

刘书豪 20307110229

报告主要针对本学期阅读教材《Random Matrix Methods for Machine Learning》[1]和《Application Of Random Matrix Theory In Statistics And Machine Learning》[2]以及其他相关论文后所掌握的知识脉络进行梳理,由于定理的证明和结论的推导十分繁琐(动辄上十面),本文将只对最核心的内容进行梳理。 写报告网表各个

目录

1	1专统	t 机器字 3 甲仔在的问题	2		
2	随机	l矩阵理论	2		
	2.1	基础工具	2		
	2.2	MP分布律、Wigner半圆分布律及其推广	4		
	2.3	关于协方差矩阵经验谱分布的进一步讨论	7		
		$2.3.1$ 利用Stieltjes变换的反函数求解 $supp(\tilde{\mu})$	7		
		$2.3.2$ $supp(\nu)$ 和 $supp(\mu)$ 的关系	8		
	2.4	关于 C 特征值的统计推断	10		
	2.5	Spiked模型	13		
		2.5.1 特征值溢出问题	13		
		2.5.2 扰动项对特征向量的干扰	13		
		2.5.3 扰动的统计检验方法	14		
3	应用案例分析				
	3.1	分布式线性回归模型的误差分析	14		
	3.2	核方法中的随机矩阵	16		

1 传统机器学习中存在的问题

在传统机器学习研究中,我们通常需要做一个重要假设,即数据的样本-特征比是足够大的。在这一假设下,我们可以借助大数定理、中心极限定理等传统概率论工具来解释实验结果的可靠性。

文献

但在如今的大数据时代,很多时候不仅样本量很大,特征数量也十分庞大,例如生物统计领域的细胞基因检测、金融领域的因子分析中都会出现维度很高的数据。在这种情况下,传统的大数定律和中心极限定律都会失效,一些传统认知下的共识也会发生变化。这里有两个简单的例子:

1、相关系数矩阵不收敛。

假设由一组服从标准高斯分布的数据(共1000条),先假设数据维数为10的样本,即样本矩阵大小为 1000×10 ,此时关于维度的协方差矩阵是一个 10×10 的矩阵,且根据强大数定律,该相关系数矩阵是几乎处处收敛到单位矩阵的。若假设样本的维数是2000,此时得到的相关系数矩阵为 2000×2000 的矩阵,但它的秩最多不超过 1000,故不可能收敛到单位矩阵。

2、欧式度量"失效"

考虑两组均值为0,标准差一大一下(但是是O(1)量级)的高斯分布样本。在低维空间中,明显高标准差样本会集中分布在离原点更远的地方;但是在高维空间中,假设空间维度为p十分大,可以证明样本的范数 $\|x\| \sim O(\sqrt{p})$,但 $\|x\| - E[\|x\|] \sim O(1)$,即两组样本的主要信息都被维度p盖住了,这时候再用低维时的方法去处理问题就会失效了。

总之,我们需要找到更准确的数学语言去刻画这种模型。

一般地,涉及以下两个方面的问题可以借助随机矩阵的工具找到更准确的结果:

• 协方差矩阵,如PCA、LDA等。

主成份分析 1PCA),··(LDA)

• 核矩阵,主要运用于各种核方法。

2 随机矩阵理论 公司经下,《公务一些公局大。

2.1 基础工具

Definition 1. 对于一个n维实对称方阵M,记其谱为 $\sigma(M)$,

则M的结式为一个矩阵函数: 没有用分

 $Q_M(z): \mathbb{C} \to \mathbb{C}^{n \times n}$

 $z \to (M - zI_n)^{-1}$

Definition 2. 对于一个n维实对称方阵M,记其为 $\sigma(M)$,则M的**经验谱分布** μ_M 为:

$$\mu_M = \frac{1}{n} \sum_{\lambda \in \sigma(M)} \delta_{\lambda}$$

其中 δ_{λ} 为 λ 的计数测度。

Definition 3. 对于一个实值测度 μ , 它的Stieltjes变换是一个定义在 $\mathbb{C}\setminus supp(\mu)$ 上的函数:

$$m_{\mu}(z) = \int \frac{1}{t-z} \mu(dt)$$
 不要用系件

类似于Fourier变换, Stieltjes变换也具有许多比较好的性质, 如:

- 它在定义域上是复解析的。
- 它是有界的, $|m_{\mu}(z)| \leq \frac{1}{d(z,supp(\mu))}$, すったす、、、、、
- $\Im[z] > 0$ 蕴含着 $\Im[m_{\mu}(z)] > 0$ 。
- 如果将其限制在 \mathbb{R} 上,在每个连通分支上它是单调递增的,且 $\lim_{x\to\pm\infty}m_{\mu}(x)=0$ 当然,最重要的还是它的逆转公式:

Theorem 1. 对于一个概率测度 μ , 任取a, b为它的两个连续点,则我们有:

$$\mu([a,b]) = \frac{1}{\pi} \lim_{y \downarrow 0} \int_a^b \Im[m_\mu(x+iy)] dx.$$

进一步,如果 μ 在x点具有密度函数f,则:

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{y \downarrow 0} \Im[m_{\mu}(x+iy)].$$

同时,如果 μ 在x点有离散分布,则:

$$\mu(x) = \lim_{y \downarrow 0} -iy m_{\mu}(x + iy).$$

更重要的是,如果这里的测度是经验谱分布,则我们有(记M的特征值一共有n个):

$$m_{\mu_M}(z)=rac{1}{n}\sum_{\lambda\in\sigma(M)}\intrac{\delta_\lambda(t)}{t-z}=rac{1}{n}\sum_{\lambda\in\sigma(M)}rac{1}{\lambda-z}=rac{1}{n}trQ_M(z).$$
 可以看到,我们将经验谱分布的Steiltjes变换和结式联系起来了,同时Steiltjes的逆转公

可以看到,我们将经验谱分布的Steiltjes变换和结式联系起来了,同时Steiltjes的逆转公式又天然地将告诉了我们经验谱分布的分布函数,故我们只需要研究矩阵的结式就可以知道其经验谱分布。

在本节结尾再介绍两个概念,它会使得我们在后续描述定理的时候更加方便:

Definition 4. 对于两个n维的随机矩阵或确定矩阵X,Y,我们称它们**确定性等价**,如果任取(算子函数意义下的)有界矩阵 A和有界向量a,b,在几乎处处或者依概率意义下有:

注:事实上,在后面的习题,我们会证明前两个条件"在某种意义上"是指对经验谱分布进行加权处理。

Definition 5. 记A为 \mathbb{C} 的一个子集, $m \in \mathbb{C}, z \in A$, 则我们称

$$\{(z,m)\in\mathcal{A}\times\mathbb{C}\mid (\Im[z]\neq 0 \ and \ \Im[z]\cdot\Im[m]>0) \ or$$

$$(m > 0 \text{ and } z < \inf \mathcal{A}^C \cap \mathbb{R}) \text{ or } (m < 0 \text{ and } z > \sup \mathcal{A}^C \cap \mathbb{R}) \}$$

为A的Stieltjes对集合,并记之为 $\mathcal{Z}(A)$.

Stieltjes对的定义是为了方便确定合理的Stieltjes变换(后文的m(z)可能是通过解方程得到的,会产生增退),这是因为在之前的性质我们提到过 $\Im[z]\cdot\Im[m]>0$,后两种情况是对 $\Im[z]=0$ 的补充。

2.2 MP分布律、Wigner半圆分布律及其推广

在随机矩阵的研究历史上,一开始人们将目光放在对一个确定维数的随机矩阵经验谱分布的精确刻画上,但这样不仅只有极少的特殊分布可以计算出精确值,而且得到的结果也十分复杂。之后一部分学者便将目光转向了渐近随机矩阵——即假设样本矩阵的样本数n和维数p在以下渐进条件下:

$$\lim_{n,p\to\infty} \frac{p}{n} = c \in (0,\infty)$$

在这一假设下,Marcenko和Pastur给出了著名的MP分布律[3]:

Theorem 2. 设 $X \in \mathbb{R}^{p \times n}$ 为每个元素都服从均值为0,方差为1的某轻尾分布,记 $Q(z) = \left(\frac{1}{n}XX^T - zI_p\right)^{-1}$ 为 $\frac{1}{n}XX^T$ 的结式,那么当

$$\lim_{n,p\to\infty} \frac{p}{n} = c \in (0,\infty)$$

时. 我们有:

$$Q(z) \leftrightarrow \bar{Q}(z), \quad \bar{Q}(z) = m(z)I_p$$

其中(z, m(z))是下述方程在 $\mathcal{Z}(\mathbb{C}\setminus[(1-\sqrt{c})^2, (1+\sqrt{c})^2])$ 内的唯一解:

$$zcm^{2}(z) - (1 - c - z)m(z) + 1 = 0$$

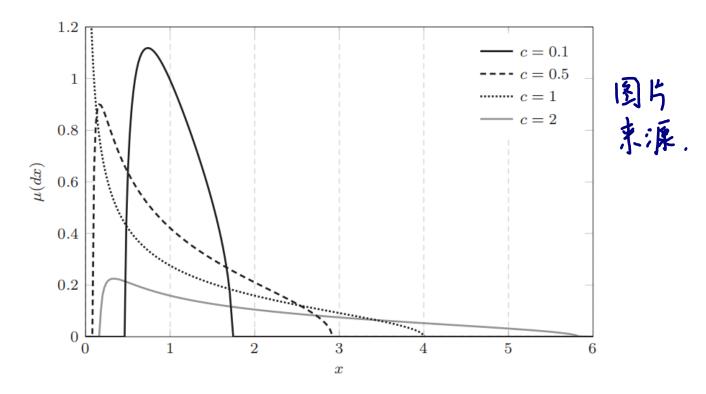


进一步地,使用逆转公式可以得到m(z)为以下概率测度的Stieltjes变换:

$$\mu(dx) = (1 - c^{-1})^{+} \delta_{0}(x) + \frac{1}{2\pi cx} \sqrt{(x - E_{-})^{+} (E_{+} - x)^{+}} dx$$

其中 $E_{\pm}=(1\pm\sqrt{c})^2,(x)^+=\max(0,x)$,且我们称 μ 为Marcenko-Pastur分布。 最关键地,矩阵 $\frac{1}{n}XX^T$ 的经验谱分布 $\mu_{\frac{1}{n}XX^T}$ 在上述渐进规律下弱收敛到 μ 。 在c取不同值时的MP分布如下图所示:





上述定理的证明是繁琐的(<u>事实上</u>,在第一次独立学习汇报上笔者花了2个多小时还没有将其讲完),这里仅对证明思路进行介绍:

约过.

(1) 由于Q是对称阵,故可以进行谱分解,记 Q_{-1} 为丢掉第一个谱之后的矩阵(即若 $Q = \sum_{k=1}^{n} v_k v_k^T$,则 $Q_{-1} = \sum_{k=2}^{n} v_k v_k^T$),定义中间变量:

$$\alpha(z) = \frac{1}{n} tr \mathbb{E}(Q_{-1}(z)), \quad \bar{\bar{Q}}(z) = (-z + \frac{1}{1 + \alpha(z)})^{-1} I_p$$

然后证明 $\|\mathbb{Q}[Q-\bar{\bar{Q}}]\|\sim O(n^{-\frac{1}{4}})$

- (2) 再证明 $|\alpha(z)-cm(z)|\to 0$,进而得到 $\|\bar{Q}(z)-\bar{\bar{Q}}(z)\|\to 0$. 进而得到确定等价的第三个关系 $\|\mathbb{E}[Q(z)-\bar{Q}(z)]\|\to 0$.
- (3) 最后再证明 $\frac{1}{p}trA(Q-\bar{Q}) \rightarrow 0, a^T(Q-\bar{Q})b \rightarrow 0$ 即可.

(4) 根据上述结果,类似于特征函数可证弱收敛性。

MP法则自然的可以应用到协方差矩阵上。

- MP律的应用条件十分广泛,只需要分布是一个轻尾分布就可以使用。(实际上轻尾分 布的条件也过强了,根据证明过程,只需要该分布具有大于8阶矩就可以证明MP律, 这里只写轻尾分布主要是因为后续推广定理证明中8阶矩不一定够用)。
- 可以看到,尽管c的值达到 $\frac{1}{100}$,其经验谱分布在渐近意义下相较于 I_n 也有将近0.2的误

上述定理是最基本的形式,事实上还有许多变式,这里不再详细阐述,只给出一个应 用范围最广的推广[4]:

Theorem 3. 若将定理2中的X改为 $C^{\frac{1}{2}}Z$. 其中C为一个半正定矩阵,Z为之前的X. 并且定

Theorem 3. 若将定理
$$Z$$
中的 X 改为 $C^{\frac{1}{2}}Z$,其中 C 为一个半正定矩义 $\tilde{Q}(z) = \left(\frac{1}{n}X^TX - zI_n\right)^{-1}$,则有:
$$Q(z) \leftrightarrow \bar{Q}(z) = -\frac{1}{z}(I_p + \tilde{m}_p(z)C)^{-1}$$
$$\tilde{Q}(z) \leftrightarrow \bar{\tilde{Q}} = \tilde{m}_p(z)I_n,$$

其中 $(z, \tilde{m}_p(z))$ 为下述方程在 $\mathcal{Z}(\mathbb{C}\backslash\mathbb{R}^+)$ 内的唯一解:

$$\tilde{m}_p(z) = \left(-z + \frac{1}{n} tr C (I_p + \tilde{m}_p(z)C)^{-1}\right)^{-1}$$

特别的,如果C的经验谱分布收敛到某一分布 $\nu(p \to \infty)$,则有

$$\mu_{\frac{1}{n}XX^T} \stackrel{a.s.}{\rightarrow} \mu, \quad \mu_{\frac{1}{n}X^TX} \stackrel{a.s.}{\rightarrow} \tilde{\mu}$$

其中 μ , $\tilde{\mu}$ 的 Stieltjes变化恰好为m(z)和 $\tilde{m}(z)$, 且:

$$m(z) = \frac{1}{c}\tilde{m}(z) + \frac{1-c}{cz}, \quad \tilde{m}(z) = \left(-z + c\int \frac{t\underline{v}(dt)}{1 + \tilde{m}(z)t}\right)^{-1}$$

从定理3中可以看出实际上协方差矩阵和Gram矩阵的经验谱分布是息息相关的,如果 将样本堪称时间,特征看成空间,我们可以说MP律反映了时空之间的联系。这一观点在其 他的推一中显得极为重要(如 $C^{\frac{1}{2}}Z\tilde{C}^{\frac{1}{2}}$ 形式的矩阵)。

但这样也带来一个问题,便是如何计算出准确值,想要求出精确的解析解就必须得保 证分布ν具有较好的形式。一般地,我们通过迭代的数值方法进行求解[5]: 可以

$$m^{(l)}(z) = \frac{1}{c}\tilde{m}^{(l)}(z) + \frac{1-c}{cz}, \quad \tilde{m}^{(l+1)}(z) = \left(-z + c\int \frac{tv(dt)}{1 + \tilde{m}^{(l)}(z)t}\right)^{-1}$$

该方法的收敛性已被证明。

注:在运用迭代法计算时,越靠近 $supp(\mu)$ 的点收敛速度越慢,所以常用的处理手法为 先计算远离 $supp(\mu)$ 的点的数值,再逐步往靠近 $supp(\mu)$ 计算,这样每次迭代的初值可以尽 可能的接近准确值,进而加快迭代速度。

在本节的最后简单叙述一下经典的Wiger半圆分布律定理[6]。

Theorem 4. 记 $X \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 为一个对称随机矩阵,其中每个元素都服从某均值为0方差为1的 轻尾分布, 记 $Q(z) = \left(\frac{X}{\sqrt{n}} - zI_n\right)^{-1}$, 则当 $n \to \infty$ 时, 我们有:

$$Q(z) \leftrightarrow \bar{Q}(z) = m(z)I_n,$$

其中 $(z, \tilde{m}_p(z))$ 为下述方程在 $\mathcal{Z}(\mathbb{C}\setminus[-2,2])$ 内的唯一解:

$$m^2(z) + zm(z) + 1 = 0$$

且经计算可得m(z)为下述概率分布的Stieltjes变换:

$$\mu(dx) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{(4-x^2)^+} dx$$
.

我们称该分布为 Wigner 半圆分布。

-

关于协方差矩阵经验谱分布的进一步讨论 2.3

本节的所有讨论都将基于定理3的条件。事实上,它和定理2是一致的,因为 I_n 的经验谱 分布测度 ν 就是 δ_1 。

在定理3中我们得到了 $\frac{1}{n}XX^T$ 和 $\frac{1}{n}X^TX$ 的极限经验谱分布 μ 和 $\tilde{\mu}$,根据高代的知识不难知 道 $\mu = \frac{1}{c}\tilde{\mu} + (1 - \frac{1}{c})\delta_0$,故我们只需将目光集中到 $\tilde{\mu}$ 的求解上。 只考虑 $\tilde{\mu}$ 的好处在于我们有一下关系式:

$$\tilde{m}(z) = \left(-z + c \int \frac{tv(dt)}{1 + \tilde{m}(z)t}\right)^{-1} \tag{1}$$

它和m(z)无关。

利用Stieltjes变换的反函数求解 $supp(\tilde{\mu})$ 2.3.1

直接求解方程(1)来得到 而的精确值是难以操作的,但我们可以将其变形为:

$$z = -\frac{1}{\tilde{m}(z)} + c \int \frac{t\underline{v}(dt)}{1 + t\tilde{m}(z)}.$$
 (2)

这样我们得到了一个定义在 $\tilde{m}(\mathbb{C}\setminus supp(\tilde{\mu}))$ 上的Stieltjes变换的逆(如果只从函数本身的 良定出发,定义域可以拓展到 $\{\tilde{m} \in \mathbb{C} | 0 \notin 1 + \tilde{m} \cdot supp(\nu)\}$ 上),但我们更关心该函数限制 在ℝ上的取值,这有以下几点好处:

 \bullet 只考虑在实轴上的取值就已经足够得到 $\tilde{\mu}$ 的相关信息了,而且还利于结果的可视化。

- 在 \mathbb{R} \supp($\tilde{\mu}$)上,Stieltjes变换是单调递增的,故其反函数也应该是单调递增的,进一步的,Silverstein和Choi也证明了反函数的每一段单调递增区间也对应了Stieltjes变换的一段逆。
- 和上面提到的一样,定义域是可以拓展到 $\{\tilde{m} \in \mathbb{R} | 0 \notin 1 + \tilde{m} \cdot supp(\nu)\}$ 上的,为了区分,我们记这段上的"Stieltjes变换"为 $\tilde{m}^{\circ}(z)$,可以证明, $\tilde{m}^{\circ}(z) = \lim_{\epsilon \downarrow 0} \tilde{m}(x + i\epsilon)$ 是存在的,进而根据关系式 $\mathfrak{I}[z] \cdot \mathfrak{I}[m(z)] > 0$ 和控制收敛定理可以知道 $\tilde{m}^{\circ}(z)$ 为下述方程的正虚部解:

$$\tilde{m}^{\circ}(z) = \left(-z + c \int \frac{tv(dt)}{1 + \tilde{m}^{\circ}(z)t}\right)^{-1}$$

解的唯一性也已被证明。此时再配合逆转公式便可得到 $\tilde{\mu}$ 在 $supp(\tilde{\mu})$ 上的概率密度函数。

总结一下,我们实际上得到了以下定理[7]:

Theorem 5. 在定理3的假设下,如果我们定义以下函数:

$$x(\cdot): \ \mathbb{R}\backslash \{\tilde{m}| -\frac{1}{\tilde{m}} \in supp(\nu)\} \to \mathbb{R}$$

$$\tilde{m} \to -\frac{1}{\tilde{m}} + c \int \frac{tv(dt)}{1 + t\tilde{m}}$$

则 $\tilde{\mu}$ 在 $\mathbb{R}\setminus\{0\}$ 上具有概率密度函数,且

- $supp(\tilde{\mu})\setminus\{0\} = \mathbb{R}\setminus\{x(\tilde{m})| \frac{1}{\tilde{m}} \in \mathbb{R}\setminus\{supp(\nu)\cup\{0\}\} \text{ and } x'(\tilde{m}) > 0\}$
- $\forall y \in supp(\tilde{\mu}), \tilde{\mu}(dy) = \begin{cases} \frac{1}{\pi}\Im[\tilde{m}^{\circ}(y)] & y \neq 0 \\ -iy\tilde{m}^{\circ}(y) & y = 0 \end{cases}$, 其中 $\tilde{m}^{\circ}(y)$ 为方程 $x(\tilde{m}^{\circ}(y)) = y$ 的唯一正虚部解。

2.3.2 $supp(\nu)$ 和 $supp(\mu)$ 的关系

我们定义一个变量代换函数:

$$\gamma: \ \mathbb{C}\backslash \{supp((\mu))\cup \{0\}\} \to \mathbb{C}$$

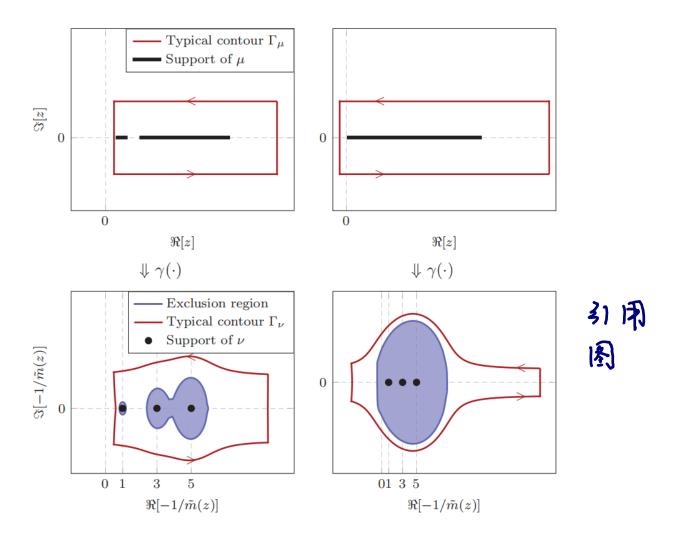
$$z=z(\tilde{m})\to -\frac{1}{\tilde{m}}$$

不难证明 γ 是一个单射且具有以下良好性质:

$$\gamma(\mathbb{C}\backslash\mathbb{R}) \subset \mathbb{C}\backslash\mathbb{R}$$
 and $\gamma(\mathbb{R}\backslash supp(\mu)) \subset \mathbb{R}\backslash supp(\nu)$

映射 γ 的单射性保证了其能把复平面内的一条闭曲线映为另一条闭曲线而且反之(局部上)也能映射回来,同时另一条性质也保证了映射前后 $supp(\mu)$ 和 $supp(\nu)$ 都被包含在了曲线内部,配合Cauchy积分公式,这一点将在后面的统计推断中起到关键作用。

下图清楚展示了映射 γ 的作用效果:



将 $supp(\nu)$ 和 $supp(\mu)$ 联系起来还有一个好处。如果只考虑 $supp(\mu)$,定理3中的弱收敛性实际上只能告诉我们,任取有界连续函数f,我们有

$$\frac{1}{p} \sum_{i=1}^{p} f(\lambda_i(\frac{1}{n}XX^T)) - \int f(t)\mu(dt) \xrightarrow{a.s.} 0$$

此时如果在上式中取f为特征函数 $1_{[a,b]}$ 的光滑化函数,其中 $[a,b] \subset \mathbb{R} \setminus supp(\mu)$,只能得到[a,b]内 $\frac{1}{n}XX^T$ 特征值个数的数量级为o(p)而不是o(1),即特征值很可能会发生"泄露"!

不过Bai和Silverstein一起在1988年和1998年借助 γ 变换分别给出了这一问题在两种不同情况下的解答[8][9],我们仅将定理陈述如下:

Theorem 6. 在定理3的假设下,如果C在算子范数意义下有界,且

$$\max_{1 \le i \le p} dist(\lambda_i(C), supp(\nu)) \to 0, \quad p \to \infty$$

则任取 $0 \le a < b \le \infty$ 且 $a, b \notin supp(\mu)$,我们有:

• 若 $\mathbb{E}[|Z_{ij}|^4] < \infty$,则:

$$\#\{\lambda_i(\frac{1}{n}XX^T)\in[a,b]\}-\#\{\lambda_i(C)\in[\gamma(a),\gamma(b)]\}\xrightarrow{a.s.}0$$

特别地,如果[a,b]是 $\mathbb{R}^+\setminus supp(\mu)$ 的一个连通子集,则有:

$$\#\{\lambda_i(\frac{1}{n}XX^T)\in[a,b]\}\xrightarrow{a.s.}0$$

• 若 $\mathbb{E}[|Z_{ij}|^4] = \infty$, 则:

$$\max_{1 \le i \le p} \lambda_i(\frac{1}{n}XX^T) \xrightarrow{a.s.} \infty$$

2.4 关于C特征值的统计推断

本节中将基于 γ 变换阐述一个随机矩阵理论的应用案例。 我们再次把目光放回方程 (1)。该式中的积分也可以看成是 ν 的Stieltjes变换,即:

$$\begin{split} \int \frac{t\nu(dt)}{1+t\tilde{m}(z)} &= \frac{1}{\tilde{m}(z)} \int \frac{t\tilde{m}(z)\nu(dt)}{1+t\tilde{m}(z)} \\ &= \frac{1}{\tilde{m}(z)} (1-\int \frac{\nu(dt)}{1+t\tilde{m}(z)}) \\ &= \frac{1}{\tilde{m}(z)} (1-\frac{1}{\tilde{m}(z)} \int \frac{\nu(dt)}{t-(-\frac{1}{\tilde{m}(z)})}) \\ &= \frac{1}{\tilde{m}(z)} (1-\frac{1}{\tilde{m}(z)} m_{\nu}(-\frac{1}{\tilde{m}(z)})) \end{split}$$

再结合等式 $m(z) = \frac{1}{c}\tilde{m}(z) + \frac{1-c}{cz}$,不难得出:

$$m_{
u}(-rac{1}{ ilde{m}(z)}) = -zm(z) ilde{m}(z)$$
 .

下面我们考虑相关矩阵C的经验谱分布 ν ,如果我们记 $\nu = \frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p}\delta_{\lambda_{i}(C)}$,则结合Cauchy积分公式可以得到:

$$\frac{1}{p} \sum_{i=1}^{p} f(\lambda_i(C)) = \int f(t)\nu(dt)$$

$$= \int \left[\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_{\nu}} \frac{f(z)dz}{z-t}\right]\nu(dt)$$

$$= -\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_{\nu}} f(z) \left[\int \frac{\nu(dt)}{t-z}\right] dz$$

$$= -\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_{\nu}} f(z) m_{\nu}(z) dz .$$

这里 $f(\cdot)$ 为在C所有特征值邻域的某邻域上解析的函数, $\Gamma_{\nu}\subset\mathbb{C}$ 为一条包含 $supp(\nu)$ 但不包含f为点的逆时针闭曲线。

进一步地我们考虑 γ (逆)变换,则环绕 $supp(\nu)$ 的 Γ_{ν} 被映为了环绕 $supp(\mu)$ 的 Γ_{μ} ,且:

$$\begin{split} \frac{1}{p} \sum_{i=1}^{p} f(\lambda_{i}(C)) &= -\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_{\mu}} f(-\frac{1}{\tilde{m}(\omega)}) m_{\mu}(\frac{1}{\tilde{m}(\omega)}) \frac{\tilde{m}'(\omega)}{\tilde{m}^{2}(\omega)} d\omega \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_{\mu}} f(-\frac{1}{\tilde{m}(\omega)}) \omega \frac{m(\omega)\tilde{m}'(\omega)}{\tilde{m}(\omega)} d\omega \\ &= \frac{1}{2c\pi i} \oint_{\Gamma_{\mu}} f(-\frac{1}{\tilde{m}(\omega)}) \omega \tilde{m}'(\omega) d\omega - \frac{1-c}{c} f(0) \cdot 1_{\{0 \in \Gamma_{\nu}^{\circ}\}} \end{split}$$

其中角标。表示曲线的内部。

可以证明,在特征值不"泄露"的条件下,也即:

$$\max_{1 \le i \le p} dist(\lambda_i(C), supp(\nu)) \to 0, \mathbb{E}[|Z_{ij}|^4] < \infty.$$

结合复分析的相关知识,等式右边满足控制收敛定理的条件,此时我们可以用 $m_{\frac{1}{n}X^TX}$ 代替 \tilde{m} ,即:

$$\frac{1}{p} \sum_{i=1}^{p} f(\lambda_i(C)) - \frac{1}{2c\pi i} \oint_{\Gamma_{\mu}} f(-\frac{1}{m_{\frac{1}{n}X^TX}(\omega)}) \omega m_{\frac{1}{n}X^TX}'(\omega) d\omega \xrightarrow{a.s.} 0$$
 (3)

这里的 Γ_{μ} 是在右半平面中环绕 $supp(\mu)\setminus\{0\}$ 的闭曲线。

之所以不考虑零点是因为,我们前面关于 γ 变换的讨论都是限制在右半平面上的,如果是包含零点的闭曲线势必会涉及到左半平面,无法保证结果的准确性。

这也告诉我们上述近似方法最好应用于c < 1的情形(否则0点会有原子质量),这也是符合我们的认知的——当p > n时,想从样本推断出相关矩阵的信息肯定是不够的。

下面我们考虑一个具体的例子。假设我们知道C的经验谱分布按一定比例分为有限个不同特征值,即:

$$\nu_C = \frac{1}{p} \sum_{i=1}^k p_i \delta_{l_i} \to \sum_{i=1}^k c_i \delta_{l_i}$$

其中 $l_1 > l_2 > \cdots > l_k > 0$,k为一个固定数, $\frac{p_i}{p} \to c_i > 0$ 。

我们希望借助式 (3)计算出 l_i 的近似值,式中的f自然取成Id函数,但是闭曲线该如何选择呢? χ なった χ 7

• 如果 $\frac{1}{n}X^TX$ 的经验谱分布是完全可分的,即可以将 $supp(\mu_{\frac{1}{n}X^TX})$ 较为准确地分成 k个连通分支,那么我们可以分别取包含这k个连通分支的闭曲线 $\Gamma_{\mu}^{(a)}$, $1 \leq a \leq k$,则:

$$l_a - \hat{l}_a \xrightarrow{a.s.} 0, \quad \hat{l}_a = -\frac{n}{p_a} \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_\mu^{(a)}} \omega \frac{m'_{\frac{1}{n}X^TX}(\omega)}{m_{\frac{1}{n}X^TX}(\omega)} d\omega$$

接下来就是利用留数定理计算 l_a 的具体值。该函数的奇点只有两种可能:

1. 一种是m本身的奇点,也就是 $m_{\frac{1}{2}X^TX}$ 的特征值 λ_i (记 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$)。根 据:

$$-\frac{n}{p_a}\omega \frac{m'_{\frac{1}{n}X^TX}(\omega)}{m_{\frac{1}{n}X^TX}(\omega)} = -\frac{n}{p_a}\omega \frac{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \frac{1}{(\lambda_i - \omega)^2}}{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \frac{1}{\lambda_i - \omega}}$$

容易计算出在 λ_i 处的留数为 $\frac{n}{p_a}\lambda_i$ (a为特征值 λ_i 按顺序对应的C的特征值种类)。 2. 另一个是 $m_{\frac{1}{n}X^TX}(\omega)$ 的零点,由Steilties变换的性质容易发现这种零点和上面的特 征值是交替出现的。同样的我们记之为 $\eta_i \in (\lambda_i, \lambda_{i+1}) \ (\eta_1 \geq \eta_2 \geq \cdots \geq \eta_n)$,将分 母在零点处一阶Taylor展开,容易算出其在 η_i 的留数为 $-\frac{n}{n_a}\eta_i$ 。

综上所述,我们实际上得到了:

$$\hat{l}_i = \frac{n}{p_a} \sum_{i=p_1+\dots+p_{a-1}+1}^{p_1+\dots+p_a} \lambda_i - \eta_i$$

这其中 λ_i 的计算是容易的, η_i 的计算可以通过以下方法:

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\lambda_i - \eta_i} = 0 \Leftrightarrow \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \frac{\lambda_i}{\lambda_i - \eta_i} - 1 = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{n} \sqrt{\lambda}^T (\Lambda - \eta_j I_n)^{-1} \sqrt{\lambda} - 1 = 0$$

$$\Leftrightarrow \det(\frac{1}{n} \sqrt{\lambda} \sqrt{\lambda}^T (\Lambda - \eta_j I_n)^{-1} - I_n) = 0$$

$$\Leftrightarrow \det(\frac{1}{n} \sqrt{\lambda} \sqrt{\lambda}^T - \Lambda + \eta_j I_n) = 0$$

其中 λ 为 λ_i 构成的列向量, Λ 为 $diag(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p)$ 。

因此, η_j 的求解可以转化为对矩阵 $\Lambda - \frac{1}{n}\sqrt{\lambda}\sqrt{\lambda}$ 工物征值的求解。进而我们得到了 l_a 的 一个估计量。

经过实验证明,这种统计推断方法比直接在每个连通分支内求平均值的做法要精确许 多(MSE误差大概相差了1到2两个数量级)[1],且C特征值的相距越远,这种方法的 效果越好。

• 如果 $\frac{1}{n}X^TX$ 的经验谱分布不可分,即出现两个两个连通分支交错在一起的情形,此时 我们无法针对每一连通分支找到对应的闭曲线。

这时我们这样操作:

以两个连通分支交错为例,类似于前面可分情形的方法,我们可以得到 $\frac{p_1}{p}l_1 + \frac{p_2}{p}l_2$ 的统 计估计量。再将式 (3)中的f取成 $f(x)=x^2$,同理可以得到 $\frac{p_1}{p}l_1^2+\frac{p_2}{p}l_2^2$ 的统计估计量,再 求解这个方程组就可以得到1,12的值了。更多连通分支的情况是类似的,只需考虑更 高次数的f即可。

Spiked模型 2.5

本节中我们将考虑一种特殊的模型,在该模型里,C被定义成单位矩阵加上一个微小 (低秩) 扰动:

$$C = I_p + P, \quad P = \sum_{i=1}^{k} l_i u_i u_i^T.$$

特征值溢出问题 2.5.1

这种情况下,C的经验谱分布 $\mu_C = \frac{p-k}{p}\delta_1 + \frac{1}{p}\sum_{i=1}^k \delta_{1+l_i} \to \delta_1$,但是注意到此时dist(1+p) $l_i, supp(\nu) = dist(1 + l_i, 1) = l_i \rightarrow 0$, 即前面的不"泄露"假设并不成立!

针对这一模型,Baik和Silverstein在2006年证明了特征值是否泄露取决于 l_i 和c的相对关 系[10]。

Theorem 7. 在定理3的假设下,且 $\mathbb{E}[|Z_{ij}|^4] < \infty$,记 $\tilde{\lambda}_1 \geq \tilde{\lambda}_2 \geq \cdots \geq \tilde{\lambda}_p$ 为 $\frac{1}{n}XX^T$ 的特征 值,则有:

$$\tilde{\lambda}_i \xrightarrow{a.s.} \begin{cases} \lambda_i = 1 + l_i + c \frac{1 + l_i}{l_i} > \left(1 + \sqrt{c}\right)^2 &, l_i > \sqrt{c}, \\ \left(1 + \sqrt{c}\right)^2 &, l_i \leq \sqrt{c}. \end{cases}$$

 \leftarrow 也就是说,只有当扰动强度 l_i 达到阈值c之后才可能导致特征值的泄露,否则只会使该 特征卡在边界处。边界内的行为和最普通MP分布律是一致的。

这一模型被经常运用在通讯信号问题上,低秩扰动被视作信号干扰。

注: $l_i < 0$ 的情形也已被Baik和Silverstein较清楚地解决了,由于课本并未详述, 在此小提一句。

2.5.2扰动项对特征向量的干扰

在上一小节中我们提到只有当扰动强度达到一定阈值,扰动作用才能够作用到特征值 上。实际上,特征向量也有类似的定理[11]:

Theorem 8. 在定理7的条件下,记 $\hat{u}_1,\ldots,\hat{u}_k$ 为 $\frac{1}{n}XX^T$ 的前k大特征值对应的特征向量。再假设扰动的特征值均不相同,即 $l_1>l_2>\cdots>l_k>0$ 。那么任取 $a,b\in\mathbb{S}*p-1$,我们有:

$$a^{T}\hat{u}_{i}\hat{u}_{i}^{T}b - a^{T}u_{i}u_{i}^{T}b \cdot \frac{1 - cl_{i}^{-2}}{1 + cl_{i}^{-1}} \cdot 1_{l_{i} > \sqrt{c}} \xrightarrow{a.s.} 0.$$

特别地,如果取 $a = b = u_i$,则:

$$|u_i^T \hat{u}_i|^2 \xrightarrow{a.s.} \frac{1 - cl_i^{-2}}{1 + cl_i^{-1}} \cdot 1_{l_i > \sqrt{c}}.$$

3 应用案例分析 14

该定理告诉我们,在扰动未达到阈值时, u_i 和 \hat{u}_i 几乎是垂直的,可在某种程度上认为完全不相干。只有在超过阈值之后效果才会逐渐显现出来——使得这两个特征向量几乎平行。这也说明了想把很小的信号干扰检测(分离)出来是难以实现的。

2.5.3 扰动的统计检验方法

在实际操作中,如果有 $\frac{1}{n}XX^T$ 的特征值出现在边界之外,我们也不能判断其是否真的是由于较大的扰动导致的,毕竟真实的样本不可能达到无穷大。基于这一问题,Baik在2005年提出了一个检验方法[12],他证明了在扰动较小的情况下, $\frac{1}{n}XX^T$ 的最大特征值会遵循以下分布:

Theorem 9. 在定理 7的假设下,如果 $0 \le l_k < \cdots < l_1 < \sqrt{c}$,则有:

$$n^{\frac{2}{3}} \frac{\hat{\lambda}_1 - (1 + \sqrt{c})^2}{(1 + \sqrt{c})^{\frac{4}{3}} c^{-\frac{1}{6}}} \to TW_1$$

其中TW1为一维(实) Tracy-Widom分布。

上述定理除了给出了一个统计检验的方法外,还有一个重要的信息:在扰动微小的情况下,特征值的波动数量级是 $O(n^{-\frac{2}{3}})$ 。但当扰动较大时,预测值收敛的速率却减缓了。Couillet和Hachem在2011年证明了其收敛速率为 $O(n^{-\frac{1}{2}})$,且分布也从 TW_1 分布变为了正态分布[13]。

3 应用案例分析

最后我们介绍两个随机矩阵在机器学习领域的应用案例。由于细节的推导过程十分繁琐,这里仅将思路梳理出来。

两个案例的参考文献分别为[1]的第四章和[2]的第二章。

3.1 分布式线性回归模型的误差分析

线性回归,作为最基础的统计工具一直被人们广泛使用。假设样本矩阵为X,目标向量为Y,用最小二乘法很容易得到回归系数为:

$$\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T Y.$$

但在实际应用中,可能我们需要同时用到多个计算资源,或者数据的储存分布在不同 地点,这时我们只能对每组分别求解其回归系数,再在最后进行加权处理。 假设数据分散为k组,分别为:

$$X = \begin{bmatrix} X_1 \\ \cdots \\ X_k \end{bmatrix}, \quad Y = \begin{bmatrix} Y_1 \\ \cdots \\ Y_k \end{bmatrix}$$

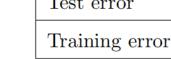
对于每一组数据,我们可以计算出其回归系数 $\hat{\beta}_i = (X_i^T X_i)^{-1} X_i^T Y_i$,则最终的结果应该 是:

$$\hat{\beta}_{dist} = \sum_{i=1}^{k} w_i \hat{\beta}_i$$

其中 $\sum_{i=1}^{k} w_i = 1$,容易证明这是一个无偏估计。

如何比较不同权重带来效果的优劣呢?我们提出下列研究框架:

Statistical learning problem	$\mid L_A \mid$	\hat{L}_A	A	h	N
Estimation	β	\hat{eta}	I_p	0	0
Regression function estimation	$X\beta$	$X\hat{eta}$	X	0	0
Confidence interval	$oldsymbol{eta_j}$	\hat{eta}_j	$E_j^{ op}$	0	0
Test error	$x_t^{\top} \beta + \varepsilon_t$	$x_t^{\top} \hat{\beta}$	x_t^{\top}	1	0
Training error	$X\beta + \varepsilon$	$X\hat{eta}$	X	1	$\sigma^2 I_n$
	Estimation Regression function estimation Confidence interval Test error	Estimation β Regression function estimation $X\beta$ Confidence interval β_j Test error $x_t^\top \beta + \varepsilon_t$	Estimation β $\hat{\beta}$ Regression function estimation $X\beta$ $X\hat{\beta}$ Confidence interval β_j $\hat{\beta}_j$ Test error $x_t^{\top}\beta + \varepsilon_t$ $x_t^{\top}\hat{\beta}$	Estimation β $\hat{\beta}$ I_p Regression function estimation $X\beta$ $X\hat{\beta}$ X Confidence interval β_j $\hat{\beta}_j$ E_j^{\top} Test error $x_t^{\top}\beta + \varepsilon_t$ $x_t^{\top}\hat{\beta}$ x_t^{\top}	Estimation β $\hat{\beta}$ I_p 0 Regression function estimation $X\beta$ $X\hat{\beta}$ X 0 Confidence interval β_j $\hat{\beta}_j$ E_j^{\top} 0 Test error $x_t^{\top}\beta + \varepsilon_t$ $x_t^{\top}\hat{\beta}$ x_t^{\top} 1



即我们用五种评判标准来判断分布式学习的效果,但框架是一致的:我们用模型 $L_A=$ $A\beta + Z$ 去预测真实数据 $L_A = A\beta + \epsilon$, 其中Z为预测误差, ϵ 为数据本身的白噪声, 且Var[Z] = $h\sigma^2I, Cov[\epsilon, Z] = N$ 。我们只需先用通用表达式计算,针对每种情况在最后分别带入对应数 值即可计算不同指标了。

我们用MSE来评价回归效果:

$$M(\hat{\beta}_0) = \mathbb{E} \|L_A - \hat{L}_A(\hat{\beta}_0)\|^2.$$

用一体式学习和分布式学习MSE的比值代替分布式学习的效率:

$$E(a,d;X_1,\ldots,X_k) := \frac{M(\hat{\beta})}{M(\hat{\beta}_{dist})}$$

容易算出:

$$E(a,d;X_1,\ldots,X_k) = \frac{tr[(X^TX)^{-1}A^TA] - 2tr[A(X^TX)^{-1}X^TN] + hd}{\sum_{i=1}^k w_i^2 \cdot tr[(X_i^TX_i)^{-1}A^TA] - 2w_i \cdot tr[A(X_i^TX_i)^{-1}X_i^TN_i] + hd}$$

からにる

3 应用案例分析 16

利用 $f(X) = \frac{1}{tr(X^{-1}A^TA)}$ 是定义在正定矩阵上的凹函数这一点,可以求出最优权重为:

$$w_i = \frac{\lambda^* + b_i}{a_i}$$

其中
$$a_i = tr[(X_i^T X_i)^{-1} A^T A], \ b_i = tr[A(X_i^T X_i)^{-1} X_i^T N_i], \ \lambda^* = \frac{1 - \sum\limits_{i=1}^k \frac{b_i}{a_i}}{\sum\limits_{i=1}^k \frac{1}{a_i}}$$

注意到最终的表达式中出现了 X^TX 形式的矩阵。如果我们将样本视为轻尾分布的随机变量,我们是可以利用MP分布律及其变式求出 a_i,b_i 在 n,p按一定比例趋于无穷时的极限值。事实上,这篇论文也是这样做的,计算过程和结果过于复杂,不再赘述。

3.2 核方法中的随机矩阵

考虑一个k类高斯混合模型,即样本矩阵为 $X = [x_1, \ldots, x_n] \in \mathbb{R}^{p \times n}$,且样本服从以下分布:

$$x_1, \dots, x_{n_1}$$
 $\sim \mathcal{N}(\mu_1, C_1)$
 \vdots \vdots
 x_{n-n_k+1}, \dots, x_n $\sim \mathcal{N}(\mu_k, C_k)$

下面考虑样本的核矩阵:

$$K = \left\{ f(\frac{1}{p} ||x_i - x_j||^2) \right\}_{i,j=1}^n$$

其中f是一个足够光滑的函数,例如高斯核。我们将要用随机矩阵的理论证明核方法在分类问题上的有效性。

我们只看一个最简单的情形,即 $C_1=C_2=\cdots=C_k=I_p$ 。这种情况下f只用取id即可。注意到:

$$\frac{1}{p} \|x_i - x_j\|^2 = \frac{1}{p} \|\mu_a - \mu_b\|^2 + \frac{2}{p} (\mu_a - \mu_b)^T (z_i - z_j) + \frac{1}{p} \|z_i\|^2 + \frac{1}{p} \|z_j\|^2 - \frac{2}{p} z_i^T z_j$$

如果 $\|\mu_a\| = O(\sqrt{p})$,则上式右侧中占主导数量级的项是 $\frac{1}{p}\|\mu_a - \mu_b\|^2 + 2$,其中2是两个 $\frac{1}{p}\|z_i\|^2 = 1 + O(p^{-\frac{1}{2}})$ 产生的,其他项都是 $O(p^{-\frac{1}{2}})$ 量级的。这也就是说,从核矩阵的每一个元素来看,占主导的项就是样本所属类别的差异。

但如果我们只能保证 $\|\mu_a - \mu_b\| = O(1)$,此时上式中的主导项(除了2之外)就变成了包含随机元素的 $\frac{2}{p} z_i^T z_j$,即从每个元素来看,似乎核矩阵并不能反映出样本的区别。

这时就需要从随机矩阵整体的角度去分析这个问题。下面我们将用矩阵和向量的形式 将核矩阵拆分开来:

$$\left\{\frac{1}{p}\|x_i - x_j\|^2\right\}_{i,j=1}^n = 2 \cdot 1_n 1_n^T + \frac{1}{p} J \{\|\mu_a - \mu_b\|^2\}_{a,b=1}^k J^T
+ \psi 1_n^T + 1_n \psi^T - \frac{2}{p} Z^T Z + \frac{2}{p} (d 1_n^T + 1_n d^T)
- \frac{2}{p} (J M^T Z + z^T M J^T) - diag(\cdot)$$

其中J为扩充矩阵,即 $J=[j_1,\ldots,j_k]\in\mathbb{R}^{n\times k}$, j_a 为只在第 $n_1+\cdots+n_{a-1}+1$ 到第 $n_1+\cdots+n_a$ 项为1其余项均为0的列向量, $M=[\mu_1,\ldots,\mu_k]\in\mathbb{R}^{p\times k}$, $\psi\in\mathbb{R}^n$ 且它的每个元素为 $1-\frac{\|z_i\|^2}{p}$, $d=diag(JM^TZ)\in\mathbb{R}^n$, $-diag(\cdot)$ 是去除对角元素的操作。

通过考察上式右侧各项(在矩阵范数意义下的)数量级,我们发现此时包含 $\mu_a - \mu_b$ 的 关键信息项和白噪声项 $\frac{2}{p}Z^TZ$ 为同一数量级,均为O(1)。但在逐元素的分析中噪声项是会盖过关键信息项的,这也体现了从整体去分析问题的优势。

注:出现这种情况可以这样理解:关键信息矩阵的秩不高,所以能量的聚集会更加集中。

事实上, 所有量级为O(1)的项为:

$$-\frac{2}{p}Z^{T}Z + \frac{1}{p}J\{\|\mu_{a} - \mu_{b}\|^{2}\}_{a,b=1}^{k}J^{T} + \frac{2}{p}(d1_{n}^{T} + 1_{n}d^{T}) - \frac{2}{p}(JM^{T}Z + z^{T}MJ^{T})$$

这是一个典型的Spiked模型——后面三项可以看成一个至多秩为2k+2的矩阵。所以接下来我们就可以通过Spiked模型中扰动和阈值c的关系,进一步分析什么时候扰动(关键信息)可以从杂乱的随机白噪声中凸显出来,后面的计算过程以及更复杂情况的讨论在此不再赘述。

参考文献

- [1] Romain Couillet and Zhenyu Liao. Random Matrix Methods for Machine Learning. Cambridge University Press, 2022.
- [2] Yue Sheng. Applications of random matrix theory in statistics and machine learning. 01 2021.
- [3] V. Marchenko and Leonid Pastur. Distribution of eigen values in certain sets of random matrices. *Mat. Sb.* (N. S.), 72, 01 1967.
- [4] Jack Silverstein and Z. Bai. On the empirical distribution of eigenvalues of a class of large dimensional random matrices. *Journal of Multivariate Analysis*, 54:175–192, 02 1995.

参考文献 18

[5] Romain Couillet, mérouane Debbah, and Jack Silverstein. A deterministic equivalent for the analysis of correlated mimo multiple access channels. *Information Theory, IEEE Transactions on*, 57:3493 – 3514, 07 2011.

- [6] E.P. Wigner. Characteristic vectors of bordered matrices with infinite dimensions. Ann. Math., 62:548–564, 01 1955.
- [7] Jack Silverstein and S. Choi. Analysis of the limiting spectral distribution of large dimensional random matrices. *Journal of Multivariate Analysis*, 54:295–309, 08 1995.
- [8] Z. Bai, Jack Silverstein, and Y.Q Yin. A note on the largest eigenvalue of a large dimensional sample covariance matrix. *Journal of Multivariate Analysis*, 26:166–168, 08 1988.
- [9] Z. Bai and Jack Silverstein. No eigenvalues outside the support of the limiting spectral distribution of large dimensional sample covariance matrices. The Annals of Probability, 26, 02 2000.
- [10] Jinho Baik and Jack Silverstein. Eigenvalues of large sample covariance matrices of spiked population models. *Journal of Multivariate Analysis*, 97:1382–1408, 07 2006.
- [11] Debashis Paul. Asymptotics of sample eigenstruture for a large dimensional spiked covariance model. *Statistica Sinica*, 17:1617–1642, 10 2007.
- [12] Noureddine Karoui. Tracy-widom limit for the largest eigenvalue of a large class of complex sample covariance matrices. *Annals of Probability*, 35, 03 2005.
- [13] Romain Couillet and Walid Hachem. Fluctuations of spiked random matrix models and failure diagnosis in sensor networks. *IEEE Transactions on Information Theory*, 59, 07 2011.