虑 $d = r + 2$ 的情形。根据 r 的奇偶性，我们将证明分为两种情况。首先设 r 为奇数。令 τ 为 $[r + 1]$ 的置换，

$$\tau = \prod_{\substack{i=1 \\ i \text{ odd}}}^{r} (i, i + 1),$$

并令 P_τ 为其置换矩阵。令 Σ'_r 为 $(r + 1) \times (r + 1)$ 矩阵，

$$\Sigma'_r := -(r + 1) P_\tau + \mathbf{1}\mathbf{1}^\top. \tag{23}$$

最后，令 Σ_r 为从 Σ'_r 得到的 $(r + 2) \times (r + 2)$ 矩阵：在第 $(r + 2)$nd 行和列处添加一行和一列零。

Σ_r 的每一行都含有一个等于 $-r$ 的元素、 r 个等于 1 的元素以及一个等于 0 的元素，因此 $\mathbf{1}$ 属于 Σ_r 的核。所以 Σ_r 的秩至多为 r。只需证明 $\gamma(\Sigma_r)$ 的秩为 $r + 2$。 Σ 的对角线是长度为 $r + 2$ 的向量 $(1, .., 1, 0)$。因此

$$\gamma(\Sigma_r) = \mathrm{CM}(-4(r + 1) P_\tau).$$

这是一个可逆 $(r + 1) \times (r + 1)$ 矩阵的 Cayley–Menger 矩阵，因此其秩为 $r + 2$。现在令 r 为偶数。令 ν 为 $[r + 1]$ 的置换，

$$\nu = \prod_{\substack{i=1 \\ i \text{ odd}}}^{r-1} (i, i + 1),$$

它将 $r + 1$ 映射到自身。令 P_ν 为其置换矩阵。令 Σ'_r 按方程 (23) 用 P_ν 类似地定义，并令 Σ_r 由 Σ'_r 通过添加一行和一列零得到。于是 Σ_r 仍然是一个 $(r + 2) \times (r + 2)$ 矩阵，其核中包含 $\mathbf{1}$ 和 $\mathbf{e}_{r+2}$，因此其秩至多为 r。此外， $\gamma(\Sigma'_r)$仍然是 $2rP_\nu$的 Cayley–Menger 矩阵，是一个可逆的 $(r + 1) \times (r + 1)$ 矩阵。因此， $\gamma(\Sigma_r)$的秩为 $r + 2$，证毕。

现在考虑 $d = r + 1$ 或 $d = r$的情形。对于任意 k，令 M_k 表示一个 $k \times k$ 矩阵，其对角线元素为 0，非对角线元素为 1。令 I_k 表示 $k \times k$ 单位

矩阵，并令 $I_k' = \mathrm{diag}(1, \ldots, 1, 0)$ 表示将 I_k 中 (k, k) 项设为 0 后得到的矩阵。

假设 $d = r + 1$。那么 $\gamma(I_d') = \mathrm{CM}(-4M_{d-1})$。由于 $-4M_{d-1}$ 是一个可逆的 $(d-1) \times (d-1)$ 矩阵，其 Cayley–Menger 矩阵 $\gamma(I_d')$ 也可逆。最后，如果 $d = r$，那么 $\gamma(I_d) = 2M_d$，它是可逆的。因此，对每个 $r \le d$，我们都可以找到一个秩为 r 的样本协方差矩阵 Σ，使得 $\gamma(\Sigma)$ 的秩为 $r + 2$，如所需。□

命题 A.2. 设 Σ 是一个秩为 $d-2$ 的 $d \times d$ 半正定矩阵，且满足 $\mathbf{1} \in \ker(\Sigma)$。那么 $\gamma(\Sigma)$ 不是严格条件负定的。也就是说，存在一个非零的 $\mathbf{x}$，使得$\mathbf{x}^\top \mathbf{1} = 0$，且 $\mathbf{x}^\top \gamma(\Sigma)\mathbf{x} = 0.$

证明。设 $\mathbf{x} \in \ker \Sigma$ 是一个不是 $\mathbf{1}$ 的倍数的向量。由于 $\mathbf{1} \in \ker \Sigma$，我们可以取 $\mathbf{x}$ 使其满足 $\mathbf{x}^\top \mathbf{1} = 0$。则

$$\mathbf{x}^\top \gamma(\Sigma)\mathbf{x} = \mathbf{x}^\top(-2\Sigma)\mathbf{x} + (\mathbf{x}^\top \mathbf{1})(d_\Sigma^\top \mathbf{x}) + (\mathbf{x}^\top d_\Sigma)(\mathbf{1}^\top \mathbf{x}) = 0,$$

即为所需。□

命题 A.3. 设 Γ 是一个 $d \times d$ 严格条件负定矩阵。则 Γ 的每个主子矩阵都是严格条件负定的。

证明。设 $A \subseteq [d]$。我们首先注意到，由于 $\Gamma \in \mathcal{C}^d$ 具有零对角线，故 $\Gamma_{A,A} \in \mathbb{S}_0^d$ 亦然。现设$y \in \mathbb{R}^A$、$y \neq \mathbf{0}_A$ 使得 $y \perp \mathbf{1}_A$。向 y 添加若干 0 以得到 $\bar{y} \in \mathbb{R}^d$。注意我们仍有 $\bar{y} \perp \mathbf{1}$、$\bar{y} \neq \mathbf{0}$。因此

$$y^\top \Gamma_{A,A} y = \bar{y}^\top \Gamma \bar{y} < 0,$$

最后一个不等式成立是因为 Γ是严格条件负定的。因此$\Gamma_{A,A}$ 也是严格条件负定的。□