arXiv:2301.00344v1 [math.ST] 1 Jan 2023

# 总体聚类的半定规划：全局分析

Shuheng Zhou 加利福尼亚大学河滨分校,
加利福尼亚州92521

**摘要**

本文研究从两个次高斯分布的混合分布中抽取一个样本量为 $n$ 的小样本，并对其进行划分的问题。我们的研究受到这样一项应用的启发：当两个总体之间的差异较小时，利用标记按个体的来源总体对其进行聚类。我们关注个体特征平均质量较低 $\gamma$的情形，并希望尽可能少用特征就能正确划分样本。我们考虑一个整数二次规划的半正定松弛；该规划本质上是在图上寻找最大割，其中割中的边权重表示基于特征计算的两个节点之间的不相似度分数。Blum、Coja-Oghlan、Frieze 和 Zhou（2007、2009）的一项小规模模拟结果表明，即使样本量 $n$较小，只要增加 $p$ 使得 $np = \Omega(1/\gamma^2)$，便可使用其中的谱方法对两个乘积群体的混合分布进行分类，且成功率可达到“神谕”曲线。该研究中的“神谕”是在假设分布已知的情况下计算得出的；成功率指正确分类的个体数与样本量 $n$之比。本文从理论上解释了这一高维测度集中现象，并同时研究半正定优化目标和谱方法，其中输入基于由中心化数据计算得到的格拉姆矩阵。我们允许样本量与特征数之间存在各种权衡，只要二者的乘积不低于 $1/\gamma^2$ ，且特征数 $p$ 不低于$1/\gamma$。

## 1 引言

我们探讨一种计算生物学领域中的分类问题。问题是，我们给定一个大小为 $n$ 的小样本，例如来自 $n$ 个体的 DNA（设想 $n$ 的数量为数百或数千），每个个体由 $p$ 特征或标记的取值描述，例如单核苷酸多态性（单核苷酸多态性，设想 $p$ 比 $n$ 大一个数量级）。我们的目标是利用这些特征，根据个体的来源总体对其进行分类。根据个体所属的总体不同，特征出现的概率略有差异。用 $\Delta^2$ 表示两个群体中心（均值向量）之间的 $\ell_2^2$ 距离，即 $\mu^{(1)}$, $\mu^{(2)} \in \mathbb{R}^p$。我们关注 $p > n$ 的情形，尽管这并非必要。注意， $\Delta$ 衡量了 $\mu^{(1)}$ 与 $\mu^{(2)}$ 之间的欧氏距离，因此表示它们的分离度。

我们考虑的目标是，最小化正确分类样本中个体所需的总数据量 $D = np$

，并将其表示为特征的“平均质量” $\gamma$ 的函数：

$$\gamma := \Delta^2/p, \text{ where } \Delta^2 := \sum_{k=1}^{p} (\mu_k^{(1)} - \mu_k^{(2)})^2 \text{ and } \mu^{(i)} = (\mu_1^{(i)}, \ldots, \mu_p^{(i)}) \in \mathbb{R}^p, i = 1, 2. \tag{1}$$

假设我们给定了一个数据矩阵 $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$，其中包含来自两个总体的样本 $\mathcal{C}_1$，$\mathcal{C}_2$，满足

$$\forall i \in \mathcal{C}_g, \ \mathbb{E}(X_{ij}) = \mu_j^{(g)} \quad g = 1, 2, \forall j = 1, \ldots, p. \tag{2}$$

本研究的目标是估计群体成员向量 $\bar{x} \in \{-1, 1\}^n$，使得

$$\bar{x}_i = 1 \text{ for } i \in \mathcal{C}_1 \text{ and } \bar{x}_i = -1 \text{ for } i \in \mathcal{C}_2, \tag{3}$$

其中，簇 $|\mathcal{C}_j| =$ 的大小：$n_j$，$\forall j$ 可能并不相同。我们的最终目标是求解以下离散优化问题：

$$\text{maximize } x^T \bar{A} x \quad \text{subject to } x \in \{-1, 1\}^n \tag{4}$$

¯其中 $A$ 是一个待指定的静态参考矩阵。此前的研究表明，在由 $n$ 个顶点（样本点）构成的完全图中，所有平衡割里最大权重的割，在期望意义上对应于平衡情形下按分布划分这些点所得的正确划分（$n_1 = n_2 = n/2$）。这里，割的权重是割中所有边的权重之和，而边权重等于两个端点 [11, 45] 的比特向量之间的汉明距离。在适当条件下，上述结论以高概率成立（w.h.p.）。

换言之，在总体聚类的背景下，先前的研究已表明，可以使用一个随机实例的整数二次规划：

$$\text{maximize } x^T A x \quad \text{subject to } \quad x \in \{-1, 1\}^n \tag{5}$$

只要数据量 $D$ 足够大，且分离度量的量级为 $\Delta^2 = \Omega(\log n)$，就能以高概率根据节点的来源总体识别出正确的划分。相关分析聚焦于高维情形，其中 $p \gg n$ [11, 45]。这里，$A = (a_{ij})$ 是一个 $n \times n$对称矩阵，其中对于 $1 \leq i, j \leq n$, $a_{ij} = a_{ji}$ 表示节点 $i$ 和$j$之间的边权重，该权重根据个体的比特向量计算得出。这一结果是结构性的，而非算法性的。整数二次规划 (4)（或 (5)）是 NP 难的。在一篇开创性的论文中，[21], Goemans 和 Williamson 表明，可以使用半定规划 (SDP) 作为松弛来近似求解这些问题。

本文提出了一种半正定松弛框架，受 [22], 启发，我们在该框架下设计并分析了计算高效的算法，以便近似地根据数据的来源总体将其划分为两组。更一般地，可以考虑针对以下含有 $k$ 个中心的次高斯混合模型的半定松弛（其中隐含嵌入了秩为$k$ 的均值矩阵）：

$$X_i = \mu^{(\psi_i)} + \mathbb{Z}_i \tag{6}$$

其中 $\mathbb{Z}_1$，.....，$\mathbb{Z}_n \in \mathbb{R}^p$ 是独立的次高斯零均值随机向量，且 $\psi_i$：$i \to \{1, \ldots, k\}$ 将节点 $i$ 分配到群组 $\mathcal{C}_j$，其均值为 $\mu^{(j)} \in \mathbb{R}^p$，其中 $j \in [k]$。这里我们用

$[k]$ 表示整数集合 $\{1,\ldots,k\}$。这里， $X$ 的每个行向量都是一个 $p$ 维的次高斯随机向量，并且我们假设各行相互独立。我们将在第 2 节中考虑 $\mathbb{Z}_j,\ j \in [n]$ 的灵活参数化模型。特别是，我们允许每个总体具有不同的协方差结构，其中对角矩阵是特殊情况。Gu´edon 和 Vershynin [22] 针对稀疏网络中的社群检测建立了半正定松弛的分析框架，其中 $A$ 表示随机图的邻接矩阵。换言之，他们研究整数规划 (5) 的半正定松弛，其中使用一个 $n\times n$对称随机邻接¯矩阵 $A$ （观测值）来替代原问题 (4) 中的隐藏的静态矩阵 $A$ ，使得 ¯ $\mathbb{E}(A) = A$。

[22] 的一项创新性证明策略是，对随机¯误差 $A - A$ 应用 Grothendieck 不等式，而非像早期文献中那样对原始矩阵 $A$ 应用该不等式。我们沿用 [13]的说法，将这一方法称为全局分析。经过适当调整，我们将这一方法应用于当前问题，并证明了第一个主要结果——定理 2.5：基于符合均值模型（2）的 $n$ 序列 $p$ 特征，对群体成员关系进行部分恢复。两者的重要区别在于：这里，我们将 [22] 所考虑的随机块模型产生的随机邻接矩阵 $A$ ，替换为对称矩阵 $A$的一个实例，见（9）；该矩阵由中心化数据矩阵计算得到，下面将对此作进一步说明。令 diag($A$) 和 offd($A$) 分别表示矩阵 $A$ 的对角部分和非对角部分。

**估计量**。我们提出以下估计量。与许多统计问题一样，一个简单但至关重要的步骤是先获得中心化数据。令 $\mathbf{1}_n = [1,\ldots,1] \in \mathbb{R}^n$ 表示一个元素全为 1 的向量。令 $X$ 为一个数据矩阵，其行向量 $X_1$、.....、 $X_n$ 如（2）中所定义。记

$$Y \;=\; X - \mathbf{1}_n \otimes \widehat{\mu}_n = X - P_1 X, \quad \text{where} \quad P_1 = \frac{1}{n}\mathbf{1}_n\mathbf{1}_n^T \quad \text{and} \tag{7}$$

$$\widehat{\mu}_n \;=\; \frac{1}{n}\sum_i X_i \text{ is the average over } n \text{ random vectors in } \mathbb{R}^p. \tag{8}$$

宽泛地说，在统计学文献中，这一过程被称为“全局中心化”，例如参见 [24]。为估计群体成员向量 $\bar{x} \in \{-1,1\}^n$，我们使用以下调整后的 $A$:

$$A \;:=\; YY^T - \lambda(E_n - I_n), \quad \text{where } \lambda = \frac{2}{n(n-1)}\sum_{i<j}\langle Y_i, Y_j\rangle, \tag{9}$$

$$E_n \;:=\; \mathbf{1}_n\mathbf{1}_n^T, \text{ and } I_n \text{ denotes the identity matrix,} \tag{10}$$

并考虑以下半定优化问题:

$$\text{SDP:} \qquad \text{maximize } \langle A, Z\rangle \quad \text{subject to} \quad Z \succeq 0,\ I_n \succeq \text{diag}(Z), \tag{11}$$

其中， $Z \succeq 0$ 表示矩阵 $Z$ 受半正定约束，而 $A \succeq B$表示 $A - B \succeq 0$；此外，矩阵的内积 $\langle A, B\rangle = \text{tr}(A^T B)$。在此处及下文中，记 $\mathcal{M}_G^+ := \{Z :\ Z \succeq 0,\ I_n \succeq \text{diag}(Z)\}$ 为元素绝对值均不超过 1 的半正定矩阵集合。更明确地说，优化问题半定规划 (11) 等价于:

$$\text{SDP2:} \qquad \text{maximize } \langle YY^T - \lambda E_n, Z\rangle \quad \text{subject to} \quad Z \succeq 0, \text{diag}(Z) = I_n. \tag{12}$$

在我们的设定中，对数据进行中心化 $X$，这对统计分析以及理解样本量下界在簇部分恢复中的作用至关重要。顺便提及，我们基于协方差估计所做的概率分析（参见定理 6.3 和 7.2）也可直接应用于秩-$k$ 模型（或 $k$-均值）设定。在继续之前，先介绍一些定义和记号。令 $\mathbf{B}_2^n$ 和 $\mathbb{S}^{n-1}$ 分别表示 $\mathbb{R}^n$中的单位欧几里得球和单位球面。

**定义 1.1**。回忆一下，对于随机变量 $X$，$X$ 的 $\psi_2$-范数记为 $\|X\|_{\psi_2}$，定义为 $\|X\|_{\psi_2} = \inf\{t > 0 : \mathbb{E}\exp(X^2/t^2) \leq 2\}$。若随机向量 $W \in \mathbb{R}^m$ 的一维边缘 $\langle W, h\rangle$ 对所有 $h \in \mathbb{R}^m$ 都是次高斯随机变量，则称 $W \in \mathbb{R}^m$ 为次高斯随机向量：*(1)* 若对于每个 $h \in \mathbb{R}^m$ 都有 $\mathbb{E}|\langle W, h\rangle|^2 = \|h\|_2^2$，其中 $\|h\|_2^2 = \sum_{j=1}^m h_j^2$，则称 $W$ 是各向同性的；*(2)* 若对于每个 $h \in \mathbb{R}^m$ 都有 $\|\langle W, h\rangle\|_{\psi_2} \leq C_0 \|h\|_2$，则称 $W$ 以常数 $C_0$ 为次高斯，记 $W \in \mathbb{R}^m$ 的次高斯范数为

$$\|W\|_{\psi_2} := \sup_{h \in \mathbb{S}^{m-1}} \|\langle W, h\rangle\|_{\psi_2}. \tag{13}$$

在本文中，我们用 $Z = (Z_{ij})$ 表示半定规划目标函数中的半正定矩阵。用 $\mathbb{Z} = (z_{ij})$ 表示具有相互独立的零均值次高斯行向量 $\mathbb{Z}_1, \ldots, \mathbb{Z}_n \in \mathbb{R}^p$ 的零均值随机矩阵，正如式 (6) 中所考虑的，其中对于常数 $C_0$，

$$\forall j = 1, \ldots, n, \ \|\langle \mathbb{Z}_j, x\rangle\|_{\psi_2} \leq C_0 \|\langle \mathbb{Z}_j, x\rangle\|_{L_2} \text{ for any } x \in \mathbb{R}^p \tag{14}$$

$$\text{where } \|\langle \mathbb{Z}_j, x\rangle\|_{L_2}^2 := \mathbb{E}\langle \mathbb{Z}_j, x\rangle^2 = x^T \mathbb{E}(\mathbb{Z}_j \mathbb{Z}_j^T) x =: x^T \mathsf{Cov}(\mathbb{Z}_j) x. \tag{15}$$

边缘分布为次高斯分布的随机向量示例包括协方差为 $\Sigma \succ 0$ 的多元正态随机向量 $\mathbb{Z}_j \sim N(0, \Sigma)$，以及由独立伯努利随机变量构成的向量；其中假设对所有 $i \in [n]$ 和 $j \in [p]$，均值参数 $p_j^i := \mathbb{E}(X_{ij})$ 与 0 和 1 保持正距离；例如参见 [11, 9]。对于对称矩阵 $A$，令 $\lambda_{\max}(A)$ 和 $\lambda_{\min}(A)$ 分别表示 $A$ 的最大和最小特征值。算子范数 $\|A\|_2$ 定义为 $\sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}$。

---

**信噪比与样本量下界**。我们的工作受到组合优化和社群检测这两条研究脉络的启发，尤其是受到 [22]重新审视最大割问题 (5) 并构建半定规划 (11) 的启发。我们的重点是样本量下界，这与作者此前的研究 [11, 45] 类似。此外，当 (6) 中的次高斯随机向量 $\mathbb{Z}_i$ 满足各向同性时，我们采用以下信噪比概念：

$$\textbf{SNR isotropic:} \quad s^2 = (\Delta^2/C_0^2) \wedge (np\gamma^2/C_0^4) \tag{16}$$

其中 $C_0$ 是高维向量 $\mathbb{Z}_i \in \mathbb{R}^p$ 的 $\psi_2$-常数；这一信噪比概念见于 [20], ，考虑到 (14) 和 (15)，当 $\mathbb{Z}_i$ 中的坐标相互依赖时，也可以对其进行适当调整：

$$\textbf{SNR anisotropic:} \quad s^2 = \frac{\Delta^2}{C_0^2 \max_j \|\mathsf{Cov}(\mathbb{Z}_j)\|_2} \wedge \frac{np\gamma^2}{C_0^4 \max_j \|\mathsf{Cov}(\mathbb{Z}_j)\|_2^2}. \tag{17}$$

我们可以将定理 2.5 中隐含的分离条件改写如下：

$$\Delta^2 = p\gamma \geq C_0^2 \max_i \|\mathsf{Cov}(\mathbb{Z}_i)\|_2 \left(\frac{1}{\xi^2} \vee \sqrt{\frac{p}{n\xi^2}}\right) \text{ for some } 0 < \xi < 1/2. \tag{18}$$

在假设信噪比参数 $s^2$ 有下界的情况下，对于各向同性 $\mathbb{Z}_i$（分别对于具有协方差结构的 $\mathbb{Z}_i$, $i \in [n]$），定理 2.5 给出了与信噪比参数的平方根成反比的误分类误差，如式 (16)（分别如式 (17)）所示。在定理 2.5 和引理 2.4 的设定下，我们能够证明，误差会随定理 2.7 中的信噪比 $s^2$ 指数衰减。如此指数衰减的误差界意味着：当 $s^2 = \Omega(\log n)$ 时，即可精确恢复聚类结构。这一结果与 [20]中的结果思路相同；另请参见 [39, 16, 17]及其中的参考文献。由于篇幅较长，我们将其证明留待另一篇论文。下文将与 [16, 17, 20]进行比较。 [9]的工作也与此密切相关。

具体而言，谱算法依据格拉姆矩阵 $XX^T$的前几个特征向量对 [9] 中的样本进行划分，这一思路至少可以追溯到 [18]。在 [9], 中，假设两个参数 $n$， $p$大致处于同一量级，因此无法像本文所考虑的那样充分权衡这两个维度；参见式 (18)。本文的谱分析基于 $YY^T$，这将直接改进 [9] 中的结果：针对 $k = 2$的谱聚类，我们去除了对 $n$的下界要求；参见定理 4.1。鉴于 [9]中的实证证据， $n$ 的这一类下界被认为并无必要；参见 [9]中的“总结与未来方向”。

## 1.1 贡献

总之，本文在理论上作出以下贡献：(a) 我们构造了式 (11) 中的估计量，它们充分利用了两个均值向量的几何性质，详见第 3 节；(b) 此外，我们将 $YY^T$（以及相应的 $A$ (9)）而非 $XX^T$ 用作 [9], 中优化算法的输入，从而确保计算效率和统计收敛，即使在低信噪比情形下也是如此（$s^2 = o(\log n)$）；(c) 这一方法为半定规划优化问题 (11) 提供了清晰且统一的全局与局部分析框架，分别见定理 2.5 和 2.7；(d) 借助关于 $\left\|YY^T - \mathbb{E}YY^T\right\|$的测度集中界的新结果，我们能够同时分析半定规划 (11)，以及基于 $YY^T$的主特征向量的谱算法。下文中，我们用 $\|\cdot\|$ 表示算子范数或割范数；参见定义 3.1。

在第 4 节中，我们进一步探讨了与现有 $k$-均值聚类问题的半定松弛之间的联系，其中包括一种基线谱算法，该算法基于对 $YY^T$ 进行奇异值分解（SVD）。这使得计算速度更快。我们在定理 4.1 中通过 Davis-Kahan扰动定理分析了一种简单的谱算法，并得到了与定理 2.5 类似的误差界。在该节中，我们进一步论证了本文所采用的全局中心化方法。我们对比了两种算法的数值表现，即分别基于半定规划（SDP）和谱聚类的算法，并表明它们确实呈现出信噪比参数所预测的相似趋势。

## 1.2 记号与组织结构

令 $e_1$、.....、$e_n$为 $\mathbb{R}^n$ 的标准基。对于集合 $J \subset \{1, \ldots, n\}$，记 $E_J = \text{span}\{e_j : \ j \in J\}$。令 $P_1 = \mathbf{1}_n\mathbf{1}_n^T/n$ 和 $E_n = nP_1$。用 $E_{n\times m} \subset \mathbb{R}^{n\times m}$ 表示元素全为 1 的矩阵。对于向量 $v \in \mathbb{R}^n$，用 $v_J$ 表示子向量（$v_j$）$_{j\in J}$。对于向量 $x$， $\|x\|_\infty := \max_j |x_j|$, $\|x\|_1 := \sum_j |x_j|$, 以及 $\|x\|_2 := \sqrt{\sum_j x_j^2}$; diag($x$) 表示其主对角线元素为 $x$ 中各元素的对角矩阵。对于矩阵 $B \in \mathbb{R}^{n\times n}$, tr($B$) $= \sum_{i=1}^n B_{ii}$。对于矩阵 $A = (a_{ij})$

大小为 $n \times m$，令 vec $\{\mathrm{A}\}$ 为将矩阵 $A$ 的各列拼接成一个大小为 $nm$ 的长向量；我们用 $\|A\|_1 = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}|a_{ij}|$ 表示 vec $\{\mathrm{A}\}$ 的 $\ell_1$ 范数，并用 $\|A\|_F = (\sum_{i,j} a_{ij}^2)^{1/2}$ 表示 vec $\{\mathrm{A}\}$ 的 $\ell_2$ 范数，该范数也称为矩阵弗罗贝尼乌斯范数。对于矩阵 $A$，令$\|A\|_\infty = \max_i \sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|$ 表示最大绝对行和；令 $\|A\|_{\max} = \max_{i,j}|a_{ij}|$ 表示逐分量最大范数。对于两个数 $a$、$b$，$a \wedge b := \min(a,b)$，以及 $a \vee b := \max(a,b)$。如果对于某些与 $n$、$p$ 和 $\gamma$ 独立的正绝对常数 $c$、$C$，有 $ca \le b \le Ca$，则记作 $a \asymp b$。如果对于某个绝对常数 $C < \infty$ 和$f =$，有 $|f| \le Ch$，则记作 $f = O(h)$ 或 $f \ll h$；$\Omega(h)$ 或 $f \gg h$ 表示 $h = O(f)$。如果 $f/h \to 0$ as $n \to \infty$，其中参数 $n$ 将表示所考虑矩阵的大小，则记作 $f = o(h)$。在本文中，$C$、$C_1$、$C_2$、$C_4$、$c$、$c'$、$c_1$ 等表示各种正的绝对常数，这些常数可能逐行变化。

本文其余部分安排如下。第 2 节介绍本文的主要理论结果。第 3 节概述定理 2.5 的证明，该定理涉及半定规划 (11)，并给出定理 3.5 中关于 $B$ 的测度集中界。第 4 节讨论文献中已有的各种半定松弛形式，并重点介绍它们与本文工作的联系和主要区别。第 5 节概述定理 3.5 的证明思路，重点介绍定理 5.3 和 5.2 中关于 $\left\|YY^T - \mathbb{E}YY^T\right\|$ 的集中界。第 6 节介绍使用独立设计证明定理 5.2 时涉及算子范数和割范数的主要思路。第 7 节讨论相关设计及其测度集中界，这些内容与定理 5.3 有关，而该定理是本文技术性最强的结果之一。第 8 节展示验证理论预测的数值结果。最后，我们在第 9 节作总结。所有技术性证明均置于补充材料中。

## 2 理论

我们首先构造一个矩阵 $Y$，将根据式 (8) 计算得到的样本均值 $\widehat{\mu}_n \in \mathbb{R}^p$ 从数据矩阵的每个行向量 $X_i$ 中减去。根据式 (20) 进行直接计算，可得参考矩阵 $R$ 的表达式，因此，对于式 (21) 中的 $R$，有 $\mathbb{E}(Y)\mathbb{E}(Y)^T = R$。

**定义 2.1.（估计量）**令 $Y$ 如式(7) 所示，$X$ 如式(2)所示。记 $\mathbb{Z}_i = X_i - \mathbb{E}(X_i)$和

$$\widehat{\mu}_n - \mathbb{E}\widehat{\mu}_n \;:=\; \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\mathbb{Z}_i = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}X_i - \mathbb{E}(X_i), \tag{19}$$

其中 $\mu_n$ 如式(8)所示。

显然，根据期望的线性性，$\mathbb{E}\widehat{\mu}_n = w_1\mu^{(1)} + w_2\mu^{(2)}$，其中 $w_j = |C_j|/n$ 对于 $j = 1,\ 2$。因此，对于 $w_i = |\mathcal{C}_i|/n$，我们有 $i = 1,\ 2$

$$\mathbb{E}(Y_i) \;:=\; \begin{cases} w_2(\mu^{(1)} - \mu^{(2)}) & if\ i \in \mathcal{C}_1; \\ w_1(\mu^{(2)} - \mu^{(1)}) & if\ i \in \mathcal{C}_2. \end{cases} \tag{20}$$

**定义 2.2。（参考矩阵）**记 $n_1 = w_1 n$ 和 $n_2 = w_2 n$。对于 （7） 中定义的 $Y$ （参见定义 *2.1*），以及如 （1） 中的 $\Delta^2 = p\gamma$，有

$$R = \mathbb{E}(Y)\mathbb{E}(Y)^T \;=:\; p\gamma\begin{bmatrix} w_2^2 E_{n_1} & -w_1 w_2 E_{n_1\times n_2} \\ -w_1 w_2 E_{n_2\times n_1} & w_1^2 E_{n_2} \end{bmatrix}. \tag{21}$$

**定义 2.3。（数据生成过程。）** 设随机矩阵 $\mathbb{W} = (w_{jk}) \in \mathbb{R}^{n\times m}$ 的行向量为 $W_1$、.....、$W_n \in \mathbb{R}^m$，其中 $W_j$、$j \in [n]$ 是具有独立元素且满足以下条件的独立、零均值、各向同性次高斯随机向量

$$\forall j \in [n], \quad \mathit{Cov}(W_j) := \mathbb{E}(W_j W_j^T) = I_m, \ \mathbb{E}[w_{jk}] = 0, \forall j,k, \quad \mathit{and} \quad \max_{jk} \|w_{jk}\|_{\psi_2} \le C_0. \tag{22}$$

假设我们有 $\mathbb{Z} \in \mathbb{R}^{n\times p}$、$\forall j = 1$、.....、$n$ 的行向量，

$$\mathbb{Z}_j^T \ = \ W_j^T H_j^T \ \ \mathit{where}\, H_j \in \mathbb{R}^{p\times m}, \ 0 < \|H_j\|_2 < \infty,$$

并且允许 $H_j$ 重复出现，例如，在同一簇 $\mathcal{C}_i$ 中的行之间重复出现，对于某个 $i = 1,\ 2$。

在本文中，为简化表述，我们假设 $m \ge p$，尽管这并非必要。首先，引理 2.4 刻画了定理 2.5 和 2.7 中要考虑的双组设计矩阵的方差和协方差结构。需要指出的是，当 $H_i$ 是对称方阵时，它可以取为半正定协方差矩阵的唯一平方根，记作 $\mathsf{Cov}(\mathbb{Z}_j) := H_i H_i^T =: \Sigma_i \succeq 0$ 对所有 $j \in \mathcal{C}_i$ 均成立。

**引理 2.4。（双组次高斯混合模型）** 将 $X$ 记为式 (2) 中所考虑的双组设计矩阵。设 $W_1$、.....、$W_n \in \mathbb{R}^m$ 为相互独立、零均值、各向同性的次高斯随机向量，且满足 (22)。设对所有 $j \in \mathcal{C}_i$，$\mathbb{Z}_j = X_j - \mathbb{E}X_j = H_i W_j$，其中 $H_i \in \mathbb{R}^{p\times m}$，且 $0 < \|H_i\|_2 < \infty$，对于 $i \in \{1,2\}$。则 $\mathbb{Z}_1$、.....、$\mathbb{Z}_n$ 是相互独立的次高斯随机向量，其 $\mathit{Cov}(\mathbb{Z}_i)$ 满足 (14) 和 (15)，其中

$$\forall j \in \mathcal{C}_i, \quad \mathit{Cov}(\mathbb{Z}_j) := \mathbb{E}(\mathbb{Z}_j \mathbb{Z}_j^T) \ = \ \mathbb{E}(H_i W_j W_j^T H_i^T) = H_i H_i^T \ \mathit{and} \ V_i := \|H_i\|_F^2 = \mathrm{tr}(\Sigma_i). \tag{23}$$

## 2.1 主要结果

全文中，我们用 $n_{\min} := n w_{\min}$ 和 $n_{\max} := n w_{\max}$ 分别表示最小簇和最大簇的大小。记 $w_{\min} := \min_{j=1,\ 2} w_j$，其中 $w_j = n_j/n$。我们首先提出以下假设 (A1) 和 (A2)：假设随机矩阵 $\mathbb{Z}$ 的元素相互独立且服从次高斯分布，并满足分离度（及信噪比）条件 (25)。作为基准，我们在定理 2.5 中陈述了在 (A1) 和 (A2) 条件下的首个主要结果。然而，只要 (A2) 成立，调整 (25) 后，定理 2.5 的结论也适用于一般的双组模型。

**(A1)** 令 $\mathbb{Z} = X - \mathbb{E}X = (z_{ij})$。令 $\mathbb{Z}_i = X_i - \mathbb{E}X_i$，$i = 1$、.....、$n$ 为相互独立、均值为零且坐标相互独立的次高斯随机向量，满足对所有 $i,\ j$, $\|z_{ij}\|_{\psi_2}$：
$\|X_{ij} - \mathbb{E}X_{ij}\|_{\psi_2} \le C_0$ 。

**(A2)** 这两 个分布的方差轮廓差异按以下意义有界 ：

$$\begin{aligned} |V_1 - V_2| \ &\le \ \frac{1}{3}\xi n p \gamma \quad \text{for some} \quad 1 > 2\xi = \Omega(1/n_{\min}), \ \text{where} \\ V_1 \ &= \ \mathbb{E}\,\langle\, \mathbb{Z}_j, \mathbb{Z}_j \,\rangle \quad \forall j \in \mathcal{C}_1 \ \text{and} \ V_2 = \mathbb{E}\,\langle\, \mathbb{Z}_j, \mathbb{Z}_j \,\rangle \quad \forall j \in \mathcal{C}_2. \end{aligned} \tag{24}$$

**定理 2.5.** 设 $1 > \delta = \Omega(1/n)$。令 $\mathcal{C}_j \subset [n]$ 表示组成员关系，其中 $|\mathcal{C}_j| = n_j$和 $\sum_j n_j = n$。假设对于 $j \in \mathcal{C}_i$，有 $\mathbb{E}X_j = \mu^{(i)}$，其中 $i = 1,2$。令 $\widehat{Z}$ 为 *SDP* (11) 的一个解。假设 *(A1)* 和 *(A2)* 成立，且存在某些绝对常数 $C, C'$，

$$p\gamma = \Delta^2 \ge \frac{C' C_0^2}{\xi^2} \quad \mathit{and} \ \ pn \ge \frac{C C_0^4}{\xi^2 \gamma^2}, \ \ \mathit{where}\ \xi \ \mathit{is\ the\ same\ as\ in}\ (24). \tag{25}$$

那么，以至少 $1-2\exp(-cn)$ 的概率，有

$$\left\|\widehat{Z}-\bar{x}\bar{x}^T\right\|_1/n^2 \quad =: \quad \delta \le 2K_G\xi/w_{\min}^2 \quad and \quad \left\|\widehat{Z}-\bar{x}\bar{x}^T\right\|_F^2/n^2 \le 4K_G\xi/w_{\min}^2, \tag{26}$$

其中 $\bar{x}$ 如 (3) 所示。对于引理 *2.4* 中讨论的更一般的双组次高斯混合模型，只需相应调整 (25)，同样的误差界 (26) 也成立，从而 (18) 成立。

**讨论**。为完整起见，我们在第 3 节给出定理 2.5 的证明提纲。我们的证明适用于各向同性和各向异性情形。关于 (A2) 的论证，参见 [39, 20] 。我们的分析得出了一个令人惊讶的结果：只要 (A2) 成立，定理 2.5 就不要求簇的规模均衡，也不要求方差分布相同。我们还选取一个凸子集 $\mathcal{M}_{\rm opt}$:

$$\mathcal{M}_{\rm opt} = \{Z : Z \succeq 0, \mathrm{diag}(Z) = I_n\} \subset \mathcal{M}_G^+. \tag{27}$$

我们的证明沿用了 [22]，中针对随机块模型给出的论证顺序。然而，将其应用于我们的设定时，我们关键地利用了定理 3.5 和 5.2 给出的次高斯集中不等式，并验证了在最大化解 $Z^* = \arg\max_{Z\in\mathcal{M}_{\rm opt}} \langle R, Z\rangle = \bar{x}\bar{x}^T$ 处，可行集 $\mathcal{M}_{\rm opt}$ 上超额风险 $\langle R, Z^* - Z\rangle$ 具有非平凡的全局曲率，参见引理 3.7。为了采用全局方法控制误分类误差，参数 $(\delta, \xi)$ 必须满足以下条件：根据 (25) 和 (26),

$$\xi^2 \asymp \frac{C_0^2}{p\gamma} \vee \frac{C_0^4}{np\gamma^2} = 1/s^2 \quad \text{and} \quad \delta \le \frac{2K_G\xi}{w_{\min}^2}. \tag{28}$$

这里的参数 $0 < \xi^2 < 1/4$ 理解为选取为与信噪比参数 $s^2$成反比，从而以至少 $1-\exp(-cn)$ 的概率，

$$\left\|YY^T - \mathbb{E}YY^T\right\|_2 \le C(C_0^2(\sqrt{pn}\vee n)\vee C_0 n\sqrt{p\gamma}) \asymp \xi np\gamma$$

正如我们将在定理 5.2 和 5.3 中所证明的那样。

显然，分离度 $\Delta^2$越大、样本量 $n$越大且 $s^2$越大，(A2)就越容易得到满足，因为根据定义和 (25),

$$\xi np\gamma \ge n/(\xi) \vee \frac{1}{\xi\gamma} \asymp \sqrt{s^2}(n \vee \frac{1}{\gamma})$$

因此，到目前为止，误分类率 $\delta \asymp \xi/w_{\min}^2$ 被界定为与 $s^2$的平方根成反比。更明确地说，我们有推论 2.6。

**推论 2.6**。（关于 $o(n)$ 个误分类顶点的聚类）令 $\widehat{x}$ 表示 $Z$对应于最大特征值的特征向量，其中 $\|\widehat{x}\|_2 = \sqrt{n}$。那么在定理 *2.5* 的两种情形下，我们都有至少以 $1-2\exp(-cn)$ 的概率，

$$\min_{\alpha=\pm1} \|\alpha\widehat{x} - \bar{x}\|_2^2 \le \delta n = \delta\|\bar{x}\|_2^2, \quad where\, \delta \le 32K_G\xi/w_{\min}^2; \tag{29}$$

此外，$\widehat{x}$ 系数的符号能够正确估计顶点划分为两个簇的结果，误分类的顶点数至多为 $\delta n$ 。

接下来，我们在定理 2.7（分别为推论 2.8）中给出误差界（31）（分别为（32））， 该误差界随（17）中定义的信噪比参数 $s^2$ 呈指数衰减。定理 2.7 所考虑的设置包含定理 2.5 的情形作为特例, 我们将在第 2.2 节中对此进行详细说明。我们在一篇同期论文中证明定理 2.7。推论 2.6 和 2.8 分别由 Davis-Kahan 定理、定理 2.5 和 2.7 推出；我们将在补充材料 B 节中证明这些定理。

**定理 2.7**。 设 $W_1$、...、$W_n \in \mathbb{R}^m$ 是满足 (22) 的相互独立、均值为零、各向同性的次高斯随机向量。假设定理 *2.5* 中的条件成立，但将 *(A1)* 替换为以下假设：噪声矩阵 $\mathbb{Z} = X - \mathbb{E}(X)$ 按照定义 *2.3* 生成：

$$\forall j \in \mathcal{C}_i, \quad \mathbb{Z}_j = H_i W_j \ \ for \ \ i \in \{1,2\} \quad and \ \ H_i \in \mathbb{R}^{p\times m},$$

其中 $0 < \|H_i\|_2 < \infty$。假设对于某个绝对常数 $C$， $C_1$,

$$p\gamma \geq \frac{CC_0^2 \max_j \|\mathsf{Cov}(\mathbb{Z}_j)\|_2}{w_{\min}^4} \quad and \quad np \geq \frac{C_1 C_0^4 \max_j \|\mathsf{Cov}(\mathbb{Z}_j)\|_2^2}{\gamma^2 w_{\min}^4}. \tag{30}$$

设 $s^2$ 如 (17) 中的定义。则以至少 $1 - 2\exp(-c_1 n) - c_2/n^2$ 的概率,

$$\left\|\widehat{Z} - \bar{x}\bar{x}^T\right\|_1 /n^2 \leq \exp(-c_0 s^2 w_{\min}^4) \tag{31}$$

$\widehat{\ }$，其中 $Z$ 如 (11) 中所示，且 $c$、$c_0$、$c_1$ 为某些绝对常数。

**推论 2.8**。 (关于 $s^2$ 的指数衰减) 记 $\theta_{SDP} = \angle(\widehat{x}, \bar{x})$ 为 $\widehat{x}$ 与 $\bar{x}$ 之间的夹角；回忆一下，当 $j \in \mathcal{C}_1$ 时 $\bar{x}_j = 1$，当 $j \in \mathcal{C}_2$ 时 $\bar{x}_j = -1$，且 $\widehat{x}$ 如推论 *2.6* 中所示。在定理 *2.7* 的设定下，以至少 $1 - 2\exp(-cn) - 2/n^2$ 的概率，对于某些绝对常数 $c$、$c_0$、$c_1$,

$$\begin{aligned} \sin(\theta_{SDP}) &\leq 2\left\|\widehat{Z} - \bar{x}\bar{x}^T\right\|_2 /n \leq \exp(-c_1 s^2 w_{\min}^4) \quad and \\ \min_{\alpha=\pm 1} \left\|(\alpha\widehat{x} - \bar{x})/\sqrt{n}\right\|_2 &\leq 2^{3/2}\left\|\widehat{Z} - \bar{x}\bar{x}^T\right\|_2 /n \leq 4\exp(-c_0 s^2 w_{\min}^4/2) \end{aligned} \tag{32}$$

## 2.2 协方差估计

**关于协方差为对角形式的备注**。在定理 2.5 中，每个噪声向量 $\mathbb{Z}_j$, $\forall j \in [n]$ 的坐标相互独立、均值为零且服从次高斯分布，其 $\psi_2$ 范数一致有界。假设我们根据引理 2.4 生成两个簇，其协方差分别为对角矩阵 $H_1$ 和 $H_2$，其中

$$H_j H_j^T = \mathrm{diag}(\sigma_{1j}^2, \ldots, \sigma_{pj}^2) \quad \forall j \in \{1,2\},$$

令 $\sigma_{\max} := \max_i \|H_i\|_2 = (\max_{j,\ k} \mathbb{E}(z_{jk}^2))^{1/2}$。那么对于 $\mathcal{C}_i$中的每个行向量，我们有

$$\mathsf{Cov}(\mathbb{Z}_j) \ = \ H_i H_i^T \ \text{ and hence } \ V_i := \mathbb{E}\left\langle \mathbb{Z}_j, \mathbb{Z}_j \right\rangle = \mathrm{tr}(H_i H_i^T) = \sum_{k=1}^p \sigma_{ki}^2$$

根据引理 2.4，其中 $V_i$ 是节点 $j \in \mathcal{C}_i$的共同方差轮廓。现在，根据 $\mathbb{Z}_j$ 的坐标独立性以及 (13) 的定义，我们有

$$\|\mathbb{Z}_j\|_{\psi_2} := \sup_{h\in\mathbb{S}^{p-1}} \|\left\langle \mathbb{Z}_j, h \right\rangle\|_{\psi_2} \leq C \max_{k\leq p} \|z_{jk}\|_{\psi_2} \leq CC_0(\max_i \|H_i\|_2)$$

其中 $\mathbb{S}^{p-1}$ 表示 $\mathbb{R}^p$中的球面，并且我们利用 (22) 以及以下事实

$$\max_{k\le p}\|z_{jk}\|_{\psi_2}\le\sigma_{\max}(\max_{j,k}\|w_{jk}\|_{\psi_2})\le\sigma_{\max}C_0\ \text{ since }\ \|w_{jk}\|_{\psi_2}\le C_0,\forall j,k.$$

那么显然，$\max_j\|$协方差$(\mathbb{Z}_j)\|_2=\max_i\left\|H_iH_i^T\right\|_2=\sigma_{\max}^2$，因此 (30) 蕴含 (25) 成立；参见。

**关于更一般协方差的备注**。当允许各总体具有不同的协方差结构时，根据定理 2.7，对于某个普适常数 $C$，且对所有$j\in\mathcal{C}_i$,

$$\|\mathbb{Z}_j\|_{\psi_2}:=\sup_{h\in\mathbb{S}^{p-1}}\|\langle\mathbb{Z}_j,h\rangle\|_{\psi_2}\ \le\ \|W_j\|_{\psi_2}\|H_i\|_2\le CC_0\max_i\|H_i\|_2\ \text{ since}\tag{33}$$

$$\forall h\in\mathbb{S}^{p-1},\quad\|\langle\mathbb{Z}_j,h\rangle\|_{\psi_2}\ =\ \|\langle H_iW_j,h\rangle\|_{\psi_2}\le\|W_j\|_{\psi_2}\left\|H_i^Th\right\|_2\tag{34}$$

其中 $\|W_j\|_{\psi_2}\le CC_0$ 由 (22) 的定义可知。不失一般性（w.l.o.g.），可以假设 $C_0=1$，因为可以调整 $H_i$，通过 $\|H_i\|_2$ 控制 (33) 中的上界。正如我们将在定理 6.3 和 7.2 中所展示的，以至少 $1-2\exp(-cn)$ 的概率，对于定义 2.3 中的 $\mathbb{Z}$，

$$\frac{1}{p}\left\|\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T-\mathbb{E}\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T\right\|_2\ \le\ C'(C_0\max_i\|H_i\|_2)^2\left(\sqrt{\frac{n}{p}}\vee\frac{n}{p}\right),\tag{35}$$

对于绝对常数 $c,\ C'$。我们利用第 5.1 节和第 7 节中的式（35），讨论关于 $\left\|YY^T-\mathbb{E}YY^T\right\|$的测度集中界；参见引理 5.4 和 5.5。

## 2.3 相关工作

在本文中，我们使用图割问题（5）的半正定松弛；该问题最初由 [11, 45] 在总体聚类的背景下提出。这个问题的生物学背景是：给定来自 $k$ 个来源总体的 $n$ 个体的 DNA 信息，我们希望将每个个体归入正确的类别。DNA 包含一系列称为单核苷酸多态性的标记，每个标记有两种变体（等位基因）。已知某个体的来源总体后，可以合理地假设，其基因型是通过从相应分布中独立抽取等位基因生成的。在理论计算机科学文献中，早期研究主要关注从充分分离的高斯混合（分量分布）中学习，目标是根据每个样本所属的分量分布对其进行分类；例如参见 [14, 5, 41, 3, 26, 28]。在早期研究中 [14, 5], ，分离度要求取决于每个分布的维度；最近，对于某些分布类别 [3, 27]，这一要求已被降低到与分布的维度 $p$ 无关。虽然我们的目标与这些结果不同——其中 $n>p$ 几乎是普遍适用的，而我们关注的是 $p>n$ 的情形——但我们仍有一个共同的比较指标：式（36）中所述的任意两个分布中心之间的 $\ell_2$-距离，这一指标本质上是最优的。

假设 (25) 成立，使得 $\ell_2$-分离度和总数据量满足

$$\Delta^2:=p\gamma=\widetilde{\Omega}(1/(\xi^2))\ \text{ and }\ pn=\widetilde{\Omega}(1/(\xi^2\gamma^2)),\quad\text{ where }\ 1/n<\xi\le cw_{\min}^2\tag{36}$$

~而 Ω(·) 符号仅隐藏式（6）中高维次高斯随机向量$\mathbb{Z}_i\in\mathbb{R}^p$ 的 $\psi_2$ 常数。我们的结果表明，即使 $n$ 很小，只要增大 $p$，使总

样本量满足式（36），我们就能确保通过半定规划（11）或定理 4.1 中所述的谱算法实现簇结构的部分恢复。此前，只有~平衡最大割算法 [45, 11], 已知存在此类结果·，其中式（36）中的 Ω(·) 符号也可能隐藏对数因子。 [45, 11]中的结果是最早一批旨在从严格和直观两方面理解其提出的算法及先前方法 [34, 37] 为何能在低样本量设置下奏效的研究之一，当 $p \gg n$ 和 $np$ 满足式（36）时尤其如此。这些早期结果仍要求信噪比达到 $s^2 = O(\log n)$ 的量级；此外，这些结果仅在结构层面，因为并未给出用于寻找最大割的多项式时间算法。

本工作的主要贡献是：我们使用所提出的半定规划 (11) 及相关谱算法来求得划分，并通过消除这些对数因子，证明了定量上比 [45, 11]更紧的界。近期， [39, 16, 20], 系列工作也打破了这一障碍，我们将在第 4 节详细阐述，参见变体 3。例如， [16, 17]也针对适当定义的信噪比建立了指数衰减的误差界，该信噪比侧重于平衡簇，并且要求在第二个分量中的 (37) 式额外包含一个 $\sqrt{\log n}$ 因子：

$$\text{In [16], cf. eq.(8):} \quad \Delta^2 = p\gamma \;=\; \Omega\left(1 + \sqrt{\frac{p\log n}{n}}\right) \quad \text{or} \tag{37}$$

$$\text{In [17], cf. eq.(13):} \quad \Delta^2 = p\gamma \;=\; \Omega\left((1 \vee \frac{p}{n}) + \sqrt{\frac{p\log n}{n}}\right) \tag{38}$$

因此，在 (38) 式中，对样本量施加了下界：在 $p > n$的情况下为 $n \geq 1/\gamma$ ，此外，矩阵 $np \geq \log n/\gamma^2$的大小也受到限制，这与 [9]中的界类似；参见其中的定理 1.2。关于谱聚类和图划分早期结果的参考文献，请参阅 [11, 9] 。关于随机块模型 (SBM)、（次）高斯混合以及更一般度量空间中的聚类相关工作，请参阅 [26, 38, 22, 1, 7, 12, 8, 20, 29, 17, 30, 2, 32] 及其中的参考文献。我们的证明技巧或许也具有独立研究价值，因为对数据矩阵进行中心化，使每一列的经验均值为 0，是统计数据分析中广泛采用的一种思路。

## 3 （“神谕”）估计量与整体分析

本小节的论述遵循 [22], ，为确保内容自足，我们将其纳入其中。首先，我们按照 [22] 的论述给出 Grothendieck 不等式。Frieze 和 Kannan 在 [19] 中提出的稠密图和矩阵问题高效近似算法研究，充分体现了割范数这一概念的重要作用。割范数对于 [22] 中论证的成立也至关重要。

**定义 3.1。（矩阵割范数）**对于矩阵 $A = (a_{ij})$ ，我们用 $\| (a_{ij}) \|_{\infty\to 1}$ 表示其 $\ell_\infty \to \ell_1$ 范数，其定义为

$$\|(a_{ij})\|_{\infty\to 1} \;=\; \max_{\|s\|_\infty \leq 1} \|As\|_1 = \max_{s,t\in\{-1,1\}^n} \langle A, st^T \rangle$$

该范数等价于如下定义的矩阵割范数：对于 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$,

$$\|A\|_\square \;=\; \max_{I\subset[m],J\subset[n]} \left|\sum_{i\in I}\sum_{j\in J} a_{i,j}\right|$$

因此

$$\|A\|_{\infty\to 1} \quad = \quad \max_{x,y\in\{-1,1\}^n} \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_i y_i \le \|x\|_2 \|y\|_2 \|A\|_2 \le n\|A\|_2$$

**定理 3.2**。（Grothendieck 不等式）设有一个由实数组成的 $n\times n$ 矩阵 $B=(b_{ij})$。假设对于任意数 $s_i$、$t_j\in\{-1,1\}$，都有

$$\left|\sum_{i,j} b_{ij}s_i t_j\right| = \left|\langle B, st^T\rangle\right| \le 1 \tag{39}$$

那么，对于所有向量 $S_i$、$V_i\in B_2^n$，都有 $\left|\sum_{i,\ j} b_{ij}\langle S_i, V_j\rangle\right| = \left|\langle B, SV^T\rangle\right| \le K_G$，其中 $K_G$ 是一个绝对常数，称为格罗滕迪克常数：

$$K_G \le \frac{\pi}{2\ln(1+\sqrt{2})} \le 1.783. \tag{40}$$

这里 $B_2^n=\{x\in\mathbb{R}^n:\ \|x\|_2\le 1\}$ 表示欧几里得范数的单位球。考虑以下两个矩阵集合：

$$\mathcal{M}_1 := \left\{st^T\ :\ s,t\in\{-1,1\}^n\right\},\quad \mathcal{M}_G := \left\{SV^T:\ \text{ all rows } S_i, V_j\in B_2^n\right\}.$$

显然，$\mathcal{M}_1\subset\mathcal{M}_G$。因此，Grothendieck 不等式可表述如下：

$$\forall B\in\mathbb{R}^{n\times n}\quad \max_{Z\in\mathcal{M}_G}|\langle B,Z\rangle| \le K_G \max_{Z\in\mathcal{M}_1}|\langle B,Z\rangle|. \tag{41}$$

显然，(41) 式右侧可以与定义 3.1 中的割范数联系起来：

$$\max_{Z\in\mathcal{M}_1}|\langle B,Z\rangle| = \max_{s,t\in\{-1,1\}^n}\langle B, st^T\rangle = \|B\|_{\infty\to 1} \tag{42}$$

为使讨论足够一般，按照 [22], ，我们首先令 $\mathcal{M}_{\text{opt}}$ 为 (43) 中定义的格罗滕迪克集合 $\mathcal{M}_G^+$ 的任意子集：

$$\mathcal{M}_G^+ := \{Z : Z\succeq 0, \operatorname{diag}(Z)\preceq I_n\}\subset\mathcal{M}_G\subset[-1,1]^{n\times n}. \tag{43}$$

^引理 3.3 详细说明了对于任意给定的 $B$（随机或确定性），$Z$ 与使用 $R$ 关于目标函数的 $Z^*$ 之间的关系，其中 $R$ 定义见 (44)。令

$$\widehat{Z} := \arg\max_{Z\in\mathcal{M}_{\text{opt}}}\langle B,Z\rangle \quad \text{and} \quad Z^* := \arg\max_{Z\in\mathcal{M}_{\text{opt}}}\langle R,Z\rangle \tag{44}$$

**引理 3.3**。(引理 3.3 [22]) 令 $\mathcal{M}_{opt}$ 为 (43) 中定义的 $M_G^+\subset[-1,1]^{n\times n}$ 的任意子集。^那么，对于(44)中定义的 $Z$ 和 $Z^*$，

$$\langle R,Z^*\rangle - 2K_G\|B-R\|_{\infty\to 1} \le \langle R,\widehat{Z}\rangle \le \langle R,Z^*\rangle \tag{45}$$

其中，格罗滕迪克常数 $K_G$ 与(40)中的定义相同。于是

$$0\le\langle R, Z^*-\widehat{Z}\rangle \quad\le\quad 2K_G\|B-R\|_{\infty\to 1} \quad \textit{moreover, we have} \tag{46}$$

$$\sup_{Z\in\mathcal{M}_{opt}}|\langle B-R, Z-Z^*\rangle| \quad\le\quad 2K_G\|B-R\|_{\infty\to 1} \tag{47}$$

^引理 3.3 表明，对于给定的 $B$，原问题中如 (44) 所定义的 $Z$，若原矩阵 $B$ 与参考矩阵 $R$ ^足够接近，则可为参考问题提供一个近似最优解。引理 3.3 促使我们在第 3 节中考虑如 (48) 所定义的“神谕” $B$ 以及如 (44) 所定义的 $Z$。引理 3.3 作为引理 3.3 出现在 [22]中。为使论述完整，我们在补充材料 C 节中给出证明。

### 3.1 预言机估计量

凸松弛的总体目标是：(a) 使用恰当选取的参考矩阵 $R$ 估计离散优化问题 (4) 的解，使得求解整数二次问题 (4)（用 $R$ 替换 $\bar{A}$）能够准确地恢复该簇；(b) 此外，凸集 $\mathcal{M}_G^+$（分别为 $\mathcal{M}_{\text{opt}}$）的选取应使静态问题 (4) 的半正定松弛是紧的。这意味着，在半定规划 (11)（分别为半定规划2 (12)）中，用 $R = \mathbb{E}\,(Y)\,\mathbb{E}\,(Y)^T$ 替换 $A$（分别为 $A'$）时，我们会得到一个解 $Z^* = \bar{x}\bar{x}^T$，进而可用它准确恢复这些簇；参见引理 3.6。

请注意，与 [22]、$\mathbb{E}A \neq R$ 的情形不同，这会导致偏差；不过，一种补救方法是将 (11) 转换为等价的**预言机半定规划**形式，以弥合 $YY^T$ 与参考矩阵 $R$ 之间的差距。现在我们给出其定义：回顾 $\mathcal{M}_{\text{opt}} = \{Z:\ Z \succeq 0,\ \text{diag}(Z) = I_n\} \subset \mathcal{M}_G^+$，

$$\textbf{OracleSDP}: \qquad \text{maximize} \ \ \langle B, Z \rangle \quad \text{subject to} \quad Z \in \mathcal{M}_{\text{opt}} \text{ where} \tag{48}$$

$$B \ := \ A - \mathbb{E}\tau I_n \quad \text{where} \quad \tau = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \langle Y_i, Y_i \rangle \tag{49}$$

且 $A$ 与式 (11) 中相同。

此外，在 $\mathcal{M}_{\text{opt}}$ 上，调整项 $\mathbb{E}\tau I_n$ 在优化中不起作用，因为额外的迹项 $\propto \langle I_n, Z \rangle = \text{tr}(Z)$ 在可行集 $\mathcal{M}_{\text{opt}}$ 上是关于 $Z$ 的常数函数。然而，在式 (49) 中加入对角项 $\mathbb{E}\tau I_n$，使得偏差 $\|\mathbb{E}B - R\|$ 较小。总之，根据命题 3.4，优化目标 (11) 等价于 (48)；参见 (51)。换言之，如式 (51) 所示，在更大的约束集 $\mathcal{M}_G^+$ 上优化原始半定规划 (11)，等价于在$Z \in \mathcal{M}_{\text{opt}}$ 上最大化 $\langle B, Z \rangle$，其中我们用 $B$ 替换对称矩阵 $A$。

^**命题 3.4**。如(11) 所示，最优解 $Z$ 的对角元素必须设为 $I_n$。因此，(11) 中的最优解集合^ $Z$ 与(27)所示的凸子集 $\mathcal{M}_{opt}$ 上的解相同，

$$\underset{Z \in \mathcal{M}_G^+}{arg\,max} \langle A, Z \rangle \ = \ \underset{Z \in \mathcal{M}_{opt}}{arg\,max} \langle A, Z \rangle \tag{50}$$

$$= \ \underset{Z \in \mathcal{M}_{opt}}{arg\,max} (\langle A, Z \rangle - \mathbb{E}\tau \langle I_n, Z \rangle). \tag{51}$$

我们在补充材料 C.2 节中证明命题 3.4。我们强调，我们的算法求解的是半定规划 (11)，而非预言机半定规划 (48)。不过，构造预言机半定规划 (48) 有助于我们进行全局分析，控制 $\|\mathbb{E}B - R\|$，正如我们将在定理 3.5 中展示的那样。

**定理 3.5**。（$R$ **是主导项**）假设定理 *2.5* 中的条件成立。那么，以至少 $1 - 2\exp(-cn)$ 的概率，我们有

$$\|B - R\|_2 \ \leq \ \xi np\gamma \ \ and \ \ \|B - R\|_{\infty \to 1} \leq \xi n^2 p\gamma$$

**讨论**。注意， $B$ 无法直接获得，因为我们不知道 $\mathbb{E}\tau$；不过这并不重要，因为在所提出的算法 (11) 中，我们可以利用中心化数据（或其格拉姆矩阵）轻松计算出 $A$ 。结合引理 3.3，定理 3.5 有助于证明定理 2.5；定理 3.5 的证明概要见第 5 节，完整证明见补充材料 D 节。半正定规划过程 (11) 的有效性关键取决于对偏差项 $\|\mathbb{E}B - R\|_{\infty\to 1}$ 以及关于 $\|B - \mathbb{E}B\|_{\infty\to 1}$ 的测度集中界的控制，而这又分别依赖于引理 5.1、定理 5.2 和定理 5.3。正如我们将在定理 3.5 的证明中所展示的，偏差项

$$\mathbb{E}B - R \;=\; \mathbb{E}YY^T - \mathbb{E}(Y)\mathbb{E}(Y)^T - \mathbb{E}\lambda(E_n - I_n) - \mathbb{E}\tau I_n$$

在假设 (A2) 下，它在算子范数和割范数意义下都显著小于 $\mathbb{E}A - R$。此外，关于 $\left\|YY^T - \mathbb{E}YY^T\right\|$ 的测度集中界意味着，同样的界（相差一个常数因子）也适用于 $\|B - \mathbb{E}B\|$。对二者加以控制，即可得到定理 3.5 的结论。

在定理 4.1 中，我们证明了关于 $R$ 与 $B$（分别为 $YY^T$）的主特征向量之间夹角和 $\ell_2$ 距离的界的收敛结果。事实上，计算 $B - R$ 的算子范数和割范数是本文的关键技术步骤之一，它将定理 4.1 和定理 2.5 统一起来。

### 3.2 定理 2.5 的证明

引理 3.6 表明，群体成员向量的外积，即 $Z^*$ ，将在所有 $Z \in [-1,1]^{n\times n}$ 中最大化 $\langle R, Z\rangle$ ，自然也会在所有 $Z \in \mathcal{M}_{\text{opt}}$ 中最大化。我们需要的最后一个结果是 $\widehat{}$，用于验证超额风险 $\langle R, Z^* - Z\rangle$ 在最大化解 $Z^*$ 处相对于可行集 $\mathcal{M}_{\text{opt}}$ 具有非平凡的全局曲率；该结果由引理 3.7 给出。随后，我们结合引理 3.3 和引理 3.7，并$\widehat{}$定理 3.5，得到 $\|Z - Z^*\|$ 在 $\ell_1$ 范数或弗罗贝尼乌斯范数下的最终误差界。回想 $\|A\|_1 = \sum_{i,\ j}|a_{ij}|$。

**引理 3.6**。***(参考目标函数的优化器)*** 设 $R$ 如定义 *2.2* 所定义。设 $\mathcal{M}_{opt} \subseteq \mathcal{M}_G^+ \subset [-1,1]^{n\times n}$ 如 (27)中所定义。则

$$Z^* = \underset{Z\in\mathcal{M}_{opt}}{arg\,max}\,\langle R, Z\rangle \;=\; \begin{bmatrix} E_{n_1} & -E_{n_1\times n_2} \\ -E_{n_2\times n_1} & E_{n_2}\end{bmatrix} = \bar{x}\bar{x}^T \tag{52}$$

引理 3.7 的证明基于引理 6.2 [22] 中的思路，并推迟至补充材料 C.4 节。由此，我们可以对随机误差 $B - R\widehat{}$ $\widehat{}$应用 Grothendieck 不等式（参见引理 3.3），从而对所有 $Z \in \mathcal{M}_{\text{opt}}$一致地得到 $\langle R, Z^* - Z\rangle$ 的上界，其中 $Z^*$如 (52) 中所定义。综合以上结果，我们可以证明定理 2.5。

**引理 3.7**。 设 $R$ 如定义 *2.2* 所定义，且 $Z^*$ 如(52)中所定义。对于每个 $Z \in \mathcal{M}_{opt}$,

$$\langle R, Z^* - Z\rangle \;\geq p\gamma w_{\min}^2 \|Z - Z^*\|_1 . \tag{53}$$

定理 *2.5* 的证明。我们首先将根据定理 3.5 和引理 3.3 得出，实际目标函数 $Z = \arg\max_{Z\in\mathcal{M}_{\text{opt}}}\langle B, Z\rangle$,的$\widehat{}$最大化解必须在 $\ell_1$ 距离意义下接近 $Z^*$ 式（52）中的结果。在引理 3.3 和引理 3.7 的条件下，

$$\left\|\widehat{Z} - Z^*\right\|_1/n^2 \;\leq\; \frac{\langle R, Z^* - \widehat{Z}\rangle}{n^2 p\gamma w_{\min}^2} \leq \frac{2K_G\|B - R\|_{\infty\to 1}}{n^2 p\gamma w_{\min}^2} \leq \frac{2K_G\xi}{w_{\min}^2} =: \delta$$

其中，根据定理 3.5，$\|B-R\|_{\infty\to 1} \le \xi n^2 p\gamma$。因此

$$\left\|Z^* - \widehat{Z}\right\|_F^2 \;\le\; \left\|Z^* - \widehat{Z}\right\|_{\max} \left\|Z^* - \widehat{Z}\right\|_1 \le 2\delta$$

其中，$\widehat{Z}$，$Z^*$ 的所有元素都属于 $[-1,1]$，因此 $\left\|Z^* - \widehat{Z}\right\|_{\max} \le 2$。□

## 4 用于聚类的半定规划松弛 g

将行向量为 $X_i$ 的数据矩阵记为 $X \in \mathbb{R}^{n\times p}$，如式 (54) 所示。对样本点 $\{1,\dots,n\}$ 的划分 $\mathcal{C} = \{C_1,\dots,\mathcal{C}_k\}$，其 $k$-均值准则基于每个点 $X_i \in \mathbb{R}^p$ 到其所属簇质心 $\mathbf{c}j$ 的欧氏距离平方和，即:

$$f(X,\mathcal{C},k) := \sum_{j=1}^{k}\sum_{i\in\mathcal{C}_j} \|X_i - \mathbf{c}_j\|_2^2 \quad \text{where} \quad \mathbf{c}_j := \frac{1}{|\mathcal{C}_j|}\sum_{\ell\in\mathcal{C}_j} X_\ell \in \mathbb{R}^p \tag{54}$$

按照 [36, 35]，中的方法，通过整数规划形式求得式 (54) 的全局解是 NP 难的；对于 $k = 2$ [15, 4]，这也是 NP 难问题。在不同背景下，人们研究了目标函数的各种半定松弛。关于更全面的介绍，请参阅 [44, 35, 6, 25, 29, 31, 39, 16, 20, 17] 及其中的参考文献。令 $\Psi_n$ 表示实数 $n \times n$ 对称矩阵构成的线性空间。

**划分的表示**。 [44, 36, 35] 的研究表明，最小化 $k$-均值目标函数 $f(X,\ \mathcal{C},\ k)$等价于求解以下最大化问题:

$$\text{maximize} \quad \langle \widehat{S}_n, Z\rangle \qquad \text{s.t. } Z \in \mathcal{P}_k \tag{55}$$

其中 $\widehat{S}_n = XX^T$，约束集 $\mathcal{P}_k$ 的定义如式（56）所示:

$$\mathcal{P}_k = \{B \in \Psi_n : B \ge 0, B^2 = B, B\mathbf{1}_n = \mathbf{1}_n, \operatorname{tr}(B) = k\} \tag{56}$$

其中 $B \ge 0$ 表示 $B$ 的所有元素均为非负数。因此，$\mathcal{P}_k$ 中的矩阵是分块对角、对称、非负的投影矩阵，且 $\mathbf{1}_n$ 是其特征向量。对于任意 $k \in [n]$，以下矩阵集合 $\Phi_{n,\ k}$ 是 $\Psi_n$的紧凸子集:

$$\Phi_{n,k} = \{Z \in \Psi_n : I_n \succeq Z \succeq 0, \operatorname{tr}(Z) = k\} \tag{57}$$

**变体 1**。 Peng 和 Wei [35] 首先将 $Z^2 = Z$这一要求，即 $Z$ 是投影矩阵，替换为一个放宽后的条件: $Z$ 的所有特征值必须位于 $[0,1]$中: $I_n \succeq Z \succeq 0$。现在考虑式（55）的以下半正定松弛,

$$\text{maximize} \quad \langle \widehat{S}_n, Z\rangle \ \text{s.t. } Z \in \mathcal{M}_k \ \text{ where } \ \mathcal{M}_k = \{Z \in \Phi_{n,k} : Z \ge 0, Z\mathbf{1}_n = \mathbf{1}_n\} \tag{58}$$

本方法与半定规划 (11) 的主要区别如下：(a) 在凸集 $\mathcal{M}_{\text{opt}}$ (27) 中，我们不要求所有条目均为非负，即 $Z_{ij} \ge 0,\ \forall i,\ j$；这样可以加快计算；(b) 为了得到足够紧的测度集中界，本研究进行了一个自然但重要的数据处理步骤：根据数据的列均值对其进行中心化，然后

按照定义 2.1 计算 $A$，如 (9) 所示；(c) 鉴于这一步中心化处理，我们不需要施加 $Z\mathbf{1}_n = \mathbf{1}_n$。详情请见变体 2。

**变体 2**。为加快计算，可以去掉 (58) [44, 35] 中 $Z$ 各元素的非负约束。[35] 中还考虑了以下半正定松弛：

$$\text{maximize} \quad \langle \widehat{S}_n, Z \rangle \qquad \text{s.t.} \quad Z\mathbf{1}_n = \mathbf{1}_n, Z \in \Phi_{n,k} \quad \text{for} \quad \Phi_{n,k} \text{ as in (57).} \tag{59}$$

此外，Peng 和 Wei [35] 表明，(59) 的可行解集与 $YY^T$ 的奇异值分解存在直接联系，这可通过以下与我们方案密切相关的约化步骤实现。当 $Z$ 是 (59) 的一个可行解时，$\mathbf{1}_n/\sqrt{n}$ 是 $Z$ 的单位范数主特征向量，并且可以定义

$$Z_1 \;:=\; Z - \frac{1}{n}\mathbf{1}_n\mathbf{1}_n^T \quad \text{and hence} \quad Z_1 := (I - P_1)Z = (I - P_1)Z(I - P_1). \tag{60}$$

于是，$\mathsf{tr}(Z_1) = \mathsf{tr}(Z) - 1 = k - 1$，且 $Z_1 \in \Phi_{n,\ k-1}$。因此，(59) 约化为

$$\text{maximize} \quad \langle YY^T, Z_1 \rangle \qquad \text{s.t.} \quad I_n \succeq Z_1 \succeq 0, \mathrm{tr}(Z_1) = k - 1 \tag{61}$$

因为 $YY^T = (I - P_1)\widehat{S}_n(I - P_1)$。令 $\lambda_1 \geq \ldots \geq \lambda_{n-1}$ 为 $YY^T$ 按降序排列的最大 $(n-1)$ 个特征值。当且仅当；参见例如，( $\sum_{i=1}^{k-1}\lambda_i$ [33] 61 $\langle YY^T, Z_1 \rangle$ =) 的最优解才能达到。于是，求解 ( ) 并相应地求解 ( ) 的算法如下 [35]: 61 59

(a) 使用奇异值分解法计算 $YY^T$ 的前 $k-1$ 个最大特征值及其对应的特征向量 $v_1, \ldots, v_{k-1}$; (b) 设

$$Z_1 = \sum_{j=1}^{k-1} v_j v_j^T; \;\; \text{and return} \;\; Z = \frac{1}{n}\mathbf{1}_n\mathbf{1}_n^T + Z_1 \;\; \text{as a solution to (59).}$$

现在，对于 $k = 2$，我们有 $Z_1 = v_1 v_1^T$。在定理 4.1 中，我们证明了夹角以及向量 $v_1$ 和 $\bar{v}_1$之间$\ell_2$ 距离的收敛性，其中 $v_1$ 和 $\bar{v}_1$ 分别是 $YY^T$和参考矩阵 $R$ 的主特征向量。定理 4.1 展示了我们的估计过程和测度集中界的另一项出色应用，即定理 3.5。

**定理 4.1**。**（奇异值分解：不平衡情形）**记 $YY^T$ 的主单位范数特征向量为 $v_1$，它也与(9) 和 $B$ (49)的主单位范数特征向量一致。令 $\bar{v}_1$ 为(21)中的$R$ 的主单位范数特征向量：

$$\bar{v}_1 = [w_2\mathbf{1}_{n_1}, -w_1\mathbf{1}_{n_2}]/\sqrt{w_2 w_1 n} = [\sqrt{w_2/w_1}\mathbf{1}_{n_1}, -\sqrt{w_1/w_2}\mathbf{1}_{n_2}]/\sqrt{n}, \tag{62}$$

其中 $\langle \bar{v}_1, \mathbf{1}_n \rangle = 0$。那么，在定理 *3.5* 的条件下，以至少 $1 - 2\exp(-cn)$ 的概率，对于某些绝对常数 $c$、$c_0$、$c_1$、$c_2$，

$$\sin(\theta_1) \;:=\; \sin(\angle(v_1, \bar{v}_1)) \leq \frac{2\,\|B - R\|_2}{w_1 w_2 np\gamma} \leq \frac{2\xi}{w_1 w_2} \tag{63}$$

$$\min_{\alpha=\pm 1} \|\alpha v_1 - \bar{v}_1\|_2^2 \;\leq\; \delta', \;\; where \;\; \delta' = 8\xi^2/(w_1^2 w_2^2) \leq c_2\xi^2/w_{\min}^2; \tag{64}$$

其中 $\theta_1 = \angle(v_1, \bar{v}_1)$ 表示两个向量 $v_1$ 和 $\bar{v}_1$之间的夹角。

**推论 4.2.** (含有 $o(n/s^2)$ 个误分类顶点的聚类) 假设 $w_1, w_2 \in (0,1)$ 与 0、1保持一定距离。在定理 *4.1* 的条件下，以至少$1-2\exp(-cn)$的概率，对于某些绝对常数 $c$， $v_1$ 的系数符号能够正确估计顶点划分为两个簇的结果，误分类顶点至多为 $O(\xi^2 n)$ 个。

**讨论**。 我们在补充材料 E 节中证明定理 4.1 及其推论。 $v_1$ 的系数符号能够正确估计顶点的划分，误分类顶点至多为 $\delta' n \asymp \xi^2 n$ 个，其中回顾一下， $\xi^2 \asymp 1/s^2$ (28)。因此，误分类误差的上界与信噪比参数 $s^2$成反比；参见 (28)。这应与 (29) 对照：我们在定理 2.5 中证明，误分类顶点至多为 $\delta n \asymp \xi n$ 个，而在定理 2.7 中，这一数量进一步改进为 $O(n\exp(-c_0 s^2 w_{\min}^4))$。此外，可以对 $v_1$ 的取值进行排序，并根据 $k$-均值准则找到近乎最优的划分；算法2及数值示例见第 8 节。

**变体 3**。 $k$-均值松弛的主要问题在于，所得解往往会将样本点分成大小相同的组；此外，对角矩阵 $\Gamma$ 可能会造成偏差，其中

$$\Gamma = (\mathbb{E}[\,\langle \mathbb{Z}_i, \mathbb{Z}_j \rangle\,])_{i,j} = \mathrm{diag}([\mathrm{tr}(\mathsf{Cov}(\mathbb{Z}_1)), \ldots, \mathrm{tr}(\mathsf{Cov}(\mathbb{Z}_n))]),$$

尤其是当 $V_1$， $V_2$ 彼此不同时；偏差分析请参见补充材料 H 节。 $\widehat{}$在 [39, 20, 10], 中，他们提出了一个 $\Gamma$ 的初步估计量，记为 $\Gamma$，并考虑

$$\widehat{Z} \in \arg\max_{Z \in \mathcal{M}_k} \langle XX^T - \widehat{\Gamma}, Z \rangle \quad \text{where } \mathcal{M}_k \text{ is as in (58)} \tag{65}$$

而非原始的 Peng-Wei 半定规划松弛 (58)。尽管我们的定理 2.7 中的一般结果与 [20] 针对 $k=2$ 所得的结果一致，但我们强调，我们证明的是半定规划 (11) 的这些界限，该半定规划的动机来自图划分问题 (5)；而他们则遵循 [35]，直接为基于 $k$-均值准则 (54) 的半定松弛建立此类界限。在那里，参见 (58) 和 (65)，矩阵 $Z$ 不仅受半正定约束，其元素也必须非负。如前所述，在 (11) 中去掉对 $Z$ 元素的非负约束，优势在于能够加快计算。

因此，我们的半定规划和谱公式的另一个主要优势是，无需单独估计 $\mathrm{tr}(\Sigma_j)$，其中 $\Sigma_j$， $j=1,2$ 表示次高斯随机向量 $\mathbb{Z}_j$， $j \in [n]$的协方差矩阵，只要 (A2) 成立即可。若不成立，则可以考虑采用类似的思路。我们强调，我们的部分概率界限——即定理 6.3 和 7.2——已经适用于一般的 $k$-均值聚类问题。

## 5 定理 3.5 证明思路概述

我们强调，本节中的结果适用于所考虑的两种情形：设计矩阵具有独立元素，或具有独立的各向异性次高斯行。这使我们能够在这两种情形下证明定理 3.5。设 $Y$ 如定义 2.1 所述。根据 (9) 和 (49) 的定义，

$$\begin{aligned} A - \mathbb{E}A = B - \mathbb{E}B &:= YY^T - \mathbb{E}YY^T - (\lambda - \mathbb{E}\lambda)(E_n - I_n) && (66)\\ \text{hence } \|B - R\|_{\infty\to 1} &= \|B - \mathbb{E}B + \mathbb{E}B - R\|_{\infty\to 1} \\ &\le \|B - \mathbb{E}B\|_{\infty\to 1} + \|\mathbb{E}B - R\|_{\infty\to 1} && (67) \end{aligned}$$

根据三角不等式、(66)、(67) 以及补充引理 D.1，对于

$$\begin{aligned} \|B-R\|_2 &\leq 2\|\Psi\|_2 + \|\mathbb{E}B-R\|_2 \quad \text{where } \Psi := YY^T - \mathbb{E}(YY^T), \\ \text{and} \quad \|B-R\|_{\infty\to 1} &\leq \|\Psi\|_{\infty\to 1} + n\|\Psi\|_2 + \|\mathbb{E}B-R\|_{\infty\to 1} \end{aligned} \tag{68}$$

引理 5.1 指出，得益于调整项 $\mathbb{E}\tau I_n$，对于如 (49) 所示的 $B$，偏差 $\mathbb{E}B-R$ 会显著减小；当簇的方差分布相似（即 (24) 有界）时，偏差甚至会进一步减小。定理 3.5 可由引理 5.1 和定理 5.2（分别为定理 5.3）直接推出，其中我们对具有独立元素的设计矩阵（分别为具有独立各向异性次高斯行的设计矩阵）的 $\left\|YY^T-\mathbb{E}(YY^T)\right\|$ 给出了界。除定理 5.2 和定理 5.3 外，所有结果均表述为确定性界。令 $c_7$，$c_8$，$C_2$，$C_3$，.....为一些绝对常数。所有诸如 $1/6$，$2/3$，.....的常数均可任意选取。

**引理 5.1**。 假设 *(A2)* 成立。假设 $\xi \geq \frac{1}{2n}\left(4 \vee \frac{1}{w_{\min}}\right)$ 且 $n \geq 4$。则有

$$\|\mathbb{E}B-R\|_2 \leq \frac{2}{3}\xi np\gamma \quad and \quad \|\mathbb{E}B-R\|_{\infty\to 1} \leq \frac{2}{3}\xi n^2 p\gamma$$

最后，当 $V_1 = V_2$ 时，我们有 $\|\mathbb{E}B-R\|_{\infty\to 1} \leq n\|\mathbb{E}B-R\|_2 \leq pn\gamma/3$。

**定理 5.2**。**（具有独立元素的设计）**在定理 *2.5* 所述的初始设定中，假设$(A1)$、$(A2)$ 和$(25)$ 成立，且$\max_{j,k}\|z_{jk}\|_{\psi_2} := \|X_{jk}-\mathbb{E}X_{jk}\|_{\psi_2} \leq C_0$。那么，以至少 $1-2\exp(-c_7 n)$ 的概率，

$$\left\|YY^T-\mathbb{E}(YY^T)\right\|_2 \leq C_2C_0^2(\sqrt{pn}\vee n) + C_3C_0 n\sqrt{p\gamma} \leq \frac{1}{6}\xi np\gamma$$

**定理 5.3**。**（各向异性设计矩阵。）**设 $Y$ 如定义 *2.1* 所述。假设定理 *2.5* 和引理 *2.4* 中的所有条件均成立。假设$(18)$ 成立。那么，以至少$1-2\exp(-c_8 n)$的概率，

$$\left\|YY^T-\mathbb{E}(YY^T)\right\|_2 \leq \frac{1}{12}\xi np\gamma + C_4(C_0\max_i\|H_i\|_2)^2(\sqrt{pn}\vee n) \leq \frac{1}{6}\xi np\gamma.$$

其中 $C_0$ 与$(18)$ 和$(33)$中的相同。

我们在补充材料 H.2 节中证明引理 5.1，其中证明了平衡情形的界限稍微更紧；另见其中的引理 H.7。我们分别在补充材料 F.1 节和第 7 节中证明定理 5.2 和定理 5.3。可以认为，对于这两个定理，我们还得到 $\left\|YY^T-\mathbb{E}(YY^T)\right\|_{\infty\to 1}$ 与 $O(n)\|YY^T-\mathbb{E}(YY^T)\|_2$之间相差不超过一个因子。我们在补充材料 D 节中证明定理 3.5。

## 5.1 约化

在本节中，我们提出一个用于界定 $\left\|YY^T-\mathbb{E}YY^T\right\|_2$ 的统一框架。首先，

$$\begin{aligned} YY^T-\mathbb{E}(YY^T) &= YY^T-\mathbb{E}(Y)\mathbb{E}(Y)^T+\mathbb{E}(Y)\mathbb{E}(Y)^T-\mathbb{E}(YY^T) \\ &= \mathbb{E}(Y)(Y-\mathbb{E}(Y))^T+(Y-\mathbb{E}(Y))(\mathbb{E}(Y))^T+\widehat{\Sigma}_Y-\Sigma_Y \end{aligned} \tag{69}$$

其中 $\widehat{\Sigma}_Y = (Y - \mathbb{E}(Y))(Y - \mathbb{E}(Y))^T$ 和

$$\widehat{\Sigma}_Y - \Sigma_Y \quad = \quad (Y - \mathbb{E}(Y))(Y - \mathbb{E}(Y))^T + \mathbb{E}(Y)\mathbb{E}(Y)^T - \mathbb{E}(YY^T),$$

由协方差矩阵的这一众所周知的关系，我们得到

$$\Sigma_Y := \mathbb{E}\left((Y - \mathbb{E}(Y))(Y - \mathbb{E}(Y))^T\right) = \mathbb{E}(YY^T) - \mathbb{E}(Y)\mathbb{E}(Y)^T.$$

现在我们在引理 5.4 中陈述一个用于界定（69）中第一项的约化原理：为了控制

$$\|M_Y\| = \left\|\mathbb{E}(Y)(Y - \mathbb{E}(Y))^T + (Y - \mathbb{E}(Y))(\mathbb{E}(Y))^T\right\|,$$

我们需要界定每个零均值随机向量 $\mathbb{Z}_j, \forall j \in [n]$ 沿 $v := \mu^{(1)} - \mu^{(2)}$ 方向的投影。换言之，我们计算一维边缘分布时所选取的特定方向，就是 $\mu^{(1)}$ 与 $\mu^{(2)}$ 之间的方向。

**引理 5.4。（约化：确定性比较引理）**令 $\mathbb{Z}_j, j \in [n]$ 为 $X - \mathbb{E}X$ 中的行向量，且 $\widehat{\mu}_n$ 如 (8)中所定义。对于 $x_i \in \{-1, 1\}$,

$$\sum_{i=1}^{n} x_i \left\langle Y_i - \mathbb{E}Y_i, \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \right\rangle \quad \leq \quad \frac{2(n-1)}{n} \sum_{i=1}^{n} \left| \left\langle \mathbb{Z}_i, \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \right\rangle \right| \tag{70}$$

于是，对于 $M_Y := \mathbb{E}(Y)(Y - \mathbb{E}(Y))^T + (Y - \mathbb{E}(Y))(\mathbb{E}(Y))^T$,

$$\begin{aligned} \|M_Y\|_{\infty \to 1} \quad &\leq \quad 8w_1w_2(n-1) \sum_{i=1}^{n} \left| \left\langle \mathbb{Z}_i, \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \right\rangle \right| \quad and \\ \|M_Y\|_2 \quad &\leq \quad 4\sqrt{n}\sqrt{w_1w_2} \sup_{q \in S^{n-1}} \left| \sum_i q_i \left\langle \mathbb{Z}_i, \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \right\rangle \right| \end{aligned}$$

得到（20）后，引理 5.4 是确定性的，并不依赖于 $\mathbb{Z}$ 的协方差结构。另一方面，控制（69）中的第二项相当于在给定均值矩阵 $\mathbb{E}(Y)$ 的情况下进行协方差估计；引理 5.5 同样是确定性的，其中我们证明，对 $\widehat{\Sigma}_Y - \Sigma_Y$ 的算子范数（以及割范数）的控制可约化为对 $\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T - \mathbb{E}(\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T)$ 的相应范数进行控制。我们分别在补充材料 F.2 和 F.3 节中证明引理 5.4 和 5.5。

**引理 5.5。** 设 $Y$ 和 $Z$ 是定义 *2.1* 中定义的矩阵。以下结论成立：

$$\widehat{\Sigma}_Y - \Sigma_Y = (I - P_1)(\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T - \mathbb{E}(\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T))(I - P_1)$$

参见补充材料中的命题 *F.1*。然后 $\left\|\widehat{\Sigma}_Y - \Sigma_Y\right\|_2 \leq \left\|\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T - \mathbb{E}\left(\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T\right)\right\|_2$。

# 6 定理 5.2 的证明概要

本节给出定理 5.2 的证明概要。我们将在引理 6.1 和定理 6.3 中分别界定这两个分量 (69)。引理 6.1 可由引理 5.4 以及引理 6.2 中的次高斯测度集中界推出。定理 6.3 中我们只陈述算子范数界；需注意，同一矩阵的割范数与算子范数相差不超过 $O(n)$ 倍。定理 5.2 和定理 6.3 的证明分别放在补充材料 F.1 和 G.3 节。引理 6.1 和引理 6.2 的证明见补充材料 G 节。令 $c$、$c'$、$c_1$、$c_5$、$C_3$、$C_4$，.....为绝对常数。

**引理 6.1。（投影：概率视角）**假设定理 *5.2* 的条件成立。那么，以至少 $1-2\exp(-cn)$ 的概率，

$$\begin{aligned}\left\|\mathbb{E}(Y)(Y-\mathbb{E}(Y))^T+(Y-\mathbb{E}(Y))(\mathbb{E}(Y))^T\right\|_2 &\leq 2C_3C_0n\sqrt{p\gamma}\ and\\ \left\|\mathbb{E}(Y)(Y-\mathbb{E}(Y))^T+(Y-\mathbb{E}(Y))(\mathbb{E}(Y))^T\right\|_{\infty\to 1} &\leq C_4C_0n(n-1)\sqrt{p\gamma}\end{aligned}$$

引理 6.2 由次高斯尾界可得，因为 $\mathbb{Z}_j,\ \forall j\in[n]$ 的一维边缘分布是次高斯的，且其 $\psi_2$ 范数有界。记

$$\mu:=\frac{\mu^{(1)}-\mu^{(2)}}{\left\|\mu^{(1)}-\mu^{(2)}\right\|_2}=\frac{\mu^{(1)}-\mu^{(2)}}{\sqrt{p\gamma}}\in\mathbb{S}^{p-1} \tag{71}$$

**引理 6.2。（次高斯随机向量的投影）**在定理 *5.2* 的设定下，假设 *(A*

*1* $C_0=\ _{i\,j}\|z_{ij}\|_{\psi_2}$ $t>0$ $u=\ u_1\ \ldots\ u_n\ \in$*)* 成立且 max, 。那么对于任意 , $\{-1,1\}^n$
以及任意 (, , )

$$\mathbb{P}\left(\sum_{i=1}^n u_i\left\langle\mathbb{Z}_i,\mu\right\rangle\geq t\right) \leq 2\exp\left(-ct^2/(C_0^2n)\right); \tag{72}$$

$$and\ for\ any\ \ q\in\mathbb{S}^{n-1},\mathbb{P}\left(\sum_{i=1}^n\left\langle q_i\mathbb{Z}_i,\mu\right\rangle\geq t\right) \leq 2\exp\left(-c't^2/C_0^2\right) \tag{73}$$

**定理 6.3。**在定理 *5.2* 的设定下，以至少 $1-2\exp(-c_6n)$ 的概率，

$$\left\|\widehat{\Sigma}_Y-\mathbb{E}\widehat{\Sigma}_Y\right\|_2 = \left\|\mathbb{E}(\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T)-\mathbb{E}(\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T)\right\|_2\leq C_2C_0^2(\sqrt{pn}+n)\leq\frac{1}{12}\xi np\gamma.$$

# 7 定理 5.3 的证明提纲

本节给出定理 5.3 的证明提纲。首先，我们陈述引理 7.1，将引理 6.1 推广到各向异性情形。引理 6.2 的各向异性版本见补充引理 I.1。定理 7.2 中所考虑的模型可视为定理 7.3 的一个特例。定理 5.3 可由定理 7.2 和引理 7.1 立即推出，调整常数后，概率陈述仍然成立。所有证明均留待补充章节 I 给出。设 $c,\ c',\ C_2,\ C_3,\ C_4,$ .....为绝对常数。

**引理 7.1.（投影：概率视角）**设 $\mu$ 如 (71) 所示，且 $M_Y$ 如引理 *5.4* 所示。假设定理 *5.3* 中的所有条件均成立。则以至少 $1-2\exp(-c'n)$ 的概率，有

$$\begin{aligned}\|M_Y\|_{\infty\to 1} &\leq C_4(C_0\max_i\|R_i\mu\|_2)n(n-1)\sqrt{p\gamma}\leq\frac{1}{12}\xi n(n-1)p\gamma\\ \|M_Y\|_2 &\leq 2C_3(C_0\max_i\|R_i\mu\|_2)n\sqrt{p\gamma}\leq\frac{1}{12}\xi np\gamma\end{aligned}$$

**定理 7.2。** 在定理 *5.3* 的设定下，以至少 $1-2\exp(-c_6n)$ 的概率，

$$\left\|\widehat{\Sigma}_Y-\mathbb{E}\widehat{\Sigma}_Y\right\|_2 \leq \left\|\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T-\mathbb{E}\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T\right\|_2\leq C_2(C_0\max_i\|H_i\|_2)^2(\sqrt{np}\vee n). \tag{74}$$

**定理 7.3。（各向异性次高斯向量的 Hanson-Wright 不等式。）**令$H_1$，…，$H_n$为确定性的 $p \times m$ 矩阵，其中假设 $m \geq p$。令 $\mathbb{Z}_1^T$，…，$\mathbb{Z}_n^T \in \mathbb{R}^p$ 为 $\mathbb{Z}$的行向量。我们根据定义 *2.3* 生成 $\mathbb{Z}$ 。

于是，对于 $t > 0$，任意 $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$，我们有

$$\begin{aligned} &\mathbb{P}\left(\left|\sum_{i=1}^{n}\sum_{j\neq i}^{n} \langle\, \mathbb{Z}_i, \mathbb{Z}_j \,\rangle\, a_{ij}\right| > t\right) \\ &\quad\leq\ 2\exp\left(-c\min\left(\frac{t^2}{(C_0 \max_i \|H_i\|_2)^4 p\, \|A\|_F^2}, \frac{t}{(C_0 \max_i \|H_i\|_2)^2 \|A\|_2}\right)\right) \end{aligned} \tag{75}$$

其中，按照(33)的意义，$\max_i \|\mathbb{Z}_i\|_{\psi_2} \leq CC_0 \max_i \|H_i\|_2$。

**关于协方差估计的备注。** 从本质上说，(74) 与协方差估计的最优界相吻合；在这些界中，零均值随机矩阵由相互独立的列 $\mathbb{Z}^j$，$j = 1, \ldots, p$ 构成，这些列是 $\mathbb{R}^n$ 中的各向同性次高斯随机向量；或者，这些列可通过共同协方差矩阵变换为各向同性。举例而言，参见定理 4.6.1 和 4.7.1 [42]。(74) 与这些已知结果的区别在于：(a) 我们不假设各列相互独立；(b) 我们不要求各向异性行向量具有相同的协方差矩阵。更一般地，通过定义 2.3，我们允许（逐样本的）协方差矩阵 $\Sigma_X$：$= \mathbb{E}\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T = \text{diag}([\text{tr}(H_1 H_1^T), \ldots, \text{tr}(H_n H_n^T)])$；因此，我们估计的是一个具有 $p$ 相关特征的对角矩阵，并假设 $\mathbb{E}(X)$ 已知。我们在定理 7.2 中给出算子范数界，其中默认 (74) 在定义 2.3 和定理 7.3 所讨论的一般协方差模型下成立。我们在补充章节 I.4 中证明定理 7.3。该证明本身也具有独立研究价值。这种推广很有用，因为我们可以考虑更一般的 $k$ 分量混合分布问题，详见第 4 节。相关结果另见练习 6.2。7 [42]

# 8 实验

在本节中，我们通过模拟展示两个估计量的有效性及其收敛性质。我们采用与 [9] 中类似的设置。我们生成由两个总体混合而成的数据。数据矩阵 $X \in \{0,1\}^{n \times p}$ 由独立伯努利随机变量组成，其中均值参数 $\mathbb{E}(X_{ij}) := q^j_{\psi(i)}$ 对所有 $i \in [n]$ 和 $j \in [p]$均成立，其中 $\psi(i) \in \{1,2\}$ 将节点 $i$ 分配到组 $\mathcal{C}_1$ 或 $\mathcal{C}_2$，对每个 $i \in [n]$均如此。令 $|\mathcal{C}_1| = w_1 n$ 和 $|\mathcal{C}_2| = w_2 n$。我们针对平衡情形（$w_1 = w_2$）和不平衡情形进行了实验。各项的期望值选取如下：对于一半的 $p$ 特征，均值参数为 $q_1^j > q_2^j$；对于另一半，$q_1^j < q_2^j$ 使得 $\forall j$, $q_1^j, q_2^j \in \{\frac{1+\alpha}{2} + \frac{\epsilon}{2}, \frac{1-\alpha}{2} + \frac{\epsilon}{2}\}$。设 $\epsilon = 0.1\alpha$和 $\alpha = 0.04$。因此 $\gamma = \alpha^2 = 0.0016$, $\frac{1}{\gamma^2} = 390\ 625$ $\frac{1}{\gamma} = 625$ _ ___ _ **1** 11 ,, 并且 。我们按照（ ）中的描述实现半定规划**算法 :**，并依照推论 2.6 根据 $\hat{x}$的符号进行分类；此外，我们按照 [35]实现 Peng-Wei谱方法**算法2:** 。

**算法2：** **的谱方法** $k$**-均值聚类（Peng-Wei）** [35]**：输入：** 中心化数据矩阵 $Y \in \mathbb{R}^{n\times p}$, $k = 2$**输出：** 组分配向量 $P$**步骤1.** 使用奇异值分解得到 $YY^T$的主特征向量 $v_1$，并令 $v := v_1$；**步骤2.** 令 $S$ 为 $v$ 按降序排列后的值组成的向量。对于 $[n]$中的每个索引 $j$，计算两个均值 $\mathbf{c}_1$, $\mathbf{c}_2$, ，分别对应两个组，即 $\mathcal{C}_1 = S_L := \{S_1, \ldots, S_j\}$和 $\mathcal{C}_2 = S_R := \{S_{j+1}, \ldots, S_n\}$，它们分别位于该索引左侧（含该索引）和右侧；**步骤3.** 按照（54）计算每个组中各点到相应均值的欧几里得距离平方之和；令 $t$ 为使总距离最小的索引，其对应的值为 $S_t$；**步骤4.** 若 $v_i \geq S_t$，则设 $P_i = 1$；若 $v_i < S_t$，则设 $P_i = -1$。

**成功率和误分类率**。对于每个实验，我们进行 100 次试验；每次试验中，首先根据上述参数所描述的两个伯努利分布的混合分布生成一个数据矩阵 $X_{n\times p}$，然后将 $Y$ (7) 输入两个估计量进行分类。我们根据输出的分配向量 $P$ 衡量成功率和误分类率。成功率的计算方法是将正确分类的个体数除以样本量 $n$。因此，误分类率为 1− 成功率。每个数据点对应 100 次试验的平均值。图 1 展示了平衡情形下，随着 $n$ 增大，不同 $p$ 取值对应的平均成功率（基于 100 次试验）。

我们观察到，在 $np\gamma^2 > 1.5$ 时，对于每种 ($n$、 $p$) 设置，半定规划的平均成功率都更高，尽管算法2采用了穷举搜索；对于 $np\gamma^2 < 1.5$，两者的成功率则更为接近。我们还从图中看到，当 $p < 1/\gamma = 625$ 时，例如当 $p = 500$ 时，成功率会随 $n$ 的变化保持平稳。请注意，50% 的成功率相当于完全失败。相比之下，当 $n$ 小于 $1/\gamma$ 时，随着 $p$ 增大，我们总能以较高的成功率进行分类。一般来说，当 $p \geq 1/\gamma$ 时， $np\gamma^2 > 1$ 确实是获得高于 60% 成功率的必要条件。当 $n < 625$ 时， $np\gamma^2$ 起到信噪比的作用，因为 $np\gamma^2 < p\gamma$；这一点在我们的所有实验中始终成立。

**夹角和** $\ell_2$ **收敛性**。这里我们进一步观察 $\widehat{x}$ 和 $Z$的变化趋势：随着 $n$ 增加，半定规划（11）的解，以及 $v_1$（ $YY^T$的主特征向量）的变化趋势。在第二个实验中，我们设定 $p \in \{20000, 50000, 80000\}$，并增加 $n$。在图 2 的左列中，对于 $w_1 = 0.7$的不平衡情形，我们绘制了 $\theta_{\text{SDP}} := \angle(\widehat{x},\ \bar{x})$，即 $\widehat{x}$ 与其参考向量 $\bar{x}$ 之间的夹角，其中 $\bar{x}$ 的定义见定理 2.5和推论 2.6。

对于算法2， $\theta_1 := \angle(v_1,\ \bar{v}_1)$，即 $v_1$ 与其参考向量 $\bar{v}_1$之间的夹角，其中 $\bar{v}_1$ 的定义见定理 4.1。在此情形下，两个参考向量之间的夹角 $\angle(\bar{v}_1,\ \bar{x})$约为22度（蓝色水平虚线）。我们观察到，随着 $n$ 增加，对于两种算法，夹角 $\theta_{\text{SDP}}$ 和$\theta_1$ 均减小，但 $\theta_{\text{SDP}}$ 下降得快得多；当 $n > 200$ 且 $p = 80,000$时，它减小至0。我们还展示了两个主特征向量 $\widehat{x}$ 和 $v_1$之间的夹角 $\phi = \angle(\widehat{x},\ v_1)$，该夹角在所有 $n$范围内基本保持平坦。

在图 $\theta_1$ $\theta_{\text{SDP}}$ $\|Z^* -$ 的右侧列中，我们绘制了 $\widehat{Z}\|_2/n$ $\|Z^* - \widehat{Z}\|_F/n$ $Z^* = \bar{x}\bar{x}^T$ Algorithm 和 SDP 的 sin( )；对于 SDP，我们绘制了 sin( )、 和 ，其中 。可以看到，对于 Algorithm，随着 $n$ 增大，三个度量指标均随 $n$ 呈指数衰减而下降，这与定理 2.7 和推论 2.8 中的理论预测一致；每幅图中， $p, \gamma$ 均保持不变。对于 SDP，三条曲线之间的差距

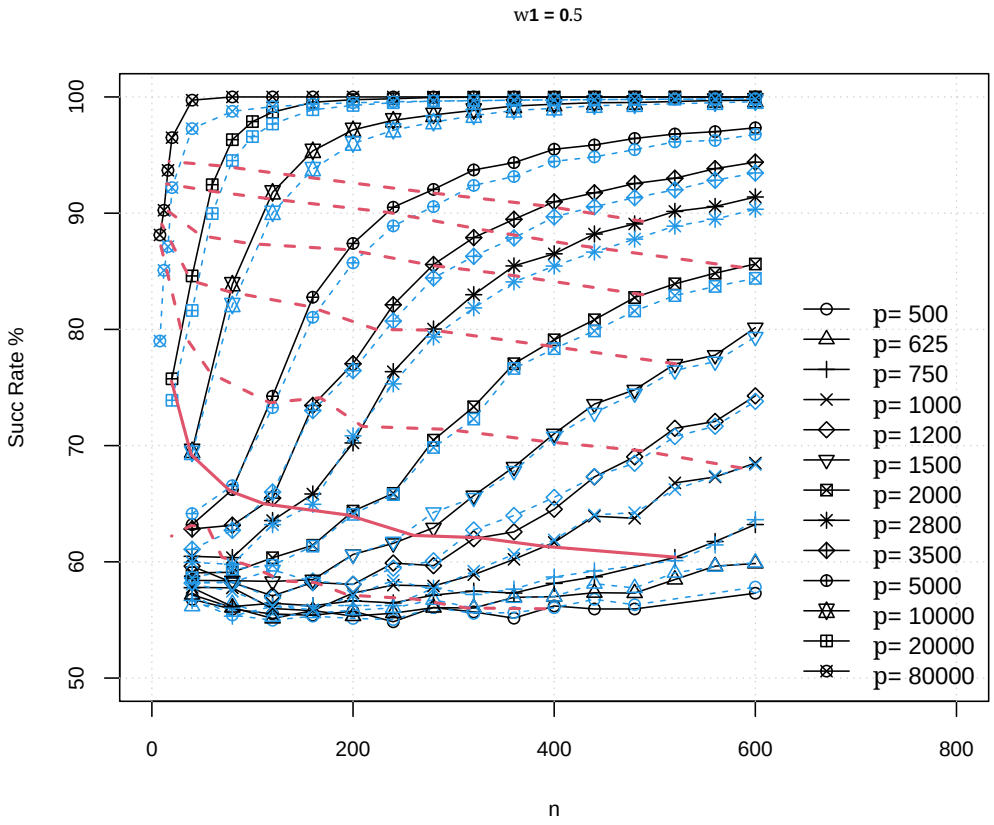



图1：平衡情形 $w_1 = 0.5$。我们绘制了维度 $p$ 从 500 到 80000 时，随着 $n$ 增大而变化的成功率。这里 $\gamma = 0.0016$ 且 $1/\gamma = 625$。对于标记相同的两条曲线，黑色实线表示半定规划解 $Z$（以及基于 $\widehat{x}$ 的划分），蓝色虚线表示算法2。红色曲线（无标记）展示了 $np\gamma^2$ 取值从 0。5 到 3。5（从下至上，步长为 0。5）时的成功率。红色实线对应 $np\gamma^2 = 1$。一般而言，当$p \geq 625 = 1/\gamma$ 时， $np\gamma^2 > 1$ 是成功率超过 60% 的必要条件。

随着 $p, n$ 增大而缩小。对于算法2，sin($\theta_1$)也会随着 $n$ 增大而下降，但速率为 $1/n$，较为缓慢，这同样符合定理 4.1 和推论 4.2 的预测。

## 9 结论

探究在样本量 $n$ 较小时，足以实现分类的 $n$ 与 $p$ 之间的权衡，既具有理论意义，也有实际价值。近期一系列研究针对次高斯混合模型，在低信噪比区域建立了半定规划的近似恢复保证；参见[16, 20] 等文献。本研究旨在进一步阐明这一问题的几何特征与概率特征，同时允许两个总体的簇大小和方差分布有所不同。尽管我们以总体聚类问题为例，但经适当调整后，第 7 节中的测度集中分析同样适用于一般情形 (6)。具体而言，我们研究半定规划松弛以及一种简单的谱算法，

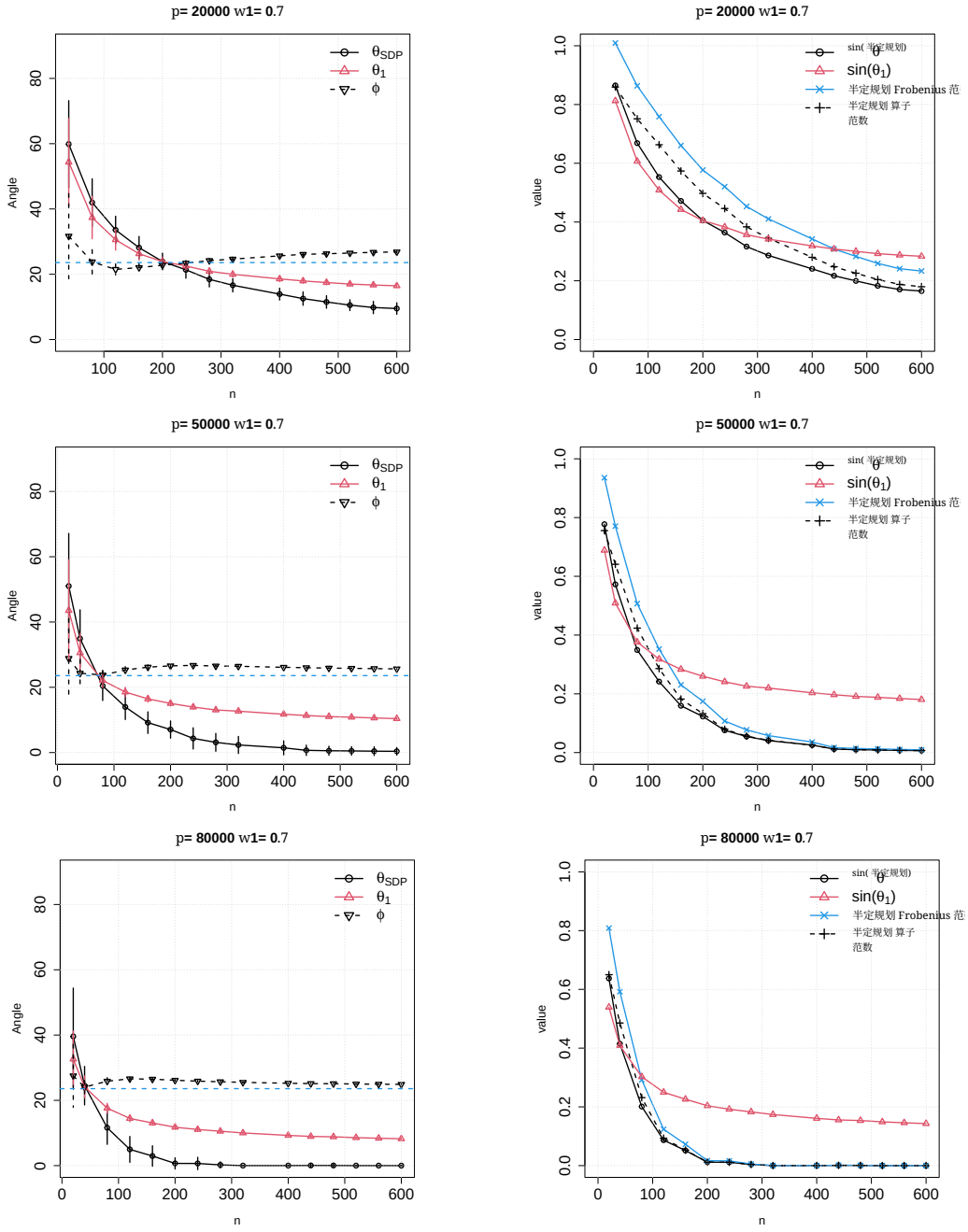



图2：不平衡情形 $w_1 = 0.7, p \in \{20000, 50000, 80000\}$。左列展示半定规划解 $\widehat{Z}$的主特征向量 $\hat{x}$ 与 $\bar{x}$之间的夹角 $\theta_{\mathrm{SDP}}$（以及半定规划解 $YY^T$的主特征向量 $v_1$与$\bar{v}_1$之间的夹角 $\theta_1$）。随着 $n$ 增大， $\theta_{\mathrm{SDP}}$ 比 $\theta_1$下降得更快，尤其是在 $p$取值较大时。水平虚线（实线）表示静态角度 $\angle(\bar{v}_1, \bar{x})$；其附近的虚线曲线对应随机$\phi = \angle(\hat{x}, v_1)$。每根竖线表示 100 次试验的一个标准差。右列绘制了半定规划的 $\widehat{\ }$ $\widehat{\ }\sin(\theta_{\mathrm{SDP}})$、 $\|Z^* - Z\|_F/n$、 $\|Z^* - Z\|_2/n$， 以及算法2的 $\sin(\theta_1)$。

这些方法在理论和实践层面都能高效求解，并对文献中最常研究的两种方法进行了统一分析。由此，我们获得了新的认识：主特征向量不仅包含聚类所需的充分信息，而且当信噪比有一个正常数下界时，也可以通过算法技术有效识别群体成员关系。


## 致谢

感谢 Alan Frieze 阅读本稿的初稿，也感谢 Mark Rudelson 提供许多有益的讨论。感谢家人一直以来的支持，尤其是在大流行病期间。


## A 组织结构

我们在 B 节证明推论 2.6 和 2.8。第 3 节中各引理的证明见 C 节。我们在 D 节证明定理 3.5。定理 4.1 的证明见 E 节。定理 5.2 的证明见 F.1 节。G 节包含关于随机矩阵 $YY^T - \mathbb{E}(YY^T)$ 的测度集中分析，并由此得到定理 5.2。在 H 节，我们证明引理 5.1 的相应结果。I 节包含关于各向异性随机向量的测度集中分析，并由此得到定理 5.3 的结论。在 I.4 节，我们证明定理 7.3，即适用于各向异性次高斯向量的 Hanson-Wright 不等式；这一结果也具有独立研究价值。

## B 推论 2.6 和 2.8 的证明

定理 B.1 是扰动理论中的一个著名结果。证明见 [9] 。另请参见定理 4.5。5 [42] 以及 [43]中的推论 3。

定理 *B.1*。（*Davis-Kahan*）设 $A$ 和 $M$ 是两个对称矩阵，且 $E = M - A$。令$\lambda_1$（$A$） $\geq \lambda_2$（$A$） $\geq \ldots \geq \lambda_n$（$A$）为 $A$的特征值，其标准正交特征向量为 $v_1$、$v_2$、.....、$v_n$；再令 $\lambda_1$（$M$） $\geq \lambda_2$（$M$） $\geq \ldots \geq \lambda_n$（$M$）为 $M$的特征值，且 $w_1$、$w_2$、.....、$w_n$为 $M$对应的标准正交特征向量，其中 $\theta_i = \angle$（$v_i$， $w_i$）。那么

$$\theta_i \sim \sin(\theta_i) \leq \frac{2\|E\|_2}{\mathit{gap}(i,A)} \quad \mathit{where} \ \ \mathit{gap}(i,A) = \min_{j \neq i} |\lambda_i(A) - \lambda_j(A)| \,. \tag{76}$$

证明 推论 2.6。第一个结论参见推论 1.2 [22] 的证明，它由 Davis-Kahan 定理得出，是误差界 (26) 的直接推论。注意， $\bar{x}\bar{x}^T$ 的最大特征值为 $n$，其余特征值均为 0，因此按照定理 B.1 的定义，谱间隙等于 $n$；更具体地，根据定理 2.5 和推论 3 [43],

$$\begin{aligned} \min_{\alpha=\pm 1} \left\|(\alpha\widehat{x} - \bar{x})/\sqrt{n}\right\|_2^2 &\leq \frac{2^3 \left\|\widehat{Z} - \bar{x}\bar{x}^T\right\|_2^2}{\mathsf{gap}(1, \bar{x}\bar{x}^T)^2} \leq 2^3 \left\|\widehat{Z} - \bar{x}\bar{x}^T\right\|_F^2 / n^2 \\ &\leq 2^3 4 K_G \xi / w_{\min}^2 \end{aligned}$$

□

证明 推论 2.8。 $\widehat{x}/\sqrt{n}$ 与 $\bar{x}/\sqrt{n}$ 之间的夹角可表示为

$$\cos(\theta_{\mathrm{SDP}}) = \cos(\angle(\widehat{x}, \bar{x})) \quad = \quad \langle \widehat{x}, \bar{x} \rangle / n \tag{77}$$

$\sin(\theta_{\mathrm{SDP}})$ 的上界由定理 2.7 和 B.1 得出；此外，根据 Davis-Kahan 定理，参见推论 3 [43], ，我们以至少 $1 - 2\exp(-cn)$ 的概率有 $-2/n^2$,

$$\begin{aligned} \min_{\alpha=\pm 1} \left\| (\alpha\widehat{x} - \bar{x})/\sqrt{n} \right\|_2 &\leq \frac{2^{3/2} \left\| \widehat{Z} - \bar{x}\bar{x}^T \right\|_2}{\mathsf{gap}(1, \bar{x}\bar{x}^T)} \leq 2^{3/2} \left\| \widehat{Z} - \bar{x}\bar{x}^T \right\|_F / n \\ &\leq 2^{3/2} (2 \left\| \widehat{Z} - \bar{x}\bar{x}^T \right\|_1)^{1/2} / n \leq 4 \exp(-c_0 s^2 w_{\min}^4 / 2) \end{aligned}$$

其中，调整常数后，最后一个不等式成立。因此该推论得证。□

# C 第 3 节结果的证明

结合 (43)、(41) 和 (42)，得到以下事实 C.1。

**事实 C.1**。 （*Grothendieck* 不等式，半正定）每个矩阵 $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 都满足

$$\max_{Z \in \mathcal{M}_G^+} |\langle B, Z \rangle| \leq K_G \|B\|_{\infty \to 1}.$$

## C.1 引理 3.3 的证明

根据定义，(45) 中的上界显然成立： $Z^*, Z \in \mathcal{M}_{\mathrm{opt}}$ 并且用到了以下事实： $Z^* := \arg\max_{Z \in \mathcal{M}_{\mathrm{opt}}} \langle R, Z \rangle$; 下界则依赖于事实 (C.1)，该事实意味着

$$\forall Z \in \mathcal{M}_{\mathrm{opt}}, \quad |\langle B - R, Z \rangle| \leq K_G \|B - R\|_{\infty \to 1} =: \varepsilon \tag{78}$$

现在证明 (45) 中的下界。首先利用 (78) 将 $R$ 替换为 $B$ ,

$$\begin{aligned} \langle R, \widehat{Z} \rangle &\geq \langle B, \widehat{Z} \rangle - \varepsilon \\ &\geq \langle B, Z^* \rangle - \varepsilon \geq \langle R, Z^* \rangle - 2\varepsilon \end{aligned}$$

其中，第二个不等式用到了以下事实： $Z := \arg\max_{Z \in \mathcal{M}_{\mathrm{opt}}} \langle B, Z \rangle$ , 并且 $Z, Z^* \in \mathcal{M}_{\mathrm{opt}}$ 根据定义 (44) 成立；最后一个不等式由 (78) 得出，因为 $Z^* \in \mathcal{M}_{\mathrm{opt}}$ ，因此

$$|\langle B - R, Z^* \rangle| \quad \leq \quad K_G \|B - R\|_{\infty \to 1} \tag{79}$$

因此 (46) 成立。最后证明 (47)。根据 (78)、(79) 和三角不等式，对于所有 $Z \in \mathcal{M}_{\mathrm{opt}}$，我们有:

$$|\langle B - R, Z - Z^* \rangle| \quad \leq \quad 2K_G \|B - R\|_{\infty \to 1}$$

由此可得（47）。 □

## C.2 命题 3.4 的证明

回顾

$$\mathcal{M}_{\rm opt} \;:=\; \{Z : Z \succeq 0, \mathrm{diag}(Z) = I_n\} \subset \mathcal{M}_G^+ \subset [-1,1]^{n\times n};$$

注意，对于 (9) 中的第二项，在目标函数 (11) 中，我们有 $\langle (E_n - I_n)\ Z\rangle = \langle (E_n - I_n),\ \mathrm{offd}(Z)\rangle$，它不依赖于 $\mathrm{diag}(Z)$；因此，为了最大化

$$\begin{aligned}\langle A, Z\rangle &= \langle A, \mathrm{offd}(Z)\rangle + \langle A, \mathrm{diag}(Z)\rangle \\ &= \langle \mathrm{offd}(A), \mathrm{offd}(Z)\rangle + \langle \mathrm{diag}(YY^T), \mathrm{diag}(Z)\rangle,\end{aligned}$$

必须令对角项 $Z_{jj} \in [0,1]$ 为 1，因为 $\mathrm{diag}(YY^T) \geq 0$。此外，增大 $\mathrm{diag}(Z)$ 只会使满足 $Z \succeq 0$ 更容易，从而最大化 $\langle \mathrm{offd}(A),\ \mathrm{offd}(Z)\rangle$。因此，(12) 中的最优解集合 $\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$ 必须满足 $\mathrm{diag}(Z) = I_n$。由上述定义可知，(50) 成立。此外，由于对于可行集$\mathcal{M}_{\rm opt}$中的所有 $Z$，$\langle I_n, Z\rangle = \mathrm{tr}(Z) = n$，故 (51) 成立。□

## C.3 引理 3.6 的证明

可以验证，在包含可行集 $\mathcal{M}_{\rm opt}$ 的较大集合 $[-1,1]^{n\times n}$ 上，$\langle R, Z\rangle$ 的最大化解为 $Z^*$。显然，$\mathrm{diag}(Z^*) = I_n$。由于 $Z^* = \bar{x}\bar{x}^T \succeq 0$ 属于较小集合 $\mathcal{M}_{\rm opt} \subset M_G^+$，它也必定是 $\langle R, Z\rangle$ 在该集合上的最大化解。□

## C.4 引理 3.7 的证明

我们将证明 (53) 对所有 $Z \in [-1,1]^n \supset \mathcal{M}_{\rm opt}$ 都成立。回顾一下，我们有

$$\begin{aligned}R = \mathbb{E}(Y)\mathbb{E}(Y)^T \;&=:\; \left\|\mu^{(1)} - \mu^{(2)}\right\|_2^2 \begin{bmatrix} w_2^2\mathbf{1}_{n_1}\otimes\mathbf{1}_{n_1} & -w_1w_2\mathbf{1}_{n_1}\otimes\mathbf{1}_{n_2} \\ -w_1w_2\mathbf{1}_{n_2}\otimes\mathbf{1}_{N_1} & w_1^2\mathbf{1}_{n_2}\otimes\mathbf{1}_{n_2}\end{bmatrix} \\ &= p\gamma\begin{bmatrix} w_2^2E_{n_1} & -w_1w_2E_{n_1\times n_2} \\ -w_1w_2E_{n_2\times n_1} & w_1^2E_{n_2}\end{bmatrix} =: p\gamma\begin{bmatrix}\mathbb{A} & \mathbb{B} \\ \mathbb{B}^T & \mathbb{C}\end{bmatrix}\end{aligned}$$

现在，$Z^*$，$Z$ 的所有元素都属于 $[-1,1]$。显然，对于左上和右下对角块，记为 $\mathbb{D} = \{\mathbb{A}, \mathbb{C}\}$，我们有 $Z^* - Z \geq 0$，因为 $Z^*$ 在这些块上的所有元素都是 1。同样，对于非对角块 $\{\mathbb{B}, \mathbb{B}^T\}$，我们有 $Z - Z^* \geq 0$，因为 $Z^*$ 在这些块上的所有元素都是 $-1$。因此我们有

$$\begin{aligned}\frac{1}{p\gamma}\langle R, Z^* - Z\rangle \;&=\; \sum_{(i,j)\in\mathbb{A}} w_2^2(Z^* - Z)_{ij} + \sum_{(i,j)\in\mathbb{C}} w_1^2(Z^* - Z)_{ij} - \sum_{(i,j)\in\mathbb{B},\mathbb{B}^T} w_1w_2(Z^* - Z)_{ij} \\ &\geq\; (w_2^2 \wedge w_1^2 \wedge w_1w_2)\Big(\sum_{(i,j)\in\mathbb{D}}(Z^* - Z) + \sum_{(i,j)\in\{\mathbb{B},\mathbb{B}^T\}}(Z - Z^*)_{ij}\Big) \\ &\geq\; \min_{j=1,2} w_j^2 \left\|Z - Z^*\right\|_1\end{aligned}$$

其中我们利用了这一事实:

$$\sum_{(i,j)\in\mathbb{D}}(Z^* - Z)_{ij} + \sum_{(i,j)\in\{\mathbb{B},\mathbb{B}^T\}}(Z - Z^*)_{ij} \;=\; \left\|Z - Z^*\right\|_1$$

由此，引理得证。□

## D 定理 3.5 的证明

我们首先陈述引理 D.1。

**引理 D.1.** (确定性界) 令 $\lambda$ 和 $\tau$ 如定义 *2.1* 中所述，使用矩阵 $Y$ 按 (10) 定义。根据 $\tau$ 和 $\lambda$ 的定义，我们有

$$(n-1)\,|\lambda - \mathbb{E}\lambda| \;\; = \;\; |\tau - \mathbb{E}\tau| \leq \left\|YY^T - \mathbb{E}(YY^T)\right\|_2 \tag{80}$$

证明。 现在，(80) 成立，因为 $2\binom{n}{2}|\lambda - \mathbb{E}\lambda| = |n(\tau - \mathbb{E}\tau)| \leq n\left\|YY^T - \mathbb{E}(YY^T)\right\|_2$，其中

$$\begin{aligned}\left|\sum_{i=1}^{n}(\,\langle\, Y_i, Y_i\,\rangle\, - \mathbb{E}\,\langle\, Y_i, Y_i\,\rangle\,)\right| &=: n\,|(\tau - \mathbb{E}\tau)| \\ \leq \;\; n\max_i |\,\langle\, Y_i, Y_i\,\rangle\, - \mathbb{E}\,\langle\, Y_i, Y_i\,\rangle\,| &\leq n\left\|YY^T - \mathbb{E}(YY^T)\right\|_2\end{aligned}$$

□

证明 定理 3.5。根据定理 5.2（分别为定理 5.3），以至少$1 - 2\exp(-cn)$的概率，我们有

$$\begin{aligned}\|B - \mathbb{E}B\|_{\infty\to 1} &\leq \left\|YY^T - \mathbb{E}(YY^T)\right\|_{\infty\to 1} + |\lambda - \mathbb{E}\lambda|\,\|E_n - I_n\|_{\infty\to 1} \\ &\leq \left\|YY^T - \mathbb{E}(YY^T)\right\|_{\infty\to 1} + n\left\|YY^T - \mathbb{E}(YY^T)\right\|_2 \leq \frac{1}{3}\xi n^2 p\gamma\end{aligned}$$

其中我们利用了 $\|E_n - I_n\|_{\infty\to 1} = n(n-1)$ 这一事实，并由引理 D.1 得到，

$$(n-1)\,|\lambda - \mathbb{E}\lambda| = |\tau - \mathbb{E}\tau| = \frac{1}{n}\left|\mathrm{tr}(YY^T - \mathbb{E}(YY^T))\right| \leq \left\|YY^T - \mathbb{E}(YY^T)\right\|_2$$

现在 $\|E_n - I_n\|_2 \leq \|E_n - I_n\|_\infty = (n-1)$；因此，同理可得，

$$\begin{aligned}\|B - \mathbb{E}B\|_2 &\leq \left\|YY^T - \mathbb{E}(YY^T)\right\|_2 + |\lambda - \mathbb{E}\lambda|\,\|E_n - I_n\|_2 \\ &\leq \;\; 2\left\|YY^T - \mathbb{E}(YY^T)\right\|_2 \leq \frac{1}{3}\xi np\gamma\end{aligned}$$

根据引理 5.1，由三角不等式可得定理 3.5 成立；参见 (67) 和 (68)。另请参见引理 H.7。□

## E 定理 4.1 的证明

众所周知，对于任意实对称矩阵，都存在一组 $n$ 标准正交特征向量。首先陈述事实 E.1。事实 E.1 也并不令人意外，因为所有非对角元素之和为$A$ 0。

**事实 E.1**。 假设我们观察到格拉姆矩阵 $\widehat{S}_n := XX^T$ 的一个实例。那么

$$YY^T \;\; = \;\; (I - P_1)XX^T(I - P_1) \tag{81}$$

其中

$$\langle\, YY^T, E_n\,\rangle = \mathbf{1}_n^T YY^T \mathbf{1}_n = 0.$$

此外，根据构造，对于（9）中定义的 $A$ ，我们有，

$$\langle A, E_n \rangle \quad = \quad \mathbf{1}_n^T Y Y^T \mathbf{1}_n - \lambda \langle (E_n - I_n), E_n \rangle = -\lambda n(n-1) = \mathrm{tr}(YY^T)$$

其中

$$\lambda \quad = \quad \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i \neq j} \langle Y_i, Y_j \rangle = -\frac{1}{n(n-1)} \mathrm{tr}(YY^T) = -\frac{\tau}{n-1}$$

换言之，我们有 $\langle A, P_1 \rangle = \langle A, \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^T / n \rangle = \mathrm{tr}(YY^T)/n =: \tau$

回顾一下， $R$ 是秩一矩阵，且 $\lambda_{\max}(R) = \mathrm{tr}(R) = w_1 w_2 np\gamma$ ，而 $\bar{x} R \bar{x}/n = (4w_1 w_2) w_1 w_2 np\gamma \leq \frac{1}{4} np\gamma$。因此，当 $w_1 = w_2 = 1/2$ 时， $\bar{x}/\sqrt{n}$ 与 $\bar{v}_1$ 重合。于是，对于定理 B.1 中定义的 $\mathsf{gap}(1, R)$,

$$\mathsf{gap}(1, R) = \lambda_{\max}(R) = w_1 w_2 np\gamma.$$

我们来验证以下断言： $B$ 的主特征向量与事实 E.2 中 $YY^T$ 的主特征向量重合。显然,

$$\cos(\theta_1) = \cos(\angle(v_1, \bar{v}_1)) \quad = \quad \langle v_1, \bar{v}_1 \rangle \tag{82}$$

从而

$$\theta_1 = \arccos(\langle v_1, \bar{v}_1 \rangle).$$

因此，我们可以使用 $YY^T$ 的第一特征向量对 $\mathbb{R}^p$中的两组点进行划分。为了得到 $\sin(\theta_1)$ 的上界，我们应用 Davis-Kahan 扰动界如下。由于$v_1$， $\bar{v}_1$ 分别是 $B$ 和 $R$ 的主特征向量，根据定理 3.5 和 B.1, (63) 成立:

$$\sin(\theta_1) \quad := \quad \sin(\angle(v_1, \bar{v}_1)) \leq \frac{2 \|B - R\|_2}{\lambda_{\max}(R)} = \frac{2 \|B - R\|_2}{w_1 w_2 np\gamma} \leq \frac{2\xi}{w_1 w_2}.$$

此外，由于.....，根据推论 3 [43]，式 (64) 成立:

$$\begin{aligned} \min_{\alpha = \pm 1} \|\alpha v_1 - \bar{v}_1\|_2^2 \quad &\leq \quad \left( \frac{2^{3/2} \|B - R\|_2}{w_1 w_2 np\gamma} \right)^2 \\ &\leq \quad \frac{2^3 \xi^2}{(w_1 w_2)^2} =: \delta', \text{ where } \delta' = 8\xi^2/(w_1^2 w_2^2) \leq c_2 \xi^2 / w_{\min}^2; \end{aligned}$$

因此，定理得证。 □

接下来陈述事实 E.2。

**事实 E.2.** 令 $YY^T = \sum_{j=1}^{n-1} \lambda_j v_j v_j^T$。记为 $\widetilde{A} = YY^T - \lambda E_n$，则

$$\widetilde{A} \quad := \quad YY^T - \lambda E_n = \sum_{j=1}^{n-1} \lambda_j v_j v_j^T + \frac{n\tau}{n-1} \mathbf{1}\mathbf{1}^T / n \succeq 0; \tag{83}$$

$\widetilde{A}$（分别地，$A$ 和 $B$）的主特征向量将与 $YY^T$ 的主特征向量重合，且

$$\lambda_{\max}(\widetilde{A}) \;=\; \lambda_{\max}(YY^T) \geq n\tau/(n-1) \tag{84}$$

当且仅当 $YY^T$ 的特征值并非全部相同时，严格不等式成立。因此，只要 $YY^T$ 的特征值并非全部相同，对称矩阵 $A = A + \lambda I_n$ 和 $B = A + \mathbb{E}\tau I_n$ 也与 $YY^T$ 共享同一个主特征向量 $v_1$，其中 $\lambda_{\max}(A) \geq \tau$。

证明。显然，涉及 $E_n$ 和 $I_n$ 的附加项要么与 $YY^T$ 的特征向量 $v_1, \ldots, v_{n-1}$ 正交，要么在由 $\{v_1, \ldots, v_{n-1}\}$ 张成的子空间上充当恒等映射。现在，由于对所有 $j$ 都有 $\langle v_j, \mathbf{1}_n \rangle = 0$，因此 (83) 成立，且 $\{v_1, \ldots, v_{n-1}, \mathbf{1}_n/\sqrt{n}\}$ 构成 $A$（分别为 $A$ 和 $B$）的一组正交归一特征向量；此外，根据事实 E.1，

$$-\lambda E_n \;=\; \frac{n\tau}{n-1}P_1 = \frac{n\tau}{n-1}\mathbf{1}_n\mathbf{1}_n^T/n, \quad \text{where} \quad \lambda = -\frac{\tau}{n-1},$$

由于非零特征值至多有 $n-1$ 个，且它们的和为 $\mathrm{tr}(YY^T)$，因此

$$\lambda_{\max}(YY^T) \;\geq\; \mathrm{tr}(YY^T)/(n-1) = n\tau/(n-1)$$

当这些特征值并非全都相同时，严格不等式成立。

最后，由于根据特征分解 (83) 和紧邻上方显示的等式，$\lambda_1(\widetilde{A}) := \lambda_{\max}(YY^T)$，因此 (84) 成立。现在，对于 $A = YY^T - \lambda(E_n - I_n)$，我们有 $\mathrm{tr}(A) = \mathrm{tr}(YY^T)$，从而 $\lambda_{\max}(A) \geq \tau$。此外，$A$（分别为 $B$）中的额外项 $\propto I_n$ 不会改变相对于针对 $A$ 所确定的特征值序列顺序$^\sim$，其中 $B$（分别为 $A$）；因此，所有对称矩阵 $B$、$\widetilde{A}$ 和 $A$ 都与 $YY^T$ 共享相同的主特征向量 $v_1$。□

# F 第 5 节结果的证明

无论权重或混合成分的数量如何，命题 F.1 均成立。

**命题 F.1。（协方差投影：一般混合模型）**设 $Y = X - P_1X$ 如定义 *2.1* 所述。设 $\mathbb{Z} = X - \mathbb{E}X$。我们首先将 $\widehat{\Sigma}_Y = (Y - \mathbb{E}(Y))(Y - \mathbb{E}(Y))^T$ 重写如下：

$$\widehat{\Sigma}_Y \;:=\; (I - P_1)\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T(I - P_1) = M_1 - (M_2 - M_3), \tag{85}$$

$$\textit{where}\;\; M_1 \;:=\; \widehat{\Sigma}_X = (X - \mathbb{E}(X))(X - \mathbb{E}(X))^T = \mathbb{Z}\mathbb{Z}^T, \quad \textit{and}\;\; P_1 = \frac{1}{n}\mathbf{1}_n\mathbf{1}_n^T \tag{86}$$

$$M_2 \;=\; \mathbb{Z}\mathbb{Z}^TP_1 + P_1\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T, \;\textit{and}\; M_3 = P_1\mathbb{Z}\mathbb{Z}^TP_1, \tag{87}$$

$$\textit{and}\;\; \Sigma_Y \;:=\; \mathbb{E}\widehat{\Sigma}_Y := (I - P_1)\mathbb{E}(\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T)(I - P_1) \tag{88}$$

那么我们有 (69)，因为

$$YY^T - \mathbb{E}(Y)\mathbb{E}(Y)^T \;=\; \widehat{\Sigma}_Y + \mathbb{E}(Y)(Y - \mathbb{E}(Y))^T + (Y - \mathbb{E}(Y))(\mathbb{E}(Y))^T.$$

证明。 回顾 $\mathbf{1}(X) = \frac{1}{n}\mathbf{1}_n\mathbf{1}_n^T X =: P_1 X$；于是

$$\begin{aligned}
\widehat{\Sigma}_Y := (Y-\mathbb{E}Y)(Y-\mathbb{E}Y)^T &= (X-\mathbb{E}(X)-(\mathbf{1}(X)-\mathbb{E}\mathbf{1}(X)))(X-\mathbb{E}(X)-(\mathbf{1}(X)-\mathbb{E}\mathbf{1}(X)))^T \\
&= (X-P_1X-(\mathbb{E}(X)-P_1\mathbb{E}X))(X-P_1X-(\mathbb{E}(X)-P_1\mathbb{E}X))^T \\
&= \big((I-P_1)(X-\mathbb{E}(X))\big)\big((I-P_1)(X-\mathbb{E}(X))\big)^T \qquad (89)\\
&= (I-P_1)(X-\mathbb{E}(X))(X-\mathbb{E}(X))^T(I-P_1) \\
&= (I-P_1)\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T(I-P_1)
\end{aligned}$$

其余部分显而易见。□

## F.1 定理 5.2 的证明

我们对 $M_Y := \mathbb{E}(Y)(Y-\mathbb{E}(Y))^T + (Y-\mathbb{E}(Y))(\mathbb{E}(Y))^T$ 使用简写符号。因此，根据三角不等式、(69)、(69)（命题 F.1）、引理 6.1 和定理 6.3，以至少 $1-2\exp(-c_6 n) - 2\exp(-cn)$ 的概率，

$$\begin{aligned}
\left\|YY^T-\mathbb{E}(YY^T)\right\|_2 &\le \left\|\widehat{\Sigma}_Y-\Sigma_Y\right\|_2 + \|M_Y\|_2 \le \left\|\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T-\mathbb{E}(\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T)\right\|_2 + \|M_Y\|_2 \\
&\le C_2C_0^2(\sqrt{pn}\vee n) + 2C_3C_0 n\sqrt{p\gamma} \le \frac{1}{6}\xi np\gamma \\
\left\|YY^T-\mathbb{E}(YY^T)\right\|_{\infty\to 1} &\le n\left\|YY^T-\mathbb{E}(YY^T)\right\|_2 \le \frac{1}{6}\xi n^2 p\gamma
\end{aligned}$$

其中，最后一个不等式由 (25) 得出，同时对常数进行了调整。□

## F.2 引理 5.4 的证明

首先，我们验证 (20)：

$$\begin{aligned}
\forall i\in\mathcal{C}_1 \quad \mathbb{E}Y_i &= \mathbb{E}X_i - (w_1\mu^{(1)}+w_2\mu^{(2)}) = \mu^{(1)}(1-w_1)-w_2\mu^{(2)} \\
&= w_2(\mu^{(1)}-\mu^{(2)}) \qquad (90)\\
\forall i\in\mathcal{C}_2 \quad \mathbb{E}Y_i &= \mathbb{E}X_i - (w_1\mu^{(1)}+w_2\mu^{(2)}) = \mu^{(2)}(1-w_2)-w_1\mu^{(1)} \\
&= w_1(\mu^{(2)}-\mu^{(1)}) \qquad (91)
\end{aligned}$$

**引理 F.2**。 假设引理 *5.4* 中的所有条件均成立。那么

$$\sup_{q\in\mathbb{S}^{n-1}}\sum_{i=1}^n q_i\left\langle Y_i-\mathbb{E}(Y_i), \mu^{(1)}-\mu^{(2)}\right\rangle \le 2\sup_{q\in\mathbb{S}^{n-1}}\sum_{i=1}^n q_i\left\langle \mathbb{Z}_i, \mu^{(1)}-\mu^{(2)}\right\rangle. \qquad (92)$$

证明。

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^n q_i\left\langle Y_i-\mathbb{E}(Y_i), \mu^{(1)}-\mu^{(2)}\right\rangle &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n q_i\left\langle \sum_{j\neq i}(\mathbb{Z}_i-\mathbb{Z}_j), \mu^{(1)}-\mu^{(2)}\right\rangle \\
&= \frac{n-1}{n}\left(\sum_{i=1}^n q_i\left\langle \mathbb{Z}_i, \mu^{(1)}-\mu^{(2)}\right\rangle\right) + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n q_i\left\langle \mathbb{Z}_i - \sum_{j=1}^n \mathbb{Z}_j, \mu^{(1)}-\mu^{(2)}\right\rangle \\
&= \sum_{i=1}^n q_i\left\langle \mathbb{Z}_i, \mu^{(1)}-\mu^{(2)}\right\rangle - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n q_i\sum_{j=1}^n\left\langle \mathbb{Z}_j, \mu^{(1)}-\mu^{(2)}\right\rangle
\end{aligned}$$

其中

$$\left|\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} q_i \sum_{j=1}^{n} \langle\, \mathbb{Z}_j, \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \,\rangle \right| \leq \sup_{q\in\mathbb{S}^{n-1}} \frac{1}{n} \|q\|_1 \left| \sum_{j=1}^{n} \langle\, \mathbb{Z}_j, \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \,\rangle \right|$$

$$\leq \left| \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{n}} \langle\, \mathbb{Z}_j, \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \,\rangle \right| \leq \sup_{q\in\mathbb{S}^{n-1}} \sum_{i=1}^{n} q_i \langle\, \mathbb{Z}_i, \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \,\rangle$$

因此，式（92）成立，引理得证。□

证明 引理 5.4。由于对称性，我们只需计算

$$\left\|(Y - \mathbb{E}(Y))\mathbb{E}(Y)^T\right\| = \left\|(\mathbb{Z} - (\mathbf{1}(X) - \mathbb{E}\mathbf{1}(X)))(\mathbb{E}(X) - \mathbb{E}\mathbf{1}(X))^T\right\|$$

首先，我们证明式（70）成立。现在

$$Y_i - \mathbb{E}Y_i = (X_i - \mathbb{E}X_i) - ((\widehat{\mu}_n - \mathbb{E}\widehat{\mu}_n) = \mathbb{Z}_i - \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \mathbb{E}X_i)\right)$$

$$= \frac{n-1}{n}\mathbb{Z}_i - \frac{1}{n}\sum_{j\neq i}^{n}\mathbb{Z}_j = \frac{1}{n}\sum_{j\neq i}^{n}(\mathbb{Z}_i - \mathbb{Z}_j)$$

并且对于 $x_i \in \{-1, 1\}$,

$$\sum_{i=1}^{n} x_i \langle\, Y_i - \mathbb{E}Y_i, \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \,\rangle = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{j\neq i}^{n} \langle\, (\mathbb{Z}_i - \mathbb{Z}_j), \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \,\rangle$$

$$\leq \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j\neq i}^{n} \left| \langle\, (\mathbb{Z}_i - \mathbb{Z}_j), \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \,\rangle \right| \leq \frac{2(n-1)}{n} \sum_{i=1}^{n} \left| \langle\, \mathbb{Z}_i, \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \,\rangle \right|$$

根据割范数的定义、(90)、(91) 和 (70)，我们得到,

$$\left\|(Y - \mathbb{E}(Y))\mathbb{E}(Y)^T\right\|_{\infty\to 1} = \sup_{x,y\in\{-1,1\}^n} \sum_{i=1}^{n} x_i \cdot$$

$$\left( \sum_{j\in\mathcal{C}_1} y_j \langle\, Y_i - \mathbb{E}(Y_i), w_2(\mu^{(1)} - \mu^{(2)}) \,\rangle + \sum_{j\in\mathcal{C}_2} y_j \langle\, Y_i - \mathbb{E}(Y_i), w_1(\mu^{(2)} - \mu^{(1)}) \,\rangle \right)$$

$$\leq \sup_{x,y\in\{-1,1\}^n} \sum_{i=1}^{n} x_i \left( \langle\, Y_i - \mathbb{E}(Y_i), \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \,\rangle \, (\sum_{j\in\mathcal{C}_1} w_2 y_j - \sum_{j\in\mathcal{C}_2} w_1 y_j) \right)$$

$$\leq (w_2 |\mathcal{C}_1| + w_1 |\mathcal{C}_2|) \sum_{i=1}^{n} \left| \langle\, Y_i - \mathbb{E}(Y_i), \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \,\rangle \right|$$

$$= 2w_2 w_1 n \max_{x\in\{-1,1\}^n} \sum_{i=1}^{n} x_i \langle\, Y_i - \mathbb{E}(Y_i), \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \,\rangle$$

$$\leq 4w_1 w_2 (n-1) \sum_{i=1}^{n} \left| \langle\, \mathbb{Z}_i, \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \,\rangle \right|$$

类似地，根据 (90) 和 (91)，我们得到，

$$\begin{aligned}
\left\|(Y-\mathbb{E}(Y))\mathbb{E}(Y)^T\right\|_2 = & \sup_{q,h\in\mathbb{S}^{n-1}} \sum_{i=1}^n q_i \cdot \\
& \left(\sum_{j\in\mathcal{C}_1} h_j \left\langle Y_i-\mathbb{E}(Y_i), w_2(\mu^{(1)}-\mu^{(2)})\right\rangle + \sum_{j\in\mathcal{C}_2} h_j \left\langle Y_i-\mathbb{E}(Y_i), w_1(\mu^{(2)}-\mu^{(1)})\right\rangle\right) \\
\leq & \sup_{q,h\in\mathbb{S}^{n-1}} \left(\sum_{i=1}^n q_i \left\langle Y_i-\mathbb{E}(Y_i), \mu^{(1)}-\mu^{(2)}\right\rangle \left(\sum_{j\in\mathcal{C}_1} w_2 h_j - \sum_{j\in\mathcal{C}_2} w_1 h_j\right)\right) =: Q
\end{aligned} \tag{93}$$

由（93）和（92），以及 $w_1 w_2 \leq 1/4$,

$$\begin{aligned}
Q &\leq \sup_{q\in\mathbb{S}^{n-1}} \left|\sum_{i=1}^n q_i \left\langle Y_i-\mathbb{E}(Y_i), \mu^{(1)}-\mu^{(2)}\right\rangle\right| \cdot \sup_{h\in\mathbb{S}^{n-1}} \left|\sum_{j\in\mathcal{C}_1} w_2 h_j - \sum_{j\in\mathcal{C}_2} w_1 h_j\right| \\
&\leq 2 \sup_{q\in\mathbb{S}^{n-1}} \left|\sum_{i=1}^n q_i \left\langle \mathbb{Z}_i, \mu^{(1)}-\mu^{(2)}\right\rangle\right| \cdot \sqrt{n w_1 w_2} \leq \sqrt{n} \sup_{q\in\mathbb{S}^{n-1}} \left|\left\langle \sum_i q_i \mathbb{Z}_i, \mu^{(1)}-\mu^{(2)}\right\rangle\right|
\end{aligned}$$

其中对于 $\|h_{\mathcal{C}_i}\|_2 = \sqrt{\sum_{j\in\mathcal{C}_i} h_j^2}$, $i=1$, 2 和 $h\in\mathbb{S}^{n-1}$,

$$\begin{aligned}
\left|\sum_{j\in\mathcal{C}_1} w_2 h_j - \sum_{j\in\mathcal{C}_2} w_1 h_j\right| &\leq w_2 \sum_{j\in\mathcal{C}_1} |h_j| + w_1 \sum_{j\in\mathcal{C}_2} |h_j| =: w_2 \|h_{\mathcal{C}_1}\|_1 + w_1 \|h_{\mathcal{C}_2}\|_1 \\
&\leq w_2\sqrt{|\mathcal{C}_1|}\,\|h_{\mathcal{C}_1}\|_2 + w_1\sqrt{|\mathcal{C}_2|}\,\|h_{\mathcal{C}_2}\|_2 \\
&\leq \sqrt{w_1 w_2 n}\,(\sqrt{w_2}\,\|h_{\mathcal{C}_1}\|_2 + \sqrt{w_1}\,\|h_{\mathcal{C}_2}\|_2) \leq \sqrt{w_1 w_2 n}
\end{aligned}$$

其中 $1 = w_1 + w_2 \geq 2\sqrt{w_1 w_2}$，根据柯西-施瓦茨不等式，对于 $\bar{w_0} = (\sqrt{w_2},\ \sqrt{w_1})$，存在使得 $\|\bar{w_0}\|_2 = \sqrt{w_1+w_2} = 1$ 的条件，并且对于 $z = (\|h_{\mathcal{C}_1}\|_2,\ \|h_{\mathcal{C}_2}\|_2)$，存在使得 $\|z\|_2 = 1$ 的条件，

$$\left\langle \bar{w_0}, z\right\rangle = (\sqrt{w_2}\,\|h_{\mathcal{C}_1}\|_2 + \sqrt{w_1}\,\|h_{\mathcal{C}_2}\|_2) \leq \|w_0\|_2\,\|z\|_2 = 1.$$

□

### F.3 引理 5.5 的证明

算子范数中的约化成立，这是因为根据命题 F.1,

$$\begin{aligned}
\widehat{\Sigma}_Y - \Sigma_Y &:= (Y-\mathbb{E}Y)(Y-\mathbb{E}Y)^T - \mathbb{E}((Y-\mathbb{E}Y)(Y-\mathbb{E}Y)^T) \\
&= (I-P_1)(\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T - \mathbb{E}(\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T))(I-P_1)
\end{aligned}$$

并且显然,

$$\begin{aligned}
\left\|\widehat{\Sigma}_Y - \Sigma_Y\right\|_2 &\leq \|I-P_1\|_2 \left\|\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T - \mathbb{E}(\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T)\right\|_2 \|I-P_1\|_2 \\
&\leq \left\|\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T - \mathbb{E}(\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T)\right\|_2.
\end{aligned} \tag{94}$$

□

# G 各向同性设计的第 6 节证明

在（A2）条件下，矩阵 $\mathbb{Z} = X - \mathbb{E}X$ 的行向量 $\mathbb{Z}_1$、$\mathbb{Z}_2$、……、$\mathbb{Z}_n \in \mathbb{R}^p$ 相互独立，且为次高斯向量，其次高斯范数参见引理 3.4。2 [42]。为衔接引理 5.4 中的确定性界与引理 6.1 中的概率性结论，我们使用引理 6.2 中的尾界。结合引理 5.4 和引理 6.2，即可证明引理 6.1。

## G.1 引理 6.1 的证明

令 $\varepsilon = 1/3$。令 $\Pi_n$ 为 $\mathbb{S}^{n-1}$ 的一个 $\varepsilon$-网，使得 $|\Pi_n| \leq (1+2/\varepsilon)^n$；由 (73) 和并集界可得，

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\mathbb{E}_3) &:= \mathbb{P}\left( \left| \sup_{q\in\Pi_n} \sum_{i=1}^n q_i \langle \mathbb{Z}_i, \mu \rangle \right| \geq \frac{1}{2} C_3 C_0 \sqrt{n} \right) \\ &\leq 9^n \cdot 2\exp\left(-c_6 C_3^2 n/4\right) \leq 2\exp(-c_1 n) \end{aligned} \tag{95}$$

其中 $C_3$，$c_1$ 和 $\mu$ 是 (71) 中的绝对常数。因此，在事件 $\mathbb{E}_3^c$ 上，由标准逼近论证可得，

$$\sup_{q\in\mathbb{S}^{n-1}} \sum_{i=1}^n q_i \langle \mathbb{Z}_i, \mu \rangle \leq \frac{1}{1-\varepsilon} \sup_{q\in\Pi_n} \sum_{i=1}^n q_i \langle \mathbb{Z}_i, \mu \rangle \leq C_3 C_0 \sqrt{n}$$

类似地，由并集界和 (72) 可得，

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\mathbb{E}_4) &:= \mathbb{P}\left( \max_{u\in\{-1,1\}^n} \left| \sum_{i=1}^n u_i \langle \mathbb{Z}_i, \mu \rangle \right| \geq \frac{1}{2} C_4 C_0 n \right) \\ &\leq 2^n \exp\left( -c_5 \frac{(C_4 C_0)^2 n^2}{4 C_0^2 n} \right) \leq 2\exp(-c' n); \end{aligned} \tag{96}$$

因此，在 $\mathbb{E}_4^c$ 上，第二个不等式由 (70) 得出。

$$\sup_{u\in\{-1,1\}^n} \sum_{i=1}^n u_i \langle Y_i - \mathbb{E}Y_i, \mu \rangle \leq \frac{2(n-1)}{n} \sup_{u\in\{-1,1\}^n} \sum_{i=1}^n u_i \langle \mathbb{Z}_i, \mu \rangle \leq C_4 C_0 (n-1)$$

由引理 5.4 可知，在事件 $\mathbb{E}_3^c \cap \mathbb{E}_4^c$ 上，

$$\|M_Y\|_2 \leq 4\sqrt{n}\sqrt{w_1 w_2} \sup_{q\in S^{n-1}} \left| \sum_i q_i \langle \mathbb{Z}_i, \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \rangle \right| \leq 2 C_3 C_0 n \sqrt{p\gamma}$$

and

$$\|M_Y\|_{\infty\to 1} \leq 8 w_1 w_2 (n-1) \sup_{u\in\{-1,1\}^n} \sum_{i=1}^n u_i \langle \mathbb{Z}_i, \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \rangle \leq C_4 C_0 n (n-1) \sqrt{p\gamma}$$

因此，调整常数后，引理成立。□

## G.2 引理 6.2 的证明

设 $\mu$ 如式（71）所示，并回顾

$$\max_i \|\mathbb{Z}_i\|_{\psi_2} \le CC_0$$

Mo此外，由 $\mathbb{Z}_1, \dots, \mathbb{Z}_n$ 的独立性可得，对于 $u = (u_1, \dots, u_n)$，有 $\in \{-1, 1\}^n$ ，

$$\left\| \sum_{i=1}^n u_i \langle \mathbb{Z}_i, \mu \rangle \right\|_{\psi_2}^2 \le C \sum_{i=1}^n \| \langle \mathbb{Z}_i, \mu \rangle \|_{\psi_2}^2 \le C \sum_{i=1}^n \|\mathbb{Z}_i\|_{\psi_2}^2$$

其中 $\| \langle \mathbb{Z}_j, \mu \rangle \|_{\psi_2} \le \|\mathbb{Z}_j\|_{\psi_2}$ 根据 (13) 的定义，对于任意 $q \in \mathbb{S}^{n-1}$ 和 $t > 0$，有

$$\left\| \sum_{i=1}^n q_i \langle \mathbb{Z}_i, \mu \rangle \right\|_{\psi_2}^2 \le C \sum_{i=1}^n q_i^2 \| \langle \mathbb{Z}_i, \mu \rangle \|_{\psi_2}^2 \le C \max_i \|\mathbb{Z}_i\|_{\psi_2}^2 \le C' C_0^2$$

因此，对于任意 $u = (u_1, \dots, u_n) \in \{-1, 1\}^n$ 和 $t > 0$，有以下次高斯尾界：

$$\mathbb{P}\left( \sum_{i=1}^n u_i \langle \mathbb{Z}_i, \mu \rangle \ge t \right) \le 2 \exp\left( - \frac{ct^2}{\sum_{i=1}^n \|\mathbb{Z}_i\|_{\psi_2}^2} \right) \le 2 \exp\left( - \frac{ct^2}{C_0^2 n} \right)$$

对于任意 $q \in \mathbb{S}^{n-1}$ 和 $t > 0$，有

$$\mathbb{P}\left( \sum_{i=1}^n q_i \langle \mathbb{Z}_i, \mu \rangle \ge t \right) \le 2 \exp\left( - \frac{ct^2}{\max_{i=1}^n \|\mathbb{Z}_i\|_{\psi_2}^2} \right) \le 2 \exp\left( - \frac{c' t^2}{C_0^2} \right)$$

参见命题 2.5.2 (i) [42]。因此引理成立。□

## G.3 定理 6.3 的证明概要

首先，注意到 $M_1 = \mathbb{Z}\mathbb{Z}^T =: \widehat{\Sigma}_X$ 是基于原始数据 $X$ 得到的经验协方差矩阵。为了证明定理 6.3 的测度集中界，我们将首先在引理 G.1 中给出 $M_1 - \mathbb{E}M_1$ 的算子范数界。

设 $C_{\text{diag}}$，$C_{\text{offd}}$，$C_1$，$C_2$，$c$，$c'$，.....为一些绝对常数，它们可能逐行变化。用 $\mathbb{E}_0$ 表示以下事件：

$$\mathbb{E}_0 : \quad \exists j \in [n] \quad \left| \|\mathbb{Z}_j\|_2^2 - \mathbb{E}\|\mathbb{Z}_j\|_2^2 \right| > C_{\text{diag}} C_0^2 (\sqrt{np} \vee n) \tag{94}$$

**引理 G.1.（M1 项：算子范数）**选择 $\varepsilon = 1/4$ 并构造一个 $\varepsilon$-网 $\mathcal{N}$，其大小上界为 $|\mathcal{N}| \le (\frac{2}{\varepsilon} + 1)^n \le 9^n$。回顾一下， $\mathbb{Z} = X - \mathbb{E}X$。固定 $\varepsilon = 1/4$。在定理 *6.3* 的条件下，将以下事件记为 $\mathbb{E}_8$ ：

$$event\ \mathbb{E}_8 : \quad \left\{ \max_{q,h \in \mathcal{N}} \sum_{i=1}^n \sum_{j \ne i}^n \langle \mathbb{Z}_i, \mathbb{Z}_j \rangle q_i h_j > C_1 C_0^2 (\sqrt{np} \vee n) \right\}$$

因此，在事件 $\mathbb{E}_0^c \cap \mathbb{E}_8^c$ 上，我们有

$$\left\|\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T - \mathbb{E}\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T\right\|_2 \quad \leq \quad C_2 C_0^2(\sqrt{np} \vee n)$$

其中 $\mathbb{P}\left(\mathbb{E}_0^c \cap \mathbb{E}_8^c\right) \geq 1 - 2\exp\left(-c_4 n\right)$，调整常数后成立。

当我们将 $\mathbb{Z}$ 视为具有独立元素的次高斯系综时，我们关于 $\|M_1 - \mathbb{E}M_1\|$（割范数和算子范数）的界依赖于 Bernstein 型不等式和高维汉森–赖特不等式。我们将在 G.4 节陈述引理 G.4，并在那里界定事件 $\mathbb{E}_0$ 发生的概率。我们将在 G.5 节使用标准网论证证明引理 G.1。权重和混合成分的数量都不会影响这些界。

## G.4 独立次指数随机变量的界

现在，我们利用次指数随机变量的性质推导相应的界。随机变量 $S$ 的次指数范数（或 $\psi_1$范数）记为 $\|S\|_{\psi_1}$，其定义为

$$\|S\|_{\psi_1} = \inf\{t > 0 \,:\, \mathbb{E}\exp(|S|/t) \leq 2\}. \tag{95}$$

随机变量 $Z$ 当且仅当满足以下条件时是次高斯的：$S := Z^2$ 具有 $\|S\|_{\psi_1} = \|Z\|_{\psi_2}^2$的次指数性。

该证明不依赖于簇的具体大小 $|\mathcal{C}_j| \, \forall j$ 。引理 G.2 涉及独立次指数随机变量之和。我们还陈述 Hanson-Wright 不等式 [40]。

**引理 G.2**。（伯恩斯坦不等式，参见定理 2.8。1 [42]）设 $X_1$、…、$X_n$ 为独立的零均值次指数随机变量。则对于任意 $t > 0$,

$$\mathbb{P}\left(\left|\sum_{j=1}^{n} X_j\right| \geq t\right) \quad \leq \quad 2n\exp\left(-c\min\left(\frac{t^2}{\sum_{j=1}^{n}\|X_j\|_{\psi_1}^2}, \frac{t}{\max_j \|X_j\|_{\psi_1}}\right)\right)$$

**定理 G.3**。 [40] 设 $X = (X_1、\ldots、X_m) \in \mathbb{R}^m$ 为一个具有独立分量$X_i$ 的随机向量，并满足 $\mathbb{E}X_i = 0$ 和 $\|X_i\|_{\psi_2} \leq C_0$。设 $A$ 为一个 $m \times m$ 矩阵。则对于任意 $t > 0$,

$$\mathbb{P}\left(\left|X^T A X - \mathbb{E}(X^T A X)\right| > t\right) \leq 2\exp\left(-c\min\left(\frac{t^2}{C_0^4\|A\|_F^2}, \frac{t}{C_0^2\|A\|_2}\right)\right).$$

**引理 G.4**。 令 $\mathbb{Z} = (z_{jk}) \in \mathbb{R}^{n\times p}$ 为一个随机矩阵，其元素是相互独立、零均值的次高斯随机变量，且 最大值$_{j,\ k}\|z_{jk}\|_{\psi_2} \leq C_0$。则对于 $t_{\text{diag}} = C_{\text{diag}} C_0^2(\sqrt{np} \vee n)$，

$$\mathbb{P}\left(\mathbb{E}_0\right) \quad := \quad \mathbb{P}\left(\exists j \in [n], \quad \left|\|\mathbb{Z}_j\|_2^2 - \mathbb{E}\|\mathbb{Z}_j\|_2^2\right| > t_{\text{diag}}\right) \leq 2\exp(-c_0 n)$$

其中 $\{\mathbb{Z}_j, j \in [n]\}$ 是矩阵 $\mathbb{Z}$的行向量， $C_{\text{diag}}$ 和 $c_0$ 是绝对常数。

证明。 记为

$$S_{jk} = z_{jk}^2 - \mathbb{E}z_{jk}^2, \quad \text{where } z_{jk} = X_{jk} - \mathbb{E}X_{jk}, \forall i \in [n], k \in [p] \tag{96}$$

由式 (95) 可知， $S_{jk}$ 是一个零均值的次指数随机变量，因为

$$\begin{aligned}\max_{j,k}\|S_{jk}\|_{\psi_1} &\le CC_0^2 \quad \text{since } \forall j,k,\ \left\|z_{jk}^2\right\|_{\psi_1}=\|z_{jk}\|_{\psi_2}^2\le C_0^2,\\ \text{and}\quad \|S_{jk}\|_{\psi_1} &= \left\|z_{jk}^2-\mathbb{E}z_{jk}^2\right\|_{\psi_1}\le C\left\|z_{jk}^2\right\|_{\psi_1}=C\|z_{jk}\|_{\psi_2}^2\le CC_0^2\end{aligned}$$

参见习题 2.7。10 [42]。令 $t_3=C_{\text{diag}}C_0^2\sqrt{np}\vee n$。由伯恩斯坦不等式、引理 G.2 和并集界，可得以下大偏差界：

$$\begin{aligned}&\mathbb{P}\left(\exists j\in[n],\quad \left|\|\mathbb{Z}_j\|_2^2-\mathbb{E}\|\mathbb{Z}_j\|_2^2\right|\ge t_3\right)\le\sum_{j=1}^n\mathbb{P}\left(\left|\sum_{k=1}^p S_{jk}\right|\ge t_3\right)\le\\ &\qquad 2n\exp\left(-c\min\left(\frac{(C_{\text{diag}}C_0^2\sqrt{np}\vee n)^2}{\max_{j\in[n]}\sum_{k=1}^p\|S_{jk}\|_{\psi_1}^2},\frac{C_{\text{diag}}C_0^2\sqrt{np}\vee n}{\max_{j,k}\|S_{jk}\|_{\psi_1}}\right)\right)\\ &\le\ 2n\exp\left(-c\min\left(\frac{C_{\text{diag}}^2np}{p},C_{\text{diag}}n\right)\right)\le 2\exp(-c_0n)\end{aligned}\tag{97}$$

其中，对所有 $j\in[n]$、$\sum_{k=1}^p\|S_{jk}\|_{\psi_1}^2\le pC^2C_0^4$ 均成立。因此该引理得证。□

## G.5 引理 G.1 的证明

我们使用定理 G.3 来界定非对角部分。回顾 $\max_{j,k}\|z_{jk}\|_{\psi_2}\le C_0$。令 $\mathrm{vec}\{\mathbb{Z}\}=\mathrm{vec}\{\mathbb{X}-\mathbb{E}\mathbb{X}\}$ 为将矩阵 $\mathbb{Z}$ 的各列拼接而成的长向量，其大小为 $np$。对于 $q,h\in\mathbb{S}^{n-1}$ 的某个特定取值，我们构造分块对角矩阵 $\widetilde{A}(q,h)$，其中 $\mathrm{diag}(\widetilde{A})=0$，其对角线上有 $p$ 个相同的分块对角系数矩阵 $A_{qh}^{(k)}=\mathrm{offd}(q\otimes h)\ \forall k$，大小为 $n\times n$。于是

$$\left|\sum_{i=1}^n q_i\sum_{j\ne i}^n h_j\langle\mathbb{Z}_i,\mathbb{Z}_j\rangle\right|\ :=\ \left|\mathrm{vec}\{\mathbb{Z}\}^{\mathrm{T}}\widetilde{\mathrm{A}}_{\mathrm{q,h}}\mathrm{vec}\{\mathbb{Z}\}\right|$$

and

$$\begin{aligned}\forall q,h\in\mathbb{S}^{n-1},\quad \left\|\widetilde{A}(q,h)\right\|_F^2 &= \sum_{k=1}^p\left\|A_{qh}^{(k)}\right\|_F^2=p\|\mathrm{offd}(q\otimes h)\|_F^2\le p,\\ \left\|\widetilde{A}(q,h)\right\|_2 &= \|\mathrm{offd}(q\otimes h)\|_2\le 1,\\ \text{since}\quad \|\mathrm{offd}(q\otimes h)\|_2 &\le \|\mathrm{offd}(q\otimes h)\|_F\le\|q\otimes h\|_F^2=\mathrm{tr}(qh^Thq^T)=1.\end{aligned}$$

对 $|\mathcal{N}|^2$ 个 $q,h\in\mathcal{N}$（即 $\mathbb{S}^{n-1}$ 的 $\varepsilon$-网）应用并集界，根据定理 G.3，对于某些足够大的常数 $C_1$ 和 $c>4\ln 9$，有：

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(\mathbb{E}_8):=\mathbb{P}&\left(\max_{q,h\in\mathcal{N}}\left|\sum_{i=1}^n\sum_{j\ne i}^n q_ih_j\langle\mathbb{Z}_i,\mathbb{Z}_j\rangle\right|>C_1C_0^2(\sqrt{pn}\vee n)\right)\\ &\le\ |\mathcal{N}|^2\,\mathbb{P}\left(\left|\mathrm{vec}\{\mathbb{Z}\}^{\mathrm{T}}\widetilde{\mathrm{A}}(\mathrm{q,h})\mathrm{vec}\{\mathbb{Z}\}\right|>C_1C_0^2(\sqrt{pn}\vee n)\right)\\ &\le\ 2\times 9^{2n}\exp\left(-c\min\left(C_1^2pn/p,C_1n\right)\right)\\ &\le\ 2\exp\left(-cn+2n\ln 9\right)=2\exp\left(-c_3n\right)\end{aligned}$$

标准逼近论证表明，在 $\mathbb{E}_8^c$ 条件下，我们有：

$$\begin{aligned}\left\|\mathrm{offd}(\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T)\right\|_2 &= \sup_{q\in\mathbb{S}^{n-1}}\sum_{i=1}^n\sum_{j\neq i}^n q_iq_j\left\langle\mathbb{Z}_i,\mathbb{Z}_j\right\rangle \\ &\leq \frac{1}{(1-2\varepsilon)}\sup_{q,h\in\mathcal{N}}\sum_{i=1}^n\sum_{j\neq i}^n q_ih_j\left\langle\mathbb{Z}_i,\mathbb{Z}_j\right\rangle \leq 2C_1C_0^2(\sqrt{np}\vee n)\end{aligned}$$

例如，参见练习 4.4。3 [42]。

算子范数的大偏差界由三角不等式得出：在事件$\mathbb{E}_8^c\cap\mathbb{E}_0^c$上，

$$\left\|\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T-\mathbb{E}(\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T)\right\|_2 \leq \left\|\mathrm{diag}(\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T-\mathbb{E}(\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T))\right\|_2+\left\|\mathrm{offd}(\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T)\right\|_2 \leq C_2C_0^2(\sqrt{np}\vee n)$$

对于某个绝对常数 $C_2$。□

# H 偏差项

本节证明定理 3.5 所需的结果。我们在 H.2 节证明引理 5.1，并在该节陈述引理 H.7。结合 (114)、(115) 和命题 H.4，我们得到关于 $\mathbb{E}B-R$ 的一个表达式。回顾一下，$R=\mathbb{E}(Y)\mathbb{E}(Y)^T$ 如 (21) 中所定义。关于 $R$，我们有以下事实。

**事实 H.1**。对 $R$ 中所有元素求和时，显然，对于 (21) 中定义的 $R$，我们有 $\mathbf{1}_n^TR\mathbf{1}_n=0$，

$$\begin{aligned}\mathbf{1}_n^T\mathrm{offd}(R)\mathbf{1}_n &= \mathbf{1}_n^TR\mathbf{1}_n-\mathrm{tr}(R)=-\mathrm{tr}(R)=-np\gamma w_2w_1, \quad where \\ \frac{1}{p\gamma}\mathrm{tr}(R) &= nw_2^2w_1+nw_1^2w_2=w_1w_2n \quad and\ hence \quad \|R\|_2=\mathrm{tr}(R)=w_1w_2np\gamma\end{aligned} \tag{98}$$

**引理 H.2.** 根据事实 *H.1*，我们有 $\mathrm{tr}(R)/n=p\gamma w_1w_2$，因此对于 $n\geq 4$，

$$\left\|\frac{\mathrm{tr}(R)}{n-1}(I_n-E_n/n)\right\|_2 \leq \frac{n}{n-1}o\gamma w_1w_2\leq p\gamma/3 \tag{99}$$

$$and\ hence \quad \left\|\frac{\mathrm{tr}(R)}{n-1}(I_n-E_n/n)\right\|_{\infty\to 1} \leq \frac{n}{n-1}np\gamma w_1w_2\leq np\gamma/3 \tag{100}$$

其中 $\|I_n-E_n/n\|_{\infty\to 1}\leq n\|I_n-E_n/n\|_2=1$，因为 $I_n-E_n/n$ 是投影矩阵。

## H.1 一些有用的命题

接下来，我们计算命题 H.3 中的均值，并在命题 H.4 中得到关于 $\mathbb{E}B-R$ 的一个表达式。命题 H.3 的证明见 H.3 节。

**命题 H.3**。**（协方差投影：两个群体）**令 $N_j=w_jn$ *for* $j\in\{1,2\}$。不失一般性，假设 $X$ 中的前 $N_1$ 行属于 $\mathcal{C}_1$，接下来的 $N_2$ 行属于 $\mathcal{C}_2$。令 $M_1$、$M_2$、$M_3$ 如命题 *F.1* 中所定义。令 $V_1$ 和 $V_2$ 与（24）中相同：

$$V_1:=\mathbb{E}\left\langle\mathbb{Z}_j,\mathbb{Z}_j\right\rangle\ \ \forall j\in\mathcal{C}_1 \quad and \quad V_2:=\mathbb{E}\left\langle\mathbb{Z}_j,\mathbb{Z}_j\right\rangle\ \ \forall j\in\mathcal{C}_2 \tag{101}$$

^令 $V_m := w_1V_1 + w_2V_2 = W_n/n$。令 $\Sigma_Y$ 如（85）中所述。令 $W_n$ 定义如下（102）：

$$W_n \;:=\; \mathbb{E}\sum_{i=1}^{n}\langle\,\mathbb{Z}_i,\mathbb{Z}_i\,\rangle \;=\sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{p}\mathbb{E}z_{ik}^2. \tag{102}$$

*Then*

$$\mathbb{E}M_1 \;=\; \begin{bmatrix} V_1I_{N_1} & 0 \\ 0 & V_2I_{N_2}\end{bmatrix} =: (w_1V_1+w_2V_2)I_n + W_0, \tag{103}$$

$$\mathbb{E}M_2 \;=\; \frac{V_1+V_2}{n}E_n + W_2, \tag{104}$$

$$\mathbb{E}M_3 \;:=\; \mathbb{E}\,\langle\,\widehat{\mu}_n-\mathbb{E}\widehat{\mu}_n,\widehat{\mu}_n-\mathbb{E}\widehat{\mu}_n\,\rangle\,\mathbf{1}_n\otimes\mathbf{1}_n = \frac{W_n}{n^2}E_n, \tag{105}$$

$$\textit{and}\quad W_n/n^2 \;:=\; (|\mathcal{C}_1|\,V_1+|\mathcal{C}_2|\,V_2)/n^2 = (w_1V_1+w_2V_2)/n =: \frac{V_w}{n}, \tag{106}$$

其中 $\mathrm{tr}(\mathbb{E}M_1)/n = V_m$ 和

$$W_0 \;=\; (V_1-V_2)\begin{bmatrix} w_2I_{N_1} & 0 \\ 0 & -w_1I_{N_2}\end{bmatrix} \;\textit{and}\; W_2 := \frac{V_1-V_2}{n}\begin{bmatrix} E_{N_1} & 0 \\ 0 & -E_{N_2}\end{bmatrix}. \tag{107}$$

现在综合以上结果，我们得到 $Y$的协方差表达式:

$$\begin{aligned}\Sigma_Y &:= \mathbb{E}(YY^T)-\mathbb{E}(Y)\mathbb{E}(Y)^T = \mathbb{E}M_1+\mathbb{E}M_3-\mathbb{E}M_2\\ &= \begin{bmatrix} V_1I_{N_1} & 0 \\ 0 & V_2I_{N_2}\end{bmatrix} - \frac{w_2V_1+w_1V_2}{n}E_n - W_2\end{aligned}$$

可化简为

$$\Sigma_Y = V(I_n-E_n/n) \;\; \textit{in case} \;\; V_1=V_2=V$$

我们在 **H.4** 节证明命题 **H.4**。直观而言， $W_2$ 和 $\mathbb{W}$ 是由方差分布的不平衡引起的。

**命题 H.4。（偏差分解）**设 $M_1$、$M_2$、$M_3$、$W_0$、$W_2$、$V_1$、$V_2$... 与命题 *F.1* 和 *H.3* 中的定义相同。则

$$\mathbb{E}B-R \;=\; W_0-\mathbb{W}-\frac{\mathrm{tr}(R)}{(n-1)}(I_n-\frac{E_n}{n}) \;\; \textit{where} \tag{108}$$

$$\mathbb{W} \;:=\; W_2+\frac{(V_1-V_2)(w_2-w_1)}{n}E_n \tag{109}$$

其中 $W_2$ 由(107)定义。此外，当 $V_1=V_2$、$W_0=\mathbb{W}=0$时。

接下来，我们陈述关于 $W_2$ 的以下事实。

**H.5号事实**。记为

$$\mathbb{W} := W_2-\frac{1}{n}\mathrm{tr}(W_2)I_n-\frac{\mathbf{1}_n^T\mathrm{offd}(W_2)\mathbf{1}_n}{n(n-1)}(E_n-I_n)$$

那么 $\mathbb{W}$ 与（109）一致。此外，我们有

$$\begin{aligned}\mathbb{W} &= W_2 - \frac{(V_2-V_1)(w_2-w_1)}{n}E_n \\ &:= \frac{V_1-V_2}{n}\begin{bmatrix} 2w_2E_{N_1} & (w_2-w_1)E_{N_1\times N_2} \\ (w_2-w_1)E_{N_1\times N_2} & -2w_1E_{N_2}\end{bmatrix}\end{aligned}$$

此外，我们有

$$\|\mathbb{W}\|_2 \le |V_1-V_2|(w_1\vee w_2) \quad and \quad \|\mathbb{W}\|_{\infty\to 1} \le n|V_1-V_2|(w_1\vee w_2) \tag{110}$$

证明。根据定义，如 (107) 中的 $W_2$ ，我们有

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}(W_2) &= \frac{V_2-V_1}{n}(w_2n-w_1n) = (V_2-V_1)(w_2-w_1) \text{ and} \\ \mathbf{1}_n^TW_2\mathbf{1}_n &= \frac{V_2-V_1}{n}(w_2^2n^2-w_1^2n^2) = n(V_2-V_1)(w_2^2-w_1^2) \\ &= n(V_2-V_1)(w_2-w_1)\end{aligned}$$

Thus

$$\frac{\mathbf{1}_n^T\mathrm{offd}(W_2)\mathbf{1}_n}{n(n-1)} = \frac{\mathbf{1}_n^TW_2\mathbf{1}_n-\mathrm{tr}(W_2)}{n(n-1)} = \frac{(V_2-V_1)(w_2-w_1)}{n};$$

Then

$$\begin{aligned}\mathbb{W} &= W_2 - \frac{1}{n}\mathrm{tr}(W_2)I_n - \frac{\mathbf{1}_n^T\mathrm{offd}(W_2)\mathbf{1}_n}{n(n-1)}(E_n-I_n) \\ &= W_2 - \frac{(V_2-V_1)(w_2-w_1)}{n}E_n.\end{aligned}$$

因此 (109) 成立。此外，由对称性，$\|\mathbb{W}\|_2 \le \|\mathbb{W}\|_\infty \le |V_1-V_2|(w_1\vee w_2)$. □

## H.2 引理 5.1 的证明

根据命题 H.4，我们有

$$\begin{aligned}\|\mathbb{E}B-R\| &= \left\|W_0-\mathbb{W}-\frac{\mathrm{tr}(R)}{(n-1)}(I_n-\frac{E_n}{n})\right\| \\ &\le \|W_0\|+\|\mathbb{W}\|+\left\|\frac{\mathrm{tr}(R)}{(n-1)}(I_n-\frac{E_n}{n})\right\|\end{aligned} \tag{111}$$

其中，$\|\cdot\|$ 应理解为算子范数或割范数。回顾

$$\begin{aligned}W_0 &:= \mathbb{E}M_1 - V_wI_n = (V_1-V_2)\begin{bmatrix} w_2I_{w_1n} & 0 \\ 0 & -w_1I_{w_2n}\end{bmatrix} \\ \text{and hence } \mathbf{1}_n^TW_0\mathbf{1}_n &= \mathrm{tr}(W_0)=0 \text{ and } V_m := \mathrm{tr}(\mathbb{E}M_1)/n = w_1V_1+w_2V_2\end{aligned}$$

因此，如果两个簇的方差和相同：$V_1=V_2$，则 $W_0$ 消失。显然，

$$\|W_0\|_2 \le |V_1-V_2|(w_2\vee w_1) \tag{112}$$

结合 (111)、(112)、(110) 和 (100)，对于 $w_{\min} := w_1 \wedge w_2$ 以及 $n\xi \geq \frac{1}{2w_{\min}}$ ——

$$\begin{aligned} \|\mathbb{E}B - R\|_2 &\leq \|W_0\|_2 + \|\mathbb{W}\|_2 + \left\| \frac{\mathrm{tr}(R)}{(n-1)}(I_n - \frac{E_n}{n}) \right\|_2 \\ &\leq 2\,|V_1 - V_2|\,(w_1 \vee w_2) + p\gamma/3 \\ &= \frac{2}{3}\xi np\gamma(1 - w_{\min}) + p\gamma/3 \leq \frac{2}{3}\xi np\gamma \end{aligned}$$

这里我们利用了以下事实:

$$\frac{2}{3}\xi p\gamma n w_{\min} \geq p\gamma/3 \quad \text{since} \quad 2\xi n w_{\min} \geq 1$$

现在，由于以下原因，割范数的上界成立:

$$\|\mathbb{E}B - R\|_{\infty\to 1} \leq n\,\|\mathbb{E}B - R\|_2 \leq \frac{2}{3}\xi n^2 p\gamma$$

因此，该引理适用于一般情形；当 $V_1 = V_2$ 时，我们在引理 H.7 中给出更紧的上界。□

推论 H.6 可由引理 5.1 的证明推出；我们陈述该引理是为了证明平衡情形的一个上界。证明见 H.5 节。

**推论 H.6.** 对于一般情形，根据定义，我们有:

$$W_2 := \frac{V_1 - V_2}{n}\begin{bmatrix} E_{N_1} & 0E_{N_1\times N_2} \\ 0E_{N_1\times N_2} & -E_{N_2} \end{bmatrix}$$

此外，我们还有以下依赖于权重的项:

$$\begin{aligned} \left\| \frac{(V_2 - V_1)(w_2 - w_1)}{n} E_n \right\|_{\infty\to 1} &\leq n\,|(V_2 - V_1)(w_2 - w_1)| \leq \xi n^2 p\gamma\,|w_2 - w_1| \\ \|W_2\|_{\infty\to 1} &:= n\,|V_1 - V_2|\,(w_1^2 + w_2^2) \\ \textit{and hence} \quad \|W_0 - W_2\|_{\infty\to 1} &\leq n\,\|W_0 - W_2\|_2 < n\,|V_1 - V_2| \leq \xi p n^2\gamma \end{aligned}$$

**引理 H.7。（约化）**令 $W_0$、$W_2$、$V_1$、$V_2$ 与命题 *H.3* 中的相同。回顾 $R = \mathbb{E}(Y)\mathbb{E}(Y)^T$。**当** $V_1 = V_2$ 时，我们有

$$\mathbb{E}B - R = -\frac{\mathrm{tr}(R)}{(n-1)}(I_n - \frac{E_n}{n}) = -p\gamma w_2 w_1 \frac{n}{n-1}(I_n - \frac{E_n}{n})$$

因此，对于 $n \geq 4$,

$$\|\mathbb{E}B - R\|_{\infty\to 1} = \left\| p\gamma w_2 w_1 \frac{n}{n-1}(I_n - \frac{E_n}{n}) \right\|_{\infty\to 1} \leq np\gamma/3$$

**对于平衡簇，也就是说，当** $w_1 = w_2$时，我们有

$$\mathbb{E}B - R = W_0 - W_2 - \frac{\mathrm{tr}(R)}{(n-1)}(I_n - \frac{E_n}{n})$$

因此对于 $n \geq 4$,

$$\begin{aligned} \|\mathbb{E}B - R\|_2 &\leq \frac{p\gamma}{3} + |V_1 - V_2| \leq \frac{1}{3}(1+o(1))\xi pn\gamma \\ \|\mathbb{E}B - R\|_{\infty\to 1} &\leq \frac{np\gamma}{3} + |V_1 - V_2|\, n \leq \frac{1}{3}(1+o(1))\xi pn^2\gamma. \end{aligned}$$

证明。回顾

$$W_0 - W_2 = (V_1 - V_2)\begin{bmatrix} w_2 I_{N_1} - E_{N_1}/n & 0 \\ 0 & -(w_1 I_{N_2} - E_{N_2}/n) \end{bmatrix}$$

$V_1 = V_2$ 的情形可由引理 H.2 和 (108) 得出。现在证明$w_1 = w_2$时的平衡情形。根据引理 5.1 的条件, 对于 $\xi = \Omega(1/n)$, 由 (99) 和 (108) 可得,

$$\begin{aligned} \|\mathbb{E}B - R\|_2 &\leq \|W_0 - W_2\|_2 + \left\|\frac{(V_1 - V_2)(w_1 - w_2)}{n} E_n\right\|_2 + \left\|\frac{\mathrm{tr}(R)}{n-1}(I_n - E_n/n)\right\|_2 \\ &\leq |V_1 - V_2| + p\gamma/3 \leq \frac{1}{3}\xi np\gamma + p\gamma/3 \end{aligned}$$

同理, 我们得到

$$\|\mathbb{E}B - R\|_{\infty\to 1} \leq |V_1 - V_2|\, n + np\gamma/3 \leq \frac{1}{3}\xi n^2 p\gamma + np\gamma/3$$

由推论 H.6 可立即得出证明。□

### H.3 命题 H.3 的证明

记 $\mathrm{tr}(\mathbb{E}M_1)/n = (w_1V_1 + w_2V_2)$ 为 $= V_m$。

$$\begin{aligned} \mathbb{E}M_1 &= \mathbb{E}\left((X - \mathbb{E}(X))(X - \mathbb{E}(X))^T\right) = \mathbb{E}\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T \\ &= \begin{bmatrix} V_1 I_{w_1 n} & 0 \\ 0 & V_2 I_{w_2 n} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

此外, 从 $\mathbb{E}M_1$ 中减去 $V_w I_n = \frac{1}{n}\mathrm{tr}(\mathbb{E}M_1) I_n$ 的分量后,– 我们得到 $W_0$:

$$\mathbb{E}M_1 - V_w I_n := \mathbb{E}M_1 - \frac{1}{n}\mathrm{tr}(\mathbb{E}M_1) I_n = (V_1 - V_2)\begin{bmatrix} w_2 I_{w_1 n} & 0 \\ 0 & -w_1 I_{w_2 n} \end{bmatrix} =: W_0;$$

接下来我们计算 $\mathbb{E}M_2$: 对于 $\mathbb{Z} = X - \mathbb{E}X$

$$\begin{aligned} \mathbb{E}M_2 &= \mathbb{E}\left(\left(\mathbb{Z}(\mathbf{1}(X) - \mathbb{E}\mathbf{1}(X))^T + (\mathbf{1}(X) - \mathbb{E}\mathbf{1}(X))\mathbb{Z}^T\right)\right) \\ &= \frac{1}{n}\begin{bmatrix} 2V_1 E_{N_1} & (V_1 + V_2)E_{N_1 \times N_2} \\ (V_1 + V_2)E_{N_1 \times N_2} & 2V_2 E_{N_2} \end{bmatrix} \\ \text{and hence} \quad \mathbb{E}M_2 - \frac{(V_1 + V_2)}{n} E_n &= \frac{V_1 - V_2}{n}\begin{bmatrix} E_{N_1} & 0E_{N_1 \times N_2} \\ 0E_{N_1 \times N_2} & -E_{N_2} \end{bmatrix} =: W_2 \end{aligned}$$

对于 (102) 中定义的 $W_n$，我们有

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\left\langle \widehat{\mu}_n - \mathbb{E}\widehat{\mu}_n, \widehat{\mu}_n - \mathbb{E}\widehat{\mu}_n \right\rangle &:= \frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{k}\mathbb{E}z_{ik}^2 = \frac{w_1V_1 + w_2V_2}{n} = \frac{V_m}{n} \\ \mathbb{E}M_3 &:= \mathbb{E}\left\langle \widehat{\mu}_n - \mathbb{E}\widehat{\mu}_n, \widehat{\mu}_n - \mathbb{E}\widehat{\mu}_n \right\rangle E_n = \frac{|\mathcal{C}_1|\,V_1 + |\mathcal{C}_2|\,V_2}{n^2}E_n = \frac{W_n}{n^2}E_n\end{aligned}$$

现在把各项合在一起,

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(YY^T) - \mathbb{E}(Y)\mathbb{E}(Y)^T &= \mathbb{E}M_1 + \mathbb{E}M_3 - \mathbb{E}M_2 \\ &= \begin{bmatrix} V_1 I_{N_1} & 0 \\ 0 & V_2 I_{N_2} \end{bmatrix} + \frac{V_m}{n}E_n - \frac{(V_1+V_2)}{n}E_n - W_2 \quad \text{where} \\ \frac{V_m}{n} - \frac{(V_1+V_2)}{n} &= -\frac{V_1(1-w_1) + V_2(1-w_2)}{n} = -\frac{V_1w_2 + V_2w_1}{n}\end{aligned}$$

因此命题成立。□

## H.4 命题 H.4 的证明

首先，由命题 F.1 以及 $R = \mathbb{E}(Y)\mathbb{E}(Y)^T$,

$$\mathbb{E}(YY^T) = \Sigma_Y + R = \mathbb{E}M_1 - \mathbb{E}M_2 + \mathbb{E}M_3 + R \tag{113}$$

由事实 H.1 和 (113)，我们有

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\tau &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\mathbb{E}\left\langle Y_i, Y_i \right\rangle = \mathbb{E}\mathrm{tr}(YY^T)/n = \mathrm{tr}(\Sigma_Y)/n + \mathrm{tr}(R)/n \\ &= \frac{1}{n}\left(\mathrm{tr}(\mathbb{E}M_1 + \mathbb{E}M_3) - \mathrm{tr}(\mathbb{E}M_2)\right) + \mathrm{tr}(R)/n \qquad (114) \\ \mathbb{E}\lambda &= \frac{1}{n(n-1)}\sum_{i\neq j}^{n}\mathbb{E}\left\langle Y_i, Y_j \right\rangle = \frac{1}{n(n-1)}\mathbf{1}_n^T\mathbb{E}(\mathrm{offd}(YY^T))\mathbf{1}_n \\ &= \frac{1}{n(n-1)}\mathbf{1}_n^T\mathrm{offd}(\mathbb{E}M_3 - \mathbb{E}M_2)\mathbf{1}_n - \frac{\mathrm{tr}(R)}{n(n-1)} \qquad (115)\end{aligned}$$

其中，在 (115) 中，我们利用了由 (104) 和 (98) 得到的 $\mathrm{offd}(\mathbb{E}M_1) = 0$。因此，根据 $B$ 和 $R$ 的定义，我们有

$$\begin{aligned}\mathbb{E}B - R &= \mathbb{E}M_1 - \mathbb{E}M_2 + \mathbb{E}M_3 - \mathbb{E}\tau I_n - \mathbb{E}\lambda(E_n - I_n) \\ &= \mathbb{E}M_1 - \mathbb{E}M_2 + \mathbb{E}M_3 - \left(\frac{1}{n}\mathrm{tr}(\mathbb{E}M_1 + \mathbb{E}M_3) - \frac{1}{n}\mathrm{tr}(\mathbb{E}M_2) + \frac{\mathrm{tr}(R)}{n}\right)I_n \\ &\quad - \left(\frac{1}{n(n-1)}\mathbf{1}_n^T\mathrm{offd}(\mathbb{E}M_1 + \mathbb{E}M_3 - \mathbb{E}M_2)\mathbf{1}_n - \frac{\mathrm{tr}(R)}{n(n-1)}\right)(E_n - I_n) \qquad (116)\end{aligned}$$

- 注意到 $\mathbb{E}M_3 = \frac{V_w}{n}E_{\overline{n}}$，因此它对 $\mathbb{E}\tau$ 和 $\mathbb{E}\lambda$ 的贡献相同；于是我们有

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}(\mathbb{E}M_3) &= \frac{1}{(n-1)}\mathbf{1}_n^T\mathrm{offd}(\mathbb{E}M_3)\mathbf{1}_n = \frac{W_n}{n} = V_m \text{ and by (105)}, \\ &\mathbb{E}M_3 - \frac{1}{n}\mathrm{tr}(\mathbb{E}M_3)I_n - \frac{\mathbf{1}_n^T\mathrm{offd}(\mathbb{E}M_3)\mathbf{1}_n}{n(n-1)}(E_n - I_n) = 0; \qquad (117)\end{aligned}$$

- $\mathbb{E}M_1$ 是一个对角矩阵，因此 $\text{offd}(\mathbb{E}M_1) = 0$。由 (104) 可得，

$$\mathbb{E}M_1 - \frac{1}{n}\text{tr}(\mathbb{E}M_1)I_n = W_0 \text{ and } \text{offd}(\mathbb{E}M_1) = 0 \tag{118}$$

- 对于 $\mathbb{E}M_2$，我们将其分解为一个与 $E_n$成比例的分量：$\bar{M}_2 := \frac{V_1+V_2}{n}E_n$ 以及另一个分量 $W_2 = \mathbb{E}M_2 - M_2$。根据命题 H.3，我们有

$$\begin{aligned} W_2 &= \mathbb{E}M_2 - \bar{M}_2 = \mathbb{E}M_2 - \frac{V_1+V_2}{n}E_n \\ &:= \frac{V_1-V_2}{n}\begin{bmatrix} E_{N_1} & 0E_{N_1\times N_2} \\ 0E_{N_1\times N_2} & -E_{N_2} \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{119}$$

$$\text{根据定义} \qquad \bar{M}_2 - \frac{\text{tr}(\bar{M}_2)}{n}I_n - \frac{1_n^T\text{offd}(\bar{M}_2)1_n}{n(n-1)}(E_n - I_n) = 0 \tag{120}$$

因此，根据 H.5号事实和式 (120)，我们有

$$\begin{aligned} &\mathbb{E}M_2 - \frac{1}{n}\text{tr}(\mathbb{E}M_2)I_n - \frac{\mathbf{1}_n^T\text{offd}(\mathbb{E}M_2)\mathbf{1}_n}{n(n-1)}(E_n - I_n) \\ =\ & W_2 - \frac{1}{n}\text{tr}(W_2)I_n - \frac{\mathbf{1}_n^T\text{offd}(W_2)\mathbf{1}_n}{n(n-1)}(E_n - I_n) =: \mathbb{W} \end{aligned} \tag{121}$$

现在，根据式 (114)、(115)、(116)、(117)、(118)、(121)以及命题 H.3，

$$\begin{aligned} \mathbb{E}B - R &= \mathbb{E}M_1 - \mathbb{E}M_2 + \mathbb{E}M_3 - \mathbb{E}\tau I_n - \mathbb{E}\lambda(E_n - I_n) \\ &=: W_0 - \mathbb{W} - \frac{\text{tr}(R)}{n-1}(I_n - E_n/n) \end{aligned} \tag{122}$$

其中在第 2 步中，我们简化了所有涉及 $\mathbb{E}M_1$ 和 $\mathbb{E}M_2$的项，并消去了所有涉及$\mathbb{E}M_3$的项。□

## H.5 推论 H.6 的证明

Now

$$W_0 - W_2 = (V_1 - V_2)\begin{bmatrix} w_2 I_{N_1} - E_{N_1}/n & 0 \\ 0 & -(w_1 I_{N_2} - E_{N_2}/n) \end{bmatrix}.$$

此外，由于对称性，对于 $w_j > 1/n$,

$$\begin{aligned} \|W_0 - W_2\|_2 &\le \|W_0 - W_2\|_\infty := \max_i \sum_{j=1}^n |W_{0,ij} - W_{2,ij}| \\ &\le |V_1 - V_2|\left((w_2 - 1/n) + (w_1 n - 1)/n\right) \vee \left((w_1 - 1/n) + (w_2 n - 1)/n\right) < |V_1 - V_2| \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} &((w_2 - 1/n) + (w_1 n - 1)/n) \vee ((w_1 - 1/n) + (w_2 n - 1)/n) \\ =\ & ((w_2 - 1/n) + (w_1 - 1/n) \vee ((w_1 - 1/n) + (w_2 - 1/n) = 1 - 2/n \end{aligned}$$

因此，根据三角不等式，我们有：

$$\begin{aligned}\|W_0 - W_2\|_{\infty\to 1} &\leq \|W_2\|_{\infty\to 1} + \|W_0\|_{\infty\to 1} \\ &\leq |V_1 - V_2|\, n\big(\,|w_2 w_1 + w_1 w_2| + (w_1^2 + w_2^2)\big) \\ &= |V_1 - V_2|\, n \leq \frac{1}{2}\xi n^2 p\gamma\end{aligned}$$

□

# I 第 7 节的证明

证明 定理 5.3。定理 5.3 的证明依据 F.1 节中定理 5.2 的证明，并结合定理 7.2 和引理 7.1。最后，通过调整常数即可得到这些概率陈述。□

## I.1 预备结果

引理 I.1　由次高斯尾界可得。我们将在 I.2 节中证明引理 7.1。

**引理 I.1。（各向异性次高斯随机向量的投影）**。假设引理 *7.1* 中的所有条件均成立。令 $\mu$ 如 (71)中所定义。则

$$\begin{aligned}\|\langle \mathbb{Z}_j, \mu\rangle\|_{\psi_2} &\leq C_0 \|\langle \mathbb{Z}_j, \mu\rangle\|_{L_2} := C_0\sqrt{\mu^T \mathsf{Cov}(\mathbb{Z}_j)\mu} \qquad (123)\\ where\ \sqrt{\mu^T \mathsf{Cov}(\mathbb{Z}_j)\mu} &= \sqrt{\mu^T H_i H_i^T \mu} = \|R_i\mu\|_2 \quad for\ each\ j \in \mathcal{C}_i, i = 1,2\end{aligned}$$

因此，对于任意 $t > 0$，存在某些绝对常数 $c$、$c'$，使得对每个 $q \in \mathbb{S}^{n-1}$ 和 $u = (u_1, \ldots, u_n) \in \{-1,1\}^n$，都有以下尾界：

$$\begin{aligned}\mathbb{P}\left(\left|\sum_{i=1}^n q_i \langle \mathbb{Z}_i, \mu\rangle\right| \geq t\right) &\leq 2\exp\left(-\frac{ct^2}{(C_0 \max_i \|R_i\mu\|_2)^2}\right), \quad and \qquad (124)\\ \mathbb{P}\left(\left|\sum_{i=1}^n u_i \langle \mathbb{Z}_i, \mu\rangle\right| \geq t\right) &\leq 2\exp\left(-\frac{c't^2}{n(C_0 \max_i \|R_i\mu\|_2)^2}\right) \qquad (125)\end{aligned}$$

我们在 I.5 节证明引理 I.2。作为一个特例，我们得到了引理 G.4 中的结果。

**引理 I.2。** 设 $W_j$ 是一个零均值、单位方差、具有独立元素的次高斯随机向量，其中 $\max_{j,\ k}\|w_{jk}\|_{\psi_2} \leq C_0$。设 $\{\mathbb{Z}_j, j \in [n]\}$ 为 $\mathbb{Z}$ 的行向量，其中 $\mathbb{Z}_j = H_i W_j$ 对于 $j \in \mathcal{C}_i$、$i = 1$、$2$。那么，对每个 $j \in \mathcal{C}_i$、$i = 1$、$2$，我们有

$$\begin{aligned}\mathbb{P}\left(\left|\|\mathbb{Z}_j\|_2^2 - \mathbb{E}\|\mathbb{Z}_j\|_2^2\right| > t\right) &= \mathbb{P}\left(\left|\|H_i W_j\|_2^2 - \|H_i\|_F^2\right| > t\right) \\ &\leq 2\exp\left(-c\min\left(\frac{t^2}{(C_0^2\|H_i\|_2\|H_i\|_F)^2}, \frac{t}{(C_0\|H_i\|_2)^2}\right)\right)\end{aligned}$$

因此，对于秩为 $p$ 的矩阵 $H_i$，当 $H = I$ 时，我们恢复了(97) 中的结果，

$$\mathbb{P}\left(\left|\|\mathbb{Z}_j\|_2^2 - \mathbb{E}\|\mathbb{Z}_j\|_2^2\right| > t\right) \leq 2\exp\left(-c\min\left(\frac{t^2}{p(C_0\|H_i\|_2)^4}, \frac{t}{(C_0\|H_i\|_2)^2}\right)\right)$$

接下来我们证明，只要针对各向异性随机向量 $\mathbb{Z}_j$ 的算子范数更新事件 $\mathbb{E}_0$ 和 $\mathbb{E}_8$，就能得到与引理 G.1 中相同的结论。记事件 $\mathbb{E}_0$ 为：存在某个绝对常数 $C_{\text{diag}}$,

$$\mathbb{E}_0 := \left\{ \exists j \in [n] \quad \left| \|\mathbb{Z}_j\|_2^2 - \mathbb{E}\,\|\mathbb{Z}_j\|_2^2 \right| > C_{\text{diag}} (C_0 \max_i \|H_i\|_2)^2 (\sqrt{np} \vee n) \right\}$$

将以下事件记为 $\mathbb{E}_8$： 对于某个绝对常数 $C_1$,

$$\mathbb{E}_8 : \quad \left\{ \max_{q,h \in \mathcal{N}} \sum_{i=1}^n \sum_{j \neq i}^n \langle\, \mathbb{Z}_i, \mathbb{Z}_j \,\rangle\, q_i h_j > C_1 (C_0 \max_i \|H_i\|_2)^2 (\sqrt{np} \vee n) \right\}$$

其中 $\mathcal{N}$ 是引理 G.1 中为 $\varepsilon < 1/4$ 构造的 $\varepsilon$-网，定义在 $\mathbb{S}^{n-1}$ 上。

## I.2 引理7.1的证明

令 $c$、$c'$、$C_3$、$C_4$ 为一些绝对常数。令 $M_Y := \mathbb{E}(Y)(Y - \mathbb{E}(Y))^T + (Y - \mathbb{E}(Y))\mathbb{E}(Y)^T$。显然，向量 $\mathbb{Z}_1$、$\mathbb{Z}_2$，...，$\mathbb{Z}_n \in \mathbb{R}^p$ 相互独立。令 $\mu$ 如式 (71) 所示。于是，由引理 I.1 可得,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\mathbb{E}_4) := \mathbb{P}\left( \max_{u \in \{-1,1\}^n} \sum_{i=1}^n u_i \,\langle\, \mathbb{Z}_i, \mu \,\rangle \right) &\geq \frac{1}{2} C_4 n (C_0 \max_i \|R_i \mu\|_2) \\ \leq \quad 2^n 2 \exp\left( -\frac{c' n^2 (C_0 \max_i \|R_i\mu\|_2)^2}{C (C_0 \max_i \|R_i\mu\|_2)^2 n} \right) &\leq 2\exp(-c'n). \end{aligned} \tag{126}$$

因此，在事件 $\mathbb{E}_4^c$发生时,

$$\sum_i \left| \,\langle\, \mathbb{Z}_i, \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \,\rangle\, \right| \quad < \quad \frac{1}{2} C_4 (C_0 \max_i \|R_i\mu\|_2) n \sqrt{p\gamma}.$$

构造一个 $\mathbb{S}^{n-1}$的 $\varepsilon$-网 $\Pi_n$，其中 $\varepsilon = 1/3$ 且 $|\Pi_n| \leq (1+2/\varepsilon)^n$。对于适当选取的常数$C_3$，由引理 I.1 可得,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\mathbb{E}_3) \quad &:= \quad \mathbb{P}\left( \exists q \in \Pi_n, \left| \sum_{i=1}^n q_i \,\langle\, \mathbb{Z}_i, \mu \,\rangle \right| \geq \frac{1}{2} C_3 (C_0 \max_i \|R_i\mu\|_2) \sqrt{n} \right) \\ &\leq \quad 9^n 2 \exp\left( -\frac{c' n (C_0 \max_i \|R_i\mu\|_2)^2}{C (C_0 \max_i \|R_i\mu\|_2)^2} \right) \leq 2\exp(-c'n). \end{aligned}$$

此外，通过标准逼近论证，在事件 $\mathbb{E}_3^c$上，我们有:

$$\sup_{q \in \mathbb{S}^{n-1}} \sum_{i=1}^n q_i \,\langle\, \mathbb{Z}_i, \mu \,\rangle \quad \leq \quad \frac{1}{1-\varepsilon} \sup_{q \in \Pi_n} \sum_{i=1}^n q_i \,\langle\, \mathbb{Z}_i, \mu \,\rangle \; \leq C_3 C_0 (\max_i \|R_i\mu\|_2) \sqrt{n}.$$

由引理 5.4，在事件 $\mathbb{E}_4^c \cap \mathbb{E}_3^c$ 上,

$$\begin{aligned} \|M_Y\|_{\infty \to 1} \quad &\leq \quad 8 w_1 w_2 (n-1) \sum_{i=1}^n \left| \,\langle\, \mathbb{Z}_i, \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \,\rangle\, \right| \leq C_4 n (n-1) (C_0 \max_i \|R_i\mu\|_2) \sqrt{p\gamma} \\ \|M_Y\|_2 \quad &\leq \quad 4\sqrt{w_1 w_2 n} \sup_{q \in \mathbb{S}^{n-1}} \left| \sum_{i=1}^n q_i \,\langle\, \mathbb{Z}_i, \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \,\rangle\, \right| \leq 2 C_3 (C_0 \max_i \|R_i\mu\|_2) n \sqrt{p\gamma}. \end{aligned}$$

□

## I.3 引理 I.1 的证明

证明。 记为 $\mu = (\mu^{(1)} - \mu^{(2)})/\sqrt{p\gamma} \in \mathbb{S}^{p-1}$。首先，根据定义，对于每个$j \in \mathcal{C}_i, i = 1,2$，有 $\mathbb{Z}_j = H_i W_j$; 参见式 (13)。因此， $\mathbb{Z}_j$是一个次高斯随机向量，其边缘 $\psi_2$范数满足式 (14) 和 (15) 所述的界，且

$$\| \langle \mathbb{Z}_j, \mu \rangle \|_{\psi_2} \;:=\; \| \langle H_i W_j, \mu \rangle \|_{\psi_2} \leq \|W_j\|_{\psi_2} \|R_i \mu\|_2 \leq C_0 \|R_i \mu\|_2 . \tag{127}$$

其中， $W_j \in \mathbb{R}^m$ 是一个满足 $\|W_j\|_{\psi_2} \leq C_0$ 的零均值、各向同性次高斯随机向量；因此，(123) 成立，且对所有 $j \in \mathcal{C}_i$,

$$\left\| \langle \mathbb{Z}_j, \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \rangle \right\|_{\psi_2} \;\leq\; C_0 \sqrt{p\gamma} \|R_i \mu\|_2 \quad \text{and} \quad R_i = H_i^T. \tag{128}$$

首先，由 $\mathbb{Z}_j$， $\forall j$ 的独立性可得,

$$\begin{aligned}
\forall q \in \mathbb{S}^{n-1}, \quad \left\| \sum_{i=1}^n q_i \langle \mathbb{Z}_i, \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \rangle \right\|_{\psi_2}^2 &\leq C \sum_{i=1}^n q_i^2 \left\| \langle \mathbb{Z}_i, \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \rangle \right\|_{\psi_2}^2 \\
&\leq Cp\gamma (C_0 \max_i \|R_i \mu\|_2)^2 \\
\text{and for } \; u_i \in \{-1, 1\}, \quad \left\| \sum_{i=1}^n u_i \langle \mathbb{Z}_i, \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \rangle \right\|_{\psi_2}^2 &\leq C \sum_{i=1}^n \left\| \langle \mathbb{Z}_i, \mu^{(1)} - \mu^{(2)} \rangle \right\|_{\psi_2}^2 \\
&\leq Cnp\gamma (C_0 \max_i \|R_i \mu\|_2)^2.
\end{aligned}$$

然后，根据次高斯尾界可得 (124) 和 (125)，例如命题 2.6.1 和 2.5.2 (i) [42]。另见引理 6.2 的证明。□

## I.4 定理 7.3 的证明

本节余下部分将证明定理 7.3。该证明具有独立研究价值。我们根据定义 2.3 生成 $\mathbb{Z}$：

$$\mathbb{Z}_j \;=\; H_j W_j \in \mathbb{R}^p \quad \text{and hence } \; \mathbb{Z} = \sum_{j=1}^n e_j W_j^T H_j^T = \sum_{j=1}^n \operatorname{diag}(e_j) \mathbb{W} H_j^T$$

其中 $W_1^T, \ldots, W_n^T \in \mathbb{R}^m$是相互独立、零均值、各向同性的 $\mathbb{W} = (w_{jk})$ 行向量。我们假设坐标 $w_{jk}$ 也相互独立，且 $\max_{j,k} \|w_{jk}\|_{\psi_2} \leq C_0$。在本节中，令 $\mathrm{vec}\{\mathbb{Z}\} = \mathrm{vec}\{\mathbb{X} - \mathbb{E}\mathbb{X}\}$ 表示将矩阵 $\mathbb{Z}$ 的各列拼接成一个长度为 $np$的长向量。用 $\otimes$ 表示张量积。回忆一下， $e_1, \ldots, e_n$是 $\mathbb{R}^n$的标准基。

证明 定理 7.3。根据定义 2.3,

$$\begin{aligned}
\mathrm{vec}\{\mathbb{Z}\} \;&=\; \sum_{j=1}^n \mathrm{vec}\left\{ \operatorname{diag}(\mathrm{e_j}) \mathbb{W} \mathrm{H_j^T} \right\} = \sum_{\mathrm{j}=1}^{\mathrm{n}} \mathrm{H_j} \otimes \operatorname{diag}(\mathrm{e_j}) \mathrm{vec}\{\mathbb{W}\} \\
&=:\; L \mathrm{vec}\{\mathbb{W}\} \in \mathbb{R}^{\mathrm{np}} \quad \text{where } \; \mathrm{L} := \sum_{\mathrm{j}=1}^{\mathrm{n}} \mathrm{H_j} \otimes \operatorname{diag}(\mathrm{e_j}) \in \mathbb{R}^{\mathrm{np} \times \mathrm{mn}}
\end{aligned} \tag{129}$$

另一方面，对于 $\mathbb{W} \in \mathbb{R}^{n\times m}$, $\mathbb{Z}_j = H_j W_j$ ，我们有，因此

$$\begin{aligned}
\mathbb{Z}^T &= [\mathbb{Z}_1, \ldots, \mathbb{Z}_n] = \sum_{j=1}^{n} \mathbb{Z}_j \otimes e_j^T = \sum_{j=1}^{n} H_j \mathbb{W}^T \mathrm{diag}(e_j) \ \text{ and hence} \\
\mathrm{vec}\left\{ \mathbb{Z}^{\mathrm{T}} \right\} &= \mathrm{vec}\left\{ \sum_{\mathrm{j=1}}^{\mathrm{n}} \mathrm{H_j} \mathbb{W}^{\mathrm{T}} \mathrm{diag(e_j)} \right\} = \sum_{\mathrm{j=1}}^{\mathrm{n}} \mathrm{vec}\left\{ \mathrm{H_j} \mathbb{W}^{\mathrm{T}} \mathrm{diag(e_j)} \right\} \\
&= \sum_{j=1}^{n} (\mathrm{diag}(e_j) \otimes H_j) \mathrm{vec}\left\{ \mathbb{W}^{\mathrm{T}} \right\} =: \mathrm{Rvec}\left\{ \mathbb{W}^{\mathrm{T}} \right\} \qquad (130)
\end{aligned}$$

那么存在一些置换矩阵 $P, Q$ ，使得

$$L = \sum_{i=1}^{n} H_i \otimes \mathrm{diag}(e_i) \ = \ P^T \big( \sum_{i=1}^{n} \mathrm{diag}(e_i) \otimes H_i \big) Q =: P^T R Q \qquad (131)$$

其中 $H_j H_j^T$ 表示每个行向量 $\mathbb{Z}_j$, $j \in [n]$ 的协方差矩阵。

现在我们通过显式构造证明 (131)。众所周知，存在一些置换矩阵 $P, Q$ ，使得

$$\begin{aligned}
\mathrm{vec}\left\{ \mathbb{Z}^{\mathrm{T}} \right\} &= P \mathrm{vec}\left\{ \mathbb{Z} \right\} \ \text{ and } \ \mathrm{vec}\left\{ \mathbb{W}^{\mathrm{T}} \right\} = \mathrm{Q vec}\left\{ \mathbb{W} \right\} \qquad (132) \\
\text{and hence by (129), } \mathrm{vec}\left\{ \mathbb{Z}^{\mathrm{T}} \right\} &= P \mathrm{vec}\left\{ \mathbb{Z} \right\} = \mathrm{PL vec}\left\{ \mathbb{W} \right\}
\end{aligned}$$

另一方面，由 (130) 和 (132) 可得

$$\mathrm{vec}\left\{ \mathbb{Z}^{\mathrm{T}} \right\} \ = \ R \mathrm{vec}\left\{ \mathbb{W}^{\mathrm{T}} \right\} = \mathrm{RQ vec}\left\{ \mathbb{W} \right\}.$$

这表明，对于 $P^T = P^{-1}$,

$$PL = RQ \quad \text{and hence} \ \ L = P^T R Q$$

因此 (131) 确实成立。参见引理 4.3.1 和推论 4.3.10 [23]。

首先，我们将二次型改写如下：对于任意矩阵 $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^n$,

$$\begin{aligned}
\left| \sum_{i=1}^{n} \sum_{j\neq i}^{n} \langle \mathbb{Z}_i, \mathbb{Z}_j \rangle \, a_{ij} \right| &= \left| \sum_{i=1}^{n} \sum_{j\neq i}^{n} a_{ij} \sum_{k=1}^{p} z_{ik} z_{jk} \right| \\
&= \mathrm{vec}\left\{ \mathbb{Z} \right\}^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathrm{A}} \mathrm{vec}\left\{ \mathbb{Z} \right\} = \mathrm{vec}\left\{ \mathbb{W} \right\}^{\mathrm{T}} \mathrm{L}^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathrm{A}} \mathrm{L vec}\left\{ \mathbb{W} \right\},
\end{aligned}$$

其中， $\widetilde{A}$ 是一个分块对角矩阵，其 $\mathsf{diag}(\widetilde{A})$ 为 $= 0$，且主对角线上有 $p$ 个相同的块 $\widetilde{A}^k = \mathsf{offd}(A)$ $\forall k \in [p]$，每个块的大小为 $n \times n$ ；其中 $\|\mathsf{offd}(A)\|_2 \leq \|A\|_2 + \|\mathsf{diag}(A)\|_2 \leq 2\|A\|_2$。现在我们计算

$$\begin{aligned}
\left\| L^T \widetilde{A} L \right\|_2 &\leq \left\| \sum_{i=1}^{n} H_i \otimes \mathrm{diag}(e_i) \right\|_2^2 \left\| \widetilde{A} \right\|_2 \leq \max_i \|H_i\|_2^2 \left\| \widetilde{A} \right\|_2 \\
\text{where } \|L\|_2 &= \|R\|_2 = \left\| \sum_{i=1}^{n} \mathrm{diag}(e_i) \otimes H_i \right\|_2 \leq \max_i \|H_i\|_2 \\
\left\| L^T \widetilde{A} L \right\|_F &\leq \|L\|_2^2 \left\| \widetilde{A} \right\|_F \leq \max_i \|H_i\|_2^2 \left\| \widetilde{A} \right\|_F \leq \max_i \|H_i\|_2^2 \sqrt{p} \, \|A\|_F ,
\end{aligned}$$

其中，我们利用分块对角矩阵的性质来处理 $R = \sum_{i=1}^{n} \mathrm{diag}(e_i) \otimes H_i$，这也称为对 $H_i$，$i = 1, \ldots, n$ 取直和。

因此，对于任意 $t > 0$，根据 Hanson-Wright 不等式（定理 G.3），

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}\left(\left|\mathrm{vec}\{\mathbb{Z}\}^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathrm{A}} \mathrm{vec}\{\mathbb{Z}\}\right| > t\right) = \mathbb{P}\left(\left|\mathrm{vec}\{\mathbb{W}\}^{\mathrm{T}} \mathrm{L}^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathrm{A}} \mathrm{L} \mathrm{vec}\{\mathbb{W}\}\right| > t\right) \\
&\quad \leq \quad 2\exp\left(-c\min\left(\frac{t^2}{C_0^4(\max_i \|H_i\|_2^4)\left\|\widetilde{A}\right\|_F^2}, \frac{t}{C_0^2(\max_i \|H_i\|_2^2)\left\|\widetilde{A}\right\|_2}\right)\right) \\
&\quad \leq \quad 2\exp\left(-c\min\left(\frac{t^2}{C_0^4(\max_i \|H_i\|_2^4) p \|A\|_F^2}, \frac{t}{C_0^2(\max_i \|H_i\|_2^2)\|A\|_2}\right)\right).
\end{aligned}$$

因此，(75) 成立。□

## I.5 引理 I.2 的证明

我们通过允许每个行向量具有其自身的协方差 $A_i = H_i H_i^T$，以最一般的形式证明该引理，其中 $A_i \in \mathbb{R}^{p\times p}$ 是如 (23) 所示行向量 $\mathbb{Z}_j \in \mathbb{R}^p$ 对应于 $j \in \mathcal{C}_i$ 的协方差。现在我们还引入半正定矩阵 $M := H_i^T H_i \succeq 0 \in \mathbb{R}^{m\times m}$。首先，我们对每个各向异性向量 $\mathbb{Z}_j^T = W_j^T H_i^T \in \mathbb{R}^p$ 的 $\ell_2$ 范数进行界定，其中 $W_j \in \mathbb{R}^m$，且 $j \in \mathcal{C}_i$

$$\begin{aligned}
\|\mathbb{Z}_j\|_2^2 &= \langle H_i W_j, H_i W_j \rangle = W_j^T H_i^T H_i W_j =: W_j^T M W_j \qquad (133)\\
\text{where} \quad \mathrm{tr}(H_i H_i^T) &= \mathrm{tr}(M) = \|H_i\|_F^2 \leq (m \wedge p)\|H_i\|_2^2,
\end{aligned}$$

其中 $W_j$ 是具有独立、零均值坐标的各向同性次高斯随机向量，并且在 (133) 中，我们使用了 $W_j$ 的各向同性性质。现在显然，

$$\|M\|_F = \left\|H_i^T H_i\right\|_F \leq \|H_i\|_2 \|H_i\|_F \quad \text{and} \quad \|M\|_2 = \|H_i\|_2^2; \qquad (134)$$

因此，对于任意 $t > 0$,

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}\left(\left|\|\mathbb{Z}_j\|_2^2 - \mathbb{E}\|\mathbb{Z}_j\|_2^2\right| > t\right) = \mathbb{P}\left(\left|\|H_i W_j\|_2^2 - \mathbb{E}\|H_i W_j\|_2^2\right| > t\right) \\
&\quad = \quad \mathbb{P}\left(\left|W_j^T M W_j - \|H_i\|_F^2\right| > t\right) \leq 2\exp\left(-c\min\left(\frac{t^2}{C_0^4\|M\|_F^2}, \frac{t}{C_0^2\|M\|_2}\right)\right) \\
&\quad \leq \quad 2\exp\left(-c\min\left(\frac{t^2}{C_0^4\|H_i\|_2^2\|H_i\|_F^2}, \frac{t}{C_0^2\|H_i\|_2^2}\right)\right),
\end{aligned}$$

因此，在 $H_i = I$ 的情况下，我们也可以得到式 (97) 中的结果。 □

## I.6 定理 7.2 的证明

首先，我们选择 $t_{\mathrm{diag}} = C(\max_i \|H_i\|_2^2)C_0^2(\sqrt{np} \vee n)$ 并完成计算。首先，根据引理 I.2,

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}\left(\max_i \max_{j\in\mathcal{C}_i}\left|\|\mathbb{Z}_j\|_2^2 - \mathbb{E}\|\mathbb{Z}_j\|_2^2\right| > t_{\mathrm{diag}}\right) =: \mathbb{P}(\mathbb{E}_0) = \\
&\leq \quad 2n\exp\left(-c\min\left(\frac{(\max_i \|H_i\|_2^4)np}{\max_i(\|H_i\|_2^2\,\|H_i\|_F^2)}, \frac{(\max_i \|H_i\|_2^2)n}{\max_i(\|H_i\|_2^2)}\right)\right) \\
&\leq \quad 2n\exp\left(-c\min\left(\frac{np}{(m\wedge p)}, n\right)\right) \leq 2\exp(-c'n),
\end{aligned}$$

其中，对于 $p\times m$ 矩阵 $H_i$，我们有 $\|H_i\|_F \leq \sqrt{p\wedge m}\|H_i\|_{2^\circ}$ 我们使用定理 7.3 来界定非对角部分。因此，对于所有 $q,\ h\in\mathbb{S}^{n-1}$, $A(q,\ h) := \mathrm{offd}(q\otimes h) = (a_{ij})$,

$$\|A(q,h)\|_2 \leq \|A(q,h)\|_F \leq 1$$

令 $t_{\mathrm{offd}} = C_{\mathrm{offd}}C_0^2(\max_i \|H_i\|_2^2)(\sqrt{pn}\vee n)$。对于 $q,\ h\in\mathbb{S}^{n-1}$ 和 $A(q,\ h)$ 的一个特定实现，其中 $=(a_{ij})$ 如上所定义，由定理 7.3 可得,

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}\left(\left|\sum_{i=1}^n\sum_{j\neq i}^n \langle\,\mathbb{Z}_i,\mathbb{Z}_j\,\rangle\, q_ih_j\right| > t_{\mathrm{offd}}\right) = \mathbb{P}\left(\sum_{i=1}^n\sum_{j\neq i}^n \langle\,\mathbb{Z}_i,\mathbb{Z}_j\,\rangle\, a_{ij} > t_{\mathrm{offd}}\right) \\
&\leq \quad 2\exp\left(-c\min\left(\frac{C_0^4(\max_i\|H_i\|_2^4)(\sqrt{pn}\vee n)^2}{C_0^4(\max_i\|H_i\|_2^4)p\,\|A(q,h)\|_F^2}, \frac{C_0^2(\max_i\|H_i\|_2^2)(\sqrt{pn}\vee n)}{C_0^2(\max_i\|H_i\|_2^2)\,\|A(q,h)\|_2}\right)\right) \\
&\leq \quad 2\exp\left(-cn\min(C_1^2, C_1)\right) \leq 2\exp(-cn)
\end{aligned}$$

对于某个充分大的 s 常数 $C_1$ 和 $c > 4\ln 9$。令 $\mathcal{N}$ 如引理 G.1 中所定义 .

对所有 $|\mathcal{N}|^2 \leq 9^{2n}$ 对 $q,\ h\in\mathcal{N}$ 取并集界，其中 $\mathbb{S}^{n-1}$ 的 $\varepsilon$-网，因此我们得出

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}\left(\max_{q,h\in\mathcal{N}}\left|\sum_{i=1}^n\sum_{j\neq i}^n q_ih_j\,\langle\,\mathbb{Z}_i,\mathbb{Z}_j\,\rangle\,\right| > t_{\mathrm{offd}}\right) =: \mathbb{P}(\mathbb{E}_8) \\
&\leq \quad |\mathcal{N}|^2\cdot 2\exp\left(-cn\min(C_1^2,C_1)\right) \leq 2\times 9^{2n}\exp\left(-cn\min(C_1^2,C_1)\right) \\
&\leq \quad 2\exp\left(-cn + 2n\ln 9\right) = 2\exp\left(-c_3n\right)
\end{aligned}$$

可以证 明，在 $\mathbb{E}_8^c$ 下，通过标准逼近论证可得 (74) 成立:

$$\begin{aligned}
\left\|\mathrm{offd}(\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T)\right\|_2 \quad &= \quad \sup_{q\in\mathbb{S}^{n-1}}\sum_{i=1}^n\sum_{j\neq i}^n q_iq_j\,\langle\,\mathbb{Z}_i,\mathbb{Z}_j\,\rangle\, \leq \frac{1}{(1-2\varepsilon)}\sup_{q,h\in\mathcal{N}}\sum_{i=1}^n\sum_{j\neq i}^n q_ih_j\,\langle\,\mathbb{Z}_i,\mathbb{Z}_j\,\rangle \\
&\leq \quad 2(\max_i\|H_i\|_2^2)C_1C_0^2(\sqrt{np}\vee n) \qquad (135)
\end{aligned}$$

例如，参见练习 4.4。3 [42]。因此，在事件 $\mathbb{E}_8^c\cap\mathbb{E}_0^c$ 上，我们有

$$\begin{aligned}
\left\|\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T - \mathbb{E}(\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T)\right\|_2 \quad &\leq \quad \left\|\mathrm{diag}(\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T) - \mathbb{E}\mathrm{diag}(\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T)\right\|_{\max} + \left\|\mathrm{offd}(\mathbb{Z}\mathbb{Z}^T)\right\|_2 \\
&\leq \quad C'C_0^2(\max_i\|H_i\|_2^2)(\sqrt{np}\vee n)
\end{aligned}$$

此外，在调整常数后，我们有 $\mathbb{P}(\mathbb{E}_8^c\cap\mathbb{E}_0^c) \geq 1 - 2\exp(-cn)$。□

# 参考文献

[1] Abbe, E.（2018）。社群检测与随机块模型：最新进展。机器学习研究杂志 18 1–86。[2] Abbe, E., Fan, J.和 Wang, K.（2022）。PCA 与谱聚类的 $\ell_p$ 理论。Annals of Statistics 50 2359–2385。[3] Achlioptas, D. 和 McSherry, F.（2005）。关于分布混合的谱学习。载于第 18 届年度 COLT 会议论文集。（版本见 http://www.cs.ucsc.edu/optas/papers/）。[4] Aloise, D., Deshpande, A., Hansen, P. 和 Popat, P.（2009）。欧几里得平方和聚类的 NP困难性。机器学习 75 245–248。[5] Arora, S. 和 Kannan, R.（2001）。学习任意高斯混合。载于第 33 届 ACM 计算理论研讨会论文集。[6] Awasthi, P., Bandeira, A. S., Charikar, M., Krishnaswamy, R., Villar, S.和Ward, R.（2015）。松弛即可，无需舍入：聚类公式的整数性。载于 2015 年理论计算机科学创新会议论文集。[7] Balakrishnan, S., Wainwright, M. J.和 Yu, B.（2017）。期望最大化算法的统计保证：从总体到基于样本的分析。《统计年鉴》45 77–120。[8] Banks, J., Moore, C., Vershynin, R., Verzelen, N. 和 Xu, J.（2018）。聚类、稀疏主成分分析和子矩阵定位中的信息论界与相变。IEEE信息论汇刊 64 4872–4994。[9] Blum, A., Coja-Oghlan, A., Frieze, A. 和 Zhou, S.（2009）。利用宽数据区分总体：谱分析。电子统计学杂志 3 76–113。[10] Bunea, F., Giraud, C., Luo, X., Royer, M. 和 Verzelen, N.（2020）。模型辅助的变量聚类：极小极大最优恢复与算法。《统计年鉴》48 111–137。[11] Chaudhuri, K., Halperin, E., Rao, S.和 Zhou, S.（2007）。有限数据下总体分层结构的严格分析。载于第 18 届 ACM-SIAM 离散算法研讨会论文集。[12] Chen, X. 和 Yang, Y.（2021）。希尔伯特空间中的 Hanson-Wright 不等式及其在 $K$-均值聚类非欧几里得数据中的应用。Bernoulli 27 586–614。[13] Chrétien, S., Cucuringu, M., Lecué, G. 和 Neirac, L.（2021）。利用半定规划进行学习：基于不动点分析和超额风险曲率的统计界。机器学习研究杂志 22。[14] Dasgupta, S. 和 Schulman, L. J.（2000）。高斯混合的两轮期望最大化算法变体。载于第 16 届人工智能中的不确定性会议（UAI）论文集。[15] Drineas, P., Frieze, A., Kannan, R., Vempala, S. 和 Vinay, V.（2004）。通过奇异值分解对大型图进行聚类。机器学习 9–33。[16] Fei, Y. 和 Chen, Y.（2018）。次高斯混合模型半定规划松弛的隐藏整数性。载于第 31 届学习理论会议论文集。

[17] Fei, Y. 和 Chen, Y. (2021). 次高斯混合模型半定规划松弛的隐藏整数性与半随机稳健性。预印本。[18] Fiedler, M. (1973). 图的代数连通度。《捷克斯洛伐克数学杂志》23 298–305. URL http://eudml.org/doc/12723[19] Frieze, A. M. 和 Kannan, R. (1999). 矩阵的快速近似及其应用。《组合数学》19 175–200.[20] Giraud, C.和 Verzelen, N. (2019). 松弛 K 均值聚类的部分恢复界。《数理统计与学习》1 317–374.[21] Goemans, M. 和 Williamson, D. (1995). 利用半定规划改进最大割与可满足性问题的近似算法。《ACM 杂志》42 1115–1145.[22] Guedon, O. 和 Vershynin, R. (2016). 通过 Grothendieck 不等式检测稀疏网络中的社群。《概率论及相关领域》165 1025–1049.[23] Horn, R. 和 Johnson, C.(1991). 《矩阵分析专题》。Cambridge University Press；再版。[24] Hornstein, M., Fan, R., Shedden, K. 和 Zhou, S. (2019). 无重复矩阵变量数据的均值与协方差联合估计。《美国统计学会会刊》（理论与方法）114 682–696.[25] Iguchi, T., Mixon, D. G., Peterson, J. 和 Villar, S. (2017). 大概可认证正确的 k-means 聚类。Mathematical Programming 165 605–642.[26] Kalai, A. T., Moitra, A.和 Valiant, G. (2010). 高效学习两个高斯分布的混合。载于第四十二届 ACM 计算理论研讨会论文集。ACM.[27] Kannan, R., Salmasian, H.和 Vempala, S. (2005). 一般混合模型的谱方法。载于第 18 届年度 COLT 论文集。[28] Kumar, A. 和 Kannan, R. (2010). 基于谱范数与 k-means 算法的聚类。载于 2010 年 IEEE 第 51 届计算机科学基础年度研讨会论文集。IEEE Computer Society.[29] Li, X., Li, Y., Ling, S., Strohmer, T. 和 Wei, K.(2020). 物以类聚： $k$-均值、邻近性与锥规划。Mathematical Programming 179 295–341.[30] Löffler, M., Zhang, A. Y. 和 Zhou, H. H. (2021). 高斯混合模型中谱聚类的最优性。《统计年鉴》49 2506 – 2530.[31] Mixon, D. G., Villar, S. 和 Ward, R. (2017). 通过半定规划对次高斯混合进行聚类。《信息与推断：IMA 期刊》6 389–415.[32] Ndaoud, M.(2022). 双成分高斯混合模型中的尖锐最优恢复。Annals of Statistics 50 2096–2126.

[33] Overton, M. 和 Womersley, R.(1993). 对称矩阵最大特征值之和最小化的最优性条件与对偶理论。Mathematical Programming 62 321–357.[34] Patterson, N., Price, A. 和 Reich, D. (2006). 群体结构与特征分析。PLoS Genet 2. DOI:10.1371/journal.pgen.0020190.
[35] Peng, J. 和 Wei, Y. (2007). 通过半定规划近似 K 均值型聚类。SIAM Journal on Optimization 18 186–205.[36] Peng, J. 和 Xia, Y. (2005). K 均值型聚类的新理论框架。载于 Foundations and Advances in Data Mining。Springer.[37] Price, A., Patterson, N., Plenge, R., Weinblatt, M., Shadick, N. 和 Reich, D.(2006). 主成分分析校正全基因组关联研究中的分层结构。Nature Genetics 38 904–909.[38] Rohe, K., Chatterjee, S. 和 Yu, B. (2011). 谱聚类与高维随机块模型。Annals of Statistics 39 1878–1915.[39] Royer, M. (2017). 通过半定规划进行自适应聚类。Advances in Neural Information Processing Systems 1795–1803.[40] Rudelson, M. 和 Vershynin, R. (2013). Hanson-Wright 不等式与次高斯集中。Electronic Communications in Probability 18 1–9.[41] Vempala, V. 和 Wang, G. (2002). 一种学习分布混合的谱算法。载于第 43 届 IEEE FOCS 论文集。[42] Vershynin, R.(2018).《高维概率：数据科学中的导论与应用》。Cambridge University Press.[43] Yu, Y., Wang, T.和 Samworth, R. (2015). 一个适用于统计学家的 Davis-Kahan 定理变体。Biometrika 102 315–323.[44] Zha, H., He, X., Ding, C., Simon, H. 和 Gu, M. (2002). k-均值聚类的谱松弛。载于 Advances in Neural Information Processing Systems 14。MIT Press.[45] Zhou, S. (2006). 路由、不相交路径与分类。博士论文，卡内基梅隆大学，匹兹堡，宾夕法尼亚州。