arXiv:2301.00793v1 [stat.ML] 2 Jan 2023

因果推断（C-inf）——最坏情况典型相变的闭式表达

Agostino Capponi * Mihailo Stojnic †哥伦比亚大
学工业工程与运筹学系，纽约州纽约市 10027，美国

摘要

本文建立了因果推断（C-inf）与低秩恢复（LRR）之间严格的数学联系。借助 [46,48,50]中发展的随机对偶理论（RDT）概念，以及与自由概率论相关的新颖数学策略，我们得到了精确且显式的典型（可实现）最坏情况相变（PT）。这些相变精确地区分了通过低秩恢复进行因果推断可行与不可行的情形。我们通过数值实验补充数学分析，验证了相变现象的理论预测，并进一步表明，即使样本量相当小，两者也十分吻合。我们得到了相应相变的简洁闭式表达，揭示了目标因果推断矩阵的低秩性与处理时间之间的直接关系。因此，我们的结果可用于确定因果推断典型适用范围。

索引词：因果推断；随机对偶理论；算法；矩阵补全；稀疏性。

1 引言

该因果推断（C-inf）领域研究如何设计方法，以估计面板数据情境下的因果效应；在这些情境中，部分单位会在某些时期接受处理。其目标是估计反事实结果，即假设某一时期未对这些单位实施处理时，它们会出现的结果。

因果推断在决策中发挥着关键作用，对于商业决策、网络设计、医学等诸多领域都至关重要。它能够帮助回答以下问题：如果未使用新的拥塞控制算法，数据中心的延迟会如何变化？如果没有给患者服用新药，她的收缩压会是多少？

估计反事实的问题出现在许多学科中，包括经济学、金融、健康和社会科学（例如，参见 [2, 16, 18, 19, 37, 38, 58]），以及计算机科学（例如，参见 [30–33]）。通过数字服务和智能传感器获取大数据的渠道日益增多，使得我们能够设计高效的算法技术来解决反事实估计中的这些基本问题。

计量经济学和社会科学领域提出了三种主要的因果推断方法：1）无混杂性（参见 [19, 37]）；2）合成控制（参见 [1, 2, 16]）；以及 3）矩阵补全（参见 [3, 4, 20]。矩阵补全方法以 [9, 11, 34] 的奠基性工作为基础。或许出人意料的是，这三种方法都高度依赖数学、统计学以及最终的算法概念，而这些概念在信息论中有着深厚的根基。我们的工作属于第三类研究，在数学上与 矩阵补全（MC）问题相似。

我们的主要贡献是严谨地建立了基于观察性数据的因果推断（C-inf）与压缩感知中的低秩恢复（LRR）问题之间的联系。在方法上，我们融合了随机对偶理论（RDT）中的概念，该理论由 [46, 48, 50] 提出，并结合了新颖的数学

*电子邮箱： ac3827@columbia.edu
†电子邮箱： flatoyer@gmail.com

策略，这些策略与自由概率理论相关，并成功得出了精确且显式的典型（且可实现的）最坏情况相变（PT）。这些相变精确划分了参数空间：在样本量较大时，哪些区域可以通过低秩恢复（LRR）完美估计反事实，哪些区域则无法做到。我们的数值研究进一步印证了理论预测，表明即使样本量相当小，理论与数值模拟也高度吻合。

2 因果推断的数学基础

为将我们的贡献置于恰当的背景下，我们首先展示因果推断（C-inf）$\leftrightarrow$ 矩阵补全（MC）之间的明确联系。

为介绍 C-inf 核心概念最基本的数学描述，我们采用标准的矩阵补全（MC）术语。众所周知，矩阵补全问题属于所谓的低秩恢复问题（LRR），而低秩恢复问题本身又属于更广泛的所谓结构化恢复（SR）问题。对结构化恢复问题最一般的描述，始于假设我们能够获取观测向量 $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$，其定义如下

$$\mathbf{y}_i = f_i(A_{i,:}\mathbf{x}_{sol}), \tag{1}$$

其中，$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 是已知系统矩阵（其行是 $A_{i,:}, 1 \le i \le m$），$\mathbf{x}_{sol} \in \mathbb{R}^n$ 是未知向量，而 $f_i(\cdot): \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ 是已知实函数。在此处我们关注的处理方法中，函数$f_i(\cdot)$将被假设为恒等线性函数，即假设 $f_i(x) = x$。随后，结构化恢复利用 $\mathbf{x}_{sol}$ 先验已知的结构，最终将其恢复出来。在实践中，这通常归结为寻找高效的算法设计，以观测向量 $\mathbf{y}$ 和系统矩阵 A 为输入，并成功输出 $\mathbf{x}_{sol}$ 或与其足够接近的近似值。此外，通常认为高效算法应当最好能够被证明可在多项式时间内运行。SR 问题的各种形式通常因 $\mathbf{x}_{sol}$ 所具有的结构以及系统矩阵 A的结构而异。同理，这些形式可能达到的成功程度（或实用性）通常取决于用于求解问题的算法在理论和实践上的最终能力。

结构化恢复问题在过去半个多世纪里一直是广泛研究的主题，其理论和实践的各个方面都涌现出了许多优美的成果。然而，大约 20 年前压缩感知（CS）的出现，几乎凭一己之力彻底改变了人们对这些问题及相关研究的看法。随着这种观念的转变，人们对结构化恢复的兴趣，以及对其重要性、普及程度和最终用途的认识，都达到了前所未有的高度。当然，很难准确指出压缩感知迅速取得成功的秘诀，但其整体概念上的简洁性或许起了一定作用。有关 CS 的提出、简洁性及后续发展，详见例如 [7,8,13,14,44,45,47–50,52]。与此同时，严格来说，CS 并非我们在此关注的主要主题，因此在继续讨论之前，我们只简要提及：它基本上假设采用上述结构化恢复设定，并以$\mathbf{x}_{sol}$ 的稀疏性作为其底层结构。

2.1 低秩恢复（低秩表示）

虽然压缩感知中常见的数学问题通常与本文的核心数学问题并不完全相同，但上述低秩恢复（LRR）问题则与之相符。为了介绍低秩恢复问题，我们首先指出，上文针对一般结构化恢复所述的内容几乎都适用于低秩恢复场景。事实上，与标准压缩感知设置相比，只有一个关键区别：在低秩恢复中，$\mathbf{x}_{sol}$（在压缩感知语境中是一个稀疏向量）将被视为向量化的未知矩阵 X_{sol}，因此施加的先验已知结构是 X_{sol} 的低秩性。当然，这无非就是 X_{sol} 的奇异值向量的稀疏性。换言之，在压缩感知中，未知向量 $\mathbf{x}_{sol}$ 本身是稀疏的；而在低秩恢复中，未知矩阵 X_{sol} 的奇异值向量是稀疏的。

用更数学化的语言来说，低秩恢复可以描述如下。首先，对矩阵 X_{sol} 进行上述向量化处理

$$\mathbf{x}_{sol} = \text{vec}(X_{sol}), \tag{2}$$

其中，vec(·) 将其矩阵参数的各列依次堆叠（从第一列开始）为一个列向量。假设 $X_{sol} \in \mathbb{R}^{n\times n}$，经过简单的维度调整即可得到 $A \in \mathbb{R}^{m\times n^2}$。低秩性（rank($X_{sol}$) $= k \leq n$）及相应的稀疏性通过奇异值分解（SVD）来施加

$$X = U\Sigma V^T, \tag{3}$$

其中

$$\sigma(X) \triangleq \text{diag}(\Sigma) \quad \text{and} \quad U^TU = I_{n\times n} \quad \text{and} \quad V^TV = I_{n\times n}, \tag{4}$$

其中，$I_{n\times n}$ 是大小为 $n \times n$ 的单位矩阵，而 diag(·) 是从矩阵参数中提取对角元素并将其放入列向量的算子。上下文清楚时，我们将简写为 σ，而不写 $\sigma(X)$。此外，$\sigma_i(X)$ 表示 $\sigma(X)$ 的第 i 个分量（通常可简写为 σ_i）。众所周知，$\sigma \in \mathbb{R}^n$ 的元素恰好是上述 X 的奇异值，而这些元素中非零元素的数量恰好是 X_{sol} 的秩。这一点或许显而易见，但为确保表述清晰，我们指出，在数学文献中关于奇异值分解的典型论述里，式（4）中常用 $I_{k\times k}$ 替代 $I_{n\times n}$。换言之，常见的做法是令相应单位矩阵的大小为 $k \times k$，而不是 $n \times n$。我们之所以这样选择，是为了确保低秩表示与压缩感知之间完全平行。基本上，这一选择使奇异值构成的向量明显呈现稀疏性（按此定义，它将自动包含$n - k$ 个零），因此更贴近压缩感知设置中通常出现的相应稀疏向量结构。为了进一步保持与压缩感知的平行性，我们还认为引入 $\ell_p^*(X)$ 作为所谓的 X 的 ℓ_p^* 准范数很有用

$$\ell_p^*(X) \triangleq \ell_p(\sigma(X)), p \in \mathbb{R}_+, \tag{5}$$

其中，ℓ_p(·) 是标准向量 ℓ_p （准）范数，并且注意到以下有用的矩阵-向量极限 ℓ_p(·) 关系也成立

$$\ell_0^*(X_{sol}) \triangleq \ell_0(\sigma(X_{sol})) = \|\sigma(X_{sol})\|_0 = \lim_{p\longrightarrow 0} \|\sigma(X_{sol})\|_p = \lim_{p\longrightarrow 0} \ell_p(\sigma(X_{sol})) = \lim_{p\longrightarrow 0} \ell_p^*(X_{sol}). \tag{6}$$

然后，可以将式（1）改写为适用于低秩表示语境的形式:

$$\mathbf{y}_i = A_{i,:}\mathbf{x}_{sol} = A_{i,:}\text{vec}(X_{sol}) \quad \text{where} \quad \ell_0^*(X_{sol}) = \ell_0(\sigma(X_{sol})) = \|\sigma(X_{sol})\|_0 = k, k \in \mathbb{N}, \tag{7}$$

且 $A_{i,:}$ 为 A 的第 i 行。最后，可以将低秩表示机制概括为 s:

通用低秩表示

观测值——由 X_{sol} 构造 y

给定 A 和 X_{sol}，构造 y 如下

$$\mathbf{y} = A\text{vec}(X_{sol}), \ell_0^*(X_{sol}) = k, k \in \mathbb{N}. \tag{8}$$

观测值 – 从 X_{sol} 构造 y

已知 y 和由 (8) 得到的 A，能否高效地恢复出 X_{sol} ?

不难看出，$\ell_0^*(X_{sol})$ 基本上是一个计数函数，用于统计 X_{sol} 的非零奇异值的数量。它与函数 $\ell_0(\mathbf{x}_{sol})$ 的类比相当明显；后者出现在压缩感知框架中，用于统计未知稀疏向量中的非零元素数量。此外，这种类比以及使其成立的稀疏性，都启示了一种算法方法，

可以尝试采用这种方法，最终恢复 X_{sol}。根据上述定义，低秩表示是式（8）的逆问题，可表述为所谓的 ℓ_0^*-最小化优化问题。由于这种最小化是一个高度非凸问题，因此目前尚不知道能否在多项式时间内求解。为了设计多项式时间可解启发式方法，人们便借鉴压缩感知的做法，引入最紧的凸范数松弛概念，并用 ℓ_1^*-最小化取代 ℓ_0^*-。

ℓ_0^*-最小化（低秩表示/MC/C-inf – VMT）

$$\begin{aligned} &\min_X && \ell_0^*(X) \\ &\text{满足} && \mathbf{y} = A\text{vec}(X)。 \end{aligned} \tag{9}$$

ℓ_1^*-最小化（低秩表示/MC/C-inf – VMT）

$$\begin{aligned} &\min_X && \ell_1^*(X) \\ &\text{满足} && \mathbf{y} = A\text{vec}(X)。 \end{aligned} \tag{10}$$

关于上述通过最紧凸范数松弛引入的通用低秩恢复（LRR）的历史、用途和适用性，详见入门论文 [35, 41]。我们还要指出，有时我们可能会将上述 LRR 描述称为“向量化矩阵术语”（**VMT**）。下文中，我们也会发现，采用相应的所谓“掩码矩阵术语”（**MMT**）来介绍同一个 LRR 很有用。

2.2 矩阵补全（MC）——低秩表示（LRR）的一个特例

上述当然是通用低秩表示（LRR）的描述。矩阵补全是低秩表示的一种特定类型，或者用技术术语来说，是上述低秩表示数学框架的一个特例。在矩阵补全场景中，所处理的是一种非常特殊类型的系统矩阵 A。此时，公式（7）变为

$$\mathbf{y}_i = A\text{vec}(X_{sol}) \quad \text{where} \quad \ell_0^*(X_{sol}) = \ell_0(\sigma(X_{sol})) = \|\sigma(X_{sol})\|_0 = k, k \in \mathbb{N} \quad \text{and} \quad \forall p \in \mathbb{R}_+, \|A_{i,:}\|_p = 1. \tag{11}$$

实际上，这意味着系统矩阵 A 的每一行恰好有一个元素等于 1，而所有其他元素均等于 0。从某种意义上说，可以将 A 视为 $I_{n^2 \times n^2}$的一个行子集，其基数为 m 。这种矩阵 A 出现的原因，当然与矩阵补全本身的由来有关。基本上，矩阵 A 实质上模拟了一个施加在矩阵 X 上的“掩码”，使得只能读取其 n^2 个元素中的 m 。关于矩阵补全的起源、重要性以及相关算法方面的不同考量，详见入门论文 [9, 41] 以及之后的许多进一步研究（例如参见 [10, 21–27, 36]）。

为确保整体阐述的完整性，并与文献中通常采用的矩阵补全问题标准表述保持一致，我们使用上述掩码矩阵术语重新表述 (11)。令 $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 为一个掩码矩阵，使得

$$M_{i,j} = \begin{cases} 1, & (i,j)\text{-th element of } X_{sol} \text{ is observed} \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{12}$$

那么，可以将矩阵补全中生成线性观测描述如下

$$Y = M \circ X_{sol}, \tag{13}$$

其中，$\circ$ 表示逐分量乘法。显然，矩阵 M 中的 1 使得可以读取 X_{sol} 中相应的元素，而 0 则会屏蔽这些元素。为了将上述线性描述纳入 (11)，接下来可以通过从 $\text{diag}^{-1}(\text{vec}(M))I_{n^2 \times n^2}$ 中移除所有零行来构造 A（$\text{diag}^{-1}(\cdot)$ 会生成一个对角矩阵，其主对角线上的元素等于作为参数传入的向量；从某种意义上说，它是先前引入的 diag(·) 的逆运算）。因此，y 可由 $\mathbf{y} = AX_{sol}$ 得到。

2.3 因果推断 (C-inf)——矩阵补全的一个特殊情形

最后，因果推断是上述低秩恢复框架的另一个特例，也是我们关注的主题。事实上，更准确地说，矩阵补全是一个特例

上述低秩表示的特例，而因果推断本身又是矩阵补全的特例。矩阵补全（MC）与因果推断（C-inf）之间的联系是在 [4] 中确立的。此外，关于无混杂性和合成控制的一个非常出色的拓展联系也在 [4] 中确立。这里，我们也将在矩阵补全与因果推断的联系这一背景下展开讨论。为此，我们首先从数学上更精确地阐明这一联系。具体而言，如果将矩阵补全视为一种"掩码" X 并读取未被掩码元素的方法，那么因果推断所做的完全相同，只是在此基础上还对掩码本身施加了特定结构。与上文一样，设 $M \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 为一个掩码矩阵。那么，对于一个固定的 $l \leq n$，在因果推断的语境下，有

$$M \triangleq M^{(l)} \quad \text{and} \quad M_{i,j} = M^{(l)}_{i,j} = \begin{cases} 1, & \text{if } \min(i,j) \leq l \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{14}$$

以上就是所谓的分块因果推断设定。图 1 和图 2 展示了通用矩阵补全与因果推断之间的主要区别。在通用矩阵补全中，掩码矩阵 M 中的 0 和 1 基本上可以任意分布在矩阵内。另一方面，在因果推断设定中，M 的结构则比较特殊。一般而言，在矩阵 M 的一行中，第一个 0 出现的位置不会晚于前面任何一行中第一个 0 出现的位置。出现 0 之后，该行中其余所有元素也都必须为 0。对于我们在此关注的分块情形，如图 2 所示。



图 1：矩阵 M ——通用矩阵补全（矩阵补全）设定

如果从时域的角度看问题，就最容易理解为何要采用分块因果推断。也就是说，如果掩码矩阵 M 的列代表时间轴，那么矩阵某些行对应的观测值在某个固定时间点之后将无法获得。在分块场景中，这个时间点对于受影响的各行都是固定的。不过，这个时间点不一定必须固定（关于这一方向的更多内容，可参阅 [2]（尤其是加利福尼亚烟草案例）、[57]（尤其是同时／错期开启干预背景下的潜在因子建模），以及 [5, 6, 39]（尤其是医疗保健应用）这些优秀参考文献，以了解各种 C-inf 场景的需求）。作为一篇导论性论文，我们在此介绍整体方法，因此选择了分块因果推断场景，因为它可能是最具代表性且广为人知的场景。在我们的一些配套论文中，我们将展示如何利用此处介绍的方法来处理其他 C-inf 场景。

在这一因果推断假设下，观测集合 Y 满足以下性质

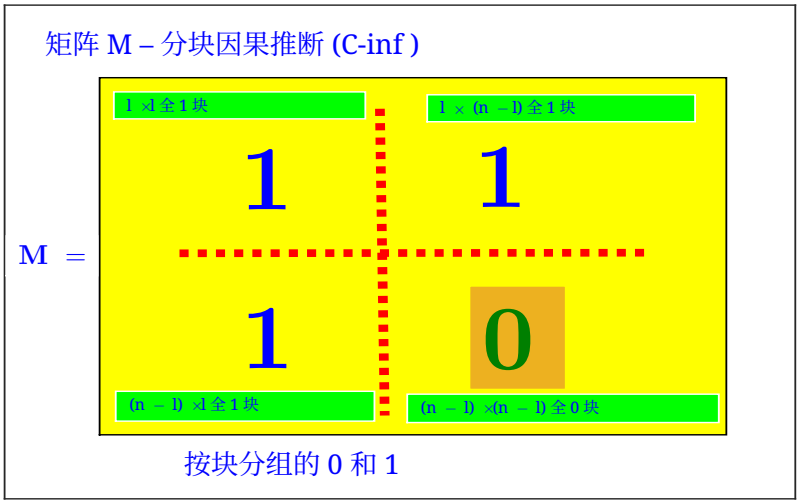


图 2：矩阵 M， $M_{(l)}$ – 分块因果推断（**C-inf**）设置

在矩阵补全中

$$Y = M \circ X = M^{(l)} \circ X. \tag{15}$$

为了便于书写，我们通常会省略上标。根据上下文，可以清楚地判断是否应当有上标；如果有，其值也显而易见。为了符合式 (11) 的线性描述，可以按以下方式构造 A ： 1）首先选取 $I_{n^2 \times n^2}$ 的前 ln 行；2）然后，对于 $I_{n^2 \times n^2}$ 后续的每组 n 行，继续选取其前 l 行的子集，并跳过剩余的 $n - l$。同样，y 可通过堆叠 Y 的列并跳过元素 $Y_{i,\,j}$ 来获得，其中 $\min(i, j) > l$。如上所述，之后我们会发现，将式 (9) 和 (10) 也改写成“掩码矩阵术语”（MMT）很有用；

ℓ_0^*-最小化（C-inf – MMT）

$$\begin{aligned} \min_X \quad & \ell_0^*(X) \\ \text{满足约束} \quad & Y = M \circ X. \end{aligned} \tag{16}$$

ℓ_1^*-最小化（C-inf – MMT）

$$\begin{aligned} \min_X \quad & \ell_1^*(X) \\ \text{满足约束} \quad & Y = M \circ X. \end{aligned} \tag{17}$$

2.4 C-inf $\leftrightarrow$ 矩阵补全通过反事实建立联系

为了理解这种结构可能从何而来，我们可以按照 [4] 中的术语，将其与处理/单位/时间的背景联系起来。在此背景下，假设矩阵 X 包含了某一组——例如 n 个单位（如个体、亚群体和地理区域）——在一段时间内（例如 n 个时间实例）的观测值。假设 X 的行对应单位，列对应时间实例，我们希望估计某种处理可能对处理单位产生的影响。随后，在时间 l，部分单位（即对应于行 $i > l$ 的单位）会接受不可逆处理（一旦开始处理，其影响就无法逆转）。处理的例子包括健康疗法、社会经济政策和税收。为了恰当地评估由此产生的处理效应，除了获得处理后 X 的数值外，还需要获得所谓的反事实——即假如没有实施处理，处理单位本应具有的数值。换回矩阵补全的术语来说，我们需要估计（假定为低秩的） X，但无法获取其被块掩码 $M = M^{(l)}$ 覆盖的部分。换言之，我们需要在 $M = M^{(l)}$ 的情况下求解（16）。

当然，由于 A 或 M 结构的变化并不妨碍使用上述 $\ell_0^* \longrightarrow \ell_1^*$松弛概念，通常会将其作为一种可证明具有多项式时间复杂度的启发式策略，用于近似求解矩阵补全/因果推断问题。直观而言，作为最接近的凸范数松弛，上述 ℓ_1^*-最小化可能会得到一个与未知的 X_{sol} 相似的矩阵；但或许令人颇感意外的是，在某些情形下，它实际上能够完美恢复精确的 X_{sol}。这种 $\ell_0^* - \ell_1^*$ 等价关系可能存在，实属非凡；确定它何时发生或发生的频率如何，几乎就是基于凸范数松弛的低秩表示算法在数学分析中的核心任务。循着同样的思路，回答这一问题也正是本文的主要数学贡献。

不过，在我们能够就最终的数学贡献作出更具体的说明之前，还需要做大量工作。我们将在很大程度上运用随机对偶理论（RDT）的一些概念；这些概念已在一系列研究中提出并得到详细讨论 [42–46,48,50,51]）。此外，还需要不少其他数学概念。我们会尽力充分详尽地解释所有必需的数学工具，但若对 RDT 有扎实的了解，将会有所帮助。

在转向更深入、尤其是与因果推断数学分析相关的讨论之前，我们先稍作停顿，探讨一个看似矛盾的情况：上述低秩表示的简易程度与难度，与其特例 MC/C-inf 的简易程度与难度之间的关系。

2.5 特例并不一定更简单

上文通过通用低秩表示机制介绍矩阵补全和因果推断的概念，可能会让人觉得它们是更一般一类恢复问题中的子问题。此外，人们或许会因此认为，这些问题既可以用与通用低秩表示问题相同的方式求解，也可以用相同的方式分析。这基本上意味着，针对低秩表示可能得到的所有结果，都能自动以类似形式适用于矩阵补全和 C-inf 场景。关于求解这些问题的部分确实如此。用于通用低秩表示的启发式算法（例如 ℓ_1^*-最小化），同样可以用于矩阵补全和 C-inf。另一方面，关于分析的部分则与此大相径庭。针对低秩表示得到的结果不仅无法直接推广到矩阵补全和 C-inf，而且往往还需要以完全不同的方式加以证明。

要充分理解这一悖论，关键在于区分对未知向量 X_{sol} 的额外结构化与对系统矩阵 A的额外结构化。当未知向量/矩阵具有额外结构时，相应底层算法的性能分析很可能可以相互转换（例如，参见配套论文 [12]）。另一方面，当系统矩阵 A 具有额外结构时，不仅相应的分析可能难以转换，而且实际上可能需要彻底替换。沿着同样的思路，由于 MC 和 C-inf 是关于 A的额外结构化而言的 LRR 特例，因此，能够对相应的通用低秩表示进行解析处理，并不能先验地保证在解析处理 MC 和 C-inf 时也具备这种能力。我们将在后文的某一节中看到这一推理的若干方面。

3 因果推断 – $\ell_0^* - \ell_1^*$ 松弛等价关系

如前所述，求解通用低秩表示（因此也包括作为其特例的 C-inf）可能颇具难度，这是因为式 (16) 中的目标函数高度非凸。面对不同的实际情形，可以采用各种启发式方法。在数学上最具挑战性的所谓线性渐近区间中，上述 ℓ_1^*-最小化松弛启发式通常被视为目前已知的最佳可证明多项式时间算法。下文中我们也采用这一观点，并将其作为当前处理 C-inf 的算法基准。如上所述，这种启发式的一个相当显著的特点是，有时它确实能够精确求解底层问题。出现这种情况时，我们称之为以下 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价现象。

$\ell_0^* - \ell_1^*$-等价关系（C-inf）：

令 X_{sol} 为式 (16) 或 (9) 的解，令 $\hat{X}$ 为式 (17) 或 (10) 的一个解，并设

$$\mathbf{RMSE} \triangleq \|\mathrm{vec}(\hat{X}) - \mathrm{vec}(X_{sol})\|_2.$$

当且仅当 仅当（ $\hat{X} = X_{sol}$ 且 均方根误差 $= 0$）则 （ℓ_0^* –最小化 $\iff$ ℓ_1^* –最小化）。 (18)

上述内容基本意味着，当发生 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价关系时，式（16）和（17）中的优化问题是等价的，因此可以相互替换。当然，这将是理想情形：在不损失所得解的准确度的情况下，可以用凸优化问题替代非凸优化问题。由于仅仅存在这种情形就已经是一个非凡现象，因此本文将致力于揭示使其成为可能的底层复杂机制。此外，事实将表明，这种现象的发生并非异常，而是某种一般性质的结果；因此，我们将相应地提高要求，尝试不仅证明该性质的存在，还对其进行完整的分析刻画。这将包括全面刻画它发生的频率以及可能发生的情形。为此，我们将结合 [42–46,48,50,51] 中的随机对偶理论（RDT）工具，以及若干先进而复杂的概率概念；我们将在下面后续各节中逐步介绍这些概念。

在本节余下部分，我们将聚焦于一些代数上的 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价关系预备知识，这些内容在概念上借鉴自 RDT。首先介绍一个通用低秩表示 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价关系结果（该结果基本上是将 [44–46] 中的一般压缩感知等价条件结果，改编为对应的奇异值/特征值 ℓ_1 范数版本（ [29] 中也可以找到类似的改编））。

定理 1。 *($\ell_0^* - \ell_1^*$-等价条件（低秩表示） – 一般 X)* 设有一个 $\bar{U} \in \mathbb{R}^{n\times k}$ 满足$\bar{U}^T\bar{U} = I_{k\times k}$，以及一个 $\bar{V} \in \mathbb{R}^{n\times k}$满足 $\bar{V}^T\bar{V} = I_{k\times k}$，还有一个秩为 $-k$的矩阵 $X_{sol} = X \in \mathbb{R}^{n\times n}$，其所有列都属于 $\bar{U}$的张成空间，且其所有行都属于 $\bar{V}^T$。此外，设正交张成空间 $\bar{U}^\perp \in \mathbb{R}^{n\times(n-k)}$和 $\bar{V}^\perp \in \mathbb{R}^{n\times(n-k)}$满足 U， $\begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}$以及 V， $\begin{bmatrix}\bar{V} & \bar{V}^\perp\end{bmatrix}$并且

$$U^TU \triangleq \begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}^T\begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix} = I_{n\times n} \quad and \quad V^TV \triangleq \begin{bmatrix}\bar{V} & \bar{V}^\perp\end{bmatrix}^T\begin{bmatrix}\bar{V} & \bar{V}^\perp\end{bmatrix} = I_{n\times n}. \tag{19}$$

给定矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m\times n^2}$ $(m \le n^2)$，假设 $\mathbf{y} = A\mathrm{vec}(X) = A\mathrm{vec}(X_{sol}) \in \mathbb{R}^m$，并令 $\hat{X}$ 为方程 (17) 的解。如果

$$(\forall W \in \mathbb{R}^{n\times n} | Avec(W) = \mathbf{0}_{m\times 1}, W \neq \mathbf{0}_{n\times n}) \quad -\mathrm{tr}\,(\bar{U}^TW\bar{V}) < \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^TW\bar{V}^\perp), \tag{20}$$

then

$$\ell_0^* \iff \ell_1^* \quad and \quad \mathbf{RMSE} = \|\mathrm{vec}(\hat{X}) - \mathrm{vec}(X_{sol})\|_2 = 0, \tag{21}$$

并且方程 (16)（或 (9)）与 (17)（或 (10)）的解相同。此外，如果

$$(\exists W \in \mathbb{R}^{n\times n} | Avec(W) = \mathbf{0}_{m\times 1}, W \neq \mathbf{0}_{n\times n}) \quad -\mathrm{tr}\,(\bar{U}^TW\bar{V}) \ge \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^TW\bar{V}^\perp), \tag{22}$$

¯那么，在上述矩阵集合中存在一个 X，其列属于 U 的张成空间，且其行属于 ¯ V 的张成空间，使得方程 (16)（或 (9)）与 (17)（或 (10)）的解不同。

证明。该证明是对附录 A 中给出的对称矩阵证明的直接改写。 □

定理中的条件将矩阵 W 与矩阵 A 的零空间联系起来，因此是基于 VMT 的。在我们关注的 MC 和 C-inf 情形中，采用其 MMT 类比形式更为方便。回顾附录 A 中定理 1 的证明，以及矩阵 W 在该证明中的来源和作用，可知，断言 W 属于 A 的零空间，基本上等价于断言$M \circ W = \mathbf{0}_{n\times n}$。换言之，以下两个集合等价

$$(W \in \mathbb{R}^{n\times n} | A\mathrm{vec}(W) = \mathbf{0}_{m\times 1}, W \neq \mathbf{0}_{n\times n}) \iff (W \in \mathbb{R}^{n\times n} | M \circ W = \mathbf{0}_{n\times n}, W \neq \mathbf{0}_{n\times n}). \tag{23}$$

进一步沿着 RDT 的思路，还可以得出上述定理的以下推论。

推论 1. *($\ell_0^*-\ell_1^*$-等价条件，通过掩码矩阵 (MC/C-inf) –一般形式 X)* 假设定理 1 的设置成立，其中 X_{sol} 是 (16) （或 (9) ）的唯一解。设掩码矩阵 $M \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 有 m 个 1 和 (n^2-m) 个 0，并设 A 由 M 生成，即令 A 为从 $\mathrm{diag}^{-1}(vec(M))I_{n^2\times n^2}$ 中删除所有零行后得到的矩阵。当且仅当

$$\min_{W, W^TW=1, M\circ W=\mathbf{0}_{n\times n}} \mathrm{tr}\,(\bar{U}^TW\bar{V}) + \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^TW\bar{V}^\perp) \geq 0, \tag{24}$$

then

$$\ell_0^* \Longleftrightarrow \ell_1^* \quad \textit{and} \quad \mathbf{RMSE} = \|\mathrm{vec}(\hat{X}) - \mathrm{vec}(X_{sol})\|_2 = 0, \tag{25}$$

且 (16)（或 (9)）与 (17)（或 (10)）的解相同。

证明。由 (20)、(22) 和 (23) 组合可立即得出。 □

备注：仔细比较 (20) 和 (24) 中的条件可以发现，为了放宽唯一性假设，严格不等式也相应放宽了一些。稍加努力即可避免这种情况。不过，为了大幅简化下文的表述，我们将采用非严格不等式。

为分析式（24）中的优化问题，我们沿用了[45] 的思路；类似的优化问题曾多次通过一种非常通用的拉格朗日机制得到处理。此类过程的第一步，是明确写出式（24）中的优化问题

$$\begin{aligned} f_{pr}(M;U,V) \triangleq \min_{W} \quad & \mathrm{tr}\,(\bar{U}^TW\bar{V}) + \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^TW\bar{V}^\perp) \\ \text{subject to} \quad & M\circ W = \mathbf{0}_{n\times n} \\ & W^TW = 1. \end{aligned} \tag{26}$$

接着可以 写出相应的拉格朗日函数和拉格朗日对偶函数，从而得到

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(W,\Lambda,\Theta,\gamma) &\triangleq \mathrm{tr}\,(\bar{U}^TW\bar{V}) + \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^TW\bar{V}^\perp) + \Theta(M\circ W) + \gamma\left(\mathrm{tr}\,(W^TW)-1\right) \\ &= \max_{\Lambda,\Lambda^T\Lambda\leq I} \left(\mathrm{tr}\,(\bar{U}^TW\bar{V}) + \mathrm{tr}\,(\Lambda((\bar{U}^\perp)^TW\bar{V}^\perp)) + \Theta(M\circ W) + \gamma\left(\mathrm{tr}\,(W^TW)-1\right)\right) \\ &= \max_{\Lambda,\Lambda^T\Lambda\leq I} \left(\mathrm{tr}\,\left((\bar{V}\bar{U}^T + \bar{V}^\perp\Lambda(\bar{U}^\perp)^T + \Theta\circ M)W\right) + \gamma\mathrm{tr}\,(W^TW) - \gamma\right), \end{aligned} \tag{27}$$

and

$$\begin{aligned} g(\Theta,\gamma) &\triangleq \min_W \mathcal{L}(W,\Lambda,\Theta,\gamma) \\ &= \min_W \max_{\Lambda,\Lambda^T\Lambda\leq I} \left(\mathrm{tr}\,\left((\bar{V}\bar{U}^T + \bar{V}^\perp\Lambda(\bar{U}^\perp)^T + \Theta\circ M)W\right) + \gamma\mathrm{tr}\,(W^TW) - \gamma\right). \end{aligned} \tag{28}$$

利用拉格朗日对偶性，进一步有

$$\begin{aligned} g(\Theta,\gamma) &= \min_W \max_{\Lambda,\Lambda^T\Lambda\leq I} \left(\mathrm{tr}\,\left((\bar{V}\bar{U}^T + \bar{V}^\perp\Lambda(\bar{U}^\perp)^T + \Theta\circ M)W\right) + \gamma\mathrm{tr}\,(W^TW) - \gamma\right) \\ &\geq \max_{\Lambda,\Lambda^T\Lambda\leq I} \min_W \left(\mathrm{tr}\,\left((\bar{V}\bar{U}^T + \bar{V}^\perp\Lambda(\bar{U}^\perp)^T + \Theta\circ M)W\right) + \gamma\mathrm{tr}\,(W^TW) - \gamma\right) \\ &= \max_{\Lambda,\Lambda^T\Lambda\leq I} \left(-\frac{1}{4\gamma}\mathrm{tr}\,\left((\bar{V}\bar{U}^T + \bar{V}^\perp\Lambda(\bar{U}^\perp)^T + \Theta\circ M)(\bar{V}\bar{U}^T + \bar{V}^\perp\Lambda(\bar{U}^\perp)^T + \Theta\circ M)^T\right) - \gamma\right). \end{aligned} \tag{29}$$

此外，

$$\begin{aligned} f_{pr}(M;U,V) &\geq \max_{\Theta,\gamma} g(\Theta,\gamma) \\ &= \max_{\Lambda,\Lambda^T\Lambda\leq I,\Theta,\gamma} \left(-\frac{1}{4\gamma}\mathrm{tr}\,\left((\bar{V}\bar{U}^T + \bar{V}^\perp\Lambda(\bar{U}^\perp)^T + \Theta\circ M)(\bar{V}\bar{U}^T + \bar{V}^\perp\Lambda(\bar{U}^\perp)^T + \Theta\circ M)^T\right) - \gamma\right). \end{aligned}$$

(30)

我们继续对 γ进行进一步优化。

$$\begin{aligned} f_{pr}(M;U,V) &\geq \max_{\Lambda,\Lambda^T\Lambda\leq I,\Theta,\gamma}\left(-\frac{1}{4\gamma}\mathrm{tr}\left((\bar{V}\bar{U}^T+\bar{V}^\perp\Lambda(\bar{U}^\perp)^T+\Theta\circ M)(\bar{V}\bar{U}^T+\bar{V}^\perp\Lambda(\bar{U}^\perp)^T+\Theta\circ M)^T\right)-\gamma\right) \\ &= \max_{\Lambda,\Lambda^T\Lambda\leq I,\Theta} -\sqrt{\mathrm{tr}\left((\bar{V}\bar{U}^T+\bar{V}^\perp\Lambda(\bar{U}^\perp)^T+\Theta\circ M)(\bar{V}\bar{U}^T+\bar{V}^\perp\Lambda(\bar{U}^\perp)^T+\Theta\circ M)^T\right)} \\ &= -\min_{\Lambda,\Lambda^T\Lambda\leq I,\Theta}\sqrt{\mathrm{tr}\left((\bar{V}\bar{U}^T+\bar{V}^\perp\Lambda(\bar{U}^\perp)^T+\Theta\circ M)(\bar{V}\bar{U}^T+\bar{V}^\perp\Lambda(\bar{U}^\perp)^T+\Theta\circ M)^T\right)}. \end{aligned} \tag{31}$$

现在我们将上述内容具体化到分块因果推断场景。在块 C-inf 场景中，矩阵 M 的定义如式 (14) 所示。为使内容更具体，并便于后续书写，我们将引入矩阵 $I^{(l)}$，同时牢记矩阵 M 的以下刻画

M 因果推断 (C-inf) 中的矩阵：

$$M \triangleq M^{(l)} \triangleq \mathbf{1}_{n\times 1}\mathbf{1}_{n\times 1}^T - I^{(l)}(I^{(l)})^T\mathbf{1}_{n\times 1}\mathbf{1}_{n\times 1}^T I^{(l)}(I^{(l)})^T \quad \text{and} \quad I^{(l)} \triangleq \begin{bmatrix}\mathbf{0}_{l\times(n-l)}\\ I_{(n-l)\times(n-l)}\end{bmatrix}. \tag{32}$$

在上述 M 的定义/表示中，1/0 分别表示其下标所指定维度的全 1/全 0 向量和矩阵。为避免符号过于繁杂，我们有时可能省略这些向量的具体维度。不过，根据整体语境应能轻松推断出来。当然，还会对 l 作相应调整，使 M 含有 m 个非零元素，即 m 个值为 1 的元素，这基本上等同于满足以下恒等式

$$m = n^2-(n-l)^2. \tag{33}$$

利用式 (31) 中上述 C-inf M，优化后 $(\bar{V}\bar{U}^T+\bar{V}^\perp\Lambda(\bar{U}^\perp)^T)$ 中仅剩下与 M 的零元素对应的项，也就是说，只有这些项不受 Θ 的存在（因而也不受对其进行优化）的影响。这基本上意味着

$$f_{pr}(M;U,V) \geq -\min_{\Lambda,\Lambda^T\Lambda\leq I}\sqrt{\mathrm{tr}\left(\left((I^{(l)})^T\left(\bar{V}\bar{U}^T+\bar{V}^\perp\Lambda(\bar{U}^\perp)^T\right)I^{(l)}\right)\left((I^{(l)})^T\left(\bar{V}\bar{U}^T+\bar{V}^\perp\Lambda(\bar{U}^\perp)^T\right)I^{(l)}\right)^T\right)}. \tag{34}$$

要使整个机制总体上成功，需要能够选择上述优化中的 Λ，使总体最优值非负。这样便足以得出以下推论，作为推论 1 的另一种表述。

推论 2。 *($\ell_0^*-\ell_1^*$-等价条件：通过掩码矩阵（C-inf）–一般 X) 假设定理 1 和推论 1 的设定成立。令 $I^{(l)}$ 如 (32) 所示。则*

***C-inf* 完美成功：** $\ell_0^* \Longleftrightarrow \ell_1^*$ 且 均方根误差 $= \|\mathbf{vec}(\hat{X}) - \mathbf{vec}(X_{sol})\|_2 = 0$

$$\textit{If and only if} \quad \exists\Lambda|\Lambda^T\Lambda\leq I \quad \textit{and} \quad (I^{(l)})^T\left(\bar{V}\bar{U}^T+\bar{V}^\perp\Lambda(\bar{U}^\perp)^T\right)I^{(l)}=0 \tag{35}$$

证明。“若”部分可由推论 1、(34) 及上述讨论得出。“仅若”部分则源于注意到，(29)–(34) 中的所有上述不等式都是为一般说明目的而写的。由于凸性和强对偶性，它们实际上也都可以替换为等式。

□

暂且假设 $k \le l$ （稍后将严格证明这一假设的合理性）。由此很容易得到 (35)

$$\Lambda = ((I^{(l)})^T \bar{V}^\perp)^{-1} (I^{(l)})^T \bar{V} \bar{U}^T I^{(l)} ((\bar{U}^\perp)^T I^{(l)})^{-1} \quad \Longrightarrow \quad (I^{(l)})^T \left(\bar{V} \bar{U}^T + \bar{V}^\perp \Lambda (\bar{U}^\perp)^T \right) I^{(l)} = 0, \tag{36}$$

其中 $(\cdot)^{-1}$ 表示伪逆。为了让表达稍微简洁一些，我们可以设

$$\begin{aligned} \Lambda_{opt} &\triangleq \Lambda_V \Lambda_U^T \\ \Lambda_V &\triangleq ((I^{(l)})^T \bar{V}^\perp)^{-1} (I^{(l)})^T \bar{V} \\ \Lambda_U &\triangleq ((I^{(l)})^T \bar{U}^\perp)^{-1} (I^{(l)})^T \bar{U}. \end{aligned} \tag{37}$$

令 $\lambda_{max}(\cdot)$ 表示其对称矩阵参数的最大特征值。结合 (35)–(37) 后，我们得出，若

$$\lambda_{max}(\Lambda_{opt}^T \Lambda_{opt}) \le 1, \tag{38}$$

则 (35) 将成立。经过基本的代数变换后，(38) 也可以改写为

$$\lambda_{max}(\Lambda_{opt}^T \Lambda_{opt}) = \lambda_{max}(\Lambda_{opt} \Lambda_{opt}^T) = \lambda_{max}(\Lambda_V \Lambda_U^T \Lambda_U \Lambda_V^T) = \lambda_{max}(\Lambda_V^T \Lambda_V \Lambda_U^T \Lambda_U) \le 1. \tag{39}$$

由 (39) 可清楚看出， $\Lambda_V^T \Lambda_V \Lambda_U^T \Lambda_U$的谱以及 $\Lambda_V^T \Lambda_V$和 $\Lambda_U^T \Lambda_U$各自的谱在 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价关系中起着重要作用。我们先考察一个最坏情况界。具体而言，由于

$$\lambda_{max}(\Lambda_{opt}^T \Lambda_{opt}) = \lambda_{max}(\Lambda_V^T \Lambda_V \Lambda_U^T \Lambda_U) \le \lambda_{max}(\Lambda_V^T \Lambda_V) \lambda_{max}(\Lambda_U^T \Lambda_U)), \tag{40}$$

因此，如果 $\Lambda_V^T \Lambda_V$和 $\Lambda_U^T \Lambda_U$ 各自的谱都不超过 1，则 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价关系成立。鉴于这些谱显然十分重要，下面我们将对它们进行更详细的考察。显然，由于对称性，我们只需关注其中一个。为此，我们先注意到

$$((I^{(l)})^T \bar{V}^\perp)^{-1} \quad = \quad (\bar{V}^\perp)^T I^{(l)} \left((I^{(l)})^T \bar{V}^\perp (\bar{V}^\perp)^T I^{(l)} \right)^{-1}, \tag{41}$$

由式 (41) 可迅速得到

$$\left(((I^{(l)})^T \bar{V}^\perp)^{-1} \right)^T ((I^{(l)})^T \bar{V}^\perp)^{-1} \quad = \quad \left((I^{(l)})^T \bar{V}^\perp (\bar{V}^\perp)^T I^{(l)} \right)^{-1}. \tag{42}$$

于是我们可以写成

$$(I^{(l)})^T \bar{V} \bar{V}^T I^{(l)} \quad = \quad (I^{(l)})^T \left(I - \bar{V}^\perp (\bar{V}^\perp)^T \right) I^{(l)}. \tag{43}$$

由式 (37) 可知

$$\begin{aligned} Q_1 \triangleq \Lambda_V^T \Lambda_V &= \left(\left(((I^{(l)})^T \bar{V}^\perp)^{-1} (I^{(l)})^T \bar{V} \right)^T \left(((I^{(l)})^T \bar{V}^\perp)^{-1} (I^{(l)})^T \bar{V} \right) \right) \\ &= \bar{V}^T I^{(l)} \left(((I^{(l)})^T \bar{V}^\perp)^{-1} \right)^T ((I^{(l)})^T \bar{V}^\perp)^{-1} \left((I^{(l)})^T \bar{V} \right). \end{aligned} \tag{44}$$

现在，使用矩阵 Q_1的一个略作修改的版本会更方便。具体而言，将（37）、（42）和（43）合并后，我们得到

$$\begin{aligned} Q &\triangleq \left(\left(((I^{(l)})^T \bar{V}^\perp)^{-1} \right)^T ((I^{(l)})^T \bar{V}^\perp)^{-1} \left((I^{(l)})^T \bar{V} \bar{V}^T I^{(l)} \right) \right) \\ &= \left(\left((I^{(l)})^T \bar{V}^\perp (\bar{V}^\perp)^T I^{(l)} \right)^{-1} \left((I^{(l)})^T \left(I - \bar{V}^\perp (\bar{V}^\perp)^T \right) I^{(l)} \right) \right) \\ &= \left((I^{(l)})^T \bar{V}^\perp (\bar{V}^\perp)^T I^{(l)} \right)^{-1} - I. \end{aligned} \tag{45}$$

显然， Q_1 和 Q 的所有非零特征值都相同。当 $k \le n-l$ 时， Q 拥有 Q_1 的全部特征值，外加 $n-l-k$ 个零特征值。另一方面，当 $k \ge n-l$ 时， Q_1 拥有 Q 的全部特征值，外加 $k-$ （$n-l$）个零特征值。由于在谱中添加或移除零特征值不会改变我们在此关注的任何性质，因此，与其直接使用 Q_1，不如使用 Q。特别地，我们有

$$\lambda_{max}(Q_1) = \lambda_{max}(\Lambda_V^T \Lambda_V) \quad = \quad \lambda_{max}\left(\left((I^{(l)})^T \bar{V}^{\perp} (\bar{V}^{\perp})^T I^{(l)}\right)^{-1}\right) - 1 = \lambda_{max}(Q). \tag{46}$$

现在我们可以给出推论 2 的谱替代条件。

推论 3. *($\ell_0^* - \ell_1^*$-等价条件：基于掩码修正基底谱 (C-inf) – 一般X)* 假设满足定理 1 以及推论 1 和推论 2 的设定，且 $k \le l$。令 λ_V 和 λ_U 按式 (37) 定义。那么

***C-inf*完美成功：** $\ell_0^* \Longleftrightarrow \ell_1^*$ 且 均方根误差 $= \|\mathbf{vec}(\hat{X}) - \mathbf{vec}(X_{sol})\|_2 = 0$

$$\textit{If and only if} \quad \lambda_{max}(\Lambda_V^T \Lambda_V \Lambda_U^T \Lambda_U) \le 1. \tag{47}$$

此外，如果

$$\left(\lambda_{max}\left(\left((I^{(l)})^T \bar{V}^{\perp} (\bar{V}^{\perp})^T I^{(l)}\right)^{-1}\right) - 1\right)\left(\lambda_{max}\left(\left((I^{(l)})^T \bar{U}^{\perp} (\bar{U}^{\perp})^T I^{(l)}\right)^{-1}\right) - 1\right) \le 1, \tag{48}$$

那么再次有 $\ell_0^* \Longleftrightarrow \ell_1^*$ 且均方根误差 $= \|\mathbf{vec}(\hat{X} - \mathbf{vec}(X_{sol})\|_2 = 0$ ，并且 C-inf 也能完美成功。

证明。第一部分由推论 1 和推论 2、式 (36)、(37)、(39)、上述讨论以及一些额外考量得出；第二部分则是在进一步考虑式 (40) 和 (46) 后得出。下文将分三部分给出全部细节：前两部分涉及等价条件（式 (47)），第三部分涉及式 (48)。

1) $\Longrightarrow$ – 条件（*47*）的“如果”部分： 选择 $\Lambda = \Lambda_{opt}$

$$\Lambda_{opt} \quad \triangleq \quad \Lambda_V \Lambda_U^T = -((I^{(l)})^T \bar{V}^{\perp})^{-1} (I^{(l)})^T \bar{V} \bar{U}^T I^{(l)} ((\bar{U}^{\perp})^T I^{(l)})^{-1}, \tag{49}$$

（其中 $(\cdot)^{-1}$ 表示伪逆）可确保

$$(I^{(l)})^T \left(\bar{V}\bar{U}^T + \bar{V}^{\perp} \Lambda (\bar{U}^{\perp})^T\right) I^{(l)} = 0. \tag{50}$$

令 $\lambda_{max}(\cdot)$ 表示其对称矩阵参数的最大特征值。结合式（35）–（50）可确保，若

$$\lambda_{max}(\Lambda_{opt}^T \Lambda_{opt}) \le 1, \tag{51}$$

则 Λ_{opt} 满足式（35）。由式（47）可推出式（51），因为

$$\lambda_{max}(\Lambda_{opt}^T \Lambda_{opt}) = \lambda_{max}(\Lambda_U \Lambda_V^T \Lambda_V \Lambda_U^T) = \lambda_{max}(\Lambda_V^T \Lambda_V \Lambda_U^T \Lambda_U) \le 1,$$

这足以完成“如果”部分的证明。

2) $\Longleftarrow$ – 条件（*47*）的“仅当”部分： 考虑奇异值分解

$$B \triangleq (I^{(l)})^T V^{\perp} = U_B \Sigma_B V_B^T, \quad C \triangleq (I^{(l)})^T U^{\perp} = U_C \Sigma_C V_C^T \tag{52}$$

其中 U_B、V_B、U_C、V_C 为酉矩阵， Σ_B、Σ_C 为对角矩阵（主对角线上没有零元素）。任意 Λ 都可以参数化为

$$\Lambda = V_B H^T + V_B^{\perp} D^T, \quad H \triangleq V_C E + V_C^{\perp} F \tag{53}$$

对于某些 E、F、D，以及酉矩阵 $V_B^{\perp}$ 和 $V_C^{\perp}$，满足 $V_B^T V_B^{\perp} = V_C^T V_C^{\perp} = 0$。此外，可以令 Λ_*，并写出 E 的奇异值分解

$$\Lambda_* \triangleq V_B E^T V_C^T, \quad E = U_E \Sigma_E V_E^T, \tag{54}$$

其中 U_E、V_E 是酉矩阵，Σ_E 是对角矩阵，其主对角线上的元素均非零且按升序排列。令 $\mathbf{u}_e$ 为 U_E 的最后一列（即对应于 EE^T 最大特征值的特征向量）。由于 $\|V_C \mathbf{u}_e\|_2 = 1$,

$$\begin{aligned}
\lambda_{max}(\Lambda^T \Lambda) &\geq \mathbf{u}_e^T V_C^T \Lambda^T \Lambda V_C \mathbf{u}_e \\
&= \mathbf{u}_e^T V_C^T H H^T V_C \mathbf{u}_e + \mathbf{u}_e^T V_C^T D D^T V_C \mathbf{u}_e \\
&\geq \mathbf{u}_e^T V_C^T (V_C E + V_C^{\perp} F)(V_C E + V_C^{\perp} F)^T V_C \mathbf{u}_e \\
&= \mathbf{u}_e^T E E^T \mathbf{u}_e = \lambda_{max}(EE^T) \\
&= \lambda_{max}(V_C E E^T V_C^T) = \lambda_{max}(\Lambda_*^T \Lambda_*).
\end{aligned} \tag{55}$$

若 Λ 满足条件 (35)，则结合 (35) 和 (52)-(54) 可得

$$(I^{(l)})^T \bar{V} \bar{U} I^{(l)} + B \Lambda_* C^T = 0, \tag{56}$$

结合 (37)、(52) 和 (56) 可得

$$\Lambda_V \Lambda_U^T = -B^{-1} (I^{(l)})^T \bar{V} \bar{U} I^{(l)} (C^T)^{-1} = \Lambda_*. \tag{57}$$

最后，对于满足 (35) 的 Λ，由 (55) 和 (57) 可得

$$\begin{aligned}
1 &\geq \lambda_{max}(\Lambda^T \Lambda) > \lambda_{max}(\Lambda_*^T \Lambda_*) = \lambda_{max}(\Lambda_* \Lambda_*^T) \\
&= \lambda_{max}(\Lambda_V \Lambda_U^T \Lambda_U \Lambda_V^T) = \lambda_{max}(\Lambda_V^T \Lambda_V \Lambda_U^T \Lambda_U),
\end{aligned} \tag{58}$$

由此完成“仅当”部分的证明。

3) 条件 (48) 的充分性：由于

$$\lambda_{max}(\Lambda_V^T \Lambda_V \Lambda_U^T \Lambda_U) \leq \lambda_{max}(\Lambda_V^T \Lambda_V) \lambda_{max}(\Lambda_U^T \Lambda_U), \tag{59}$$

可以得出，如果 $\Lambda_V^T \Lambda_V$ 和 $\Lambda_U^T \Lambda_U$ 的各自的谱不超过 1，那么 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价关系成立。由于对称性，我们只关注其中一个。首先观察到

$$((I^{(l)})^T \bar{V}^{\perp})^{-1} = (\bar{V}^{\perp})^T I^{(l)} \left((I^{(l)})^T \bar{V}^{\perp} (\bar{V}^{\perp})^T I^{(l)} \right)^{-1},$$

并很快得到

$$\left(((I^{(l)})^T \bar{V}^{\perp})^{-1} \right)^T ((I^{(l)})^T \bar{V}^{\perp})^{-1} = \left((I^{(l)})^T \bar{V}^{\perp} (\bar{V}^{\perp})^T I^{(l)} \right)^{-1}. \tag{60}$$

我们还注意到

$$(I^{(l)})^T \bar{V} \bar{V}^T I^{(l)} = (I^{(l)})^T \left(I - \bar{V}^{\perp} (\bar{V}^{\perp})^T \right) I^{(l)}, \tag{61}$$

and

$$\begin{aligned}
Q_1 &\triangleq \Lambda_V^T \Lambda_V \\
&= \left(\left(((I^{(l)})^T \bar{V}^{\perp})^{-1} (I^{(l)})^T \bar{V} \right)^T \left(((I^{(l)})^T \bar{V}^{\perp})^{-1} (I^{(l)})^T \bar{V} \right) \right) \\
&= \bar{V}^T I^{(l)} \left(((I^{(l)})^T \bar{V}^{\perp})^{-1} \right)^T ((I^{(l)})^T \bar{V}^{\perp})^{-1} \left((I^{(l)})^T \bar{V} \right).
\end{aligned} \tag{62}$$

结合式 (60)、(61) 和 (62) 可得

$$\begin{aligned} Q &\triangleq \left(\left(((I^{(l)})^T\bar{V}^{\perp})^{-1}\right)^T((I^{(l)})^T\bar{V}^{\perp})^{-1}\left((I^{(l)})^T\bar{V}\bar{V}^T I^{(l)}\right)\right) \\ &= \left(\left((I^{(l)})^T\bar{V}^{\perp}(\bar{V}^{\perp})^T I^{(l)}\right)^{-1}\left((I^{(l)})^T\left(I-\bar{V}^{\perp}(\bar{V}^{\perp})^T\right)I^{(l)}\right)\right) \\ &= \left((I^{(l)})^T\bar{V}^{\perp}(\bar{V}^{\perp})^T I^{(l)}\right)^{-1} - I. \end{aligned} \tag{63}$$

由于 Q_1 和 Q 的所有非零特征值都相同

$$\lambda_{max}(\Lambda_V^T\Lambda_V) = \lambda_{max}(Q_1) = \lambda_{max}(Q). \tag{64}$$

将上述过程重复一遍，其中用 U 替换 V，用 $Q_1^{\perp}$ 替换 Q_1，并用 $Q^{\perp}$ 替换 Q，即可得到式 (64) 的以下类似结果

$$\lambda_{max}(\Lambda_U^T\Lambda_U) = \lambda_{max}(Q_1^{\perp}) = \lambda_{max}(Q^{\perp}). \tag{65}$$

结合式 (59) 和式 (62)–(65)，即可证明条件 (48) 对 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价关系的充分性。

□

上述三个推论均为 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价关系提供了有用的刻画。根据所面临的情境以及可用的数值、计算或统计资源，可以采用其中任意一种。在接下来的章节中，我们将重点分析一种特定类型的问题，该分析主要与推论 3 中给出的谱刻画相关。

4 典型最坏情况分析：$\ell_0^* - \ell_1^*$-等价关系

本节将通过分析进一步阐明推论 3 中的条件何时确实成立。我们将在典型的统计情境下展开讨论。首先假设 V 和 U 是统计对象，并在此假设下探究是否存在某些情形，使得 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价关系通常成立。当然，V 和 U 的统计特性有许多合理的选择。我们将假设 $\bar{}$ $\bar{}$ 采用谱理论中最一般、典型的均匀随机情形。这意味着 V 和 U 均服从 Haar 分布。稀疏恢复领域的专家很快会注意到，这在某种程度上类似于假设标准压缩感知中 k-稀疏向量的非零分量位置是均匀随机选取的。除了 [42, 43, 45, 46, 48, 50] 中的 RDT 考量以及 [13, 15] 中的高维几何考量之外，我们尚未发现其他技术能够避免这类假设，同时仍能对类似定理 1 和推论 1–3 中条件的情形，给出最终精确的相变（PT）刻画。

假设 V 和 U 具有统计特性来进行分析，我们将揭示三个先验上未必相关的领域之间一个非常有趣且相当显著的联系：1）压缩感知（**CS**）、2）因果推断（**C-inf**）和3）自由概率论（**FPT**）。前两个领域之间的联系即使在统计背景之外也存在，因此我们已在前几节的讨论中部分纳入了这一联系。另一方面，在接下来的章节中，我们将进一步加深对这一联系的理解，并将其与自由概率论以及现代随机矩阵谱理论中的一系列通用概念联系起来。

4.1 自由概率论(自由概率变换)–预备知识

由于这是一篇导论性论文，旨在建立因果推断与自由概率论（FPT）之间的联系，因此在本小节中，我们将先回顾一些自由概率论基础。自由概率论在数学上内容深奥、结构复杂，因此我们只介绍基本的自由概率论定义，解释关键的技术结果，最后简要说明这些结果在实践中的应用。之后，在接下来的各节中，我们将看到如何运用其中一些自由概率论概念，加深对因果推断本身的理解。

当然，自由概率变换（FPT）是一个非常通用且抽象的概念。下面我们将聚焦于它在随机矩阵谱理论中的一些关键蕴含关系，并从概述自由概率变换背后的主要动机开始。也就是说，我们从最简单的矩阵入手，它们当然就是标量。

4.1.1 自由概率变换基础 – 随机标量变量

众所周知，若有两个相互独立的随机变量 A 和 B，其对应的概率密度函数分别为 $f_A(\cdot)$ 和 $f_B(\cdot)$，那么确定它们之和或之积的分布，通常需要借助特征函数以及相应的傅里叶逆变换。更具体地说，首先可以看出，这两个变量各自的特征函数为

$$\begin{aligned} F_A(jw) &\triangleq Ee^{jwA} = \int e^{jwa} f_A(a)da \triangleq \mathcal{F}(f_A(a)) \\ F_B(jw) &\triangleq Ee^{jwB} = \int e^{jwb} f_B(b)db \triangleq \mathcal{F}(f_B(b)). \end{aligned} \tag{66}$$

假设

$$C = A + B, \tag{67}$$

类似于（66），我们也有

$$F_C(jw) = Ee^{jwC} = \int e^{jwc} f_C(c)dc. \tag{68}$$

此外，

$$F_C(jw) = Ee^{jwC} = Ee^{jw(A+B)} = Ee^{jwA}Ee^{jwB} = F_A(jw)F_B(jw) = \int e^{jwa} f_A(a)da \int e^{jwb} f_B(b)db, \tag{69}$$

最后

$$f_C(c) = \mathcal{F}^{-1}(F_C(jw)). \tag{70}$$

由此不难看出，只要知道式（69）和式（70），就足以从 A 各自的概率密度函数推得 $C = A + B$ 和 B的概率密度函数。上述机制之所以能够奏效，关键在于引入了傅里叶变换和所谓的特征函数。事实证明，在变换域中，随机变量的和在某种意义上对应于它们的乘积，因此可以成功地将它们分离开来，再依靠各自的概率密度函数。尽管这种方法相当简单，而且已有近两个世纪的历史，但直到几十年前，人们才发现矩阵也存在类似的方法。此外，探索这一方法的过程比人们所能想象的更加曲折、难以预料。Dan Voiculescu 关于群论的研究（例如，见 [54–56]）几乎是在附带的过程中揭示了这一方法。当然，鉴于其极其重要的实际意义，这一发现立即引起了广泛关注；在发现后的几年里，也陆续出现了一些出色的成果，使得这一方法得以用相对简单、易于理解的方式呈现。下文将循着同样的思路，略去所有抽象内容，重点介绍自由概率变换的核心机制如何运作（更多细节可参见，例如，[17, 28, 40, 53–56]）。

4.1.2 自由概率变换基础——随机矩阵变量

和上文讨论标量时一样，我们这里也从两个随机变量 A 和 B 开始。不过这一次，这两个变量是对称矩阵，即 $A = A^T \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 和 $B = B^T \in \mathbb{R}^{n\times n}$。我们还将假设处于大 n 体制，并且这些矩阵的特征子空间服从 Haar 分布。此外，我们将假设它们各自的谱律分别为 $f_A(\cdot)$ 和 $f_B(\cdot)$。与上文标量情形中的论述类似，我们这里也将通过引入分布变换来展开讨论。不过，与标量情形不同，这里我们要引入的不是一种变换，而是三种不同的变换。我们先从所谓的

概率密度函数 $f(\cdot)$ 的斯蒂尔切斯变换（或者我们通常称之为 G 变换）

$$G(z) \triangleq \int_{I_f} \frac{f(x)}{z-x}dx, \quad z \in \mathbb{C} \setminus I_f, \tag{71}$$

其中 I_f 是 $f(\cdot)$ 的定义域。于是还可以得到逆关系（这与傅里叶逆变换和随机变量之和的底层概率密度函数之间的上述关系有些类似）

$$f(x) = \lim_{\epsilon \to 0^+} \frac{G(x-i\epsilon) - G(x+i\epsilon)}{2i\pi} \quad \text{or} \quad f(x) = -\lim_{\epsilon \to 0^+} \frac{\text{imag}(G(x+i\epsilon))}{\pi}. \tag{72}$$

要使上述结论成立，默认假设 $f(x)$ 连续会更方便。不过，我们也会在离散（或半离散）情形下使用它，因为显而易见，只要将其渐近地转换为连续情形，便可使论证完全严谨。稍后，当我们看到一些可能出现此类情况的具体示例时，会再多作说明，更深入地解释究竟哪些量可能是离散的，以及如何处理这种离散性。在此期间，我们将继续讨论一般原理，不必过于担心那些偏离常见情形时可能出现、且可能需要单独处理的各种底层技术细节。为此，我们接下来考虑满足下列条件的 $R(\cdot)$-变换和 $S(\cdot)$-变换

$$R(G(z)) + \frac{1}{G(z)} = z, \tag{73}$$

and

$$S(z) = \frac{1}{R(zS(z))} \quad \text{and} \quad R(z) = \frac{1}{S(zR(z))}. \tag{74}$$

设 $f_A(\cdot)$ 和 $f_B(\cdot)$ 分别为 A 和 B 的谱分布，且 $R_A(z)/S_A(z)$ 和 $R_B(z)/S_B(z)$ 分别为它们对应的 $R(\cdot)$-/$S(\cdot)$-变换。于是有如下结论

Voiculescu 自由概率理论的关键概念 [54, 55]:

$$\begin{array}{rcl} C = A+B & \Longrightarrow & R_C(z) = R_A(z) + R_B(z) \\ C = AB & \Longrightarrow & S_C(z) = S_A(z)S_B(z). \end{array} \tag{75}$$

现在不难看出，式（71）–（75）足以确定具有给定谱密度及特征子空间的 Haar 分布基的两个独立矩阵之和或乘积的谱分布。上述内容当然是一条普适原则。只要能够获取底层矩阵 A 和 B 的统计性质，它几乎总能应用。在下一节中，我们将进一步提高要求，并表明在因果推断的情形下，可以如此运用上述所有内容，最终明确确定所有感兴趣的量。此外，尽管这种方法有时看起来颇为繁复，最终结果却会以相当简洁优雅的闭式呈现。

4.2 揭示 C-inf $\longleftrightarrow$ 自由概率变换之间的联系

现在，我们终于可以转向本文的一个关键方面，即揭示 C-inf 与自由概率变换之间一个颇为出乎意料的联系。这一联系的第一部分在某种程度上是隐含的，涵盖了我们在上一节中所介绍的内容。具体而言，我们运用压缩感知的关键概念和随机对偶理论（RDT），将因果推断的成功与某些代数结构的行为联系起来。尤其是，我们确立了所谓的 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价关系，将其作为决定 C-inf 最终成功程度的关键概念。这一联系的第二部分建立在第一部分的基础之上，通过自由概率理论工具分析 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价关系。在接下来的几节中，我们将对此进行详尽而自成一体的分析。

4.2.1 对 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价关系的谱方法分析

如前所述，下面我们将依据推论 3 中给出的 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价关系的谱刻画。显然，确定 $\lambda_V^T\lambda_V\lambda_U^T\lambda_U$ 的谱就足以确定何时出现 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价关系（事实上，只需确定谱的边缘即可）。虽然我们将在接下来的几节中确定 $\lambda_V^T\lambda_V\lambda_U^T\lambda_U$ 的谱，但这里需要指出的是，在最坏情况下，这或许并非必要。具体而言，在最坏情况下，有

$$\lambda_{max}(\lambda_V^T\lambda_V\lambda_U^T\lambda_U) \leq \lambda_{max}(\lambda_V^T\lambda_V)\lambda_{max}(\lambda_U^T\lambda_U). \tag{76}$$

在大 n 极限下，由于集中性以及 V和 U 服从相同的 Haar 分布，还可以得到

$$\lambda_{max}(\lambda_V^T\lambda_V\lambda_U^T\lambda_U) \leq \lambda_{max}(\lambda_V^T\lambda_V)\lambda_{max}(\lambda_U^T\lambda_U) \longrightarrow \left(\lambda_{max}(\lambda_V^T\lambda_V)\right)^2. \tag{77}$$

此外，在最坏情况下， $U = V$，等号确实成立，因为

$$\lambda_{max}(\lambda_V^T\lambda_V\lambda_V^T\lambda_V) = \lambda_{max}((\lambda_V^T\lambda_V)^2) = \left(\lambda_{max}(\lambda_V^T\lambda_V)\right)^2. \tag{78}$$

这基本　　上意味着，在最坏情况下，只需考虑 Q 的谱，且

$$Q \triangleq \lambda_V^T\lambda_V. \tag{79}$$

4.2.2 Q的谱的自由概率变换分析

我们首先回顾（44）和（45）

$$\begin{aligned} Q_1 &\triangleq \Lambda_V^T\Lambda_V \\ Q &\triangleq \left((I^{(l)})^T\bar{V}^\perp(\bar{V}^\perp)^TI^{(l)}\right)^{-1} - I \\ Sp(Q_1) &\iff_{\backslash 0} Sp(Q), \end{aligned} \tag{80}$$

其中， $Sp(\cdot)$表示矩阵参数的谱，而$\iff_{\backslash 0}$ 表示谱中除零特征值之外部分的等价关系。显然，接下来只需处理以下对象的谱即可

$$D \triangleq (I^{(l)})^T\bar{V}^\perp(\bar{V}^\perp)^TI^{(l)}. \tag{81}$$

考虑 Haar 分布的 $\bar{U}_D^\perp \in \mathbb{R}^{n\times(n-l)}$，其中（$\bar{U}_D^\perp$）$^T\bar{U}_D^\perp = I_{(n-l)\times(n-l)}$，并令

$$U_D = \begin{bmatrix}\bar{U}_D & \bar{U}_D^\perp\end{bmatrix} \quad \text{with} \quad U_D^TU_D = I_{n\times n}. \tag{82}$$

此外，我们假设$\bar{U}_D^\perp$（以及 U_D）与 $\bar{V}^\perp$相互独立。令

$$\bar{D} \triangleq (I^{(l)})^TU_D^T\bar{V}^\perp(\bar{V}^\perp)^TU_DI^{(l)}, \tag{83}$$

¯我们有， D 和 D 的谱在统计上是相同的，即

$$Sp(D) \triangleq Sp((I^{(l)})^T\bar{V}^\perp(\bar{V}^\perp)^TI^{(l)}) \iff_{\mathbb{P}} Sp((I^{(l)})^TU_D^T\bar{V}^\perp(\bar{V}^\perp)^TU_DI^{(l)}) \triangleq Sp(\bar{D}), \tag{84}$$

其中， $\iff_{\mathbb{P}}$ 表示统计/概率等价。上述统计恒等式成立的依据有两点：1）投影算子 $\bar{V}^\perp(\bar{V}^\perp)^T$的谱在两侧进行前置和后置酉乘法后保持不变；2） $\bar{V}^\perp$ 的 Haar 结构保持不变。除去零特征值后，我们进一步有

$$Sp((I^{(l)})^TU_D^T\bar{V}^\perp(\bar{V}^\perp)^TU_DI^{(l)}) \iff_{\mathbb{P}\backslash 0} Sp(\bar{V}^\perp(\bar{V}^\perp)^TU_DI^{(l)}(I^{(l)})^TU_D^T) \iff Sp(\bar{V}^\perp(\bar{V}^\perp)^T\bar{U}_D^\perp(\bar{U}_D^\perp)^T), \tag{85}$$

其中，与上文类似，$\overset{\mathbb{P}\backslash 0}{\Longleftrightarrow}$ 表示谱中除零特征值之外部分的统计/概率等价（这些零特征值是由非方形底层矩阵引入的）。显然，下面我们感兴趣的核心对象将是

$$\tilde{D} \triangleq \bar{V}^{\perp}(\bar{V}^{\perp})^T\bar{U}_D^{\perp}(\bar{U}_D^{\perp})^T, \tag{86}$$

其中 $\bar{V}^{\perp}$ 和 $\bar{U}_D^{\perp}$ 均服从 Haar 分布，且相互独立。设定

$$\begin{aligned}\mathcal{V} &\triangleq \bar{V}^{\perp}(\bar{V}^{\perp})^T \\ \mathcal{U} &\triangleq \bar{U}_D^{\perp}(\bar{U}_D^{\perp})^T,\end{aligned} \tag{87}$$

根据 (86)，我们很容易得到

$$\tilde{D} \triangleq \mathcal{V}\mathcal{U}, \tag{88}$$

接下来，我们首先着重处理 $\mathcal{V}$ 的谱及其相关变换。由于我们将在数学上最具挑战性的高维 n 线性渐近区间中进行分析，因此引入以下高维缩放会很有帮助

$$\beta \triangleq \lim_{n\to\infty}\frac{k}{n} \quad \text{and} \quad \eta \triangleq \lim_{n\to\infty}\frac{l}{n} \quad \text{and} \quad \alpha \triangleq \lim_{n\to\infty}\frac{m}{n^2} = \lim_{n\to\infty}\frac{n^2-(n-l)^2}{n^2} = 1-(1-\eta)^2. \tag{89}$$

我们从一个显而易见的观察开始。设 $f_{\mathcal{V}}(\cdot)$ 为 $\mathcal{V}$ 的谱分布。那么

$$f_{\mathcal{V}}(x) = (1-\beta)\delta(1-x) + \beta\delta(x), \tag{90}$$

其中 $\delta(\cdot)$ 表示标准狄拉克δ函数，仅当其自变量取值为零时才非零。利用 (71) 中 G-变换的定义，我们可以得到

$$G_{\mathcal{V}}(z) = \int\frac{f_{\mathcal{V}}(x)}{z-x}dx = \int\frac{(1-\beta)\delta(1-x)+\beta\delta(x)}{z-x}dx = \frac{1-\beta}{z-1}+\frac{\beta}{z} = \frac{z-\beta}{z^2-z}. \tag{91}$$

此外，根据 (85)，我们有

$$R_{\mathcal{V}}(y) = z - \frac{1}{y} \quad \text{with} \quad y = G_{\mathcal{V}}(z) \quad \text{and} \quad z = G_{\mathcal{V}}^{-1}(y). \tag{92}$$

由（91）和（92）进一步得到

$$G_{\mathcal{V}}(z) = y \iff \frac{z-\beta}{z^2-z} = y \iff z^2y - z(y+1) + \beta = 0. \tag{93}$$

解出 z 可得

$$z = \frac{y+1\pm\sqrt{(y+1)^2-4\beta y}}{2y}. \tag{94}$$

结合（92）和（94），对于 R-变换可得

$$R_{\mathcal{V}}(y) = z - \frac{1}{y} = \frac{y-1\pm\sqrt{(y+1)^2-4\beta y}}{2y}, \tag{95}$$

为确保完整性，我们采用保留两种 $\pm$ 符号的策略。为确定 S变换，我们首先将式（74）和式（95）结合起来。

$$S_{\mathcal{V}}(z) = \frac{1}{R_{\mathcal{V}}(zS_{\mathcal{V}}(z))} = \frac{1}{\frac{zS_{\mathcal{V}}(z)-1\pm\sqrt{(zS_{\mathcal{V}}(z)+1)^2-4\beta zS_{\mathcal{V}}(z)}}{2zS_{\mathcal{V}}(z)}}. \tag{96}$$

经过一些代数变换，我们得到

$$\begin{array}{rrcl} & zS_{\mathcal{V}}(z)-1-2z & = & \mp\sqrt{(zS_{\mathcal{V}}(z)+1)^2-4\beta zS_{\mathcal{V}}(z)} \\ \iff & (zS_{\mathcal{V}}(z)-1-2z)^2 & = & (zS_{\mathcal{V}}(z)+1)^2-4\beta zS_{\mathcal{V}}(z) \\ \iff & (zS_{\mathcal{V}}(z))^2-2(2z+1)zS_{\mathcal{V}}(z)+(2z+1)^2 & = & (zS_{\mathcal{V}}(z))^2+2zS_{\mathcal{V}}+1-4\beta zS_{\mathcal{V}}(z) \\ \iff & -2(2z+1)zS_{\mathcal{V}}(z)+4z^2+4z & = & 2zS_{\mathcal{V}}(z)-4\beta zS_{\mathcal{V}}(z) \\ \iff & 4z^2+4z & = & (4z^2+4z)S_{\mathcal{V}}(z)-4\beta zS_{\mathcal{V}}(z) \\ \iff & z+1 & = & S_{\mathcal{V}}(z)(z+1-\beta). \end{array} \tag{97}$$

由式（97）最终可得

$$S_{\mathcal{V}}(z)=\frac{z+1}{z+1-\beta}. \tag{98}$$

由于这是一个非常一般的结果，因此将其形式化为以下引理很有用。

引理 1. 设 $\bar{V}^{\perp}\in\mathbb{R}^{n\times(n-k)}$ 是 $\mathbb{R}^n$ 中一个维数为 $(n-k)$ 的子空间的 Haar 分布的酉基。设 $\mathcal{V}$ 如 (87) 所示，即

$$\mathcal{V}\triangleq\bar{V}^{\perp}(\bar{V}^{\perp})^T. \tag{99}$$

在线性渐近区间的大 n 中，当 β 时，$\lim_{n\to\infty}\frac{k}{n}$， $\mathcal{V}$ 的谱密度的 S-变换 $f_{\mathcal{V}}(\cdot)$ 为

$$S_{\mathcal{V}}(z)=\frac{z+1}{z+1-\beta}. \tag{100}$$

证明。由上述讨论可得。 □

由于 $\mathcal{V}$ 和 $\mathcal{U}$ 结构相同（唯一的区别在于其中一个维数），我们很容易得到

$$S_{\mathcal{U}}(z)=\frac{z+1}{z+1-\eta}. \tag{101}$$

结合式（75）、（88）、（98）和（101）可得

$$S_{\tilde{D}}(z)=\frac{(z+1)^2}{(z+1-\beta)(z+1-\eta)}. \tag{102}$$

由式（74）还可得

$$R_{\tilde{D}}(z)=\frac{1}{S_{\tilde{D}}(zR_{\tilde{D}}(z))}=\frac{1}{\frac{(zR_{\tilde{D}}(z)+1)^2}{(zR_{\tilde{D}}(z)+1-\beta)(zR_{\tilde{D}}(z)+1-\eta)}}=\frac{(zR_{\tilde{D}}(z)+1-\beta)(zR_{\tilde{D}}(z)+1-\eta)}{(zR_{\tilde{D}}(z)+1)^2}. \tag{103}$$

此外，由式（72）可得

$$R_{\tilde{D}}(G_{\tilde{D}}(z))+\frac{1}{G_{\tilde{D}}(z)}=z, \tag{104}$$

and

$$G_{\tilde{D}}(z)R_{\tilde{D}}(G_{\tilde{D}}(z))=zG_{\tilde{D}}(z)-1, \tag{105}$$

由式（103）还可以进一步得到

$$R_{\tilde{D}}(G_{\tilde{D}}(z))=\frac{(G_{\tilde{D}}(z)R_{\tilde{D}}(G_{\tilde{D}}(z))+1-\beta)(G_{\tilde{D}}(z)R_{\tilde{D}}(G_{\tilde{D}}(z))+1-\eta)}{(G_{\tilde{D}}(z)R_{\tilde{D}}(G_{\tilde{D}}(z))+1)^2}. \tag{106}$$

将式（105）代入式（106）后，我们得到

$$R_{\tilde{D}}(G_{\tilde{D}}(z)) = \frac{(zG_{\tilde{D}}(z) - 1 + 1 - \beta)(zG_{\tilde{D}}(z) - 1 + 1 - \eta)}{(zG_{\tilde{D}}(z) - 1 + 1)^2} = \frac{(zG_{\tilde{D}}(z) - \beta)(zG_{\tilde{D}}(z) - \eta)}{(zG_{\tilde{D}}(z))^2}. \tag{107}$$

(104) 与 (107) 结合后还可得

$$z - \frac{1}{G_{\tilde{D}}(z)} = \frac{(zG_{\tilde{D}}(z) - \beta)(zG_{\tilde{D}}(z) - \eta)}{(zG_{\tilde{D}}(z))^2}. \tag{108}$$

由 (108) 可迅速得到

$$z^3(G_{\tilde{D}}(z))^2 - z^2 G_{\tilde{D}}(z) = z^2(G_{\tilde{D}}(z))^2 - (\beta + \eta)zG_{\tilde{D}}(z) + \beta\eta, \tag{109}$$

and

$$(G_{\tilde{D}}(z))^2(z^3 - z^2) - G_{\tilde{D}}(z)(z^2 - z(\beta + \eta)) - \beta\eta = 0. \tag{110}$$

解出 $G_{\tilde{D}}(z)$ 后，最终得到

$$G^{\pm}_{\tilde{D}}(z) = \frac{z^2 - z(\beta + \eta) \pm \sqrt{(z^2 - z(\beta + \eta))^2 + 4\beta\eta(z^3 - z^2)}}{2(z^3 - z^2)}, \tag{111}$$

or

$$G^{\pm}_{\tilde{D}}(z) = \frac{z - (\beta + \eta) \pm \sqrt{(z - (\beta + \eta))^2 + 4\beta\eta(z - 1)}}{2(z^2 - z)}. \tag{112}$$

以上内容足以证明以下引理。

引理 2. 设 $\bar{V}^{\perp} \in \mathbb{R}^{n\times(n-k)}$ 和 $\bar{U}^{\perp}_{D} \in \mathbb{R}^{n\times(n-k)}$ 是 $\mathbb{R}^n$ 中 $(n-k)$ 维 ˜ 子空间的 Haar分布的酉基。设 $\mathcal{V}$ 和 $\mathcal{U}$ 如 (87) 所示， D 如 (88) 所示，即

$$\begin{aligned} \mathcal{V} &\triangleq \bar{V}^{\perp}(\bar{V}^{\perp})^T \\ \mathcal{U} &\triangleq \bar{U}^{\perp}_{D}(\bar{U}^{\perp}_{D})^T \\ \tilde{D} &\triangleq \mathcal{V}\mathcal{U}. \end{aligned} \tag{113}$$

在大 n 线性渐近区间内，当 β、$\lim_{n\to\infty}\frac{k}{n}$ 时， $\tilde{D}$ 的谱密度的 G-变换 $f_{\tilde{D}}(\cdot)$ 为

$$G^{\pm}_{\tilde{D}}(z) = \frac{z - (\beta + \eta) \pm \sqrt{(z - (\beta + \eta))^2 + 4\beta\eta(z - 1)}}{2(z^2 - z)}. \tag{114}$$

证明。由上述讨论可知。“+/–”符号分别对应根号下虚部为负/正的情况。

□

然后利用 (72) 确定 $f_{\tilde{D}}(x)$:

$$f_{\tilde{D}}(x) = -\lim_{\epsilon\to 0^+}\frac{\mathrm{imag}(G_{\tilde{D}}(x + i\epsilon))}{\pi}. \tag{115}$$

上述是一个通用过程。图 3 展示了取两个具体值$\beta = 0.2$ 和 $\eta = 0.6$时可以得到的结果。需要注意的是，事先并不清楚应该采用两个 ± 符号中的哪一个。正如图 3 所示，必须相当谨慎，并将两个符号都纳入考虑。从图 3 还可以看出，谱本身有四个临界点：两个狄拉克 δ 函数的位置，即零和一，以及谱主体的两个边缘，x_l 和 x_u。这些点的取值显示在右侧的图中。一般来说，实际上也可以确定它们的闭式表达式。

此外，事实证明，可以确定整个谱函数的闭式。接下来的章节˜将更详细地分析 D 的谱，并最终给出所有相关谱特征的闭式表达式。

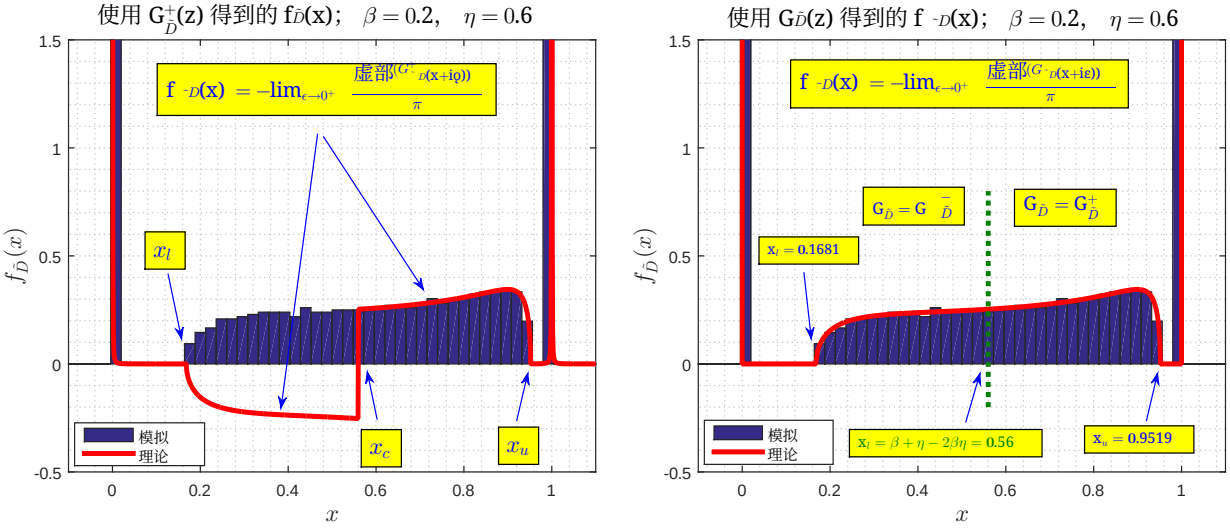


图 3：$G_{\tilde{D}}^{+}(z)$ 和 $G_{\tilde{D}}^{-}(z)$ 都需要纳入考虑

˜4.2.2.1 D 的谱——闭式表达式

本文关注的主要问题之一，是如何利用我们将在本节中得到的最终结果，而不一定是呈现推导这些结果所需的细枝末节。因此，我们将概述所有关键论证，并省略不必要的琐碎细节。不过，我们要强调的是，这份概述会包含所有关键线索，因此只需稍加努力，有需要的人便能补齐整幅图景中缺失的部分。

如上所述，考察 (112) 的分母并牢记 (115) 中的 $f \longleftrightarrow G$ 联系，可以发现我们所关注的概率密度函数 $f_{\tilde{D}}(x)$ 可能包含两个狄拉克 δ 函数，一个位于零处，另一个位于一处。此外，谱的体相将处于根号内实部为负的范围内。几乎不言而喻，整个谱也将位于零与一之间。最后，分界点 x_c 是 (115) 中需要从 $G_{\tilde{D}}^{+}(z)$ 切换到 $G_{\tilde{D}}^{-}(z)$ 的位置，其取值由根号内虚部变号的位置确定。根据这些观察，接下来便可以具体确定一些相关量。

基于上文刚才的观察，我们首先将 $f_{\tilde{D}}(x)$ 表示为其三个关键组成部分之和（两个狄拉克 δ 函数和体相）

$$f_{\tilde{D}}(x) = f_0\delta(x-0) + f_{\tilde{D}}^{(b)}(x) + f_1\delta(x-1). \tag{116}$$

由 (116) 可知，只要确定狄拉克 δ 系数 f_0 和 f_1，以及体概率密度函数 $f_{\tilde{D}}^{(b)}(\cdot)$，就能完全确定 $f_{\tilde{D}}(x)$。

1) 求解 f_0：为确定 f_0 我们先观察（115）中 $x=0$

$$f_{\tilde{D}}(0) = -\lim_{\epsilon\to 0^+} \frac{\text{imag}(G_{\tilde{D}}(i\epsilon))}{\pi}. \tag{117}$$

利用 (112)，我们进一步得到

$$f_{\tilde{D}}(0) \quad = \quad -\frac{1}{\pi}\lim_{\epsilon\to 0^+} \text{imag}\left(\frac{i\epsilon-(\beta+\eta)\pm\sqrt{(i\epsilon-(\beta+\eta))^2+4\beta\eta(i\epsilon-1)}}{2((i\epsilon)^2-i\epsilon)}\right)$$

$$
\begin{aligned}
&= -\frac{1}{\pi}\lim_{\epsilon\to 0^+}\operatorname{imag}\left(\frac{-(\beta+\eta)\pm\sqrt{-\epsilon^2+(\beta+\eta)^2-4\beta\eta-2i\epsilon(\beta+\eta-2\beta\eta)}}{2(-\epsilon^2-i\epsilon)}\right)\\
&= -\frac{1}{\pi}\lim_{\epsilon\to 0^+}\operatorname{imag}\left(\frac{-(\beta+\eta)\pm\sqrt{(\beta-\eta)^2}}{2(-i\epsilon)}\right)\\
&= -\frac{1}{\pi}\lim_{\epsilon\to 0^+}\operatorname{imag}\left(\frac{-(\beta+\eta)-|\beta-\eta|}{-2i\epsilon}\right)\\
&= (\beta+\eta+|\beta-\eta|)\left(-\frac{1}{\pi}\lim_{\epsilon\to 0^+}\operatorname{imag}\left(\frac{1}{i\epsilon}\right)\right)\\
&= \max(\beta,\eta)\delta(0), \qquad (118)
\end{aligned}
$$

其中，第四个等式（在 $\pm$ 中选择“–”号）成立，是因为 $0 \le x_c$ （谱属于区间 $[0,1]$，且 x_c 必须属于谱）；最后一个等式成立，是因为按照约定

$$\delta(0) = \left(-\frac{1}{\pi}\lim_{\epsilon\to 0^+}\operatorname{imag}\left(\frac{1}{i\epsilon}\right)\right). \qquad (119)$$

为了解释式 (119) 背后的原理，我们先稍作展开，从以下内容开始:

$$g(x) = \delta(x). \qquad (120)$$

由式 (71) 可得

$$G(z) = \int_x \frac{\delta(x)dx}{z-x} = \frac{1}{z}, \qquad (121)$$

由式 (72) 可得

$$\delta(x) = -\lim_{\epsilon\to 0^+}\frac{\operatorname{imag}(G(x+i\epsilon))}{\pi}. \qquad (122)$$

对于 $x=0$，则有

$$\delta(0) = -\lim_{\epsilon\to 0^+}\frac{\operatorname{imag}(G(i\epsilon))}{\pi} = -\lim_{\epsilon\to 0^+}\operatorname{imag}\left(\frac{1}{\pi i\epsilon}\right) = -\frac{1}{\pi}\lim_{\epsilon\to 0^+}\operatorname{imag}\left(\frac{1}{i\epsilon}\right), \qquad (123)$$

这与式 (119) 完全相同。上述对狄拉克 δ 函数的描述未必最为恰当。不过，对于我们在此所需而言，从概念上说已经足够。也就是说，我们此处关注的是确定乘在狄拉克 δ 函数前的比例常数，而非函数本身的表达式。要使整个处理更加恰当，一种方法是将所有内容转换到连续域，并选取一个连续函数作为 $\delta(x)$ 的渐近替代。例如，可以采用高斯连续近似

$$\delta(x) = \lim_{\sigma\to 0^+}\frac{e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}. \qquad (124)$$

那么，对于较小的 $\sigma = \epsilon\sqrt{\pi}/2$，以上结论均成立，并且

$$\delta(x) \to \lim_{\sigma\to 0^+}\frac{e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \to \lim_{\sigma\to 0^+}\frac{e^{-\frac{x^2}{\pi\epsilon^2}}}{\pi\epsilon} \quad \text{and} \quad \delta(0) \to \lim_{\sigma\to 0^+}\frac{1}{\pi\epsilon}. \qquad (125)$$

不过，区别在于，在计算和处理上述所有变换时，需要考虑由此产生/诱导的 ϵ-差异。当然，这些差异在实践和概念上都可以忽略不计，我们所呈现的所有结果在 σ 或 ϵ较小时的极限下仍然成立。然而，文字表述会繁琐得多，还需要加入大量额外的细节，以说明所有 ϵ-类型的修改，并展示它们的贡献确实微不足道。这些事情在概念上非常简单，却需要一项注重细节且十分繁琐的工作。鉴于，

另一方面，它们对论证的本质和最终结果完全没有贡献，因此我们选择在带有狄拉克 δ 函数的半离散域中进行处理。由此得到式（119）和（123）中的表达式。我们认为，保留少许传统意义上的不严谨，总好过用大量细节淹没整个论述；尽管这些细节可以避免这种不严谨，却会同时使整体内容更难理解，也可能更难掌握。

2）求 f_1：为确定 f_1，我们遵循上述方法，首先观察 $x=1$ (115)

$$f_{\tilde{D}}(1) = -\lim_{\epsilon\to 0^+}\frac{\mathrm{imag}(G_{\tilde{D}}(1+i\epsilon))}{\pi}. \tag{126}$$

进一步利用 (112) 可得

$$\begin{aligned}
f_{\tilde{D}}(1) &= -\frac{1}{\pi}\lim_{\epsilon\to 0^+}\mathrm{imag}\left(\frac{1+i\epsilon-(\beta+\eta)\pm\sqrt{(1+i\epsilon-(\beta+\eta))^2+4\beta\eta i\epsilon}}{2((1+i\epsilon)^2-1-i\epsilon)}\right)\\
&= -\frac{1}{\pi}\lim_{\epsilon\to 0^+}\mathrm{imag}\left(\frac{1-(\beta+\eta)\pm\sqrt{-\epsilon^2+(1-(\beta+\eta))^2-2i\epsilon(-1+\beta+\eta-2\beta\eta)}}{2(-\epsilon^2+i\epsilon)}\right)\\
&= -\frac{1}{\pi}\lim_{\epsilon\to 0^+}\mathrm{imag}\left(\frac{1-(\beta+\eta)\pm\sqrt{(1-(\beta-\eta))^2}}{2(i\epsilon)}\right)\\
&= -\frac{1}{\pi}\lim_{\epsilon\to 0^+}\mathrm{imag}\left(\frac{1-(\beta+\eta)+|1-(\beta+\eta)|}{2i\epsilon}\right)\\
&= (1-(\beta+\eta)+|1-(\beta+\eta)|)\left(-\frac{1}{\pi}\lim_{\epsilon\to 0^+}\mathrm{imag}\left(\frac{1}{i\epsilon}\right)\right)\\
&= \max(1-(\beta+\eta),0)\delta(0),
\end{aligned} \tag{127}$$

其中，第四个等号（在 $\pm$ 中选择“+”号）成立，是因为现在 $x_c\le 1$；最后一个等号则源于上述讨论过的 $\delta(0)$ 约定。

3）求 $f_{\tilde{D}}^{(b)}(x)$：为确定 $f_{\tilde{D}}^{(b)}(x)$，对于 $x\notin\{0,1\}$，我们再次从 (115) 出发，并针对一般的 x 谱的体相部分

$$f_{\tilde{D}}^{(b)}(x) = -\lim_{\epsilon\to 0^+}\frac{\mathrm{imag}(G_{\tilde{D}}(x+i\epsilon))}{\pi}. \tag{128}$$

再次利用 (112)，对于 $x\notin\{0,1\}$，我们有

$$\begin{aligned}
f_{\tilde{D}}^{(b)}(x) &= -\frac{1}{\pi}\lim_{\epsilon\to 0^+}\mathrm{imag}\left(\frac{x+i\epsilon-(\beta+\eta)\pm\sqrt{(x+i\epsilon-(\beta+\eta))^2+4\beta\eta(x+i\epsilon-1}}{2((x+i\epsilon)^2-x-i\epsilon)}\right)\\
&= -\frac{1}{\pi}\lim_{\epsilon\to 0^+}\mathrm{imag}\left(\frac{x-(\beta+\eta)\pm\sqrt{-\epsilon^2+(x-(\beta+\eta))^2+4\beta\eta(x-1)-2i\epsilon(-x+\beta+\eta-2\beta\eta)}}{2(x^2-x-\epsilon^2+i\epsilon(2x-1))}\right)\\
&= -\frac{1}{\pi}\lim_{\epsilon\to 0^+}\mathrm{imag}\left(\frac{x-(\beta+\eta)\pm\sqrt{(x-(\beta+\eta))^2+4\beta\eta(x-1)-2i\epsilon(-x+\beta+\eta-2\beta\eta)}}{2(x^2-x)}\right)\\
&= -\frac{1}{\pi}\lim_{\epsilon\to 0^+}\mathrm{imag}\left(\frac{\pm\sqrt{(x-(\beta+\eta))^2+4\beta\eta(x-1)-2i\epsilon(-x+\beta+\eta-2\beta\eta)}}{2(x^2-x)}\right).
\end{aligned} \tag{129}$$

现在，由于我们关注的是虚部，因此关注的区域是 x 根号下实部为负的区域（在该区域之外，即在 x 根号下实部非负的区域，$f_{\tilde{D}}^{(b)}(x)$ 为零）。为确定关注区域，我们从设定以下条件开始

$$T_{\tilde{D}}\triangleq\{x\in\mathbb{R}|(x-(\beta+\eta))^2+4\beta\eta(x-1)\le 0\}\quad\text{and}\quad x_c\triangleq\beta+\eta-2\beta\eta. \tag{130}$$

为明确刻画 $T_{\tilde{D}}$，我们来看以下内容

$$\begin{array}{rcl} (x-(\beta+\eta))^2+4\beta\eta(x-1) &=& 0 \\ \iff \quad x^2-2x(\beta+\eta-2\beta\eta)+(\beta+\eta)^2-4\beta\eta &=& 0 \\ \iff \quad x^2-2x(\beta+\eta-2\beta\eta)+(\beta-\eta)^2 &=& 0. \end{array} \tag{131}$$

解出 x 可得

$$x=\frac{2(\beta+\eta-2\beta\eta)\pm\sqrt{(2(\beta+\eta-2\beta\eta))^2-4(\beta-\eta)^2}}{2}=\beta+\eta-2\beta\eta\pm\sqrt{(\beta+\eta-2\beta\eta)^2-(\beta-\eta)^2}. \tag{132}$$

令

$$\begin{array}{rcl} x_l &\triangleq& \beta+\eta-2\beta\eta-\sqrt{(\beta+\eta-2\beta\eta)^2-(\beta-\eta)^2} \\ x_u &\triangleq& \beta+\eta-2\beta\eta+\sqrt{(\beta+\eta-2\beta\eta)^2-(\beta-\eta)^2}, \end{array} \tag{133}$$

可得

$$T_{\tilde{D}}=\{x\in\mathbb{R}|x\in[x_l,x_u]\}. \tag{134}$$

此外，由 (133) 还可得

$$0\le x_l\le x_u\le 1, \tag{135}$$

with

$$x_l=0 \quad \text{if} \quad \beta=\eta \quad \text{and} \quad x_u=1 \quad \text{if} \quad \beta=\eta=0.5. \tag{136}$$

(133) 中的前两个不等式显然成立，而第三个不等式可由以下观察得到

$$\beta+\eta-2\beta\eta\le\max(\beta,1-\beta)\le 1, \tag{137}$$

并观察以下推导过程

$$\begin{array}{rcl} \beta+\eta-2\beta\eta+\sqrt{(\beta+\eta-2\beta\eta)^2-(\beta-\eta)^2} &\le& 1 \\ \iff \quad (\beta+\eta-2\beta\eta)^2-(\beta-\eta)^2 &\le& (1-(\beta+\eta-2\beta\eta))^2 \\ \iff \quad -(\beta-\eta)^2 &\le& 1-2(\beta+\eta-2\beta\eta) \\ \iff \quad -(\beta-\eta)^2+2(\beta+\eta-2\beta\eta)-1 &\le& 0 \\ \iff \quad -(\beta+\eta)^2+2(\beta+\eta)-1 &\le& 0 \\ \iff \quad -(1-(\beta+\eta))^2 &\le& 0. \end{array} \tag{138}$$

回到 (129)，对于 $x\in T_{\tilde{D}}=[x_l,x_u]$ 我们还可以进一步得到

$$\begin{array}{rcl} f_{\tilde{D}}^{(b)}(x) &=& -\frac{1}{\pi}\lim\limits_{\epsilon\to 0^+}\text{imag}\left(\frac{\pm\sqrt{(x-(\beta+\eta))^2+4\beta\eta(x-1)-2i\epsilon(-x+\beta+\eta-2\beta\eta)}}{2(x^2-x)}\right) \\ &=& -\frac{1}{\pi}\lim\limits_{\epsilon\to 0^+}\text{imag}\left(\frac{\pm\sqrt{(x-(\beta+\eta))^2+4\beta\eta(x-1)-2i\epsilon(x_c-x)}}{2(x^2-x)}\right) \\ &=& -\frac{1}{\pi}\lim\limits_{\epsilon\to 0^+}\text{imag}\left(\frac{i\sqrt{-(x-(\beta+\eta))^2-4\beta\eta(x-1)}}{2(x^2-x)}\right), \end{array} \tag{139}$$

当 $x_c\le x\le x_u$ 时，选择“+”加号；当 $x_l\le x\le x_c$ 时，选择“–”符号。最后，由 (139) 可轻易得出

$$f_{\tilde{D}}^{(b)}(x) \quad = \quad \frac{\sqrt{-(x-(\beta+\eta))^2-4\beta\eta(x-1)}}{2\pi(x-x^2)} \quad \text{if} \quad x_l\le x\le x_u. \tag{140}$$

上述内容足以完全刻画谱分布 $f_{\tilde{D}}(x)$。我们在以下引理中总结这些结果。

引理 3。假设较大的 n 线性渐近区间满足

$$\beta \triangleq \lim_{n\to\infty} \frac{k}{n} \quad and \quad \eta \triangleq \lim_{n\to\infty} \frac{l}{n}. \tag{141}$$

令 $\bar{V}^{\perp} \in \mathbb{R}^{n\times(n-k)}$ 为 R^n中一个 $n-k$ 维子空间的 Haar 分布基。类似地，令 $\bar{U}_D^{\perp} \in \mathbb{R}^{n\times(n-k)}$ 为 R^n 中一个 $n-l$ 维子空间的 Haar 分布基。此外，令 $\bar{V}^{\perp} \in \mathbb{R}^{n\times(n-k)}$ 与 $\bar{U}_D^{\perp} \in \mathbb{R}^{n\times(n-k)}$ 相互独立。再令 $\mathcal{V}$、$\mathcal{U}$和 $\tilde{D}$ 如 (87) 和 (88) 中所定义，即令

$$\begin{aligned} \mathcal{V} &\triangleq \bar{V}^{\perp}(\bar{V}^{\perp})^T \\ \mathcal{U} &\triangleq \bar{U}_D^{\perp}(\bar{U}_D^{\perp})^T \\ \tilde{D} &\triangleq \mathcal{V}\mathcal{U}. \end{aligned} \tag{142}$$

令 x_l 和 x_u 如 (133) 中所定义，即

$$\begin{aligned} x_l &\triangleq \beta+\eta-2\beta\eta-\sqrt{(\beta+\eta-2\beta\eta)^2-(\beta-\eta)^2} \\ x_u &\triangleq \beta+\eta-2\beta\eta+\sqrt{(\beta+\eta-2\beta\eta)^2-(\beta-\eta)^2}, \end{aligned} \tag{143}$$

˜那么， D、 $f_{\tilde{D}}(x)$ 的极限谱分布为

$$f_{\tilde{D}}(x) = f_0\delta(x) + f_{\tilde{D}}^{(b)}(x) + f_1 f_0\delta(x-1) = \max(\beta,\eta)\delta(x) + f_{\tilde{D}}^{(b)}(x) + \max(1-(\beta+\eta),0)\delta(x-1), \tag{144}$$

with

$$f_{\tilde{D}}^{(b)}(x) = \begin{cases} \frac{\sqrt{-(x-(\beta+\eta))^2-4\beta\eta(x-1)}}{2\pi(x-x^2)}, & if\ x_l \le x \le x_u. \\ 0, & otherwise. \end{cases} \tag{145}$$

证明。结合 (116)、(118)、(127)、(140) 以及上述讨论即可得出。 □

图 4 展示了根据上述引理得到的 $\beta = 0.1$ 和 $\eta = 0.8$的谱函数。我们观察到，模拟结果与上述理论预测高度吻合。模拟结果使用中等规模的 $n = 4000$ 得到。

图 5 展示了根据上述引理得到的 $\beta = 0.2$ 和 $\eta = 0.9$的谱函数。由于相关函数具有一项显著性质，除了零点处狄拉克δ函数的权重从 0.8 增至 0.9，同时移除了位于一点的狄拉克δ函数外，谱与图 4 中的完全相同。我们再次观察到，模拟结果与理论预测高度吻合。与图 4 一样，模拟结果同样基于 $n = 4000$ 得到。

¯4.2.2.2 D/D 的谱——闭式表达式

回顾式 (82) 和 (83)，令

$$\bar{D} \triangleq (I^{(l)})^T U_D^T \bar{V}^{\perp}(\bar{V}^{\perp})^T U_D I^{(l)} = (\bar{U}_D^{(\perp)})^T \bar{V}^{\perp}(\bar{V}^{\perp})^T \bar{U}_D^{(\perp)}, \tag{146}$$

比较 (86) 和 (146) 可知，除缩放因子外，它们的谱基本相同。更¯ ˜准确地说， D 的所有特征值都包含在 D 中，但 D 比 D 多了 ηn 个零。这基本上意味着，需要调整 $f_{\tilde{D}}(x)$ 中 $\delta(x)$ 的乘数，并将所有内容缩放 $(1-\eta)$。下面的引理总结了这一过程的最终结果。

¯引理 4. 假设满足引理 3 中的设定。令 D 如 (146) 所示，即

$$\bar{D} \triangleq (\bar{U}_D^{(\perp)})^T \bar{V}^{\perp}(\bar{V}^{\perp})^T \bar{U}_D^{(\perp)}, \tag{147}$$

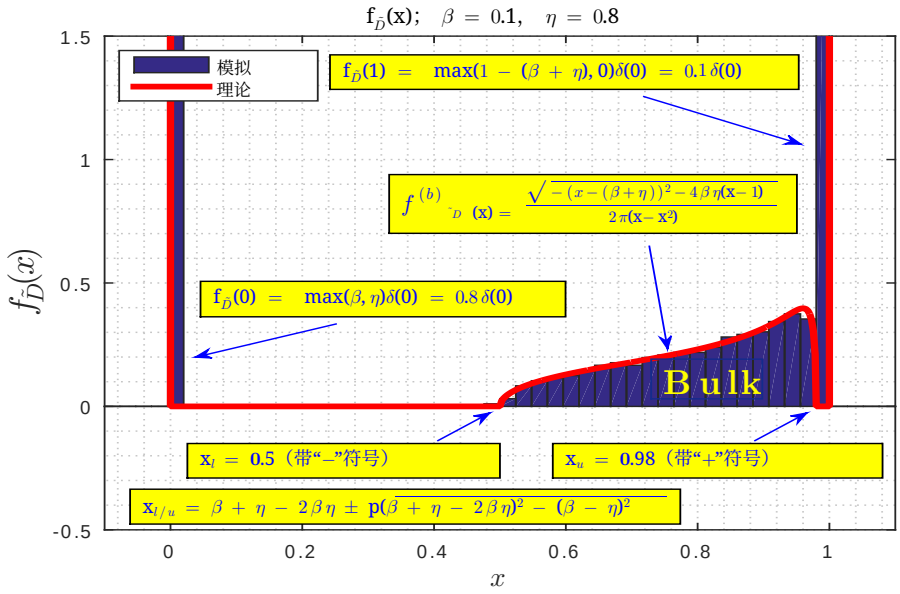


图 4: $f_{\tilde{D}}(x)$ – D的谱函数; $\beta = 0.1$ 和 $\eta = 0.8$

并令 x_l 和 x_u 如 (143) 所示。那么 D、 $f_{\tilde{D}}(x)$ 的极限谱分布，i s

$$f_{\tilde{D}}(x) = \frac{(\max(\beta,\eta)-\eta)}{1-\eta}\delta(x) + f_{\tilde{D}}^{(b)}(x) + \frac{\max(1-(\beta+\eta),0)}{1-\eta}\delta(x-1), \tag{148}$$

with

$$f_{\tilde{D}}^{(b)}(x) = \begin{cases} \frac{\sqrt{-(x-(\beta+\eta))^2-4\beta\eta(x-1)}}{2\pi(x-x^2)(1-\eta)}, & \text{if } x_l \le x \le x_u. \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{149}$$

此外，令 D 如式 (81) 所示，即

$$D \triangleq (I^{(l)})^T \bar{V}^{\perp} (\bar{V}^{\perp})^T I^{(l)}. \tag{150}$$

D的极限谱分布， $f_D(x)$，为

$$f_D(x) = f_{\tilde{D}}(x). \tag{151}$$

证明。关于 D 谱分布的部分，可通过从 D 的谱中移除 $l = \eta n$ 个零，并对剩余概率密度函数按 ($1-\eta$) 适当缩放得到。关于 D 谱分布的部分，则由式 (84) 得出，而式 (84) 本身是酉乘法下谱不变性的结果。 □

在图6中，我们展示了根据上述引理得到的 $\beta = 0.1$ 和 $\eta = 0.8$的谱函数。我们观察到，模拟结果与上述理论预测高度吻合。模拟结果使用中等规模的 $n = 4000$获得。

4.2.2.3 Q 的谱——闭式表达式

我们先回顾一下（81）

$$Q = D^{-1} - I. \tag{152}$$

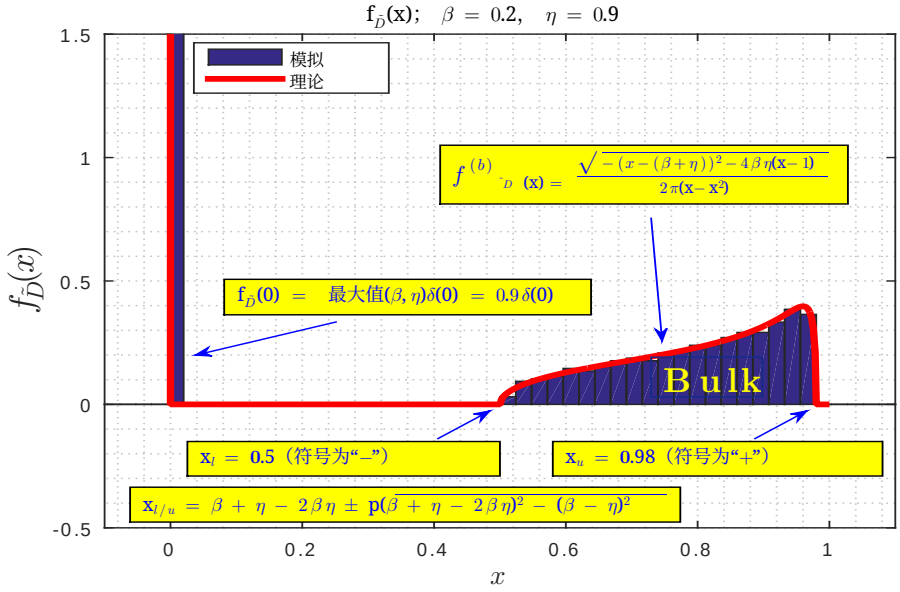


图 5： $f_{\tilde{D}}(x)$ – D的谱函数； $\beta = 0.2$ 和 $\eta = 0.9$

以上内容几乎都无需显式假设 $k \le l$。从这里开始则需要这一假设。由于 $k \le l$ 意味着 $\beta \le \eta$，因此 D 的谱没有零点，可以求逆。由于求逆后谱中位于 1 的部分保持不变，因此基本上可以认为， Q 的谱与 D 的谱相同，差别仅在于对 D的体相求逆。经过变量替换 $y = \frac{1}{x}$，可得求逆后的体相的谱分布

$$f^{(b)}_{\tilde{D}^{-1}}(y) = \begin{cases} \frac{-\sqrt{-(\frac{1}{y}-(\beta+\eta))^2-4\beta\eta(\frac{1}{y}-1)}}{2\pi(\frac{1}{y}-(\frac{1}{y})^2)(1-\eta)y^2}, & \text{if } \frac{1}{x_u} \le y \le \frac{1}{x_l}. \\ 0, & \text{otherwise,} \end{cases} \tag{153}$$

经过初等代数变换后得到

$$f^{(b)}_{\tilde{D}^{-1}}(x) = \begin{cases} \frac{\sqrt{-(1-x(\beta+\eta))^2-4\beta\eta x(1-x)}}{2\pi(1-x)(1-\eta)x}, & \text{if } \frac{1}{x_u} \le x \le \frac{1}{x_l}. \\ 0, & \text{otherwise,} \end{cases} \tag{154}$$

注意到 $\beta \le \eta$ 意味着 $\max(\beta,\eta) - \eta = 0$，将 (154 与 (148) 结合可得

$$f_{\tilde{D}^{-1}}(x) = f^{(b)}_{\tilde{D}^{-1}}(x) + \frac{\max(1-(\beta+\eta),0)}{1-\eta}\delta(x-1). \tag{155}$$

最后，对减去的单位矩阵进行调整，相当于从谱中的任意一点减去 1（或者说，将整个谱分布向左平移 1）。换言之

$$f_Q(x) = f_{\tilde{D}^{-1}-I}(x) = f^{(b)}_{\tilde{D}^{-1}-I}(x) + \frac{\max(1-(\beta+\eta),0)}{1-\eta}\delta(x), \tag{156}$$

with

$$f^{(b)}_Q(x) \triangleq f^{(b)}_{\tilde{D}^{-1}-I}(x) = \begin{cases} \frac{\sqrt{-(1-(x+1)(\beta+\eta))^2-4\beta\eta x(x+1)}}{2\pi x(x+1)(1-\eta)}, & \text{if } \frac{1}{x_u}-1 \le x \le \frac{1}{x_l}-1. \\ 0, & \text{otherwise,} \end{cases} \tag{157}$$

以下引理总结了本节的关键结果。

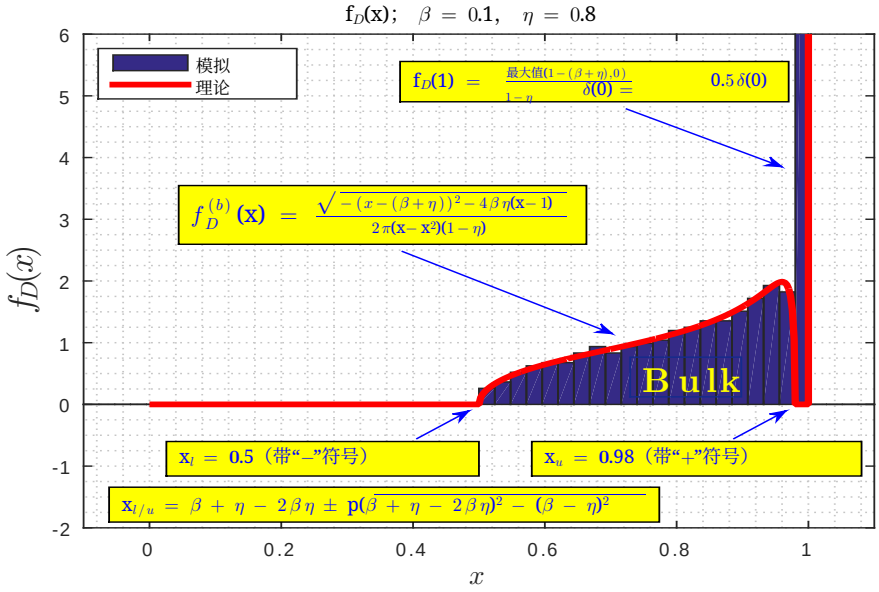


图6: $f_D(x)$ – D的谱函数; $\beta = 0.1$ 和 $\eta = 0.8$

引理 5. 假设满足引理 4 的设定。令 Q 如式（81）所示，即

$$Q \triangleq D^{-1} - I = \left((I^{(l)})^T \bar{V}^{\perp} (\bar{V}^{\perp})^T I^{(l)}\right)^{-1} - I, \tag{158}$$

并令 x_l 和 x_u 如(143)中所述。则 Q、 $f_Q(x)$的极限谱分布，i s

$$f_Q(x) = f_Q^{(b)}(x) + \frac{\max(1-(\beta+\eta),0)}{1-\eta}\delta(x), \tag{159}$$

with

$$f_Q^{(b)}(x) = \begin{cases} \frac{\sqrt{-(1-(x+1)(\beta+\eta))^2 - 4\beta\eta x(x+1)}}{2\pi x(x+1)(1-\eta)}, & \text{if } \frac{1}{x_u} - 1 \le x \le \frac{1}{x_l} - 1, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{160}$$

证明。由上述讨论可得。 □

图 7 展示了根据上述引理针对 $\beta = 0.1$ 和$\eta = 0.8$得到的谱函数 $f_Q(x)$。可以看出，理论预测与模拟结果高度吻合。与之前所有实验一样，此处再次使用了 $n = 4000$ 。

4.2.3 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价关系：通过谱极限

根据推论 3、(47)、(48)和(77)，在最坏情况下有

$$\ell_0^* - \ell_1^* - \text{equivalence} \iff \lambda_{max}(Q) \le 1. \tag{161}$$

由引理 5 可得

$$\lambda_{max}(Q) = \frac{1}{x_l} - 1, \tag{162}$$

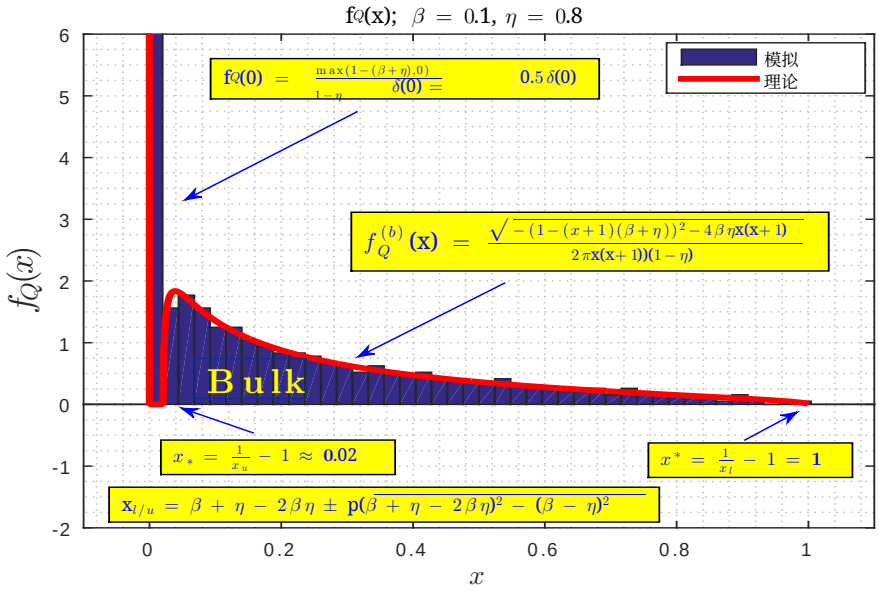


图 7： $f_Q(x)$ – Q的谱函数； $\beta = 0.1$ 和 $\eta = 0.8$

其中 x_l 如式 (143) 所示。此外，由式 (161) 和 (162) 可得，要实现 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价关系，必须满足以下充要条件

$$\ell_0^* - \ell_1^* - \text{equivalence} \iff \frac{1}{x_l} - 1 \le 1, \tag{163}$$

or

$$\ell_0^* - \ell_1^* - \text{equivalence} \iff \frac{1}{2} \le x_l. \tag{164}$$

回顾式 (143)

$$x_l \triangleq \beta + \eta - 2\beta\eta - \sqrt{(\beta+\eta-2\beta\eta)^2 - (\beta-\eta)^2}, \tag{165}$$

并进一步结合式 (164)，可得

$$\begin{array}{rrcl} & \frac{1}{2} & \le & x_l \\ \iff & \frac{1}{2} & = & \beta+\eta-2\beta\eta - \sqrt{(\beta+\eta-2\beta\eta)^2-(\beta-\eta)^2} \\ \iff & (\beta+\eta-2\beta\eta)^2-(\beta-\eta)^2 & \le & \left(\beta+\eta-2\beta\eta-\frac{1}{2}\right)^2 \\ \iff & (\beta+\eta-2\beta\eta)^2-(\beta-\eta)^2 & \le & (\beta+\eta-2\beta\eta)^2-(\beta+\eta-2\beta\eta)+\frac{1}{4} \\ \iff & -(\beta-\eta)^2 & \le & -(\beta+\eta-2\beta\eta)+\frac{1}{4} \\ \iff & 0 & \le & \beta^2+\eta^2-(\beta+\eta)+\frac{1}{4} \\ \iff & \eta-\eta^2 & \le & \left(\frac{1}{2}-\beta\right)^2 \\ \iff & \beta & \le & \frac{1}{2}-\sqrt{\eta-\eta^2}. \end{array} \tag{166}$$

由式 (164) 和 (166)，最终可得

$$\ell_0^* - \ell_1^* - \text{equivalence} \iff \beta \le \frac{1}{2} - \sqrt{\eta-\eta^2}. \tag{167}$$

现在，我们可以正式阐述因果推断中的关键结果：这些结果确立了所谓的相变现象，并精确确定了典型统计情境中的最坏情况位置。

定理 2。 *(ℓ_1^* – 相变 – C-inf（典型 最坏情况））* 考虑一个秩为 k 的矩阵 $X_{sol} =$

$X \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 其正交行空间和列空间的基服从 Haar 分布（不一定相互独立） $\bar{U}^{\perp} \in \mathbb{R}^{n\times(n-k)}$ 和 $\bar{V}^{\perp} \in \mathbb{R}^{n\times(n-k)}$($X_{sol}^T\bar{U}^{\perp} = X_{sol}\bar{V}^{\perp} = \mathbf{0}_{n\times(n-k)}$)。令 M, $M_{(l)} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 如 (15) 或 (32) 中所定义。假设处于大规模 n 线性渐近区间，且 β，$\lim_{n\to\infty}\frac{k}{n}$ 和 η，$\lim_{n\to\infty}\frac{l}{n}$，并令 β_{wc} 和 η 满足以下条件

C-inf ℓ_1^* 最坏情况相变（PT）刻画

$$\xi_{\eta}^{(wc)}(\beta) \triangleq \beta - \frac{1}{2} + \sqrt{\eta - \eta^2} = 0. \tag{168}$$

当且仅当 $\beta \le \beta_{wc}$

$$\lim_{n\to\infty} \mathbb{P}(\ell_0^* \Longleftrightarrow \ell_1^*) = \lim_{n\to\infty} \mathbb{P}(\mathbf{RMSE} = 0) = 1, \tag{169}$$

并且以极高概率，(16) 和 (17) 的解一致。

证明。“若”部分结合定理 1、推论 3、引理 5 以及上文从 (161) 到 (167) 的讨论即可得出。“仅若”部分还假设 $\bar{U}^{\perp} = \bar{V}^{\perp}$，然后依据 (77) 和 (78)，可确保所得结果在最坏情况下可实现。 □

基于上述定理得到的结果如图 9 所示。从图中可以看出，相变曲线将整个 (β,η) 区域分为两个子区域。第一个子区域位于曲线下方（或右侧），在该区域中会出现 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价现象。这意味着，可以通过 (17) 中的 ℓ_1^* 启发式方法，恢复如 (16) 中被 M 掩码的 X_{sol}，且残差均方误差（RMSE）为零。换言之，对于属于曲线下方子区域的系统参数 (β,η)，可以实现完美恢复，其中 X_{sol} 和 X （分别为 (16) 和 (17) 的解）彼此相等，因此 RMSE $= \|\text{vec}(X) - \text{vec}(X_{sol})\|_2 = 0$。另一方面，在曲线上方的子区域中，$\ell_1^*$ 启发式方法会失效，甚至可以找到一个 X_{sol}，使得 RMSE $\to \infty$。

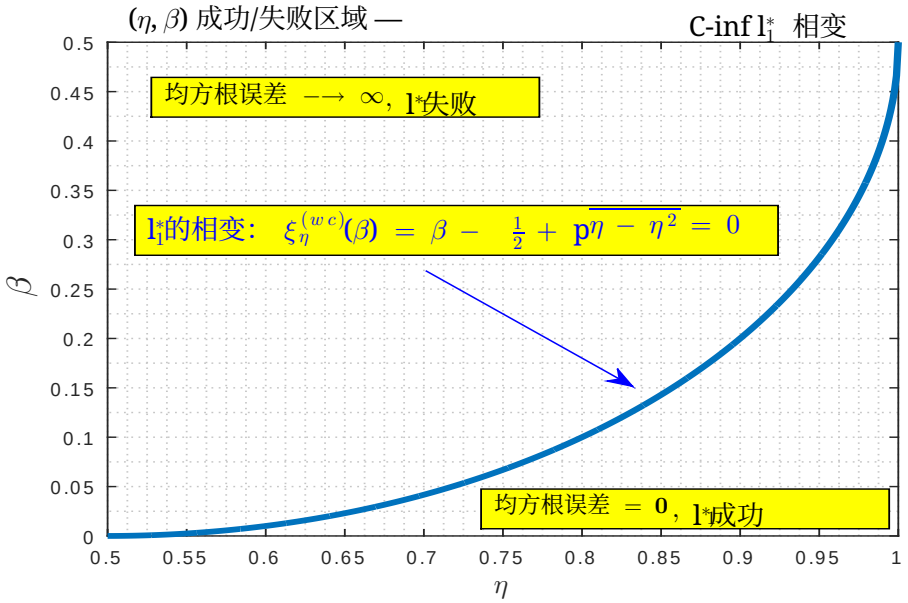


图8：因果推断（C-inf）–典型最坏情况 ℓ_1^* 相变

我们简要讨论矩阵补全的一些一般特征，以及它们与标准压缩感知的区别。即使在所谓的随机掩码情形中（其中 M 以二分之一的概率取值 $0/1$），恢复低秩矩阵也可能遇到困难。

例如，在这种情形下，即使对于秩一矩阵，也很难在统计意义上保证普适恢复。为此，可以选取一个秩 1 X_{sol} 矩阵，其左上角元素为 1，其余元素均为 0。只有当 $M \circ X_{sol}$ 的左上角元素为 1 时，才能从 M 中恢复出这样的矩阵。由于这种情况发生的概率为 1/2，因此，当 $n \to \infty$时，无法以趋近于 1 的概率可靠地恢复。正是获取观测值 Y过程中的离散性，使得这类情形成为可能，也使矩阵补全（MC）与其向量压缩感知对应形式有了显著区别。从这个角度看，在线性渐近区间内能够确立某种形式的相变，多少令人意外。上述方法之所以成功，关键在于关注典型 最坏情况以及因果推断的内部结构。在向量压缩感知设置中，上述情形不会发生，因此无需诉诸典型性，而可以提出更一般的相变概念（关于 非典型 压缩感知方法，可参见例如 [13, 45, 48]；相应的 典型 方法，可参见例如 [7, 14]）。

推论 4. *(ℓ_1^* – 相变 – C-inf（典型 最坏情况；标准 $(\alpha,\ \beta)$ 表示) 假设定理 2 的设定。令 m 为矩阵 M 中 1 的总数，并令 α， $\lim_{n\to\infty} \frac{m}{n^2}$。令 β 和 α_w 满足*

C-inf ℓ_1^* 最坏情况相变（标准 $(\alpha,\ \beta)$ 表示

$$\xi_\beta^{(wc,s)}(\alpha) \triangleq \beta - \frac{1}{2} + \sqrt{\sqrt{1-\alpha} - 1 + \alpha} = 0. \tag{170}$$

当且仅当 $\alpha \geq \alpha_w$

$$\lim_{n\to\infty} \mathbb{P}(\ell_0^* \Longleftrightarrow \ell_1^*) = \lim_{n\to\infty} \mathbb{P}(\mathbf{RMSE} = 0) = 1, \tag{171}$$

并且 (16) 和 (17) 的解以压倒性概率重合。

证明。观察到 $m = n^2 - (n-l)^2$，因此 $\alpha = 1 - (1-\eta)^2$，即可由定理 2 立即得出。

□

图 9 展示了基于上述推论、采用标准 (α, β) 区域格式得到的结果。ˆ 与前文一样，在曲线右侧（或下方）的子区域中，均方根误差 $= \|\text{vec}(X) - \text{vec}(X_{sol})\|_2 = 0$。在曲线左侧（或上方）的子区域中，$\ell_1^*$ 启发式方法通常会失效，而且甚至可以达到均方根误差 $\to \infty$。

4.3 数值结果

我们进行了一系列数值实验，以补充上述理论发现，并考察整个理论框架对因果推断问题中 ℓ_1^*-最小化启发式方法效果的刻画能力。图 10 展示了数值实验所得的性能，以及上文讨论的相应理论最坏情况预测。我们清楚地观察到了相变的存在，理论预测与数值实验结果也高度吻合。

还需指出，我们进行数值实验时采用的矩阵规模相当小。另一方面，理论预测假设 n 较大（基本上是一个 $n \to \infty$）。具体而言，我们选择了处于 $[0.6, 0.95]$ 范围内的 $n = 80$ 和 η。这一选择表明，尽管理论以 n 较大为前提，其结论也可能适用于较小的 n 值。换个角度看，理论正常适用所需的大 n 区间，实际上可能在 n 不一定特别大的情况下就已开始显现。这也意味着，所提出的理论实际上也可能具有实用价值。不过，我们要指出，随着 n 增大，理论结果与模拟结果之间的吻合度可能会进一步提高。

最后，我们要强调，在本文的数值实验中（以及论文的很大一部分内容中），我们考察的是所谓的典型行为。此外，我们沿用了前几节理论分析的做法，给出了方阵的模拟结果。稍加努力，我们所有的理论考量也都可以推广到

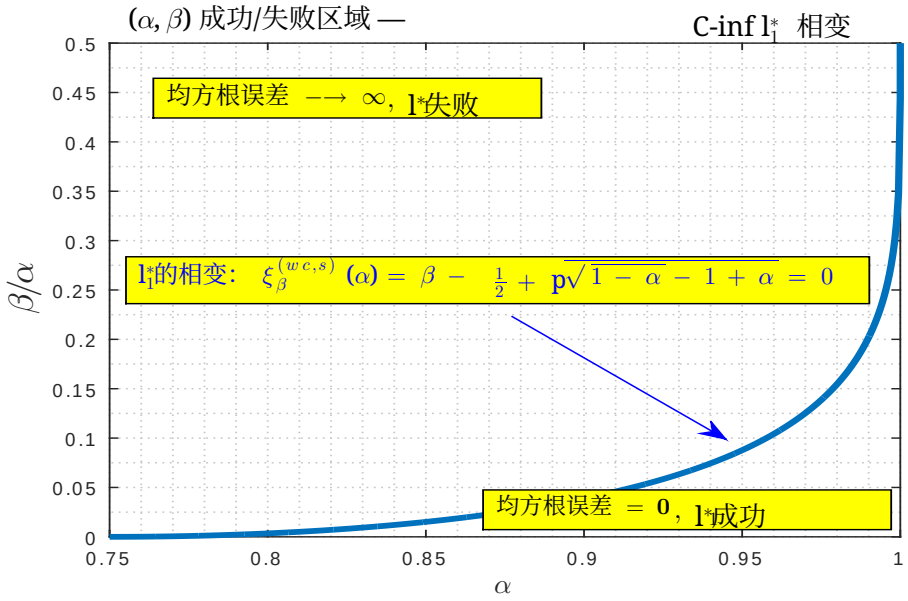


图 9：因果推断（C-inf）—典型最坏情况 ℓ_1^* 相变（（α， β）区域）

非方形情形。由于这样写会稍显繁复，我们认为，为了保持表述清晰，省略这些相当简单的推广是有益的。最后，在我们展示的所有数值实验中，所选未知矩阵的奇异值均为 1。尽管对这一选择的全面讨论远超本文的范围，我们在此仅简要指出，这类结构通常是在建立反向 $\ell_0 - \ell_1$-等价条件时所采用的最坏情况示例。换言之，它们通常是使我们的许多关键结果/定理成立为等价关系、而不仅仅是蕴含关系的示例。我们还进行了奇异值随机选取的数值实验，其结果与图 10 所示相同或更好。

5 结论

本文探讨了因果推断（C-inf） $\leftrightarrow$ 低秩恢复（LRR）之间的联系。我们分析了被称为 ℓ_1^*-最小化的已知最佳凸型启发式方法在求解 C-inf 时的表现。我们通过理论和数值分析表明，在典型的统计情境下，因果推断呈现出所谓的相变（PT）现象。这意味着，在一定范围的系统参数 ℓ_1^* 下，该方法能够成功恢复未观测到的潜在结果；超出这一范围则会失败。此外，我们得到了最坏情况相变（PT）曲线位置的精确显式函数刻画。作为分析的副产品，我们（有些出乎意料地）发现，相关函数刻画具有相当简单的形式，清晰地揭示了目标因果推断矩阵的低秩性与处理施加时间之间的关系。我们还强调，在建立用于刻画 C-inf 相变的数学方法时，我们发现了通过 LRR 实现的 C-inf与现代随机矩阵谱理论中的自由概率论（自由概率变换）之间一个颇有意思的联系。在通过随机对偶理论（***RDT***）建立 C-inf 与压缩感知之间的联系之后，我们进一步认识到自由概率变换在整个理论架构中发挥的作用；正是这一作用最终使我们能够处理 C-inf 问题。

在实现对因果推断的完整处理这一过程中，我们得出了不少具有独立研究价值的数学结果。为确保整体处理的完整性，我们还针对所有这些结果进行了相应的数值实验，并再次观察到理论预测与模拟之间高度吻合。

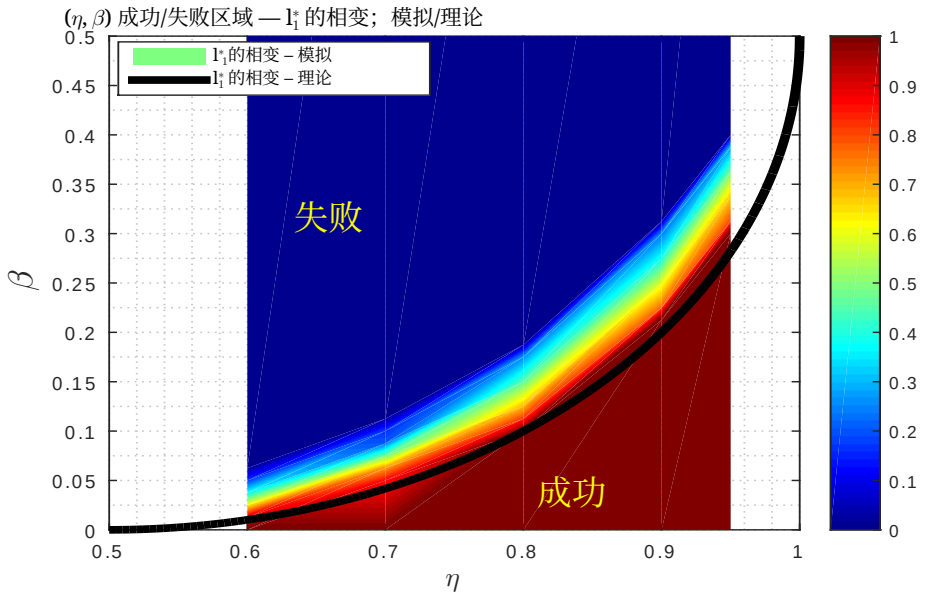


图 10：C-inf ℓ_1^* 的相变（相变）

尽管可以采用不同的方法来解决本文所研究的问题（其中一些方法在概念上甚至更简单），但我们选择当前方法，部分是因为它能够应对本研究未来拓展中更复杂的问题。作为一篇导论性论文，我们没有进一步展示所提出的理论应用于许多具体且更复杂的实例时表现如何（其中最简单的实例是含噪和近似低秩的对应情形）。在配套论文中，我们将沿着这些方向确立相关结果，而这些结果都建立在本文提出的数学框架之上。

参考文献

[1] A. Abadie. 使用合成控制：可行性、数据要求与方法论方面。《经济文献杂志》，2019年。[2] A. Abadie、A. Diamond 和 J. Hainmueller. 用于比较案例研究的合成控制方法：估计加利福尼亚州烟草管制计划的影响。《美国统计学会会刊》，105:493–505，2010年。[3] A. Agarwal、M. Dahel、D. Shah 和 D. Shen. 因果矩阵补全。可在线访问，网址为 arxiv。[4] S. Athey、M. Bayati、N. Doudchenko、G. Imbens 和 K. Khosravi. 因果面板数据模型的矩阵补全方法。《美国统计学会会刊》，116(536):1716–1730，2021年。[5] S. Athey 和 G. W. Imbens. 分期采用情形下双重差分设定中的基于设计的分析。技术报告，美国国家经济研究局，2018年。[6] S. Athey 和 S. Stren. 信息技术对急诊医疗结果的影响。《兰德经济学杂志》，33:399–432，2002年。[7] M. Bayati 和 A. Montanari. 稠密图上的消息传递动态及其在压缩感知中的应用。可在线访问，网址为http://arxiv.org/abs/1001.3448。

[8] E. Candes、J. Romberg 和 T. Tao. 稳健不确定性原理：从高度不完整的频率信息中精确重建信号。IEEE 信息论汇刊，52:489–509，2006年12月。[9] E. J. Candes 和 B. Recht. 通过凸优化实现精确矩阵补全。《计算数学基础》，(9):717，2009年。[10] E. J. Candes 和 T. Tao. 凸松弛的威力：近乎最优的矩阵补全。IEEE 信息论汇刊，56:2053–2080，2010年。[11] E. J. Cand`es 和 Y. Plan. 含噪矩阵补全。IEEE 会刊，98:925–936，2010年。[12] A. Capponi 和 M. Stojnic. 因果推断（C-inf）——典型相变的非对称情形。可在线访问，网址为 arxiv。[13] D. Donoho. 邻点数与维数成比例的高维中心对称多胞体。《离散与计算几何》，35(4):617–652，2006年。[14] D. Donoho、A. Maleki 和 A. Montanari. 用于压缩感知的消息传递算法。《美国国家科学院院刊》，106(45):18914–18919，2009年11月。[15] D. Donoho 和 J. Tanner. 通过线性规划求解欠定线性方程的稀疏非负解。《美国国家科学院院刊》，102(27):9446–9451，2005年。[16] N. Doudchenko 和 G. W. Imbens. 平衡、回归、双重差分与合成控制方法：综述。技术报告，美国国家经济研究局，2016年。[17] U. Haagerup. 关于自由非交换随机变量的 Voiculescu 的 R 变换和 S 变换。载于：《自由概率论》，菲尔兹研究所通讯，12:127–148，1997年。[18] M. A. Hernan 和 J. M. Robins.《因果推断》。佛罗里达州博卡拉顿：CRC出版社，2010年。[19] G. W. Imbens 和 D. B. Rubin.《统计、社会与生物医学科学中的因果推断》。纽约：剑桥大学出版社，2015年。[20] N. Kallus、X. Mao 和 M. Udell. 通过矩阵分解对含噪与缺失协变量进行因果推断。第32届神经信息处理国际会议论文集，第6921—-6932页，2018年12月。可在线访问。[21] R. H. Keshavan、A. Montanari 和 S. Oh. 基于少量元素的矩阵补全。IEEE 信息论汇刊，56:2980–2998，2010年。[22] R. H. Keshavan、A. Montanari 和 S. Oh. 基于含噪元素的矩阵补全。《机器学习研究杂志》，11:2057–2078，2010年。[23] O. Klopp. 一般抽样分布下的含噪低秩矩阵补全。《伯努利》，20:282–303，2014年。[24] V. Koltchinskii、K. Lounici 和 A. B. Tsybakov. 核范数惩罚与含噪低秩矩阵补全的最优速率。《统计年鉴》，39:2302–2329，2011年。[25] R. Mazumder、T. Hastie 和 R. Tibshirani. 用于学习大型不完整矩阵的谱正则化算法。《机器学习研究杂志》，11:2287–2322，2010年。[26] S. N. Negahban 和 M. J. Wainwright. 含噪与高维尺度下（近似）低秩矩阵的估计。《统计年鉴》，39:1069–1097，2011年。[27] S. N. Negahban 和 M. J. Wainwright. 受限强凸性与加权矩阵补全：含噪条件下的最优界。《机器学习研究杂志》，13:1685–1697，2012年。[28] A. Nica 和 R. Speicher. 伦敦数学会讲义系列，第335卷。剑桥大学出版社，2006年。

[29] S. Oymak 和 B. Hassibi。矩阵秩最小化的新零空间结果与恢复阈值。2010年11月。在线获取：http://arxiv.org/abs/1011.6326。[30] J. Pearl。统计学中的因果推断：概述。《统计调查》, 3:96–146, 2009年。[31] J. Pearl。《因果关系：模型、推理与推断》。第2版。剑桥大学出版社，纽约，2009年。[32] J. Pearl 和 E. Bareinboim。关于"研究结果的可推广性"的说明。《流行病学杂志》, 30:186–188, 2019年。[33] J. Pearl 和 D. Mackenzie。《为什么之书》。Basic Books，纽约，2018年。[34] B. Recht。矩阵补全的一种更简单方法。《机器学习研究杂志》, 12:3413– 3430, 2011年。[35] B. Recht、M. Fazel 和 P. A. Parrilo。通过核范数最小化，保证求得线性矩阵方程的最小秩解。2007 年。在线获取：http://www.dsp.ece.rice.edu/cs/。[36] A. Rohde 和 A. B. Tsybakov。高维低秩矩阵的估计。《统计年鉴》, 39:887–930, 2011 年。[37] P. R. Rosenbaum 和 D. B. Rubin。倾向评分在旨在估计因果效应的观察性研究中的核心作用。《生物计量学》, 70, 1983年。[38] D. B. Rubin。《因果效应的匹配抽样》。剑桥：剑桥大学出版社，2006年。[39] A. Shaikh 和 P. Toulis。分期实施治疗的观察性研究中的随机化检验。芝加哥大学贝克尔—弗里德曼经济学研究所工作论文，(144), 2019年。[40] R. Speicher。自由概率与随机矩阵。载于：国际数学家大会论文集，III:477–501, 2014年。[41] N. Srebro、N. Alon 和 T. S. Jaakkola。低秩矩阵协同预测的泛化误差界。载于《神经信息处理系统进展》, 17:1321–1328, 2005年。编者：L. K. Saul、Y.Weiss 和 L. Bottou。[42] M. Stojnic。LASSO 算法性能刻画的框架。在线获取：http://arxiv.org/abs/1303.7291。[43] M. Stojnic。正则随机对偶性。在线获取：http://arxiv.org/abs/1303.7295。[44] M. Stojnic。 ℓ_1优化弱阈值的上界。在线获取：http://arxiv.org/abs/1303.7289。[45] M. Stojnic。压缩感知中 ℓ_1优化的各种阈值。在线获取：http://arxiv.org/abs/0907.3666。[46] M. Stojnic。压缩感知中 ℓ_1优化的简明性能分析。ICASSP，国际声学、信号与语音处理会议，页码 3021–3024，2009年4月15日至19日。台湾台北。[47] M. Stojnic。块稀疏压缩感知中 ℓ_2/ℓ_1优化的依赖于块长度的阈值。ICASSP，IEEE 声学、信号与语音处理国际会议，页码 3918–3921，2010年3月14日至19日。美国德克萨斯州达拉斯。[48] M. Stojnic。压缩感知中的 ℓ_1 优化及其各种阈值。ICASSP，IEEE 声学、信号与语音处理国际会议，页码 3910–3913，2010年3月14日至19日。美国德克萨斯州达拉斯。[49] M. Stojnic。块稀疏压缩感知中的 ℓ_2/ℓ_1优化及其强阈值。《IEEE信号处理精选主题期刊》, 4(2):350–357, 2010年。

[50] M. Stojnic。二元压缩感知中 ℓ_1 优化的恢复阈值。ISIT，IEEE 国际信息论研讨会，页码 1593 – 1597, 2010年6月13日至18日。美国德克萨斯州奥斯汀。[51] M. Stojnic。力求改进压缩感知中的 ℓ_1 优化。ICASSP，IEEE 声学、信号与语音处理国际会议，页码 3938–3941，2010年3月14日至19日。美国德克萨斯州达拉斯。[52] M. Stojnic、F. Parvaresh 和 B. Hassibi。关于以最优测量数重建块稀疏信号。IEEE 信号处理汇刊, 57(8):3075–3085, 2009年8月。[53] A. M. Tulino 和 S. Verd´u。《随机矩阵理论与无线通信》。通信与信息论基础与趋势：第1卷。Now Publishers，汉诺威，2004年。[54] D. Voiculescu。某些非交换随机变量的加法。《泛函分析杂志》, 66(3):323–346, 1986年。[55] D. Voiculescu。某些非交换随机变量的乘法。《算子理论杂志》, 18:2223– 2235, 1987年。[56] D. Voiculescu。随机矩阵与自由积的极限定律。《数学发明》, 104(1):201–220, 1991年。[57] R. Xiong 和 M. Pelger。含缺失观测值的大维潜在因子建模及其在因果推断中的应用。2018年。电子版可见：https://ssrn.com/abstract=3465357。[58] Y. Xu。广义合成控制法：基于交互固定效应模型的因果推断。《政治分析》, 25:57–76, 2017年。

定理 1 的证明

如前所述，定理 1 的证明在概念上与矩阵 X 为对称矩阵时的相应证明完全相同。下面给出对称矩阵情形的详细证明。在陈述证明之前，我们还需要几个技术引理。

引理 6. 设 $C = C^T \in \mathbb{R}^{n\times n}$。再设 C 的所有特征值都属于区间 $[-1, 1]$。最后，设主对角线上前 k 个元素 $C_{i,\ i}, 1 \le i \le k$ 均大于或等于 1。那么， C, $C_{1:k,\ 1:k}$ 的左上 $k \times k$ 块是一个单位矩阵，即

$$C_{1:k,1:k} \quad = \quad I_{k\times k}. \tag{172}$$

证明。设 $\lambda_{max}(C)$ 是 C 的最大特征值。那么

$$\lambda_{max}(C) \quad \triangleq \quad \max_{\|\mathbf{c}\|_2=1} \mathbf{c}^T C\mathbf{c}. \tag{173}$$

由于根据假设 $1 \le C_{i,\ i}, 1 \le i \le k$ 和 $\lambda_{max}(C) \le 1$，对于任意 $1 \le i \le k$，我们也有

$$1 \le C_{i,i} \le \max_{\|\mathbf{c}\|_2=1} \mathbf{c}^T C\mathbf{c} \triangleq \lambda_{max}(C) \le 1, \tag{174}$$

这意味着 $C(i, i) = 1, 1 \le i \le k$。其余所有 $C_{1:k,\ 1:k}$ 元素均为零的证明可用归纳法进行。

1) 从 $l = 1$ 归纳到 $l = 2$：首先考察大小为 2×2 的上块，即 $C_{1:2,\ 1:2}$。然后我们有

$$\begin{aligned} 1 \ge \max_{\|\mathbf{c}\|_2=1} \mathbf{c}^T C\mathbf{c} \ge \max_{\|\mathbf{c}_{1:2}\|_2=1} \mathbf{c}_{1:2}^T C_{1:2,1:2}\mathbf{c}_{1:2} \quad &\ge \quad \max_{\|\mathbf{c}_{1:2}\|_2=1} (\|\mathbf{c}_{1:2}\|_2 + 2|\mathbf{c}_1\mathbf{c}_2 C_{1,2}|) \\ &\ge \quad \max_{\|\mathbf{c}_{1:2}\|_2=1} (1 + 2|\mathbf{c}_1\mathbf{c}_2 C_{1,2}|) \ge 1, \end{aligned} \tag{175}$$

这意味着 $C_{1,\ 2}=0$。

2）归纳法从 l 到 $l+1$: 现在我们来看大小为 $(l+1)\times(l+1)$ 的上块，即在$C_{1:l+1,\ 1:l+1}$ 同时假设 $C_{1:l,\ 1:l}=I_{l\times l}$。于是我们有

$$\begin{aligned}
1 &\geq \max_{\|\mathbf{c}\|_2=1}\mathbf{c}^T C\mathbf{c}\\
&\geq \max_{\|\mathbf{c}_{1:l+1}\|_2=1}\mathbf{c}_{1:l+1}^T C_{1:l+1,1:l+1}\mathbf{c}_{1:l+1}\\
&\geq \max_{\|\mathbf{c}_{1:l+1}\|_2=1}\left(\|\mathbf{c}_{1:l+1}\|_2+2|\mathbf{c}_{1:l}^T C_{1:l,l+1}\mathbf{c}_{l+1}|\right)\\
&\geq \max_{\|\mathbf{c}_{1:l+1}\|_2=1}\left(1+2|\mathbf{c}_{1:l}^T C_{1:l,l+1}\mathbf{c}_{l+1}|\right)\\
&\geq 1,
\end{aligned}\tag{176}$$

这意味着 $C_{1:l,\ l+1}=\mathbf{0}_{l\times 1}$ ，并完成了证明。 □

引理 7。假设满足引理 6 的设定。那么， C的上 $k\times k$ 左块、 $C_{1:k,\ 1:k}$是单位矩阵，而 C的上 $k\times(n-k)$右块、$C_{1:k,\ n-k+1:n}$ 是零矩阵，即

$$\begin{aligned}
C_{1:k,1:k} &= I_{k\times k}\\
C_{1:k,n-k+1:n} &= \mathbf{0}_{k\times(n-k)}.
\end{aligned}\tag{177}$$

证明。第一部分由引理 6 得出。现在我们关注第二部分。考虑矩阵 C的以下分块

$$C = \begin{bmatrix} C_{1:k,1:k} & C_{1:k,n-k+1:n}\\ C_{n-k+1:n,1:k} & C_{n-k+1:n,n-k+1:n}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix} I_{k\times k} & C_{1:k,n-k+1:n}\\ C_{n-k+1:n,1:k} & C_{n-k+1:n,n-k+1:n}\end{bmatrix}.\tag{178}$$

那么，假设 $C_{1:k,\ n-k+1:n}$ 的最大非零奇异值等于 $b>0$，我们有

$$\begin{aligned}
1 &\geq \max_{\|\mathbf{c}\|_2=1}\mathbf{c}^T C\mathbf{c}\\
&\geq \max_{\|\mathbf{c}_{1:k}\|_2=a,\mathbf{c}_{n-k+1:n}}\left(\mathbf{c}_{1:k}^T C_{1:k,1:k}\mathbf{c}_{1:k}+2|\mathbf{c}_{1:k}^T C_{1:k,n-k+1:n}\mathbf{c}_{n-k+1:n}|+\mathbf{c}_{n-k+1:n}^T C_{n-k+1:n,n-k+1:n}\mathbf{c}_{n-k+1:n}\right)\\
&\geq \max_{\|\mathbf{c}_{1:k}\|_2=a,\mathbf{c}_{n-k+1:n}}\left(a^2+2|\mathbf{c}_{1:k}^T C_{1:k,n-k+1:n}\mathbf{c}_{n-k+1:n}|+\mathbf{c}_{n-k+1:n}^T C_{n-k+1:n,n-k+1:n}\mathbf{c}_{n-k+1:n}\right)\\
&\geq \max_{\|\mathbf{c}_{1:k}\|_2=a,\mathbf{c}_{n-k+1:n}}\left(a^2+2|\mathbf{c}_{1:k}^T C_{1:k,n-k+1:n}\mathbf{c}_{n-k+1:n}|-\mathbf{c}_{n-k+1:n}^T\mathbf{c}_{n-k+1:n}\right)\\
&\geq \max_{a\in[0,1]}\left(a^2+2ba\sqrt{1-a^2}-(1-a^2)\right)\\
&= \max_{a\in[0,1]}\left(2a^2-1+2ba\sqrt{1-a^2}\right),
\end{aligned}\tag{179}$$

其中，第四个不等式成立，是因为 $C_{n-k+1:n,\ n-k+1:n}$ 的最小特征值大于或等于 C 的最小特征值，而根据引理的假设，该最小特征值大于或等于 -1。现在，我们进一步得到

$$c\triangleq 2a\sqrt{1-a^2}\quad\text{and}\quad 2a^2-1+2ba\sqrt{1-a^2}=\sqrt{1-c^2}+bc,\tag{180}$$

and

$$\frac{d(\sqrt{1-c^2}+bc)}{dc}=\frac{-c}{\sqrt{1-c^2}}+b=0.\tag{181}$$

由 (181) 可轻易得到

$$c = \frac{b}{\sqrt{1+b^2}}. \tag{182}$$

结合（179）、（180）和（182）可得

$$1 \geq \max_{\|\mathbf{c}\|_2=1} \mathbf{c}^T C \mathbf{c} \geq \max_{a\in[0,1]} \left(2a^2 - 1 + 2ba\sqrt{1-a^2}\right) = \sqrt{1+b^2}, \tag{183}$$

这意味着 $b = 0$，且自动有 $C_{1:k,\ n-k+1:n} = \mathbf{0}_{k\times 1}$。证明至此完成。 □

现在我们可以考虑上述定理：它将 ℓ_1 <style id='4'}的一般等价条件结果推广 [44–46] 到相应的 ℓ_1 奇异值/特征值范数情形（类似的推广也可见于 [29]）。

定理 3。*($\ell_0^* - \ell_1^*$-等价条件（低秩表示）– 对称 X）* 设 $\bar{U} \in \mathbb{R}^{n\times k}$ 满足$\bar{U}^T\bar{U} = I_{k\times k}$，且有一个秩为 $-k$、先验已知为对称矩阵 $X_{sol} = X \in \mathbb{R}^{n\times n}$，其所有列均属于 U的张成空间。具体而言，不失一般性，假设 X 仅有正的非零特征值。对于给定的矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m\times n^2}$ *($m \leq n^2$)*，假设 $\mathbf{y} = Avec(X) \in \mathbb{R}^m$。若

$$(\forall W \in \mathbb{R}^{n\times n} | Avec(W) = \mathbf{0}_{m\times 1}, W = W^T \neq \mathbf{0}_{n\times n}) \quad -\operatorname{tr}(\bar{U}^T W \bar{U}) < \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T W \bar{U}^\perp), \tag{184}$$

那么，(9) 和 (10) 的解相同。此外，如果

$$(\exists W \in \mathbb{R}^{n\times n} | Avec(W) = \mathbf{0}_{m\times 1}, W = W^T \neq \mathbf{0}_{n\times n}) \quad -\operatorname{tr}(\bar{U}^T W \bar{U}) \geq \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T W \bar{U}^\perp), \tag{185}$$

那么，存在一个 X，它属于上述对称矩阵集合，且其列属于 U的张成空间，使得 (9) 和 (10) 的解不同。

证明。 证明严格按照 [44–46] 中相应定理的证明逐步展开，并将其应用于矩阵或其奇异值/特征值。对于该领域的专家而言，这种应用很可能会被视为显而易见，当然也不必像我们这样详细地展开。不过，为了确保所有论证都清晰无误，我们仍提供逐步的讲解式推导。为具体起见且不失一般性，我们还假设 X 的特征分解为

$$X = U\Lambda U^T = \begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix} \begin{bmatrix}\bar{\Lambda}_X & \mathbf{0}_{k\times(n-k)} \\ \mathbf{0}_{(n-k)\times k} & \bar{\Lambda}_X^\perp\end{bmatrix} \begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}^T. \tag{186}$$

(i) $\Longrightarrow$ （充分性部分）：按照 [46], 中定理 2 的证明逐步推导，我们首先假设 $\hat{}\hat{}X$ 是 (10) 的解。接下来，我们要证明，如果 (184) 成立，那么 $X = X$。通常，我们不这样做，而是假设相反的情况，即假设 (184) 成立，但 $X \neq X$。那么，由于 $\mathbf{y} = Avec(X)$ 和 $\mathbf{y} = Avec(X)$ $\hat{}$ 必须同时成立，因此必定存在 W 使得 $X = X + W$ 满足 $W \neq 0$, $Avec(W) = 0$。此外，$\hat{}$由于 X 是 (10) 的解，因此还必须有

$$\begin{array}{rcl} & \ell_1^*(X+W) = \ell_1^*(\hat{X}) \leq \ell_1^*(X) \\ \Longleftrightarrow & \ell_1^*(\begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}^T (X+W) \begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}) \leq \ell_1^*(X) \\ \Longrightarrow & \ell_1^*(\bar{U}^T(X+W)\bar{U}) + \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T(X+W)\bar{U}^\perp) \leq \ell_1^*(X). \end{array} \tag{187}$$

最后一个蕴含关系在注意到以下事实后即可直接得出

$$\begin{aligned} \ell_1^*(\begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}^T (X+W) \begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}) &= \max_{\Lambda_* = \Lambda_*^T \in \mathcal{L}_*} \operatorname{tr}(\Lambda_* \begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}^T (X+W) \begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}) \\ &\geq \max_{\Lambda_* = \Lambda_*^T \in \mathcal{L}_*^0} \operatorname{tr}(\Lambda_* \begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}^T (X+W) \begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}) \end{aligned}$$

$$= \quad \ell_1^*(\bar{U}^T(X+W)\bar{U}) + \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T(X+W)\bar{U}^\perp), \tag{188}$$

其中

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_*^0 &\triangleq \left\{\Lambda_* \in \mathbb{R}^{n\times n} | \Lambda_* = \Lambda_*^T, \Lambda_*\Lambda_*^T \preceq I, \Lambda_* = \begin{bmatrix} \Lambda_{*,1} & 0_{k\times(n-k)} \\ 0_{(n-k)\times k} & \Lambda_{*,2} \end{bmatrix}\right\} \\ &\subseteq \left\{\Lambda_* \in \mathbb{R}^{n\times n} | \Lambda_* = \Lambda_*^T, \Lambda_*\Lambda_*^T \preceq I\right\} \triangleq \mathcal{L}_*. \end{aligned} \tag{189}$$

关键观测——“去掉绝对值”：

现在，[46] 中的关键观测发挥了作用。具体来说，我们注意到，在非零部分可以去掉绝对值，并且 $\ell_1^*(\cdot)$ 可以被“替换”为 tr $(\cdot)$。这个简单的观测正是使用**RDT** 对结构化对象的恢复进行精确性能刻画时取得成功的最根本原因。由 (187) 可得

$$\begin{array}{rcl} & \ell_1^*(\bar{U}^T(X+W)\bar{U}) + \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T(X+W)\bar{U}^\perp) \leq \ell_1^*(X) \\ \Longrightarrow & \mathrm{tr}\,(\bar{U}^T(X+W)\bar{U}) + \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T(W)\bar{U}^\perp) \leq \ell_1^*(X) \\ \Longleftrightarrow & \mathrm{tr}\,(\bar{U}^T W\bar{U}) + \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T W\bar{U}^\perp) \leq 0. \end{array} \tag{190}$$

我们得出了矛盾，因为 (190) 中最后一个不等式恰好与 (184) 相反。这 ^ ^ 意味着我们的初始假设 $X \neq X$ 不成立，因此必有 $X = X$。这正是定理第一部分的结论。

(ii) $\Longleftarrow$ （仅当部分）：现在我们假设 (185) 成立，即

$$(\exists W \in \mathbb{R}^{n\times n} | A\mathrm{vec}(W) = \mathbf{0}_{m\times 1}, W \neq \mathbf{0}_{n\times n}) \quad -\mathrm{tr}\,((\bar{U})^T W\bar{U}) \geq \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T W\bar{U}^\perp) \tag{191}$$

并希望证明，对于这样的 W，存在一个对称的秩为-k 的矩阵 X，其列属于 U 的张成空间¯，使得 y $= A$vec(X)，并且满足以下条件

$$\ell_1^*(X+W) < \ell_1^*(X). \tag{192}$$

存在这样一个 X 可以确保它既满足 (10) 中的所有约束，又不是 (10) 的解。按照 [44] 的策略，可以用严格不等式反向执行从 (191) 到 (187) 的所有上述步骤，并得到 (187) 中的第一个不等式，而这恰好就是 (192)。这一反向推导过程中有两个蕴含关系会造成问题，分别是 (191) 中的蕴含关系和 (187) 中的蕴含关系。如果这些蕴含关系都是等价关系，一切就都没问题了。下面分别讨论这两个蕴含关系。

1) (190) 中的蕴含关系——特别是 X“压过” W：假设 $X = \bar{U}\Lambda_x\bar{U}^T$，其中 Λ_x >0 是一个对角矩阵，主对角线上的元素可以任意大（这里，只需选择 Λ_x 的对角线，使其最小元素大于 $\bar{U}^T W\bar{U}$ 的最大特征值即可）。现在显然可以看出 [44, 46]“去掉绝对值”这一概念背后的主要思路。也就是说，对于这样的 X，有 $\ell_1^*(\bar{U}^T X + W)\bar{U}) = tr(\ell_1^*(\bar{U}^T X + W)\bar{U}))$，因为对于对称矩阵，$\ell_1^*(\cdot)$（即其参数的绝对值特征值之和）与 tr $(\cdot)$（即其参数的特征值之和）相等。这基本上意味着，反向推导时，(190) 中的第二个不等式不仅可由第一个不等式推出，也能反过来推出第一个不等式。换句话说，对于 $X = \bar{U}\Lambda_x\bar{U}^T$（其中 $\Lambda_x > 0$ 且任意大）

$$\begin{array}{rcl} & \mathrm{tr}\,(\bar{U}^T W\bar{U}) + \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T W\bar{U}^\perp) \leq 0 \\ \Longleftrightarrow & \mathrm{tr}\,(\bar{U}^T(X+W)\bar{U}) + \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T(W)\bar{U}^\perp) \leq \ell_1^*(X) \\ \Longleftrightarrow & \ell_1^*(\bar{U}^T(X+W)\bar{U}) + \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T(X+W)\bar{U}^\perp) \leq \ell_1^*(X), \end{array} \tag{193}$$

¯这基本上意味着存在一个 X 可以“压倒” W （位于 U的张成空间中），并确保“去掉绝对值” 不仅是创建松弛等价条件的充分而且是必要的概念。

2)（187）中的蕴含关系：现在需要设法证明，（187）中的第三个不等式不仅由第二个不等式推出，而且也能反过来推出第二个不等式。这归结为证明可以将（188）中的不等式替换为等式，或者证明 $\mathcal{L}^0$ 和 $\mathcal{L}$ 暂时等价。这两种

说法通常都不成立。不过，既然我们手头有一组 X，或许存在一个X使它们确实成立。我们继续假设 $X=\bar{U}\Lambda_x\bar{U}^T$，其中 $\Lambda_x>0$是一个主对角线上元素任意大的对角矩阵。于是，（188）中的最后一个等式给出

$$\begin{array}{rcl} \ell_1^*(\bar{U}^T(X+W)\bar{U})+\ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T(X+W)\bar{U}^\perp) & \leq & \ell_1^*(X) \\ \iff \quad \max_{\Lambda_*=\Lambda_*^T\in\mathcal{L}_*^0}\operatorname{tr}\left(\Lambda_*\begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}^T(X+W)\begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}\right) & \leq & \ell_1^*(X). \end{array} \tag{194}$$

此外，有

$$\begin{array}{rcl} \max_{\Lambda_*=\Lambda_*^T\in\mathcal{L}_*^0}\operatorname{tr}\left(\Lambda_*\begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}^T(X+W)\begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}\right) & \leq & \ell_1^*(X) \\ \iff \quad \max_{\Lambda_{*,i}=\Lambda_{*,i}^T,\Lambda_{*,i}\Lambda_{*,i}^T\leq I,i\in\{1,2\}}\operatorname{tr}\left(\Lambda_{*,1}\bar{U}^TX\bar{U}+\Lambda_{*,2}(\bar{U}^\perp)^TW\bar{U}^\perp\right) & \leq & \ell_1^*(X) \\ \iff \quad \max_{\Lambda_{*,i}=\Lambda_{*,i}^T,\Lambda_{*,i}\Lambda_{*,i}^T\leq I,i\in\{1,2\}}\operatorname{tr}\left(\Lambda_{*,1}\Lambda_x+\Lambda_{*,2}(\bar{U}^\perp)^TW\bar{U}^\perp\right) & \leq & \operatorname{tr}(\Lambda_x). \end{array} \tag{195}$$

现在，如果 $\Lambda_{*,1}$ 的主对角线上的元素（diag($\Lambda_{*,1}$）中至少有一个小于 1，那么 Λ_x 对角线上的相应元素就可以变得任意大于 Λ_x 的其他元素，于是有

$$\begin{array}{rcl} \max_{\Lambda_{*,i}=\Lambda_{*,i}^T,\Lambda_{*,i}\Lambda_{*,i}^T\leq I,i\in\{1,2\}}\operatorname{tr}\left(\Lambda_{*,1}\Lambda_x+\Lambda_{*,2}(\bar{U}^\perp)^TW\bar{U}^\perp\right) & < & \operatorname{tr}(\Lambda_x) \\ \iff \quad \max_{\Lambda_*=\Lambda_*^T\in\mathcal{L}_*^0}\operatorname{tr}\left(\Lambda_*\begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}^T(X+W)\begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}\right) & < & \ell_1^*(X) \\ \iff \quad \max_{\Lambda_*=\Lambda_*^T\in\mathcal{L}_*}\operatorname{tr}\left(\Lambda_*\begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}^T(X+W)\begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}\right) & < & \ell_1^*(X), \end{array} \tag{196}$$

最后一个等价关系成立，是因为最后两个不等式左侧各项之差有界，且该界与 X 无关。此外，(196) 中的最后一个不等式结合 (188) 中的第一个等式以及 (187) 中的第一个不等式，便可得到 (192)。因此，唯一可能无法推出 (192) 的情形是主对角线上的所有元素都大于或等于 1。然而，定理前的两个引理表明，在这种情形下 $\mathcal{L}^0=\mathcal{L}$，因此 (188) 中是不等式而是等式；再结合 (187)，即可推出 (192)。至此，定理第二部分（“当且仅当”中的“仅当”部分）的证明完成，整个定理的证明也随之完成。

□