arXiv:2301.00801v1 [stat.ML] 2 Jan 2023

因果推断（C-inf）——典型相变的非对称情形

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

摘要

本文重新审视并进一步探讨了以下两者之间在数学上严谨的联系：因果推断（C-inf）与低秩恢复（LRR），该联系由 [10]建立。借助随机对偶理论—自由概率论（RDT-FPT）之间的联系，我们得到了精确且明确的典型因果推断非对称相变（PT）。我们揭示了一种低秩性加倍现象，这意味着，与 [10]中讨论的对称最坏情形相比，非对称情形所允许的低秩性恰好高出一倍。因此，最终的相变数学表达式与 [10],中的结果同样优雅，并凸显了目标因果推断矩阵低秩性与治疗时间之间的直接关系。我们的结果对相关应用具有重要意义，因为因果推断矩阵不一定是对称的。

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

因果推断（C-inf）旨在设计估计策略，使研究人员能够基于数据得出因果结论。其总体目标是得出关于某个因果变量对特定结果影响的结论；该因果变量通常称为“处理”或“干预”。例如，假设我们想估计某种药物对致命癌症进展的因果效应（相对于未接触该药物的情况）。那么，我们希望比较患者开始用药一个月后的身体转移情况与未接触该药物时的转移情况。因果推断面临的主要挑战在于，我们通常无法同时观察这两种状态：在测量结果的时间点，每个人要么接触过药物，要么没有。

估计反事实，即在未接受处理的情况下结果会如何，是经济学、健康和社会科学等许多学科的核心问题（例如，参见[2,11,13,14,32,33,50]），也是机器学习和理论计算机科学中的核心问题（例如，参见 [25–28]）。估计因果效应的方法学发展，建立在实验数据或观测数据的基础上。实验研究能够提供最有可能无偏的估计，但实验往往难以实施，因为成本高昂或可能引发伦理争议。另一方面，随着传感器和硬件设备设计方面的技术进步，观测数据日益丰富。我们关注观察性研究中的因果推断，具体而言，是设计高效的算法技术来估计反事实。

C-inf 方法大致可分为三类：1）无混杂性（例如，见 [14, 32]）；2）合成控制（例如，见 [1, 2, 11]）；以及 3）矩阵补全（例如，见 [3, 4, 15]）。矩阵补全方法建立在 [7, 9, 29] 的奠基性研究之上。或许出乎意料的是，这三种方法都高度依赖具有深厚渊源的数学、统计学以及最终的算法概念

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

，其根源可追溯至信息论。我们的研究属于第三条研究路线，在数学上与矩阵补全（MC）问题相似。

沿着同样的思路，我们的工作大幅扩展了配套论文中的分析 [10]。在该论文中，我们得到了精确且明确的典型最坏情况C-inf相变（PT），并进一步证明，这些相变可由对称目标因果推断矩阵实现。在本文中，我们考虑一般的非对称情境，以处理实际应用中因果推断矩阵不一定总是对称的情况。这使我们能够在某些情形下改进 [10] 中的结果。我们进一步研究了 [10], 中探讨的RDT-FPT协同机制，并精确刻画相应的非对称相变。我们还发现了低秩性翻倍现象，这意味着与 [10]中的对称最坏情形相比，非对称情形允许的低秩性恰好增加一倍。

2 因果推断的数学设置

本节将重新审视因果推断（C-inf）$\leftrightarrow$ 矩阵补全（MC）之间在 [10]中建立的联系。该文讨论了低秩恢复（LRR）、矩阵补全（MC）和因果推断（C-inf）之间的联系。从数学角度来看，MC是LRR的一种特殊情形，而C-inf又是MC本身的一种特殊情形。因此，用于描述LRR问题的数学模型也可用于描述MC问题，进而描述C-inf问题。下面我们介绍通过这种联系建立的C-inf数学设置，详见 [10]。

我们从 低秩矩阵 $X_{sol} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 及其奇异值分解（SVD）开始

$$X = U\Sigma V^T, \tag{1}$$

其中

$$\sigma(X) \triangleq \mathrm{diag}(\Sigma) \quad \text{and} \quad U^TU = I_{n\times n} \quad \text{and} \quad V^TV = I_{n\times n}, \tag{2}$$

其中 $I_{n\times n}$ 是 $n \times n$ 单位矩阵，diag(·)表示一个算子，它将其矩阵参数的对角元素构成一个列向量。接着，我们将 $\ell_p^*(X)$ 定义为$\sigma(X)$ 的所谓 ℓ_p （准）范数（即 X的奇异值向量），也就是说：

$$\ell_p^*(X) \triangleq \ell_p(\sigma(X)), p \in \mathbb{R}_+. \tag{3}$$

以下极限 ℓ_p(·)联系也很重要

$$\ell_0^*(X_{sol}) \triangleq \ell_0(\sigma(X_{sol})) = \|\sigma(X_{sol})\|_0 = \lim_{p\longrightarrow 0} \|\sigma(X_{sol})\|_p = \lim_{p\longrightarrow 0} \ell_p(\sigma(X_{sol})) = \lim_{p\longrightarrow 0} \ell_p^*(X_{sol}). \tag{4}$$

此外，我们还将所谓的块掩膜矩阵 M 定义如下（另见图 1）　　1)

M 分块因果推断中的矩阵（C-inf）：

$$M \triangleq M^{(l)} \triangleq \mathbf{1}_{n\times 1}\mathbf{1}_{n\times 1}^T - I^{(l)}(I^{(l)})^T\mathbf{1}_{n\times 1}\mathbf{1}_{n\times 1}^T I^{(l)}(I^{(l)})^T \quad \text{and} \quad I^{(l)} \triangleq \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{l\times(n-l)} \\ I_{(n-l)\times(n-l)} \end{bmatrix}. \tag{5}$$

于是可得以下　　以下两个优化问题构成了 ***C-inf*** $\leftrightarrow$ 矩阵补全 联系的核心

ℓ_0^*-最小化（C-inf – MMT）

$$\begin{array}{ll} \min\limits_X & \ell_0^*(X) \\ \text{满足约束条件} & Y = M \circ X. \end{array} \tag{6}$$

ℓ_1^*-最小化（C-inf – MMT）

$$\begin{array}{ll} \min\limits_X & \ell_1^*(X) \\ \text{满足约束} & Y = M \circ X, \end{array} \tag{7}$$

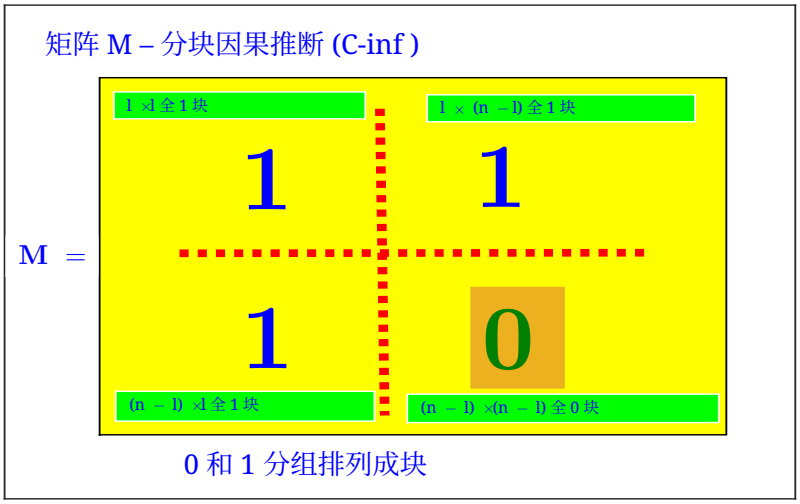

图 1：矩阵 M， $M_{(l)}$– 分块因果推断（C-inf）设置

其中 $\circ$ 表示逐分量乘法。也就是说，注意到 $\ell_0^*(X)$实际上计算的是 X的非零奇异值个数，优化问题 (6) 正是从通过 Y 掩码 M获得的线性观测值 X 中恢复 C-inf 目标低秩矩阵 。此外，问题 (6)（其中 M为一般情形）是标准的矩阵补全问题；另一方面，它是低秩表示问题的一种特殊情形（采用“掩码矩阵术语”（MMT）表述）。另一方面，优化问题 (7) 是矩阵补全文献中通常用于求解 NP难问题 (6) 的最紧凸松弛启发式方法。关于这两个问题的起源，以及它们在低秩表示和矩阵补全背景下的联系，请参阅介绍低秩表示/矩阵补全的论文 [7,30,36]。关于它们的重要性及相关的不同算法考量，后续许多论文均有论述（例如参见 [8,16–22,31]）。

不过，我们特别想指出参考文献 [4] ，其中考察了完全相同的 C-inf 环境，并识别出完全相同的 ***C-inf*** $\leftrightarrow$ 矩阵补全联系。事实上， [4] 中的考量尤其有助于我们正确理解在哪些 C-inf 环境下，矩阵的分块结构M 可能会出现。要了解这一点，可以将其与 [4]中使用的所谓反事实和单位／处理术语联系起来。

首先注意到， M 也可以定义为

$$M_{i,j} = \begin{cases} 1, & (i,j)\text{-th element of } X_{sol} \text{ is observed} \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{8}$$

由此可见， M 中的 1 允许读取 X_{sol} 中相应的元素，而 0 则会阻止（屏蔽）读取这些元素。因此， [4] 的背景大致如下。首先假设矩阵 X 包含某一组 n 单位（例如个人、亚群体和地理区域）在一段时期内（假设为 n 个时间点）的观测值。随后，将 X 的各行分配给这些单位，将各列分配给各时间点，并希望估计某种处理对受处理单位可能产生的影响。某一单位子集（例如对应于行 $i > l$的单位）会在时间点 l 接受不可逆的处理。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，除了获得处理后的 X 的值之外，还需要获得所谓的反事实——即受处理单位在未施加处理时的值。回到矩阵补全的术语，我们基本上需要估计一个（推测秩较低的） X ，但无法获得其

被 t 覆盖的部分　　块掩码 $M = M_{(l)}$。换言之，需要求解带有 $M = M^{(l)}$ 的 (6)。

。上述内容通过反事实描述了 C-inf 以及矩阵 M 的内在作用。此外，若从时间域的角度来看，即若矩阵 M 的列代表时间轴，那么在某个固定时间点之后，某些行中的观测值将不可用。在分块情形下，受影响的各行对应的这个时间点是固定的。不过，这个时间点不一定非要固定（关于这一方向的更多内容，可参阅 [2]（尤其是加州烟草示例）、[49]（尤其是同步／分期处理采纳背景下的潜在因子建模），以及 [5, 6, 34]（尤其是医疗保健应用）；这些都是帮助理解各种 C-inf 情形需求的优秀参考资料）。由于本文和 [10] 是介绍性论文，旨在展示整体方法论，因此我们选择了分块因果推断情形，因为它可能是最具代表性且最广为人知的一种情形。在我们的一些配套论文中，我们将展示如何运用此处介绍的方法来处理其他 C-inf 情形。

3　$\ell_0^* - \ell_1^*$ 等价

如前所述，求解一般的低秩表示（LRR）（因此也包括作为其特殊情形的 C-inf）可能会很困难，这是因为式（6）中的目标函数高度非凸。根据实际可能遇到的不同情形，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情形中，上述 ℓ_1^*-最小化松弛启发式方法（通常称为核范数最小化）通常被视为目前已知的、可证明具有多项式时间复杂度的最佳方法。接下来我们也采用这一观点，并将其作为当前 C-inf 算法处理的基准。如前所述，这种启发式方法的一个相当引人注目的特点是，有时它实际上能够精确求解底层问题。发生这种情况时，我们称以下 $\ell_0^* - \ell_1^*$ 等价现象成立。

$\ell_0^* - \ell_1^*$-等价（C-inf）：　$\ell_0^* \Longleftrightarrow \ell_1^*$

设 X_{sol} 是（6）的解，$\hat{X}$ 是（7）的一个解，并令

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

$\hat{}$当且仅当 ($X = X_{sol}$ 和 均方根误差 $= 0$) 时 (ℓ_0^* –最小化 $\Longleftrightarrow$ ℓ_1^* –最小化)。　(9)

上述内容基本意味着，当 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价发生时，（6）和（7）中的优化问题是等价的，因此可以相互替换。我们将这种现象记为 $\ell_0^* \Longleftrightarrow \ell_1^*$。当然，这将是理想情形：在不损失所得解的精度的前提下，基本上可以用凸优化问题替代非凸优化问题。鉴于这种现象本身的存在性相当引人注目，本文将致力于揭示促成其发生的内在复杂机制。此外，事实证明，这种现象并非异常，而是某种一般性质的结果。因此，我们将相应地提高目标，不仅尝试证明其存在性，还要对其进行完整的解析刻画。这将包括全面说明它发生的频率以及可能出现的情形。为此，我们将结合[37–44] 中的随机对偶理论（RDT）工具，以及若干先进而精妙的概率概念；这些概念将在下文各节中逐步引入。

我们先介绍一些借鉴自 RDT 的代数 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价预备知识。首先是一个一般性的低秩表示 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价结果（该结果基本上是对 [39–41] 中相应 CS 等价条件的改编（ [24] 中也有类似改编））。

定理 1. *([10] $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价条件（低秩表示）–一般 X)* 设有一个 $\bar{U} \in \mathbb{R}^{n\times k}$ 使得$\bar{U}^T\bar{U} = I_{k\times k}$ 以及一个 $\bar{V} \in \mathbb{R}^{n\times k}$ 使得 $\bar{V}^T\bar{V} = I_{k\times k}$和一个秩为 $-k$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 $U \triangleq \begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}$ 以及 $V \triangleq \begin{bmatrix}\bar{V} & \bar{V}^\perp\end{bmatrix}$ 并且

$$U^TU \triangleq \begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}^T\begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix} = I_{n\times n} \quad and \quad V^TV \triangleq \begin{bmatrix}\bar{V} & \bar{V}^\perp\end{bmatrix}^T\begin{bmatrix}\bar{V} & \bar{V}^\perp\end{bmatrix} = I_{n\times n}. \tag{10}$$

对于给定矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m\times n^2}$ $(m \le n^2)$，假设 $\mathbf{y} = A\text{vec}(X) = A\text{vec}(X_{sol}) \in \mathbb{R}^m$，并令 $\hat{X}$ 为式 (7) 的解。如果

$$(\forall W \in \mathbb{R}^{n\times n} | Avec(W) = \mathbf{0}_{m\times 1}, W \neq \mathbf{0}_{n\times n}) \quad -\text{tr}\,(\bar{U}^T W \bar{V}) < \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T W \bar{V}^\perp), \tag{11}$$

then

$$\ell_0^* \Longleftrightarrow \ell_1^* \quad and \quad \mathbf{RMSE} = \|\text{vec}(\hat{X}) - \text{vec}(X_{sol})\|_2 = 0, \tag{12}$$

且 (6) 和 (7) 的解相同。此外，如果

$$(\exists W \in \mathbb{R}^{n\times n} | Avec(W) = \mathbf{0}_{m\times 1}, W \neq \mathbf{0}_{n\times n}) \quad -\text{tr}\,(\bar{U}^T W \bar{V}) \ge \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T W \bar{V}^\perp), \tag{13}$$

那么，存在一个 X，它属于上述矩阵集合，且其列属于 U 的张成空间，行属于 V 的张成空间，使得 (6) 和 (7) 的解不同。

证明。该证明只需对附录 A 中给出的对称矩阵证明稍作调整。 □

按照 RDT 的思路继续，下面的推论是上述定理针对矩阵补全的特定变体。

推论 1。 *([10]* $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价条件：通过掩码矩阵（MC/C-inf） – 一般 X) 假设定理 1 的设定成立，且 X_{sol} 是 (6) 的唯一解。设掩码矩阵 $M \in \mathbb{R}^{n\times n}$具有 m 个 1 和 (n^2-m) 个 0，并设 A由 M生成，即设 A为从 $\text{diag}^{-1}(vec(M))I_{n^2\times n^2}$中移除所有零行后得到的矩阵。当且仅当

$$\min_{W, W^T W=1, M\circ W=\mathbf{0}_{n\times n}} \text{tr}\,(\bar{U}^T W \bar{V}) + \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T W \bar{V}^\perp) \ge 0, \tag{14}$$

then

$$\ell_0^* \Longleftrightarrow \ell_1^* \quad and \quad \mathbf{RMSE} = \|\text{vec}(\hat{X}) - \text{vec}(X_{sol})\|_2 = 0, \tag{15}$$

并且，(6) 和 (7) 的解相同。

最后， [10] 也证明了以下从谱角度表述的推论。

推论2。 *([10]* $\ell_0^* - \ell_1^*$通过掩码修正基谱的-等价条件（C-inf） – 一般X) 假设定理 1 的设定成立，且 $k \le l$。令 $M \triangleq M^{(l)} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 和 $I^{(l)} \in \mathbb{R}^{n\times(n-l)}$ 如 (5) 中所定义。设

$$\begin{aligned} \Lambda_V &\triangleq ((I^{(l)})^T \bar{V}^\perp)^{-1} (I^{(l)})^T \bar{V} \\ \Lambda_U &\triangleq ((I^{(l)})^T \bar{U}^\perp)^{-1} (I^{(l)})^T \bar{U} \\ Q &= \left((I^{(l)})^T \bar{V}^\perp (\bar{V}^\perp)^T I^{(l)}\right)^{-1} - I \\ Q_1^\perp &= \left((I^{(l)})^T \bar{U}^\perp (\bar{U}^\perp)^T I^{(l)}\right)^{-1} - I. \end{aligned} \tag{16}$$

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

$$If\ and\ only\ if \quad \lambda_{max}(\Lambda_V^T \Lambda_V \Lambda_U^T \Lambda_U) \le 1. \tag{17}$$

此外，如果

$$\lambda_{max}(Q)\, \lambda_{max}\left(Q_1^\perp\right) \le 1, \tag{18}$$

那么再次有 $\ell_0^* \Longleftrightarrow \ell_1^*$ 和均方根误差 $= \|\text{vec}(\hat{X} - \text{vec}(X_{sol})\|_2 = 0$，且 C-inf 完美地成功了，作为 w *ell.*

由于我们将研究数学上最具挑战性的大规模 n 线性情形，因此引入以下高维缩放会很有用

$$\beta \triangleq \lim_{n\to\infty} \frac{k}{n} \quad \text{and} \quad \eta \triangleq \lim_{n\to\infty} \frac{l}{n} \quad \text{and} \quad \alpha \triangleq \lim_{n\to\infty} \frac{m}{n^2} = \lim_{n\to\infty} \frac{n^2-(n-l)^2}{n^2} = 1-(1-\eta)^2. \tag{19}$$

关于[10] 的核心亮点结果是以下定理。该定理通过分析得出，分析依据了上述推论，并结合了随机对偶理论（RDT）和自由概率论（FPT）。它基本确立了最坏情况相变（PT），即 ℓ_1^*在典型统计情形下用于求解 C-inf 时所呈现的最紧凸松弛启发式。

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 $\bar{U}^\perp \in \mathbb{R}^{n\times(n-k)}$和 $\bar{V}^\perp \in \mathbb{R}^{n\times(n-k)}$（$X_{sol}^T \bar{U}^\perp = X_{sol}\bar{V}^\perp = \mathbf{0}_{n\times(n-k)}$）的基服从 Haar 分布（不一定相互独立）。令 $M, M\,(\iota) \in \mathbb{R}^{n\times n}$如式（5）所定义。假设处于大规模 n 线性情形，其中 β，$\lim_{n\to\infty} \frac{k}{n}$，且 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

$$\xi_\eta^{(wc)}(\beta) \triangleq \beta - \frac{1}{2} + \sqrt{\eta-\eta^2} = 0. \tag{20}$$

当且仅当 $\beta \le \beta_{wc}$

$$\lim_{n\to\infty} \mathbb{P}(\ell_0^* \Longleftrightarrow \ell_1^*) = \lim_{n\to\infty} \mathbb{P}(\mathbf{RMSE} = 0) = 1, \tag{21}$$

并且（6）和（7）的解以压倒性概率相同。

基于上述定理得到的结果如图 2 所示，可以清楚地看到，相变曲线将整个（β，η）区域分成两个子区域：1）第一个子区域（位于曲线下方（或右侧）），其中会出现 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价现象；2）第二个子区域（位于曲线上方（或左侧）），其中缺少 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价性。这意味着，可以通过（7）中的 ℓ_1^* 启发式方法，以残差均方误差（均方根误差）为零的方式恢复（6）中被 M 掩盖的 X_{sol}。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，且 X_{sol} 和 $\hat{X}$（分别为（6）和（7）的解）彼此相等，因此均方根误差 $= \|\text{vec}(\hat{X}) - \text{vec}(X_{sol})\|_2 = 0$。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}，使得均方根误差 $\to \infty$。

4 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价性分析——典型非对称情形

本节讨论推论2中的条件何时成立。与 [10], 一样，我们将在“典型”的统计背景下进行研究。另一方面，与 [10], 不同，我们不再关注最坏情况（对称）情形，而是考虑典型的非对称情形设定。实际上，这意味着两点：1）与 [10], 一样，假设 V和 U 都服从 Haar 分布；2）不同于定理2和 [10]，现在假设 V和 U 彼此独立。某种程度上，可以将 [10] 中的最坏情况情形视为一种极端情况：V 和 U “完全不独立”（换言之，两者相等）。同理，可以将我们在此考虑的情形视为另一种极端情况：V和 U “完全不相关”（换言之，两者完全独立）。如果在低秩非对称 X_{sol} 中，没有任何特定结构比其他结构更受青睐，那么这自然是最合理的选择。换言之，这不仅是一种极端情况，事实上，它通常也最能真实反映底层 C-inf 启发式的性能。

4.1 自由概率论 (FPT)– 预备知识

下面我们简要介绍分析所需的最基础 FPT 概念（更详细的处理请参阅我们的配套论文 [10] ）。如今众所周知，丹·沃伊库莱斯库的工作

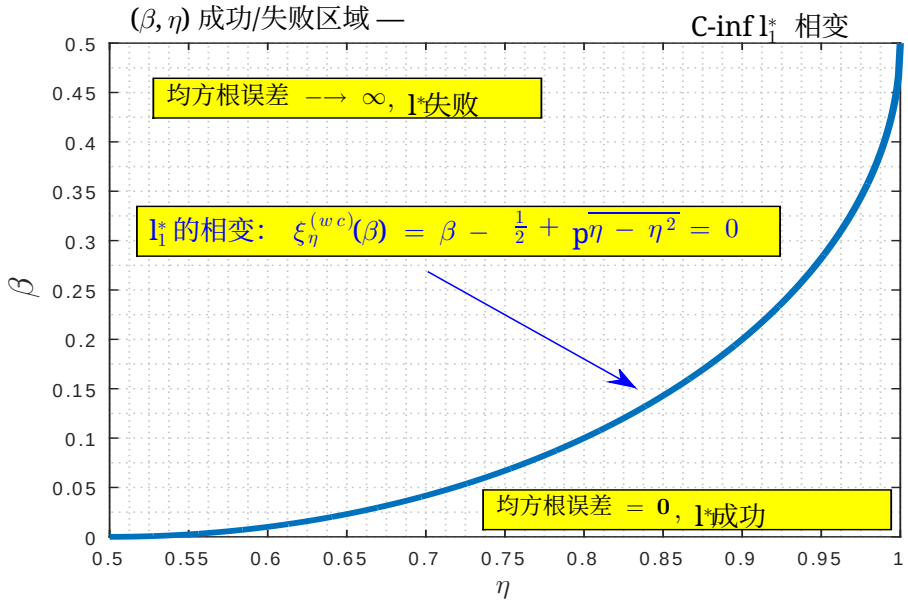

图 2：因果推断（**C-inf**）——典型的最坏情况 ℓ_1^* 相变

关于群论（例如参见 [46–48]）奠定了 FPT 的基础。FPT 的实际重要性很快显而易见，因此人们对进一步研究产生了浓厚兴趣。在随后的几年里，出现了不少出色的成果，使整个理论更易于理解，最终也更便于清晰地阐述。循着同样的思路，我们沿着 [10], 的脚步，摒弃所有抽象内容，聚焦于 FPT 中关键且具有实际应用价值的部分（更多详情亦可参见，例如 [12, 23, 35, 45–48]）。

4.1.1 FPT 基础——随机矩阵变量

我们假设处于大规模 n 线性情形，并考虑两个对称矩阵 $A = A^T \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 和 $B = B^T \in \mathbb{R}^{n\times n}$，其特征子空间服从 Haar 分布。我们还假设，它们各自的谱律分别为 $f_A(\cdot)$ 和 $f_B(\cdot)$。我们将需要这两种谱密度的三种不同变换。首先介绍第一种，即所谓的斯蒂尔切斯变换（或 G 变换）

$$G(z) \triangleq \int_{I_f} \frac{f(x)}{z-x}dx, \quad z \in \mathbb{C} \setminus I_f, \tag{22}$$

其中 I_f 是 $f(\cdot)$ 的定义域。以下反演关系也广为人知

$$f(x) = \lim_{\epsilon\to 0^+} \frac{G(x-i\epsilon) - G(x+i\epsilon)}{2i\pi} \quad \text{or} \quad f(x) = -\lim_{\epsilon\to 0^+} \frac{\text{imag}(G(x+i\epsilon))}{\pi}. \tag{23}$$

为使上述结论成立，隐含地假设 $f(x)$ 连续会更容易。不过，我们也会在离散（或半离散）情形下使用它，因为显而易见的渐近转换可以使其连续，从而使论证完全严谨。稍后，当我们看到一些可能出现这类情况的具体例子时，会再多作说明，并更详细地解释究竟哪些东西可以是离散的，以及如何处理这种离散性。在此期间，我们先讨论一般原理，不必过分担心那些偏离典型情形时可能出现、并可能需要另行处理的所有技术细节。为此，我们接下来考虑满足以下条件的 $R(\cdot)$-变换和 $S(\cdot)$-变换

$$R(G(z)) + \frac{1}{G(z)} = z, \tag{24}$$

and

$$S(z)=\frac{1}{R(zS(z))}\quad\text{and}\quad R(z)=\frac{1}{S(zR(z))}. \tag{25}$$

设 $f_A(\cdot)$ 和 $f_B(\cdot)$ 是 A 和 B 的谱分布，$R_A(z)/S_A(z)$ 和 $R_B(z)/S_B(z)$ 分别是它们对应的 $R(\cdot)$-/$S(\cdot)$-变换。于是有以下结论

Voiculescu 的自由概率变换的关键概念 [46, 47]:

$$\begin{array}{rclcrcl} C & = & A+B & \Longrightarrow & R_C(z) & = & R_A(z)+R_B(z) \\ C & = & AB & \Longrightarrow & S_C(z) & = & S_A(z)S_B(z). \end{array} \tag{26}$$

现在不难看出，(22)-(26) 足以确定两个独立矩阵之和或乘积的谱分布，其中这两个矩阵具有已知的谱密度，且其特征子空间的基服从 Haar 分布。以上当然是一条普遍原则。只要能够获得底层矩阵 A 和 B 的统计特性，它几乎总是适用。在下一节中，我们将进一步提高要求，并说明在 C-inf 环境下，可以以这样的方式运用上述所有内容，最终明确确定所有感兴趣的量。

4.1.2 谱预备知识

我们首先回顾 (16) 中的 Q，并引入 Q_1

$$\begin{array}{rcl} Q_1 & \triangleq & \Lambda_V^T\Lambda_V \\ Q & \triangleq & \left((I^{(l)})^T\bar{V}^\perp(\bar{V}^\perp)^TI^{(l)}\right)^{-1}-I \\ Sp(Q_1) & \Longleftrightarrow_{\setminus 0} & Sp(Q), \end{array} \tag{27}$$

其中，$Sp(\cdot)$ 表示矩阵自变量的谱，而 $\Longleftrightarrow_{\setminus 0}$ 表示谱中零特征值以外部分的等价性。显然，接下来只需处理以下矩阵的谱

$$D\triangleq(I^{(l)})^T\bar{V}^\perp(\bar{V}^\perp)^TI^{(l)}. \tag{28}$$

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

$$U_D=\begin{bmatrix}\bar{U}_D & \bar{U}_D^\perp\end{bmatrix}\quad\text{with}\quad U_D^TU_D=I_{n\times n}. \tag{29}$$

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

$$\bar{D}\triangleq(I^{(l)})^TU_D^T\bar{V}^\perp(\bar{V}^\perp)^TU_DI^{(l)}, \tag{30}$$

¯，我们有 D 和 D 的谱在统计上相同，即

$$Sp(D)\triangleq Sp((I^{(l)})^T\bar{V}^\perp(\bar{V}^\perp)^TI^{(l)})\Longleftrightarrow_{\mathbb{P}}Sp((I^{(l)})^TU_D^T\bar{V}^\perp(\bar{V}^\perp)^TU_DI^{(l)})\triangleq Sp(\bar{D}), \tag{31}$$

其中 $\Longleftrightarrow_{\mathbb{P}}$ 表示统计／概率等价。以下两个事实使上述统计等价成立：1）投影矩阵 $\bar{V}^\perp(\bar{V}^\perp)^T$ 的谱在两侧进行前后酉乘法后保持不变；2）$\bar{V}^\perp$ 的 Haar 结构保持不变。忽略零特征值后，我们进一步有

$$Sp((I^{(l)})^TU_D^T\bar{V}^\perp(\bar{V}^\perp)^TU_DI^{(l)})\Longleftrightarrow_{\mathbb{P}\setminus 0}Sp(\bar{V}^\perp(\bar{V}^\perp)^TU_DI^{(l)}(I^{(l)})^TU_D^T)\Longleftrightarrow Sp(\bar{V}^\perp(\bar{V}^\perp)^T\bar{U}_D^\perp(\bar{U}_D^\perp)^T), \tag{32}$$

其中，与上文类似，$\Longleftrightarrow_{\mathbb{P}\setminus 0}$ 表示谱中零特征值以外部分的统计／概率等价性（这些零特征值是由底层矩阵非方阵所导致的）。显然，

我们下面关注的关键对象将是

$$\tilde{D} \triangleq \bar{V}^{\perp}(\bar{V}^{\perp})^T\bar{U}_D^{\perp}(\bar{U}_D^{\perp})^T, \tag{33}$$

其中 $\bar{V}^{\perp}$ 和 $\bar{U}_D^{\perp}$ 均服从 Haar 分布，且彼此独立。设

$$\begin{aligned}\mathcal{V} &\triangleq \bar{V}^{\perp}(\bar{V}^{\perp})^T \\ \mathcal{U} &\triangleq \bar{U}_D^{\perp}(\bar{U}_D^{\perp})^T,\end{aligned} \tag{34}$$

由（33）易得

$$\tilde{D} \triangleq \mathcal{V}\mathcal{U}. \tag{35}$$

˜下面的引理证明见 [10] ，它刻画了 G-变换 D。

引理1. (*[10]*) 设 $\bar{V}^{\perp} \in \mathbb{R}^{n\times(n-k)}$ 和 $\bar{U}_D^{\perp} \in \mathbb{R}^{n\times(n-k)}$ 是 $\mathbb{R}^n$中（$n-k$）-˜维子空间的 Haar 分布酉基。设 $\mathcal{V}$ 和 $\mathcal{U}$ 如（34）中所示， D 如（35）中所示，即

$$\begin{aligned}\mathcal{V} &\triangleq \bar{V}^{\perp}(\bar{V}^{\perp})^T \\ \mathcal{U} &\triangleq \bar{U}_D^{\perp}(\bar{U}_D^{\perp})^T \\ \tilde{D} &\triangleq \mathcal{V}\mathcal{U}.\end{aligned} \tag{36}$$

在大 n线性 性范围内，当 β，$\lim_{n\to\infty}\frac{k}{n}$ 时， $\tilde{D}$, $f_{\tilde{D}}(\cdot)$的谱密度的 G-变换为

$$G_{\tilde{D}}^{\pm}(z) = \frac{z-(\beta+\eta)\pm\sqrt{(z-(\beta+\eta))^2+4\beta\eta(z-1)}}{2(z^2-z)}. \tag{37}$$

4.2 非对称情形 – FPT 分析 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价

与 [10], 中一样，我们将再次借助自由概率论。不过这一次，情况会稍微复杂一些，因为可以说，我们将确定 $\lambda_V^T\lambda_V\lambda_U^T\lambda_U$的“联合谱”。换句话说，根据推论2和式（17），我们有

$$\ell_0^* - \ell_1^* - -\text{equivalence} \iff \lambda_{max}(\lambda_V^T\lambda_V\lambda_U^T\lambda_U) \leq 1, \tag{38}$$

因此，只要确定 $\lambda_V^T\lambda_V\lambda_U^T\lambda_U$ 的“联合谱”的上边缘，就足以确立 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价。回顾一下，在 [10] 中，我们只确定了单独谱 $\lambda_V^T\lambda_V$和$\lambda_U^T\lambda_U$ （在最坏情况下，这已足以最终得到相应的 C-inf ℓ_1^* 相变）。尽管计算及其相关技术细节有时可能较为繁琐，但总体方法与我们在 [10]中介绍的相当相似。事实上，为了便于理解，我们会尽可能按照 [10] 中的呈现顺序展开。我们首先回顾 Q_1 并引入 $Q_1^{\perp}$和 $\mathcal{Q}_1$

$$\begin{aligned}Q_1 &\triangleq \lambda_V^T\lambda_V \\ Q_1^{\perp} &\triangleq \lambda_U^T\lambda_U \\ \mathcal{Q}_1 &\triangleq Q_1Q_1^{\perp}.\end{aligned} \tag{39}$$

我们还回顾了 Q 和 $Q^{\perp}$ 的定义，并按以下方式引入 $\mathcal{Q}$ y

$$\begin{aligned}Q &\triangleq \left((I^{(l)})^T\bar{V}^{\perp}(\bar{V}^{\perp})^TI^{(l)}\right)^{-1} - I \\ Q^{\perp} &\triangleq \left((I^{(l)})^T\bar{U}^{\perp}(\bar{U}^{\perp})^TI^{(l)}\right)^{-1} - I \\ \mathcal{Q} &\triangleq QQ^{\perp}.\end{aligned} \tag{40}$$

4.2.1 $\mathcal{Q}_1$, $\lambda_V^T\lambda_V\lambda_U^T\lambda_U$ 的谱——理论考量

由于 (Q_1, Q) 和 $(Q_1^{\perp}, Q^{\perp})$ 是统计上相同的配对，因此暂时我们只关注其中一组，比如 (Q_1, Q)。为此，我们先回顾配对内部的统计关系

$$\begin{aligned} Q_1 &\triangleq \Lambda_V^T\Lambda_V \\ Q &\triangleq \left((I^{(l)})^T\bar{V}^{\perp}(\bar{V}^{\perp})^T I^{(l)}\right)^{-1} - I = D^{-1} - I \\ Sp(Q_1) &\Longleftrightarrow_{\backslash 0} Sp(Q), \end{aligned} \tag{41}$$

其中，$\Longleftrightarrow_{\backslash 0}$ 表示零特征值以外的谱等价。我们还会发现，研究 Q 的谱也很方便。之后，我们将进行必要的调整，使结果完全适用于 Q_1 的谱。首先，我们注意到

$$G_Q(z) = G_{D^{-1}}(z+1). \tag{42}$$

为了验证 (42) 确实成立，我们首先注意到，Q 和 D^{-1}、$f_Q(x)$ 以及 $f_{D^{-1}}(x)$ 的谱函数可以通过以下方式联系起来

$$f_Q(x) = f_{D^{-1}}(x+1). \tag{43}$$

由 (22) 可得

$$G_Q(z) = \int \frac{f_Q(x)}{z-x}dx = \int \frac{f_{D^{-1}}(x+1)}{z-x}dx = \int \frac{f_{D^{-1}}(x+1)}{z+1-(x+1)}dx = \int \frac{f_{D^{-1}}(x)}{z+1-x}dx = G_{D^{-1}}(z+1). \tag{44}$$

由 (41) 和 (42) 还可得

$$R_Q(z) = R_{D^{-1}}(z) - 1. \tag{45}$$

也就是说，(24) 首先给出

$$R_Q(G_Q(z)) = z - \frac{1}{G_Q(z)}, \tag{46}$$

然后

$$\begin{array}{rcccrcl} R_Q(z) &=& G_Q^{-1}(z) - \frac{1}{z} &\iff& z &=& G_Q\left(R_Q(z) + \frac{1}{z}\right) \\ R_{D^{-1}}(z) &=& G_{D^{-1}}^{-1}(z) - \frac{1}{z} &\iff& z &=& G_{D^{-1}}\left(R_{D^{-1}}(z) + \frac{1}{z}\right). \end{array} \tag{47}$$

结合式（42）和（47），我们得到

$$\begin{array}{rrcl} & G_Q\left(R_Q(z) + \frac{1}{z}\right) &=& G_{D^{-1}}\left(R_{D^{-1}}(z) + \frac{1}{z}\right) \\ \iff & G_Q\left(R_Q(z) + \frac{1}{z}\right) &=& G_Q\left(R_{D^{-1}}(z) + \frac{1}{z} - 1\right) \\ \iff & R_Q(z) + \frac{1}{z} &=& R_{D^{-1}}(z) + \frac{1}{z} - 1 \\ \iff & R_Q(z) &=& R_{D^{-1}}(z) - 1, \end{array} \tag{48}$$

这正是式（46）。由式（25）进一步可得

$$S_Q(z) = \frac{1}{R_Q(zS_Q(z))} = \frac{1}{R_{D^{-1}}(zS_Q(z)) - 1}, \tag{49}$$

and

$$R_{D^{-1}}(zS_Q(z)) = \frac{1}{S_Q(z)} + 1. \tag{50}$$

进一步利用式（25），还可得

$$R_{D^{-1}}(zS_Q(z)) = \frac{1}{S_{D^{-1}}(zS_Q(z)R_{D^{-1}}(zS_Q(z)))} = \frac{1}{S_{D^{-1}}\left(zS_Q(z)\left(\frac{1}{S_Q(z)}+1\right)\right)} = \frac{1}{S_{D^{-1}}\left(z+zS_Q(z)\right)}. \quad (51)$$

结合 (50) 和 (51)，可以建立 D^{-1} 和 Q 的 S-变换之间的联系

$$\frac{1}{S_{D^{-1}}\left(z+zS_Q(z)\right)} = \frac{1}{S_Q(z)} + 1. \quad (52)$$

由 (40) 和自由概率理论原则 (26) 可得

$$S_{\mathcal{Q}}(z) = S_Q(z)S_{Q_\perp}(z) = (S_Q(z))^2, \quad (53)$$

这里用到了 Q 和 $Q^\perp$ 在统计上完全相同，因此具有相同的 S-变换这一事实。现在可以用 $z \to zR_{\mathcal{Q}}(z)$ 改写 (52)，并利用 (25) 得到

$$\begin{array}{rcl} & \frac{1}{S_{D^{-1}}(zR_{\mathcal{Q}}(z)+zR_{\mathcal{Q}}(z)S_Q(zR_{\mathcal{Q}}(z)))} & = \frac{1}{S_Q(zR_{\mathcal{Q}}(z))}+1 \\ \iff & \frac{1}{S_{D^{-1}}\left(zR_{\mathcal{Q}}(z)+zR_{\mathcal{Q}}(z)\sqrt{S_{\mathcal{Q}}(zR_{\mathcal{Q}}(z))}\right)} & = \frac{1}{\sqrt{S_Q(zR_{\mathcal{Q}}(z))}}+1 \\ \iff & \frac{1}{S_{D^{-1}}\left(zR_{\mathcal{Q}}(z)+z\sqrt{R_{\mathcal{Q}}(z)}\right)} & = \sqrt{R_{\mathcal{Q}}(z)}+1. \end{array} \quad (54)$$

代入 $z \to G_{\mathcal{Q}}(z)$ 后，可以进一步改写 (54)

$$\begin{array}{rcl} & \frac{1}{S_{D^{-1}}\left(zR_{\mathcal{Q}}(z)+z\sqrt{R_{\mathcal{Q}}(z)}\right)} & = \sqrt{R_{\mathcal{Q}}(z)}+1 \\ \iff & \frac{1}{S_{D^{-1}}\left(G_{\mathcal{Q}}(z)R_{\mathcal{Q}}(G_{\mathcal{Q}}(z))+G_{\mathcal{Q}}(z)\sqrt{R_{\mathcal{Q}}(G_{\mathcal{Q}}(z))}\right)} & = \sqrt{R_{\mathcal{Q}}(G_{\mathcal{Q}}(z))}+1. \end{array} \quad (55)$$

由 (24) 可得

$$\begin{array}{rcl} R_{\mathcal{Q}}(G_{\mathcal{Q}}(z)) + \frac{1}{G_{\mathcal{Q}}(z)} & = & z \\ \iff \quad G_{\mathcal{Q}}(z)R_{\mathcal{Q}}(G_{\mathcal{Q}}(z)) & = & zG_{\mathcal{Q}}(z) - 1. \end{array} \quad (56)$$

进一步结合 (55) 和 (56)，还可得

$$\begin{array}{rcl} & \frac{1}{S_{D^{-1}}\left(G_{\mathcal{Q}}(z)R_{\mathcal{Q}}(G_{\mathcal{Q}}(z))+G_{\mathcal{Q}}(z)\sqrt{R_{\mathcal{Q}}(G_{\mathcal{Q}}(z))}\right)} & = \sqrt{R_{\mathcal{Q}}(G_{\mathcal{Q}}(z))}+1 \\ \iff & \frac{1}{S_{D^{-1}}\left(zG_{\mathcal{Q}}(z)-1+\sqrt{G_{\mathcal{Q}}(z)}\sqrt{zG_{\mathcal{Q}}(z)-1}\right)} & = \sqrt{\frac{zG_{\mathcal{Q}}(z)-1}{G_{\mathcal{Q}}(z)}}+1. \end{array} \quad (57)$$

如 [12] 可得矩阵的 S变换与其逆矩阵变换之间的联系

$$S_D(z) = \frac{1}{S_{D^{-1}}(-1-z)}. \quad (58)$$

牢记（58），可以将（57）改写如下

$$\begin{array}{rcl} & \frac{1}{S_{D^{-1}}\left(G_{\mathcal{Q}}(z)R_{\mathcal{Q}}(G_{\mathcal{Q}}(z))+G_{\mathcal{Q}}(z)\sqrt{R_{\mathcal{Q}}(G_{\mathcal{Q}}(z))}\right)} & = \sqrt{R_{\mathcal{Q}}(G_{\mathcal{Q}}(z))}+1 \\ \iff & S_D\left(-zG_{\mathcal{Q}}(z)-\sqrt{G_{\mathcal{Q}}(z)}\sqrt{zG_{\mathcal{Q}}(z)-1}\right) & = \sqrt{\frac{zG_{\mathcal{Q}}(z)-1}{G_{\mathcal{Q}}(z)}}+1. \end{array} \quad (59)$$

下面我们将建立一个 $S_D(z) - G_D(z)$ 联系。不过，在此之前，我们需要对 $G_D(z)$ 变换本身做一些调整。

~ ¯i) 调整 $G_D(z)$，以弥补 D 与 D之间的差异

我们现在简要 $\tilde{}$ $\bar{}$简要回顾一下 D、 $\tilde{D}$与 $\bar{D}$之间的联系。首先，由 (32) 和 (19) 可得

$$\begin{aligned} \tilde{D} &= \bar{V}^{\perp}(\bar{V}^{\perp})^T\bar{U}_{\bar{D}}^{\perp}(\bar{U}_{\bar{D}}^{\perp})^T \\ \bar{D} &= (\bar{U}_{\bar{D}}^{\perp})^T\bar{V}^{\perp}(\bar{V}^{\perp})^T\bar{U}_{\bar{D}}^{\perp}. \end{aligned} \tag{60}$$

$\tilde{}$ $\bar{}$ $\bar{}$ $\tilde{}$ D 和 $\bar{D}$ 的谱仅相差缩放，实际上是相同的。由于 $\bar{D}$ 包含 D的所有特征值，只是去掉了 $l=\eta n$ 个零特征值，因此可以通过以下方式联系它们的 G变换。

$$G_{\bar{D}}(z) = \frac{1}{1-\eta}\left(G_{\tilde{D}}(z)-\frac{\eta}{z}\right). \tag{61}$$

$\tilde{}$ $\bar{}$为了证明 (61) 确实成立，我们首先联系 $\tilde{D}$ 和 $\bar{D}$的谱概率密度函数

$$f_{\bar{D}}(x) = \frac{1}{1-\eta}\left(f_{\tilde{D}}(x)-\eta\delta(x)\right). \tag{62}$$

然后由 (22) 可得

$$G_{\bar{D}}(x) = \int\frac{f_{\bar{D}}(x)}{z-x}dx = \frac{1}{1-\eta}\left(\int\frac{f_{\tilde{D}}(x)}{z-x}dx-\eta\int\frac{\delta(x)}{z-x}dx\right) = \frac{1}{1-\eta}\left(G_{\tilde{D}}(z)-\frac{\eta}{z}\right). \tag{63}$$

将 (63) 的开头和结尾联系起来，即可得到 (61)。

ii) 针对 Q_1 和 Q之间的差异调整 $G_D(z)$

我们回顾一下， Q_1 的特征值与 Q 的特征值相同，但少了 $n-l-k$ 个零特征值（当 $n-l-k\le 0$ 时，这意味着 Q_1 拥有 Q 的全部特征值，外加 $|n-l-k|$ 个零特征值）。为计入这一差异，我们发现，引入一个矩阵 D_1 很有帮助：通过从D的谱中移除/添加 $|n-(l+k)|$ 个 1 来得到该矩阵。由于这些添加的 1 具有反演不变性，在反演后它们仍留在谱中。这意味着，对 D_1 进行反演并减去单位矩阵后，这些 1 就变成了零；实际上，它们对 Q 的作用相当于添加或移除 $|n-(l+k)|$ 个零，这正是我们为计入 Q_1 与 Q之间的差异所需要的。为了将一切置于恰当的数学背景下，设 D_1 为一个具有 Haar 分布的特征空间基、且谱函数按以下方式定义的矩阵

$$f_{D_1} = \frac{1}{1-\eta-(1-(\beta+\eta))}\left(f_{\tilde{D}}-\eta\delta(x)-(1-(\beta+\eta))\delta(x-1)\right), \tag{64}$$

$\tilde{}$ $\bar{}$ $\bar{}$这里我们已将上述对 D 和 $\bar{D}$ 之间差异的调整考虑在内（D 和 $\bar{D}$ 具有相同的谱函数）。再次利用（22），我们可仿照（63）得到

$$G_{D_1}(z) = \frac{1}{1-\eta-(1-\beta+\eta)}\left(G_{\tilde{D}}(z)-\frac{\eta}{z}-\frac{1-(\beta+\eta)}{z-1}\right). \tag{65}$$

再次回顾式 (24)，我们得到

$$\begin{aligned} & R_{D_1}(G_{D_1}(z))+\tfrac{1}{G_{D_1}(z)} = z \\ \iff\quad & R_{D_1}(z)+\tfrac{1}{z} = G_{D_1}^{-1}(z). \end{aligned} \tag{66}$$

取 $z\to R_{D_1}(z)+\frac{1}{z}$后，我们可以将式 (65) 重写为

$$G_{D_1}\left(R_{D_1}(z)+\frac{1}{z}\right) = \frac{1}{\beta}\left(G_{\tilde{D}}\left(R_{D_1}(z)+\frac{1}{z}\right)-\frac{\eta}{R_{D_1}(z)+\frac{1}{z}}-\frac{1-(\beta+\eta)}{R_{D_1}(z)+\frac{1}{z}-1}\right), \tag{67}$$

并在利用（66）之后

$$z = \frac{1}{\beta}\left(G_{\tilde{D}}\left(R_{D_1}(z)+\frac{1}{z}\right)-\frac{\eta}{R_{D_1}(z)+\frac{1}{z}}-\frac{1-(\beta+\eta)}{R_{D_1}(z)+\frac{1}{z}-1}\right). \tag{68}$$

再次替换 $z \to zS_{D_1}(z)$ 后，（68）变为

$$zS_{D_1}(z) = \frac{1}{\beta}\left(G_{\tilde{D}}\left(R_{D_1}(zS_{D_1}(z)) + \frac{1}{zS_{D_1}(z)}\right) - \frac{\eta}{R_{D_1}(zS_{D_1}(z)) + \frac{1}{zS_{D_1}(z)}} - \frac{1-(\beta+\eta)}{R_{D_1}(zS_{D_1}(z)) + \frac{1}{zS_{D_1}(z)} - 1}\right). \tag{69}$$

利用 (25)，由 (69) 进一步可得

$$zS_{D_1}(z) = \frac{1}{\beta}\left(G_{\tilde{D}}\left(\frac{1}{S_{D_1}(z)} + \frac{1}{zS_{D_1}(z)}\right) - \frac{\eta}{\frac{1}{S_{D_1}(z)} + \frac{1}{zS_{D_1}(z)}} - \frac{1-(\beta+\eta)}{\frac{1}{S_{D_1}(z)} + \frac{1}{zS_{D_1}(z)} - 1}\right), \tag{70}$$

and

$$zS_{D_1}(z) = \frac{1}{\beta}\left(G_{\tilde{D}}\left(\frac{z+1}{zS_{D_1}(z)}\right) - \frac{\eta}{\frac{z+1}{zS_{D_1}(z)}} - \frac{1-(\beta+\eta)}{\frac{z+1}{zS_{D_1}(z)} - 1}\right). \tag{71}$$

将 $D \to D_1$ 代入 (41)，并相应地记为 $Q \to Q_1$ 和 $\mathcal{Q} \to \mathcal{Q}_1$，重复从 (41) 到 (59) 的所有步骤，即可得到如下结果

$$S_{D_1}\left(-zG_{\mathcal{Q}_1}(z) - \sqrt{G_{\mathcal{Q}_1}(z)}\sqrt{zG_{\mathcal{Q}_1}(z)-1}\right) \quad = \quad \sqrt{\frac{zG_{\mathcal{Q}_1}(z)-1}{G_{\mathcal{Q}_1}(z)}} + 1. \tag{72}$$

令

$$\begin{aligned} z_1(z) &\triangleq -zG_{\mathcal{Q}_1}(z) - \sqrt{G_{\mathcal{Q}_1}(z)}\sqrt{zG_{\mathcal{Q}_1}(z)-1} \\ y(z) &\triangleq \frac{z_1(z)+1}{z_1(z)S_{D_1}(z_1(z))}, \end{aligned} \tag{73}$$

由 (72) 可得

$$S_{D_1}(z_1(z)) \quad = \quad \sqrt{\frac{zG_{\mathcal{Q}_1}(z)-1}{G_{\mathcal{Q}_1}(z)}} + 1. \tag{74}$$

取 $z \to z_1$ 并重写 (71) 后，最终得到

$$\frac{z_1(z)+1}{y(z)} = \frac{1}{\beta}\left(G_{\tilde{D}}(y(z)) - \frac{\eta}{y(z)} - \frac{1-(\beta+\eta)}{y(z)-1}\right). \tag{75}$$

我们将上述结果总结为以下引理。

引理2。设 $\mathcal{Q}_1$ 如 (39) 所示。则其 G 变换 $G_{\mathcal{Q}_1}(z)$ 满足

$$\frac{z_1(z)+1}{y(z)} = \frac{1}{\beta}\left(G_{\tilde{D}}(y(z)) - \frac{\eta}{y(z)} - \frac{1-(\beta+\eta)}{y(z)-1}\right). \tag{76}$$

其中 $z_1(z)$ 和 $y(z)$ 如 (73) 所示， $S_{D_1}(z_1(z))$ 如 (74) 所示，而 $G_{\tilde{D}}(y(z))$ 如引理1所示。

结合引理1（其中明确给出了 $G_{\tilde{D}}(\cdot)$ ）和（73）—（75），即可确定$G_{\mathcal{Q}_1}(z)$。利用（23）便能够完全确定谱分布。这是一种原则上可行的通用方法。下面我们将进一步推进，针对谱边缘提供更为详细的分析，因为它们在 $\ell_0^* - \ell_1^*$等价性中发挥着关键作用。事实证明，我们可以对其给出足够明确的刻画，从而再次得到相应C-inf相变的显式闭式表达。稍后我们将回到上述用于确定 $\mathcal{Q}_1$ 的整个谱的过程，并展示这种过程实际上会产生何种类型的结果。

4.2.2 $\mathcal{Q}_1$ 的谱边缘显式刻画

正如我们前面所看到的， $\mathcal{Q}$ （或 $\mathcal{Q}_1$）的谱的上边缘 $\lambda_{max}(\mathcal{Q}) = \lambda_{max}(\mathcal{Q}_1)$与因果推断中 ℓ_1^*最小化启发式方法的成功直接相关。更准确地说，正如推论2所述，当且仅当 $\lambda_{max}(\mathcal{Q}) = \lambda_{max}(\mathcal{Q}_1) \leq 1$时，才有 $\ell_0^* - \ell_1^*$等价性。显然，对 $\lambda_{max}(\mathcal{Q}) = \lambda_{max}(\mathcal{Q}_1)$进行明确刻画，就足以对 $\ell_0^* - \ell_1^*$等价性进行明确刻画。这样便足以得出何时可以可靠地使用 ℓ_1^* 来处理因果推断。

为了显式刻画 $\lambda_{max}(\mathcal{Q}) = \lambda_{max}(\mathcal{Q}_1) \leq 1$ ，我们依赖上一节给出的结果。首先注意到， $\mathcal{Q}_1$ 的谱函数 $f_{\mathcal{Q}_1}(x)$ 可以通过利用式（23）和上文讨论的 $G_{\mathcal{Q}_1}(z)$ 变换得到。此外，在谱边缘处，$G_{\mathcal{Q}_1}(z)$ 应为实数（谱边缘实际上是 $G_{\mathcal{Q}_1}(z)$ 变为复数的临界点，也就是说，它开始具有非零虚部）。这基本上意味着，在谱边缘处，对于实数 $G_{\mathcal{Q}_1}(z)$，应满足式（76）。此外，由于我们所关注的谱边缘是 one，这意味着对于实数 $G_{\mathcal{Q}_1}(1)$，式（76）需要成立。将式（73）—（75）改写为 $z = 1$ gives

$$\begin{aligned} z_1(1) &= -G_{\mathcal{Q}_1}(1) - \sqrt{G_{\mathcal{Q}_1}(1)}\sqrt{G_{\mathcal{Q}_1}(1) - 1} \\ y(1) &\triangleq \frac{z_1(1) + 1}{z_1(1) S_{D_1}(z_1(1))}, \end{aligned} \tag{77}$$

and

$$S_{D_1}(z_1(1)) = \sqrt{\frac{G_{\mathcal{Q}_1}(1) - 1}{G_{\mathcal{Q}_1}(1)}} + 1 = -\frac{z_1(1)}{G_{\mathcal{Q}_1}(1)}, \tag{78}$$

and

$$\frac{z_1(1) + 1}{y(1)} = \frac{1}{\beta}\left(G_{\tilde{D}}(y(1)) - \frac{\eta}{y(1)} - \frac{1 - (\beta + \eta)}{y(1) - 1}\right). \tag{79}$$

由（77）还可进一步得出

$$\begin{aligned} G_{\mathcal{Q}_1}(1) &= -\frac{(z_1(1))^2}{1 + 2z_1(1)} \\ y(1) &= -\frac{(z_1(1) + 1) G_{\mathcal{Q}_1}(1)}{(z_1(1))^2} = \frac{z_1(1) + 1}{1 + 2z_1(1)}. \end{aligned} \tag{80}$$

于是，第二个等式也给出

$$z_1(1) = \frac{y(1) - 1}{1 - 2y(1)}, \tag{81}$$

and

$$z_1(1) + 1 = \frac{y(1)}{2y(1) - 1}. \tag{82}$$

将（82）代入（79）可得

$$\frac{1}{2y(1) - 1} = \frac{1}{\beta}\left(G_{\tilde{D}}(y(1)) - \frac{\eta}{y(1)} - \frac{1 - (\beta + \eta)}{y(1) - 1}\right), \tag{83}$$

or

$$\zeta_1(y) \triangleq -\frac{1}{2y - 1} + \frac{1}{\beta}\left(G_{\tilde{D}}(y) - \frac{\eta}{y} - \frac{1 - (\beta + \eta)}{y - 1}\right) = 0. \tag{84}$$

˜利用 $G_{\tilde{D}}(z)$（其中“–”符号对应于 D 谱的主体区域的下边缘

的上边缘）根据引理1，我们进一步得到

$$\zeta_1(y) = -\frac{1}{2y-1} + \frac{2\beta-1}{2\beta(y-1)} + \frac{1}{2\beta y(y-1)}\left(-\beta+\eta-\sqrt{(y-(\beta+\eta))^2+4\beta\eta(y-1)}\right) = 0, \tag{85}$$

and

$$\begin{aligned}\zeta_1(y) &= \frac{-2\beta y(y-1)+y(2\beta-1)(2y-1)+(2y-1)\left(-\beta+\eta-\sqrt{(y-(\beta+\eta))^2+4\beta\eta(y-1)}\right)}{2\beta y(y-1)(2y-1)} \\ &= \frac{2(\beta-1)y^2+(1-2\beta+2\eta)y+\beta-\eta-(2y-1)\sqrt{(y-(\beta+\eta))^2+4\beta\eta(y-1)}}{2\beta y(y-1)(2y-1)}.\end{aligned} \tag{86}$$

设定

$$\begin{aligned}\zeta_2(y) &\triangleq 2(\beta-1)y^2+(1-2\beta+2\eta)y+\beta-\eta-(2y-1)\sqrt{(y-(\beta+\eta))^2+4\beta\eta(y-1)} \\ \zeta(y) &\triangleq (2(\beta-1)y^2+(1-2\beta+2\eta)y+\beta-\eta)^2-((2y-1)\sqrt{(y-(\beta+\eta))^2+4\beta\eta(y-1)})^2,\end{aligned} \tag{87}$$

我们很容易得到

$$\zeta_1(y)=0 \iff \zeta_2(y)=0 \iff \zeta(y)=0. \tag{88}$$

因此，下面我们关注 $\zeta(y)$。将两边平方并合并各项后，得到

$$\zeta(y) = 4\beta(c_3y^4+c_2y^3+c_1y^2+c_0y+c_{00}), \tag{89}$$

with

$$\begin{aligned}c_3 &= \beta-2 \\ c_2 &= 5-2\beta-2\eta \\ c_1 &= \beta-4+3\eta \\ c_0 &= 1-\eta \\ c_{00} &= 0.\end{aligned} \tag{90}$$

由 (89) 我们还可得到

$$\zeta(y) = 4\beta y(c_3y^3+c_2y^2+c_1y+c_0). \tag{91}$$

由于我们关注的是谱的边缘或断裂点，$\zeta(y)$ 应在某些 y 处与零相切，这意味着它应在这样的 y 处有一个驻点。为求出该驻点，我们取导数

$$\frac{d\left(\frac{\zeta(y)}{4\beta y}\right)}{dy} = 3c_3y^2+2c_2y+c_1 = 0. \tag{92}$$

对 y 求解，得到

$$y = \frac{-c_2+\sqrt{c_2^2-3c_1c_3}}{3c_3}. \tag{93}$$

设定

$$r \triangleq c_2^2-3c_1c_3 = 1+\beta^2+4\eta^2-2\beta-2\eta-\beta\eta, \tag{94}$$

由式（93）可得

$$y_{opt} = \frac{-c_2 + \sqrt{r}}{3c_3}. \tag{95}$$

首先我们设

$$\zeta_3(y) \triangleq c_3 y^3 + c_2 y^2 + c_1 y + c_0. \tag{96}$$

显然，由（91）可得

$$\zeta(y) = 4\beta y \zeta_3(y). \tag{97}$$

然后代入（95）中的 y_{opt} 值，经过一些代数变换后得到

$$\zeta_3(y_{opt}) = -2(\sqrt{r})^3 - c_2^3 + 3rc_2 + 27c_3^2 c_0. \tag{98}$$

首先由（90）可得

$$\begin{aligned} c_2 &= -2c_3 - 1 + 2c_0 \\ c_1 &= c_3 - 3c_0 + 1, \end{aligned} \tag{99}$$

然后由（94）可得

$$r = c_3^2 + 1 + 4c_0^2 + c_3 - 4c_0 + c_0 c_3. \tag{100}$$

将（98）—（100）结合起来，再经过一些代数变换可得

$$\zeta_3(y_{opt}) = -2(\sqrt{r})^3 + 2c_3^3 - 3c_3 + 6c_3 c_0^2 + 3c_3^2 + 3c_3 c_0 + 3c_0 c_3^2 - 2 - 24c_0^2 + 12c_0 + 16c_0^3. \tag{101}$$

下面我们证明

$$c_3^2 = -1 - 2c_3 + 4c_0 - 4c_0^2 \quad \Longleftrightarrow \quad \zeta_3(y_{opt}) = 0. \tag{102}$$

我们首先利用 (102) 对 $\zeta_3(y_{opt})$ 关于 c_3 进行系统线性化，得到

$$\zeta_3(y_{opt}) = -2(\sqrt{r})^3 + (-3c_3 + 5c_3 c_0 - 2c_3 c_0^2 - 1 - 8c_0^2 + 5c_0 + 4c_0^3). \tag{103}$$

进一步变换后，我们还得到

$$\begin{aligned} \zeta_3(y_{opt}) &= -2(\sqrt{r})^3 + (-3c_3 + 5c_3 c_0 - 2c_3 c_0^2 - 1 - 8c_0^2 + 5c_0 + 4c_0^3) \\ &= -2(\sqrt{r})^3 + (c_3(c_0 - 1)(3 - 2c_0) + (-4c_0 + 1 + 4c_0^2)(c_0 - 1)) \\ &= 2(\sqrt{c_3}\sqrt{c_0 - 1})^3 + (c_3(c_0 - 1)(3 - 2c_0) + (-4c_0 + 1 + 4c_0^2)(c_0 - 1)) \\ &= \left(2(\sqrt{c_3})^3\sqrt{c_0 - 1} + (c_3(3 - 2c_0) + (-4c_0 + 1 + 4c_0^2))\right)(c_0 - 1). \end{aligned} \tag{104}$$

其中第三个等号是在注意到满足条件 (102) 后，100) 中的 r 变为以下形式时得到的

$$c_3^2 = -1 - 2c_3 + 4c_0 - 4c_0^2 \quad \Longrightarrow \quad r = -c_3 + c_0 c_3. \tag{105}$$

我们发现将 (104) 改写为以下形式很有用

$$\zeta_3(y_{opt}) = \zeta_3^{(1)}(y_{opt}) + \zeta_3^{(2)}(y_{opt}), \tag{106}$$

其中

$$\begin{aligned} \zeta_3^{(1)}(y_{opt}) &\triangleq 2(\sqrt{c_3})^3\sqrt{c_0 - 1} \\ \zeta_3^{(2)}(y_{opt}) &\triangleq c_3(3 - 2c_0) + (-4c_0 + 1 + 4c_0^2). \end{aligned} \tag{107}$$

接下来，我们考察这些量的平方值。首先从 $\zeta_3^{(1)}$ (y_{opt} 开始)

$$(\zeta_3^{(1)}(y_{opt}))^2 = 4c_3^3(c_0-1), \tag{108}$$

并利用条件 (102) 对 c_3 进行系统线性化。首先消去三次项 c_3 ，得到如下结果

$$\begin{aligned}(\zeta_3^{(1)}(y_{opt}))^2 &= 4c_3^3(c_0-1)\\ &= 4c_3(-1-2c_3+4c_0-4c_0^2)(c_0-1)\\ &= -8c_3^2c_0+32c_3c_0^2-16c_3c_0^3-8-12c_3+32c_0-32c_0^2-20c_3c_0,\end{aligned} \tag{109}$$

然后再次应用相同的步骤，得到完全线性化的形式

$$(\zeta_3^{(1)}(y_{opt}))^2 = 4(c_3((-2c_0^2+c_0+1)(2c_0-3))-2(1-c_0)(2c_0-1)^2). \tag{110}$$

接下来考察 $\zeta_3^{(2)}$ (y_{opt})

$$(\zeta_3^{(2)}(y_{opt}))^2 = (c_3(3-2c_0)+(-4c_0+1+4c_0^2))^2, \tag{111}$$

并再次利用条件 (102) 对 c_3 进行线性化。这次过程更简单，因为 c_3 中只有二次项，无须像上面那样分两步进行。只需一步即可得到

$$\begin{aligned}(\zeta_3^{(2)}(y_{opt}))^2 &= (c_3(3-2c_0)+(-4c_0+1+4c_0^2))^2\\ &= c_3^2(3-2c_0)^2+(-4c_0+1+4c_0^2)^2+2(-4c_0+1+4c_0^2)c_3(3-2c_0)\\ &= (-1-2c_3+4c_0-4c_0^2)(3-2c_0)^2+(-4c_0+1+4c_0^2)^2+2(-4c_0+1+4c_0^2)c_3(3-2c_0)\\ &= -2c_3(9-12c_0+4c_0^2-(-4c_0+1+4c_0^2)(3-2c_0))-(-4c_0+1+4c_0^2)(8-8c_0)\\ &= 4(c_3((-2c_0^2+c_0+1)(2c_0-3))-2(1-c_0)(2c_0-1)^2).\end{aligned} \tag{112}$$

比较 (110) 和 (112)，可得

$$(\zeta_3^{(1)}(y_{opt}))^2 = (\zeta_3^{(2)}(y_{opt}))^2. \tag{113}$$

现在我们将证明同样有 $(\zeta_3^{(1)}(y_{opt}))^2 = -(\zeta_3^{(2)}(y_{opt}))^2$。我们再次考察 (102) 中的条件，并代入 (91) 中 c_0 和 c_3 的值，得到

$$\begin{aligned}& c_3^2 &=& -1-2c_3+4c_0-4c_0^2\\ \iff\quad & (\beta-2)^2 &=& -1-2(\beta-2)+4(1-\eta)-4(1-\eta)^2\\ \iff\quad & (\beta-2)^2+2(\beta-2)+1 &=& 4(1-\eta)-4(1-\eta)^2\\ \iff\quad & (\beta-2+1)^2 &=& 4\eta(1-\eta)\\ \iff\quad & \beta &=& 1-2\sqrt{\eta(1-\eta)}.\end{aligned} \tag{114}$$

由式（107）还可得

$$\zeta_3^{(1)}(y_{opt}) \triangleq 2(\sqrt{c_3})^3\sqrt{c_0-1} = 2(\sqrt{\beta-2})^3\sqrt{-\eta} = 2(2-\beta)\sqrt{\eta(2-\beta)} \geq 0. \tag{115}$$

同理，我们有

$$\begin{aligned}\zeta_3^{(2)}(y_{opt}) &\triangleq c_3(3-2c_0)+(-4c_0+1+4c_0^2)\\ &= (\beta-2)(1+2\eta)+(1-2\eta)^2\\ &= (-1-2\sqrt{\eta(1-\eta)})(1+2\eta)+(1-2\eta)^2\\ &= -2\sqrt{\eta(1-\eta)}(1+2\eta)-6\eta+4\eta^2\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\leq -2\sqrt{\eta(1-\eta)}(1+2\eta)-6\eta+4\eta \\ &= -2\sqrt{\eta(1-\eta)}(1+2\eta)-2\eta \\ &\leq 0. \end{aligned} \tag{116}$$

结合式（106）、（107）、（113）、（115）和（116），最终得到

$$\begin{aligned} & & (\zeta_3^{(1)}(y_{opt}))^2 &\overset{(113)}{=} (\zeta_3^{(2)}(y_{opt}))^2 \\ &\overset{(115),(116)}{\Longleftrightarrow} & \zeta_3^{(1)}(y_{opt}) &= -\zeta_3^{(2)}(y_{opt}) \\ &\Longleftrightarrow & \zeta_3^{(1)}(y_{opt})+\zeta_3^{(2)}(y_{opt}) &= 0 \\ &\overset{(106)}{\Longleftrightarrow} & \zeta_3(y_{opt}) &= 0. \end{aligned} \tag{117}$$

此外，将 (102)、(114) 和 (117) 结合起来可得

$$\beta = 1-2\sqrt{\eta(1-\eta)} \iff c_3^2 = -1-2c_3+4c_0-4c_0^2 \iff \zeta_3(y_{opt})=0. \tag{118}$$

将 (97) 和 (118) 结合起来，还可得到

$$\beta = 1-2\sqrt{\eta(1-\eta)} \iff c_3^2 = -1-2c_3+4c_0-4c_0^2 \iff \zeta_3(y_{opt})=0 \iff \zeta(y_{opt})=0. \tag{119}$$

由 (88) 可得，对于 y_{opt}

$$\zeta_1(y_{opt})=\zeta_2(y_{opt})=0, \tag{120}$$

这意味着，$y=y_{opt}$ 确实是 y 的一个取值，它能确保用于确定 $G_{\mathcal{Q}_1}(z)$ 的函数方程成立。此外，由于导数条件也满足，即 $\zeta(y_{opt})=0$，因此 y_{opt} 不仅是 $\zeta(y)$ 穿过零点的位置，实际上还是它与零点相切的位置。这正是确定谱边缘所需要的。由于我们在定义 $G_{\tilde{D}}(z)$ 时使用了“–”符号，这意味着（根据 [10] 中的考量），我们确定了 D（或 D 和 D 中任意一个）的相应谱中的下~~边缘；经过求逆后，这意味着我们确定了 $\mathcal{Q}_1$ 或 $\mathcal{Q}$ 谱中的上边缘。

甚至可以明确确定 y_{opt}。由（90）、（95）、（99）和（105）可得

$$y_{opt} = \frac{-c_2+\sqrt{r}}{3c_3} = \frac{-(5-2\beta-2\eta)+\sqrt{\eta(2-\beta)}}{3(\beta-2)}. \tag{121}$$

图3展示了 y_{opt} 随 η 变化的情况。随着 β 减小，“触及零点”的整个过程在图中针对 $\eta=0.9$ 展示。正如图中所示，对于 $\beta > 1-2\sqrt{\eta}\,(1-\eta)$，$=0.4\,\zeta_1(y)$ 始终低于零，因此不可能属于谱。另一方面，对于 $\beta \leq 1-2\sqrt{\eta}\,(1-\eta)$，$=0.4\,\zeta_1(y)$ 确实与零线相交，这意味着它现在位于谱中（存在 $y=y$(11)，因此存在一个实数 $G_{\mathcal{Q}_1}$(1)，使得 $\zeta_1(y)=0$）。临界边界或转折点恰好出现在 $\zeta_1(y)$ 曲线触及零线之时。正如图中所示，这发生在 $y=y_{opt}=0.25$，与理论预测完全一致。

我们将上述结果总结为以下引理。

引理 3. 假设满足引理 1 和引理 2 中的设置，且 $\mathcal{Q}_1$ 如式 (39) 所示。那么，对于 $\mathcal{Q}_1$ 的谱上边缘，我们有

$$\beta = 1-2\sqrt{\eta(1-\eta)} \iff \lambda_{max}(\mathcal{Q}_1)=1. \tag{122}$$

此外，

$$\beta \leq 1-2\sqrt{\eta(1-\eta)} \iff \lambda_{max}(\mathcal{Q}_1)\leq 1. \tag{123}$$

证明。由上述讨论可得。 □

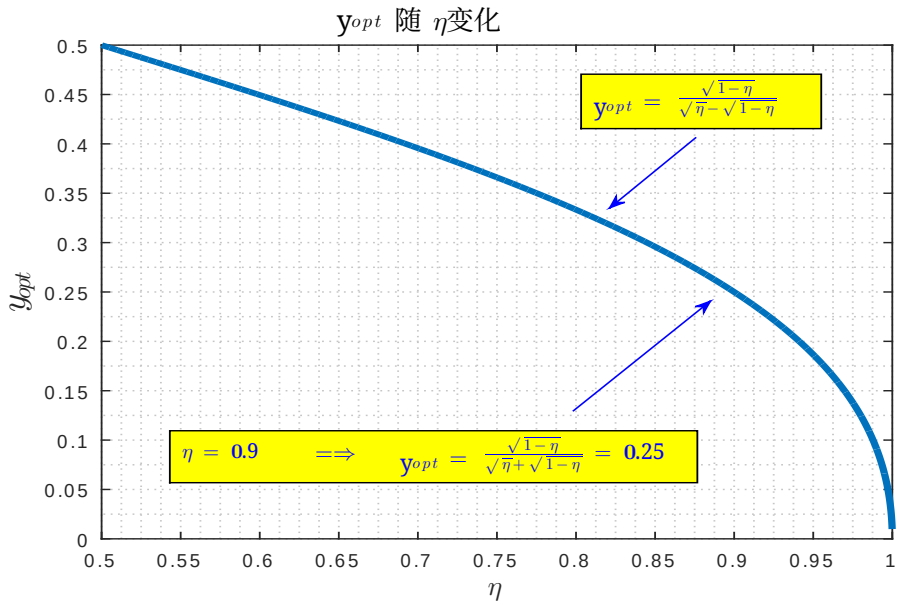

图3： y_{opt} 随 η变化

4.2.3 $\mathcal{Q}_1$ 、 $\lambda_V^T\lambda_V\lambda_U^T\lambda_U$ 的谱——实际评估

既然我们已经完整刻画了 $\mathcal{Q}_1$ 的谱的上边缘，现在可以回到对整个谱的考察。借助上述方法，我们可以证明以下引理。

引理4. 假设满足引理 1 和引理 2 的设定，其中 $\mathcal{Q}_1$ 如式 (39) 所示。令 $G_{\mathcal{Q}_1}(z)$为以下方程组的解:

$$\begin{aligned} y(z) &= \frac{\sqrt{zG_{\mathcal{Q}_1}(z)-1}}{\sqrt{zG_{\mathcal{Q}_1}(z)-1}+z\sqrt{G_{\mathcal{Q}_1}(z)}} \\ G_{\tilde{D}}(y(z)) &= \frac{y(z)-(\beta+\eta)\pm\sqrt{(y(z)-(\beta+\eta))^2+4\beta\eta(y(z)-1)}}{2((y(z))^2-y(z))} \\ \frac{1}{\beta}\left(G_{\tilde{D}}(y(z))-\frac{\eta}{y(z)}-\frac{1-(\beta+\eta)}{y(z)-1}\right) &= -(\sqrt{zG_{\mathcal{Q}_1}(z)-1}+\sqrt{G_{\mathcal{Q}_1}(z)})(\sqrt{zG_{\mathcal{Q}_1}(z)-1}+z\sqrt{G_{\mathcal{Q}_1}(z)}). \end{aligned} \tag{124}$$

则 $\mathcal{Q}_1$、 $f_{\mathcal{Q}_1}(x)$的谱函数为

$$f_{\mathcal{Q}_1}(x) = -\lim_{\epsilon\to 0^+}\frac{\mathrm{imag}(G_{\mathcal{Q}_1}(x+i\epsilon))}{\pi}. \tag{125}$$

证明。由引理2可知，结合引理1（其中明确给出了 $G_{\tilde{D}}(\cdot)$）的结果以及式(73)–(75)即可得到。随后，以下两组恒等式足以证明该引理

$$\begin{aligned} y(z) &= \frac{z_1(z)+1}{z_1(z)S_D(z_1(z))} \\ &= \frac{((-zG_{\mathcal{Q}_1}(z)-\sqrt{G_{\mathcal{Q}_1}(z)}\sqrt{zG_{\mathcal{Q}_1}(z)-1})+1)\sqrt{G_{\mathcal{Q}_1}(z)}}{(-zG_{\mathcal{Q}_1}(z)-\sqrt{G_{\mathcal{Q}_1}(z)}\sqrt{zG_{\mathcal{Q}_1}(z)-1})(\sqrt{zG_{\mathcal{Q}_1}(z)-1}+\sqrt{G_{\mathcal{Q}_1}(z)})} \\ &= \frac{\sqrt{zG_{\mathcal{Q}_1}(z)-1}}{\sqrt{zG_{\mathcal{Q}_1}(z)-1}+z\sqrt{G_{\mathcal{Q}_1}(z)}}, \end{aligned} \tag{126}$$

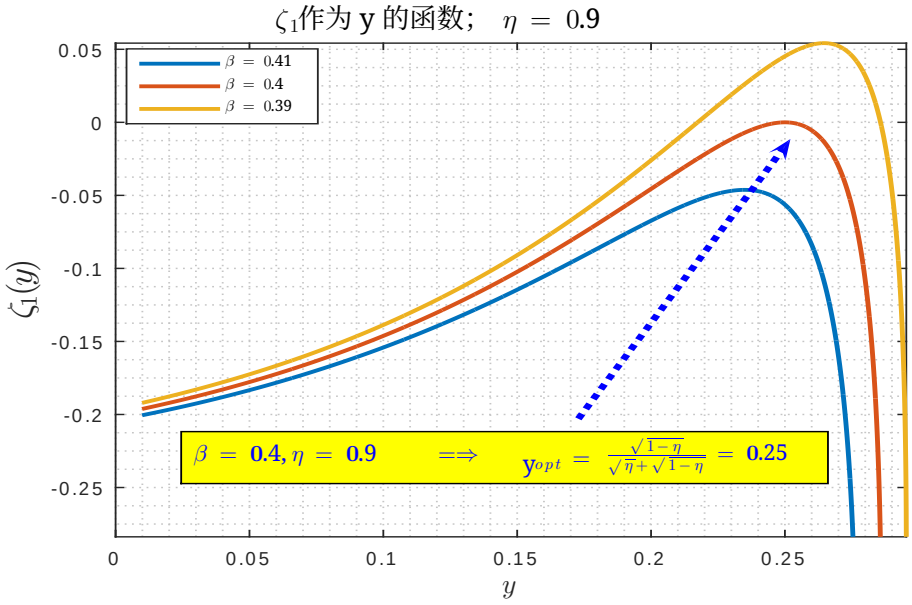

图4： $\zeta_1 y$ 作为 y的函数

and

$$\begin{aligned}\frac{z_1(z)+1}{y(z)} &= \frac{S_D(z_1(z))}{z_1(z)} \\ &= \frac{(-zG_{\mathcal{Q}_1}(z)-\sqrt{G_{\mathcal{Q}_1}(z)}\sqrt{zG_{\mathcal{Q}_1}(z)-1})(\sqrt{zG_{\mathcal{Q}_1}(z)-1}+\sqrt{G_{\mathcal{Q}_1}(z)})}{\sqrt{G_{\mathcal{Q}_1}(z)}} \\ &= (\sqrt{zG_{\mathcal{Q}_1}(z)-1}+z\sqrt{G_{\mathcal{Q}_1}(z)})(\sqrt{zG_{\mathcal{Q}_1}(z)-1}+\sqrt{G_{\mathcal{Q}_1}(z)}). \qquad (127)\end{aligned}$$

□

图5展示了 $f_{\mathcal{Q}_1}(x)$的完整谱。我们选择了 $\beta = 0.4$ 和 $\eta = 0.9$，并使用 $n = 4000$进行了实验。从图中可以看出，得到的数值结果与理论预测高度一致。

4.2.4 $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价性：通过谱极限——非对称情形

由推论2、(17)和(38)可得，在非对称情形下

$$\ell_0^* - \ell_1^* - \text{equivalence} \iff \lambda_{max}(\lambda_V^T \lambda_V \lambda_U^T \lambda_U) \le 1 \iff \lambda_{max}(\mathcal{Q}_1) \le 1. \qquad (128)$$

由(123)和(128)最终可得

$$\ell_0^* - \ell_1^* - \text{equivalence} \iff \beta \le 1 - 2\sqrt{\eta - \eta^2}. \qquad (129)$$

类似于定理 2，我们现在可以在典型统计背景下精确确定非对称情形中的相变位置。

定理 3. *(ℓ_1^* – 相变 – C-inf（典型非对称情形））* 假设采用定理 2 中的设定，其中秩为 k 的矩阵 $X_{sol} = X \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 现在具有 Haar 分布的 独立的正交行空间和列空间的基 $\bar{U}^\perp \in \mathbb{R}^{n\times(n-k)}$ 以及 $\bar{V}^\perp \in \mathbb{R}^{n\times(n-k)}$（$X_{sol}^T \bar{U}^\perp = X_{sol}\bar{V}^\perp = \mathbf{0}_{n\times(n-k)}$）。令 M， $M^{(l)} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 如（5）中所定义。令 β_{ac} 和 η 满足以下条件

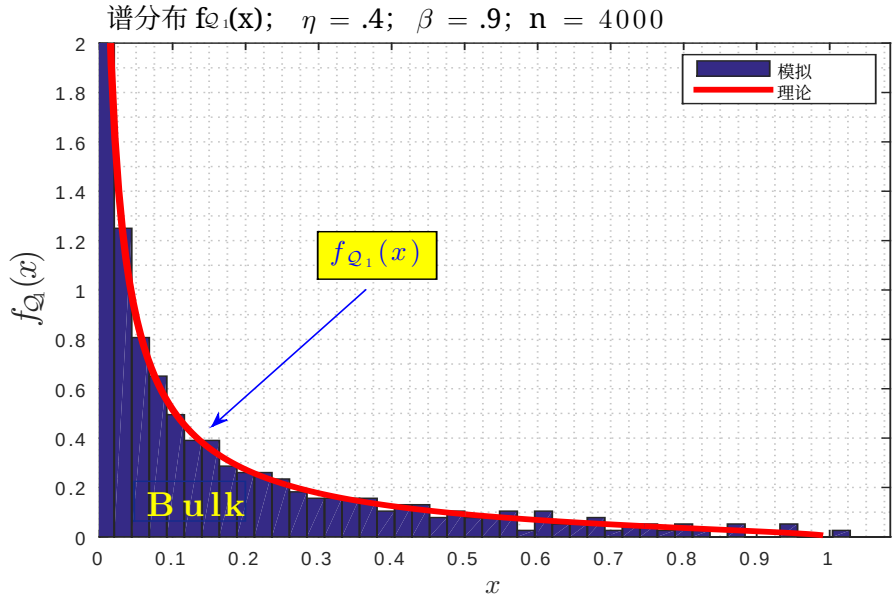

图5： $f_{\mathcal{Q}_1}(x)$ – $\mathcal{Q}_1$的谱函数； $\beta = 0.4$ 和 $\eta = 0.9$

C-inf ℓ_1^* 非对称情形相变（PT）刻画

$$\xi_\eta^{(ac)}(\beta) \triangleq \beta - 1 + 2\sqrt{\eta - \eta^2} = 0. \tag{130}$$

当且仅当 $\beta \le \beta_{ac}$

$$\lim_{n\to\infty} \mathbb{P}(\ell_0^* \Longleftrightarrow \ell_1^*) = \lim_{n\to\infty} \mathbb{P}(\mathbf{RMSE} = 0) = 1, \tag{131}$$

并且，式（6）和式（7）的解以压倒性概率一致。

证明。由引理 3 和上述讨论可得。 □

基于上述定理，使用 ℓ_1^*-最小化启发式方法求解因果推断问题所得的结果如图6所示。与最坏情形一样，相变（PT）曲线将 (β, η) 区域分为两个子区域，在这两个区域中， $\ell_0^* - \ell_1^*$-等价现象分别会发生或不会发生。基本上，在曲线下方可以实现完美恢复，残差均方根误差为 $= \|\text{vec}(\hat{X}) - \text{vec}(X_{sol})\|_2 = 0$。与此相反，在曲线上方，存在一个 X_{sol}，使得 RMSE $\to \infty$ ，且 ℓ_1^* 不成立。

以下推论对上述结果进行了调整，使其适用于压缩感知（CS）、低秩恢复（LRR）和矩阵补全（MC）文献中通常使用的标准 (α, β) 表示。

推论 3. *(ℓ_1^* – 相变 – C-inf（典型非对称情形；标准(α, β) 表示法)* 假设定理 3 的设定。令 m 为矩阵 M 中 1 的总数，并令$\alpha \triangleq \lim_{n\to\infty} \frac{m}{n^2}$。令 β 和 α_w 满足

C-inf ℓ_1^* 非对称情形 相变（标准 （α， β） 表示）

$$\xi_\beta^{(wc,s)}(\alpha) \triangleq \beta - 1 + 2\sqrt{\sqrt{1-\alpha} - 1 + \alpha} = 0. \tag{132}$$

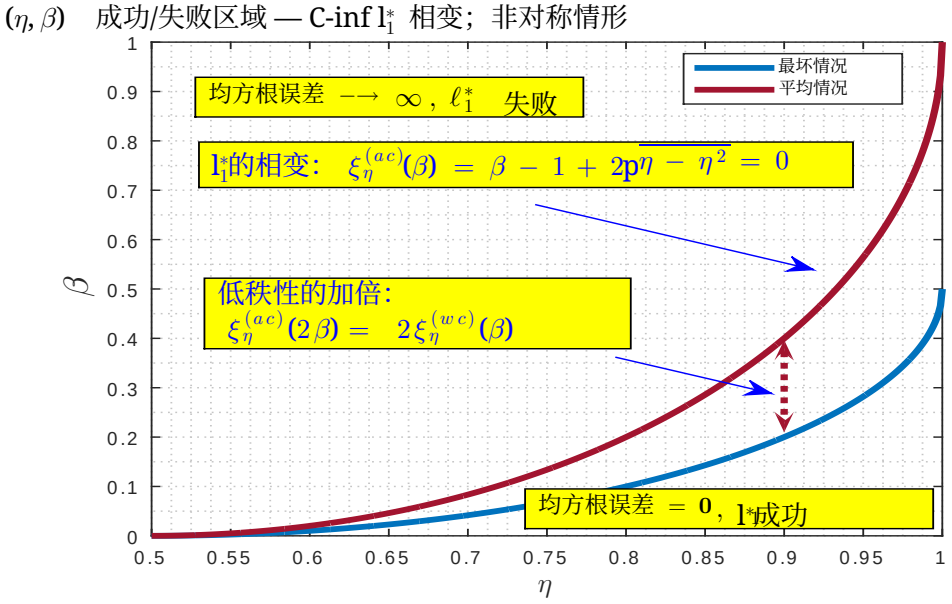

图6：因果推断（C-inf）——典型非对称情形 ℓ_1^* 相变

当且仅当 $\alpha \geq \alpha_w$

$$\lim_{n\to\infty} \mathbb{P}(\ell_0^* \Longleftrightarrow \ell_1^*) = \lim_{n\to\infty} \mathbb{P}(\mathbf{RMSE} = 0) = 1, \tag{133}$$

且式 (6) 和式 (7) 的解以压倒性概率重合。

证明。注意到 $m = n^2 - (n-l)^2$，因此$\alpha = 1 - (1-\eta)^2$，结论可直接由定理 3 得出。

□

图7以标准的 (α, β) 区域格式展示了根据上述推论得到的结果。与相变分析中的惯例相同，整个 (α, β) 区域被曲线分为两部分：曲线下方的部分满足 $\hat{}\text{RMSE} = \|\text{vec}(X) - \text{vec}(X_{sol})\|_2 = 0$，而曲线上方的部分则连 RMSE $\to \infty$ 都无法达到。

我们应当指出，上述推论和图7中的观察结果，与一般低秩表示中的已知结论存在一个有趣的相似之处。具体而言，正如推论 3 所述（图7也强调了这一点），对于相同的 α，非对称情形下可达到的 β 恰好是最坏情况的两倍。由于最坏情况基本上是对称的，因此对称情形和非对称情形的相变相差两倍。在比较对称矩阵与一般（非对称）矩阵的低秩表示时，也观察到了类似现象。不过，我们也应牢记其中一个根本区别：在低秩表示中，底层对称性是先验已知的，可用于算法设计；而在这里，它只是对最坏情况问题实例的选择，并不假定算法本身知道这一点。当然，鉴于低秩表示的性质，这种选择并不一定十分令人意外。

4.3 数值结果

为补充上述理论发现，并考察它们在刻画因果推断问题中ℓ_1^*-最小化的应用效果方面究竟有多成功，我们进行了一系列数值实验，并在图8中展示了所得结果。与 [10], 中一样，我们再次观察到了相变的存在性，且其理论预测与模拟结果高度吻合。

在所进行的数值实验中，我们选择了 $n = 80$ 和 η，取值范围为 $[0.6, 0.95]$。显然，如此小的矩阵规模对应的设置与我们在理论分析中采用的设置截然相反。尽管如此，即使理论以大 n 假设为前提，其结论仍有可能对较小的 n 值同样成立。图8中的结果证实了这一点

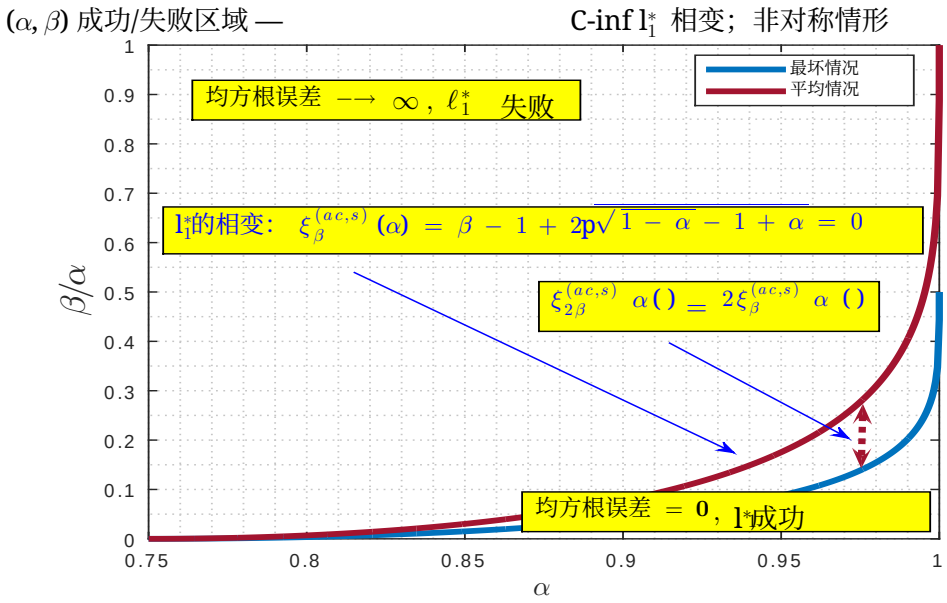

图7：因果推断（C-inf）– 典型非对称情形 ℓ_1^* 相变（（α， β）区域）

确实如此。此外，可以说，理论考量所需的大 n 区间，实际上可能在 n取值相当小（约为几十！）时就已开始显现。这意味着，所呈现的结果虽然在性质上属于理论研究，但本身也具有很强的实用性。最后还应指出，当 n 取值更大时，理论结果与模拟结果预计会更加吻合。

关于模拟设置，还有几点补充说明可能会有所帮助。首先需要强调的是，为了与理论考量保持一致，我们在所有数值实验中都考察了所谓的典型行为。遵循理论考量的思路，所呈现的模拟结果均针对方阵得出。正如在 [10],中所述，所有理论考量同样可以在非方阵情形下加以验证。不过，我们（与 [10]中一样）优先考虑表述的清晰性，而非简单推广，因此选择了更易于阐述的方阵情形。此外，图8所需的所有模拟均假设未知目标矩阵的奇异值为1。关于这一选择的更完整讨论，参见 [10] ；此处我们简要指出，这类选择已知可作为建立反转 $\ell_0 - \ell_1$等价条件时的最坏情况示例。与 [10],中一样，我们也进行了奇异值随机选取的模拟，所得结果与图8所示结果完全一致或更优。

5 结论

本文基于数学上的因果推断（C-inf） $\leftrightarrow$ 低秩恢复（LRR）联系 [10] ，以处理非对称相变现象。研究结果 [10] 证明，核范数（ℓ_1^*）最小化启发式方法用于求解低秩恢复因果推断问题时，会呈现所谓的相变现象。此外，在典型的统计情形下， [10]确定了最坏情形相变的精确位置。这意味着，某些问题实例中的ℓ_1^* 预期行为可能还有改进空间。本文证明，事实确实如此。考虑一种非对称情形（与[10]中的对称最坏情形相对照），我们确定了其背后的精确相变位置。此外，我们还发现了低秩性的加倍现象，这意味着，在整个允许的系统参数范围内，相比 [10]中的最坏情形，可以恢复秩恰好大一倍的矩阵。这种现象还确保了[10] 中的最坏情形相变所具有的简洁性在非对称情形下同样得以保留

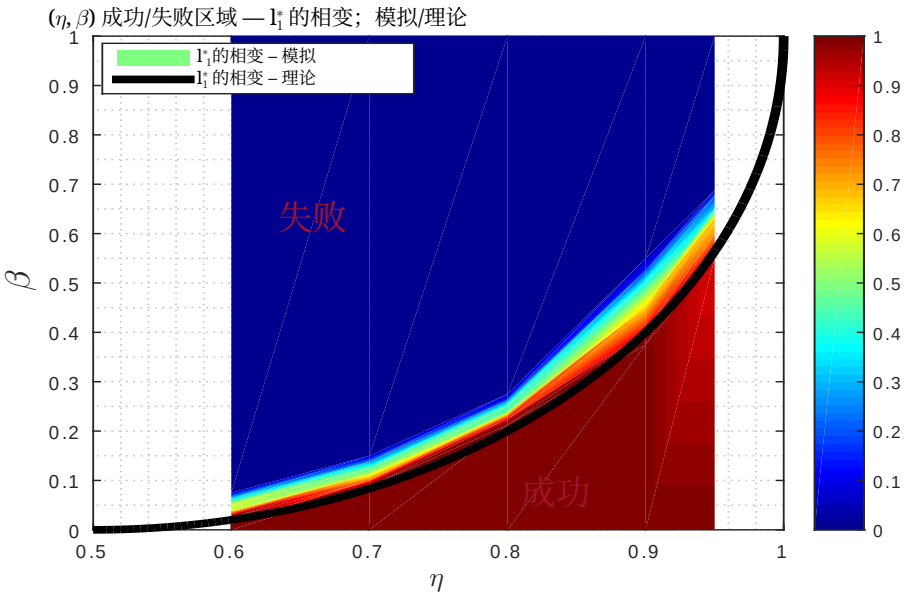

图8：C-inf ℓ_1^* 的非对称情形相变（PT）

。因此，我们再次能够优雅地确定目标 C-inf 矩阵的低秩性与处理施加时间之间的关系。

在建立理论相变刻画的整个过程中，我们还得出了一些具有独立研究价值的数学结果。我们还用相应数值实验得到的结果补充了所有理论发现。此外，在所有情况下，我们都观察到理论预测与模拟结果之间高度一致。

为获得所需的相变结果，我们结合了随机对偶理论（**RDT**）和自由概率论（**FPT**）中的思想。因此，我们得到了一个功能强大且通用的数学工具体系，可作为进一步探索的理论平台。由于本文及配套论文 [10] 属于入门性质，我们没有进一步展示如何运用所建立的理论来处理更复杂的问题实例（其中包括实践中非常重要的含噪和近似低秩问题实例）。我们的配套论文将依托此处及 [10] 中提出的数学框架，沿这些方向建立相关结果。

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控制计划的效果。《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。可在线查阅，见 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。错位实施情境下双重差分的基于设计的分析。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。《RAND经济学杂志》，33:399–432，2002年。[7] 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。[8] 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。[9] E. J. Cand`es 和 Y. Plan。含噪矩阵补全。《IEEE学报》，98:925–936，2010年。[10] A. Capponi 和 M. Stojnic。因果推断（C-inf）——闭式最坏情况典型相变。可在线查阅，见 arXiv。[11] 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。[12] 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》，Fields研究所通讯，12:127–148，1997年。[13] 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。[14] G. W. Imbens 和 D. B. Rubin。《统计学、社会科学与生物医学科学中的因果推断》。纽约：剑桥大学出版社，2015年。[15] N. Kallus、X. Mao 和 M. Udell。通过矩阵分解，利用含噪和缺失协变量进行因果推断。第32届国际神经信息处理会议论文集，第6921—6932页，2018年12月。可在线查阅。[16] R. H. Keshavan、A. Montanari 和 S. Oh。利用少量条目进行矩阵补全。《IEEE信息论汇刊》，56:2980–2998，2010年。[17] R. H. Keshavan、A. Montanari 和 S. Oh。利用含噪条目进行矩阵补全。《机器学习研究杂志》，11:2057–2078，2010年。[18] O. Klopp。一般采样分布下的含噪低秩矩阵补全。《伯努利》，20:282–303，2014年。[19] 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。《统计学年刊》，39:2302–2329，2011年。[20] 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。[21] S. N. Negahban 和 M. J. Wainwright。含噪及高维尺度下（近似）低秩矩阵的估计。《统计学年刊》，39:1069–1097，2011年。[22] S. N. Negahban 和 M. J. Wainwright。受限强凸性与加权矩阵补全：含噪情况下的最优界。《机器学习研究杂志》，13:1685–1697，2012年。[23] A. Nica 和 R. Speicher。伦敦数学学会讲义系列，第335卷。剑桥大学出版社，2006年。[24] S. Oymak 和 B. Hassibi。关于矩阵秩最小化的新零空间结果与恢复阈值。2010年11月。可在线查阅：http://arxiv.org/abs/1011.6326。[25] J. Pearl。统计学中的因果推断：概述。《统计学综述》，3:96–146，2009年。[26] 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。

[27] J. Pearl 和 E. Bareinboim。《研究结果的可推广性》札记。《流行病学杂志》，30:186–188，2019年。[28] J. Pearl 和 D. Mackenzie。《为什么之书》。Basic Books，纽约，2018年。[29] B. Recht。矩阵补全的一种更简单的方法。《机器学习研究杂志》，12:3413– 3430，2011年。[30] B. Recht、M. Fazel 和 P. A. Parrilo。通过核范数最小化保证获得线性矩阵方程的最小秩解。2007年。在线查阅：http://www.dsp.ece.rice.edu/cs/。[31] A. Rohde 和 A. B. Tsybakov。高维低秩矩阵的估计。《统计学年刊》，39:887–930，2011年。[32] P. R. Rosenbaum 和 D. B. Rubin。倾向评分在因果效应观察性研究中的核心作用。《生物统计学》，70，1983年。[33] D. B. Rubin。《因果效应的匹配抽样》。剑桥：剑桥大学出版社，2006年。[34] A. Shaikh 和 P. Toulis。分阶段采用处理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。[35] 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。[36] 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。[37] M. Stojnic。LASSO 算法性能刻画框架。在线查阅：http://arxiv.org/abs/1303.7291。[38] M. Stojnic。正则随机对偶性。在线查阅：http://arxiv.org/abs/1303.7295。[39] M. Stojnic。 ℓ_1优化弱阈值的上界。在线查阅：http://arxiv.org/abs/1303.7289。[40] M. Stojnic。压缩感知中 ℓ_1优化的各种阈值。在线查阅：http://arxiv.org/abs/0907.3666。[41] M. Stojnic。压缩感知中 ℓ_1优化的简单性能分析。ICASSP，国际声学、信号与语音处理会议，第3021–3024页，2009年4月15日至19日。台北，台湾。[42] M. Stojnic。 ℓ_1 优化及其在压缩感知中的各种阈值。ICASSP，IEEE 国际声学、信号与语音处理会议，第3910–3913页，2010年3月14日至19日。达拉斯，得克萨斯州。[43] 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，第1593–1597页，2010年6月13日至18日。奥斯汀，得克萨斯州。[44] M. Stojnic。改进压缩感知中 ℓ_1 优化的探索。ICASSP，IEEE 国际声学、信号与语音处理会议，第3938–3941页，2010年3月14日至19日。达拉斯，得克萨斯州。[45] A. M. Tulino 和 S. Verd´u。《随机矩阵理论与无线通信》。《通信与信息论前沿与趋势》：第1卷。Now Publishers，汉诺威，2004年。[46] D. Voiculescu。某些非交换随机变量的加法。《函数分析杂志》，66(3):323–346，1986年。

[47] 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。[48] 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。[49] R. Xiong 和 M. Pelger。含缺失观测的大维度潜在因子建模及其在因果推断中的应用。2018年。电子版可查阅：https://ssrn.com/abstract=3465357。[50] 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。在介绍证明之前，我们需要几个技术引理。

引理 5. 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，设主对角线上的前 k 个元素，$C_{i,\ i}, 1 \le i \le k$，都大于或等于 1。那么， C, $C_{1:k,\ 1:k}$的左上角 $k \times k$ 块是一个单位矩阵，即

$$C_{1:k,1:k} \quad = \quad I_{k\times k}. \tag{134}$$

证明. 设 $\lambda_{max}(C)$ 为 C的最大特征值。那么

$$\lambda_{max}(C) \quad \triangleq \quad \max_{\|\mathbf{c}\|_2=1} \mathbf{c}^T C\mathbf{c}. \tag{135}$$

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

$$1 \le C_{i,i} \le \max_{\|\mathbf{c}\|_2=1} \mathbf{c}^T C\mathbf{c} \triangleq \lambda_{max}(C) \le 1, \tag{136}$$

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通过归纳法进行。

1）从 $l = 1$ 到 $l = 2$的归纳法步骤：首先考察大小为 2×2的上方块，即考察$C_{1:2,1:2}$。于是有

$$\begin{aligned} 1 \ge \max_{\|\mathbf{c}\|_2=1} \mathbf{c}^T C\mathbf{c} \ge \max_{\|\mathbf{c}_{1:2}\|_2=1} \mathbf{c}_{1:2}^T C_{1:2,1:2}\mathbf{c}_{1:2} \quad &\ge \quad \max_{\|\mathbf{c}_{1:2}\|_2=1} \left(\|\mathbf{c}_{1:2}\|_2 + 2|\mathbf{c}_1\mathbf{c}_2 C_{1,2}|\right) \\ &\ge \quad \max_{\|\mathbf{c}_{1:2}\|_2=1} \left(1 + 2|\mathbf{c}_1\mathbf{c}_2 C_{1,2}|\right) \ge 1, \end{aligned} \tag{137}$$

这意味着$C_{1,2} = 0$。

2）从 l 到 $l + 1$的归纳法步骤：现在考察大小为（$l + 1$） $\times$ （$l + 1$）的上方块，即考察$C_{1:l+1,1:l+1}$，并假设$C_{1:l,\ 1:l} = I_{l\times l}$。于是有

$$\begin{aligned} 1 \quad &\ge \quad \max_{\|\mathbf{c}\|_2=1} \mathbf{c}^T C\mathbf{c} \\ &\ge \quad \max_{\|\mathbf{c}_{1:l+1}\|_2=1} \mathbf{c}_{1:l+1}^T C_{1:l+1,1:l+1}\mathbf{c}_{1:l+1} \\ &\ge \quad \max_{\|\mathbf{c}_{1:l+1}\|_2=1} \left(\|\mathbf{c}_{1:l+1}\|_2 + 2|\mathbf{c}_{1:l}^T C_{1:l,l+1}\mathbf{c}_{l+1}|\right) \\ &\ge \quad \max_{\|\mathbf{c}_{1:l+1}\|_2=1} \left(1 + 2|\mathbf{c}_{1:l}^T C_{1:l,l+1}\mathbf{c}_{l+1}|\right) \\ &\ge \quad 1, \end{aligned} \tag{138}$$

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

引理 6。假设满足引理 5 的设定。那么， C, $C_{1:k,\ 1:k}$的左上 $k \times k$ 块是单位矩阵，而 C, $C_{1:k,\ n-k+1:n}$ 的右上 $k \times (n-k)$ 块是零矩阵，即

$$\begin{aligned} C_{1:k,1:k} &= I_{k\times k} \\ C_{1:k,n-k+1:n} &= \mathbf{0}_{k\times(n-k)}. \end{aligned} \tag{139}$$

证明。第一部分由引理 5 得出。现在我们关注第二部分。考虑矩阵 C的如下划分

$$C = \begin{bmatrix} C_{1:k,1:k} & C_{1:k,n-k+1:n} \\ C_{n-k+1:n,1:k} & C_{n-k+1:n,n-k+1:n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_{k\times k} & C_{1:k,n-k+1:n} \\ C_{n-k+1:n,1:k} & C_{n-k+1:n,n-k+1:n} \end{bmatrix}. \tag{140}$$

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

$$\begin{aligned} 1 &\geq \max_{\|\mathbf{c}\|_2=1} \mathbf{c}^T C \mathbf{c} \\ &\geq \max_{\|\mathbf{c}_{1:k}\|_2=a, \mathbf{c}_{n-k+1:n}} \left(\mathbf{c}_{1:k}^T C_{1:k,1:k} \mathbf{c}_{1:k} + 2|\mathbf{c}_{1:k}^T C_{1:k,n-k+1:n} \mathbf{c}_{n-k+1:n}| + \mathbf{c}_{n-k+1:n}^T C_{n-k+1:n,n-k+1:n} \mathbf{c}_{n-k+1:n} \right) \\ &\geq \max_{\|\mathbf{c}_{1:k}\|_2=a, \mathbf{c}_{n-k+1:n}} \left(a^2 + 2|\mathbf{c}_{1:k}^T C_{1:k,n-k+1:n} \mathbf{c}_{n-k+1:n}| + \mathbf{c}_{n-k+1:n}^T C_{n-k+1:n,n-k+1:n} \mathbf{c}_{n-k+1:n} \right) \\ &\geq \max_{\|\mathbf{c}_{1:k}\|_2=a, \mathbf{c}_{n-k+1:n}} \left(a^2 + 2|\mathbf{c}_{1:k}^T C_{1:k,n-k+1:n} \mathbf{c}_{n-k+1:n}| - \mathbf{c}_{n-k+1:n}^T \mathbf{c}_{n-k+1:n} \right) \\ &\geq \max_{a\in[0,1]} \left(a^2 + 2ba\sqrt{1-a^2} - (1-a^2) \right) \\ &= \max_{a\in[0,1]} \left(2a^2 - 1 + 2ba\sqrt{1-a^2} \right), \end{aligned} \tag{141}$$

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，该值大于或等于 -1。现在，我们进一步有

$$c \triangleq 2a\sqrt{1-a^2} \quad \text{and} \quad 2a^2 - 1 + 2ba\sqrt{1-a^2} = \sqrt{1-c^2} + bc, \tag{142}$$

and

$$\frac{d(\sqrt{1-c^2} + bc)}{dc} = \frac{-c}{\sqrt{1-c^2}} + b = 0. \tag{143}$$

由 (143) 可轻易得到

$$c = \frac{b}{\sqrt{1+b^2}}. \tag{144}$$

(141)、(142) 和 (144) 结合可得

$$1 \geq \max_{\|\mathbf{c}\|_2=1} \mathbf{c}^T C \mathbf{c} \geq \max_{a\in[0,1]} \left(2a^2 - 1 + 2ba\sqrt{1-a^2} \right) = \sqrt{1+b^2}, \tag{145}$$

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

现在我们可以考虑上述定理，它将一般的 ℓ_1 等价条件结果从 [39–41] 推广到相应的 ℓ_1 奇异值/特征值范数的结果（类似的推广也可见于 [24]）。

定理 4. *($\ell_0^* - \ell_1^*$-等价条件（低秩表示）– 对称 X）考虑一个 $\bar{U} \in \mathbb{R}^{n\times k}$ 使得$\bar{U}^T\bar{U} = I_{k\times k}$ 以及一个秩为 $-k$ 先验已知为对称矩阵 $X_{sol} = X \in \mathbb{R}^{n\times n}$，其所有列都属于 U的张成空间。具体而言，且不失一般性，假设 X 仅有*

正的非零特征值 $\mathbf{n}$ 个值。对于给定的矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m\times n^2}$ $(m \le n^2)$，假设 $\mathbf{y} = A\text{vec}(X) \in \mathbb{R}^m$。如果

$$(\forall W \in \mathbb{R}^{n\times n} | Avec(W) = \mathbf{0}_{m\times 1}, W = W^T \neq \mathbf{0}_{n\times n}) \quad -\operatorname{tr}(\bar{U}^T W \bar{U}) < \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T W \bar{U}^\perp), \tag{146}$$

那么，(6) 和 (7) 的解相同。此外，如果

$$(\exists W \in \mathbb{R}^{n\times n} | Avec(W) = \mathbf{0}_{m\times 1}, W = W^T \neq \mathbf{0}_{n\times n}) \quad -\operatorname{tr}(\bar{U}^T W \bar{U}) \ge \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T W \bar{U}^\perp), \tag{147}$$

¯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 (6) 和 (7) 的解不同。

证明。 证明完全逐步遵循 [39–41] 中相应定理的证明，并将其推广到矩阵或其奇异值/特征值。对于该领域的专家而言，这种推广很可能会被视为显而易见，因此当然无需像我们接下来这样详细阐述。不过，为了确保所有论证都清晰无误，我们仍将逐步给出推导过程。具体而言，且不失一般性，我们还假设 X 的特征分解为

$$X = U\Lambda U^T = \begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix} \begin{bmatrix}\bar{\Lambda}_X & \mathbf{0}_{k\times(n-k)} \\ \mathbf{0}_{(n-k)\times k} & \bar{\Lambda}_X^\perp\end{bmatrix} \begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}^T. \tag{148}$$

(i) $\Longrightarrow$ (充分性部分): 逐步遵循 [41], 中定理 2 的证明，我们首先假设 ˆ ˆX 是 (7) 的解。接下来要证明，若 (146) 成立，则 $X = X$。像往常一样，我们不直接这样做，而是假设相反的情况，即假设 (146) 成立，但 $X \neq X$。那么，由于 $\mathbf{y} = A\text{vec}(X)$ 和 $\mathbf{y} = A\text{vec}(X)$ 必须同时成立，因此必然存在 W 使得 $X = X + W$且 $W \neq 0$， $A\text{vec}(W) = 0$。此外，由于 ˆ X 是 (7) 的解，还必须有

$$\begin{array}{rrcl} & \ell_1^*(X+W) = \ell_1^*(\hat{X}) & \le & \ell_1^*(X) \\ \Longleftrightarrow & \ell_1^*(\begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}^T (X+W) \begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}) & \le & \ell_1^*(X) \\ \Longrightarrow & \ell_1^*(\bar{U}^T(X+W)\bar{U}) + \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T(X+W)\bar{U}^\perp) & \le & \ell_1^*(X). \end{array} \tag{149}$$

最后一个推论显然可由以下观察得出

$$\begin{aligned} \ell_1^*(\begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}^T (X+W) \begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}) &= \max_{\Lambda_* = \Lambda_*^T \in \mathcal{L}_*} \operatorname{tr}(\Lambda_* \begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}^T (X+W) \begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}) \\ &\ge \max_{\Lambda_* = \Lambda_*^T \in \mathcal{L}_*^0} \operatorname{tr}(\Lambda_* \begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}^T (X+W) \begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}) \\ &= \ell_1^*(\bar{U}^T(X+W)\bar{U}) + \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T(X+W)\bar{U}^\perp), \end{aligned} \tag{150}$$

其中

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_*^0 &\triangleq \left\{\Lambda_* \in \mathbb{R}^{n\times n} | \Lambda_* = \Lambda_*^T, \Lambda_*\Lambda_*^T \le I, \Lambda_* = \begin{bmatrix}\Lambda_{*,1} & 0_{k\times(n-k)} \\ 0_{(n-k)\times k} & \Lambda_{*,2}\end{bmatrix}\right\} \\ &\subseteq \left\{\Lambda_* \in \mathbb{R}^{n\times n} | \Lambda_* = \Lambda_*^T, \Lambda_*\Lambda_*^T \le I\right\} \triangleq \mathcal{L}_*. \end{aligned} \tag{151}$$

关键观察——“去掉绝对值”:

现在， [41] 中提出的关键观察发挥了作用。具体而言，我们注意到，在非零部分可以去掉绝对值，并且 ℓ_1^* (·) 可以用“替换”为 tr (·)。这一简单观察是 RDT 在结构化对象恢复的精确性能表征中取得成功的最根本原因。由 (149) 可得

$$\begin{array}{rrcl} & \ell_1^*(\bar{U}^T(X+W)\bar{U}) + \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T(X+W)\bar{U}^\perp) & \le & \ell_1^*(X) \\ \Longrightarrow & \operatorname{tr}(\bar{U}^T(X+W)\bar{U}) + \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T(W)\bar{U}^\perp) & \le & \ell_1^*(X) \\ \Longleftrightarrow & \operatorname{tr}(\bar{U}^T W \bar{U}) + \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T W \bar{U}^\perp) & \le & 0. \end{array} \tag{152}$$

我们得出了一个矛盾，因为 (152) 中最后一个不等式恰好与 (146) 相反。这ˆ ˆ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所要证明的结论。

(ii) $\Longleftarrow$ （仅当部分）：现在我们假设（147）成立，即

$$(\exists W \in \mathbb{R}^{n\times n} | A\text{vec}(W) = \mathbf{0}_{m\times 1}, W \neq \mathbf{0}_{n\times n}) \quad -\text{tr}\left((\bar{U})^T W \bar{U}\right) \geq \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T W \bar{U}^\perp) \tag{153}$$

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，且满足 $\mathbf{y} = A\text{vec}(X)$，并且以下条件成立

$$\ell_1^*(X + W) < \ell_1^*(X). \tag{154}$$

存在这样的 X 即可确保它既满足（7）中的所有约束，又不是（7）的解。遵循 [39] 的策略，可以将上述从（153）到（149）的所有步骤反向进行，并使用严格不等式，从而得到（149）中的第一个不等式，而这恰好就是（154）。在这一反向过程中，有两个蕴含关系会造成问题，分别是（153）中的蕴含关系和（149）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。我们将分别讨论这两个蕴含关系。

1）(152) 中的蕴含关系——特定的 X 用来“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，其主对角线上的元素可以任意大（这里甚至只需选择 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）。现在很容易看出 [39, 41] 中“去掉绝对值”这一概念背后的主要思想。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，$\ell_1^*(\cdot)$（即其特征值绝对值之和）与 $\text{tr}(\cdot)$（即其特征值之和）相等。这基本上意味着，在反向推导时，(152) 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。换言之，对于 $X = \bar{U}\Lambda_x\bar{U}^T$（其中 $\Lambda_x > 0$ 任意大）

$$\begin{array}{rcl} & \text{tr}\left(\bar{U}^T W \bar{U}\right) + \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T W \bar{U}^\perp) \leq 0 & \\ \Longleftrightarrow & \text{tr}\left(\bar{U}^T (X+W) \bar{U}^)\right) + \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T (W) \bar{U}^\perp) \leq \ell_1^*(X) & \\ \Longleftrightarrow & \ell_1^*(\bar{U}^T (X+W) \bar{U}) + \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T (X+W) \bar{U}^\perp) \leq \ell_1^*(X), & \end{array} \tag{155}$$

¯这基本上意味着存在一个 X 能够“压过” W（在 U张成空间内），并确保“去掉绝对值” 不仅是构造松弛等价条件的 充分 条件，也是 必要 条件。

2）(149) 中的蕴含关系：现在需要设法证明，(149) 中的第三个不等式不仅可以由第二个不等式推出，反过来也成立。归根结底，这意味着要证明不等式 (150) 可以替换为等式；或者，$\mathcal{L}^0$ 与 $\mathcal{L}$ 暂时等价。这两种说法通常都不成立。不过，既然我们有一组 X 可用，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 $\Lambda_x > 0$是一个对角矩阵，其主对角线上的元素可以任意大。于是，(150) 中的最后一个等式给出

$$\begin{array}{rcl} & \ell_1^*(\bar{U}^T (X+W) \bar{U}) + \ell_1^*((\bar{U}^\perp)^T (X+W) \bar{U}^\perp) \leq \ell_1^*(X) & \\ \Longleftrightarrow & \max_{\Lambda_* = \Lambda_*^T \in \mathcal{L}_*^0} \text{tr}\left(\Lambda_* \begin{bmatrix} \bar{U} & \bar{U}^\perp \end{bmatrix}^T (X+W) \begin{bmatrix} \bar{U} & \bar{U}^\perp \end{bmatrix}\right) \leq \ell_1^*(X). & \end{array} \tag{156}$$

此外，还有

$$\begin{array}{rcl} & \max_{\Lambda_* = \Lambda_*^T \in \mathcal{L}_*^0} \text{tr}\left(\Lambda_* \begin{bmatrix} \bar{U} & \bar{U}^\perp \end{bmatrix}^T (X+W) \begin{bmatrix} \bar{U} & \bar{U}^\perp \end{bmatrix}\right) \leq \ell_1^*(X) & \\ \Longleftrightarrow & \max_{\Lambda_{*,i} = \Lambda_{*,i}^T, \Lambda_{*,i}\Lambda_{*,i}^T \leq I, i\in\{1,2\}} \text{tr}\left(\Lambda_{*,1}\bar{U}^T X \bar{U} + \Lambda_{*,2}(\bar{U}^\perp)^T W \bar{U}^\perp\right) \leq \ell_1^*(X) & \\ \Longleftrightarrow & \max_{\Lambda_{*,i} = \Lambda_{*,i}^T, \Lambda_{*,i}\Lambda_{*,i}^T \leq I, i\in\{1,2\}} \text{tr}\left(\Lambda_{*,1}\Lambda_x + \Lambda_{*,2}(\bar{U}^\perp)^T W \bar{U}^\perp\right) \leq \text{tr}(\Lambda_x). & \end{array} \tag{157}$$

现在，如果 $\Lambda_{*,1}$、$\text{diag}(\Lambda_{*,1})$ 的主对角线上至少有一个元素小于 1，那么 Λ_x 对角线上对应的元素就可以变得任意大，相对于其他元素而言

关于 Λ_x，人们会得到

$$\begin{array}{rcl} \max_{\Lambda_{*,i}=\Lambda_{*,i}^T,\Lambda_{*,i}\Lambda_{*,i}^T\leq I,i\in\{1,2\}} \operatorname{tr}\left(\Lambda_{*,1}\Lambda_x+\Lambda_{*,2}(\bar{U}^\perp)^T W\bar{U}^\perp\right) & < & \operatorname{tr}\left(\Lambda_x\right) \\ \iff \quad \max_{\Lambda_*=\Lambda_*^T\in\mathcal{L}_*^0} \operatorname{tr}\left(\Lambda_*\begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}^T(X+W)\begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}\right) & < & \ell_1^*(X) \\ \iff \quad \max_{\Lambda_*=\Lambda_*^T\in\mathcal{L}_*} \operatorname{tr}\left(\Lambda_*\begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}^T(X+W)\begin{bmatrix}\bar{U} & \bar{U}^\perp\end{bmatrix}\right) & < & \ell_1^*(X), \end{array} \tag{158}$$

最后一个等价关系成立，是因为最后两个不等式左边各项之差有界，且该界与 X 无关。此外，(158) 中最后一个不等式与 (150) 中第一个等式以及 (149) 中第一个不等式结合起来，便得到 (154)。因此，唯一可能无法推出 (154) 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 (150) 中是等式而非不等式；再结合 (149)，即可推出 (154)。至此，定理第二部分（“仅当”部分）的证明完成，整个定理也随之得证。

□