arXiv:2603.00927v1 [stat.ME] 1 Mar 2026

贝叶斯包络模型的拉普拉斯变分推断

Seunghyeon Kim[1], Kwangmin Lee[2], 和 Yeonhee Park[3]

[1]全南大学数学与统计系[2]全南大学大数据融合系[3]成均馆大学统计系

2026年3月3日

摘要

包络模型为多元回归分析提供了一个充分降维框架。这些模型的贝叶斯推断主要采用马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）方法。具体而言，吉布斯抽样和 Metropolis–Hastings算法存在混合缓慢、计算成本高的问题。尽管自动微分变分推断（ADVI）已被用于贝叶斯包络模型，但由于后验分布存在严重的病态条件，基于梯度的优化通常会数值不稳定。为解决这一问题，我们提出了一种新的后验分布重新参数化方法，以缓解传统变分方法固有的病态条件。在此重新参数化的基础上，我们开发了一种高效的变分推断过程。由于所得似然仍为非共轭，我们在坐标上升变分推断（CAVI）框架内使用拉普拉斯近似来近似相应的变分因子。我们建立了理论结果，证明在每次单步坐标更新中，拉普拉斯近似相对于精确变分推断坐标更新的误差均趋于零。模拟研究和真实数据分析表明，与现有方法相比，所提出的方法在保持估计精度和模型选择性能的同时，显著提高了计算效率。

关键词：贝叶斯包络模型、变分推断、拉普拉斯近似、渐近正态性

1 引言

Cook 等人 (2010年) 提出了包络模型，将其作为一种降维方法，以提高多元回归中的估计效率。其核心思想是认识到，多元响应中的变异并非都能用于解释预测变量的作用。响应包络模型提取出一个包含所有与预测变量相关的信息的低维子空间，并剔除其余与回归无关的变异。通过去除这些无关信息，

包络方法能够显著提高估计效率，其效果往往相当于增加了许多观测值，同时保留了核心回归信号。

包络方法已扩展到各种情境，包括分位数回归（Ding 等人，2021）、矩阵与张量变元回归（Ding 和 Cook，2018；Li 和 Zhang，2017）以及多元 Probit 回归（Lee 和 Park，2024）。贝叶斯包络框架的最新进展包括 Khare 等人 (2017）、Lee 等人 (2021）、Shen 等人 (2023）、Chakraborty 和 Su(2024a）以及Lee 和 Park (2024）。

贝叶斯包络模型为不确定性量化和模型选择提供了一个原则性框架。然而，现有的贝叶斯实现通常计算效率低下。尤其是，目前可用的方法依赖于马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）算法，这些算法往往混合缓慢且自相关性高，从而严重限制了可扩展性。

Khare 等人 (2017）提出了一种在斯蒂费尔流形上运行的随机扫描吉布斯采样器，但直接在流形上采样的计算成本很高。为提高计算效率，Chakraborty 和 Su (2024a）基于欧几里得参数化（Cook 等人，2016）构建了一个全面的贝叶斯框架，并采用 Metropolis-within-Gibbs 采样器从后验中抽样（详情见第2 节）。然而，在高维情形下，Metropolis–Hastings（MH）和吉布斯更新往往混合不佳且自相关性高，导致计算成本大幅增加。

在这种情形下，变分推断（VI）可被视为一种替代方法，用于减轻现有基于MCMC的方法所带来的计算负担。VI将后验推断重新表述为一个优化问题，从而大幅缩短计算时间（Jordan 等人，1999；Wainwright 等人，2008；Blei 等人，2017）。凭借这些优势，VI日益被广泛应用于各类统计模型，作为MCMC的替代方法，包括逻辑回归模型（Durante 和 Rigon，2019）、层次模型（Goplerud，2022）以及多项 Probit 模型（Loaiza-Maya 和 Nibbering，2023）。

优化变分推断目标函数的两种常见策略是坐标上升变分推断（CAVI）（Bishop，2006）和随机变分推断（SVI）（Hoffman 等人，2013）；综述请参见Blei 等人 （2017）。这些方法在条件共轭模型中尤为直接。所谓条件共轭模型，是指每个全条件分布都与其先验分布属于同一族，从而可以进行闭式坐标更新。然而，贝叶斯包络模型是条件非共轭的——某些全条件分布不具有共轭形式——因此无法进行闭式更新。

尽管自动微分变分推断（ADVI）已被用于贝叶斯包络模型（Chakraborty 和 Su，2013），我们的实证研究表明，在标准欧几里得参数化下，其表现可能高度敏感。具体而言，我们观察到不同重复数据集之间的估计精度存在显著差异，而且在包络维数较高时，该算法偶尔会出现数值不稳定性。这些现象可能源于标准参数化下包络几何结构与变分目标曲率之间的相互作用。这种敏感性促使我们开发一种更稳定、专为这类模型设计的逐坐标近似方法。

为解决这一问题，我们采用坐标上升拉普拉斯变分推断（CALVI）（Wang 和 Blei，2013），该方法通过对原本难以处理的更新步骤进行拉普拉斯近似，保留了坐标上升方案。我们提出了一种新的重新参数化策略，以便应用拉普拉斯近似，因为将 CALVI 应用于Khare 等人（2017）和 Chakraborty 和 Su（2024a）所用的参数化在计算上代价高昂。这种重新参数化有效地将一阶和二阶微分带来的计算瓶颈转移到一组更易处理的参数上，从而显著提高计算效率，使 CALVI 能够切实应用于包络模型。

我们还研究了所提出的 CALVI 方法的理论性质。具体而言，我们考察将非共轭块的精确逐坐标变分更新替换为其拉普拉斯近似所引入的近似误差。尽管 CALVI 在实践中得到了广泛应用，但相较于精确 CAVI 更新，这种基于拉普拉斯近似的坐标更新的准确性尚未得到深入分析。我们在一般情形下确定了使相应近似误差在适当重新缩放后以总变差（TV）距离衡量渐近可忽略的条件。在贝叶斯响应包络模型的局部化和曲率假设下，我们进一步为单步 CALVI 算法提供了理论依据。

本文其余部分安排如下。第 2 节回顾贝叶斯响应包络模型。第 3 节简要回顾变分推断（VI）和 CALVI。第 4节讨论将 CALVI 应用于包络模型时面临的计算挑战，并提出一种重新参数化方法，以便将 CALVI 高效地应用于贝叶斯响应包络模型。第5 节介绍关于 CALVI 方法近似误差的理论结果。第 6节通过模拟和真实数据分析展示数值研究。最后，第 7节总结本文的主要贡献和研究发现。补充材料给出了详细证明，并将结果扩展至贝叶斯预测变量包络模型。

2 贝叶斯响应包络模型综述

本节回顾由Cook 等人（2010年）提出的响应包络模型，并特别强调贝叶斯推断及其计算挑战。我们首先介绍响应包络模型，重点说明它如何提高多元线性回归模型中的估计效率。然后，我们回顾现有的贝叶斯推断方法，指出与从受约束参数空间抽样相关的关键计算瓶颈。本节的讨论为后续各节的方法学发展奠定基础。

考虑具有 r维响应 $\boldsymbol{Y}$ 和p维预测变量 $\boldsymbol{X}$ 的多元线性回归模型，其形式为

$$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\beta}\boldsymbol{X} + \boldsymbol{\epsilon}, \quad \boldsymbol{\epsilon} \sim \mathcal{N}_r(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{\Sigma}), \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^r$、 $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^{r\times p}$和 $\boldsymbol{\Sigma} \in \mathcal{C}_r$ 分别表示截距、系数矩阵和协方差， $\mathcal{C}_d$ 表示 $d \times d$ 对称正定矩阵的集合。

响应包络模型（Cook 等人，2010年）提高了估计 $\boldsymbol{\beta}$ 的效率，其方法是

将注意力限制在响应空间的一个低维子空间上。形式上，令 $\mathcal{S} \subset \mathbb{R}^r$ 为一个子空间，并用 $\mathbb{P}_{\mathcal{S}}$ 表示到 $\mathcal{S}$上的正交投影算子，且 $\mathbb{Q}_{\mathcal{S}} = \boldsymbol{I}_r - \mathbb{P}_{\mathcal{S}}$。我们将$\mathbb{P}_{\mathcal{S}}\boldsymbol{Y}$称为响应的实质部分，它包含与回归相关的全部信息矩阵，并将 $\mathbb{Q}_{\mathcal{S}}\boldsymbol{Y}$ 称为非实质部分，它表示与预测变量无关的变异。响应包络模型假设：

(i) $\mathbb{Q}_{\mathcal{S}}\boldsymbol{Y} \mid \boldsymbol{X} \overset{d}{=} \mathbb{Q}_{\mathcal{S}}\boldsymbol{Y}$：无用部分在给定条件下与 $\boldsymbol{X}$ 条件独立；

(ii) $\operatorname{cov}(\mathbb{Q}_{\mathcal{S}}\boldsymbol{Y},\ \mathbb{P}_{\mathcal{S}}\boldsymbol{Y} \mid \boldsymbol{X}) = 0$：给定 $\boldsymbol{X}$ 后，实质部分与无用部分条件不相关。

在条件 (i)–(ii) 下，令 $u = \dim(\mathcal{S})$，并令 $\boldsymbol{\Gamma} \in \mathbb{R}^{r\times u}$ 和 $\boldsymbol{\Gamma}_0 \in \mathbb{R}^{r\times(r-u)}$ 分别为 $\mathcal{S}$ 和 $\mathcal{S}^{\perp}$ 的标准正交基。则响应包络模型具有如下参数化形式：

$$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\Gamma}\boldsymbol{\eta}\boldsymbol{X} + \boldsymbol{\epsilon}, \qquad \boldsymbol{\epsilon} \sim \mathcal{N}_r(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{\Gamma}\boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{\Gamma}^{\top} + \boldsymbol{\Gamma}_0\boldsymbol{\Omega}_0\boldsymbol{\Gamma}_0^{\top}), \tag{2}$$

其中 $\boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^{u\times p}$ 满足 $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\Gamma}\boldsymbol{\eta}$，且 $\boldsymbol{\Omega} \in \mathcal{C}_u$，$\boldsymbol{\Omega}_0 \in \mathcal{C}_{r-u}$。在此表示中，只有实质部分 $\boldsymbol{\Gamma}^{\top}\boldsymbol{Y}$ 包含关于 $\boldsymbol{\beta}$的信息，因此相较于（1），可提升效率；而 $\boldsymbol{\Gamma}_0^{\top}\boldsymbol{Y}$则带来无用变异。

响应包络模型（2）的贝叶斯推断颇具挑战，因为作为主要推断目标的包络子空间 $\mathcal{S} = \operatorname{span}$（$\boldsymbol{\Gamma}$）位于 $r\times u$ 格拉斯曼流形上。尽管该模型通过斯蒂费尔流形上的正交归一基矩阵 $\boldsymbol{\Gamma}$ 进行参数化，但由于基在正交变换下具有不变性，因此无法识别。

为解决可识别性问题，Khare 等人 (2017) 通过约束 2 中的模型参数，$\boldsymbol{\Omega}$ $= \operatorname{diag}(\omega_1, \ldots, \omega_u)$ 以及 $\boldsymbol{\Omega}_0$ $= \operatorname{diag}(\omega_{0,1}, \ldots, \omega_{0,(r-u)})$，其中$\omega_1 > \cdots > \omega_u$ 且 $\omega_{0,\ 1} > \cdots > \omega_{0,\ r-u}$，从而确保包络模型 2 可识别。

然而，他们的抽样器需要对截断的逆伽马分布进行拒绝抽样（针对$\boldsymbol{\Omega}$的对角元素），并从广义宾厄姆分布中抽样（针对$\boldsymbol{\Gamma}$）。这两个步骤计算密集，在高维情形下往往混合缓慢。

为克服流形约束推断带来的计算局限，Chakraborty 和 Su(2024a) 采用了Cook 等人(2016) 的参数化方法，该方法通过欧几里得空间中定义的参数来确定包络子空间。当 u 行 $\boldsymbol{\Gamma}$ 满秩时，包络基 $\boldsymbol{\Gamma}$ 可表示为无约束矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{(r-u)\times u}$的函数，如下所示：

$$\boldsymbol{\Gamma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Gamma}_1 \\ \boldsymbol{\Gamma}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_u \\ \boldsymbol{\Gamma}_2\boldsymbol{\Gamma}_1^{-1} \end{pmatrix} \boldsymbol{\Gamma}_1 \equiv \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_u \\ \boldsymbol{A} \end{pmatrix} \boldsymbol{\Gamma}_1 \equiv \boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{\Gamma}_1,$$

其中 $\boldsymbol{\Gamma}_1 \in \mathbb{R}^{u\times u}$、$\boldsymbol{\Gamma}_2 \in \mathbb{R}^{(r-u)\times u}$、$\boldsymbol{A} \equiv \boldsymbol{\Gamma}_2\boldsymbol{\Gamma}_1^{-1}$ 和 $\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}} \equiv \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_u \\ \boldsymbol{A} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{r\times u}$。那么，$\boldsymbol{\Gamma}$ 和 $\boldsymbol{\Gamma}_0$ 可表示为：

$$\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A}) := \boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}})^{-1/2}, \qquad \boldsymbol{\Gamma}_0(\boldsymbol{A}) := \boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}})^{-1/2}, \tag{3}$$

其中 $\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}} \equiv \begin{pmatrix} -\boldsymbol{A}^{\top} \\ \boldsymbol{I}_{r-u} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{r\times(r-u)}$。不失一般性，我们可以假设——必要时对行进行置换后—— $\boldsymbol{\Gamma}$ 的前 u 行构成一个满秩块。

采用 Cook 等人 (2016) 的参数化，Chakraborty 和 Su (2024a) 将响应包络模型指定如下：

$$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})\boldsymbol{\eta}\boldsymbol{X} + \boldsymbol{\epsilon}, \qquad \boldsymbol{\epsilon} \sim \mathcal{N}_r\left(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})\boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{\Gamma}^{\top}(\boldsymbol{A}) + \boldsymbol{\Gamma}_0(\boldsymbol{A})\boldsymbol{\Omega}_0\boldsymbol{\Gamma}_0^{\top}(\boldsymbol{A})\right). \tag{4}$$

他们将先验分布指定如下：

(i) $\pi(\boldsymbol{\mu}) \propto 1$ 是 $\mathbb{R}^r$ 上的非正常平坦先验分布。(ii) $\Omega \sim \mathcal{IW}_u(\boldsymbol{\Psi}, \nu^{(1)})$，其中 $\boldsymbol{\Psi} \in \mathcal{C}_u$，$\nu^{(1)} > u-1$。(iii) $\Omega_0 \sim \mathcal{IW}_{r-u}(\boldsymbol{\Psi}_0, \nu^{(0)})$，其中 $\boldsymbol{\Psi}_0 \in \mathcal{C}_{r-u}$，$\nu^{(0)} > r-u-1$。(iv) $\boldsymbol{\eta} \mid \boldsymbol{A}$，$\Omega \sim \mathcal{MN}_{u,p}(\boldsymbol{\Gamma}^{\top}(\boldsymbol{A})\boldsymbol{B}_0,\ \Omega,\ \boldsymbol{M}^{-1})$，其中 $\boldsymbol{B}_0 \in \mathbb{R}^{r\times p}$ 和 $\boldsymbol{M} \in \mathcal{C}_p$。(v) $\boldsymbol{A} \sim \mathcal{MN}_{r-u,u}(\boldsymbol{A}_0,\ \boldsymbol{U}_0^{(A)}, \boldsymbol{V}_{(A)}\ 0\ )$，其中 $\boldsymbol{A}_0 \in \mathbb{R}^{(r-u)\times u}$，$\boldsymbol{U}_{(A)\ 0} \in \mathcal{C}_{r-u}$，且 $\boldsymbol{V}_{(A)\ 0} \in \mathcal{C}_u$，

其中 $\mathcal{MN}$ 表示矩阵正态分布，$\mathcal{IW}$ 表示逆威沙特分布。令 $\mathbb{Y} \in \mathbb{R}^{n\times r}$ 表示响应矩阵，其第 i行是 $\boldsymbol{Y}_i^{\top} \in \mathbb{R}^r$。类似地，令 $\mathbb{X} \in \mathbb{R}^{n\times p}$表示预测变量矩阵，其第 i行是 $\boldsymbol{X}_i^{\top} \in \mathbb{R}^p$。令 $\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}} = \mathbb{Y} - \boldsymbol{1}_n\boldsymbol{\mu}^{\top}$，其中 $\boldsymbol{1}_n$ 是由n个 1 组成的向量。于是，未归一化的对数后验分布为：

$$\begin{aligned}
&\log p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}_0, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{Y}) = \\
&\textit{const.} - \frac{n+p+\nu^{(1)}+u+1}{2}\log|\boldsymbol{\Omega}| - \frac{n+\nu^{(0)}+r-u+1}{2}\log|\boldsymbol{\Omega}_0| \\
&- \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left[(\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A}) - \mathbb{X}\boldsymbol{\eta}^{\top})\boldsymbol{\Omega}^{-1}(\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A}) - \mathbb{X}\boldsymbol{\eta}^{\top})^{\top}\right] \qquad (5) \\
&- \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left[\boldsymbol{\Gamma}_0^{\top}(\boldsymbol{A})\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}^{\top}\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}\boldsymbol{\Gamma}_0(\boldsymbol{A})\boldsymbol{\Omega}_0^{-1}\right] \qquad (6) \\
&- \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left[\boldsymbol{M}(\boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\Gamma}^{\top}(\boldsymbol{A})\mathbf{B}_0)^{\top}\boldsymbol{\Omega}^{-1}(\boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\Gamma}^{\top}(\boldsymbol{A})\mathbf{B}_0)\right] - \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left[\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\Omega}^{-1}\right] - \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left[\boldsymbol{\Psi}_0\boldsymbol{\Omega}_0^{-1}\right] \\
&- \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left[\boldsymbol{V}_0^{(A)-1}(\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}_0)^{\top}\boldsymbol{U}_0^{(A)-1}(\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}_0)\right]. \qquad (7)
\end{aligned}$$

响应包络模型中主要关注的对象是包络子空间 $\mathcal{S}$ =span($\boldsymbol{\Gamma}$)（以及由此导出的回归系数 $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\Gamma}\boldsymbol{\eta}$）。在欧几里得参数化（3）下，子空间 $\mathcal{S}$ 由无约束矩阵 $\boldsymbol{A}$完全刻画，因此可以通过对 $\boldsymbol{A}$进行推断来实现对包络结构的后验推断。其余参数（$\boldsymbol{\mu}$、$\boldsymbol{\eta}$、$\boldsymbol{\Omega}$、$\boldsymbol{\Omega}_0$）在似然设定中起辅助作用，通常在给定 $\boldsymbol{A}$的条件下视为干扰参数。重要的是，给定 $\boldsymbol{A}$后，这些参数块具有标准的共轭全条件分布（在上述先验下为正态/矩阵正态和逆威沙特分布形式）。

Chakraborty 和 Su (2024a）提出了一种分块式 Metropolis-within-Gibbs 采样器。具体而言，他们提出了一种由似然驱动的 MH 算法，用于更新 $\boldsymbol{A}$，以缓解随机游走提议混合不佳的问题（详见 Chakraborty 和 Su（2024b）的 C.7 节）。

然而，Khare 等人(2017) 和 Chakraborty 和 Su (2024a) 提出的算法仍存在混合效果差、收敛速度慢的问题，尤其是在参数维度较高时。

与此一致，Chakraborty 和 Su (2024a) 报告称，平均有效样本量（ESS）比值（其 Metropolis-within-Gibbs 采样器相对于Khare 等人(2017) 提出的流形 Gibbs 采样器）约为 0.9 ，适用于 β个坐标和重复试验；见 Chakraborty 和 Su(2024b)，C.13.3 节。此外，针对 $\boldsymbol{A}$ 的似然驱动提议完全依据似然构造，未纳入先验信息，因此在存在信息性先验时可能降低后验效率。总之，这些局限凸显了基于马尔可夫链蒙特卡罗的响应包络模型推断所面临的根本性可扩展性挑战，并促使人们开发计算效率更高的替代方法。

3 拉普拉斯变分推断综述

VI 是一种可扩展的 MCMC 替代方法，它通过一个更易处理的变分族来近似后验分布。我们将这种近似分布称为变分分布，记作 $q(\boldsymbol{\theta})$。在平均场变分族（MFVF）假设下，变分分布可按参数块分解为

$$q(\boldsymbol{\theta}) = \prod_{i=1}^{K} q_i(\boldsymbol{\theta}_i),$$

其中每个 q_i（$\boldsymbol{\theta}_i$） 称为一个变分因子。VI 最小化 Kullback–Leibler（KL）散度 $\mathrm{KL}(q$（$\boldsymbol{\theta}$） $\| p$（$\boldsymbol{\theta} \mid \mathbb{Y}$），这等价于最大化证据下界（ELBO）（Jordan 等人， 1999）

$$\mathcal{L}(q) := \mathbb{E}_q[\log p(\mathbb{Y}, \boldsymbol{\theta})] - \mathbb{E}_q[\log q(\boldsymbol{\theta})].$$

坐标上升变分推断。 CAVI 通过在固定其余变分因子的同时，逐次更新一个变分因子来优化证据下界。令 $q^{(t)}(\boldsymbol{\theta}) = \prod_i q_i^{(t)}(\boldsymbol{\theta}_i)$ 表示第 t 次迭代时的变分分布。给定当前迭代值 $q_{-i}^{(t)}(\boldsymbol{\theta}_{-i}) := \prod_{j \neq i} q_j^{(t)}(\boldsymbol{\theta}_j)$，第（$t+1$）次对第 i 个因子的更新可通过求解以下问题得到

$$q_i^{(t+1)}(\boldsymbol{\theta}_i) \propto \exp\Big\{ \mathbb{E}_{q_{-i}^{(t)}}\big[\log p(\boldsymbol{\theta}_i \mid \boldsymbol{\theta}_{-i}, \mathbb{Y})\big] \Big\}. \tag{8}$$

更准确地说，更新是按顺序进行的：在第 t 次迭代中， q_i 的更新使用 $q_j^{(t+1)}$ 作为 $j < i$ ，并使用 $q_j^{(t)}$ 作为 $j > i$。为简化记号，我们用 $q_{-i}^{(t)}$ 表示这一集合。CAVI 通过依次遍历 $i = 1$、……、K 并重复这些更新，直至收敛。

条件共轭块。 若参数块 $\boldsymbol{\theta}_i$ 在 $q_i(\boldsymbol{\theta}_i)$ 中的更新 (8) 在变分意义上得到一个属于已知参数族的因子（Wang 和 Blei，2013）。形式化地， $\boldsymbol{\theta}_i$ 是条件共轭的，当且仅当存在一个族 $\mathcal{F}_i$ 使得

$$q_i^{(t+1)}(\boldsymbol{\theta}_i) \in \mathcal{F}_i \quad \text{and} \quad p(\boldsymbol{\theta}_i \mid \boldsymbol{\theta}_{-i}, \mathbb{Y}) \in \mathcal{F}_i.$$

例如，当 $\mathcal{F}_i$ 是正态分布的集合时，

$$\mathbb{E}_{q_{-i}^{(t)}}[\log p(\boldsymbol{\theta}_i \mid \boldsymbol{\theta}_{-i}, \mathbb{Y})] = -\tfrac{1}{2}\boldsymbol{\theta}_i^\top \mathbf{H}^{(t)} \boldsymbol{\theta}_i + \mathbf{b}^{(t)\top} \boldsymbol{\theta}_i + \text{const},$$

且更新为

$$q_i^{(t+1)}(\boldsymbol{\theta}_i) = \mathcal{N}\big(\mathbf{H}^{(t)-1}\mathbf{b}^{(t)}, \mathbf{H}^{(t)-1}\big),$$

其中，$\mathbf{H}^{(t)}$ 和 $\mathbf{b}^{(t)}$ 分别是二次系数和一次系数，由对 $\boldsymbol{\theta}_i \log\ p(\boldsymbol{\theta}_i \mid \boldsymbol{\theta}_{-i}, \mathbb{Y})]$ 的展开确定。

条件共轭块在 CAVI 中发挥着关键的计算作用。由于最优变分因子 $q_i^{(t+1)}(\boldsymbol{\theta}_i)$ 属于已知的参数族，其归一化常数和矩都可以用闭式形式求得。因此，其他块的坐标更新中涉及的关于 $q_i(\boldsymbol{\theta}_i)$ 的期望可以通过解析方式计算。这种易处理性避免了对这些块进行数值积分或基于梯度的优化，从而显著节省计算开销并提高数值稳定性。

非共轭块与拉普拉斯更新。 当 $\boldsymbol{\theta}_i$ 为条件非共轭时，更新（8）无法直接求解。为了解决这一问题，Wang 和 Blei(2013) 提出在每次坐标更新中引入拉普拉斯近似。定义迭代 t 时的局部目标为

$$f_i^{(t)}(\boldsymbol{\theta}_i) := \mathbb{E}_{q_{-i}^{(t)}}\big[\log p(\boldsymbol{\theta}_i \mid \boldsymbol{\theta}_{-i}, \mathbb{Y})\big]. \tag{9}$$

Let

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_i^{(t)} := \arg\max_{\boldsymbol{\theta}_i} f_i^{(t)}(\boldsymbol{\theta}_i)$$

令其为局部最大值点。我们在 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_i^{(t)}$ 附近对 $f_i^{(t)}$ 作二阶泰勒展开，得到如下高斯更新

$$\begin{aligned} & q_i^{(t+1)}(\boldsymbol{\theta}_i) \\ & \approx \exp\Big\{ f_i^{(t)}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_i^{(t)}) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\theta}_i - \hat{\boldsymbol{\theta}}_i^{(t)})^\top f_i^{(t)\prime\prime}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_i^{(t)})(\boldsymbol{\theta}_i - \hat{\boldsymbol{\theta}}_i^{(t)}) \Big\} \\ & = \mathcal{N}\Big(\hat{\boldsymbol{\theta}}_i^{(t)}, -\big[f_i^{(t)\prime\prime}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_i^{(t)})\big]^{-1}\Big) =: q_i^{L(t+1)}(\boldsymbol{\theta}_i). \end{aligned} \tag{10}$$

我们将加入这一基于拉普拉斯近似的坐标更新的 CAVI 称为坐标上升拉普拉斯变分推断 (CALVI)。

4 贝叶斯响应包络模型的 CALVI

本节展示如何将 CALVI 有效应用于贝叶斯响应包络模型。包络参数矩阵 $\boldsymbol{A}$带来了一个关键挑战：由于它通过正交归一基矩阵 $\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})$和$\boldsymbol{\Gamma}_0(\boldsymbol{A})$ 出现在（5）和（6）的似然中，因此它是条件非共轭的。如第 4.1 节所示，在 $\boldsymbol{A}$ 上采用 Cook 等人 (2016) 的欧几里得参数化进行直接拉普拉斯更新，会导致严重的计算瓶颈，原因是矩阵导数计算的计算开销很大。为解决这一问题，第 4.2 节介绍了一种新颖的重新参数化方法，该方法消除了主要的计算瓶颈，并为贝叶斯响应包络模型提供了一种可处理且数值稳定的 CALVI 程序。

4.1 参数化的计算问题 (3)

在经由(3)参数化的包络模型中，对 $\boldsymbol{A}$ 的非共轭更新应用拉普拉斯近似在计算上具有挑战性。在每次CALVI迭代中，拉普拉斯步

需要对局部目标求导

$$f^{(t)}(\boldsymbol{A}) := \mathbb{E}_{q^{(t)}_{-\boldsymbol{A}}}\big[\log p(\boldsymbol{A} \mid \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}_0, \mathbb{Y})\big], \tag{11}$$

其中 $q^{(t)}_{-\boldsymbol{A}} = q^{(t)}(\boldsymbol{\mu})q^{(t)}(\boldsymbol{\eta})q^{(t)}(\boldsymbol{\Omega})q^{(t)}(\boldsymbol{\Omega}_0)$。 $f^{(t)}(\boldsymbol{A})$ 的显式形式及其完整导数见补充材料第S1节。由此产生的计算困难由单一主导项驱动。

具体而言，瓶颈源于对出现在 $\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})$ 和 $\boldsymbol{\Gamma}_0(\boldsymbol{A})$ 中的矩阵逆平方根项求导，这些项会导致大型克罗内克和矩阵求逆。令

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{A}) &:= \boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^\top \boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{I}_u + \boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{u\times u},\\ \boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A}) &:= \boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^\top \boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{I}_{r-u} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\top \in \mathbb{R}^{(r-u)\times(r-u)}.\end{aligned}$$

对 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{A})^{-1/2}$ 和 $\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A})^{-1/2}$ 关于 $\boldsymbol{A}$ 求导，可得式（12）中的克罗内克和表达式。

$$\begin{aligned}\frac{\partial \operatorname{vec}\left(\boldsymbol{J}(\boldsymbol{A})^{-1/2}\right)}{\partial \operatorname{vec}(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}})^\top} &= -\Big[\underbrace{\boldsymbol{J}(\boldsymbol{A})^{-1/2}\otimes \boldsymbol{I}_u + \boldsymbol{I}_u \otimes \boldsymbol{J}(\boldsymbol{A})^{-1/2}}_{(i)}\Big]^{-1}\\ &\quad\times\Big[\boldsymbol{J}(\boldsymbol{A})^{-1}\otimes \boldsymbol{J}(\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^\top + \boldsymbol{J}(\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^\top \otimes \boldsymbol{J}(\boldsymbol{A})^{-1}\mathcal{K}_{r,u}\Big],\\ \frac{\partial \operatorname{vec}\left(\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A})^{-1/2}\right)}{\partial \operatorname{vec}(\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}})^\top} &= -\Big[\underbrace{\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A})^{-1/2}\otimes \boldsymbol{I}_{r-u} + \boldsymbol{I}_{r-u} \otimes \boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A})^{-1/2}}_{(ii)}\Big]^{-1}\\ &\quad\times\Big[\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A})^{-1}\otimes \boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^\top + \boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^\top \otimes \boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A})^{-1}\mathcal{K}_{r,(r-u)}\Big],\end{aligned} \tag{12}$$

其中，vec(·) 表示按列向量化算子，$\mathcal{K}_{m,n}$ 表示 $(mn)\times(mn)$ 交换矩阵。式（12）（i）和（12）（ii）中出现的矩阵维度分别为 $u^2\times u^2$ 和 $(r-u)^2\times(r-u)^2$，。因此，理论上，在采用 Coppersmith–Winograd（Coppersmith 和 Winograd，1987年）等快速矩阵求逆算法时，计算这些项需要 $\mathcal{O}\big(\max\{u, r-u\}^{4.752}\big)$ 次运算。由于每次拉普拉斯更新迭代都要执行这一计算，在参数化（3）下直接实现 CALVI 的计算负担很重。

重要的是，这一困难并非响应包络模型所独有。任何基于 Cook 等人(2016) 的参数化的包络模型都会导致相同的克罗内克和瓶颈（12）；例如，参见补充材料第 S3 节中的预测变量包络模型。

4.2 重新参数化与 CALVI 算法

第 4.1 节 指出，在欧几里得参数化（ $\boldsymbol{A}$ （3）下，对逆平方根因子 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{A})^{-1/2}$ 和 $\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A})^{-1/2}$ 求导会引入（12）中的克罗内克和矩阵求逆，这正是直接进行拉普拉斯更新时的主要计算开销。采用下文引入的重新参数化后， $f^{(t)}(\boldsymbol{A})$中不再出现这些逆平方根项。

$\tilde{}$ $\tilde{}$重新参数化。 我们引入映射 $(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}_0, \boldsymbol{A}) \mapsto (\tilde{\boldsymbol{\mu}}, \tilde{\boldsymbol{\eta}}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}_0, \boldsymbol{A})$ 定义如下

$$\begin{aligned}\tilde{\boldsymbol{\eta}} &= \boldsymbol{J}(\boldsymbol{A})^{1/2}\boldsymbol{\eta},\\ \tilde{\boldsymbol{\Omega}} &= \boldsymbol{J}(\boldsymbol{A})^{1/2}\boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{A})^{1/2},\\ \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0 &= \boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A})^{1/2}\boldsymbol{\Omega}_0\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A})^{1/2}.\end{aligned} \tag{13}$$

我们还定义中心化截距

$$\begin{aligned}\tilde{\boldsymbol{\mu}} &:= \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}\,\boldsymbol{J}(\boldsymbol{A})^{-1}\,\tilde{\boldsymbol{\eta}}\,\bar{\boldsymbol{X}},\\ \bar{\boldsymbol{X}} &:= \mathbb{X}^\top \mathbf{1}_n/n \in \mathbb{R}^p, \qquad \mathbb{X}_c := \mathbb{X} - \mathbf{1}_n\bar{\boldsymbol{X}}^\top.\end{aligned} \tag{14}$$

这种中心化确保似然仅通过中心化设计 $\mathbb{X}_c$ 依赖于 $\mathbb{X}$，同时$\tilde{}$ $\tilde{}$保持（$\tilde{\boldsymbol{\mu}}, \tilde{\boldsymbol{\eta}}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}_0$）各块中的共轭性。

式（13）的关键动机在于，它消去了似然二次型中出现在 $\boldsymbol{\Gamma}$（$\boldsymbol{A}$）和 $\boldsymbol{\Gamma}_0$（$\boldsymbol{A}$）里的逆平方根因子。例如，利用 $\boldsymbol{\Gamma}$（$\boldsymbol{A}$）$=\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{J}$（$\boldsymbol{A}$）$^{-1/2}$ 以及 $\Omega^{-1} = \boldsymbol{J}$（$\boldsymbol{A}$）$^{1/2}\,\tilde{}\Omega^{-1}\boldsymbol{J}$（$\boldsymbol{A}$）$^{1/2}$，式（5）中的实质部分二次型可简化为仅涉及 $\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}$ 和 $\tilde{}\Omega^{-1}$ 的表达式，不再含有 $\boldsymbol{J}$（$\boldsymbol{A}$）$^{-1/2}$。通过 $\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}$ 和 $\tilde{}\Omega_0^{-1}$，无用部分也会发生类似的消去。

关键计算结论：对于 $\boldsymbol{A}$， 在 MFVF 方案下

$$q^{(t)}(\tilde{\boldsymbol{\mu}}, \tilde{\boldsymbol{\eta}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0, \mathrm{vec}(\boldsymbol{A})) = q^{(t)}(\tilde{\boldsymbol{\mu}})\,q^{(t)}(\tilde{\boldsymbol{\eta}})\,q^{(t)}(\tilde{\boldsymbol{\Omega}})\,q^{(t)}(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0)\,q^{(t)}(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})), \tag{15}$$

定义第 t 次迭代时的 $\boldsymbol{A}$ 坐标目标函数为

$$\tilde{f}^{(t)}(\boldsymbol{A}) := \mathbb{E}_{q^{(t)}_{-\boldsymbol{A}}}\left[\log p\Big(\boldsymbol{A} \mid \tilde{\boldsymbol{\mu}}, \tilde{\boldsymbol{\eta}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0, \mathbb{Y}\Big)\right], \tag{16}$$

其中 $q^{(t)}_{-\boldsymbol{A}} := q^{(t)}(\tilde{\boldsymbol{\mu}})\,q^{(t)}(\tilde{\boldsymbol{\eta}})\,q^{(t)}(\tilde{}\boldsymbol{\Omega})\,q^{(t)}(\tilde{}\boldsymbol{\Omega}_0)$。等价地，$\tilde{f}^{(t)}(\boldsymbol{A})$ 可用期望对数联合分布表示，至多相差一个与 $\boldsymbol{A}$无关的加性常数。显式的矩展开形式 $\tilde{f}^{(t)}(\boldsymbol{A})$ 见补充材料第S2.1节。

在本节中，我们采用各向同性逆Wishart先验尺度，令 $\boldsymbol{\Psi} = \psi^{(1)}\boldsymbol{I}_u$和 $\boldsymbol{\Psi}_0 = \psi^{(0)}\boldsymbol{I}_{r-u}$ 为常数 $\psi^{(1)}, \psi^{(0)} > 0$。在此选择下，$\boldsymbol{A}$-坐标目标函数$\tilde{f}^{(t)}(\boldsymbol{A})$仅通过对数行列式项 $\log|\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A})| := \log|\boldsymbol{I}_{r-u} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\top|$以及由 $\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}$ 和 $\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}$导出的线性形式和二次型依赖于 $\boldsymbol{A}$，从而得到一种简单高效的拉普拉斯更新。更一般的先验尺度可通过基于 $\boldsymbol{\Psi}$ 和 $\boldsymbol{\Psi}_0$的 Cholesky分解的白化重新参数化来处理。

因此，$\tilde{f}^{(t)}(\boldsymbol{A})$关于 $\boldsymbol{A}$ 的梯度可写成显式的矩阵形式，而二阶导数则可表示为关于向量化参数 $\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})$ 的海森矩阵。具体而言，梯度和海森矩阵的一般形式如下：

$$\nabla_{\boldsymbol{A}}\tilde{f}^{(t)}(\boldsymbol{A}) = \kappa\,\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A} + 2\,\boldsymbol{C}_1^{(t)}\boldsymbol{A}\boldsymbol{C}_2^{(t)} + \boldsymbol{C}_3^{(t)\top}, \tag{17}$$

$$\begin{aligned}&\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\tilde{f}^{(t)}(\boldsymbol{A})\\ &\quad= \kappa\,(\boldsymbol{I}_u - \boldsymbol{A}^\top\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}) \otimes \boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A})^{-1}\\ &\qquad- \kappa\left((\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A})^\top \otimes (\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A})\right)\mathcal{K}_{(r-u),u} + 2\,\boldsymbol{C}_2^{(t)} \otimes \boldsymbol{C}_1^{(t)},\end{aligned} \tag{18}$$

其中 $\kappa = 2n+\nu^{(1)}+\nu^{(0)}$、 $\boldsymbol{C}_1^{(t)} \in \mathbb{R}^{(r-u)\times(r-u)}$ 和 $\boldsymbol{C}_2^{(t)} \in \mathbb{R}^{u\times u}$ 均为对称矩阵，且 $\boldsymbol{C}_3^{(t)} \in \mathbb{R}^{u\times(r-u)}$ 仅取决于 $q^{(t)}(\tilde{\boldsymbol{\mu}}$、 $\tilde{\boldsymbol{\eta}}$、 $\tilde{\boldsymbol{\Omega}}$ $\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0)$在第 t 次迭代时的变分矩（以及数据和超参数）。这里，系数 κ 汇总了似然中的对数行列式项以及重新参数化后逆Wishart先验分布所产生的贡献；完整推导见补充材料第S2.1节。

由于采用了重新参数化， $\boldsymbol{A}$坐标目标函数（16）的梯度和海森矩阵均有显式闭式表达式；见（17）–（18）。计算这些导数只需构造 $\boldsymbol{J}_0$（$\boldsymbol{A}$）$^{-1}$ （一个（$r-u$） $\times$（$r-u$）逆矩阵）并进行标准矩阵乘法，因此在本文所考虑的维度下，计算上是可行的。相比之下，在 Cook 等人（2016）的欧几里得参数化下，拉普拉斯导数受制于（12）中的克罗内克和计算瓶颈，而二阶导数则需要反复进行克罗内克和求解，并涉及额外的克罗内克积（补充材料第S1.4节）。最后，计算拉普拉斯协方差仍需求解一个维度为 u（$r-u$）的线性方程组，但与欧几里得参数化中占主导地位的克罗内克和计算相比，这一步的计算负担要小得多。

非共轭块的拉普拉斯更新 $\boldsymbol{A}$。 在第 t次迭代中，给定 $q_{-\boldsymbol{A}}^{(t)}$，我们构造$\tilde{f}^{(t)}(\boldsymbol{A})$ 中的 (16)，并使用拉普拉斯步 (10) 更新 $q^{(t+1)}(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}))$:

$$q^{(t+1)}(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})) \approx q^{L}(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})) = \mathcal{N}_{(r-u)u}\Big(\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}^{(t)}),\, H(\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}^{(t)}))\Big)\,, \tag{19}$$

其中

$$\begin{aligned}
&\hat{\boldsymbol{A}}^{(t)} = \arg\max_{\boldsymbol{A}}\ \tilde{f}^{(t)}(\boldsymbol{A}),\\
&H(\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}^{(t)})) = -\left[\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\tilde{f}^{(t)}(\hat{\boldsymbol{A}}^{(t)})\right]^{-1}.
\end{aligned}$$

实际上，$\hat{}\boldsymbol{A}^{(t)}$ 是基于 (17) 中的导数，通过数值优化得到的（Cook 等人，2016）。

共轭块的闭式更新。 通过拉普拉斯步更新非共轭包络因子 $q^{(t+1)}(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}))$ 后，在 MFVF 假设 (15) 下，其余参数块变为条件共轭。因此，根据 (8) 可得到它们的坐标更新的闭式表达式，我们选择相应的变分族为

$$\begin{aligned}
&q^{(t+1)}(\tilde{\boldsymbol{\mu}}) \sim \mathcal{N}_r(\boldsymbol{\mu}_q^{(t+1)}, \boldsymbol{\Sigma}_q^{(t+1)}),\\
&q^{(t+1)}(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) \sim \mathcal{MN}_{u,p}(\boldsymbol{\eta}_q^{(t+1)}, \boldsymbol{U}_q^{(\boldsymbol{\eta})(t+1)}, \boldsymbol{V}_q^{(\boldsymbol{\eta})(t+1)}),\\
&q^{(t+1)}(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}) \sim \mathcal{IW}_u(\boldsymbol{\Psi}_q^{(1)(t+1)}, \nu_q^{(1)(t+1)}),\\
&q^{(t+1)}(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0) \sim \mathcal{IW}_{r-u}(\boldsymbol{\Psi}_q^{(0)(t+1)}, \nu_q^{(0)(t+1)}).
\end{aligned} \tag{20}$$

这些变分族的选择与重参数化模型下相应全条件后验分布的函数形式相匹配。

由此得到的变分参数可以用闭式形式表示为以下各项的函数：(i) 当前的拉普拉斯近似（$\hat{}\boldsymbol{A}^{(t)}$, H(向量化($\hat{}\boldsymbol{A}^{(t)}$))），(ii) 其他

共轭块的当前变分矩，以及 (iii) 数据的充分统计量（$\mathbb{X}, \mathbb{Y}$）。例如，$\tilde{\boldsymbol{\eta}}$ 的更新为

$$
\begin{aligned}
q^{(t+1)}(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) &\sim \mathcal{MN}_{u,p}(\boldsymbol{\eta}_q^{(t+1)}, \boldsymbol{U}_q^{(\boldsymbol{\eta})(t+1)}, \boldsymbol{V}_q^{(\boldsymbol{\eta})(t+1)}),\\
\boldsymbol{\eta}_q^{(t+1)} &= \boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}^{(t)}}^{\top}(\mathbb{X}_c^{\top}\mathbb{Y} + \boldsymbol{M}\boldsymbol{B}_0^{\top})^{\top}(\mathbb{X}_c^{\top}\mathbb{X}_c + \boldsymbol{M})^{-1},\\
\boldsymbol{U}_q^{(\boldsymbol{\eta})(t+1)} &= \boldsymbol{\Psi}_q^{(1)(t+1)} / \nu_q^{(1)(t+1)},\\
\boldsymbol{V}_q^{(\boldsymbol{\eta})(t+1)} &= (\mathbb{X}_c^{\top}\mathbb{X}_c + \boldsymbol{M})^{-1},
\end{aligned}
$$

其中 $\boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}^{(t)}} = \mathbb{E}_{q^{(t+1)}(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}))}[\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}]$ 是在高斯拉普拉斯因子（19）下计算的。其余更新的显式表达式见补充材料第 S2.2 节。

算法概要与收敛监测。 为监测收敛，我们在每次迭代时计算近似证据下界：

$$
\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{L}}^{(t)}(q) \approx \tilde{f}^{(t)}(\hat{\boldsymbol{A}}^{(t)}) &- \frac{(r-u)u}{2}\\
&- \mathbb{E}_{q^{(t)}(\tilde{\boldsymbol{\mu}},\tilde{\boldsymbol{\eta}},\tilde{\boldsymbol{\Omega}},\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0,\boldsymbol{A})}\left[\log q^{(t)}(\tilde{\boldsymbol{\mu}},\tilde{\boldsymbol{\eta}},\tilde{\boldsymbol{\Omega}},\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0,\boldsymbol{A})\right],
\end{aligned}
\tag{21}
$$

其中 $\tilde{f}^{(t)}(\hat{\boldsymbol{A}}^{(t)})$ 表示对非共轭项的代入式拉普拉斯近似。其 $\mathcal{L}(q)$ 的完整表达式（包括常数项）见补充材料第 S2.3 节。

算法 1 总结了由此得到的 CALVI 流程。在第 t 次迭代中，我们通过（$q^{(t+1)}$vec($\boldsymbol{A}$)）（19）更新，然后根据（20）所依据的闭式表达式更新共轭变分因子，如此循环，直至近似证据下界的相对改变量低于容差。

5 CALVI 拉普拉斯更新的理论依据

本节将量化 CALVI 中所用拉普拉斯近似的准确性。我们首先针对非共轭坐标更新（10）建立单步拉普拉斯近似的一般性结果，然后将其应用于贝叶斯响应包络模型，以论证模型特定更新（19）。

一般变分设定中的拉普拉斯近似误差。回顾第3节中的记号。目标后验为 $p(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbb{Y}_n)$，其分块分解为 $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2)$。在MFVF假设 $q(\boldsymbol{\theta}) = q_1(\boldsymbol{\theta}_1)\, q_2(\boldsymbol{\theta}_2)$下，块 $\boldsymbol{\theta}_1 \in \mathbb{R}^{d_1}$ 表示条件非共轭分量，而块 $\boldsymbol{\theta}_2 \in \mathbb{R}^{d_2}$ 表示条件共轭分量。由于我们关注式（10）中的单步拉普拉斯近似误差，因此将共轭块的变分因子固定在当前CAVI迭代处，记为$q_{2,n}^{\dagger}(\boldsymbol{\theta}_2)$，并省略显式的迭代指标（$t$）。在本节中，所有带下标 n的量都可能依赖于样本量 n，而维度 d_1 和 d_2 为固定值。

非共轭块 $\boldsymbol{\theta}_1$ 的精确 CAVI 坐标更新是密度正比于以下内容的分布

$$
q_n^{VI}(\boldsymbol{\theta}_1 \mid q_{2,n}^{\dagger}) \;\propto\; \exp\{\tilde{f}_n^{\dagger}(\boldsymbol{\theta}_1)\},
\tag{22}
$$

算法1 响应包络模型的坐标上升拉普拉斯变分推断 1：初始化变分因子 $q^{(1)}(\tilde{\boldsymbol{\mu}})$、$q^{(1)}(\tilde{\boldsymbol{\eta}})$、$q^{(1)}(\tilde{\Omega})$、$q^{(1)}(\tilde{\Omega}_0)$ 和 $q^{(1)}(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}))$ 2：设置容差 ϵ、最大迭代次数 T3：$t \leftarrow 1$4：当 $t < T$ 时执行 5：使用 (21) 计算 $\tilde{\mathcal{L}}(q)^{(t)}$ 6：使用 (19) 更新 $q^{(t+1)}(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}))$ 7：使用闭式CAVI更新（补充材料，S2.2节）更新 $q^{(t+1)}(\tilde{\boldsymbol{\eta}})$ 8：使用闭式CAVI更新（补充材料，S2.2节）更新 $q^{(t+1)}(\tilde{\Omega})$ 9：使用闭式CAVI更新（补充材料，S2.2节）更新 $q^{(t+1)}(\tilde{\Omega}_0)$ 10：使用闭式CAVI更新（补充材料，S2.2节）更新 $q^{(t+1)}(\tilde{\boldsymbol{\mu}})$ 11：使用 (21) 计算 $\tilde{\mathcal{L}}(q)^{(t+1)}$ 12：如果 $|\tilde{\mathcal{L}}(q)^{(t+1)} - \tilde{\mathcal{L}}(q)^{(t)}| < \epsilon\,|\tilde{\mathcal{L}}(q)^{(t+1)}|$ 则 13：跳出 14：结束如果 15：$t \leftarrow t+1$16：结束循环 17：返回 $q^{(t)}(\tilde{\boldsymbol{\mu}})$、$q^{(t)}(\tilde{\boldsymbol{\eta}})$、$q^{(t)}(\tilde{\Omega})$、$q^{(t)}(\tilde{\Omega}_0)$、$q^{(t)}(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}))$ 和 $\{\tilde{\mathcal{L}}(q)^{(1)}, \ldots, \tilde{\mathcal{L}}(q)^{(t)}\}$

这与 $i=1$ （8）中的情形一致，其中共轭变分因子 $q_{2,n}^{\dagger}$ 保持固定。指数项 $\tilde{f}_n^{\dagger}(\boldsymbol{\theta}_1)$ （定义见下文（25））与（22）中的核一致。任何与 $\boldsymbol{\theta}_1$ 无关的项均并入归一化常数。

在 CALVI 中，非共轭块的一步坐标更新以拉普拉斯近似替代精确更新（22）

$$q_n^L(\boldsymbol{\theta}_1) := \mathcal{N}\Big(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}, \big[-\tilde{f}_n^{\dagger\prime\prime}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\big]^{-1}\Big), \tag{23}$$

其中 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n} := \arg\max_{\boldsymbol{\theta}_1} \tilde{f}_n^{\dagger}(\boldsymbol{\theta}_1)$。主要目标是证明，对于固定的 $q_{2,n}^{\dagger}$，经过重缩放后，基于拉普拉斯近似的更新（23）与精确 CAVI 更新（22）在全变差距离意义下渐近等价。

为了在局部 $n^{-1/2}$ 尺度上将这一比较形式化，定义重缩放变量

$$\boldsymbol{X} := \sqrt{n}\,(\boldsymbol{\theta}_1 - \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}),$$

并令 q_n^{VI}和 q_n^L分别表示在 $q_n^{VI}(\cdot \mid q_{2,n}^{\dagger})$ 和 q_n^L 下 $\boldsymbol{X}$ 的分布律。我们的目标是证明

$$d_{TV}\left(\overline{q_n^L}, \overline{q_n^{VI}}\right) \xrightarrow{P} 0, \qquad n \to \infty,$$

在适当的正则性条件下。

B在陈述这些条件之前，我们先介绍本文分析中将始终使用的术语。 he

分析。固定$q_2^\dagger$，n 后，将变分对数似然写作

$$\ell_n^\dagger(\boldsymbol{\theta}_1) := \int q_{2,n}^\dagger(\boldsymbol{\theta}_2)\, \log p(\mathbb{Y}_n, \boldsymbol{\theta}_2 \mid \boldsymbol{\theta}_1)\, d\boldsymbol{\theta}_2, \tag{24}$$

并将相应的变分对数后验（在 $\boldsymbol{\theta}_1$ 中至多相差一个加性常数）写为

$$\tilde{f}_n^\dagger(\boldsymbol{\theta}_1) = \ell_n^\dagger(\boldsymbol{\theta}_1) + \log \pi(\boldsymbol{\theta}_1). \tag{25}$$

等价地，精确的坐标更新分布（22）是密度正比于 $\exp\{\tilde{f}_n^\dagger(\boldsymbol{\theta}_1)\}$ 的归一化分布律。以下引入的所有假设均施加于 $\ell_n^\dagger$ 和 $\tilde{f}_n^\dagger$。

我们施加假设1–5，改编自Kasprzak 等人 （2025，定理 17），并将其用于当前的变分坐标更新设定。这些条件在结构上与Kasprzak 等人 （2025）的条件一致，但此处是依据与 CALVI 相关的变分对数似然和变分对数后验来表述的。

假设1。 令 $\ell_n^\dagger(\boldsymbol{\theta}_1)$ 表示（24）中定义的变分对数似然。假设 t:

（a）存在唯一的最大变分似然估计量（最大化变分似然估计）

$$\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n} := \arg\max_{\boldsymbol{\theta}_1} \ell_n^\dagger(\boldsymbol{\theta}_1).$$

（b）存在 $\bar{\delta} > 0$，使得 $\ell_n^\dagger(\boldsymbol{\theta}_1)$ 在闭球上三次连续可微

$$\mathcal{B}(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}, \bar{\delta}) := \left\{ \boldsymbol{\theta}_1 : \ \|\boldsymbol{\theta}_1 - \bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}\| \le \bar{\delta} \right\}.$$

(c) 存在常数 $M_1 > 0$，使得

$$\sup_{\boldsymbol{\theta}_1 \in \mathcal{B}(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}, \bar{\delta})} \frac{\left\| \ell_n^{\dagger\prime\prime\prime}(\boldsymbol{\theta}_1) \right\|^*}{n} \le \bar{M}_1,$$

其中，三阶导数的范数定义为

$$g'''(\theta)[a,b,c] := \sum_{i,j,k=1}^{d_1} \frac{\partial^3 g(\theta)}{\partial\theta_i \partial\theta_j \partial\theta_k} a_i b_j c_k, \qquad \|g'''(\theta)\|^* := \sup_{\|a\|\le 1,\ \|b\|\le 1,\ \|c\|\le 1} |g'''(\theta)[a,b,c]|.$$

假设1 确保变分后验在 邻域 $\mathcal{B}(\boldsymbol{\theta}_{1_n}, \delta)$ 上围绕最大化变分似然估计$\boldsymbol{\theta}_{1_n}$存在局部二次近似。

假设2。 对于与假设 $\delta > 0$ 中相同的 $\mathcal{B}(\boldsymbol{\theta}_{1_n}, \delta)$ 和1，存在常数 $M_2 > 0$ 使得

$$\sup_{\boldsymbol{\theta}_1 \in \mathcal{B}(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}, \bar{\delta})} \left| \frac{1}{\pi(\boldsymbol{\theta}_1)} \right| \le \bar{M}_2.$$

假设2 保证 $\mathcal{B}(\boldsymbol{\theta}_{1_n}, \delta)$ 具有严格为正的先验概率，从而避免局部后验行为受先验分布支配。

假设3。 设 $\tilde{f}_n^\dagger(\boldsymbol{\theta}_1)$ 表示定义于（25）中的变分对数后验，并设 $\lambda_{\min}(\cdot)$ 表示对称矩阵的最小特征值。假设:

(a) 存在唯一的最大变分后验（MAVP），

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n} := \arg\max_{\boldsymbol{\theta}_1} \tilde{f}_n^\dagger(\boldsymbol{\theta}_1).$$

ˆ (b) 存在 $\delta > 0$，使得对数先验 $\log \pi(\boldsymbol{\theta}_1)$ 在闭球上三次连续可微

$$\mathcal{B}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}, \hat{\delta}) := \{\boldsymbol{\theta}_1 : \ \|\boldsymbol{\theta}_1 - \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}\| \leq \hat{\delta}\}.$$

(c) 存在一个常数 ˆ $M_1 > 0$，使得

$$\sup_{\boldsymbol{\theta}_1 \in \mathcal{B}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}, \hat{\delta})} \frac{\left\| \tilde{f}_n^{\dagger\prime\prime\prime}(\boldsymbol{\theta}_1) \right\|^*}{n} \leq \hat{M}_1, \qquad \lambda_{\min}\left(-\frac{\tilde{f}_n^{\dagger\prime\prime}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})}{n} \right) > \hat{\delta}\, \hat{M}_1.$$

假设 3确保纳入先验分布后，诱导的变分对数后验在最大化变分后验附近仍然强凹，从而在后验层面为高斯近似提供了依据。

– ˆ**假设 4**。 对于与假设 $\delta > 0$ 1 中相同的 $\delta > 0$ 以及与假设 3中相同的,

$$\max\left\{ \|\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n} - \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}\|, \ \sqrt{\mathrm{tr}\left[-\tilde{f}_n^{\dagger\prime\prime}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1} \right]} \right\} < \hat{\delta}, \qquad \sqrt{\mathrm{tr}\left[-\ell_n^{\dagger\prime\prime}(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1} \right]} < \bar{\delta}.$$

假设 4 确保当 n足够大时，由– – ˆˆ海森矩阵诱导的局部高斯尺度落在邻域 $\mathcal{B}(\boldsymbol{\theta}_{1_n}, \delta)$ 和 $\mathcal{B}(\boldsymbol{\theta}_{1_n}, \delta)$内，并且最大化变分似然估计与最大化变分后验足够接近，使相应的局部二次近似彼此重叠。

Ass ˆ**假设 5**。 对于与假设 $\delta > 0$ 3 中相同的，存在一个常数 $\hat{\kappa} > 0$，使得 t

$$\sup_{\boldsymbol{\theta}_1 : \ \|\boldsymbol{\theta}_1 - \bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}\| > \hat{\delta} - \|\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n} - \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}\|} \frac{\ell_n^\dagger(\boldsymbol{\theta}_1) - \ell_n^\dagger(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})}{n} \leq -\hat{\kappa}.$$

假设5 保证变分对数似然具有充分的尾部衰减，从而使远离最大化变分似然估计的区域对变分后验的贡献可以忽略不计。

定理1. 假设 *1–5* 均成立，并采用上述记号。则

$$d_{TV}\left(\overline{q_n^L}, \overline{q_n^{VI}} \right) \xrightarrow{P} 0, \qquad as \quad n \to \infty.$$

该定理确立了拉普拉斯坐标更新与精确 CAVI 更新之间的局部一步等价性；但并未讨论完整迭代方案的全局行为。证明基于全变差距离的显式非渐近界，并推迟至补充材料第S4节。

贝叶斯响应包络模型的验证。现在，我们引入一个模型特定假设，在该假设下，假设 1–5 对重参数化贝叶斯响应包络模型均成立。

假设 6. 令 $\boldsymbol{A}^\star$ 表示在由（4）所蕴含的选定识别条件下的真实参数。存在 $\rho > 0$ 和 $\delta > 0$，使得令

$$\mathcal{N}_\rho := \{\boldsymbol{A} : \|\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}^\star\|_F \leq \rho\},$$
$$\mathbf{J}_n(\boldsymbol{A}) := -\mathbb{E}_{q_n^\dagger(\boldsymbol{Z})}\left[\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \log p(\mathbb{Y}_n, \boldsymbol{Z} \mid \boldsymbol{A}) \right],$$

以下结论成立:

（a）以趋于 1 的概率，全局最大化点集合非空，且满足

$$\bar{\boldsymbol{A}}_n := \operatorname*{argmax}_{\boldsymbol{A}} \ell_n^{\dagger}(\boldsymbol{A}) \subset \operatorname{int}(\mathcal{N}_\rho), \qquad \hat{\boldsymbol{A}}_n := \operatorname*{argmax}_{\boldsymbol{A}} \tilde{f}_n^{\dagger}(\boldsymbol{A}) \subset \operatorname{int}(\mathcal{N}_\rho).$$

特别地，在该事件成立时，$\mathcal{N}_\rho$ 上的极大值点与全局极大值点重合。

(b) 以趋于 1 的概率，

$$\inf_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}_\rho} \lambda_{\min}\Big(\frac{1}{n}\mathbf{J}_n(\boldsymbol{A})\Big) \geq \delta.$$

假设 6(a) 的动机来自包络估计量已有的局部化结果。具体而言，在标准正则性条件下，包络最大似然估计量是 $\boldsymbol{A}^\star$ (Cook 等人，2010年， 2016) 的一致估计量，因此可以合理预期，当 n足够大时， $\ell_n^{\dagger}(\boldsymbol{A})$ 和$\tilde{f}_n^{\dagger}(\boldsymbol{A})$ 的极大值点会集中在 $\boldsymbol{A}^\star$的某个（依赖于模型的）邻域内；假设 6(a) 通过假定存在一个紧球 $\mathcal{N}_\rho$ ，以形式化地保证全局极大值点以高概率落在其中。

从计算角度看，当该局部化事件成立时，以一致初始估计量（例如包络最大似然估计量）作为 $\tilde{f}_n^{\dagger}(\boldsymbol{A})$ 数值最大化的初始值，是一种实用的方法，可用于找到 $\mathcal{N}_\rho$ 内相关的极大值点。

假设 6(b) 是一个曲率条件，与常规参数模型中标准的信息矩阵行为一致：在 $\boldsymbol{A}$ 处， $\boldsymbol{A}^\star$ 的信息矩阵是正定的，并且关于 $\boldsymbol{A}$(Cook 等人，2010年) 连续变化，因此，当 ρ 足够小时，可以预期 $\mathcal{N}_\rho$上存在一致的特征值下界。由于 $\mathbf{J}_n(\boldsymbol{A})$ 是在固定变分分布 $q_n^{\dagger}(\boldsymbol{Z})$下对观测信息取平均，因此该假设确保 $\boldsymbol{A}$-更新中的拉普拉斯协方差定义良好且具有一致良好的条件数。与此假设一致，我们在第6 节的数值实验中，未发现 CALVI 迭代过程中海森矩阵接近奇异。

定理1 适用于重参数化模型，从而得到以下定理2。

定理2。在重参数化响应包络模型下，假设*6* 成立。定义

$$\boldsymbol{X} := \sqrt{n}\,\big(\operatorname{vec}(\boldsymbol{A}) - \operatorname{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}_n)\big),$$

其中，$\hat{}\ \boldsymbol{A}_n$ 表示 $\boldsymbol{A}$的最大化变分后验，对应于识别条件 $\boldsymbol{\theta}_1 \equiv \boldsymbol{A}$下的$\hat{}\ \boldsymbol{\theta}_{1_n}$ 。令 q_n^L和 q_n^{VI}分别表示 $\boldsymbol{X}$在 $\boldsymbol{A} \sim q_n^L$和 $\boldsymbol{A} \sim q_n^{VI}$下的分布律。则

$$d_{TV}\Big(\overline{q_n^L}, \overline{q_n^{VI}}\Big) \xrightarrow{P} 0.$$

定理2的证明见补充材料第S5节。

6 数值研究

6.1 模拟研究

我们对贝叶斯响应包络模型开展模拟研究，从两个方面评估 CALVI 的性能：(1) $\boldsymbol{\beta}$ 的估计精度；(2) 计算时间。我们将 CALVI 与三种竞争方法进行比较：(i) 使用

由Chakraborty 和 Su 提出的2024a年的似然驱动提议（下文简称 MH-Gibbs）；(ii) Chakraborty 和 Su 在2024a年的补充材料中实现的 ADVI方法；以及 (iii) Khare 等人 于2017年提出的 Stiefel流形吉布斯采样器（下文简称流形吉布斯）。

除非另有说明，CALVI 均按照算法 1 中的停止规则终止，容差为 $\epsilon = 10^{-6}$，最大迭代次数为 $T = 10{,}000$。对于基于MCMC的方法（MH-Gibbs 和流形吉布斯），每条链运行 $10{,}000$ 次迭代，并将前 5,000次迭代作为预烧期丢弃。尽管基于优化的方法与基于抽样的方法对迭代的定义有所不同，但这一选择旨在使各方法的计算预算大致相当。

全文中，上标 $*$ 表示参数的真实值。我们根据式（4）中的响应包络模型生成 100 个重复数据集，其中 $n = 100, 200, 500, 1000, r = 20, p = 7$，包络的每个真实维数为 $u^* = 2, 5$。$\boldsymbol{\mu}^*$, $\boldsymbol{\eta}^*$ 和 $\boldsymbol{A}^*$ 的元素分别独立地从均匀分布 Uniform (0, 10)、Uniform (0, 10) 和 Uniform (-1, 1) 中抽取。矩阵 $\boldsymbol{\Omega}^*$ 和$\boldsymbol{\Omega}_0^*$ 均为对角矩阵，其对角元素分别独立地从 Uniform(0, 1) 和 Uniform(5, 10) 中抽取。

我们对每个参数指定如下弥散先验：$\boldsymbol{\eta} \sim \mathcal{MN}(\mathbf{0}, \boldsymbol{\Omega}\ 10^6 \boldsymbol{I}_p)$，$\boldsymbol{A} \sim \mathcal{MN}(\mathbf{0}, 10^6 \boldsymbol{I}_{r-u}, 10^6 \boldsymbol{I}_u)$，$\boldsymbol{\Omega} \sim \mathcal{IW}_u(u, 10^{-6}\boldsymbol{I}_u)$，以及 $\boldsymbol{\Omega}_0 \sim \mathcal{IW}_{r-u}(r-u, 10^{-6}\boldsymbol{I}_{r-u})$。这些先验设定与以下作者的模拟研究中所使用的设定相同：Chakraborty 和 Su (2024a）。对于流形吉布斯抽样器，它直接在斯蒂费尔流形上对包络子空间进行参数化，且不涉及 $\boldsymbol{A}$-参数化，我们采用以下文献中使用的常规非信息先验：Khare 等人(2017）。具体而言，对定义包络子空间的正交归一基矩阵施加均匀（Haar）先验分布，同时对 $\boldsymbol{\Omega}$ 和 $\boldsymbol{\Omega}_0$ 施加弱信息对角先验。由于参数化存在这些根本差异，各方法之间的先验分布无法精确匹配；因此，每种方法均在其标准弥散先验设定下进行评估。

在这项模拟研究中，包络维数 u被视为未知，并根据数据进行估计。对于贝叶斯方法，我们通过模型平均来估计 u，其中边际似然采用基于贝叶斯信息准则（Kass 和 Raftery，1995）的近似。具体而言，u的后验分布近似为：

$$p(u = \mathcal{M} \mid \mathbb{Y}) = \frac{\exp\left(-\mathrm{BIC}(\mathcal{M})/2\right)\ \pi(u = \mathcal{M})}{\sum_{\mathcal{M}'=0}^{r} \exp\left(-\mathrm{BIC}(\mathcal{M}')/2\right)\ \pi(u = \mathcal{M}')}, \quad \mathcal{M} = 0, \ldots, r,$$

其中 $\mathrm{BIC}(\mathcal{M}) = -2\ \hat{}\mathcal{L}(\mathcal{M}) + d_{\mathcal{M}}\log(n)$。这里，对于 CALVI，$\hat{}\mathcal{L}(\mathcal{M})$ 表示在变分后验均值处计算的对数似然；对于每种马尔可夫链蒙特卡罗方法，则表示在后验样本中的最大值处计算的对数似然。响应包络模型的有效参数个数 $d_{\mathcal{M}}$ 定义为 $r + r(r+1)/2 + up$。

100 个重复数据集的包络维数后验概率均值 u 见表 1。总体而言，随着样本量增加，三种方法都越来越集中于真实的包络维数。当 $u^* = 2$时，CALVI 对$u = 2$ 在 $n = 100$时赋予的后验概率为 0.684，其余的大部分后验概率质量落在 $u = 3$ （0.270）上。MH–Gibbs 在 $n = 100$ 时给出的概率略高，为 0.749，并且同样将其余的大部分后验概率质量放在 $u = 3$ （0.215）上。随着 n 增加，CALVI 和 MH–Gibbs 都迅速集中于正确的维数，在 $n = 200$ 时达到 0.905，并在 $n = 500$时达到至少 0.987，且在 $n = 1000$时基本达到 1.000。

相比之下，流形–Gibbs采样器得到的维度后验分布集中得多，在所考察的所有样本量下，都将 1.000 的质量赋予 $u = 2$ 。当 $u^* = 5$ 时，CALVI 和 MH–Gibbs 同样将大部分后验概率质量赋予正确的维数 $n = 100$ （分别为 0.833 和 0.808），其余概率主要落在 $u = 6$ 上。随着 n 增加，这种集中趋势迅速增强；在 $n = 200$ 时，CALVI 达到 0.993（MH–Gibbs 为 0.938），到 $n = 500$ 时，两种方法基本都以至少 0.996 的概率选择 $u = 5$。在所考察的所有样本量下，Manifold–Gibbs 采样器对 $u = 5$ 赋予的后验概率均为 1.000。

ˆ为评估 β的估计精度，我们使用贝叶斯模型平均（贝叶斯模型平均）定义 $\boldsymbol{\beta}$ 如下：

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \sum_{\mathcal{M}=0}^{r} \mathbb{E}(\boldsymbol{\beta} \mid u = \mathcal{M}, \mathbb{Y})\, p(u = \mathcal{M} \mid \mathbb{Y}).$$

We c ˆ对每个复制数据集 k 计算了均方误差（均方误差），记为均方误差$_k = \|\boldsymbol{\beta}_k - \boldsymbol{\beta}^*\|$ $_{\mathrm{F}}^2$.

在表2中，我们基于100个重复数据集，用平均均方误差 $= \frac{1}{100}\sum_{k=1}^{100}$均方误差$_k$ 及相应的标准差 $\sqrt{\frac{1}{100}\sum_{k=1}^{100}$（均方误差$_k$ –均方误差）^{2} 汇总了ˆ $\boldsymbol{\beta}$ 的均方误差。对于$u^* = 2$，CALVI在最小样本量下的均方误差略大（在$n = 100$处为2.15，标准差1.13），高于MH–Gibbs（1.74，标准差0.69）和Manifold–Gibbs（1.51，标准差0.42）。然而，随着 n 增大，这一差距迅速缩小。到 $n = 500$时，三种方法的均方误差基本相同（0.28，标准差0.08）；到 $n = 1000$ 时，它们的均方误差几乎难以区分（0.13–0.14，标准差相当）。对于 $u^* = 5$，可观察到类似的收敛模式。在 $n = 100$处，CALVI的均方误差略大（3.02，标准差0.75），高于MH–Gibbs（2.87，标准差0.54）和Manifold–Gibbs（2.72，标准差0.60）。然而，从 $n = 200$ 起，三种方法给出几乎相同且单调递减的均方误差，在$n = 1000$处约为0.24–0.25。

相比之下，ADVI 在两种包络设置下都表现出显著更大的估计误差和明显更高的变异性。对于 $u^* = 2$，平均均方误差在 $n = 100$(389.88，标准差为 119.83) 时极度膨胀；尽管随着 n 的增加而急剧下降，但即使在 $n = 1000$(4.91，标准差为 33.43) 时，仍然不稳定且高度分散。对于 $u^* = 5$，这种不稳定性更加明显：在所有样本量下，ADVI 产生的均方误差都非常大且变异性很高（例如，在 $n = 100$ 时为 617.26，标准差为 267.91；在 $n = 1000$ 时为 83.49，标准差为 123.61）。这些结果表明，在标准欧几里得参数化下，朴素的基于梯度的变分推断在包络模型中可能存在数值脆弱性，尤其是在包络维数中等或较大时。

100 个重复数据集的平均计算时间见表 3。报告的时间包括拟合所有候选维度 $u = 1, \ldots, 20$ 以构建基于BIC的权重。在这两种 $u^* \in \{2, 5\}$ 情景下，CALVI 都比基于MCMC的方法快几个数量级。当 $u^* = 2$时，在所考虑的样本量范围内，CALVI 耗时 11.8–33.0 秒，而 MH–Gibbs 耗时 2850.7–3075.7 秒，Manifold–Gibbs 耗时 13101.5–26629.7 秒。当 $u^* = 5$时，CALVI 耗时 14.0–19.9 秒，相比之下，MH–Gibbs 耗时 3350.1–3526.1 秒，Manifold–Gibbs 耗时 12295.3–26112.1 秒。与 MH–Gibbs 相比，CALVI 的运行时间约为其 0.38%–1.16%（与 Manifold–Gibbs 相比仅约为 0.04%–0.25%），且这些比例会随着 n 增大而降低，体现了 CALVI 的可扩展性。

表1：在 $r = 20$、 $p = 7$和 $u^* \in \{2, 5\}$条件下，按方法计算的包络维数 u 的后验概率均值。结果为100次重复试验的平均值。

	CALVI				MH–Gibbs				Manifold–Gibbs			
n	$u \le 1$	$u = 2$	$u = 3$	$4 \le u$	$u \le 1$	$u = 2$	$u = 3$	$4 \le u$	$u \le 1$	$u = 2$	$u = 3$	$4 \le u$
100	0.000	0.684	0.270	0.045	0.000	0.749	0.215	0.036	0.000	1.000	0.000	0.000
200	0.000	0.905	0.094	0.001	0.000	0.905	0.095	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000
500	0.000	0.997	0.003	0.000	0.000	0.987	0.013	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000
1000	0.000	1.000	0.000	0.000	0.000	0.999	0.001	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000

(a) 真实 u为2。

n	$u \le 4$	$u = 5$	$u = 6$	$7 \le u$	$u \le 4$	$u = 5$	$u = 6$	$7 \le u$	$u \le 4$	$u = 5$	$u = 6$	$7 \le u$
100	0.000	0.833	0.156	0.011	0.000	0.808	0.180	0.011	0.000	1.000	0.000	0.000
200	0.000	0.993	0.007	0.000	0.000	0.938	0.062	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000
500	0.000	1.000	0.000	0.000	0.000	0.996	0.004	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000
1000	0.000	1.000	0.000	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000

(b) 真实 u为5。

我们在图1中比较了 CALVI 与两种 MCMC 方法（MH–Gibbs 和 Manifold–Gibbs）得到的后验密度。图中展示了 $\boldsymbol{\beta}$中每个元素的边际后验密度。总体而言，所有方法都能令人满意地恢复真实系数。在该重复样本中，两种 MCMC 采样器得出的边际分布几乎无法区分。与 MCMC 基准方法相比，CALVI 得出的若干系数的边际后验分布略为集中，尤其是顶端u行。这种对后验变异性的轻微低估，可能是由通过 $\boldsymbol{A}$进行重新参数化所致：在变分近似下，与包络子空间相关的变异性可能会部分转移到其他模型成分中。由于 CALVI 采用 MFVF，这些成分之间的残余依赖未能得到充分捕捉，因此边际方差可能会略微收缩，同时保留后验中心。

6.2 真实数据分析

我们将响应包络模型应用于女性乳腺组织数据，检验社会经济压力是否会影响代谢，进而导致与黑人女性和白人女性乳腺癌风险相关的 N-糖基化变化。从印第安纳大学西蒙癌症中心的 Susan G. Komen乳腺癌基金会组织库获取了正常乳腺组织样本，样本来自 43 名黑人女性（BW）和 43 名白人女性（WW），她们依据 Gail评分均属于乳腺癌 5年风险较高者。收集了社会经济数据，包括 Gail评分、年龄、体质指数（BMI）、家庭收入、教育程度（大学和研究生院）以及婚姻状况。由于缺少这些变量的信息，我们排除了 13 名 BW 和 13 名 WW。为了解可能导致乳腺癌风险的 N-聚糖变化，我们通过质谱成像鉴定出 53 种 N-聚糖

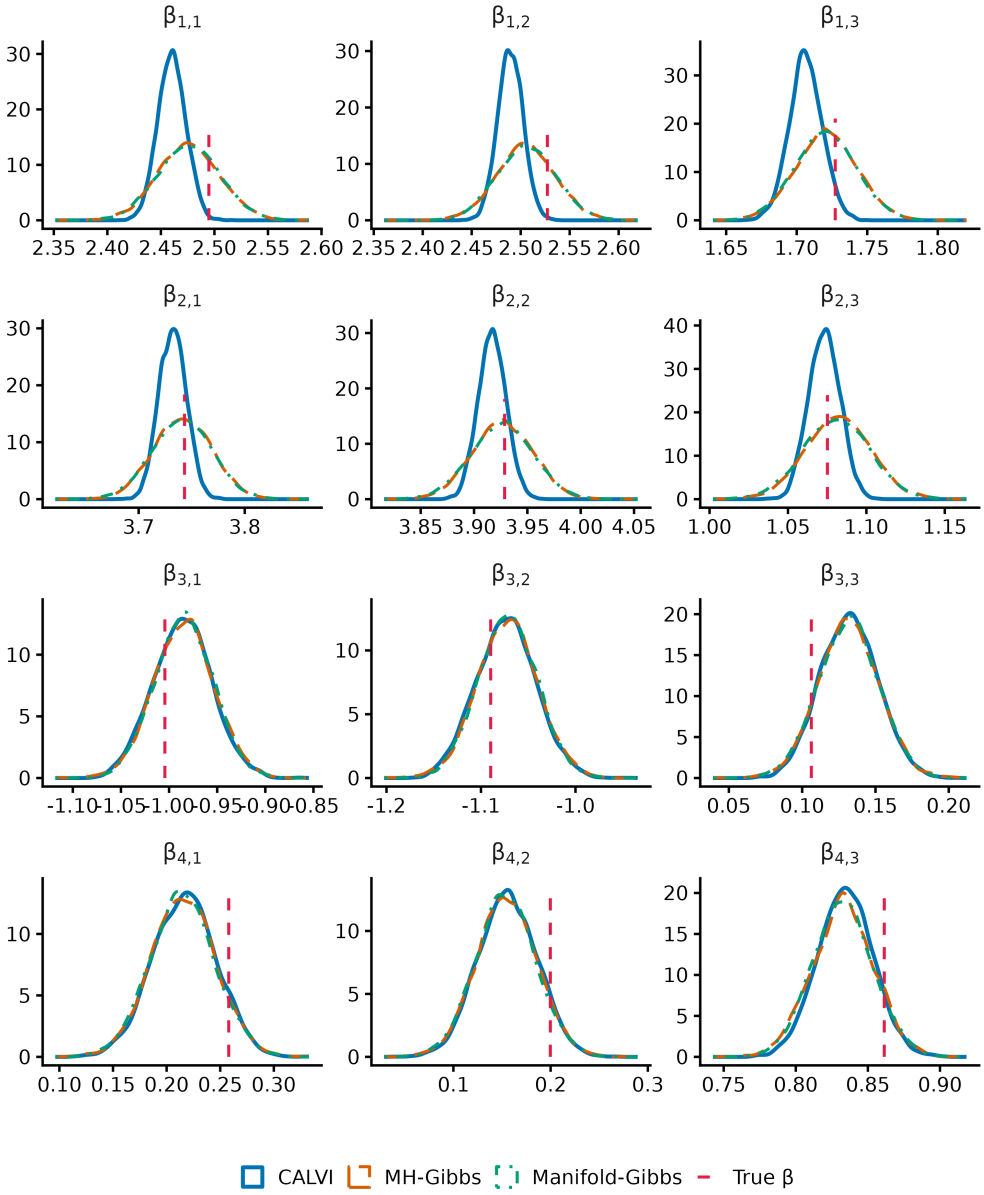


图1：基于第一个重复样本的模拟数据得到的 β_{ij}、 $i = 1$、……、3、 $j = 1$、……、3 的边际后验分布。红色点线表示参数的真实值。其余系数的边际密度见图 S1 和图 S2。

表2：不同方法下 $\boldsymbol{\beta}$ （对各坐标求和）的均方误差——包括通过 CALVI 实现的贝叶斯模型平均、MH–Gibbs、Manifold–Gibbs 和 ADVI——其中 $r = 20$、 $p = 7$ 和 $u^* \in \{2, 5\}$。数值为100次重复试验的均值（标准差）。对于 ADVI，仅报告真实包络维数为 $u = u^*$ 时的结果。

方法	$n = 100$	$n = 200$	$n = 500$	$n = 1000$
CALVI	2.15 (1.13)	0.86 (0.43)	0.28 (0.08)	0.14 (0.04)
MH–Gibbs	1.74 (0.69)	0.80 (0.31)	0.28 (0.08)	0.13 (0.04)
Manifold–Gibbs	1.51 (0.42)	0.73 (0.22)	0.28 (0.08)	0.13 (0.04)
ADVI	389.88 (119.83)	10.205 (51.28)	3.66 (29.95)	4.91 (33.43)
(a) 真正的 u是 2。				
CALVI	3.02 (0.75)	1.32 (0.25)	0.50 (0.09)	0.25 (0.05)
MH–Gibbs	2.87 (0.54)	1.33 (0.25)	0.49 (0.09)	0.24 (0.04)
Manifold–Gibbs	2.72 (0.60)	1.31 (0.16)	0.48 (0.05)	0.25 (0.03)
ADVI	617.26 (267.91)	111.01 (128.82)	65.11 (102.74)	83.49 (123.61)
(b) 真正的 u为 5。				

表3：在 $u = 1, \ldots, 20$ 次重复试验中，平均总 CPU时间（秒）（$r = 20$, $p = 7$;$u^* \in \{2, 5\}$）。

	CALVI	MH–Gibbs	Manifold–Gibbs
$n = 100$	33.0	2850.7	13101.5
$n = 200$	17.7	2892.6	16447.2
$n = 500$	12.6	2970.8	17838.3
$n = 1000$	11.8	3075.7	26629.7
(a) 真实 $u = 2$			
$n = 100$	19.9	3350.1	12295.3
$n = 200$	14.9	3377.3	14010.1
$n = 500$	14.5	3431.0	19384.1
$n = 1000$	14.0	3526.1	26112.1
(b) 真实 $u = 5$			

方法。此外，我们还将通过受试者工作特征曲线下面积（曲线下面积）测得在 BW 和 WW 之间表现出显著区分能力的 10 种（共 53 种）N-聚糖作为响应变量（p < 0.0004）。有关数据处理的更多详细信息，请参见Rujchanarong 等人(2022)。

我们将响应包络模型拟合到数据（$\mathbf{Y}_i$，$\mathbf{X}_i$）上，其中每组有 $i = 1$、.....、30 个受试者，$\mathbf{Y}_i \in \mathbb{R}^{10}$ 表示第 i位受试者的 N-聚糖质量。预测变量向量$\mathbf{X}_i \in \mathbb{R}^8$ 划分为$\mathbf{X}_i = \left((\mathbf{X}_i^{(1)})^\top \ (\mathbf{X}_i^{(2)})^\top \right)^\top$，其中$\mathbf{X}_i^{(1)} \in \{0, 1\}^4$ 包含以下二元指示变量：

表 4：白人女性和黑人女性不同估计方法的自助法均方根误差（RMSE）。

方法	白人女性	黑人女性
CALVI	0.0053 (0.0125)	0.0073 (0.0057)
MH–Gibbs	0.0373 (0.0168)	0.0517 (0.0241)

职业或技术学校状况、副学士学位状况、单身状况和已婚状况；$\mathbf{X}_i^{(2)} \in \mathbb{R}^4$ 则包含连续变量：Gail评分、年龄（年）、体质指数和家庭收入。所有预测变量均经过标准化，响应变量经过对数转换。

CALVI 和 MH–Gibbs 均选择了包络维数 $u = 1$。表 4 报告了回归系数的残差自助法均方根误差（RMSE）（$B = 1000$）。在两组中，CALVI 的 RMSE 均显著低于 MH–Gibbs（白人女性为 0.0053 对 0.0373；黑人女性为 0.0073 对 0.0517），这表明 CALVI 点估计对重抽样变异性的敏感度较低。MH–Gibbs 的自助法 RMSE 偏高，可能反映了在这一小样本情形下，似然驱动提议所带来的额外蒙特卡罗变异性。尽管 Manifold–Gibbs 采样器被纳入模拟研究，但由于其计算成本显著较高，未纳入自助法分析。具体而言，残差自助法需要重新拟合模型 $B = 1000$ 次，因此在这种情况下，Manifold–Gibbs 方法在计算上并不实际。图 2显示，若干 N-聚糖与黑人女性的年龄有很强的关联，而与白人女性的关联总体较弱。在计算方面，我们生成了 50,000 个 MH–Gibbs 样本，并舍弃前 50% 作为预烧期，以确保后验摘要充分稳定。白人女性和黑人女性分别耗时 988.0 秒和 955.7 秒。相比之下，CALVI 分别在 1.5 秒和 7.7 秒内收敛（最多迭代 50,000 次）。可复现代码见 https://github.com/Seunghyeon-Kim-stat/env-LVI。

7 总结与讨论

我们提出了一种新颖的重新参数化方法，并采用 CALVI 提高贝叶斯响应包络模型的计算效率。据我们所知，这是首次将变分推断框架引入包络模型，同时保留大多数参数的共轭性，并高效处理其余的非共轭块。除了方法上的发展，我们还为用于非共轭块的 CALVI 拉普拉斯更新提供了理论依据，证明其渐近上与相应的精确 CAVI 更新在全变差距离意义下相一致（经过通常的 $\sqrt{n}$ 重新缩放后）。

–

模拟研究和真实数据分析表明，CALVI 在保持有竞争力的推断性能的同时，能够显著提升计算效率。除了本文研究的响应包络模型外，同样的重新参数化与更新策略还可推广至其他具有包络型结构的贝叶斯模型。

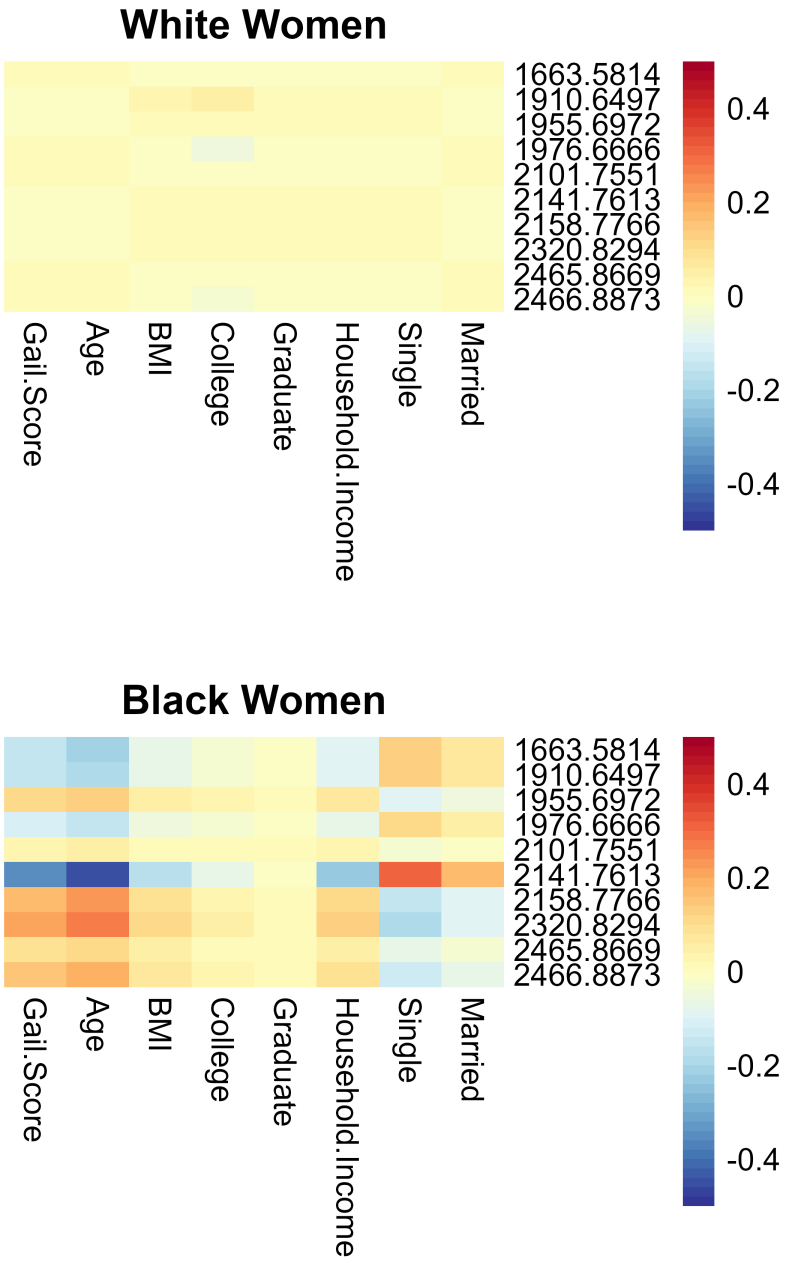


图 2：使用 CALVI算法在响应包络模型下估计的各组回归系数矩阵热图。行对应 N-聚糖（响应变量），列对应预测变量。色条表示系数值的大小和方向。

MFVF 的一个普遍局限是可能低估后验不确定性。在我们的设定中，图 1 显示，这种低估在 u 的前几行中 $\boldsymbol{\beta}$更加明显。这种现象似乎反映了平均场分解、通过 $\boldsymbol{\Gamma}$ 进行的参数化 $\boldsymbol{A}$以及所提出的重新参数化之间的相互作用。要减轻这种影响，可能需要更丰富的变分族（例如，采用结构化协方差、分块依赖或其他超越 MFVF 的扩展），或采用能够减弱后验依赖程度的替代参数化；我们将这些方向留待未来研究。

《贝叶斯包络模型的拉普拉斯变分推断》的补充材料

补充材料安排如下。第S1节详细推导了主论文中指出的计算瓶颈。第 S2 节介绍坐标上升拉普拉斯变分推断（CALVI）算法的实现细节。第S3 节讨论了 CALVI 对贝叶斯预测变量包络模型的影响。第 S4 节和 S5 节分别证明定理 1 和2。最后，第 S6 节报告了贝叶斯响应包络模型和预测变量包络模型的补充模拟结果。

记号

全文中，$\|\cdot\|_2$ 表示欧几里得范数，$\|\cdot\|_F$表示弗罗贝尼乌斯范数，$\|\cdot\|_{op}$ 表示谱范数。算子向量化$(\cdot)$表示按列向量化。对于 $a, b \in \mathbb{N}$，$\mathcal{K}_{a,b}$ 表示$(ab) \times (ab)$交换矩阵，其满足：对任意 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{a\times b}$，向量化$(\boldsymbol{A}^\top) = \mathcal{K}_{a,b}$ 向量化$(\boldsymbol{A})$。我们将 $\mathcal{MN}(\cdot)$记为矩阵正态分布，将 $\mathcal{IW}(\cdot)$记为逆威沙特分布。除非另有说明，为便于阅读，我们省略迭代指标(t)。 $\mathcal{C}_d$ 表示 $d \times d$ 对称正定矩阵的集合。

S1 计算问题

在本节中，我们给出 $\boldsymbol{A}$坐标目标函数（11）的显式形式，以及使主要计算瓶颈得以显式呈现的导数表达式（第4.1节）。

S1.1 $\boldsymbol{A}$ 更新的局部目标函数

令第 t 次迭代时关于 $\boldsymbol{A}$ 坐标的目标函数为

$$
\begin{aligned}
f^{(t)}(\boldsymbol{A}) &:= \mathbb{E}_{q^{(t)}_{-\boldsymbol{A}}}\left[\log p(\boldsymbol{A} \mid \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}_0, \mathbb{Y})\right] \\
&= \mathbb{E}_{q^{(t)}_{-\boldsymbol{A}}}\Bigg[-\frac{1}{2}\operatorname{tr}\Big[\underbrace{\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})^\top\Big(\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}^\top\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}} + \boldsymbol{B}_0\boldsymbol{M}\boldsymbol{B}_0^\top\Big)\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})\,\boldsymbol{\Omega}^{-1}}_{(i)}\Big] - \frac{1}{2}\operatorname{tr}\Big[\underbrace{\boldsymbol{\Gamma}_0(\boldsymbol{A})^\top\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}^\top\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}\boldsymbol{\Gamma}_0(\boldsymbol{A})\,\boldsymbol{\Omega}_0^{-1}}_{(ii)}\Big] \\
&\quad + \operatorname{tr}\Big[\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})^\top\Big(\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}^\top\mathbb{X}\boldsymbol{\eta}^\top + \boldsymbol{B}_0\boldsymbol{M}\boldsymbol{\eta}^\top\Big)\boldsymbol{\Omega}^{-1}\Big] - \frac{1}{2}\operatorname{tr}\Big[\boldsymbol{V}_0^{(A)-1}\boldsymbol{A}^\top\boldsymbol{U}_0^{(A)-1}\boldsymbol{A}\Big] \\
&\quad + \operatorname{tr}\Big[\boldsymbol{V}_0^{(A)-1}\boldsymbol{A}_0^\top\boldsymbol{U}_0^{(A)-1}\boldsymbol{A}\Big]\Bigg] \;+\; const., \qquad \text{(S1)}
\end{aligned}
$$

其中，$\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}} = \mathbb{Y} - \mathbf{1}_n\boldsymbol{\mu}^\top$ 和 $\mathbf{1}_n$ 是由 n 个 1 组成的向量。目标函数 $f^{(t)}(\boldsymbol{A})$ 是从式（7）中的未归一化对数后验 $\log\, p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\eta}, \Omega, \Omega 0, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{Y})$ 得到的：收集所有依赖于 $\boldsymbol{A}$ 的项，并对 $q^{(t)}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\eta}, \Omega, \Omega_0)$ 取期望。

S1.2 交换微分与期望的合理性说明

主要瓶颈在于代数运算，并且在完整数据层面就已显现。命题 3证明了可以交换微分与期望，因此相同的结构也适用于

$f_{(t)}(\boldsymbol{A})$.

命题3（微分与期望的交换（一阶））。令 $\boldsymbol{Z}:=(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\eta},\Omega,\Omega_0)$，并考虑式（7）中的完整数据对数后验 $\log\, p(\boldsymbol{Z},\boldsymbol{A}\mid\mathbb{Y}_n)$。固定一个紧邻域$\mathcal{N}:=\{\boldsymbol{A}:\ \|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}^\star\|_F\le\rho\}$。那么存在一个可测函数 $h_1(\boldsymbol{Z})$，且与 $\boldsymbol{A}$ 无关，使得对所有 $\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}$，

$$\big\|\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\log p(\boldsymbol{Z},\boldsymbol{A}\mid\mathbb{Y}_n)\big\|_{op}\ \le\ h_1(\boldsymbol{Z}),\qquad \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{Z})}[\,h_1(\boldsymbol{Z})\,]<\infty,$$

用于 *CALVI* 的变分因子 $q(\boldsymbol{Z})=q(\boldsymbol{\mu})\ q(\boldsymbol{\eta})\ q(\boldsymbol{\Omega})\ q(\boldsymbol{\Omega}_0)$。因此，对每个$\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}$，

$$\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\int q(\boldsymbol{Z})\log p(\boldsymbol{Z},\boldsymbol{A}\mid\mathbb{Y}_n)\,d\boldsymbol{Z}\ =\ \int q(\boldsymbol{Z})\,\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\log p(\boldsymbol{Z},\boldsymbol{A}\mid\mathbb{Y}_n)\,d\boldsymbol{Z}.$$

证明见第 S1.5 节。

逆平方根因子的通用记号

在第 S1 节中，瓶颈在于对形如 $(\boldsymbol{U}^\top\boldsymbol{U})^{-1/2}$ 的因子求导。为避免重复展开，我们采用以下记号。

设 $\boldsymbol{U}\in\mathbb{R}^{r\times k}$ 列满秩，并定义

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{U}):=\boldsymbol{U}^\top\boldsymbol{U},\qquad \boldsymbol{F}(\boldsymbol{U}):=\boldsymbol{J}(\boldsymbol{U})^{-1/2},\qquad \boldsymbol{P}(\boldsymbol{U}):=\boldsymbol{J}(\boldsymbol{U})^{-1},$$

以及克罗内克和矩阵

$$\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{U}):=\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U})\otimes\boldsymbol{I}_k+\boldsymbol{I}_k\otimes\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U})\in\mathbb{R}^{k^2\times k^2},$$

and

$$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{U}):=\boldsymbol{P}(\boldsymbol{U})\otimes\boldsymbol{P}(\boldsymbol{U})\boldsymbol{U}^\top\ +\ (\boldsymbol{P}(\boldsymbol{U})\boldsymbol{U}^\top\otimes\boldsymbol{P}(\boldsymbol{U}))\,\mathcal{K}_{r,k}\in\mathbb{R}^{k^2\times(rk)}.$$

在响应包络模型中，此记号使用两次：(i) $\boldsymbol{U}=\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}$ 与 $k=u$和$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}})=\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^\top\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}$，(ii) $\boldsymbol{U}=\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}$与 $k=r-u$和 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}})=\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^\top\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}$。

S1.3 一阶导数与计算瓶颈

根据命题 3， $\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}f^{(t)}(\boldsymbol{A})$ 的主要瓶颈S1来自包络项 (S1)(i)–(ii)，它们通过正交归一因子依赖于 $\boldsymbol{A}$

$$\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})=\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}\big(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^\top\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}\big)^{-1/2},\qquad \boldsymbol{\Gamma}_0(\boldsymbol{A})=\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}\big(\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^\top\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}\big)^{-1/2}.$$

因此，该导数采用一般的链式法则形式

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\,\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})^\top}\mathrm{tr}\big[\boldsymbol{S}\,\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})\,\boldsymbol{M}\,\boldsymbol{\Gamma}^\top(\boldsymbol{A})\big]&=\frac{\partial}{\partial\,\mathrm{vec}(\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A}))^\top}\mathrm{tr}\big[\boldsymbol{S}\,\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})\,\boldsymbol{M}\,\boldsymbol{\Gamma}^\top(\boldsymbol{A})\big]\\&\quad\times\frac{\partial\,\mathrm{vec}\big(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^\top\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}})^{-1/2}\big)}{\partial\,\mathrm{vec}(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}})^\top}\frac{\partial\,\mathrm{vec}(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}})}{\partial\,\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})^\top},\end{aligned}\tag{S2}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\,\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})^\top}\mathrm{tr}\big[\boldsymbol{S}_0\,\boldsymbol{\Gamma}_0(\boldsymbol{A})\,\boldsymbol{M}_0\,\boldsymbol{\Gamma}_0^\top(\boldsymbol{A})\big]&=\frac{\partial}{\partial\,\mathrm{vec}(\boldsymbol{\Gamma}_0(\boldsymbol{A}))^\top}\mathrm{tr}\big[\boldsymbol{S}_0\,\boldsymbol{\Gamma}_0(\boldsymbol{A})\,\boldsymbol{M}_0\,\boldsymbol{\Gamma}_0^\top(\boldsymbol{A})\big]\\&\quad\times\frac{\partial\,\mathrm{vec}\big(\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^\top\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}})^{-1/2}\big)}{\partial\,\mathrm{vec}(\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}})^\top}\frac{\partial\,\mathrm{vec}(\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}})}{\partial\,\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})^\top}.\end{aligned}\tag{S3}$$

第一个因子在（S2）中是显式的：

$$\frac{\partial \operatorname{tr}\left[\boldsymbol{S}\,\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})\,\boldsymbol{M}\,\boldsymbol{\Gamma}^{\top}(\boldsymbol{A})\right]}{\partial \operatorname{vec}(\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A}))^{\top}} = 2\,\boldsymbol{S}\,\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})\,\boldsymbol{M},$$

（$\boldsymbol{\Gamma}_0$ 项也可类似处理）。因此，计算瓶颈由逆平方根因子（$\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}$）$^{-1/2}$ 和（$\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}$）$^{-1/2}$的雅可比矩阵决定。

引理 4（逆平方根因子的紧凑雅可比矩阵）。 采用第 *S1.2* 节中的常用记号。对于任意满列秩 $\boldsymbol{U} \in \mathbb{R}^{r\times k}$,

$$\frac{\partial\ \operatorname{vec}\left(\boldsymbol{J}(\boldsymbol{U})^{-1/2}\right)}{\partial\ \operatorname{vec}(\boldsymbol{U})^{\top}} = -\,\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{U})^{-1}\,\boldsymbol{R}(\boldsymbol{U}).$$

应用引理 4 并令 $\boldsymbol{U} = \boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}$（因此 $k = u$），可得展开形式

$$\begin{aligned}\frac{\partial\ \operatorname{vec}\left((\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}})^{-1/2}\right)}{\partial\ \operatorname{vec}(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}})} = &-\left[(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}})^{-1/2}\otimes\boldsymbol{I}_u + \boldsymbol{I}_u\otimes(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}})^{-1/2}\right]^{-1}\\ &\times\Big[(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}})^{-1}\otimes(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}})^{-1}\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\\ &\qquad + (\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}})^{-1}\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\otimes(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}})^{-1}\mathcal{K}_{r,u}\Big],\end{aligned}\tag{S4}$$

并令 $\boldsymbol{U} = \boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}$（因此 $k = r-u$）应用该引理，可得

$$\begin{aligned}\frac{\partial\ \operatorname{vec}\left((\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}})^{-1/2}\right)}{\partial\ \operatorname{vec}(\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}})} = &-\left[(\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}})^{-1/2}\otimes\boldsymbol{I}_{r-u} + \boldsymbol{I}_{r-u}\otimes(\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}})^{-1/2}\right]^{-1}\\ &\times\Big[(\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}})^{-1}\otimes(\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}})^{-1}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\\ &\qquad + (\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}})^{-1}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\otimes(\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}})^{-1}\mathcal{K}_{r,(r-u)}\Big],\end{aligned}\tag{S5}$$

这与主论文中的瓶颈表达式（12）一致。

最后，其余线性雅可比矩阵为

$$\frac{\partial \operatorname{vec}(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}})}{\partial \operatorname{vec}(\boldsymbol{A})^{\top}} = \boldsymbol{I}_u\otimes\begin{pmatrix}\boldsymbol{0}_{u\times(r-u)}\\ \boldsymbol{I}_{r-u}\end{pmatrix},\qquad \frac{\partial \operatorname{vec}(\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}})}{\partial \operatorname{vec}(\boldsymbol{A})^{\top}} = \mathcal{K}_{(r-u),r}\begin{pmatrix}-\boldsymbol{I}_{u(r-u)}\\ \boldsymbol{0}_{(r-u)^2\times u(r-u)}\end{pmatrix}.$$

一阶导数的复杂度。主要开销来自求解涉及克罗内克和矩阵 $\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}) \in \mathbb{R}^{u^2\times u^2}$ 和 $\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}) \in \mathbb{R}^{(r-u)^2\times(r-u)^2}$的线性方程组，这些矩阵出现在 (S4)–(S5) 中。采用指数为 $\omega \approx 2.376$ 的通用快速矩阵求逆方法（Coppersmith 和 Winograd，1987年），这些方程组的求解复杂度分别为 $\mathcal{O}(u^{2\omega}) = \mathcal{O}(u^{4.752})$ 和 $\mathcal{O}((r-u)^{2\omega}) = \mathcal{O}((r-u)^{4.752})$。因此，计算 $\nabla_{\operatorname{vec}(\boldsymbol{A})} f^{(t)}(\boldsymbol{A})$ 的总体复杂度为

$$\mathcal{O}\big(\max\{u, r-u\}^{4.752}\big),$$

忽略低阶矩阵乘法项。

S1.4 二阶导数及组装完整海森矩阵的成本

再对（S4）–（S5）求导是可行的，并可得到显式的二阶导数。所得表达式仍可用闭式形式处理，但涉及额外的克罗内克和求解和克罗内克积，因此组装完整海森矩阵的代价远高于计算梯度。

引理5（逆平方根雅可比矩阵的方向二阶导数）。沿用第 *S1.2* 节中的常用记号。设 $\boldsymbol{U} \in \mathbb{R}^{r\times k}$ 列满秩，且 $\Delta\boldsymbol{U}$ 为扰动。定义

$$\Delta\boldsymbol{J}(\boldsymbol{U}) := \boldsymbol{U}^\top \Delta\boldsymbol{U} + (\Delta\boldsymbol{U})^\top \boldsymbol{U}, \qquad \Delta\boldsymbol{P}(\boldsymbol{U}) := -\boldsymbol{P}(\boldsymbol{U})\,\Delta\boldsymbol{J}(\boldsymbol{U})\,\boldsymbol{P}(\boldsymbol{U}).$$

设 $\Delta\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U})$ 由其向量化定义

$$\operatorname{vec}(\Delta\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U})) = -\,\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{U})^{-1}\,\operatorname{vec}\big(\boldsymbol{P}(\boldsymbol{U})\,\Delta\boldsymbol{J}(\boldsymbol{U})\,\boldsymbol{P}(\boldsymbol{U})\big).$$

则雅可比矩阵的方向导数在引理*4* 满足

$$\Delta\left(\frac{\partial\,\operatorname{vec}\big(\boldsymbol{J}(\boldsymbol{U})^{-1/2}\big)}{\partial\,\operatorname{vec}(\boldsymbol{U})^\top}\right) = \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{U})^{-1}\Big\{\Delta\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{U})\,\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{U})^{-1}\boldsymbol{R}(\boldsymbol{U}) - \Delta\boldsymbol{R}(\boldsymbol{U})\Big\},$$

其中

$$\Delta\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{U}) := \Delta\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U}) \otimes \boldsymbol{I}_k + \boldsymbol{I}_k \otimes \Delta\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U}),$$

and

$$\begin{aligned}\Delta\boldsymbol{R}(\boldsymbol{U}) = {} & (\Delta\boldsymbol{P}(\boldsymbol{U})) \otimes (\boldsymbol{P}(\boldsymbol{U})\boldsymbol{U}^\top) + \boldsymbol{P}(\boldsymbol{U}) \otimes (\Delta\boldsymbol{P}(\boldsymbol{U})\,\boldsymbol{U}^\top + \boldsymbol{P}(\boldsymbol{U})\,\Delta\boldsymbol{U}^\top) \\ & + \big(\Delta\boldsymbol{P}(\boldsymbol{U})\,\boldsymbol{U}^\top + \boldsymbol{P}(\boldsymbol{U})\,\Delta\boldsymbol{U}^\top\big) \otimes \boldsymbol{P}(\boldsymbol{U})\,\mathcal{K}_{r,k} + (\boldsymbol{P}(\boldsymbol{U})\boldsymbol{U}^\top) \otimes (\Delta\boldsymbol{P}(\boldsymbol{U}))\,\mathcal{K}_{r,k}.\end{aligned}$$

对组装 $\nabla^2_{\operatorname{vec}(\boldsymbol{A})} f^{(t)}(\boldsymbol{A})$的影响。设 $d := u(r-u)$为向量化$(\boldsymbol{A})$的维数。在欧几里得包络参数化中，组装完整海森矩阵 $\nabla^2_{\operatorname{vec}(\boldsymbol{A})} f^{(t)}(\boldsymbol{A}) \in \mathbb{R}^{d\times d}$ 需要将引理5应用于 $\boldsymbol{U} = \boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}$（连同 $k = u$）和 $\boldsymbol{U} = \boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}$（连同 $k = r-u$），并结合线性雅可比矩阵 ∂向量化$(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}})/\partial$向量化$(\boldsymbol{A})^\top$ 以及 ∂向量化$(\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}})/\partial$向量化$(\boldsymbol{A})^\top$。

海森矩阵的每一列（对应于向量化$(\boldsymbol{A})$中的一个坐标方向）需要对 $\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}})$和 $\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}})$进行常数次求解。使用指数为 $\omega \approx 2.376$的通用快速求逆，组装完整海森矩阵的相应代价为

$$\mathcal{O}\big(d\cdot\big(u^{2\omega} + (r-u)^{2\omega}\big)\big) = \mathcal{O}\big(u(r-u)\cdot\big(u^{4.752} + (r-u)^{4.752}\big)\big)\,,$$

加上低阶矩阵乘法和整理操作。在平衡情形 $u \asymp r-u$ 下，其规模为 $\mathcal{O}(u^{6.752})$。

备注（与重参数化目标函数的联系）。上述结果表明，Cook 等人 (2016) 的参数化具有显式的一阶和二阶导数，但海森矩阵的组装涉及对维度为 u^2 和 $(r-u)^2$的克罗内克和进行重复求解。这促使我们采用重参数化目标函数（16），其海森矩阵具有显式的闭式形式（见（S10）），并且只需对一个 $(r-u)u \times (r-u)u$ 矩阵求逆即可构造拉普拉斯协方差；对于本文所考虑的维度而言，这样的计算负担要小得多。

S1.5 命题 3 的证明

命题 *3* 的证明。在完整数据对数后验（7）中，参数 $\boldsymbol{A}$ 仅通过$\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})$、$\boldsymbol{\Gamma}_0(\boldsymbol{A})$以及先验项出现；其他部分均不含 $\boldsymbol{A}$。

步骤 1：对 $\mathcal{N}$ 以及 $\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\boldsymbol{\Gamma}$的 $\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\boldsymbol{\Gamma}_0$一致界。 与局部分析相同，取 $\mathcal{N}:=\{\boldsymbol{A}:\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}^\star\|_F\le\rho\}$ 并定义

$$B_{\mathcal{N}}:=\|\boldsymbol{A}^\star\|_F+\rho,\qquad \text{so that}\qquad \sup_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}}\|\boldsymbol{A}\|_F\le B_{\mathcal{N}}.$$

回顾 $\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^\top\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}=\boldsymbol{I}_u+\boldsymbol{A}^\top\boldsymbol{A}\succeq\boldsymbol{I}_u$ （$\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}$ 也同理），因此对于所有 $\boldsymbol{A}$，$\lambda_{\min}(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^\top\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}})\ge 1$。将 $\boldsymbol{A}$ 限制为 $\mathcal{N}$ 可得

$$\lambda_{\max}(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^\top\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}})\le 1+\|\boldsymbol{A}\|_{op}^2\le 1+\|\boldsymbol{A}\|_F^2\le 1+B_{\mathcal{N}}^2.$$

因此$(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^\top\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}})^{-1}$ 且$(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^\top\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}})^{-1/2}$ 在 $\mathcal{N}$ 上一致有界（将 $\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}$ 替换为 $\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}$ 亦然）。利用参数化(3)以及引理4（并运用标准矩阵微积分法则），可得一个有限常数 $K_1=K_1(B_{\mathcal{N}})<\infty$ 使得

$$\sup_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}}\|\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})\|_{op}\le K_1,\qquad \sup_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}}\|\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\boldsymbol{\Gamma}_0(\boldsymbol{A})\|_{op}\le K_1.$$

步骤 2：为梯度构造一个可积控制函数。 *(a)* **$\boldsymbol{A}$——梯度的一致界。**将 $\log p(\boldsymbol{Z},\ \boldsymbol{A}\mid\mathbb{Y}_n)$ 按（7）中的形式展开。只有涉及 $\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})$、$\boldsymbol{\Gamma}_0(\boldsymbol{A})$以及先验分布的项会对 $\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}$产生贡献。

先考虑这一项

$$T_1(\boldsymbol{A}):=-\frac{1}{2}\,\mathrm{tr}\Big[(\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})-\mathbb{X}\boldsymbol{\eta}^\top)\,\boldsymbol{\Omega}^{-1}\,(\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})-\mathbb{X}\boldsymbol{\eta}^\top)^\top\Big].$$

令 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{A}):=\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})-\mathbb{X}\boldsymbol{\eta}^\top$。根据标准矩阵微积分，$T_1$ 关于 $\boldsymbol{\Gamma}$ 的导数满足

$$\nabla_{\boldsymbol{\Gamma}}T_1(\boldsymbol{A})=-\,\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}^\top\boldsymbol{E}(\boldsymbol{A})\,\boldsymbol{\Omega}^{-1}.$$

利用链式法则以及 $\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})$ 上的算子界，

$$\|\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}T_1(\boldsymbol{A})\|_2\le\|\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})\|_{op}\,\|\nabla_{\boldsymbol{\Gamma}}T_1(\boldsymbol{A})\|_F\le K_1\,\|\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}^\top\boldsymbol{E}(\boldsymbol{A})\boldsymbol{\Omega}^{-1}\|_F.$$

此外，

$$\|\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}^\top\boldsymbol{E}(\boldsymbol{A})\boldsymbol{\Omega}^{-1}\|_F\le\|\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}\|_F\,\|\boldsymbol{E}(\boldsymbol{A})\|_F\,\|\boldsymbol{\Omega}^{-1}\|_{op},\qquad \|\boldsymbol{E}(\boldsymbol{A})\|_F\le\|\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}\|_F+\|\mathbb{X}\|_{op}\,\|\boldsymbol{\eta}\|_F,$$

（这里用到了 $\|\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})\|_{op}=1$）。因此，对于某个普适常数 C，

$$\sup_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}}\|\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}T_1(\boldsymbol{A})\|_2\le CK_1\,\|\boldsymbol{\Omega}^{-1}\|_{op}\Big(\|\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}\|_F^2+\|\mathbb{X}\|_{op}^2\|\boldsymbol{\eta}\|_F^2\Big).$$

接下来考虑 $\boldsymbol{\Gamma}_0$ 项

$$T_2(\boldsymbol{A}):=-\frac{1}{2}\,\mathrm{tr}\Big[\boldsymbol{\Gamma}_0^\top(\boldsymbol{A})\,\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}^\top\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}\,\boldsymbol{\Gamma}_0(\boldsymbol{A})\,\boldsymbol{\Omega}_0^{-1}\Big].$$

再次利用链式法则以及 $\sup_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}}\|\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\boldsymbol{\Gamma}_0(\boldsymbol{A})\|_{op}\le K_1$，

$$\sup_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}}\|\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}T_2(\boldsymbol{A})\|_2\le CK_1\,\|\boldsymbol{\Omega}_0^{-1}\|_{op}\,\|\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}\|_F^2,$$

对于某个通用常数 C。

其余所有 $\boldsymbol{A}$–依赖的似然项在（7）中均通过 $\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})$ 以仿射/二次方式出现，因此可以类似地用 $CK_1\|\boldsymbol{\Omega}^{-1}\|_{op}(1+\|\boldsymbol{\eta}\|_F^2)$ 进行控制；先验梯度 $\boldsymbol{Z}$与 – 无关，且在 $\mathcal{N}$上一致有界。将所有固定常数吸收到一个常数中，可得控制

$$\sup_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}} \left\|\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \log p(\boldsymbol{Z},\boldsymbol{A}\mid \mathbb{Y}_n)\right\|_2 \;\le\; h_1(\boldsymbol{Z}),$$

其中可以取

$$h_1(\boldsymbol{Z}) := C_1(B_{\mathcal{N}})\Big\{\|\boldsymbol{\Omega}^{-1}\|_{op}\big(\|\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}\|_F^2+\|\mathbb{X}\|_{op}^2\|\boldsymbol{\eta}\|_F^2+1\big)+\|\boldsymbol{\Omega}_0^{-1}\|_{op}\,\|\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}\|_F^2+1\Big\},$$

仅依赖于 $\mathcal{N}$ 至 $B_{\mathcal{N}}$ 以及固定超参数的有限常数 $C_1(B_{\mathcal{N}})$ s.

(b) 在 $q(\boldsymbol{Z})$下的可积性。 由于 $q(\boldsymbol{\mu})$ $q(\boldsymbol{\eta})$是高斯的，矩 $\mathbb{E}_q\|\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}\|_F^2<\infty$ 和$\mathbb{E}_q\|\boldsymbol{\eta}\|_F^2<\infty$ 有限。由于 $q(\boldsymbol{\Omega})$ $q(\boldsymbol{\Omega}_0)$是逆威沙特的，我们有 $\mathbb{E}_q\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Omega}^{-1})<\infty$ 和$\mathbb{E}_q\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Omega}_0^{-1})<\infty$，从而 $\mathbb{E}_q\|\boldsymbol{\Omega}^{-1}\|_{op}<\infty$ 和 $\mathbb{E}_q\|\boldsymbol{\Omega}_0^{-1}\|_{op}<\infty$。因此 $\mathbb{E}_q[h_1(\boldsymbol{Z})]<\infty$。

步骤3：沿坐标方向的控制收敛。 固定 $\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}$ 并考虑向量化$(\boldsymbol{A})$的第 j个坐标方向 e_j。对于足够小的 t，使得 $\boldsymbol{A}_t := \boldsymbol{A}+t$ 向量化$^{-1}(e_j)\in\mathcal{N}$，定义

$$\Delta_t(\boldsymbol{Z}) := \frac{\log p(\boldsymbol{Z},\boldsymbol{A}_t\mid\mathbb{Y}_n)-\log p(\boldsymbol{Z},\boldsymbol{A}\mid\mathbb{Y}_n)}{t}.$$

~ ~根据中值定理，对每个 $\boldsymbol{Z}$，存在位于 $\boldsymbol{A}$与 $\boldsymbol{A}_t$ 之间线段上的 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{Z},\ t)$，使得

$$\Delta_t(\boldsymbol{Z}) = \big\langle \nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\log p(\boldsymbol{Z},\tilde{\boldsymbol{A}}\mid\mathbb{Y}_n),\, e_j\big\rangle,$$

~因此 $|\Delta_t(\boldsymbol{Z})|\le\|\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\log\ p(\boldsymbol{Z},\ \boldsymbol{A}\mid\mathbb{Y}_n)\|_2\le h_1(\boldsymbol{Z})$。此外，$\Delta_t(\boldsymbol{Z})\ \to\partial_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})_j}\log\ p(\boldsymbol{Z},\ \boldsymbol{A}\ \mid\mathbb{Y}_n)$ 逐点收敛于 $t\to 0$。由于 h_1 是 q–可积的，由控制收敛定理可得

$$\partial_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})_j}\int q(\boldsymbol{Z})\log p(\boldsymbol{Z},\boldsymbol{A}\mid\mathbb{Y}_n)\,d\boldsymbol{Z} = \int q(\boldsymbol{Z})\,\partial_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})_j}\log p(\boldsymbol{Z},\boldsymbol{A}\mid\mathbb{Y}_n)\,d\boldsymbol{Z}.$$

对所有坐标执行此操作，即得向量恒等式

$$\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\int q(\boldsymbol{Z})\log p(\boldsymbol{Z},\boldsymbol{A}\mid\mathbb{Y}_n)\,d\boldsymbol{Z} = \int q(\boldsymbol{Z})\,\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\log p(\boldsymbol{Z},\boldsymbol{A}\mid\mathbb{Y}_n)\,d\boldsymbol{Z},$$

至此，证明完成。 □

S2 CALVI算法的细节

本节汇总了实现算法 1中的重参数化CALVI过程所需的显式表达式，重点介绍非共轭包络块 $\boldsymbol{A}$ 的拉普拉斯更新，以及共轭块的闭式CAVI更新。

在第 S2.1 节中，我们给出重参数化 $\boldsymbol{A}$ 坐标目标函数 $\tilde{f}^{(t)}(\boldsymbol{A})$ 在（16）中的矩展开表达式（相差一个与 $\boldsymbol{A}$ 无关的加性常数），该表达式以~ ~中心化设计 $\mathbb{X}_c$和条件 $q(\tilde{\boldsymbol{\mu}})\,(\tilde{\boldsymbol{\eta}})\,(\boldsymbol{\Omega})\,q(\boldsymbol{\Omega}_0)$ 下的变分参数表示。

在第S2.2节中，我们推导梯度和海森矩阵表示式（17）–（18）中出现的系数矩阵和标量（即 κ、$\boldsymbol{C}_1^{(t)}$、$\boldsymbol{C}_2^{(t)}$ 和 $\boldsymbol{C}_3^{(t)}$），并记录由此得到的共轭变分因子的闭式坐标更新。由于拉普拉斯因子 $q(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}))$

服从高斯分布，这些更新反复涉及关于C_A 和 D_A的迹二次型的高斯期望；为使表述更简洁，我们引入了克罗内克–迹算子及相关恒等式，并在整个推导过程中使用。

最后，第S2.3 节给出了用于算法˜证据下界 $\mathcal{L}(q)$ （21）中的近似完整表达式（包括常数项），用于算法1中的收敛监测。

˜S2.1 $f(A)$的显式形式。

在采用重新参数化（ $\tilde{f}^{(t)}(A)$ （16）的贝叶斯响应包络模型及 MFVF 方案（13）–（14）15）下，我们给出（16）中的局部目标 t的显式形式。回顾一下，在第

$$q(\tilde{\boldsymbol{\mu}}, \tilde{\boldsymbol{\eta}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0, \boldsymbol{A}) = q(\tilde{\boldsymbol{\mu}})\, q(\tilde{\boldsymbol{\eta}})\, q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}})\, q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0)\, q(\boldsymbol{A}),$$

其共轭变分因子为

$$\begin{aligned} q(\tilde{\boldsymbol{\mu}}) &\sim \mathcal{N}_r(\boldsymbol{\mu}_q, \boldsymbol{\Sigma}_q), \\ q(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) &\sim \mathcal{MN}_{u,p}(\boldsymbol{\eta}_q, \boldsymbol{U}_q^{(\boldsymbol{\eta})}, \boldsymbol{V}_q^{(\boldsymbol{\eta})}), \\ q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}) &\sim \mathcal{IW}_u(\boldsymbol{\Psi}_q^{(1)}, \nu_q^{(1)}), \\ q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0) &\sim \mathcal{IW}_{r-u}(\boldsymbol{\Psi}_q^{(0)}, \nu_q^{(0)}). \end{aligned} \tag{S6}$$

第 A个坐标的目标定义为

$$\tilde{f}(\boldsymbol{A}) := \mathbb{E}_{q(\tilde{\boldsymbol{\mu}})\, q(\tilde{\boldsymbol{\eta}})\, q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}})\, q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0)} \left[\log p\Big(\boldsymbol{A} \mid \tilde{\boldsymbol{\mu}}, \tilde{\boldsymbol{\eta}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0, \mathbb{Y} \Big) \right].$$

由于 $p(\boldsymbol{A} \mid \tilde{\boldsymbol{\mu}},\ \tilde{\boldsymbol{\eta}},\ \tilde{\boldsymbol{\Omega}}\ \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0,\ \mathbb{Y})$ 中的归一化常数不依赖于 $\boldsymbol{A}$, $\tilde{f}^{(t)}(\boldsymbol{A})$ 可等价地写为（相差一个与 $\boldsymbol{A}$ 无关的加性常数），并使用期望对数联合密度表示。

我们使用线性表示

$$\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{K} + \boldsymbol{L}\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{r \times u}, \qquad \boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{L} - \boldsymbol{K}\boldsymbol{A}^{\top} \in \mathbb{R}^{r \times (r-u)},$$

其中，固定选择矩阵 $\boldsymbol{K} \in \mathbb{R}^{r \times u}$ 和 $\boldsymbol{L} \in \mathbb{R}^{r \times (r-u)}$ 为

$$\boldsymbol{K} := \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_u \\ \boldsymbol{0}_{(r-u)\times u} \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{L} := \begin{pmatrix} \boldsymbol{0}_{u\times(r-u)} \\ \boldsymbol{I}_{r-u} \end{pmatrix}.$$

然后，使用（S6）所隐含的变分因子，如下所示:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}})}[\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}] &= \nu_q^{(1)}\, \boldsymbol{\Psi}_q^{(1)-1}, \\ \mathbb{E}_{q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0)}[\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0^{-1}] &= \nu_q^{(0)}\, \boldsymbol{\Psi}_q^{(0)-1}, \\ \mathbb{E}_{q(\tilde{\boldsymbol{\eta}})}[\tilde{\boldsymbol{\eta}}] &= \boldsymbol{\eta}_q, \\ \mathbb{E}_{q(\tilde{\boldsymbol{\mu}})}[\mathbb{Y}_{\tilde{\boldsymbol{\mu}}}^{\top}\mathbb{Y}_{\tilde{\boldsymbol{\mu}}}] &= (\mathbb{Y} - \boldsymbol{1}_n\boldsymbol{\mu}_q^{\top})^{\top}(\mathbb{Y} - \boldsymbol{1}_n\boldsymbol{\mu}_q^{\top}) + n\boldsymbol{\Sigma}_q, \end{aligned}$$

我们得到

$$\begin{aligned}\tilde{f}(\boldsymbol{A}) = &\frac{2n+\nu^{(1)}+\nu^{(0)}}{2}\log\left|\boldsymbol{I}_{r-u}+\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\top\right| \\ &-\frac{\nu_q^{(1)}}{2}\operatorname{tr}\Big(\boldsymbol{\Psi}_q^{(1)-1}\boldsymbol{A}^\top\boldsymbol{L}^\top\boldsymbol{G}_{r,1}\boldsymbol{L}\boldsymbol{A}\Big)-\frac{\nu_q^{(0)}}{2}\operatorname{tr}\Big(\boldsymbol{K}^\top\boldsymbol{G}_{r,2}\boldsymbol{K}\boldsymbol{A}^\top\boldsymbol{\Psi}_q^{(0)-1}\boldsymbol{A}\Big) \\ &-\frac{1}{2}\operatorname{tr}\Big(\boldsymbol{V}_0^{(A)-1}\boldsymbol{A}^\top\boldsymbol{U}_0^{(A)-1}\boldsymbol{A}\Big) \\ &-\operatorname{tr}\Big(\nu_q^{(1)}\boldsymbol{\Psi}_q^{(1)-1}(\boldsymbol{K}^\top\boldsymbol{G}_{r,1}\boldsymbol{L}-\boldsymbol{\eta}_q\boldsymbol{H}\boldsymbol{L})\boldsymbol{A}\Big)+\operatorname{tr}\Big(\nu_q^{(0)}\boldsymbol{K}^\top\boldsymbol{G}_{r,2}\boldsymbol{L}\boldsymbol{\Psi}_q^{(0)-1}\boldsymbol{A}\Big) \\ &+\operatorname{tr}\Big(\boldsymbol{V}_0^{(A)-1}\boldsymbol{A}_0^\top\boldsymbol{U}_0^{(A)-1}\boldsymbol{A}\Big)+const.,\end{aligned} \tag{S7}$$

其中

$$\begin{aligned}\boldsymbol{G}_{r,1} &:= (\mathbb{Y}-\mathbf{1}_n\boldsymbol{\mu}_q^\top)^\top(\mathbb{Y}-\mathbf{1}_n\boldsymbol{\mu}_q^\top)+n\boldsymbol{\Sigma}_q+\psi^{(1)}\boldsymbol{I}_r+\boldsymbol{B}_0\boldsymbol{M}\boldsymbol{B}_0^\top, \\ \boldsymbol{G}_{r,2} &:= (\mathbb{Y}-\mathbf{1}_n\boldsymbol{\mu}_q^\top)^\top(\mathbb{Y}-\mathbf{1}_n\boldsymbol{\mu}_q^\top)+n\boldsymbol{\Sigma}_q+\psi^{(0)}\boldsymbol{I}_r, \\ \boldsymbol{H} &:= \mathbb{X}_c^\top\mathbb{Y}+\boldsymbol{M}\boldsymbol{B}_0^\top,\end{aligned} \tag{S8}$$

其中，$\mathbf{1}_n$为全 n 向量，$\mathbb{X}_c=\mathbb{X}-\mathbf{1}_n\bar{X}^\top$为中心化设计矩阵。注意，$\mathbb{X}_c^\top\mathbf{1}_n=\mathbf{0}$，因此 $\mathbb{X}_c^\top(\mathbb{Y}-\mathbf{1}_n\tilde{\boldsymbol{\mu}}^\top)=\mathbb{X}_c^\top\mathbb{Y}$。常数项 表示不依赖于 $\boldsymbol{A}$ （但可能依赖于t）的项。

$\tilde{\nabla}_{\boldsymbol{A}}f(\boldsymbol{A})$ 和 $\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}f(\boldsymbol{A})$的显式形式

令 $\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A}):=\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^\top\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}=\boldsymbol{I}_{r-u}+\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\top$。 $\tilde{f}(\boldsymbol{A})$ 关于 $\boldsymbol{A}$ 的梯度如下 s:

$$\begin{aligned}\nabla_{\boldsymbol{A}}\tilde{f}(\boldsymbol{A}) = &(2n+\nu^{(1)}+\nu^{(0)})\,\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A} \\ &-\nu_q^{(1)}\boldsymbol{L}^\top\boldsymbol{G}_{r,1}\boldsymbol{L}\,\boldsymbol{A}\boldsymbol{\Psi}_q^{(1)-1}\;-\nu_q^{(0)}\boldsymbol{\Psi}_q^{(0)-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{K}^\top\boldsymbol{G}_{r,2}\boldsymbol{K}\;-\boldsymbol{U}_0^{(A)-1}\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{V}_0^{(A)-1} \\ &-\nu_q^{(1)}(\boldsymbol{K}^\top\boldsymbol{G}_{r,1}\boldsymbol{L}-\boldsymbol{\eta}_q\boldsymbol{H}\boldsymbol{L})^\top\boldsymbol{\Psi}_q^{(1)-1}+\nu_q^{(0)}\boldsymbol{\Psi}_q^{(0)-1}\boldsymbol{L}^\top\boldsymbol{G}_{r,2}^\top\boldsymbol{K} \\ &+\boldsymbol{U}_0^{(A)-1}\boldsymbol{A}_0\,\boldsymbol{V}_0^{(A)-1}.\end{aligned} \tag{S9}$$

关于向量化参数向量化$(\boldsymbol{A})$的二阶导数可表示为海森矩阵，具体如下:

$$\begin{aligned}\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\tilde{f}(\boldsymbol{A}) = &(2n+\nu^{(1)}+\nu^{(0)}) \\ &\times\Big[(\boldsymbol{I}_u-\boldsymbol{A}^\top\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A})\otimes\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A})^{-1}-\big((\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A})^\top\otimes(\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A})\big)\mathcal{K}_{(r-u),u}\Big] \\ &-\nu_q^{(1)}\boldsymbol{\Psi}_q^{(1)-1}\otimes(\boldsymbol{L}^\top\boldsymbol{G}_{r,1}\boldsymbol{L})-\nu_q^{(0)}(\boldsymbol{K}^\top\boldsymbol{G}_{r,2}\boldsymbol{K})\otimes\boldsymbol{\Psi}_q^{(0)-1}-\boldsymbol{V}_0^{(A)-1}\otimes\boldsymbol{U}_0^{(A)-1}.\end{aligned} \tag{S10}$$

S2.2 变分因子的更新

本小节给出了算法 1 中共轭变分因子的显式闭式坐标更新。这些更新是将通用 CAVI 公式（8）应用于 MFVF 假设下重新参数化的贝叶斯响应包络模型得到的。

针对 q（向量化（$\boldsymbol{A}$）） 的高斯期望算子。

在 CALVI 中，非共轭因子 $q(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}))$ 通过拉普拉斯近似进行更新，因此是高斯分布。当推导 $q(\boldsymbol{\Omega})$、 $q(\boldsymbol{\Omega}_0)$ 和 $q(\tilde{\boldsymbol{\mu}})$ 的共轭坐标更新时，我们

反复遇到关于该高斯因子的期望，其中涉及 $\boldsymbol{C_A}$ 和 $\boldsymbol{D_A}$ 的迹二次项。为确保取这些期望后仍保持标准的逆威沙特和正态形式，我们引入克罗内克–迹算子 $\mathrm{Ktr}[\cdot]$ 并给出两个恒等式（命题 6 和推论 7），以供后续更新中使用。

克罗内克–迹算子及其性质。

设 $d, n \in \mathbb{N}$。对于矩阵 $\boldsymbol{R} \in \mathbb{R}^{d\times d}$和分块矩阵 $\boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{dn\times dn}$，将其划分为 $n \times n$ 个分块 $\boldsymbol{B}_{ij} \in \mathbb{R}^{d\times d}$，定义克罗内克–迹算子 $\mathbf{Ktr}[\boldsymbol{R} \odot \boldsymbol{B}] \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 为

$$\big[\mathrm{Ktr}[\boldsymbol{R} \odot \boldsymbol{B}]\big]_{ij} := \mathrm{tr}(\boldsymbol{R}\,\boldsymbol{B}_{ij}), \qquad i, j = 1, \ldots, n.$$

（这里的 $\odot$ 是一个记号分隔符，表示迹内按分块进行乘积运算；它不是哈达玛积。）

命题 6（克罗内克–迹恒等式）。设 $\boldsymbol{R} \in \mathbb{R}^{d\times d}$、 $\boldsymbol{S} \in \mathbb{R}^{n\times n}$和 $\boldsymbol{H} \in \mathbb{R}^{dn\times dn}$，其中$\boldsymbol{H}$ 划分为 $n \times n$ 个分块 $\boldsymbol{H}_{ij} \in \mathbb{R}^{d\times d}$。则

$$\mathrm{tr}\big[(\boldsymbol{S} \otimes \boldsymbol{R})\boldsymbol{H}\big] \;=\; \mathrm{tr}\big(\boldsymbol{S}\ \mathrm{Ktr}[\boldsymbol{R} \odot \boldsymbol{H}]\big).$$

等价地，

$$\mathrm{tr}\big[(\boldsymbol{S}^\top \otimes \boldsymbol{R})\boldsymbol{H}\big] \;=\; \mathrm{tr}\big(\mathrm{Ktr}[\boldsymbol{R} \odot \boldsymbol{H}]\,\boldsymbol{S}^\top\big) \;=\; \mathrm{tr}\big(\mathrm{Ktr}[\boldsymbol{R} \odot \boldsymbol{H}]^\top \boldsymbol{S}\big).$$

在我们的应用中， $\boldsymbol{S}$ （例如， $\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}$ 或 $\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0^{-1}$）是对称的，因此可以省略转置。

推论 7给出了 $\boldsymbol{C_A}$ 与 $\boldsymbol{D_A}$ 中出现在共轭坐标更新里的迹二次项的高斯期望的闭式表达式。这些恒等式使我们能够将期望二次型改写为标准的逆威沙特/正态更新形式，使用ˆ仅拉普拉斯均值 $\boldsymbol{A}$与协方差 $\boldsymbol{\Sigma}$。

推论 7. 设 $m := r - u$ 并假设

$$\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}) \sim \mathcal{N}\big(\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}),\, \boldsymbol{\Sigma}\big), \qquad \boldsymbol{\Sigma} \in \mathbb{R}^{mu\times mu}.$$

定义

$$\boldsymbol{\Sigma}_T := \mathcal{K}_{m,u}\boldsymbol{\Sigma}\mathcal{K}_{m,u}^\top,$$

即向量化$(\boldsymbol{A}^\top)$的协方差。

假设 $\boldsymbol{C}_1 \in \mathbb{S}^r$ ，且 $\boldsymbol{C}_2$ 为维数相容的对称阵。则：

(1)

$$\mathbb{E}\big[\mathrm{tr}\{\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^\top \boldsymbol{C}_1 \boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}} \boldsymbol{C}_2\}\big] = \mathrm{tr}\big[\big(\boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}}^\top \boldsymbol{C}_1 \boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}} + \mathrm{Ktr}[\boldsymbol{L}^\top \boldsymbol{C}_1 \boldsymbol{L} \odot \boldsymbol{\Sigma}]\big)\,\boldsymbol{C}_2\big]\,.$$

(2)

$$\mathbb{E}\big[\mathrm{tr}\{\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^\top \boldsymbol{C}_1 \boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}} \boldsymbol{C}_2\}\big] = \mathrm{tr}\big[\big(\boldsymbol{D}_{\hat{\boldsymbol{A}}}^\top \boldsymbol{C}_1 \boldsymbol{D}_{\hat{\boldsymbol{A}}} + \mathrm{Ktr}[\boldsymbol{K}^\top \boldsymbol{C}_1 \boldsymbol{K} \odot \boldsymbol{\Sigma}_T]\big)\,\boldsymbol{C}_2\big]\,.$$

证明。 我们证明（1）；（2）的证明可类似得到。

回顾 $\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{K} + \boldsymbol{L}\boldsymbol{A}$ 以及向量化$(\boldsymbol{A}) \sim \mathcal{N}$(向量化$(\hat{\boldsymbol{A}})$ $\boldsymbol{\Sigma})$。记 $\boldsymbol{A} = \hat{\boldsymbol{A}} + (\boldsymbol{A} - \hat{\boldsymbol{A}})$并展开：

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\big[\mathrm{tr}\{\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^\top \boldsymbol{C}_1 \boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}} \boldsymbol{C}_2\}\big] &= \mathbb{E}\big[\mathrm{tr}\{(\boldsymbol{K} + \boldsymbol{L}\boldsymbol{A})^\top \boldsymbol{C}_1 (\boldsymbol{K} + \boldsymbol{L}\boldsymbol{A}) \boldsymbol{C}_2\}\big] \\ &= \mathbb{E}\Big[\mathrm{tr}\{(\boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}} + \boldsymbol{L}(\boldsymbol{A} - \hat{\boldsymbol{A}}))^\top \boldsymbol{C}_1 (\boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}} + \boldsymbol{L}(\boldsymbol{A} - \hat{\boldsymbol{A}})) \boldsymbol{C}_2\}\Big].\end{aligned}$$

交叉项因中心化而消失，得到

$$\mathbb{E}\big[\mathrm{tr}\{\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^\top \boldsymbol{C}_1 \boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}} \boldsymbol{C}_2\}\big] = \mathrm{tr}\{\boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}}^\top \boldsymbol{C}_1 \boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}} \boldsymbol{C}_2\} + \mathbb{E}\Big[\mathrm{tr}\{(\boldsymbol{A} - \hat{\boldsymbol{A}})^\top \boldsymbol{L}^\top \boldsymbol{C}_1 \boldsymbol{L} (\boldsymbol{A} - \hat{\boldsymbol{A}}) \boldsymbol{C}_2\}\Big].$$

利用恒等式

$$\mathrm{tr}\{\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{M} \boldsymbol{X} \boldsymbol{N}\} = \mathrm{vec}(\boldsymbol{X})^\top (\boldsymbol{N}^\top \otimes \boldsymbol{M})\ \mathrm{vec}(\boldsymbol{X}),$$

第二项变为

$$\mathbb{E}\Big[\mathrm{vec}(\boldsymbol{A} - \hat{\boldsymbol{A}})^\top (\boldsymbol{C}_2^\top \otimes \boldsymbol{L}^\top \boldsymbol{C}_1 \boldsymbol{L})\, \mathrm{vec}(\boldsymbol{A} - \hat{\boldsymbol{A}})\Big] = \mathrm{tr}\big[(\boldsymbol{C}_2^\top \otimes \boldsymbol{L}^\top \boldsymbol{C}_1 \boldsymbol{L})\, \boldsymbol{\Sigma}\big].$$

根据命题6，该迹可写为

$$\mathrm{tr}\big[\mathrm{Ktr}[\boldsymbol{L}^\top \boldsymbol{C}_1 \boldsymbol{L} \odot \boldsymbol{\Sigma}]\ \boldsymbol{C}_2\big].$$

合并各项，得到

$$\mathbb{E}\big[\mathrm{tr}\{\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^\top \boldsymbol{C}_1 \boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}} \boldsymbol{C}_2\}\big] = \mathrm{tr}\big[\big(\boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}}^\top \boldsymbol{C}_1 \boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}} + \mathrm{Ktr}[\boldsymbol{L}^\top \boldsymbol{C}_1 \boldsymbol{L} \odot \boldsymbol{\Sigma}]\big)\, \boldsymbol{C}_2\big],$$

由此证明了（1）。

对于（2），注意 $\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{L} - \boldsymbol{K}\boldsymbol{A}^\top$ 和 $\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}^\top) \sim \mathcal{N}(\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}^\top)\ \boldsymbol{\Sigma}_T)$，其中 $\boldsymbol{\Sigma}_T = \mathcal{K}_{m,u}\boldsymbol{\Sigma}\mathcal{K}_{m,u}^\top$。将 $\boldsymbol{A}$替换为 $\boldsymbol{A}^\top$，重复相同的论证即可得到所述结果。 □

更新 $q(\tilde{\boldsymbol{\eta}})$。

$$\begin{aligned}\log q(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) &\propto \mathbb{E}_{-q(\tilde{\boldsymbol{\eta}})}\Big[\log p(\tilde{\boldsymbol{\mu}}, \tilde{\boldsymbol{\eta}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{X}, \mathbb{Y})\Big], \\ &\propto -\frac{1}{2}\mathbb{E}_{q(\tilde{\boldsymbol{\mu}})q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}})q(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}))}\Big[\mathrm{tr}\Big[\Big(\tilde{\boldsymbol{\eta}}(\mathbb{X}_c^\top \mathbb{X}_c + \boldsymbol{M})\tilde{\boldsymbol{\eta}}^\top - 2\tilde{\boldsymbol{\eta}}(\mathbb{X}_c^\top \tilde{\mathbb{Y}}_{\boldsymbol{\mu}} + \boldsymbol{M}\boldsymbol{B}_0^\top)\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}\Big)\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}\Big]\Big] \\ &= -\frac{1}{2}\mathbb{E}_{q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}})q(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}))}\Big[\mathrm{tr}\Big[\big(\tilde{\boldsymbol{\eta}}(\mathbb{X}_c^\top \mathbb{X}_c + \boldsymbol{M})\tilde{\boldsymbol{\eta}}^\top - 2\tilde{\boldsymbol{\eta}}(\mathbb{X}_c^\top \mathbb{Y} + \boldsymbol{M}\boldsymbol{B}_0^\top)\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}\big)\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}\Big]\Big] \\ &= -\frac{1}{2}\mathbb{E}_{q(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}))}\Big[\mathrm{tr}\Big[\nu_q^{(1)}\big(\tilde{\boldsymbol{\eta}}(\mathbb{X}_c^\top \mathbb{X}_c + \boldsymbol{M})\tilde{\boldsymbol{\eta}}^\top - 2\tilde{\boldsymbol{\eta}}(\mathbb{X}_c^\top \mathbb{Y} + \boldsymbol{M}\boldsymbol{B}_0^\top)\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}\big)\boldsymbol{\Psi}_q^{(1)-1}\Big]\Big] \\ &= -\frac{1}{2}\,\mathrm{tr}\Big[\nu_q^{(1)}\big(\tilde{\boldsymbol{\eta}}(\mathbb{X}_c^\top \mathbb{X}_c + \boldsymbol{M})\tilde{\boldsymbol{\eta}}^\top - 2\tilde{\boldsymbol{\eta}}(\mathbb{X}_c^\top \mathbb{Y} + \boldsymbol{M}\boldsymbol{B}_0^\top)\boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}}\big)\boldsymbol{\Psi}_q^{(1)-1}\Big] \\ &\propto \mathrm{const.} - \frac{1}{2}\,\mathrm{tr}\Big[\boldsymbol{V}_q^{(\boldsymbol{\eta})-1}(\tilde{\boldsymbol{\eta}} - \boldsymbol{\eta}_q)^\top \boldsymbol{U}_q^{(\boldsymbol{\eta})-1}(\tilde{\boldsymbol{\eta}} - \boldsymbol{\eta}_q)\Big],\end{aligned}$$

其中 $\tilde{\mathbb{Y}}_{\tilde{\boldsymbol{\mu}}} = (\mathbb{Y} - \mathbf{1}_n\tilde{\boldsymbol{\mu}}^\top)$。

$$\begin{aligned}q(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) &\propto \mathcal{MN}_{u,p}(\boldsymbol{\eta}_q, \boldsymbol{U}_q^{(\boldsymbol{\eta})}, \boldsymbol{V}_q^{(\boldsymbol{\eta})}), \\ \boldsymbol{\eta}_q &= \boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}}^\top (\mathbb{X}_c^\top \mathbb{Y} + \boldsymbol{M}\boldsymbol{B}_0^\top)^\top (\mathbb{X}_c^\top \mathbb{X}_c + \boldsymbol{M})^{-1}, \\ \boldsymbol{U}_q^{(\boldsymbol{\eta})} &= \boldsymbol{\Psi}_q^{(1)}/\nu_q^{(1)}, \\ \boldsymbol{V}_q^{(\boldsymbol{\eta})} &= (\mathbb{X}_c^\top \mathbb{X}_c + \boldsymbol{M})^{-1}.\end{aligned}$$

$\tilde{}$ q 的更新($\boldsymbol{\Omega}$)。

$$
\begin{aligned}
\log q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}) &\propto \mathbb{E}_{-q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}})}\left[\log p(\tilde{\boldsymbol{\mu}}, \tilde{\boldsymbol{\eta}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{X}, \mathbb{Y})\right] \\
&\propto \text{const.} - \frac{n+\nu^{(1)}+u+p+1}{2}\log\left|\tilde{\boldsymbol{\Omega}}\right| \\
&\quad - \frac{1}{2}\mathbb{E}_{q(\tilde{\boldsymbol{\mu}})q(\text{vec}(\boldsymbol{A}))}\left[\text{tr}\left[\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^\top(\tilde{\mathbb{Y}}_{\boldsymbol{\mu}}^\top\tilde{\mathbb{Y}}_{\boldsymbol{\mu}} + \boldsymbol{B}_0\boldsymbol{M}\boldsymbol{B}_0^\top + \psi^{(1)}\boldsymbol{I}_r)\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}\right]\right] \\
&\quad - \frac{1}{2}\mathbb{E}_{q(\tilde{\boldsymbol{\mu}})q(\tilde{\boldsymbol{\eta}})q(\text{vec}(\boldsymbol{A}))}\left[-2\,\text{tr}\left[\tilde{\boldsymbol{\eta}}(\mathbb{X}_c^\top\tilde{\mathbb{Y}}_{\boldsymbol{\mu}} + \boldsymbol{M}\boldsymbol{B}_0^\top)\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}\right]\right] \\
&\quad - \frac{1}{2}\mathbb{E}_{q(\tilde{\boldsymbol{\eta}})}\left[\text{tr}\left[\tilde{\boldsymbol{\eta}}(\mathbb{X}_c^\top\mathbb{X}_c + \boldsymbol{M})\tilde{\boldsymbol{\eta}}^\top\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}\right]\right] \\
&= \text{const.} - \frac{n+\nu^{(1)}+u+p+1}{2}\log\left|\tilde{\boldsymbol{\Omega}}\right| \\
&\quad - \frac{1}{2}\mathbb{E}_{q(\text{vec}(\boldsymbol{A}))}\left[\text{tr}\left[\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^\top\boldsymbol{G}_{r,1}\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}\right]\right] \\
&\quad - \frac{1}{2}\mathbb{E}_{q(\tilde{\boldsymbol{\eta}})q(\text{vec}(\boldsymbol{A}))}\left[-2\,\text{tr}\left[\tilde{\boldsymbol{\eta}}(\mathbb{X}_c^\top\mathbb{Y} + \boldsymbol{M}\boldsymbol{B}_0^\top)\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}\right]\right] \\
&\quad - \frac{1}{2}\mathbb{E}_{q(\tilde{\boldsymbol{\eta}})}\left[\text{tr}\left[\tilde{\boldsymbol{\eta}}(\mathbb{X}_c^\top\mathbb{X}_c + \boldsymbol{M})\tilde{\boldsymbol{\eta}}^\top\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}\right]\right] \\
&= \text{const.} - \frac{n+\nu^{(1)}+u+p+1}{2}\log\left|\tilde{\boldsymbol{\Omega}}\right| \\
&\quad - \frac{1}{2}\mathbb{E}_{q(\text{vec}(\boldsymbol{A}))}\left[\text{tr}\left[\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^\top\boldsymbol{G}_{r,1}\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}\right]\right] \\
&\quad - \frac{1}{2}\mathbb{E}_{q(\text{vec}(\boldsymbol{A}))}\left[-2\,\text{tr}\left[\boldsymbol{\eta}_q(\mathbb{X}_c^\top\mathbb{Y} + \boldsymbol{M}\boldsymbol{B}_0^\top)\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}\right]\right] \\
&\quad - \frac{1}{2}\,\text{tr}\left[\left(\text{tr}\left[(\mathbb{X}_c^\top\mathbb{X}_c + M)\boldsymbol{V}_q^{(\eta)}\right]\boldsymbol{U}_q^{(\eta)} + \boldsymbol{\eta}_q(\mathbb{X}_c^\top\mathbb{X}_c + \boldsymbol{M})\boldsymbol{\eta}_q^\top\right)\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}\right] \\
&= \text{const.} - \frac{n+\nu^{(1)}+u+p+1}{2}\log\left|\tilde{\boldsymbol{\Omega}}\right| \\
&\quad - \frac{1}{2}\,\text{tr}\left[\left(\boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}}^\top\boldsymbol{G}_{r,1}\boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}}\right.\right. \\
&\qquad \left.\left. + \text{Ktr}\left[\boldsymbol{L}^\top\boldsymbol{G}_{r,1}\boldsymbol{L}\odot H(\text{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}))\right]\right)\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}\right] \qquad \text{(S11)} \\
&\quad - \frac{1}{2}\,\text{tr}\left[-2\boldsymbol{\eta}_q(\mathbb{X}_c^\top\mathbb{Y} + \boldsymbol{M}\boldsymbol{B}_0^\top)\boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}}\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}\right] \\
&\quad - \frac{1}{2}\,\text{tr}\left[\left(\text{tr}\left[(\mathbb{X}_c^\top\mathbb{X}_c + M)\boldsymbol{V}_q^{(\eta)}\right]\boldsymbol{U}_q^{(\eta)} + \boldsymbol{\eta}_q(\mathbb{X}_c^\top\mathbb{X}_c + \boldsymbol{M})\boldsymbol{\eta}_q^\top\right)\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}\right] \\
&\propto \text{const.} - \frac{\nu_q^{(1)}+u+1}{2}\log|\tilde{\boldsymbol{\Omega}}| - \frac{1}{2}\,\text{tr}\left[\boldsymbol{\Psi}_q^{(1)}\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}\right], \\
q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}) &\propto \mathcal{IW}_u(\boldsymbol{\Psi}_q^{(1)}, \nu_q^{(1)}), \\
\boldsymbol{\Psi}_q^{(1)} &= \boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}}^\top\boldsymbol{G}_{r,1}\boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}} + \text{Ktr}\left[\boldsymbol{L}^\top\boldsymbol{G}_{r,1}\boldsymbol{L}\odot H(\text{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}))\right] \\
&\qquad - 2\boldsymbol{\eta}_q\left(\mathbb{X}_c^\top\mathbb{Y} + \boldsymbol{M}\boldsymbol{B}_0^\top\right)\boldsymbol{C} \quad + \text{tr}\left[\left(\mathbb{X}_c^\top\mathbb{X}_c + \boldsymbol{M}\right)\boldsymbol{V}^{(\eta)}\right]\boldsymbol{U}^{(\eta)} + \boldsymbol{\eta}_q(\mathbb{X}_c^\top\mathbb{X}_c + \boldsymbol{M})\boldsymbol{\eta}_q^\top, \\
H(\text{向量化}(\hat{\boldsymbol{A}})) &: \\
&= -\left[\nabla^2_{\text{vec}(\boldsymbol{A})}\tilde{f}(\hat{\boldsymbol{A}})\right]^{-1}, \\
\nu_q^{(1)} &= n + \nu^{(1)} + p.
\end{aligned}
$$

此处 $\boldsymbol{G}_{r,\,1}$ 见（S8）。方程（S11）是推论 7 （1）的结果。

$\tilde{}$ q（$\boldsymbol{\Omega}_0$）的更新。

$$
\begin{aligned}
\log q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0) &\propto \mathbb{E}_{-q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0)}\left[\log p(\tilde{\boldsymbol{\mu}}, \tilde{\boldsymbol{\eta}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{X}, \mathbb{Y})\right] \\
&\propto const. - \frac{n+\nu^{(0)}+r-u+1}{2}\log\left|\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0\right| \\
&\quad - \frac{1}{2}\mathbb{E}_{q(\tilde{\boldsymbol{\mu}})q(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}))}\left[\mathrm{tr}\left[\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^{\top}(\tilde{\mathbb{Y}}_{\boldsymbol{\mu}}^{\top}\tilde{\mathbb{Y}}_{\boldsymbol{\mu}} + \psi^{(0)}\boldsymbol{I}_r)\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0^{-1}\right]\right] \\
&= const. - \frac{n+\nu^{(0)}+r-u+1}{2}\log\left|\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0\right| \\
&\quad - \frac{1}{2}\mathbb{E}_{q(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}))}\left[\mathrm{tr}\left[\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\boldsymbol{G}_{r,2}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0^{-1}\right]\right] \\
&= const. - \frac{n+\nu^{(0)}+r-u+1}{2}\log\left|\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0\right| \\
&\quad - \frac{1}{2}\mathrm{tr}\left[\left(\boldsymbol{D}_{\hat{\boldsymbol{A}}}^{\top}\boldsymbol{G}_{r,2}\boldsymbol{D}_{\hat{\boldsymbol{A}}} + \mathrm{Ktr}[\boldsymbol{K}^{\top}\boldsymbol{G}_{r,2}\boldsymbol{K}\odot\tilde{H}(\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}))]\right)\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0^{-1}\right] \qquad \text{(S12)} \\
&\propto \mathrm{const.} - \frac{\nu_q^{(0)}+r-u+1}{2}\log|\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0| - \frac{1}{2}\mathrm{tr}\left[\boldsymbol{\Psi}_q^{(0)}\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0^{-1}\right], \\
q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0) &\propto \mathcal{IW}_{r-u}(\boldsymbol{\Psi}_q^{(0)}, \nu_q^{(0)}), \\
\boldsymbol{\Psi}_q^{(0)} &= \boldsymbol{D}_{\hat{\boldsymbol{A}}}^{\top}\boldsymbol{G}_{r,2}\boldsymbol{D}_{\hat{\boldsymbol{A}}} + \mathrm{Ktr}[\boldsymbol{K}^{\top}\boldsymbol{G}_{r,2}\boldsymbol{K}\odot\tilde{H}(\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}))], \\
\tilde{H}(\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}})) &= \mathcal{K}_{(r-u),u}H(\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}))\mathcal{K}_{u,(r-u)}, \\
\nu_q^{(0)} &= n+\nu^{(0)}.
\end{aligned}
$$

此处$\boldsymbol{G}_{r,\ 2}$见式（S8）。式（S12是推论 7（2）的结果。

更新为 $q(\tilde{\boldsymbol{\mu}})$。

$$
\begin{aligned}
\log q(\tilde{\boldsymbol{\mu}}) &\propto \mathbb{E}_{-q(\tilde{\boldsymbol{\mu}})}\left[\log p(\tilde{\boldsymbol{\mu}}, \tilde{\boldsymbol{\eta}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{X}, \mathbb{Y})\right], \\
&\propto -\frac{1}{2}\mathbb{E}_{q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}})q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0)q(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}))}\left[\mathrm{tr}\left[(\tilde{\mathbb{Y}}_{\boldsymbol{\mu}}^{\top}\tilde{\mathbb{Y}}_{\boldsymbol{\mu}})\left(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^{\top} + \boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0^{-1}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\right)\right]\right] \\
&= -\frac{1}{2}\mathbb{E}_{q(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}))}\left[\mathrm{tr}\left[(\tilde{\boldsymbol{\mu}}\tilde{\boldsymbol{\mu}}^{\top} - 2\bar{\boldsymbol{Y}}\tilde{\boldsymbol{\mu}}^{\top})n\left(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}\nu_q^{(1)}\boldsymbol{\Psi}_q^{(1)-1}\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^{\top} + \boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}\nu_q^{(0)}\boldsymbol{\Psi}_q^{(0)-1}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\right)\right]\right] \\
&= -\frac{1}{2}\mathrm{tr}\left[(\tilde{\boldsymbol{\mu}}\tilde{\boldsymbol{\mu}}^{\top} - 2\bar{\boldsymbol{Y}}\tilde{\boldsymbol{\mu}}^{\top})(\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2)\right] \\
&\propto \mathrm{const.} - \frac{1}{2}\mathrm{tr}\left[(\tilde{\boldsymbol{\mu}}-\boldsymbol{\mu}_q)^{\top}\boldsymbol{\Sigma}_q^{-1}(\tilde{\boldsymbol{\mu}}-\boldsymbol{\mu}_q)\right], \\
q(\tilde{\boldsymbol{\mu}}) &\propto \mathcal{N}_r(\boldsymbol{\mu}_q, \boldsymbol{\Sigma}_q), \\
\boldsymbol{\mu}_q &= \bar{\boldsymbol{Y}}, \quad \boldsymbol{\Sigma}_q = (\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2)^{-1}, \\
\boldsymbol{S}_1 &= n\nu_q^{(1)}\left(\boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}}\boldsymbol{\Psi}_q^{(1)-1}\boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}}^{\top} + \boldsymbol{L}\,\mathrm{Ktr}\left[\boldsymbol{\Psi}_q^{(1)-1}\odot\tilde{H}(\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}))\right]\boldsymbol{L}^{\top}\right), \\
\boldsymbol{S}_2 &= n\nu_q^{(0)}\left(\boldsymbol{D}_{\hat{\boldsymbol{A}}}\boldsymbol{\Psi}_q^{(0)-1}\boldsymbol{D}_{\hat{\boldsymbol{A}}}^{\top} + \boldsymbol{K}\,\mathrm{Ktr}\left[\boldsymbol{\Psi}_q^{(0)-1}\odot H(\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}))\right]\boldsymbol{K}^{\top}\right).
\end{aligned}
$$

S2.3 近似 ELBO

$$
\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{L}}(q) =& \mathbb{E}_{q(\cdot)}\Big[\log p(\tilde{\boldsymbol{\mu}}, \tilde{\boldsymbol{\eta}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{X}, \mathbb{Y}) - \log q(\tilde{\boldsymbol{\mu}}, \tilde{\boldsymbol{\eta}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0, \boldsymbol{A})\Big] \\
\approx & \ const. + \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{A})}\Big[\tilde{f}(\hat{\boldsymbol{A}}) + \frac{1}{2}\operatorname{vec}(\boldsymbol{A}-\hat{\boldsymbol{A}})^\top \tilde{f}''(\hat{\boldsymbol{A}})\operatorname{vec}(\boldsymbol{A}-\hat{\boldsymbol{A}})\Big] - \mathbb{E}_{q(\tilde{\boldsymbol{\mu}}, \tilde{\boldsymbol{\eta}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0, \boldsymbol{A})}\Big[\log q(\tilde{\boldsymbol{\mu}}, \tilde{\boldsymbol{\eta}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0, \boldsymbol{A})\Big] \\
= & -\frac{up}{2}\log(2\pi) - \frac{u}{2}\log|\boldsymbol{M}^{-1}| - \frac{\nu^{(1)}u + \nu^{(0)}(r-u)}{2}\log(2) \\
& - \log(\Gamma_u(\frac{\nu^{(1)}}{2})) + \frac{\nu^{(1)}}{2}\log|\boldsymbol{\Psi}| - \log(\Gamma_{r-u}(\frac{\nu^{(0)}}{2})) + \frac{\nu^{(0)}}{2}\log|\boldsymbol{\Psi}_0| \\
& - \frac{((r-u)u)}{2}\log(2\pi) - \frac{u}{2}\log|\boldsymbol{U}_0^{(\boldsymbol{A})}| - \frac{(r-u)}{2}\log|\boldsymbol{V}_0^{(\boldsymbol{A})}| \\
& + \frac{n+\nu^{(1)}+u+p+1}{2}\left(\sum_{s=1}^{u}\psi(\frac{\nu_q^{(1)}+(1-s)}{2}) + u\log(2) + \log\left|\boldsymbol{\Psi}_q^{(1)-1}\right|\right) \\
& + \frac{n+\nu^{(0)}+r-u+1}{2}\left(\sum_{s=1}^{r-u}\psi(\frac{\nu_q^{(0)}+(1-s)}{2}) + (r-u)\log(2) + \log\left|\boldsymbol{\Psi}_q^{(0)-1}\right|\right) \\
& - \frac{\nu_q^{(1)}}{2}\operatorname{tr}\left[\left(\operatorname{tr}[\left(\mathbb{X}_c^\top\mathbb{X}_c + \boldsymbol{M}\right)\boldsymbol{V}_q^{(\boldsymbol{\eta})}]\boldsymbol{U}_q^{(\boldsymbol{\eta})} + \boldsymbol{\eta}_q\left(\mathbb{X}_c^\top\mathbb{X}_c + \boldsymbol{M}\right)\boldsymbol{\eta}_q^\top\right)\boldsymbol{\Psi}_q^{(1)-1}\right] \\
& + \tilde{f}(\hat{\boldsymbol{A}}) - \frac{(r-u)u}{2} + \frac{r}{2}\log(2\pi e) + \frac{1}{2}\log|\boldsymbol{\Sigma}_q| + \frac{up}{2}\log(2\pi e) + \frac{p}{2}\log|\boldsymbol{U}_q^{(\eta)}| + \frac{u}{2}\log|\boldsymbol{V}_q^{(\eta)}| \\
& + \frac{\nu_q^{(1)}}{2}\log|\boldsymbol{\Psi}_q^{(1)-1}| + \frac{\nu_q^{(1)}u}{2}\log(2e) + \log\Gamma_u(\frac{\nu_q^{(1)}}{2}) \\
& - \frac{(\nu_q^{(1)}+u+1)}{2}\left(\psi_u(\frac{\nu_q^{(1)}}{2}) + u\log(2) + \log|\boldsymbol{\Psi}_q^{(1)-1}|\right) \\
& + \frac{\nu_q^{(0)}}{2}\log|\boldsymbol{\Psi}_q^{(0)-1}| + \frac{\nu_q^{(0)}(r-u)}{2}\log(2e) + \log\Gamma_{r-u}(\frac{\nu_q^{(0)}}{2}) \\
& - \frac{(\nu_q^{(0)}+(r-u)+1)}{2}\left(\psi_{r-u}(\frac{\nu_q^{(0)}}{2}) + (r-u)\log(2) + \log|\boldsymbol{\Psi}_q^{(0)-1}|\right) \\
& + \frac{(r-u)u}{2}\log(2\pi e) + \frac{1}{2}\log|H(\operatorname{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}))|,
\end{aligned}
\tag{S13}
$$

其中， ψ_d 表示标准多元 digamma 函数， Γ_d 表示标准多元伽马函数。

S3 C贝叶斯预测变量包络模型的 ALVI 算法 el

本节将 CALVI 扩展到贝叶斯预测变量包络模型。设$\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^p$ 表示预测变量， $\boldsymbol{Y} \in \mathbb{R}^r$ 表示响应，并设 $m < p$ 为包络维数。在欧几里得包络参数化 $\{\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})\ \boldsymbol{\Gamma}_0(\boldsymbol{A})\}$下，包络矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{(p-m)\times m}$ 通过逆平方根因子进入似然，因此，对 $\boldsymbol{A}$ 进行直接拉普拉斯更新时，会遇到第4.1节讨论的相同克罗内克和导数瓶颈。因此，我们采用与第 4.2 节类似的重新参数化，从$\boldsymbol{A}$坐标目标函数中去除占主导地位的逆平方根项，从而为 $\boldsymbol{A}$得到一种易于处理且数值稳定的拉普拉斯更新。

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{Y}} + \boldsymbol{\eta}^\top\boldsymbol{\Gamma}^\top(\boldsymbol{A})(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}) + \boldsymbol{\epsilon}, \quad \boldsymbol{\epsilon} \sim \mathcal{N}_r\left(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}}\right), \\
&\boldsymbol{X} \sim \mathcal{N}_p\left(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}, \boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{X}}^{(1)}\boldsymbol{\Gamma}^\top(\boldsymbol{A}) + \boldsymbol{\Gamma}_0(\boldsymbol{A})\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{X}}^{(0)}\boldsymbol{\Gamma}_0^\top(\boldsymbol{A})\right),
\end{aligned}
\tag{S14}
$$

其中 $\boldsymbol{\mu_Y} \in \mathbb{R}^r$、$\boldsymbol{\mu_X} \in \mathbb{R}^p$、$\boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^{m\times r}$、$\boldsymbol{\Sigma_{Y|X}} \in \mathcal{C}_r$、$\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{X}}^{(1)} \in \mathcal{C}_m$，以及$\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{X}}^{(0)} \in \mathcal{C}_{p-m}$。于是

$$\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A}) := \boldsymbol{C_A}(\boldsymbol{C_A}^\top \boldsymbol{C_A})^{-1/2}, \qquad \boldsymbol{C_A} \equiv \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_m \\ \boldsymbol{A} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{p\times m},$$

$$\boldsymbol{\Gamma}_0(\boldsymbol{A}) := \boldsymbol{D_A}(\boldsymbol{D_A}^\top \boldsymbol{D_A})^{-1/2}, \qquad \boldsymbol{D_A} \equiv \begin{pmatrix} -\boldsymbol{A}^\top \\ \boldsymbol{I}_{p-m} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{p\times(p-m)},$$

以及 $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\eta}^\top \boldsymbol{\Gamma}^\top(\boldsymbol{A})$。

我们考虑以下先验设定：

(i) $\pi(\boldsymbol{\mu_X}) \propto 1$ 和 $\pi(\boldsymbol{\mu_Y}) \propto 1$ 分别是关于 $\mathbb{R}^p$ 和 $\mathbb{R}^r$的非正常平坦先验。

(ii) $\boldsymbol{\Sigma_{Y|X}} \sim \mathcal{IW}_r(\boldsymbol{\Psi_Y}, \nu_{\boldsymbol{Y}})$，其中 $\boldsymbol{\Psi_Y} \in \mathcal{C}_r$ 和 $\nu_{\boldsymbol{Y}} > r-1$。(iii) $\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{X}}^{(1)} \sim \mathcal{IW}_m(\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}}^{(1)}, \nu_{\boldsymbol{X}}^{(1)})$，其中 $\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}}^{(1)} \in \mathcal{C}_m$ 和 $\nu_{\boldsymbol{X}}^{(1)} > m-1$。(iv) $\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{X}}^{(0)} \sim \mathcal{IW}_{p-m}(\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}}^{(0)}, \nu_{\boldsymbol{X}}^{(0)})$，其中 $\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}}^{(0)} \in \mathcal{C}_{p-m}$ 和 $\nu_{\boldsymbol{X}}^{(0)} > p-m-1$。(v) $\boldsymbol{\eta} \mid \boldsymbol{A}, \boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{X}}^{(1)} \sim \mathcal{MN}_{m,\, r}((\boldsymbol{C_A}^\top \boldsymbol{C_A})^{1/2}\boldsymbol{C_A}^\top \boldsymbol{B}_0, \psi_0^{(\boldsymbol{\eta})}(\boldsymbol{C_A}^\top \boldsymbol{C_A})\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{X}}^{(1)}(\boldsymbol{C_A}^\top \boldsymbol{C_A})\boldsymbol{\Sigma_{Y|X}})$，其中 $\psi_0^{(\boldsymbol{\eta})} \in \mathbb{R}$，且 $\boldsymbol{B}_0 \in \mathbb{R}^{p\times r}$。

(vi) $\boldsymbol{A} \sim \mathcal{MN}_{(p-m)\,m}(\boldsymbol{A}_0, \boldsymbol{U}_0^{(A)}, \boldsymbol{V}_{(A)\,0})$，其中 $\boldsymbol{A}_0 \in \mathbb{R}^{(p-m)\times m}$，$\boldsymbol{U}_{(A)_0} \in \mathcal{C}_{p-m}$，且 $\boldsymbol{V}_{(A)_0} \in \mathcal{C}_m$。先验设定遵循 Chakraborty 和 Su (2024a)，但由于重新参数化，我们对 $\boldsymbol{\eta}$ 采用了略有不同的先验分布。

设 $(\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{Y}_1), \ldots, (\boldsymbol{X}_n, \boldsymbol{Y}_n)$ 是来自预测变量包络模型的 n 个独立观测。定义 $\mathbb{Y} = (\boldsymbol{Y}_1, \ldots, \boldsymbol{Y}_n)^\top \in \mathbb{R}^{n\times r}$ 和 $\mathbb{X} = (\boldsymbol{X}_1, \ldots, \boldsymbol{X}_n)^\top \in \mathbb{R}^{n\times p}$。则未归一化的后验分布为：

$$\begin{aligned}
&\log p(\boldsymbol{\mu}_Y, \boldsymbol{\mu}_X, \boldsymbol{\Sigma}_{Y|X}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{X}}^{(1)}, \boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{X}}^{(0)}, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{X}, \mathbb{Y}) = \\
&\quad const. - \frac{\nu_{\boldsymbol{Y}} + n + m + r + 1}{2}\log|\boldsymbol{\Sigma_{Y|X}}| - \frac{\nu_{\boldsymbol{X}}^{(1)} + n + m + 1}{2}\log|\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{X}}^{(1)}| - \frac{\nu_{\boldsymbol{X}}^{(0)} + n + (p-m) + 1}{2}\log|\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{X}}^{(0)}| \\
&\quad - \frac{r}{2}\log|\psi_0^{(\boldsymbol{\eta})}(\boldsymbol{C_A}^\top \boldsymbol{C_A})\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{X}}^{(1)}(\boldsymbol{C_A}^\top \boldsymbol{C_A})| \\
&\quad - \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left[(\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}} - \mathbb{X}_{\boldsymbol{\mu}}\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})\boldsymbol{\eta})\boldsymbol{\Sigma}_{Y|X}^{-1}(\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}} - \mathbb{X}_{\boldsymbol{\mu}}\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})\boldsymbol{\eta})^T\right] - \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left[\boldsymbol{\Gamma}^\top(\boldsymbol{A})\mathbb{X}_{\boldsymbol{\mu}}^\top \mathbb{X}_{\boldsymbol{\mu}}\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{A})\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{X}}^{(1)-1}\right] \qquad \text{(S15)} \\
&\quad - \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left[\boldsymbol{\Gamma}_0^\top(\boldsymbol{A})\mathbb{X}_{\boldsymbol{\mu}}^\top \mathbb{X}_{\boldsymbol{\mu}}\boldsymbol{\Gamma}_0(\boldsymbol{A})\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{X}}^{(0)-1}\right] \qquad \text{(S16)} \\
&\quad - \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left[\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}}^{-1}(\boldsymbol{\eta} - (\boldsymbol{C_A}^\top \boldsymbol{C_A})^{1/2}\boldsymbol{C_A}^\top \boldsymbol{B}_0)^\top \psi_0^{(\boldsymbol{\eta})-1}(\boldsymbol{C_A}^\top \boldsymbol{C_A})^{-1}\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{X}}^{(1)-1}(\boldsymbol{C_A}^\top \boldsymbol{C_A})^{-1}(\boldsymbol{\eta} - (\boldsymbol{C_A}^\top \boldsymbol{C_A})^{1/2}\boldsymbol{C_A}^\top \boldsymbol{B}_0)\right] \\
&\quad - \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left[\boldsymbol{\Sigma}_{Y|X}^{-1}\boldsymbol{\Psi_Y}\right] - \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left[\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{X}}^{(1)-1}\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}}^{(1)}\right] - \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left[\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{X}}^{(0)-1}\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}}^{(0)}\right] - \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left[\boldsymbol{V}_0^{(A)-1}(\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}_0)^\top \boldsymbol{U}_0^{(A)-1}(\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}_0)\right], \\
&\qquad \text{(S17)}
\end{aligned}$$

其中 $\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}} = (\mathbb{Y} - \mathbf{1}_n \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{Y}}^\top)$ 和 $\mathbb{X}_{\boldsymbol{\mu}} = (\mathbb{X} - \mathbf{1}_n \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}^\top)$。

如第4.1节所述，关于S15和S16式相对于 $\boldsymbol{A}$ 的导数在预测变量包络模型中会带来高昂的计算成本。现在考虑对后验分布进行重新参数化。特别是，$\boldsymbol{\eta}$ 的重新参数化不同于贝叶斯响应包络模型。

$$\begin{aligned}
\tilde{\boldsymbol{\eta}} &= (\boldsymbol{C_A}^\top \boldsymbol{C_A})^{-1/2}\boldsymbol{\eta}, \\
\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(1)} &= (\boldsymbol{C_A}^\top \boldsymbol{C_A})^{1/2}\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{X}}^{(1)}(\boldsymbol{C_A}^\top \boldsymbol{C_A})^{1/2}, \\
\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(0)} &= (\boldsymbol{D_A}^\top \boldsymbol{D_A})^{1/2}\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{X}}^{(0)}(\boldsymbol{D_A}^\top \boldsymbol{D_A})^{1/2}. \qquad \text{(S18)}
\end{aligned}$$

设 $\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}}^{(1)} = \psi_{\boldsymbol{X}}^{(1)} \boldsymbol{I}_m$ 和 $\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}}^{(0)} = \psi_{\boldsymbol{X}}^{(0)} \boldsymbol{I}_{p-m}$ 分别为某些正数常数 $\psi_{\boldsymbol{X}}^{(1)}$ 和 $\psi_{\boldsymbol{X}}^{(0)}$，则预测变量包络模型的重参数化后验分布如下。

$$
\begin{aligned}
&\log p(\boldsymbol{\mu}_Y, \boldsymbol{\mu}_X, \boldsymbol{\Sigma}_{Y|X}, \tilde{\boldsymbol{\eta}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(1)}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(0)}, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{X}, \mathbb{Y}) = \\
&\quad \text{const.} - \frac{\nu_{\boldsymbol{Y}} + n + m + r + 1}{2} \log |\boldsymbol{\Sigma}_{Y|X}| - \frac{\nu_{\boldsymbol{X}}^{(1)} + n + m + r + 1}{2} \log |\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(1)}| - \frac{\nu_{\boldsymbol{X}}^{(0)} + n + (p-m) + 1}{2} \log |\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(0)}| \\
&\quad + \frac{2n + \nu_{\boldsymbol{X}}^{(1)} + \nu_{\boldsymbol{X}}^{(0)}}{2} \log |\boldsymbol{I}_m + \boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{A}| \\
&\quad - \frac{1}{2} \operatorname{tr}\left[\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^\top (\mathbb{X}_{\boldsymbol{\mu}}^\top \mathbb{X}_{\boldsymbol{\mu}} + \psi_0^{(\boldsymbol{\eta})-1} \boldsymbol{B}_0 \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}}^{-1} \boldsymbol{B}_0^\top + \psi_{\boldsymbol{X}}^{(1)} \boldsymbol{I}_p) \boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}} \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(1)-1} \right] - \frac{1}{2} \operatorname{tr}\left[\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^\top \mathbb{X}_{\boldsymbol{\mu}}^\top \mathbb{X}_{\boldsymbol{\mu}} \boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}} \tilde{\boldsymbol{\eta}} \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}}^{-1} \tilde{\boldsymbol{\eta}}^\top \right] \\
&\quad - \frac{1}{2} \operatorname{tr}\left[-2(\psi_0^{(\boldsymbol{\eta})-1} \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(1)-1} \tilde{\boldsymbol{\eta}} \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}}^{-1} \boldsymbol{B}_0^\top + \tilde{\boldsymbol{\eta}} \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}}^{-1} \mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}^\top \mathbb{X}_{\boldsymbol{\mu}}) \boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}} \right] \\
&\quad - \frac{1}{2} \operatorname{tr}\left[\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^\top (\mathbb{X}_{\boldsymbol{\mu}}^\top \mathbb{X}_{\boldsymbol{\mu}} + \psi_{\boldsymbol{X}}^{(0)} \boldsymbol{I}_p) \boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}} \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(0)-1} \right] \\
&\quad - \frac{1}{2} \operatorname{tr}\left[(\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}}^\top \mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}} + \boldsymbol{\Psi}_Y) \boldsymbol{\Sigma}_{Y|X}^{-1} \right] - \frac{1}{2} \operatorname{tr}\left[\psi_0^{(\boldsymbol{\eta})-1} \tilde{\boldsymbol{\eta}} \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}}^{-1} \tilde{\boldsymbol{\eta}}^\top \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(1)-1} \right] - \frac{1}{2} \operatorname{tr}\left[\boldsymbol{V}_0^{(A)-1} (\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}_0)^\top \boldsymbol{U}_0^{(A)-1} (\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}_0) \right],
\end{aligned}
\tag{S19}
$$

将 MFVF 应用于重参数化参数，并选择与全条件形式匹配的族，但 $q(\boldsymbol{A})$ 除外：

$$
\begin{aligned}
q(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}, \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{Y}}, \tilde{\boldsymbol{\eta}}, \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(1)}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(0)}, \boldsymbol{A}) &= q(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}) q(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{Y}}) q(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) q(\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}}) q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(1)}) q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(0)}) q(\boldsymbol{A}) \\
q(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}) &\sim \mathcal{N}_p(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}_q}, \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{X}_q}) \\
q(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{Y}}) &\sim \mathcal{N}_r(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{Y}_q}, \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}_q}) \\
q(\operatorname{vec}(\tilde{\boldsymbol{\eta}})) &\sim \mathcal{N}_{mr}(\operatorname{vec}(\boldsymbol{\eta}_q), \boldsymbol{\Sigma}_q^{(\boldsymbol{\eta})}) \\
q(\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}}) &\sim \mathcal{IW}_r(\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{Y}_q}, \nu_{\boldsymbol{Y}_q}) \\
q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(1)}) &\sim \mathcal{IW}_m(\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}_q}^{(1)}, \nu_{\boldsymbol{X}_q}^{(1)}) \\
q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(0)}) &\sim \mathcal{IW}_{p-m}(\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}_q}^{(0)}, \nu_{\boldsymbol{X}_q}^{(0)})
\end{aligned}
\tag{S20}
$$

令 $\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{K} + \boldsymbol{L}\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{p \times m}$ 和 $\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{L} - \boldsymbol{K}\boldsymbol{A}^\top \in \mathbb{R}^{p \times (p-m)}$ 其中 $\boldsymbol{K} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_m \\ \boldsymbol{0} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{p \times m}$ 和 $\boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{I}_{p-m} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{p \times (p-m)}$。根据（S19）中的重参数化后验分布，我们可以定义 $\tilde{f}_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{A})$ 如下。

$$
\begin{aligned}
\tilde{f}_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{A}) \propto & \frac{(2n + \nu_{\boldsymbol{X}}^{(1)} + \nu_{\boldsymbol{X}}^{(0)})}{2} \log \left| \boldsymbol{I}_{p-m} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\top \right| \\
& - \frac{1}{2} \operatorname{tr}\left[\left(\boldsymbol{\eta}_q \nu_{\boldsymbol{Y}_q} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{Y}_q}^{-1} \boldsymbol{\eta}_q^\top + \operatorname{Ktr}\left[\nu_{\boldsymbol{Y}_q} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{Y}_q}^{-1} \odot \boldsymbol{\Sigma}_q^{(\boldsymbol{\eta})} \right] \right) \boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{L}^\top \boldsymbol{G}_{pX} \boldsymbol{L} \boldsymbol{A} \right] \\
& - \frac{1}{2} \operatorname{tr}\left[\nu_{\boldsymbol{X}_q}^{(1)} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}_q}^{(1)-1} \boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{L}^\top \left(\boldsymbol{G}_{pX} + \psi_0^{(\boldsymbol{\eta})-1} \boldsymbol{B}_0 \nu_{\boldsymbol{Y}_q} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{Y}_q}^{-1} \boldsymbol{B}_0^\top + \psi_{\boldsymbol{X}}^{(1)} \boldsymbol{I}_p \right) \boldsymbol{L} \boldsymbol{A} \right] \\
& - \frac{1}{2} \operatorname{tr}\left[\boldsymbol{K}^\top \left(\boldsymbol{G}_{pX} + \psi_{\boldsymbol{X}}^{(0)} \boldsymbol{I}_p \right) \boldsymbol{K} \boldsymbol{A}^\top \nu_{\boldsymbol{X}_q}^{(0)} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}_q}^{(0)-1} \boldsymbol{A} \right] \\
& + \operatorname{tr}\left[\left(\boldsymbol{\eta}_q \nu_{\boldsymbol{Y}_q} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{Y}_q}^{-1} \boldsymbol{\eta}_q^\top + \operatorname{Ktr}\left[\nu_{\boldsymbol{Y}_q} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{Y}_q}^{-1} \odot \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_q^{(\boldsymbol{\eta})} \right] \right) \boldsymbol{K}^\top \boldsymbol{G}_{pX} \boldsymbol{L} \boldsymbol{A} \right] \\
& + \operatorname{tr}\left[\nu_{\boldsymbol{X}_q}^{(1)} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}_q}^{(1)-1} \boldsymbol{K}^\top \left(\boldsymbol{G}_{pX} + \psi_0^{(\boldsymbol{\eta})-1} \boldsymbol{B}_0 \nu_{\boldsymbol{Y}_q} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{Y}_q}^{-1} \boldsymbol{B}_0^\top + \psi_{\boldsymbol{X}}^{(1)} \boldsymbol{I}_p \right) \boldsymbol{L} \boldsymbol{A} \right] \\
& - \operatorname{tr}\left[\boldsymbol{K}^\top \left(\boldsymbol{G}_{pX} + \psi_{\boldsymbol{X}}^{(0)} \boldsymbol{I}_p \right) \boldsymbol{L} \nu_{\boldsymbol{X}_q}^{(0)} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}_q}^{(0)-1} \boldsymbol{A} \right] \\
& + \operatorname{tr}\left[\left(\boldsymbol{\eta}_q \nu_{\boldsymbol{Y}_q} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{Y}_q}^{-1} \mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}_q}^\top \mathbb{X}_{\boldsymbol{\mu}_q} + \psi_0^{(\boldsymbol{\eta})-1} \nu_{\boldsymbol{X}_q}^{(1)} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}_q}^{(1)-1} \boldsymbol{\eta}_q \nu_{\boldsymbol{Y}_q} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{Y}_q}^{-1} \boldsymbol{B}_0^\top \right) \boldsymbol{L} \boldsymbol{A} \right] \\
& - \frac{1}{2} \operatorname{tr}\left[\boldsymbol{V}_0^{(\boldsymbol{A})-1} (\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}_0)^\top \boldsymbol{U}_0^{(\boldsymbol{A})-1} (\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}_0) \right],
\end{aligned}
\tag{S21}
$$

其中 $\mathbb{X}_{\boldsymbol{\mu}_q} = (\mathbb{X} - \mathbf{1}_n \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}_q}^\top)$， $\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}_q} = (\mathbb{Y} - \mathbf{1}_n \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{Y}_q}^\top)$， $\boldsymbol{G}_{pX} = \mathbb{X}_{\boldsymbol{\mu}_q}^\top \mathbb{X}_{\boldsymbol{\mu}_q} + n\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{X}_q}$，以及$\mathrm{Ktr}\,[\cdot \odot \cdot]$表示第S2.2节中定义的算子。

推导贝叶斯预测变量包络模型的 CALVI 更新过程与贝叶斯响应包络模型类似。因此，这里只列出结果。

q(向量化$(\boldsymbol{A})$)的更新。

$$
\begin{aligned}
q(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})) &\propto \mathcal{N}_{(p-m)m}\left(\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}), -\tilde{f}''_{\boldsymbol{X}}(\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}))^{-1}\right), \\
\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}) &= \underset{\boldsymbol{A}}{\mathrm{argmax}}\, \tilde{f}_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{A}), \\
H(\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}})) &= -\left[\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \tilde{f}_{\boldsymbol{X}}(\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}))\right]^{-1},
\end{aligned}
\tag{S22}
$$

其中， $\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\tilde{f}_{\boldsymbol{X}}$(向量化($\hat{}\boldsymbol{A}$)) 表示 $\tilde{f}_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{A})$ 关于向量化$(\boldsymbol{A})$ 的海森矩阵，在向量化($\hat{}\boldsymbol{A}$) 处求值：

$$
\begin{aligned}
\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\tilde{f}_{\boldsymbol{X}}(\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}})) = (2n + \nu^{(1)}_{\boldsymbol{X}} + \nu^{(0)}_{\boldsymbol{X}}) \Bigg[& (\boldsymbol{I}_m - \hat{\boldsymbol{A}}^\top \boldsymbol{J}_0(\hat{\boldsymbol{A}})^{-1}\hat{\boldsymbol{A}}) \otimes \boldsymbol{J}_0(\hat{\boldsymbol{A}})^{-1} \\
& - \left((\boldsymbol{J}_0(\hat{\boldsymbol{A}})^{-1}\hat{\boldsymbol{A}})^\top \otimes (\boldsymbol{J}_0(\hat{\boldsymbol{A}})^{-1}\hat{\boldsymbol{A}})\right)\mathcal{K}_{(p-m),m} \Bigg] \\
& - \left(\boldsymbol{\eta}_q \nu_{\boldsymbol{Y}_q} \boldsymbol{\Psi}^{-1}_{\boldsymbol{Y}_q} \boldsymbol{\eta}_q^\top + \mathrm{Ktr}\left[\nu_{\boldsymbol{Y}_q}\boldsymbol{\Psi}^{-1}_{\boldsymbol{Y}_q} \odot \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}^{(\boldsymbol{\eta})}_q\right]\right) \otimes \boldsymbol{L}^\top \boldsymbol{G}_{pX} \boldsymbol{L} \\
& - \boldsymbol{K}^\top \left(\boldsymbol{G}_{pX} + \psi^{(0)}_{\boldsymbol{X}} \boldsymbol{I}_p\right) \boldsymbol{K} \otimes \nu^{(0)}_{\boldsymbol{X}_q} \boldsymbol{\Psi}^{(0)-1}_{\boldsymbol{X}_q} \\
& - \boldsymbol{V}_0^{(\boldsymbol{A})-1} \otimes \boldsymbol{U}_0^{(\boldsymbol{A})-1},
\end{aligned}
$$

其中 $\boldsymbol{J}_0(\hat{}\boldsymbol{A}) := \boldsymbol{I}_{p-m} + \hat{}\boldsymbol{A}\,\hat{}\boldsymbol{A}^\top$。

$q(\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}})$的更新。

$$
\begin{aligned}
\log q(\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}}) &\propto \text{const.} - \frac{\nu_{\boldsymbol{Y}_q} + r + 1}{2} \log|\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}}| - \frac{1}{2}\,\mathrm{tr}\left[\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{Y}_q}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}_{\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}}\right] \\
&\propto \mathcal{IW}_r(\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{Y}_q}, \nu_{\boldsymbol{Y}_q}),
\end{aligned}
\tag{S23}
$$

其中

$$
\begin{aligned}
&\nu_{\boldsymbol{Y}_q} = n + m + \nu_{\boldsymbol{Y}}, \\
&\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{Y}_q} = \boldsymbol{G}_{pY} - 2\mathbb{Y}^\top_{\boldsymbol{\mu}_q}\mathbb{X}_{\boldsymbol{\mu}_q}\boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}}\boldsymbol{\eta}_q + \boldsymbol{\eta}_q^\top S_3 \boldsymbol{\eta}_q + \mathrm{Ktr}\left[S_3 \odot \boldsymbol{\Sigma}^{(\boldsymbol{\eta})}_q\right] + \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{Y}} \\
&\quad + \frac{\nu^{(1)}_{\boldsymbol{X}_q}}{\psi^{(\boldsymbol{\eta})}_0}\Bigg((\boldsymbol{C}^\top_{\hat{\boldsymbol{A}}}\boldsymbol{B}_0 - \boldsymbol{\eta}_q)^\top \boldsymbol{\Psi}^{(1)-1}_{\boldsymbol{X}_q} (\boldsymbol{C}^\top_{\hat{\boldsymbol{A}}}\boldsymbol{B}_0 - \boldsymbol{\eta}_q) \\
&\qquad\qquad + \boldsymbol{B}_0^\top\,\mathrm{Ktr}\left[\boldsymbol{\Psi}^{(1)-1}_{\boldsymbol{X}_q} \odot \tilde{H}(\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}))\right]\boldsymbol{B}_0 + \mathrm{Ktr}\left[\boldsymbol{\Psi}^{(1)-1}_{\boldsymbol{X}_q} \odot \boldsymbol{\Sigma}^{(\boldsymbol{\eta})}_q\right]\Bigg), \\
&\boldsymbol{G}_{pY} = \mathbb{Y}^\top_{\boldsymbol{\mu}_q}\mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}_q} + n\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}_q}, \\
&\tilde{H}(\text{向量化}(\hat{\boldsymbol{A}})) = \mathcal{K}_{(p-m),\,m} H(\text{向量化}(\hat{\boldsymbol{A}}))\mathcal{K}_{m,(p-m)}, \\
&S_3 = \boldsymbol{C}^\top_{\hat{\boldsymbol{A}}}\boldsymbol{G}_{pX}\boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}} + \mathrm{Ktr}\left[\boldsymbol{L}^\top\boldsymbol{G}_{pX}\boldsymbol{L} \odot H(\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}))\right]
\end{aligned}
$$

更新 $q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(1)})$。

$$\begin{aligned}\log q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(1)}) &\propto \text{const.} - \frac{\nu_{\boldsymbol{X}_q}^{(1)} + m + 1}{2} \log|\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(1)}| - \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left[\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}_q}^{(1)} \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(1)-1}\right] \\ &\propto \mathcal{IW}_m(\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}_q}^{(1)}, \nu_{\boldsymbol{X}_q}^{(1)}),\end{aligned} \tag{S24}$$

其中

$$\begin{aligned}&\nu_{\boldsymbol{X}_q}^{(1)} = n + \nu_{\boldsymbol{X}}^{(1)} + r, \\ &\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}_q}^{(1)} = \boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}}^\top S_4 \boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}} + \operatorname{Ktr}\left[\boldsymbol{L}^\top S_4 \boldsymbol{L} \odot H(\operatorname{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}))\right] + \boldsymbol{\eta}_q \psi_0^{(\boldsymbol{\eta})-1} \nu_{\boldsymbol{Y}_q} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{Y}_q}^{-1} \boldsymbol{\eta}_q^\top + \operatorname{Ktr}\left[\psi_0^{(\boldsymbol{\eta})-1} \nu_{\boldsymbol{Y}_q} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{Y}_q}^{-1} \odot \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_q^{(\boldsymbol{\eta})}\right], \\ &\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_q^{(\boldsymbol{\eta})} = \mathcal{K}_{m,r} \boldsymbol{\Sigma}_q^{(\boldsymbol{\eta})} \mathcal{K}_{r,m}, \\ &S_4 = \boldsymbol{G}_{pX} + \psi_0^{(\boldsymbol{\eta})-1} \boldsymbol{B}_0 \nu_{\boldsymbol{Y}_q} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{Y}_q}^{-1} \boldsymbol{B}_0^\top + \psi_{\boldsymbol{X}}^{(1)} \boldsymbol{I}_p.\end{aligned}$$

对 $q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(0)})$**的更新**。

$$\begin{aligned}\log q(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(0)}) &\propto \text{const.} - \frac{\nu_{\boldsymbol{X}_q}^{(0)} + p - m + 1}{2} \log|\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(0)}| - \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left[\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}_q}^{(0)} \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(0)-1}\right] \\ &\propto \mathcal{IW}_{p-m}(\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}_q}^{(0)}, \nu_{\boldsymbol{X}_q}^{(0)}),\end{aligned} \tag{S25}$$

其中

$$\begin{aligned}&\nu_{\boldsymbol{X}_q}^{(0)} = n + \nu_{\boldsymbol{X}}^{(0)}, \\ &\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}_q}^{(0)} = \boldsymbol{D}_{\hat{\boldsymbol{A}}}^\top S_5 \boldsymbol{D}_{\hat{\boldsymbol{A}}} + \operatorname{Ktr}\left[\boldsymbol{K}^\top S_5 \boldsymbol{K} \odot \tilde{H}(\operatorname{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}))\right], \\ &S_5 = \boldsymbol{G}_{pX} + \psi_{\boldsymbol{X}}^{(0)} \boldsymbol{I}_p.\end{aligned}$$

对 q**(向量化(**$\tilde{\boldsymbol{\eta}}$**))的更新**。

$$\begin{aligned}\log q(\operatorname{vec}(\tilde{\boldsymbol{\eta}})) &\propto \text{const.} - \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left[(\operatorname{vec}(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) - \operatorname{vec}(\boldsymbol{\eta}_q))^\top \boldsymbol{\Sigma}_q^{(\boldsymbol{\eta})-1} (\operatorname{vec}(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) - \operatorname{vec}(\boldsymbol{\eta}_q))\right], \\ &\propto \mathcal{N}_{mr}(\operatorname{vec}(\boldsymbol{\eta}_q), \boldsymbol{\Sigma}_q^{(\boldsymbol{\eta})}),\end{aligned} \tag{S26}$$

其中

$$\begin{aligned}\operatorname{vec}(\boldsymbol{\eta}_q) &= \boldsymbol{\Sigma}_q^{(\boldsymbol{\eta})} \operatorname{vec}\left((\nu_{\boldsymbol{Y}_q} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{Y}_q}^{-1} \mathbb{Y}_{\boldsymbol{\mu}_q}^\top \mathbb{X}_{\boldsymbol{\mu}_q} \boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}} + \nu_{\boldsymbol{Y}_q} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{Y}_q}^{-1} \boldsymbol{B}_0^\top \boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}} \psi_0^{(\boldsymbol{\eta})-1} \nu_{\boldsymbol{X}_q}^{(1)} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}_q}^{(1)-1})^\top\right), \\ \boldsymbol{\Sigma}_q^{(\boldsymbol{\eta})} &= \left(\nu_{\boldsymbol{Y}_q} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{Y}_q}^{-1} \otimes (S_3 + \psi_0^{(\boldsymbol{\eta})-1} \nu_{\boldsymbol{X}_q}^{(1)} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}_q}^{(1)-1})\right)^{-1}\end{aligned}$$

对 $q(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}})$**的更新**。

$$\begin{aligned}\log q(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}) &\propto \text{const.} - \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left[(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}} - \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}_q})^\top \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{X}_q}^{-1} (\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}} - \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}_q})\right], \\ &\propto \mathcal{N}_p(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}_q}, \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{X}_q}),\end{aligned} \tag{S27}$$

其中

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}_q} = \bar{\boldsymbol{X}}, \\ &\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{X}_q} = \left(\boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}} S_6 \boldsymbol{C}_{\hat{\boldsymbol{A}}}^\top + \boldsymbol{L} \operatorname{Ktr}\left[S_6 \odot \tilde{H}(\operatorname{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}))\right] \boldsymbol{L}^\top + \boldsymbol{D}_{\hat{\boldsymbol{A}}} S_7 \boldsymbol{D}_{\hat{\boldsymbol{A}}}^\top + \boldsymbol{K} \operatorname{Ktr}\left[S_7 \odot H(\operatorname{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}))\right] \boldsymbol{K}^\top\right)^{-1}, \\ &S_6 = n\nu_{\boldsymbol{X}_q}^{(1)} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}_q}^{(1)-1} + \boldsymbol{\eta}_q \nu_{\boldsymbol{Y}_q} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{Y}_q}^{-1} \boldsymbol{\eta}_q^\top + \operatorname{Ktr}\left[\nu_{\boldsymbol{Y}_q} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{Y}_q}^{-1} \odot \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_q^{(\boldsymbol{\eta})}\right], \\ &S_7 = n\nu_{\boldsymbol{X}_q}^{(0)} \boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{X}_q}^{(0)-1}.\end{aligned}$$

更新 $q(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{Y}})$。

$$\begin{aligned}\log q^*(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{Y}}) &\propto \text{const.} - \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left[(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{Y}} - \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{Y}_q})^\top \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}_q}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{Y}} - \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{Y}_q})\right], \\ &\propto \mathcal{N}_r(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{Y}_q}, \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}_q}),\end{aligned} \tag{S28}$$

其中

$$\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{Y}_q} = \bar{\boldsymbol{Y}}, \quad \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}_q} = \frac{\boldsymbol{\Psi}_{\boldsymbol{Y}_q}}{n\nu_{\boldsymbol{Y}_q}}.$$

用于收敛准则的近似 ELBO

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(q) =& \mathbb{E}_{q(\cdot)}\left[\log \pi(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}, \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{Y}}, \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}}, \tilde{\boldsymbol{\eta}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{X}, \mathbb{Y}) - \log q(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}, \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{Y}}, \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}}, \tilde{\boldsymbol{\eta}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0, \boldsymbol{A})\right] \\ \approx& \tilde{\boldsymbol{C}} + \tilde{f}_{\boldsymbol{X}}(\hat{\boldsymbol{A}}) - \frac{(p-m)m}{2} - \mathbb{E}_{q(\cdot)}\left[\log q(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}, \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{Y}}, \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}}, \tilde{\boldsymbol{\eta}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0, \boldsymbol{A})\right].\end{aligned} \tag{S29}$$

算法 2 总结了预测变量包络模型的 CALVI 过程。为得到最优变分分布，在迭代 t且给定 q_{-i}^t 时，我们更新 q_i^{t+1} ，并循环遍历 i ，重复该扫描直至收敛。

S3.1 预测变量包络模型的模拟研究

我们对贝叶斯预测变量包络模型开展了模拟研究。CALVI 的性能以 β的估计精度加以评估。我们将 CALVI 与采用似然驱动提议的 Metropolis–Hastings within Gibbs 方法（Chakraborty和Su，2024a）（以下简称 MH–Gibbs）进行比较。

全文中，上标 $*$表示参数的真实值。我们根据 (S14) 中的预测变量包络模型生成了 100 个重复数据集，其中取 $n = 100$、200、500、1000、$r = 3$、 $p = 15$，真实包络维数为 $m^* \in \{2, 5\}$。$\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}}^*$ 和 $\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{Y}}^*$ 的元素独立地从均匀分布$(-10, 10)$中抽取，而 $\boldsymbol{\eta}^*$ 和 $\boldsymbol{A}^*$ 的元素分别独立地从均匀分布$(5, 10)$和均匀分布$(0, 5)$中抽取。矩阵 $\Omega_{\boldsymbol{X}}^{(1)*}$、$\Omega_{\boldsymbol{X}}^{(0)*}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}}^*$分别独立地模拟自 $5\mathcal{IW}_m(m+2, 5\boldsymbol{I}_m)$、 $\mathcal{IW}_{p-m}(p-m+2, 0.1\boldsymbol{I}_{p-m})$和 $\mathcal{IW}_r(r+1, 5\mathrm{I}_r)$。

我们对所有参数均采用弥散先验分布：多元正态先验和矩阵正态先验的均值设为零、协方差矩阵设为 $10^6\mathbf{I}$ ，逆Wishart先验设为 $\mathcal{IW}_p(p, 10^{-6}\mathbf{I}_p)$。

表S1 报告了 CALVI 和 MH–Gibbs 下包络维数的基于BIC的后验概率 m 。当 $m^* = 2$时，CALVI 在样本量较小时更快地集中于真实维数（当 $n = 100$时为 0.901）；而 MH–Gibbs 在相邻维数上分配了相对更多的后验概率质量，尤其是在 $m = 3$时。随着 n 增大，两种方法都越来越集中于真实维数，且 CALVI 在中等样本量下的集中速度略快。

当 $m^* = 5$ 时，两种方法在所有样本量下都将大部分后验概率质量分配给 $m = 5$ 。MH–Gibbs 在较小的 n 时倾向于更集中，而随着 n 增大，CALVI 也会达到近乎退化的集中状态。

算法2 针对预测变量包络模型的坐标上升拉普拉斯变分推断

初始化变分因子 $q^{(1)}(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}})$、$q^{(1)}(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{Y}})$、$q^{(1)}(\tilde{\boldsymbol{\eta}})$、$q^{(1)}(\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}})$、$q^{(1)}(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(1)})$、$q^{(1)}(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(0)})$，以及 $q^{(1)}$(向量化$(\boldsymbol{A})$)

设置容差 ϵ ，最大迭代次数 T

$t \leftarrow 1$

当 $t < T$ **时执行**

使用 $\tilde{\mathcal{L}}(q)^{(t)}$ 计算（S29）

更新 $q^{(t+1)}$（向量化$\boldsymbol{A}$）使用拉普拉斯步（S22）

更新 $q^{(t+1)}(\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}})$ 使用闭式CAVI更新（S23）

更新 $q^{(t+1)}(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(1)})$ 使用闭式CAVI更新（S24）

更新 $q^{(t+1)}(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(0)})$ 使用闭式CAVI更新（S25）

更新 $q^{(t+1)}(\tilde{\boldsymbol{\eta}})$，使用闭式CAVI更新（S26）

更新 $q^{(t+1)}(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}})$，使用闭式CAVI更新（S27）

更新 $q^{(t+1)}(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{Y}})$，使用闭式CAVI更新（S28）

计算 $\tilde{\mathcal{L}}(q)^{(t+1)}$，使用（S29）

如果 $|\tilde{\mathcal{L}}(q)^{(t+1)} - \tilde{\mathcal{L}}(q)^{(t)}| < \epsilon \left|\tilde{\mathcal{L}}(q)^{(t+1)}\right|$ **那么**

中断

结束 if

$t \leftarrow t + 1$

结束循环

返回 $q^{(t)}(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{X}})$, $q^{(t)}(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{Y}})$, $q^{(t)}(\tilde{\boldsymbol{\eta}})$, $q^{(t)}(\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}})$, $q^{(t)}(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(1)})$, $q^{(t)}(\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_{\boldsymbol{X}}^{(0)})$, $q^{(t)}$(向量化$(\boldsymbol{A})$), and $\{\tilde{\mathcal{L}}(q)^{(1)}, \ldots\ldots, \tilde{\mathcal{L}}(q)^{(t)}\}$

表 S1：按方法列出的包络维数 m 的后验概率均值，其中 $r = 3$、 $p = 15$ 和 $m^* \in \{2, 5\}$。结果为 100 次重复试验的平均值。

	CALVI				MH–Gibbs			
n	$m \leq 1$	$m = 2$	$m = 3$	$4 \leq m$	$m \leq 1$	$m = 2$	$m = 3$	$4 \leq m$
100	0.000	0.901	0.095	0.004	0.000	0.714	0.267	0.019
200	0.000	0.975	0.024	0.000	0.000	0.920	0.076	0.004
500	0.000	0.979	0.021	0.000	0.000	0.889	0.111	0.000
1000	0.000	0.997	0.003	0.000	0.000	0.975	0.025	0.000

(a) 真实的 m 为 2。

n	$m \leq 4$	$m = 5$	$m = 6$	$7 \leq m$	$m \leq 4$	$m = 5$	$m = 6$	$7 \leq m$
100	0.000	0.860	0.123	0.017	0.000	0.919	0.080	0.001
200	0.000	0.914	0.083	0.004	0.000	0.980	0.019	0.001
500	0.000	0.960	0.039	0.001	0.000	0.937	0.06	0.000
1000	0.000	0.971	0.029	0.000	0.000	0.992	0.008	0.000

(b) 真实的 m 为 5。

ˆ表 S2 总结了通过 BMA 得到的 $\boldsymbol{\beta}$ 的均方误差。对于 $m^* = 2$，随着 n 增大，两种方法的均方误差均下降。在样本量较小和中等时，MH–Gibbs 的均方误差较小，但随着 n 增大，差距逐渐缩小。对于 $m^* = 5$，MH–Gibbs 通常在各种样本量下都能取得较低的均方误差，而 CALVI 则随着 n 增大，表现出稳定且单调的改进。

表S3 比较了总计算时间。在所有配置下，CALVI 都比 MH–Gibbs 快得多，运行时间仅为其一小部分（通常不到 4%，且随着 n 增加而进一步降低）。样本量较大时，这种计算优势尤为明显。

表 S2：按方法计算的 β （对坐标求和）的均方误差——通过 CALVI 和 MH–Gibbs 的贝叶斯模型平均——在 $r = 3$、 $p = 15$ 和 $m^* \in \{2, 5\}$ 下。条目为 100 次重复试验的均值（标准差）。

方法	$n = 100$	$n = 200$	$n = 500$	$n = 1000$
CALVI	2.578 (6.708)	0.327 (1.157)	0.106 (0.429)	0.005 (0.012)
MH–Gibbs	1.003 (2.920)	0.102 (0.506)	0.030 (0.085)	0.005 (0.015)
(a) 真实的 m 为 2。				
CALVI	4.447 (18.556)	1.200 (5.649)	0.164 (0.924)	0.026 (0.046)
MH–Gibbs	0.344 (0.858)	0.078 (0.076)	0.385 (0.027)	0.028 (0.125)
(b) 真实的 m 为5。				

表 S3：在 100 次重复试验中， $m = 1$、.. .、15 的平均总 CPU时间（秒）（$r = 3$, $p = 15$; $m^* \in \{2, 5\}$）。

	CALVI	MH–Gibbs	比率（%）
$n = 100$	91.7	2705.1	3.39
$n = 200$	100.3	2836.0	3.54
$n = 500$	23.5	3208.2	0.73
$n = 1000$	8.1	3752.1	0.22
（a）真实 $u = 2$			
$n = 100$	54.5	2695.9	2.02
$n = 200$	37.8	2829.3	1.34
$n = 500$	8.0	3221.7	0.25
$n = 1000$	7.5	3760.9	0.20
（b）真实 $u = 5$			

定理1的 S4 证明

本节证明正文中的定理1 。我们不直接证明渐近结论，而是对基于拉普拉斯近似的坐标更新与精确 CAVI 更新之间的总变差（ TV ）距离建立一个更强的非渐近界，由此可直接推得定理 1 中的渐近收敛结论。

为清晰起见并确保内容完整，我们首先重述该结果，并明确列出所有常数和辅助量。

定理 8. 假设条件 1–5 及相关符号约定均成立。那么

$$d_{\mathrm{TV}}\Big(\overline{q_n^{L}},\, \overline{q_n^{VI}}\Big) \;\le\; C_1 n^{-1/2} \;+\; 2e^{\hat{\mathcal{T}}_n} \;+\; C_2\, n^{d_1/2} e^{-n\hat{\kappa}},$$

其中

$$C_1 = \frac{\sqrt{3}\,\mathrm{tr}\big[H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1}\big]\,\hat{M}_1}{4\sqrt{\big(\lambda_{\min}(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})) - \hat{\delta}\hat{M}_1\big)\,\big(1-e^{\hat{\mathcal{T}}_n}\big)}}, \qquad C_2 = \frac{2\,\big|\det\big(J(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1}\big)\big|^{-1/2}\,\bar{M}_2}{(2\pi)^{d_1/2}\,\big(1-e^{\bar{\mathcal{T}}_J}\big)},$$

$$H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}) := -\frac{\tilde{f}_n^{\dagger\prime\prime}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})}{n}, \qquad \hat{\mathcal{T}}_n := -\frac{1}{2}\Big(\hat{\delta}\sqrt{n} - \sqrt{\mathrm{tr}\left[H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1}\right]}\Big)^2 \big\|H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1}\big\|_{\mathrm{op}}^{-1},$$

$$H_\ell(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}) := -\frac{\ell_n''(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})}{n}, \qquad J(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}) := H_\ell(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}) + \frac{\bar{M}_1\bar{\delta}}{3}\,\boldsymbol{I}_{d_1},$$

$$\bar{\mathcal{T}}_J := -\frac{1}{2}\Big(\bar{\delta}\sqrt{n} - \sqrt{\mathrm{tr}\left[J(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1}\right]}\Big)^2 \big\|J(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1}\big\|_{\mathrm{op}}^{-1}.$$

定理 8 将 Kasprzak 等人 的 (2025) 定理 17 推广到了变分推断框架。Kasprzak 等人 的 (2025) 附录 D 和 E 中的证明细节可直接沿用；为完整起见，我们在本文的设定下重述证明。我们采用第 5 节的记号。证明所需的其他记号和辅助结果（引理 9–命题 12）汇总如下。

引理 9。 令 $Z \sim \mathcal{N}_d(0,\Sigma)$，$\|\cdot\|$ 表示欧几里得范数（用于向量），$\|\cdot\|_{\mathrm{op}}$ 表示算子范数（用于矩阵）。那么，对于任意 $\epsilon > \sqrt{\mathrm{tr}[\Sigma]}$,

$$\int_{\|Z\|>\epsilon} \frac{|\det(\Sigma)|^{-1/2} e^{-\frac{1}{2}z^\top\Sigma^{-1}z}}{(2\pi)^{d/2}}\, dz \le \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\epsilon - \sqrt{\mathrm{tr}[\Sigma]}\right)^2 \|\Sigma\|_{op}^{-1}\right).$$

证明。

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}\Big[\|Z\| \ge \epsilon\Big] &= \mathbb{P}\Big[\|Z\| \ge \sqrt{\mathrm{tr}(\Sigma)} + \sqrt{2\|\Sigma\|_{op}t}\Big] \\
&= \mathbb{P}\Big[\|Z\|^2 \ge \mathrm{tr}(\Sigma) + 2\sqrt{2\|\Sigma\|_{op}\,\mathrm{tr}(\Sigma)t} + 2\|\Sigma\|_{op}t\Big] \\
&\le \mathbb{P}\Big[\|Z\|^2 \ge \mathrm{tr}(\Sigma) + 2\sqrt{\mathrm{tr}(\Sigma^2)t} + 2\|\Sigma\|_{op}t\Big] \\
&= \mathbb{P}\Big[\|Z\|^2 - \mathrm{tr}(\Sigma) \ge 2\sqrt{\mathrm{tr}(\Sigma^2)t} + 2\|\Sigma\|_{op}t\Big] \\
&\le e^{-t} = e^{-\frac{1}{2}\left(\epsilon-\sqrt{\mathrm{tr}(\Sigma)}\right)^2\|\Sigma\|_{op}^{-1}}. \qquad \text{(Hsu et al. (2012), Proposition 1)}
\end{aligned}$$

□

引理 10。 令 $z \sim \mathcal{N}_d(0,\Sigma)$，$\|\cdot\|$ 表示欧几里得范数（用于向量），$\|\cdot\|_{\mathrm{op}}$ 表示算子范数（用于矩阵）。那么，

$$\mathbb{E}[\|z\|^4] \le 3\,\mathrm{tr}\,[\Sigma]^2.$$

证明。令 $z = U\Lambda^{1/2}v$ 满足 $v \sim \mathcal{N}_d(0, I_d)$，且 $\Lambda =$ 为对角矩阵 $\mathrm{diag}(\lambda_1,\ldots,\lambda_d)$。那么

$$\|z\|^2 = \sum_{i=1}^d \lambda_i v_i^2, \qquad \|z\|^4 = \Big(\sum_{i=1}^d \lambda_i v_i^2\Big)^2.$$

利用 $\mathbb{E}[v_i^4] = 3$ 和 $\mathbb{E}[v_i^2 v_j^2] = 1$ 对 $i \ne j$，我们得到

$$\mathbb{E}[\|z\|^4] = \sum_{i=1}^d \lambda_i^2\mathbb{E}[v_i^4] + 2\sum_{i<j}\lambda_i\lambda_j\mathbb{E}[v_i^2v_j^2] = 3\sum_{i=1}^d\lambda_i^2 + 2\sum_{i<j}\lambda_i\lambda_j = (\mathrm{tr}\,\Sigma)^2 + 2\,\mathrm{tr}(\Sigma^2).$$

由于 $\mathrm{tr}(\Sigma^2) \le (\mathrm{tr}\,\Sigma)^2$,，因此 $\mathbb{E}[\|z\|^4] \le 3(\mathrm{tr}\ \Sigma)^2$。 □

命题 11 (Pinsker不等式，（Kasprzak 等人（2025），命题 D.3）。对于任意两个概率测度 ν 和 ω 满足 $\nu \ll \omega$，有

$$d_{TV}(\nu,\omega) \le \sqrt{\frac{1}{2}KL(\nu||\omega)}.$$

*Fisher*散度（或 Vempala 和 Wibisono Vempala 和 Wibisono（2019）第 2.2 节中的相对 Fisher信息）是通过两个概率分布的梯度来衡量它们之间差异的一种度量，定义如下。

$$\mathrm{Fisher}(p \,||\, q) = \int p(x) \left\| \left(\log \frac{p(x)}{q(x)} \right)' \right\|^2 \, dx.$$

定义 1 （对数-索伯列夫不等式（对数-索伯列夫不等式）Vempala 和 Wibisono （2019），第 2.2 节；Kasprzak 等人（2025），定义 D.2）。设 ω 是定义在$\Omega \subset \mathbb{R}^d$ 上的概率测度，并设 $\kappa > 0$。若 ω 满足常数为 κ 的对数-索伯列夫不等式（对数-索伯列夫不等式(κ)），则对任意定义在ν 上的概率测度Ω,

$$\mathrm{KL}(\nu||\omega) \le \frac{1}{2\kappa}\mathrm{Fisher}(\nu||\omega).$$

命题 12（Bakry-Émery对数Sobolev判据（Kolesnikov 和 Milman（2016），定理 2.1）、（Kasprzak 等人（2022），命题 D.1））。设 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ 为凸，令 $f : \Omega \to \mathbb{R}$，并考虑概率测度 $\omega(dx) = Z_\omega^{-1} e^{-f(x)} \mathbb{1}_\Omega(x)\ dx$。假设对于某个 $\kappa > 0$，有 $f''(x) \succeq \kappa \boldsymbol{I}_d$。则 ω 满足 $LSI(\kappa)$，其中 $\kappa > 0$。

证明通过将全变差距离分解为局部拉普拉斯近似误差和尾部贡献，并对每一项分别给出上界，所依据的假设为1–5。

定理8的证明。对任意可测集 $\mathcal{A} \subset \mathbb{R}^{d_1}$，令 $g = \mathbb{1}_{\mathcal{A}}$。设

$$Z \sim \mathcal{N}\big(0,\, H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1}\big),$$

并令 $X \sim \Pi_n^{-}$，其中 Π_n^{-} 表示.....的分布律

$$\sqrt{n}\,(\boldsymbol{\theta}_1 - \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}) \quad \text{under} \quad \boldsymbol{\theta}_1 \sim \Pi_n^{\dagger}.$$

定义

$$D(g) \;:=\; \big|\, \mathbb{E}[g(Z)] - \mathbb{E}[g(X)] \,\big|.$$

于是全变差距离满足

$$d_{\mathrm{TV}}\Big(\mathcal{N}\big(0, H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1}\big), \overline{\Pi}_n(X)\Big) \;=\; \sup_{A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)} \big|\, \mathbb{E}[g(Z)] - \mathbb{E}[g(X)] \,\big| \;=\; \sup_g D(g).$$

其中 $\mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ 表示 $\mathbb{R}^d$ 上的博雷尔 σ-代数。

现在，我们将 $D(g)$ 分解为关于 ˆ $\delta\sqrt{n}$ 的内积分与外积分之和。

S4.1 D_g的分解

$$
\begin{aligned}
D_g :=& \left|\mathbb{E}_{Z\sim\mathcal{N}(0,H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})}\left[g(Z_n)\right] - \mathbb{E}_{\overline{\Pi}_n(\sqrt{n}(\boldsymbol{\theta}_1-\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}))}\left[g\left(\sqrt{n}(\boldsymbol{\theta}_1-\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\right)\right]\right| \\
=& \left|\int_{\mathbb{R}^{d_1}} g(u)\frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2}e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}}\,du - \int_{\mathbb{R}^{d_1}} g(u)n^{-d_1/2}\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du\right| \\
=& \left|\int_{\mathbb{R}^{d_1}} g(u)\frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2}e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}}\,du\right. \\
& \left. -n^{-d_1/2}\int_{\|u\|>\hat{\delta}\sqrt{n}} g(u)\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du - n^{-d_1/2}\int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}} g(u)\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du\right| \\
=& \left|\int_{\mathbb{R}^{d_1}} g(u)\frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2}e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}}\,du\right. \\
& -n^{-d_1/2}\int_{\|u\|>\hat{\delta}\sqrt{n}} g(u)\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du - \frac{n^{-d_1/2}\int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}} g(u)\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du}{n^{-d_1/2}\int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}}\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du} \\
& \left.+\frac{n^{-d_1/2}\int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}} g(u)\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}t+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du}{n^{-d_1/2}\int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}}\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du} - n^{-d_1/2}\int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}} g(u)\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du\right| \\
=& \left|\int_{\mathbb{R}^{d_1}}\left(g(u) - \frac{n^{-d_1/2}\int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}} g(u)\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du}{n^{-d_1/2}\int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}}\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du}\right)\frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2}e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}}\,du\right. \\
& -n^{-d_1/2}\int_{\|u\|>\hat{\delta}\sqrt{n}} g(u)\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du \\
& \left.+\frac{n^{-d_1/2}\int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}} g(u)\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}t+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du}{n^{-d_1/2}\int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}}\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du}\left(1-n^{-d_1/2}\int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}}\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du\right)\right| \\
=& \left|\int_{\mathbb{R}^{d_1}}\left(g(u) - \frac{n^{-d_1/2}\int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}} g(u)\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du}{n^{-d_1/2}\int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}}\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du}\right)\frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2}e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}}\,du\right. \\
& \left.-n^{-d_1/2}\int_{\|u\|>\hat{\delta}\sqrt{n}}\left(g(u) - \frac{n^{-d_1/2}\int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}} g(u)\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du}{n^{-d_1/2}\int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}}\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du}\right)\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du\right|.
\end{aligned}
\tag{S30}
$$

为使表达式更易读，我们定义如下的一组量：

$$
\begin{aligned}
C_{\mathcal{P}} &:= n^{-d_1/2}\int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}}\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du, \\
C_{\mathcal{N}} &:= \int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}}\frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2}e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}}\,du, \\
h_g(u) &:= g(u) - \frac{n^{-d_1/2}}{C_{\mathcal{P}}}\int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}} g(u)\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du.
\end{aligned}
$$

接下来，我们阐明（S30），并继续进行分解。

$$
\begin{aligned}
D_g :=& \left| \int_{\mathbb{R}^{d_1}} h_g(u) \frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2} e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}) u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}}\, du - n^{-d_1/2} \int_{\|u\|>\hat{\delta}\sqrt{n}} h_g(u) \overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u + \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\, du \right| \\
=& \left| \int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}} h_g(u) \frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2} e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}) u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}}\, du \right. \\
& \left. + \int_{\|u\|>\hat{\delta}\sqrt{n}} h_g(u) \frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2} e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}) u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}}\, du - n^{-d_1/2} \int_{\|u\|>\hat{\delta}\sqrt{n}} h_g(u) \overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u + \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\, du \right| \\
\le& \frac{1}{C_{\mathcal{N}}} \left| \int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}} h_g(u) \frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2} e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}) u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}}\, du \right| \\
& + \left| \int_{\|u\|>\hat{\delta}\sqrt{n}} h_g(u) \left[\frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2} e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}) u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}} - n^{-d_1/2} \overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u + \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}) \right] du \right| \\
=& \left| \int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}} g(u) \frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2} e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}) u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}}\, du - \frac{n^{-d_1/2}}{C_{\mathcal{P}}} \int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}} g(u) \overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u + \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\, du \right| \\
& + \left| \int_{\|u\|>\hat{\delta}\sqrt{n}} h_g(u) \left[\frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2} e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}) u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}} - n^{-d_1/2} \overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u + \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}) \right] du \right| \\
:=& F_1 + F_2
\end{aligned}
$$

S4.2 控制项 F_1

$$
\begin{aligned}
F_1 :=& \left| \int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}} g(u) \frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2} e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}) u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}}\, du - \frac{n^{-d_1/2}}{C_{\mathcal{P}}} \int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}} g(u) \overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u + \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\, du \right| \\
\le& d_{TV}\left(\left[\mathcal{N}(0, H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})\right]_{B_0(\hat{\delta}\sqrt{n})}, \left[\overline{\Pi}_n(X)\right]_{B_0(\hat{\delta}\sqrt{n})} \right) && (g : \text{indicator function}) \\
\le& \sqrt{\frac{1}{2}\mathrm{KL}\left(\left[\mathcal{N}(0, H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})\right]_{B_0(\hat{\delta}\sqrt{n})}, \left[\overline{\Pi}_n(X)\right]_{B_0(\hat{\delta}\sqrt{n})} \right)} && (\text{Pinsker's inequality}) \\
\le& \frac{\sqrt{\mathrm{Fisher}\left(\left[\mathcal{N}(0, H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})\right]_{B_0(\hat{\delta}\sqrt{n})}, \left[\overline{\Pi}_n(X)\right]_{B_0(\hat{\delta}\sqrt{n})} \right)}}{2\sqrt{\lambda_{min}(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})) - \hat{\delta}\hat{M}_1}} && (\text{S31}) \\
=& \frac{1}{2\sqrt{\lambda_{min}(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})) - \hat{\delta}\hat{M}_1}} \\
& \cdot \sqrt{\int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}} \frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2} e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}) u/2}}{C_{\mathcal{N}}(2\pi)^{d_1/2}} \left\| H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}) u + \frac{f_n^{\dagger\prime}(n^{-1/2}u + \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})}{\sqrt{n}} \right\|^2 du} \\
\le& \frac{\hat{M}_1}{4\sqrt{n\left(\lambda_{min}(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})) - \hat{\delta}\hat{M}_1\right)}} \sqrt{\int_{\|u\|\le\hat{\delta}\sqrt{n}} \frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2} e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}) u/2}}{C_{\mathcal{N}}(2\pi)^{d_1/2}} \|u\|^4\, du} \\
& && (\text{S32}) \\
\le& \frac{\sqrt{3}\,\mathrm{tr}\left[H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1}\right] \hat{M}_1}{4\sqrt{n\left(\lambda_{min}(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})) - \hat{\delta}\hat{M}_1\right)\left(1 - e^{\hat{\mathcal{T}}_n}\right)}}. && (\text{S33})
\end{aligned}
$$

令 $\xi \in (\hat{}\boldsymbol{\theta}_{1_n},\ n^{-1/2}u + \hat{}\boldsymbol{\theta}_{1_n})$，根据泰勒定理、假设 3以及 $\|u\| \le \hat{}\delta\sqrt{n}$，可得

$$
-\frac{f_n^{\dagger\prime\prime}(n^{-1/2}u + \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})}{n} = -\frac{f_n^{\dagger\prime\prime}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})}{n} - \frac{f_n^{\dagger\prime\prime\prime}(\xi)\|n^{-1/2}u\|}{n} \succeq \left(\lambda_{min}\left(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\right) - \hat{\delta}\hat{M}_1\right) \boldsymbol{I}_{d_1}.
$$

于是它满足命题 12 的假设，这意味着 $\sqrt{n}(\boldsymbol{\theta}_1 - \hat{}\boldsymbol{\theta}_{1_n})$ 满足 $LSI(\kappa)$，其中 $\kappa = \left(\lambda_{min}\left(H(\hat{}\boldsymbol{\theta}_{1_n})\right) - \hat{}\delta\,\hat{}M_1\right)$。因此，我们可以证明由定义 S31 所满足的不等式 1对数-索伯列夫不等式。

不等式（S32）由三阶泰勒定理和假设 3 适用于 $\|u\| \leq \hat{}\delta\sqrt{n}$，且对某个 $\xi \in (\hat{}\boldsymbol{\theta}_{1_n}, n^{-1/2}u + \hat{}\boldsymbol{\theta}_{1_n})$，

$$
\begin{aligned}
&f_n^\dagger(n^{-1/2}u + \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}) = f_n^\dagger(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}) + f_n^{\dagger'}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})n^{-1/2}u + \frac{1}{2}f_n^{\dagger''}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})(\|n^{-1/2}u\|^2) + \frac{1}{6}f_n^{\dagger'''}(\xi)(\|n^{-1/2}u\|^3),\\
&\frac{f_n^{\dagger'}(n^{-1/2}u + \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})}{\sqrt{n}} = f_n^{\dagger'}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})n^{-1/2} + \frac{f_n^{\dagger''}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})u}{n} + \frac{1}{2n\sqrt{n}}f_n^{\dagger'''}(\xi)(\|u\|^2),\\
&\left\|-\frac{f_n^{\dagger''}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})u}{n} + \frac{f_n^{\dagger'}(n^{-1/2}u + \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})}{\sqrt{n}}\right\|^2 = \left\|\frac{\|u\|^2}{2n\sqrt{n}}f_n^{\dagger'''}(\xi)\right\|^2 \leq \left\|\frac{\hat{M}_1}{2\sqrt{n}}\right\|^2\|u\|^4.
\end{aligned}
$$

不等式（S33）由引理 9 和引理 10得出。

S4.3 控制项 F_2

我们再次分解 F_2。

$$
\begin{aligned}
F_2 &:= \left|\int_{\|u\|>\hat{\delta}\sqrt{n}} h_g(u)\left[\frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2}e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}} - n^{-d_1/2}\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u + \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\right]du\right|\\
&\leq \left|\int_{\|u\|>\hat{\delta}\sqrt{n}} g(u)\left[\frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2}e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}} - n^{-d_1/2}\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u + \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\right]du\right|\\
&\quad + \frac{n^{-d_1/2}}{C_{\mathcal{P}}}\left|\int_{\|u\|\leq\hat{\delta}\sqrt{n}} g(u)\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u + \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du\right.\\
&\qquad\qquad \left.\cdot\int_{\|u\|>\hat{\delta}\sqrt{n}}\left[\frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2}e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}} - n^{-d_1/2}\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u + \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\right]du\right|\\
&:= F_{2,1} + F_{2,2}.
\end{aligned}
$$

S4.4 控制项 $F_{2,\ 1}$

$$
\begin{aligned}
F_{2,1} &:= \left|\int_{\|u\|>\hat{\delta}\sqrt{n}} g(u)\left[\frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2}e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}} - n^{-d_1/2}\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u + \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\right]du\right|\\
&\leq \left|\int_{\|u\|>\hat{\delta}\sqrt{n}} g(u)\frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2}e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}}\,du\right| + \left|\int_{\|u\|>\hat{\delta}\sqrt{n}} g(u)n^{-d_1/2}\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u + \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du\right|\\
&\leq \int_{\|u\|>\hat{\delta}\sqrt{n}} |g(u)|\frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2}e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}}\,du + \int_{\|u\|>\hat{\delta}\sqrt{n}} |g(u)|n^{-d_1/2}\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u + \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\,du.
\end{aligned}
$$

第一项的上界$F_{2,\ 1}$ 由 $|g| \leq 1$ 和引理9推导得出。

$$
\begin{aligned}
&\int_{\|u\|>\hat{\delta}\sqrt{n}} |g(u)|\frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2}e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}}\\
&\leq \int_{\|u\|>\hat{\delta}\sqrt{n}} \frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2}e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}} \qquad (|g| \leq 1)\\
&\leq \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\hat{\delta}\sqrt{n} - \sqrt{\mathrm{tr}[H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1}]}\right)^2\left\|H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1}\right\|_{op}^{-1}\right) := \exp(\hat{\mathcal{T}}_n). \qquad \text{(S34)}
\end{aligned}
$$

第二项的上界$F_{2,\ 1}$利用泰勒定理、假设1、2和5以及 $|g| \leq 1$推导得出。

$$
\begin{aligned}
&\int_{\|u\|>\hat{\delta}\sqrt{n}} |g(u)| n^{-d_1/2} \overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u + \hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\ du \\
&= \int_{\|t-\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}\|>\hat{\delta}} |g(\sqrt{n}(t-\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})| \overline{\Pi}_n(t)\ dt \\
&\leq \frac{\int_{\|t-\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}\|>\hat{\delta}-\|\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}-\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}\|} |g(\sqrt{n}(t-\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})|\pi(t)\exp\{\ell_n(t)\}\ dt}{\int_{\|t-\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}\|>\bar{\delta}} \pi(t)\exp\{\ell_n(t)\}\ dt} \\
&\leq \frac{\int_{\|t-\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}\|>\hat{\delta}-\|\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}-\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}\|} |g(\sqrt{n}(t-\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})|\pi(t)\exp\{\ell_n(t)-\ell_n(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\}\ dt}{\int_{\|t-\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}\|>\bar{\delta}} \pi(t)\exp\{\ell_n(t)-\ell_n(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\}\ dt} \\
&\leq \frac{\exp(-n\hat{\kappa})\int_{\|t-\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}\|>\hat{\delta}-\|\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}-\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}\|} |g(\sqrt{n}(t-\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})|\pi(t)\ dt}{\int_{\|t-\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}\|>\bar{\delta}} \pi(t)\exp\{\ell_n(t)-\ell_n(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\}\ dt} && \text{(Assumption 5)} \\
&\leq \frac{\exp(-n\hat{\kappa})}{\int_{\|t-\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}\|>\bar{\delta}} \pi(t)\exp\{\ell_n(t)-\ell_n(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\}\ dt} && (|g| \leq 1) \\
&= \frac{n^{d_1/2}\exp(-n\hat{\kappa})}{\int_{\|u\|>\bar{\delta}\sqrt{n}} \pi(n^{-1/2}u+\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\exp\{\ell_n(n^{-1/2}u+\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})-\ell_n(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\}\ du} \\
&\leq \frac{n^{d_1/2}\exp(-n\hat{\kappa})}{\int_{\|u\|>\bar{\delta}\sqrt{n}} \pi(n^{-1/2}u+\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\exp\{-(u^\top J(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})u)/2\}\ du} && \text{(Taylor's theorem, Assumption 1)} \\
&\leq \frac{\bar{M}_2 n^{d_1/2}\exp(-n\hat{\kappa})}{\int_{\|u\|>\bar{\delta}\sqrt{n}} \exp\{-(u^\top J(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})u)/2\}\ du} && \text{(Assumption 2)} \\
&\leq \frac{|\det(J(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}))^{-1}|^{-1/2}\bar{M}_2 n^{d_1/2}\exp(-n\hat{\kappa})}{(2\pi)^{d_1/2}(1-\exp(\bar{\mathcal{T}}_J))}. && \text{(S35)}
\end{aligned}
$$

综上，$F_{2,1}$ 的最终上界表示如下：

$$
F_{2,1} \leq \exp(\hat{\mathcal{T}}_n) + \frac{|\det(J(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}))^{-1}|^{-1/2}\bar{M}_2 n^{d_1/2}\exp(-n\hat{\kappa})}{(2\pi)^{d_1/2}(1-\exp(\bar{\mathcal{T}}_J))}. \tag{S36}
$$

S4.5 控制项$F_{2,2}$

由于 g 是指示函数，使积分绝对值最大化的 g 是常数 1，因此当 $g \equiv 1$ 时，$F_{2,1}$ 取得最大值，该值为 $F_{2,2}$。因此，只需在 $g \equiv 1$ 处计算 $F_{2,1}$，即可为 $F_{2,2}$ 给出上界。

$$
\begin{aligned}
F_{2,2} := \frac{n^{-d_1/2}}{C_{\mathcal{P}}} &\left| \int_{\|u\|\leq\hat{\delta}\sqrt{n}} g(u)\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})\ du \right. \\
&\left. \cdot \int_{\|u\|>\hat{\delta}\sqrt{n}} \left[\frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2} e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}} - n^{-d_1/2}\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}) \right] du \right| \\
&&& (|g| \leq 1) \\
\leq &\left| \int_{\|u\|>\hat{\delta}\sqrt{n}} \left[\frac{|\det(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})|^{-1/2} e^{-u^\top H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})u/2}}{(2\pi)^{d_1/2}} - n^{-d_1/2}\overline{\Pi}_n(n^{-1/2}u+\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}) \right] du \right| \\
\leq &\exp(\hat{\mathcal{T}}_n) + \frac{|\det(J(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n}))^{-1}|^{-1/2}\bar{M}_2 n^{d_1/2}\exp(-n\hat{\kappa})}{(2\pi)^{d_1/2}(1-\exp(\bar{\mathcal{T}}_J))}. && \text{(S37)}
\end{aligned}
$$

注意，条件 $\sqrt{\operatorname{tr}\left[H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1}\right]/n} < \hat{\delta}$ 和 $\sqrt{\operatorname{tr}\left[J(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1}\right]/n} < \bar{\delta}$ 是推导自引理 S34、S35和S37中的不等式所要求的。这些条件在假设 9中给出。假设 4。

根据 S33、S36和 S37，重缩放变分后验 Π_n与其拉普拉斯近似之间的全变差距离满足以下上界：

$$d_{TV}\left(\mathcal{N}\left(0, H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1}\right), \overline{\Pi}_n\right) \leq \frac{\sqrt{3}\ \mathrm{tr}\left[H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1}\right] \hat{M}_1}{4\sqrt{\left(\lambda_{\min}(H_f(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})) - \hat{\delta}\hat{M}_1\right)\left(1-\exp(\hat{\mathcal{T}}_n)\right)}} n^{-1/2} + 2\exp(\hat{\mathcal{T}}_n) + \frac{2\left|\det(J(\bar{\boldsymbol{\theta}}_{1_n})^{-1})\right|^{-1/2}\bar{M}_2}{(2\pi)^{d_1/2}\left(1-\exp(\bar{\mathcal{T}}_J)\right)} n^{d_1/2}\exp(-n\hat{\kappa}).$$

□

注意，如果假设1–5 成立，且固定维度 d_1，那么所有界都会以 $n\to\infty$的速率趋于 $\frac{1}{\sqrt{n}}$，只要$\hat{\kappa} \gg \frac{d_1+1}{2}\cdot\log n$。这些界完全是非渐近且可计算的。更多详情请参见Kasprzak 等人(2025) 的附录 D。

S5 定理2的证明

本节给出正文中定理2 的证明。证明通过验证以下结论展开：在重参数化贝叶斯响应包络模型下，模型特定假设6以趋于 1 的概率蕴含假设1–5 。建立这些条件后，通过将非共轭块 $\boldsymbol{\theta}_1$ 与$\tilde{}$ $\tilde{}$包络参数 $\boldsymbol{A}$ 对应，并将共轭块 $\boldsymbol{\theta}_2$与 $\boldsymbol{Z}=(\tilde{\boldsymbol{\mu}},\ \tilde{\boldsymbol{\eta}},\ \boldsymbol{\Omega},\ \boldsymbol{\Omega}_0)$对应，即可直接由定理1推出结论。

为清晰起见，我们首先整理若干辅助引理，用以控制变分对数似然 $\ell_n^\dagger(\boldsymbol{A})$ 和变分对数后验 $\tilde{f}_n^\dagger(\boldsymbol{A})$的局部曲率与局部化性质。随后，我们结合这些引理，在假设1–5 下验证假设6，从而完成证明。

引理 13 (变分对数似然和对数后验的局部强凹性)。 假设*6* 成立。那么，以趋于 *1* 的概率，存在常数 $\delta>0$，使得对于所有充分大的 n,

$$\inf_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}} \lambda_{\min}\Big(-\tfrac{1}{n}\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\ell_n^\dagger(\boldsymbol{A})\Big) \geq \delta.$$

此外，在矩阵正态先验分布 $\boldsymbol{A}\sim\mathcal{MN}_{r-u,u}(\boldsymbol{A}_0, \boldsymbol{U}_0^{(\boldsymbol{A})}, \boldsymbol{V}_{(\boldsymbol{A})0})$下，变分对数后验 $\tilde{f}_n^\dagger(\boldsymbol{A}) = \ell_n^\dagger(\boldsymbol{A}) +$对数 $\pi(\boldsymbol{A})$满足

$$\inf_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}} \lambda_{\min}\Big(-\tfrac{1}{n}\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\tilde{f}_n^\dagger(\boldsymbol{A})\Big) \geq \delta.$$

因此， $\ell_n^\dagger(\boldsymbol{A})$ 和 $\tilde{f}_n^\dagger(\boldsymbol{A})$ 在凸集 $\mathcal{N}$ 上均一致强凹，且各自在 $\mathcal{N}$上都有唯一最大值点，记为

$$\bar{\boldsymbol{A}}_n := \operatorname*{argmax}_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}} \ell_n^\dagger(\boldsymbol{A}), \qquad \hat{\boldsymbol{A}}_n := \operatorname*{argmax}_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}} \tilde{f}_n^\dagger(\boldsymbol{A}).$$

此外，如果 $\rho - \|\bar{\boldsymbol{A}}_n - \boldsymbol{A}^\star\|_F > 0$ 和 $\rho - \|\hat{}\boldsymbol{A}_n - \boldsymbol{A}^\star\|_F > 0$，那么存在一些半径

$$0 < \bar{\delta}_y \leq \rho - \|\bar{\boldsymbol{A}}_n - \boldsymbol{A}^\star\|_F, \qquad 0 < \hat{\delta}_y \leq \rho - \|\hat{\boldsymbol{A}}_n - \boldsymbol{A}^\star\|_F,$$

使得 $\ell_n^\dagger$ 和 $\tilde{f}_n^\dagger$ 在对应的闭球 $\mathcal{B}(\bar{\boldsymbol{A}}_n, \bar{\delta}_y)$ 和$\mathcal{B}(\hat{}\boldsymbol{A}_n, \hat{}\delta_y)$上各自都有唯一最大值点。

引理 13 的证明见第 S5.1节。引理 13 证明了变分对数似然和变分对数后验在 $\mathcal{N}$ 上具有局部强凹性和唯一性，从而验证了贝叶斯响应包络模型的假设1(a),(b) 以及假设 3(a),(b)。

引理 14（局部邻域上的一致三阶导数界）。设假设 *6* 成立，且参数维数固定为 $n \to \infty$。则存在有限常数 $M_1 < \infty$（与 n 无关），使得对所有充分大的 n,

$$\sup_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}} \left\| \tfrac{1}{n}\nabla^3_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\ell_n^\dagger(\boldsymbol{A}) \right\|^* \le M_1, \qquad \sup_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}} \left\| \tfrac{1}{n}\nabla^3_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\tilde{f}_n^\dagger(\boldsymbol{A}) \right\|^* \le M_1.$$

特别地，在事件 $\mathcal{B}(\bar{\boldsymbol{A}}_n, \bar{\delta}_y) \subseteq \mathcal{N}$ 且 $\mathcal{B}(\hat{\boldsymbol{A}}_n, \hat{\delta}_y) \subseteq \mathcal{N}$（如引理 *13*）上，同一界在这些闭球上成立。

引理 14 的证明见 S5.2节。引理 14 提供了非渐近拉普拉斯近似界所需的一致三阶导数控制。假设1(c)和3(c)要求变分对数似然 $\ell_n^\dagger$ 与变分对数后验 $\tilde{f}_n^\dagger$ 的缩放后的三阶导数在其极大值点的邻域上一致有界。引理 13 保证，相关局部邻域 $\mathcal{B}(\bar{\boldsymbol{A}}_n, \bar{\delta}_y)$ 和 $\mathcal{B}(\hat{\boldsymbol{A}}_n, \hat{\delta}_y)$ 以趋于 1 的概率包含于固定紧集 $\mathcal{N}$ 中。因此，引理 14 中建立的关于 $\mathcal{N}$ 的一致界立即蕴含这些球上的相应界，从而验证了贝叶斯响应包络模型的假设1(c)和3(c)。

引理 15（关于局部最大变分似然估计中心的有限界 M_2）。令 $d_{\boldsymbol{A}} = (r-u)u$，并令 $\boldsymbol{\Sigma}_0^{(\boldsymbol{A})} = \boldsymbol{V}_0^{(\boldsymbol{A})} \otimes \boldsymbol{U}_0^{(\boldsymbol{A})}$) 为固定的先验协方差，使得 向量化$(\boldsymbol{A}) \sim \mathcal{N}$(向量化$(\boldsymbol{A}_0)$ $\boldsymbol{\Sigma}_0^{(\boldsymbol{A})}$)。固定一个紧邻域 $\mathcal{N} = \mathcal{B}(\boldsymbol{A}^\star, \rho)$，并令

$$\bar{\boldsymbol{A}}_n \in \arg\max_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}} \ell_n^\dagger(\boldsymbol{A}).$$

¯那么，对于任意固定的 $\delta > 0$,

$$\sup_{\|\boldsymbol{A}-\bar{\boldsymbol{A}}_n\|_F \le \bar{\delta}} \left| \frac{1}{\pi(\boldsymbol{A})} \right| \le M_2,$$

其中 $M_2 < \infty$ 是一个确定性常数（与 $\boldsymbol{A}$ 和 n无关）。特别地，假设 *2*对于响应包络模型上的 $\boldsymbol{A}$-更新 $\mathcal{N}$成立。

引理 15的证明见第 S5.3节。引理 15 保证假设 2 对于响应包络模型成立。

引理 *16*（固定 $q_n^\dagger$ 时局部最大变分似然估计周围的外壳层下降）。假设假设 *6* 成立。令 $\bar{\boldsymbol{A}}_n \in$ *argmax*$_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}} \ell_n^\dagger(\boldsymbol{A})$，并令 $\hat{\boldsymbol{A}}_n \in$ *argmax*$_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}} \tilde{f}_n^\dagger(\boldsymbol{A})$。令 $\bar{\delta}_y$、$\hat{\delta}_y$ 为引理 *13* 中的半径，取值满足 $\mathcal{B}(\bar{\boldsymbol{A}}_n, \bar{\delta}_y) \subset \mathcal{N}$ 且 $\mathcal{B}(\hat{\boldsymbol{A}}_n, \hat{\delta}_y) \subset \mathcal{N}$，并且不失一般性，$\hat{\bar{\delta}}_y \le \delta_y$。

Let

$$M_1 := \sup_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}} \left\| \tfrac{1}{n}\nabla^3_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}\ell_n^\dagger(\boldsymbol{A}) \right\|^*,$$

对所有充分大的 n，由引理*14*，该值有限。定义

$$\rho_n := \hat{\delta}_y - \|\bar{\boldsymbol{A}}_n - \hat{\boldsymbol{A}}_n\|_F.$$

¯那么，以趋于 1 的概率，对所有充分大的 n， $0 < \rho_n \le \delta_y$ 且

$$\sup_{\rho_n \le \|\boldsymbol{A}-\bar{\boldsymbol{A}}_n\|_F \le \delta_y} \frac{\ell_n(\boldsymbol{A}) - \ell_n(\bar{\boldsymbol{A}}_n)}{n} \;\le\; -\hat{\kappa}_n,$$

其中

$$\hat{\kappa}_n \;:=\; \min\left\{ \frac{\delta}{2}\,\rho_n^2 \;-\; \frac{M_1}{6}\,\rho_n^3,\;\; \frac{\delta}{2}\,\bar{\delta}_y^2 \;-\; \frac{M_1}{6}\,\bar{\delta}_y^3 \right\},$$

且 $\delta > 0$ 是引理 13中的一致强凹常数。特别地，$\hat{\kappa}_n > 0$ 当¯$\rho_n < 3\delta/M_1$ 且 $\delta_y < 3\delta/M_1$时。

此外，在对 $\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})$ 采用矩阵正态（高斯）先验分布时，

$$\|\hat{\boldsymbol{A}}_n - \bar{\boldsymbol{A}}_n\|_F = O(n^{-1}),$$

ˆ因此， $\rho_n \to \delta_y$ 和 $\rho_n > 0$ 以趋于 1 的概率成立。

引理 16 的证明见第 S5.4 节。引理 16 确立了变分对数似然在局部最大变分似然估计¯附近一致的外壳层下降 $\boldsymbol{A}_n$性质。具体而言，它表明¯在 $\boldsymbol{A}_n$的一个收缩邻域之外——但仍处于局部二次控制成立的区域内——变分对数似然以与 n成正比的速率下降。因此，诱导出的变分后验在该外壳层上的质量呈指数级小。

这一结果验证了假设 5所要求的尾部衰减条件，并且在控制非局部区域对精确 CAVI 更新与其拉普拉斯近似之间全变差距离的贡献方面发挥着关键作用。

对假设4 在 $\boldsymbol{A}$块上的显式验证。 令 $d_{\boldsymbol{A}} = (r-u)u$ ，并在假设6中的高概率事件上讨论。由引理 13，存在 $\delta > 0$ ，使得对所有充分大的 n,

$$-\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \ell_n^\dagger(\boldsymbol{A}) \;\succeq\; n\delta\, \boldsymbol{I}_{d_{\boldsymbol{A}}}, \qquad \forall \boldsymbol{A} \in \mathcal{N}.$$

在向量化$(\boldsymbol{A})$的高斯（矩阵正态）先验下， $\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \log \pi(\boldsymbol{A}) \preceq 0$，因此

$$-\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \tilde{f}_n^\dagger(\boldsymbol{A}) = -\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \ell_n^\dagger(\boldsymbol{A}) - \nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \log \pi(\boldsymbol{A}) \succeq n\delta\, \boldsymbol{I}_{d_{\boldsymbol{A}}}, \qquad \forall \boldsymbol{A} \in \mathcal{N}.$$

¯ ˆ特别地，在局部极大值点 $\boldsymbol{A}_n$ 与 $\boldsymbol{A}_n$处，

$$\mathrm{tr}\Big(\big[-\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \ell_n^\dagger(\bar{\boldsymbol{A}}_n) \big]^{-1} \Big) \le \frac{d_{\boldsymbol{A}}}{n\delta}, \qquad \mathrm{tr}\Big(\big[-\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \tilde{f}_n^\dagger(\hat{\boldsymbol{A}}_n) \big]^{-1} \Big) \le \frac{d_{\boldsymbol{A}}}{n\delta}.$$

因此，假设4 中的局部高斯尺度为 $O(n^{-1/2})$。

此外，由于 $\nabla \ell_n^\dagger(\bar{\boldsymbol{A}}_n) = 0$ 且 $\nabla \tilde{f}_n^\dagger(\hat{\boldsymbol{A}}_n) = 0$，存在位于¯ ˆ$\boldsymbol{A}_n$ 与 $\boldsymbol{A}_n$ 之间线段上的 $\tilde{\boldsymbol{A}}_n$ ，使得

$$-\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \ell_n^\dagger(\tilde{\boldsymbol{A}}_n) \big(\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}_n) - \mathrm{vec}(\bar{\boldsymbol{A}}_n) \big) = \nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \log \pi(\hat{\boldsymbol{A}}_n).$$

利用 $-\nabla^2 \ell_n^\dagger(\tilde{\boldsymbol{A}}_n) \succeq n\delta\, \boldsymbol{I}$ 以及 $\mathcal{N}$的紧致性，可得

$$\|\hat{\boldsymbol{A}}_n - \bar{\boldsymbol{A}}_n\|_F = \|\,\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}_n) - \mathrm{vec}(\bar{\boldsymbol{A}}_n)\|_2 \le \frac{1}{n\delta} \sup_{\boldsymbol{A} \in \mathcal{N}} \|\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \log \pi(\boldsymbol{A})\|_2 = O(n^{-1}).$$

因此，假设中要求的邻近性和尺度不等式4对所有充分大的 n均成立。

综上，引理 13、14、15、16以及上文验证了假设 1–5 在假设 6下适用于重新参数化的贝叶斯响应包络模型。

S5.1 引理证明 13

我们首先给出并证明命题 17，以确保二阶导数与期望可以互换。

命题 *17*（微分与期望的交换（二阶））。假设条件 *6* 成立。固定 *CALVI*~ ~方案中使用的当前变分因子 $q(\boldsymbol{Z}) = q(\tilde{\boldsymbol{\mu}})\, q(\tilde{\boldsymbol{\eta}})\, q(\Omega)\, q(\Omega_0)$，其中 $q(\tilde{\boldsymbol{\mu}})\, q(\tilde{\boldsymbol{\eta}})$ 为高斯分布，$q(\Omega)\, q(\Omega_0)$ 为逆威沙特分布。令 $\log p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{Y}_n)$ 表示式 *(12)* 中重参数化后的完整数据对数后验。固定 $\boldsymbol{A}^\star$ 的一个有界邻域 $\mathcal{N}$。

那么，存在一个可测函数 $h_2(\boldsymbol{Z})$，它与 $\boldsymbol{A}$ 无关，使得

$$\sup_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}} \left\| \nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \log p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{Y}_n) \right\|_{op} \;\le\; h_2(\boldsymbol{Z}), \qquad \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{Z})}[h_2(\boldsymbol{Z})] < \infty.$$

因此，对于每个 $\boldsymbol{A} \in \mathcal{N}$，

$$\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \int q(\boldsymbol{Z})\, \log p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{Y}_n)\, d\boldsymbol{Z} = \int q(\boldsymbol{Z})\, \nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \log p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{Y}_n)\, d\boldsymbol{Z}.$$

命题 *17* 的证明。在式 (12) 中，参数 $\boldsymbol{A}$ 仅通过以下项出现：$\log |\boldsymbol{I}_u + \boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{A}|$、仿射映射 $\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}$ 和 $\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}$，以及高斯先验项。（其余所有项均与 $\boldsymbol{A}$ 无关。）回忆$\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{K} + \boldsymbol{L}\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{L} - \boldsymbol{K}\boldsymbol{A}^\top$，因此 $\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}$ 和 $\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}$ 关于 $\boldsymbol{A}$是仿射的。

根据假设 6，对于每个 $\boldsymbol{A} \in \mathcal{N}$，

$$\|\boldsymbol{A}\|_{op} \le \|\boldsymbol{A}\|_F \le \|\boldsymbol{A}^\star\|_F + \rho \;=:\; B_{\mathcal{N}} < \infty.$$

步骤 1：构造一个 $\boldsymbol{A}$一致的海森矩阵界。将 ($\boldsymbol{A}$相关部分（12)（略去加法常数）写为

$$\begin{aligned}\log p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{Y}_n) = c_n\, \log |\boldsymbol{I}_u + \boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{A}| - \frac{1}{2}\,\mathrm{tr}\Big(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^\top \boldsymbol{S}_1(\tilde{\boldsymbol{\mu}})\, \boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}\, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}\Big) - \frac{1}{2}\,\mathrm{tr}\Big(\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^\top \boldsymbol{S}_0(\tilde{\boldsymbol{\mu}})\, \boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}\, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0^{-1}\Big) \\ - \frac{1}{2}\,\mathrm{tr}\Big((\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}_0)^\top \boldsymbol{U}_0^{(\boldsymbol{A})-1} (\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}_0)\, \boldsymbol{V}_0^{(\boldsymbol{A})-1}\Big) \;+\; \mathrm{tr}\Big(\tilde{\boldsymbol{\eta}}\, \boldsymbol{H}(\tilde{\boldsymbol{\mu}})\, \boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}\, \tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}\Big),\end{aligned}$$

其中 $c_n = \frac{2n+\nu^{(1)}+\nu^{(0)}}{2}$和

$$\boldsymbol{S}_1(\tilde{\boldsymbol{\mu}}) := \mathbb{Y}_{\tilde{\boldsymbol{\mu}}}^\top \mathbb{Y}_{\tilde{\boldsymbol{\mu}}} + \boldsymbol{B}_0 \boldsymbol{M} \boldsymbol{B}_0^\top + \psi^{(1)} \boldsymbol{I}_r, \qquad \boldsymbol{S}_0(\tilde{\boldsymbol{\mu}}) := \mathbb{Y}_{\tilde{\boldsymbol{\mu}}}^\top \mathbb{Y}_{\tilde{\boldsymbol{\mu}}} + \psi^{(0)} \boldsymbol{I}_r.$$

最后的迹项关于 $\boldsymbol{A}$ 呈线性（因为 $\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}$ 关于 $\boldsymbol{A}$是仿射的），因此它关于 $\boldsymbol{A}$ 的二阶导数为零，不会对海森矩阵产生贡献。

(a) 对数行列式项。令 $g(\boldsymbol{A}) = \log |\boldsymbol{I}_u + \boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{A}|$，且 $J(\boldsymbol{A}) = (\boldsymbol{I}_u + \boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{A})^{-1}$。则$\nabla_{\boldsymbol{A}} g(\boldsymbol{A}) = 2\boldsymbol{A} J(\boldsymbol{A})$，对于任意方向 $\boldsymbol{U}$，

$$D(\nabla_{\boldsymbol{A}} g(\boldsymbol{A}))[\boldsymbol{U}] = 2\boldsymbol{U} J(\boldsymbol{A}) - 2\boldsymbol{A} J(\boldsymbol{A})\, (\boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{U} + \boldsymbol{U}^\top \boldsymbol{A})\, J(\boldsymbol{A}).$$

利用 $\|J(\boldsymbol{A})\|_{op} \le 1$和 $\|\boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{U} + \boldsymbol{U}^\top \boldsymbol{A}\|_F \le 2\|\boldsymbol{A}\|_F \|\boldsymbol{U}\|_F$，可得

$$\|D(\nabla_{\boldsymbol{A}} g(\boldsymbol{A}))[\boldsymbol{U}]\|_F \le (2 + 4\|\boldsymbol{A}\|_F^2)\, \|\boldsymbol{U}\|_F \le (2 + 4B_{\mathcal{N}}^2)\, \|\boldsymbol{U}\|_F,$$

因此

$$\sup_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}} \|\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} g(\boldsymbol{A})\|_{op} \;\le\; 2 + 4B_{\mathcal{N}}^2.$$

（*b*）二次迹项。展开 $\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{K} + \boldsymbol{L}\boldsymbol{A}$ 得到

$$\operatorname{tr}(\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\boldsymbol{S}_1\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{A}}\,\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}) = \operatorname{tr}(\boldsymbol{A}^{\top}\boldsymbol{L}^{\top}\boldsymbol{S}_1\boldsymbol{L}\,\boldsymbol{A}\,\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}) + (\text{terms at most linear in } \boldsymbol{A}).$$

因此，该项的 $\boldsymbol{A}$负海森矩阵等于二次型$\operatorname{tr}(\boldsymbol{A}^{\top}\boldsymbol{L}^{\top}\boldsymbol{S}_1\boldsymbol{L}\,\boldsymbol{A}\,\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1})$的海森矩阵。利用（14）可得

$$\left\|\nabla^2_{\operatorname{vec}(\boldsymbol{A})} \operatorname{tr}(\boldsymbol{A}^{\top}\boldsymbol{L}^{\top}\boldsymbol{S}_1(\tilde{\boldsymbol{\mu}})\boldsymbol{L}\,\boldsymbol{A}\,\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1})\right\|_{op} \le 2\,\|\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}\|_{op}\,\|\boldsymbol{L}^{\top}\boldsymbol{S}_1(\tilde{\boldsymbol{\mu}})\boldsymbol{L}\|_{op}.$$

乘以（ $1/2$ 12）中的因子后，得到贡献项 $\|\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}\|_{op}\,\|\boldsymbol{L}^{\top}\boldsymbol{S}_1(\tilde{\boldsymbol{\mu}})\boldsymbol{L}\|_{op}$。类似地，展开 $\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{L} - \boldsymbol{K}\boldsymbol{A}^{\top}$ 可得

$$\operatorname{tr}(\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\boldsymbol{S}_0\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}\,\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0^{-1}) = \operatorname{tr}(\boldsymbol{A}^{\top}\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0^{-1}\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{K}^{\top}\boldsymbol{S}_0(\tilde{\boldsymbol{\mu}})\boldsymbol{K}) + (\text{terms at most linear in } \boldsymbol{A}),$$

因此

$$\left\|\nabla^2_{\operatorname{vec}(\boldsymbol{A})} \operatorname{tr}(\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^{\top}\boldsymbol{S}_0(\tilde{\boldsymbol{\mu}})\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}\,\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0^{-1})\right\|_{op} \le 2\,\|\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0^{-1}\|_{op}\,\|\boldsymbol{K}^{\top}\boldsymbol{S}_0(\tilde{\boldsymbol{\mu}})\boldsymbol{K}\|_{op},$$

所以， $1/2$ 因子产生的贡献项为 $\|\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0^{-1}\|_{op}\,\|\boldsymbol{K}^{\top}\boldsymbol{S}_0(\tilde{\boldsymbol{\mu}})\boldsymbol{K}\|_{op}$。

(c) 高斯先验项。先验项关于 $\operatorname{vec}(\boldsymbol{A})$ 是二次的，因此其海森矩阵为常数矩阵 $-(\boldsymbol{V}_{(\boldsymbol{A})\,0})^{-1} \otimes (\boldsymbol{U}_0^{(\boldsymbol{A})})^{-1}$，故在 $\mathcal{N}$ 上有界：

$$\left\|\nabla^2_{\operatorname{vec}(\boldsymbol{A})} \log \pi(\boldsymbol{A})\right\|_{op} = \left\|(\boldsymbol{V}_0^{(\boldsymbol{A})})^{-1} \otimes (\boldsymbol{U}_0^{(\boldsymbol{A})})^{-1}\right\|_{op} = \|(\boldsymbol{V}_0^{(\boldsymbol{A})})^{-1}\|_{op}\,\|(\boldsymbol{U}_0^{(\boldsymbol{A})})^{-1}\|_{op}.$$

汇总以上三项贡献，并利用 $\|\boldsymbol{L}^{\top}\boldsymbol{S}\boldsymbol{L}\|_{op} \le \|\boldsymbol{S}\|_{op}$, $\|\boldsymbol{K}^{\top}\boldsymbol{S}\boldsymbol{K}\|_{op} \le \|\boldsymbol{S}\|_{op}$，可得对所有 $\boldsymbol{A} \in \mathcal{N}$，

$$\left\|\nabla^2_{\operatorname{vec}(\boldsymbol{A})} \text{对数 } p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{Y}_n)\right\|_{op} \le c_n(2 + 4B_{\mathcal{N}}^2) + \|\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}\|_{op}\,\|\boldsymbol{S}_1(\tilde{\boldsymbol{\mu}})\|_{op} + \|\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0^{-1}\|_{op}\,\|\boldsymbol{S}_0(\tilde{\boldsymbol{\mu}})\|_{op} + C_{\pi},$$

其中 $C_{\pi} := \|(\boldsymbol{V}_{(\boldsymbol{A})\,0})^{-1}\|_{op}\,\|(\boldsymbol{U}_0^{(\boldsymbol{A})})^{-1}\|_{op}$. 最后， $\|\boldsymbol{S}_1(\tilde{\boldsymbol{\mu}})\|_{op} \le \|\mathbb{Y}_{\tilde{\boldsymbol{\mu}}}\|_F^2 + C_{S,1}$ 以及 $\|\boldsymbol{S}_0(\tilde{\boldsymbol{\mu}})\|_{op} \le \|\mathbb{Y}_{\tilde{\boldsymbol{\mu}}}\|_F^2 + C_{S,0}$ 对于常数 $C_{S,1}, C_{S,0} < \infty$。因此我们可以定义

$$h_2(\boldsymbol{Z}) := c_n(2 + 4B_{\mathcal{N}}^2) + \left(\|\tilde{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}\|_{op} + \|\tilde{\boldsymbol{\Omega}}_0^{-1}\|_{op}\right)\left(\|\mathbb{Y}_{\tilde{\boldsymbol{\mu}}}\|_F^2 + 1\right) + C_0,$$

对于一个有限常数 $C_0 < \infty$，它吸收了 $C_{S,1}, C_{S,0}, C_{\pi}$ 及其他固定项，使得 $\sup_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}} \|\nabla^2_{\operatorname{vec}(\boldsymbol{A})} \log\, p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{Y}_n)\|_{op} \le h_2(\boldsymbol{Z})$。

步骤 2： $h_2(\boldsymbol{Z})$的可积性。在平均场分解下， $\tilde{\boldsymbol{\mu}}$ 在 q 下与 (Ω, Ω_0) 相互独立。由于 $q(\tilde{\boldsymbol{\mu}})$ 服从高斯分布， $\mathbb{E}_q\|\mathbb{Y}_{\tilde{\boldsymbol{\mu}}}\|_F^2 < \infty$。由于 $q(\tilde{\Omega})$ 和 $q(\tilde{\Omega}_0)$ 服从逆威沙特分布，$\mathbb{E}_q \operatorname{tr}(\tilde{\Omega}^{-1}) < \infty$ 且 $\mathbb{E}_q \operatorname{tr}(\tilde{\Omega}_0^{-1}) < \infty$，因此 $\mathbb{E}_q\|\tilde{\Omega}^{-1}\|_{op} < \infty$ 和 $\mathbb{E}_q\|\tilde{\Omega}_0^{-1}\|_{op} < \infty$ 也成立，因为对于半正定矩阵，$\|\cdot\|_{op} \le \operatorname{tr}(\cdot)$。因此 $\mathbb{E}_q[h_2(\boldsymbol{Z})] < \infty$。

步骤3：二阶导数的控制收敛。令 $F(\boldsymbol{A}) := \int q(\boldsymbol{Z}) \log\, p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{Y}_n)\, d\boldsymbol{Z}$。根据命题3， F可微，且 $\partial_j F(\boldsymbol{A}) = \int q(\boldsymbol{Z})\, \partial_j \log\, p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{Y}_n)\, d\boldsymbol{Z}$。固定指标 j, k，并令 e_k 为坐标 $\operatorname{vec}(\boldsymbol{A})$ 中第 k 个欧几里得基向量。对于满足 $\boldsymbol{A}_t := \boldsymbol{A} + t\,\operatorname{vec}^{-1}(e_k) \in \mathcal{N}$ 的 $t \neq 0$，定义

$$\Delta_t(\boldsymbol{Z}) := \frac{\partial_j \log p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{A}_t \mid \mathbb{Y}_n) - \partial_j \log p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{Y}_n)}{t}.$$

根据中值定理，对于每个 $\boldsymbol{Z}$，存在 $\xi = \xi(\boldsymbol{Z}, t) \in (0,1)$，使得

$$\Delta_t(\boldsymbol{Z}) = \partial^2_{jk} \log p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{A} + \xi(\boldsymbol{Z}, t)(\boldsymbol{A}_t - \boldsymbol{A}) \mid \mathbb{Y}_n).$$

因此 $|\Delta_t(\boldsymbol{Z})| \le \|\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \log\, p(\boldsymbol{Z}, \cdot \mid \mathbb{Y}_n)\|_{op} \le h_2(\boldsymbol{Z})$。此外，根据 (12) 在 $\boldsymbol{A}$ 中的 C^2-光滑性，$\Delta_t(\boldsymbol{Z}) \to \partial^2_{jk} \log\, p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{Y}_n)$ 逐点成立，当 $t \to 0$ 时。由于 h_2 是 q–可积的，控制收敛给出

$$\partial^2_{jk} F(\boldsymbol{A}) = \int q(\boldsymbol{Z})\, \partial^2_{jk} \log p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{Y}_n)\, d\boldsymbol{Z}.$$

对所有 j, k 进行此操作，即可得到矩阵恒等式

$$\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} F(\boldsymbol{A}) = \int q(\boldsymbol{Z})\, \nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \log p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{A} \mid \mathbb{Y}_n)\, d\boldsymbol{Z},$$

由此完成证明。 □

我们证明引理13。

引理 *13* 的证明。根据命题 17, $\ell^\dagger_n(\boldsymbol{A})$ 在 $\mathcal{N}$ 上二阶可微，且我们可以交换$\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})}$ 与 $q^\dagger_n$-积分。因此，对于所有 $\boldsymbol{A} \in \mathcal{N}$,

$$\begin{aligned}\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \ell^\dagger_n(\boldsymbol{A}) &= \nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \int q^\dagger_n(\boldsymbol{Z}) \log p(\mathbb{Y}_n, \boldsymbol{Z} \mid \boldsymbol{A}) d\boldsymbol{Z} \\ &= \mathbb{E}_{q^\dagger_n(\boldsymbol{Z})}\big[\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \log p(\mathbb{Y}_n, \boldsymbol{Z} \mid \boldsymbol{A})\big] := -\mathbf{J}_n(\boldsymbol{A}),\end{aligned}$$

这里用到了假设 6(b) 中的定义。因此，根据假设 6(b),

$$\inf_{\boldsymbol{A} \in \mathcal{N}} \lambda_{\min}\Big(-\frac{1}{n} \nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \ell^\dagger_n(\boldsymbol{A}) \Big) \ge \delta$$

接下来，由于 $\tilde{f}^\dagger_n(\boldsymbol{A}) = \ell^\dagger_n(\boldsymbol{A}) + \log\, \pi(\boldsymbol{A})$,

$$-\frac{1}{n} \nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \tilde{f}^\dagger_n(\boldsymbol{A}) = -\frac{1}{n} \nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \ell^\dagger_n(\boldsymbol{A}) - \frac{1}{n} \nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \log \pi(\boldsymbol{A}).$$

在矩阵正态先验分布 $\boldsymbol{A} \sim \mathcal{MN}_{r-u,u}(\boldsymbol{A}_0, \boldsymbol{U}_0^{(\boldsymbol{A})}, \boldsymbol{V}_{(\boldsymbol{A})\,0})$ 下，

$$\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \log \pi(\boldsymbol{A}) = -(\boldsymbol{V}_0^{(\boldsymbol{A})})^{-1} \otimes (\boldsymbol{U}_0^{(\boldsymbol{A})})^{-1} \preceq 0,$$

因此 $-\nabla^2 \log \pi(\boldsymbol{A}) \succeq 0$，从而

$$-\frac{1}{n} \nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \tilde{f}^\dagger_n(\boldsymbol{A}) \succeq -\frac{1}{n} \nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \ell^\dagger_n(\boldsymbol{A}).$$

因此，对于 $\tilde{f}^\dagger_n$，同样成立曲率下界 c_0 。

$-\nabla^2 \ell^\dagger_n$ 和 $-\nabla^2 \tilde{f}^\dagger_n$ 上的一致下界意味着 $\ell^\dagger_n$ 和 $\tilde{f}^\dagger_n$ 在凸集 $\mathcal{N}$ 上一致强凹，因此它们各自在 $\mathcal{N}$ 上均有唯一最大值点。

最后，由于 $\mathcal{N} = \mathcal{B}(\boldsymbol{A}^\star, \rho)$，若 $\rho - \|\bar{\boldsymbol{A}}_n - \boldsymbol{A}^\star\|_F > 0$，则任意 $\bar{\delta}_y \in (0, \rho - \|\bar{\boldsymbol{A}}_n - \boldsymbol{A}^\star\|_F]$ 均满足$\mathcal{B}(\bar{\boldsymbol{A}}_n, \bar{\delta}_y) \subseteq \mathcal{N}$。同理可得$\hat{}\ \boldsymbol{A}_n$ 和 $\hat{}\ \delta_y$。 □

S5.2 引理证明 14

引理的证明 *14*。固定当前迭代值 $q^\dagger_n(\boldsymbol{Z})$ 并考虑其诱导的 $\boldsymbol{A}$-目标函数 $\tilde{f}^\dagger_n(\boldsymbol{A}) = \ell^\dagger_n(\boldsymbol{A}) + \log \pi(\boldsymbol{A})$ 对于固定的 $q^\dagger_n$ $\boldsymbol{A}$-更新。忽略 $\boldsymbol{A}$ 中的加性常数后，(S7) 中的显式表达式可写为

$$\tilde{f}^\dagger_n(\boldsymbol{A}) = \kappa\, g(\boldsymbol{A}) + Q_n(\boldsymbol{A}), \qquad g(\boldsymbol{A}) := \log\big|\boldsymbol{I}_{r-u} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\top\big|, \qquad \kappa := \frac{2n + \nu^{(1)} + \nu^{(0)}}{2},$$

其中，$Q_n(\boldsymbol{A})$ 汇集了其余所有依赖于 $\boldsymbol{A}$ 的项。在固定的 $q_n^\dagger$ 更新下，$Q_n(\boldsymbol{A})$ 中的所有项关于 $\boldsymbol{A}$ 的各个元素至多为二次（迹二次型和迹线性型），因此

$$\nabla^3_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} Q_n(\boldsymbol{A}) \equiv 0.$$

此外，在 $\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})$ 上的矩阵正态（高斯）先验下，$\log \pi(\boldsymbol{A})$ 是 $\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})$ 的二次型，因此

$$\nabla^3_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \log \pi(\boldsymbol{A}) \equiv 0.$$

从而，

$$\nabla^3_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \tilde{f}_n^\dagger(\boldsymbol{A}) = \kappa\, \nabla^3_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} g(\boldsymbol{A}), \qquad \nabla^3_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \ell_n^\dagger(\boldsymbol{A}) = \nabla^3_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \tilde{f}_n^\dagger(\boldsymbol{A}),$$

对所有 $\boldsymbol{A}$ 成立。

接下来，映射 $\boldsymbol{A} \mapsto g(\boldsymbol{A}) = \log|\boldsymbol{I}_{r-u} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\top|$ 在 $\mathbb{R}^{(r-u)\times u}$ 上是 C^∞，因为对每一个 $\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{I}_{r-u} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\top$ 都是正定的。因此 $\boldsymbol{A} \mapsto \|\nabla^3_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} g(\boldsymbol{A})\|^*$ 是连续的。由于 $\mathcal{N}$ 是紧的，极值定理表明

$$C_{3,\mathcal{N}} := \sup_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}} \left\| \nabla^3_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} g(\boldsymbol{A}) \right\|^* < \infty.$$

因此，对所有 $\boldsymbol{A} \in \mathcal{N}$，

$$\left\| \tfrac{1}{n} \nabla^3_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \tilde{f}_n^\dagger(\boldsymbol{A}) \right\|^* = \frac{\kappa}{n} \left\| \nabla^3_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} g(\boldsymbol{A}) \right\|^* \le \frac{\kappa}{n} C_{3,\mathcal{N}}.$$

由于 $(\nu^{(1)} + \nu^{(0)})$ 是固定的，

$$\frac{\kappa}{n} = 1 + \frac{\nu^{(1)} + \nu^{(0)}}{2n} \le 2 \quad \text{for all } n \ge \nu^{(1)} + \nu^{(0)}.$$

因此，对于所有充分大的 n，

$$\sup_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}} \left\| \tfrac{1}{n} \nabla^3_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \tilde{f}_n^\dagger(\boldsymbol{A}) \right\|^* \le 2C_{3,\mathcal{N}}.$$

令 $M_1 := 2C_{3,\mathcal{N}}$ 即可证明该结论。

最后，根据引理 13，闭球 $\mathcal{B}(\bar{\boldsymbol{A}}_n, \bar{\delta}_y)$ 和 $\mathcal{B}(\hat{\boldsymbol{A}}_n, \hat{\delta}_y)$ 均为 $\mathcal{N}$ 的子集，且其发生概率趋于 1，因此这些闭球上也成立相同的一致界。 □

S5.3 引理 15的证明

P引理 *15*的证明。 在高斯（矩阵正态）先验 向量化$(\boldsymbol{A}) \sim \mathcal{N}$(向量化$(\boldsymbol{A}_0)$ $\boldsymbol{\Sigma}_0^{(\boldsymbol{A})}$)下，

$$\frac{1}{\pi(\boldsymbol{A})} = (2\pi)^{d_{\boldsymbol{A}}/2} |\boldsymbol{\Sigma}_0^{(\boldsymbol{A})}|^{1/2} \exp\left\{ \frac{1}{2} (\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}) - \mathrm{vec}(\boldsymbol{A}_0))^\top \boldsymbol{\Sigma}_0^{(\boldsymbol{A})-1} (\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}) - \mathrm{vec}(\boldsymbol{A}_0)) \right\}.$$

利用 $x^\top \Sigma^{-1} x \le \|x\|_2^2 / \lambda_{\min}(\Sigma)$，我们得到

$$\frac{1}{\pi(\boldsymbol{A})} \le (2\pi)^{d_{\boldsymbol{A}}/2} |\boldsymbol{\Sigma}_0^{(\boldsymbol{A})}|^{1/2} \exp\left\{ \frac{\|\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}) - \mathrm{vec}(\boldsymbol{A}_0)\|_2^2}{2\,\lambda_{\min}(\boldsymbol{\Sigma}_0^{(\boldsymbol{A})})} \right\}.$$

对于任意满足 $\|\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}_n\|_F \le \delta$ 的 $\boldsymbol{A}$，

$\|$向量化$(\boldsymbol{A})$−向量化$(\boldsymbol{A}_0)\|_2 \le \|$向量化$(\boldsymbol{A})$−向量化$(\boldsymbol{A}_n)\|_2 + \|$向量化$(\boldsymbol{A}_n)$−向量化$(\boldsymbol{A}_0)\|_2 \le \delta + \|$向量化$(\boldsymbol{A}_n)$−向量化$(\boldsymbol{A}_0)\|_2$.

根据定义， $\bar{\boldsymbol{A}}_n \in \mathcal{N} = \mathcal{B}(\boldsymbol{A}^\star,\ \rho)$,

$$\|\text{向量化}(\bar{\boldsymbol{A}}_n)-\text{向量化}(\boldsymbol{A}_0)\|_2 \le \|\text{向量化}(\bar{\boldsymbol{A}}_n)-\text{向量化}(\boldsymbol{A}^\star)\|_2+\|\text{向量化}(\boldsymbol{A}^\star)-\text{向量化}(\boldsymbol{A}_0)\|_2 \le \rho+\|\text{向量化}(\boldsymbol{A}^\star)-\text{向量化}(\boldsymbol{A}_0)\|_2.$$

合并最后两个显示式可得

$$\sup_{\|\boldsymbol{A}-\bar{\boldsymbol{A}}_n\|_F\le\bar{\delta}} \|\operatorname{vec}(\boldsymbol{A})-\operatorname{vec}(\boldsymbol{A}_0)\|_2 \le \bar{\delta}+\rho+\|\operatorname{vec}(\boldsymbol{A}^\star)-\operatorname{vec}(\boldsymbol{A}_0)\|_2.$$

将此界代入前述不等式，即完成证明，并得到所述常数M_2。

□

S5.4 引理证明16

引理证明*16*。固定 $\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}$ 使得 $\|\boldsymbol{A}-\bar{\boldsymbol{A}}_n\|_F \le \bar{\delta}_y$。对 $\ell_n^\dagger$沿着从 $\bar{\boldsymbol{A}}_n$ 到 $\boldsymbol{A}$的线段应用泰勒定理，可得存在 $\tilde{\boldsymbol{A}}\in[\bar{\boldsymbol{A}}_n,\boldsymbol{A}]\subset\mathcal{N}$ 使得

$$\ell_n^\dagger(\boldsymbol{A})-\ell_n^\dagger(\bar{\boldsymbol{A}}_n)=\frac{1}{2}\langle \boldsymbol{A}-\bar{\boldsymbol{A}}_n,\ \nabla^2_{\operatorname{vec}(\boldsymbol{A})}\ell_n^\dagger(\tilde{\boldsymbol{A}})\,(\boldsymbol{A}-\bar{\boldsymbol{A}}_n)\rangle+\frac{1}{6}\nabla^3_{\operatorname{vec}(\boldsymbol{A})}\ell_n^\dagger(\tilde{\boldsymbol{A}})\big[\operatorname{vec}(\boldsymbol{A}-\bar{\boldsymbol{A}}_n)\big]^{\otimes 3}.$$

等价地，

$$\frac{\ell_n^\dagger(\boldsymbol{A})-\ell_n^\dagger(\bar{\boldsymbol{A}}_n)}{n}\le-\frac{1}{2}\lambda_{\min}\Big(-\tfrac{1}{n}\nabla^2_{\operatorname{vec}(\boldsymbol{A})}\ell_n^\dagger(\tilde{\boldsymbol{A}})\Big)\|\boldsymbol{A}-\bar{\boldsymbol{A}}_n\|_F^2+\frac{1}{6}\Big\|\tfrac{1}{n}\nabla^3_{\operatorname{vec}(\boldsymbol{A})}\ell_n^\dagger(\tilde{\boldsymbol{A}})\Big\|^*\|\boldsymbol{A}-\bar{\boldsymbol{A}}_n\|_F^3.$$

根据引理 13，以趋于 1 的概率，且对所有充分大的 n,

$$-\tfrac{1}{n}\nabla^2_{\operatorname{vec}(\boldsymbol{A})}\ell_n^\dagger(\boldsymbol{A}) \succeq \delta\,\mathbf{I}_{d_{\boldsymbol{A}}} \qquad \text{for all } \boldsymbol{A}\in\mathcal{N},$$

并且根据引理14，对所有充分大的 n,

$$\sup_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}}\Big\|\tfrac{1}{n}\nabla^3_{\operatorname{vec}(\boldsymbol{A})}\ell_n^\dagger(\boldsymbol{A})\Big\|^* \le M_1.$$

令 $t:=\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}_n\|_F\in[0,\delta_y]$。那么，在上述高概率事件上，

$$\frac{\ell_n^\dagger(\boldsymbol{A})-\ell_n^\dagger(\bar{\boldsymbol{A}}_n)}{n} \le f(t) := -\frac{\delta}{2}t^2+\frac{M_1}{6}t^3.$$

由于 $f'(t)=-\delta+\frac{M_1}{2}t^2=t\big(\frac{M_1}{2}t-\delta\big)$, f在 $(0,2\delta/M_1]$ 上递减，并在 $[2\delta/M_1,\infty)$ 上递增。因此，对任意壳层 $t\in[\rho_n,\bar{\delta}_y]$,

$$\sup_{\rho_n\le\|\boldsymbol{A}-\bar{\boldsymbol{A}}_n\|_F\le\bar{\delta}_y}\frac{\ell_n^\dagger(\boldsymbol{A})-\ell_n^\dagger(\bar{\boldsymbol{A}}_n)}{n} \le \max\{f(\rho_n),\,f(\bar{\delta}_y)\} = -\min\{-f(\rho_n),\,-f(\bar{\delta}_y)\}.$$

定义

$$\tilde{\delta}_n := \min\left\{\frac{\delta}{2}\rho_n^2-\frac{M_1}{6}\rho_n^3,\ \ \frac{\delta}{2}\bar{\delta}_y^2-\frac{M_1}{6}\bar{\delta}_y^3\right\},$$

从而得到

$$\sup_{\rho_n\le\|\boldsymbol{A}-\bar{\boldsymbol{A}}_n\|_F\le\bar{\delta}_y}\frac{\ell_n^\dagger(\boldsymbol{A})-\ell_n^\dagger(\bar{\boldsymbol{A}}_n)}{n} \le -\tilde{\delta}_n.$$

还需证明 $\rho_n>0$ 以趋于 1 的概率成立，且 $\|\hat{\boldsymbol{A}}_n-\bar{\boldsymbol{A}}_n\|_F=O(n^{-1})$。由于 $\hat{\boldsymbol{A}}_n$ 和 $\bar{\boldsymbol{A}}_n$ 是引理13中的球上的内点极大值点，它们的一阶条件给出

$$\nabla_{\operatorname{vec}(\boldsymbol{A})}\ell_n^\dagger(\bar{\boldsymbol{A}}_n)=0, \qquad \nabla_{\operatorname{vec}(\boldsymbol{A})}\ell_n^\dagger(\hat{\boldsymbol{A}}_n)+\nabla_{\operatorname{vec}(\boldsymbol{A})}\log\pi(\hat{\boldsymbol{A}}_n)=0.$$

˜根据泰勒定理的中值形式应用于 $\nabla \ell_n$，存在 $\boldsymbol{A}_n$ 位于$^-$ $\hat{}\boldsymbol{A}_n$ 与 $\boldsymbol{A}_n$ 之间线段上的一点，使得

$$-\nabla^2_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \ell_n^\dagger(\tilde{\boldsymbol{A}}_n)\,\big(\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}_n) - \mathrm{vec}(\bar{\boldsymbol{A}}_n)\big) = \nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \log \pi(\hat{\boldsymbol{A}}_n).$$

根据引理13，$-\nabla^2 \ell_n^\dagger(\tilde{\boldsymbol{A}}_n) \succeq n\delta \mathbf{I}$，因此

$$\|\hat{\boldsymbol{A}}_n - \bar{\boldsymbol{A}}_n\|_F = \|\,\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{A}}_n) - \mathrm{vec}(\bar{\boldsymbol{A}}_n)\|_2 \;\le\; \frac{1}{n\delta}\,\big\|\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \log \pi(\hat{\boldsymbol{A}}_n)\big\|_2.$$

在矩阵正态先验分布下，$\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}) \sim \mathcal{N}(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}_0)\ \boldsymbol{\Sigma}_0^{(\boldsymbol{A})})$，

$$\nabla_{\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})} \log \pi(\boldsymbol{A}) = -\,\boldsymbol{\Sigma}_0^{(\boldsymbol{A})-1}\big(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}) - \mathrm{vec}(\boldsymbol{A}_0)\big).$$

由于$\hat{}\ \boldsymbol{A}_n \in \mathcal{N}$ 和 $\mathcal{N}$ 是紧集，存在一个有限常数 $C_\pi < \infty$ （与 n无关），使得$\sup_{\boldsymbol{A}\in\mathcal{N}} \|\nabla \log\ \pi(\boldsymbol{A})\|_2 \le C_\pi$。因此，

$$\|\hat{\boldsymbol{A}}_n - \bar{\boldsymbol{A}}_n\|_F \;\le\; \frac{C_\pi}{n\delta} \;=\; O(n^{-1}).$$

由于$\hat{}\ \delta_y > 0$ 是固定的，且 $\rho_n = \hat{}\delta_y - \|\bar{\boldsymbol{A}}_n - \hat{}\boldsymbol{A}_n\|_F$，因此 $\rho_n > 0$ 以趋于1的概率成立，且 $\rho_n \to \delta_y$。证毕。 □

S6 补充模拟研究结果

图S1 和S2 展示了在真实包络维数为 β 时，CALVI、MH–Gibbs和Manifold–Gibbs下 $u^* = 2$所有元素的边际后验分布。与图1一致，这三种方法得到的边际分布总体相似，各系数的后验分布离散程度仅有细微差异。

致谢

本研究由韩国教育部（MOE）和韩国国家研究基金会（NRF）资助的BK21 FOUR（培育杰出研究型大学，编号5120200913674）支持。

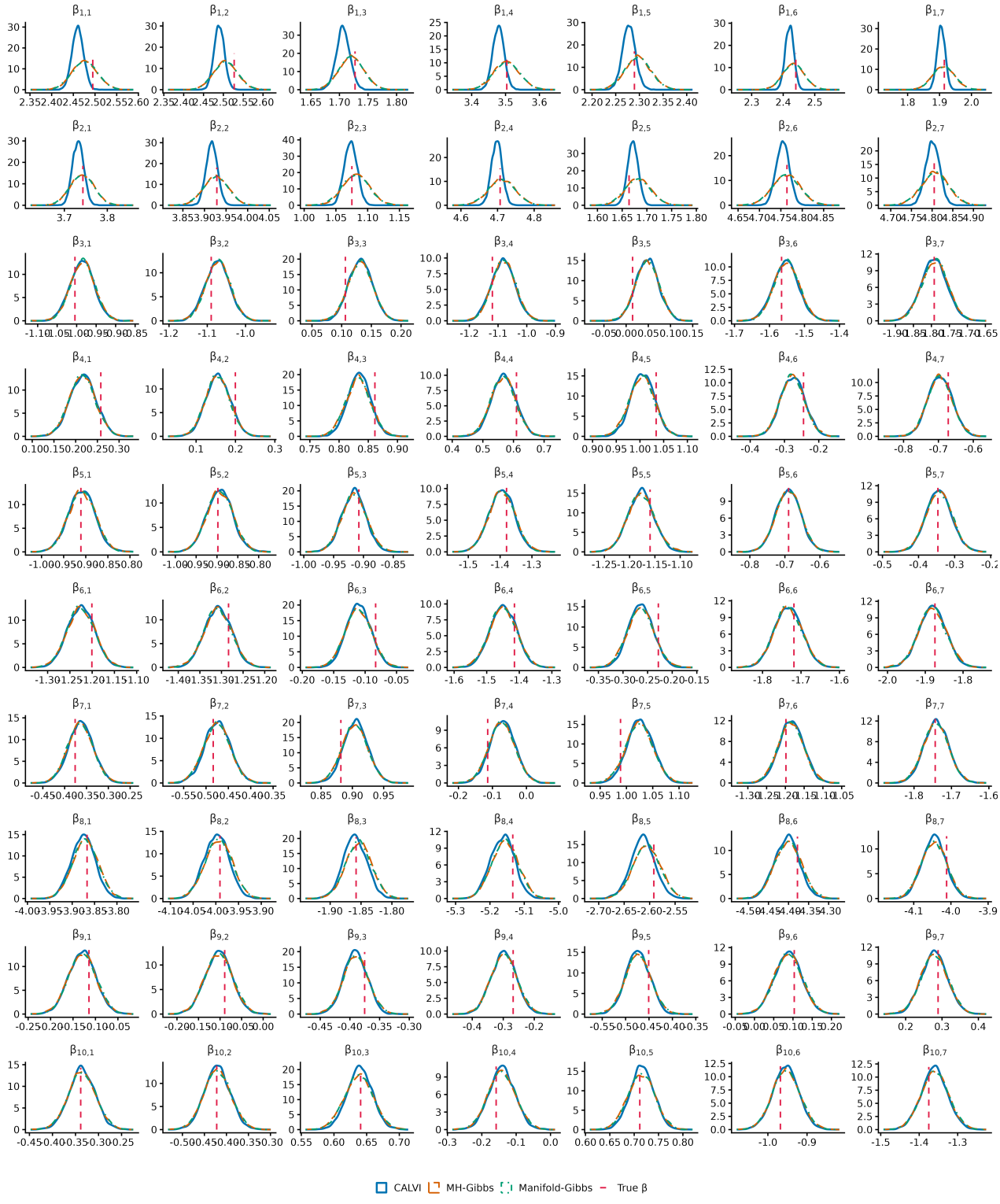
参考文献

Bishop, C.M. (2006). 模式识别与机器学习（信息科学与统计学）. Springer-Verlag，柏林，海德堡。

Blei, D. M.、Kucukelbir, A. 和 McAuliffe, J. D. (2017). 变分推断：面向统计学家的综述。美国统计学会会刊，112(518):859–877。

Chakraborty, S. 和 Su, Z. (2024a). 包络模型的综合贝叶斯框架。美国统计学会会刊，119(547):2129–2139。

Chakraborty, S. 和 Su, Z.（2024b）。《包络模型的综合贝叶斯框架》补充材料。美国统计学会会刊。



图S1：基于模拟数据的第一个重复样本，$\beta_{ij},\ i = 1,\ldots,10\ , j = 1,\ldots,7$ 的边际变分分布和后验分布。红色点线表示参数的真实值。

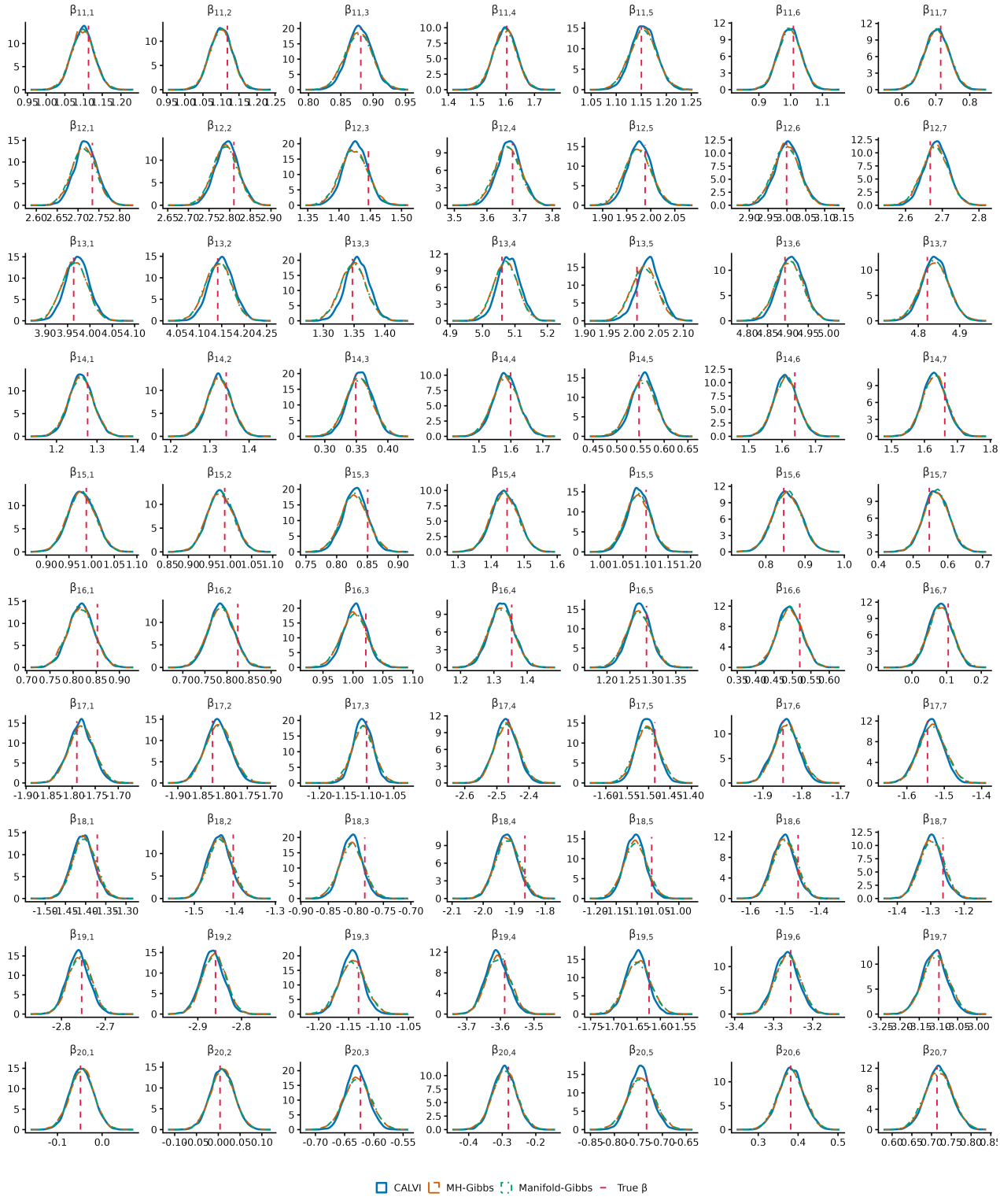


图 S2：基于模拟数据第一个重复样本的 β_{ij}、 $i = 11$、……、20 、 $j = 1$、……、7 的边际变分分布和后验分布。红色点线表示参数的真实值。

Cook, R. D., Forzani, L., and Su, Z. (2016). 关于快速包络估计的一则注记。《多元分析杂志》, 150:42–54. Cook, R. D., Li, B., and Chiaromonte, F. (2010). 用于简约高效多元线性回归的包络模型。《中华统计学志》, pages 927–960. Coppersmith, D. and Winograd, S. (1987年). 通过等差数列实现矩阵乘法。载于第十九届年度 *ACM*计算理论研讨会论文集, STOC '87, page 1–6, New York, NY, USA. 计算机协会。 Ding, S. and Cook, R. D. (2018). 矩阵变量回归与包络模型。《皇家统计学会会刊：*B*辑（统计方法论）》, 80(2):387–408. Ding, S., Su, Z., Zhu, G., and Wang, L. (2021). 包络分位数回归。《中华统计学志》, 31(1):79–105. Durante, D. and Rigon, T. (2019). 逻辑回归模型的条件共轭均值场变分贝叶斯。《统计科学》, 34(3):472 – 485. Goplerud, M. (2022). 使用变分推断快速准确估计非嵌套二项层次模型。《贝叶斯分析》, 17(2):623 – 650. Hoffman, M. D., Blei, D. M., Wang, C., and Paisley, J. (2013). 随机变分推断。《机器学习研究杂志》, 14(1):1303–1347. Hsu, D., Kakade, S., and Zhang, T. (2012). 次高斯随机向量二次型的一个尾部不等式。《概率电子通讯》, 17(none):1 – 6. Jordan, M. I., Ghahramani, Z., Jaakkola, T. S., and Saul, L. K. (1999). 图模型变分方法简介。《机器学习》, 37:183–233. Kasprzak, M. J., Giordano, R., and Broderick, T. (2022). 贝叶斯后验的拉普拉斯近似效果如何？针对多种实用散度的有限样本可计算误差界。*arXiv*预印本 *arXiv:2209.14992*. Kasprzak, M. J., Giordano, R., and Broderick, T. (2025). 贝叶斯后验的拉普拉斯近似效果如何？针对多种实用散度的有限样本可计算误差界。《机器学习研究杂志》, 26(87):1–81. Kass, R. E. and Raftery, A. E. (1995). 贝叶斯因子。美国统计学会会刊, 90(430):773–795. Khare, K., Pal, S., and Su, Z. (2017). 包络模型的贝叶斯方法。《统计年刊》, 45(1):196–222. Kolesnikov, A. V. and Milman, E. (2016). 凸集上的黎曼度量及其在庞加莱不等式和对数索博列夫不等式中的应用。《变分法与偏微分方程》, 55(4):77。

Lee, K. and Park, Y. (2024). 潜在包络多元 Probit 模型的贝叶斯推断。*Biometrics*, 80(3):ujae059. Lee, M., Chakraborty, S., and Su, Z. (2021). 包络分位数回归的贝叶斯方法。预印本. Li, L. and Zhang, X. (2017). 简约张量响应回归。美国统计学会会刊, 112(519):1131–1146. Loaiza-Maya, R. and Nibbering, D. (2023). 多项 Probit 模型的快速变分贝叶斯方法。《商业与经济统计杂志》, 41(4):1352–1363. Rujchanarong, D., Scott, D., Park, Y., Brown, S., Mehta, A. S., Drake, R., Sandusky, G. E., Naksha- tri, H., and Angel, P. M. (2022). 影响乳腺癌风险正常乳腺组织中祖源的社会经济压力相关代谢关联。《肿瘤学前沿》, 12:876651. Shen, Y., Park, Y., Chakraborty, S., and Zhang, C. (2023). 贝叶斯同步部分包络模型及其在影像遗传学分析中的应用。《新英格兰数据科学统计学杂志》, 1(2):237–269. Vempala, S. and Wibisono, A. (2019). 未校正朗之万算法的快速收敛：等周性已足够。神经信息处理系统进展, 32. Wainwright, M. J., Jordan, M. I., et al. (2008). 图模型、指数族与变分推断。《基础与趋势》® 《机器学习》, 1(1–2):1–305. Wang, C. and Blei, D. M. (2013). 非共轭模型中的变分推断。《机器学习研究杂志》.