

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
"НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
"ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ"

на правах рукописи

Наумов Алексей Александрович

**Неасимптотический анализ случайных объектов в
пространствах высокой размерности и приложения к
задачам машинного обучения**

РЕЗЮМЕ
диссертации на соискание
ученой степени доктора
компьютерных наук

Москва - 2022

Диссертационная работа выполнена в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики».

Научные консультанты:

Ульянов Владимир Васильевич, доктор физико-математических наук, профессор, МГУ им. М.В. Ломоносова

Тихомиров Александр Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор, Коми НЦ Уро РАН

Содержание

1	Введение	4
2	Список обозначений	9
3	Вероятность попадания в большие шары и приложения к бутстреп методы и байесовскому оцениваю	10
3.1	Неасимптотические оценки близости гауссовских мер на шарах и неравенства анти-концентрации	10
3.1.1	Основные результаты	11
3.2	Приложения	14
3.2.1	Бутстреп метод для построения доверительных интервалов на основе оценок максимального правдоподобия	14
3.2.2	Влияние априорного распределения в линейной гауссовской модели	16
3.2.3	Непараметрический байесовский вывод	17
3.2.4	Центральная предельная теорема в конечномерных и бесконечномерных пространствах	18
3.2.5	Доверительные множества для спектральных проекторов ковариационных матриц	20
4	Линейная стохастическая аппроксимация и приложения	25
4.1	Алгоритм ЛСА, управляемый цепью Маркова с произвольным пространством состояний	25
4.1.1	Основные результаты	27
4.1.2	Приложение к алгоритму линейной стохастической аппроксимации	29
4.1.3	Алгоритмы TD с линейной функциональной аппроксимацией	31
4.2	Точные оценки скорости сходимости с большой вероятностью алгоритма ЛСА с фиксированным шагом и в случае независимых наблюдений	33
4.2.1	Моментные и с большой вероятностью оценки на произведения случайных матриц	34
5	Снижение дисперсии в МСМС алгоритмах	40
5.1	Минимизация эмпирической спектральной оценки дисперсии	42
5.1.1	Метод	42
5.1.2	Теоретический анализ	43
5.2	Приложения	44
5.2.1	Динамика Ланжевена	45
5.2.2	Обобщения на случай стохастического градиента	47
5.3	Эксперименты	49
5.3.1	Игрушечный пример	49
5.3.2	Модель гауссовских смесей	50
5.3.3	Байесовская логистическая регрессия	51
5.3.4	Байесовская вероятностная матричная факторизация	52
6	Заключение	55
7	Благодарность	55
	Список литературы	55

1 Введение

Во многих задачах теоретической и прикладной математики, статистики, машинном обучении, инженерных науках естественным образом возникает необходимость изучать случайные объекты в пространствах высокой размерности, например, случайные матрицы, графы, процессы, алгоритмы и др. На первый взгляд, эти различные объекты имеют достаточно мало общего. В каждой есть свои идеи, математические подходы и методы. Даже вероятностная природа и структура могут быть разными. Но существуют некоторые базовые вероятностные принципы, которые возникают при изучении указанных выше объектов в пространствах в высокой размерности. Эти общие принципы обычно принимают форму неасимптотических вероятностных неравенств. Термин неасимптотический здесь означает, что мы имеем дело не с предельными теоремами (как во многих вероятностных результатах), а с явными оценками, которые могут быть или безразмерными или явным образом содержать в себе зависимость от параметра размерности. В настоящей диссертации мы обратимся к трем областям, над которыми автор работал в последние пять лет:

- Бутстреп метод и байесовское оценивание;
- Линейная стохастическая аппроксимация (ЛСА) и приложения к алгоритмам временной разницы (англ. Temporal difference (TD));
- Алгоритмы Монте-Карло по схеме Марковской цепи (МСМС) и снижению дисперсии.

Теоретический анализ этих алгоритмов требует разработки новых неасимптотических неравенств для линейных и нелинейных статистик от случайных объектов в пространствах высокой размерности, которые могут представлять независимый интерес. Диссертация организована следующим образом.

В главе 1 рассматривается задача сравнения двух гауссовских мер на шарах в гильбертовом пространстве, а именно необходимо вычислить как гауссовская мера шара изменяется при возмущении среднего и ковариационного оператора. Данная проблема возникает во многих статистических и вероятностных приложениях. В главе 1 приводится ряд соответствующих примеров, в частности, бутстреп метод, байесовское оценивание, центральная предельная теорема (ЦПТ) для сумм независимых случайных элементов в пространствах высокой размерности. Получены оптимальные неравенства, являющиеся безразмерными. Соответствующие оценки зависят только от ядерной нормы между ковариационными операторами, вектора сдвига и некоторых спектральных характеристик ковариационных операторов. Также получено оптимальное безразмерное неравенство на функцию концентрации Леви (или неравенство анти-концентрации) для квадрата нормы гауссовского элемента в гильбертовом пространстве, которое обобщает соответствующий результат для плотности χ^2 распределения.

В главе 2 изучается экспоненциальная устойчивость произведений матрично-значных функций, зависящих от последовательности независимых одинаково распределенных случайных величин (далее н.о.р.с.в.) или цепи Маркова с произвольным (возможно неограниченным) пространством состояний. Экспоненциальная устойчивость играет ключевую роль при анализе алгоритмов ЛСА, которые возникают во многих задачах машинного обучения и используются для приближенного решения системы уравнений $\bar{\mathbf{A}}\theta = \bar{\mathbf{b}}$. Здесь вектор $\bar{\mathbf{A}}$ и матрица $\bar{\mathbf{b}}$ не наблюдаются, но могут быть оценены по наблюдениям $\{(\mathbf{A}(Z_n), \mathbf{b}(Z_n))\}_{n \in \mathbb{N}}$, где $\mathbf{A} : Z \rightarrow \mathbb{R}^{d \times d}$, $\mathbf{b} : Z \rightarrow \mathbb{R}^d$ измеримые функции, $(Z_k)_{k \in \mathbb{N}}$ последовательность н.о.р.с.в. с общим распределением π , удовлетворяющим $\mathbb{E}[\mathbf{A}(Z_1)] = \bar{\mathbf{A}}$ и $\mathbb{E}[\mathbf{b}(Z_1)] = \bar{\mathbf{b}}$, или цепь Маркова, принимающая значения

в произвольном пространстве состояний Z с единственным инвариантным распределением π и $\lim_{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E}[\mathbf{A}(Z_n)] = \bar{\mathbf{A}}, \lim_{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E}[\mathbf{b}(Z_n)] = \bar{\mathbf{b}}$. В качестве приложения получены неасимптотические оценки для алгоритмов ЛСА и ТД.

В главе 3 предложен новый алгоритм снижения дисперсии для аддитивных функционалов от зависимых последовательностей. В этом подходе комбинируется использование контрольных переменных и минимизация эмпирических оценок дисперсии. Получены неасимптотические оценки на избыточную асимптотическую дисперсию. В качестве приложения данный метод применяется к методам МСМС с стохастическим градиентом для задачи байесовского оценивания на больших объемах данных, а также рассмотрены комбинации с существующими методами снижения дисперсии в стохастическом градиенте. Ключевую роль в теоретическом анализе играют новые неравенства концентрации для квадратичных форм от цепей Маркова.

Цели и задачи исследования Цель диссертации состоит из двух частей. Первая цель – получить неасимптотические неравенства для случайных объектов в пространствах высокой размерности, которые могут представлять независимый интерес. В частности, речь идет о неравенствах сравнения гауссовских мер, концентрации для квадратичных форм от марковских цепей, моментных оценках для произведений случайных матриц. Вторая цель – применение полученных результатов для теоретического анализа алгоритмов машинного обучения. Будут рассмотрены задача снижения дисперсии в алгоритмах МСМС, сходимость алгоритмов ЛСА и ТД, а также бутстреп метод и байесовское оценивание.

Полученные результаты

1. Получены оптимальные оценки в неравенстве сравнения гауссовских мер на шарах в гильбертовом пространстве. Также получено оптимальное неравенство анти-концентрации для квадрата нормы гауссовского элемента.
2. Предложен бутстреп-метод построения доверительных множеств для спектрального проектора \mathbf{P}_r ковариационной матрицы $\mathbf{\Sigma}$ с помощью имеющихся данных. В работе изучен вопрос качества бутстреп-аппроксимации.
3. Получены новые моментные оценки для произведений матрично-значных функций, зависящих от цепи Маркова с произвольным (возможно неограниченным) пространством состояний при условии (i) цепь Маркова удовлетворяет мультипликативному (супер) условию Ляпунова, (ii) рост элементов матрично-значных функций контролируется специально подобранными функциями. Используя этот результат, получены неасимптотические оценки на p -ый момент ошибки алгоритмов ЛСА и ТД с линейной функциональной аппроксимацией.
4. Получены оптимальные оценки на моменты и с высокой вероятностью для произведений н.о.р. матриц. Получены оценки с высокой вероятностью на ошибку аппроксимации алгоритма ЛСА. Оценки являются оптимальными по количеству итераций и размеру шага. Показано, что возможно получить только полиномиальную концентрацию, порядок которой зависит от размера шага алгоритма ЛСА. Более того, данный результат невозможно улучшить без дополнительных предположений на последовательность $\{\mathbf{A}_n : n \in \mathbb{N}^*\}$, и, в частности, невозможно получить гауссовскую или экспоненциальную концентрацию.

5. Предложен новый алгоритм снижения дисперсии для аддитивных функционалов от зависимых последовательностей. Получены неасимптотические оценки на избыточную асимптотическую дисперсию. Приводятся приложения к методам МСМС с стохастическим градиентом.

Личный вклад автора включает в себя разработку перечисленных выше методов и алгоритмов, теоретических анализ, а также приложения к задачам байесовской статистики, бутстреп методу, TD алгоритмам, МСМС.

По теме данной диссертации было опубликовано 10 научных статей.

Публикации повышенного уровня

1. Friedrich Götze, Alexey Naumov, Vladimir Spokoiny, and Vladimir Ulyanov. Large ball probabilities, Gaussian comparison and anti-concentration. *Bernoulli*, 25, 4A (2019), pp. 2538–2563, WOS Q2 / Scopus Q1 (главный соавтор; автором доказаны неравенства сравнения гауссовских мер и неравенства анти-концентрации).
2. Alexey Naumov, Vladimir Spokoiny, Yury Tavyrikov, and Vladimir Ulyanov. Nonasymptotic Estimates for the Closeness of Gaussian Measures on Balls. *Doklady Mathematics*, 98, 2 (2018), pp. 490–493, Scopus Q2 (главный соавтор; автором доказаны неравенства сравнения гауссовских мер и неравенства анти-концентрации).
3. Alexey Naumov, Vladimir Spokoiny, and Vladimir Ulyanov. Bootstrap confidence sets for spectral projectors of sample covariance. *Probability Theory and Related Fields*, 174, 3–4 (2019), pp. 1091–1132, WOS/Scopus Q1 (главный соавтор; автором доказана основная теорема, в которой приводятся оценки для бутстреп-аппроксимации).
4. Alexey Naumov, Vladimir Spokoiny, and Vladimir Ulyanov. Confidence Sets for Spectral Projectors of Covariance Matrices. *Doklady Mathematics*, 98, 2 (2018), pp. 511–514, Scopus Q2 (главный соавтор; автором доказана основная теорема, в которой приводятся оценки для бутстреп-аппроксимации).
5. Denis Belomestny, Leonid Iosipoi, Eric Moulines, Alexey Naumov, and Sergey Samsonov. Variance reduction for Markov chains with application to MCMC. *Statistics and Computing*, 30, 4 (2020), pp. 973–997, WOS/Scopus Q1.
6. Denis Belomestny, Leonid Iosipoi, Eric Moulines, Alexey Naumov, and Sergey Samsonov. Variance Reduction for Dependent Sequences with Applications to Stochastic Gradient MCMC. *SIAM/ASA Journal on Uncertainty Quantification*, 9, 2 (2021), pp. 507–535, WOS Q2 / Scopus Q1 (главный соавтор; автором предложен алгоритм (в тесном сотрудничестве с другими соавторами) и доказаны неравенства концентрации для квадратичных форма от цепей Маркова).
7. Maxim Kaledin, Eric Moulines, Alexey Naumov, Vladislav Tadic, and Hoi-To Wai. Finite Time Analysis of Linear Two-timescale Stochastic Approximation with Markovian Noise. *Proceedings of Thirty Third Conference on Learning Theory*. Ed. by Jacob Abernethy and Shivani Agarwal. Vol. 125. *Proceedings of Machine Learning Research*. PMLR, 2020, pp. 2144–2203, CORE A*.
8. Alain Durmus, Eric Moulines, Alexey Naumov, Sergey Samsonov, and Hoi-To Wai. On the Stability of Random Matrix Product with Markovian Noise: Application to Linear Stochastic Approximation and TD Learning. *Proceedings*

of Thirty Fourth Conference on Learning Theory. Ed. by Mikhail Belkin and Samory Kpotufe. Vol. 134. Proceedings of Machine Learning Research. PMLR, 2021, pp. 1711–1752, CORE A* (главный соавтор; автором доказан основной результат для произведений случайных матриц).

9. Alain Durmus, Eric Moulines, Alexey Naumov, Sergey Samsonov, Hoi-To Wai, and Kevin Scaman. Tight High Probability Bounds for Linear Stochastic Approximation with Fixed Stepsize. Advances in Neural Information Processing Systems 34 (NeurIPS 2021). Ed. by M. Ranzato and A. Beygelzimer and K. Nguyen and P.S. Liang and J.W. Vaughan and Y. Dauphin. CORE A* (главный соавтор; автором доказан основной результат для произведений случайных матриц).
10. Friedrich Götze, Alexey Naumov, and Alexander Tikhomirov. Distribution of linear statistics of singular values of the product of random matrices. Bernoulli, 23, 4B (2017), pp. 3067–3113, WOS Q2 / Scopus Q1 (главный соавтор; автором доказан основной результат для квадратов сингулярных чисел произведений гауссовских случайных матриц).

Доклады на конференциях и семинарах

1. Семинар "Modern Methods in Applied Stochastics and Nonparametric Statistics Берлин, Германия, 06.01.16, "Distribution of Linear Statistics of Singular Values of the Product of Random Matrices";
2. Семинар "Modern Methods in Applied Stochastics and Nonparametric Statistics Берлин, Германия, 18.01.17, "Bootstrap confidence sets for spectral projectors of sample covariance ";
3. Конференция ProbabLY ON Random matrices, Лион, Франция, 3.04.2017–7.04.2017, "Estimation of a spectral projector";
4. Конференция The 2nd Chinese-Russian Seminar on Asymptotic Methods in Probability Theory and Mathematical Statistics & The 10th Probability Limit Theory and Statistic Large Sample Theory Seminar, Чанчунь, Китай, 24.09.2017–26.09.2017, "Large ball probabilities in statistical inference";
5. Конференция 12th International Vilnius Conference on Probability Theory and Mathematical Statistics 2018 IMS Annual Meeting on Probability and Statistics, Вильнюс, Литва, 02.07.2018–06.07.2018, "Bootstrap confidence sets for spectral projectors of sample covariance";
6. Конференция Warm-Up Week - Bielefeld Stochastic Summer, Билефельд, Германия, 20.08.2018–23.08.2018, "Random matrices and high-dimensional inference";
7. Семинар "Séminaire de Statistique Париж, Франция, 13.05.19, "Gaussian approximation for maxima of large number of quadratic forms of high-dimensional random vectors";
8. Конференция Workshop SDEs/SPDEs: Theory, Numerics and their interplay with Data Science, Крит, Греция, 26.06.2019–30.06.2019, "Variance reduction for dependent sequences via empirical variance minimization with applications";
9. Конференция Mathematical Methods of Statistics, Люмини, Франция, 16.12.2019–20.12.2019, "Variance reduction for dependent sequences with application to MCMC";

10. Конференция **Conference on Computational Learning Theory (COLT2020)**, Грац, Австрия, 09.07.2020–12.07.2020, "Finite Time Analysis of Linear Two-timescale Stochastic Approximation with Markovian Noise";
11. Семинар "Modern Methods in Applied Stochastics and Nonparametric Statistics Берлин, Германия, 06.01.21, "Finite time analysis of linear two-timescale stochastic approximation with Markovian noise ";
12. Летняя школа Summer school Information, control and optimization, Воронеж, Россия, 10.06.2021–17.06.2021, "Stochastic approximation and Reinforcement learning";
13. Конференция **Conference on Computational Learning Theory (COLT2021)**, Колорадо, США, 15.08.2021–19.08.2021, "On the Stability of Random Matrix Product with Markovian Noise: Application to Linear Stochastic Approximation and TD Learning".
14. Конференция **Advances in Neural Information Processing Systems 34 (NeurIPS2021)**, 7.12.2021–10.12.2021, "Tight High Probability Bounds for Linear Stochastic Approximation with Fixed Stepsize".

2 Список обозначений

В этом разделе собраны общие обозначения, которые используются во всей диссертации. Некоторые дополнительные обозначения могут возникать в отдельных главах.

Пусть (Z, d) является полным сепарабельным метрическое пространства с σ -алгеброй \mathcal{Z} . Зафиксируем измеримую функции $V : Z \rightarrow [1, \infty)$. Обозначим через $P : Z \times \mathcal{Z} \rightarrow \mathbb{R}_+$ произвольное марковское ядро. Пусть $m \in \mathbb{N}^*$, ν является вероятностной мерой \mathcal{Z} и $\epsilon \in (0, 1)$. Множество $C \in \mathcal{Z}$ называется $(m, \epsilon\nu)$ -малым для P , если для всех $z \in C$ и $A \in \mathcal{Z}$, $P^m(z, A) \geq \epsilon\nu(A)$. Множество $A \in \mathcal{Z}$ является *достижимым*, если для всех $z \in Z$ существует $m \in \mathbb{N}^*$, такое что $P(z, A) > 0$.

Обозначим через P и Q симметричные положительно определенные матрицы.

Таблица 1: Обозначения, используемые во всей диссертации

Обозначение	Значение
$\ g\ _V, g : Z \rightarrow \mathbb{R}$ L_∞^V $PV(z), z \in Z$ $\mathbb{M}_1(Z)$ $\ \mu\ _V, \mu \in \mathbb{M}_1(Z)$ $\mathbb{S}_p(Z, d), p \geq 1$ $\Pi(\lambda, \nu), \lambda, \nu \in \mathbb{M}_1(Z)$ $W_p^d(\lambda, \nu), p \geq 1$ и $\lambda, \nu \in \mathbb{S}_p(Z, d)$ $KL(\lambda \nu), \lambda, \nu \in \mathbb{M}_1(X)$	$\ g\ _V = \sup_{z \in Z} g(z) /V(z)$ множество всех измеримых функций $g : Z \rightarrow \mathbb{R}$: $\ g\ _V < \infty$ $PV(z) = \int_Z V(z')P(z, dz')$ множество вероятностных мер на (Z, \mathcal{Z}) $\ \mu\ _V = \sup_{f: \ f\ _V \leq 1} \int_Z f(z)\mu(dz)$ $\mathbb{S}_p(Z, d) := \{\lambda \in \mathbb{M}_1(Z) : \int_Z d^p(x, y)\lambda(dy) < \infty \text{ для всех } x \in Z\}$ множество вероятностных мер на $Z \times Z$, таких что если $\xi \in \Pi(\lambda, \nu)$, то для всех $A \in \mathcal{B}(Z)$, $\xi(A, Z) = \lambda(A)$ и $\xi(Z, A) = \nu(A)$ $W_p^d(\lambda, \nu) := \inf_{\Pi(\lambda, \nu)} \{\int_{Z \times Z} d^p(x, y) \xi(dx, dy)\}^{1/p}$ Расстояние Кульбака – Лейблера меры λ относительно ν , т.е. , $KL(\lambda \nu) = \int \log(d\lambda/d\nu)d\lambda$, если $\lambda \ll \nu$ and $KL(\lambda \nu) = \infty$, иначе
$\ h\ _{Lip}, h : Z \rightarrow \mathbb{R}$ $ h _\infty, h : Z \rightarrow \mathbb{R}$ $Lip_d(L)$ $Lip_{b,d}(L, B)$	$\ h\ _{Lip} := \sup_{x \neq y \in Z} \{ h(y) - h(x) /d(x, y)\}$ $ h _\infty = \sup_{z \in Z} h(z) $ класс липшицевых функций с $\ h\ _{Lip} \leq L$ класс ограниченных липшицевых функций с $\ h\ _{Lip} \leq L$ и $ h _\infty \leq B$
$a \lesssim b$ ($a \gtrsim b$) $a \asymp b$	существует некоторая абсолютная константа C , такая что $a \leq Cb$ ($a \geq Cb$ соответственно) существуют c, C , такие что $ca \leq b \leq Ca$
\bar{I}_d $\ x\ _Q$ κ_Q $\ \mathbf{A}\ _Q$ $\ \mathbf{A}\ _{P,Q}$ $\ \mathbf{A}\ _p, p \geq 1$ $\ \mathbf{X}\ _{p,q}, p, q \geq 1$ \mathbb{S}^{d-1}	единичная матрица размера $d \times d$ $\ x\ _Q = \{x^\top Qx\}^{1/2}$ (заметим, что $\ x\ = \ x\ _{I_d}$) число обусловленности Q , т.е. $\kappa_Q = \lambda_{\min}^{-1}(Q)\lambda_{\max}(Q)$ $\ \mathbf{A}\ _Q = \max_{\ x\ _Q=1} \ \mathbf{A}x\ _Q$ (заметим, что $\ \mathbf{A}\ = \ \mathbf{A}\ _{I_d}$) $\ \mathbf{A}\ _{P,Q} = \max_{\ x\ _P=1} \ \mathbf{A}x\ _Q$ p -норма Шаттена, т.е. $\ \mathbf{A}\ _p = \{\sum_{\ell=1}^d \sigma_\ell^p(\mathbf{A})\}^{1/p}$ $\ \mathbf{X}\ _{p,q} = \{\mathbb{E}\{\ \mathbf{X}\ _p^q\}\}^{1/q}$ $\mathbb{S}^{d-1} = \{x \in \mathbb{R}^d : \ x\ = 1\}$
$X \in SG(\sigma^2)$	суб-гауссовская случайная величина X с параметром ("дисперсией") σ^2 , т.е. для всех $\lambda \in \mathbb{R}$, $\log \mathbb{E}[e^{\lambda X}] \leq \lambda^2 \sigma^2 / 2$

3 Вероятность попадания в большие шары и приложения к бутстреп методы и байесовскому оцениваю

3.1 Неасимптотические оценки близости гауссовских мер на шарах и неравенства анти-концентрации

Результаты раздела опубликованы в [48], [81], [83], [82].

Во многих статистических и вероятностных приложениях часто возникает задача сравнения двух гауссовских мер, а именно необходимо вычислить как гауссовская мера шара изменяется при возмущении среднего и ковариационного оператора. В качестве примеров мы рассмотрим бутстреп метод, байесовское оценивание, ЦПТ для сумм случайных элементов в пространствах высокой размерности. В настоящей главе мы получим оптимальные неравенства на расстояние Колмогорова между вероятностями попадания гауссовских элементов в шар в гильбертовом пространстве. Ключевым свойством данных оценок является то, что они являются безразмерными, зависят только от ядерной нормы между ковариационными операторами, нормы вектора сдвига и некоторых спектральных характеристик ковариационных операторов. Мы также получим оптимальное безразмерное неравенство на функцию концентрации Леви (неравенство анти-концентрации) для квадрата нормы гауссовского элемента в гильбертовом пространстве, которое обобщает соответствующий результат для плотности χ^2 распределения; см. Теорема 3.3.

В разделе 3.2 мы приводим примеры и показываем, как полученные в настоящей главе оценки могут быть использованы для улучшения существующих результатов. Ключевым наблюдением является то, что в большинстве случаев нам нужно знать свойства гауссовских мер на классе шаров. В частности, необходимо сравнивать гауссовскими меры на классе шаров вместо сравнения их на всех измеримых множествах. В последнем случае обычно применяют неравенство Пинскера, которое дает оценку на расстояние полной вариации через расстояние Кульбака – Лейблера и может быть выражено в терминах ковариационных операторов и средних соответствующих гауссовских мер; см. например, [101]. Однако, полученные оценки зависят от обратного оператора к ковариационному оператору. В частности, малые собственные значения могут оказывать большой вклад в неравенство, что достаточно контринтуитивно, если рассматривается вероятность попадания в шар. Полученные в настоящей главе оценки зависят только от операторной нормы или нормы Фробениуса (Гильберта–Шмидта) и могут быть применены в случае гильбертова пространства.

Доказательство основного результата опирается на Теорему 3.2, которая дает оптимальную верхнюю оценку на плотность $p_\xi(x, a)$ квадрата нормы $\|\xi - a\|^2$, где ξ гауссовский элемент с нулевым средним в гильбертовом пространстве \mathbb{H} с нормой $\|\cdot\|$ и $a \in \mathbb{H}$. Хорошо известно, что $p_\xi(x, a)$ является плотностью взвешенного нецентрированного χ^2 распределения. Более того, имеется аналитическая формула для $p_\xi(x, a)$ в конечномерном пространстве \mathbb{H} ; см., например, раздел 18 в [60]. Однако, она включает в себя некоторые специальные характеристики гауссовской меры, что делает ее трудной для использования во многих ситуациях.

При дополнительных предположениях можно получить двухсторонние оценки на $p_\xi(x, a)$; см., например, [18]. Асимптотические свойства $p_\xi(x, a)$, вероятности малых шаров $\mathbb{P}(\|\xi - a\| \leq \varepsilon)$, или неравенства больших уклонений $\mathbb{P}(\|\xi\| \geq 1/\varepsilon)$ для малых ε могут быть найдены, например, в [19], [71], [72], [73] и [113].

3.1.1 Основные результаты

Обозначим через \mathbb{H} действительное сепарабельное гильбертово пространство со скалярным произведением $\langle \cdot, \cdot \rangle$ и нормой $\| \cdot \|$. Если размерность \mathbb{H} конечна и равна p , мы будем писать \mathbb{R}^p вместо \mathbb{H} . Пусть Σ_ξ обозначает ковариационный оператор произвольного гауссовского элемента ξ в \mathbb{H} . Через $\{\lambda_{k\xi}\}_{k \geq 1}$ мы обозначим собственные значения оператора Σ_ξ , упорядоченные по убыванию, т.е. $\lambda_{1\xi} \geq \lambda_{2\xi} \geq \dots$. Пусть $\lambda_\xi := \text{diag}(\lambda_{j\xi})_{j=1}^\infty$ обозначает диагональный оператор. Заметим, что $\sum_{j=1}^\infty \lambda_{j\xi} < \infty$. Определим следующие величины

$$\Lambda_{k\xi}^2 := \sum_{j=k}^\infty \lambda_{j\xi}^2, \quad k = 1, 2,$$

и

$$(3.1) \quad \kappa(\Sigma_\xi) = \begin{cases} \Lambda_\xi^{-1}, & \text{если } 3\lambda_{1\xi}^2 \leq \Lambda_{1\xi}^2, \\ (\lambda_{1\xi}\lambda_{2\xi})^{-1/2}, & \text{если } 3\lambda_{1\xi}^2 > \Lambda_{1\xi}^2, \quad 3\lambda_{2\xi}^2 \leq \Lambda_{2\xi}^2, \\ (\lambda_{1\xi}\lambda_{2\xi})^{-1/2}, & \text{если } 3\lambda_{1\xi}^2 > \Lambda_{1\xi}^2, \quad 3\lambda_{2\xi}^2 > \Lambda_{2\xi}^2. \end{cases}$$

Легко видеть, что $\|\Sigma_\xi\|_{\text{Fr}} = \Lambda_{1\xi}$. Далее, элементарные рассуждения показывают, что

$$(3.2) \quad \frac{0.9}{(\Lambda_{1\xi}\Lambda_{2\xi})^{1/2}} \leq \kappa(\Sigma_\xi) \leq \frac{1.8}{(\Lambda_{1\xi}\Lambda_{2\xi})^{1/2}}.$$

Следовательно, $\kappa(\Sigma_\xi) \asymp (\Lambda_{1\xi}\Lambda_{2\xi})^{-1/2}$, и все результаты могут быть сформулированы в терминах этих величин. Следующая теорема представляет собой основной результат настоящей главы.

Теорема 3.1. *Пусть ξ и η гауссовские элементы \mathbb{H} , имеющие нулевое среднее и ковариационные операторы Σ_ξ и Σ_η соответственно. Для любого $\mathbf{a} \in \mathbb{H}$*

$$(3.3) \quad \begin{aligned} & \sup_{x>0} |\mathbb{P}(\|\xi - \mathbf{a}\| \leq x) - \mathbb{P}(\|\eta\| \leq x)| \\ & \lesssim \left\{ \kappa(\Sigma_\xi) + \kappa(\Sigma_\eta) \right\} \left(\|\lambda_\xi - \lambda_\eta\|_1 + \|\mathbf{a}\|^2 \right). \end{aligned}$$

Мы видим, что оценки Теоремы 3.1 сформулированы в терминах характеристик ковариационных операторов Σ_ξ и Σ_η , а именно операторной нормы и нормы Гильберта–Шмидта (или нормы Фробениуса в случае конечномерных пространств). Данные оценки не зависят явным образом от размерности p . Другой важной особенностью полученных оценок является то, что в них не фигурирует обратный оператор к Σ_ξ или Σ_η . Другими словами, малые собственные значения Σ_ξ или Σ_η не оказывают большого влияния на полученные оценки, как, например, оценки, полученные с помощью неравенства Пинскера. Аналогично, квадрат нормы $\|\mathbf{a}\|^2$ сдвига \mathbf{a} играет роль в результате, вместо величины $\|\Sigma_\xi^{-1/2}\mathbf{a}\|$, которая появляется при применении неравенства Пинскера и может быть достаточно большой, если матрица Σ_ξ плохо обусловлена.

Рассмотрим более подробно величину $\kappa(\Sigma_\xi)$ в правой части (3.3). Представление (3.1) отражает три типичные ситуации: в “большой размерности”, когда имеется по крайней мере три значимых собственных значения $\lambda_{j\xi}$, можно взять $\kappa(\Sigma_\xi) = \|\Sigma_\xi\|_{\text{Fr}}^{-1} = \lambda_{1\xi}^{-1}$. В “двухмерном” случае, когда сумма $\Lambda_{k\xi}^2$ имеет порядок $\lambda_{k\xi}^2$ для $k = 1, 2$, величина $\kappa(\Sigma_\xi)$ ведет себя как произведение $(\lambda_{1\xi}\lambda_{2\xi})^{-1/2}$. В

промежуточном случае, когда имеется одно большое с.з. $\lambda_{1\xi}$ и много малых $\lambda_{j\xi}, j \geq 2$, можно показать, что $\kappa(\Sigma_\xi)$ ведет себя как $(\lambda_{1\xi}\Lambda_{2\xi})^{-1/2}$.

Как уже отмечалось ранее (см. (3.2)), Теорема 3.1 может быть переформулирована в терминах $(\Lambda_{1\xi}\Lambda_{2\xi})^{-1/2}$ и $(\Lambda_{1\eta}\Lambda_{2\eta})^{-1/2}$. Далее, в оценке (3.3) мы выделим “многомерный” случай, $3\|\Sigma_\xi\|^2 \leq \|\Sigma_\xi\|_{\text{Fr}}^2, 3\|\Sigma_\eta\|^2 \leq \|\Sigma_\eta\|_{\text{Fr}}^2$, который означает, что имеется по крайней мере три значимых с.з. матриц Σ_ξ и Σ_η . В этом случае $\Lambda_{2\xi}^2 \geq 2\Lambda_{1\xi}^2/3, \Lambda_{2\eta}^2 \geq 2\Lambda_{1\eta}^2/3$, и мы приходим к следующему следствию.

Следствие 3.1. *Пусть ξ и η являются гауссовскими элементами в \mathbb{H} с нулевым средним и ковариационными операторами Σ_ξ и Σ_η соответственно. Тогда, для любого $\mathbf{a} \in \mathbb{H}$,*

$$\begin{aligned} & \sup_{x>0} |\mathbb{P}(\|\xi - \mathbf{a}\| \leq x) - \mathbb{P}(\|\eta\| \leq x)| \\ & \lesssim \left(\frac{1}{(\Lambda_{1\xi}\Lambda_{2\xi})^{1/2}} + \frac{1}{(\Lambda_{1\eta}\Lambda_{2\eta})^{1/2}} \right) \left(\|\lambda_\xi - \lambda_\eta\|_1 + \|\mathbf{a}\|^2 \right). \end{aligned}$$

Далее, предположим, что

$$3\|\Sigma_\xi\|^2 \leq \|\Sigma_\xi\|_{\text{Fr}}^2 \quad \text{и} \quad 3\|\Sigma_\eta\|^2 \leq \|\Sigma_\eta\|_{\text{Fr}}^2.$$

Тогда, для любого $\mathbf{a} \in \mathbb{H}$,

$$\begin{aligned} & \sup_{x>0} |\mathbb{P}(\|\xi - \mathbf{a}\| \leq x) - \mathbb{P}(\|\eta\| \leq x)| \\ & \lesssim \left(\frac{1}{\|\Sigma_\xi\|_{\text{Fr}}} + \frac{1}{\|\Sigma_\eta\|_{\text{Fr}}} \right) \left(\|\lambda_\xi - \lambda_\eta\|_1 + \|\mathbf{a}\|^2 \right). \end{aligned}$$

Дополним результат Теоремы 3.1 и Следствия 3.1 несколькими замечаниями. Во-первых, в силу неравенства, $\|\lambda_\xi - \lambda_\eta\|_1 \leq \|\Sigma_\xi - \Sigma_\eta\|_1$; см., например, [77]. Это замечание позволяет получить оценку в терминах ядерной нормы разности $\Sigma_\xi - \Sigma_\eta$, которую может быть проще контролировать во многих приложениях.

Следствие 3.2. *В предположениях Теоремы 3.1 имеет место оценка*

$$\sup_{x>0} |\mathbb{P}(\|\xi - \mathbf{a}\| \leq x) - \mathbb{P}(\|\eta\| \leq x)| \lesssim \left\{ \kappa(\Sigma_\xi) + \kappa(\Sigma_\eta) \right\} \left(\|\Sigma_\xi - \Sigma_\eta\|_1 + \|\mathbf{a}\|^2 \right).$$

Так как правая часть (3.3) не изменится, если поменять местами ξ и η , то Теорема 3.1 и ее следствия справедливы для шаров с одним и тем же центром \mathbf{a} . В частности, имеет место следующее следствие.

Следствие 3.3. *В предположениях Теоремы 3.1 имеет место оценка*

$$\sup_{x>0} \left| \mathbb{P}(\|\xi - \mathbf{a}\| \leq x) - \mathbb{P}(\|\eta - \mathbf{a}\| \leq x) \right| \lesssim \left\{ \kappa(\Sigma_\xi) + \kappa(\Sigma_\eta) \right\} \left(\|\lambda_\xi - \lambda_\eta\|_1 + \|\mathbf{a}\|^2 \right).$$

Результат Теоремы 3.1 может быть переписан в терминах операторной нормы

$$\|\Sigma_\xi^{-1/2}\Sigma_\eta\Sigma_\xi^{-1/2} - \mathbf{I}\|.$$

Действительно, применяя неравенство $\|\mathbf{A}\mathbf{B}\|_1 \leq \|\mathbf{A}\|_1\|\mathbf{B}\|$, мы получим следующее следствие.

Следствие 3.4. В предположениях Теоремы 3.1 имеет место оценка

$$\begin{aligned} & \sup_{x>0} |\mathbb{P}(\|\xi - \mathbf{a}\| \leq x) - \mathbb{P}(\|\eta\| \leq x)| \\ & \lesssim \left\{ \kappa(\Sigma_\xi) + \kappa(\Sigma_\eta) \right\} \left(\text{Tr}(\Sigma_\xi) \|\Sigma_\xi^{-1/2} \Sigma_\eta \Sigma_\xi^{-1/2} - \mathbf{I}\| + \|\mathbf{a}\|^2 \right). \end{aligned}$$

Мы обсудим откуда в основной теореме и ее следствиях возникает множитель $\kappa(\Sigma_\xi)$. Анализ доказательства Теоремы 3.1 показывает, что необходимым шагом является получение верхних оценок на плотность $p_\xi(x)$ (соответственно $p_\eta(x)$) квадрата нормы $\|\xi\|^2$ (соответственно $\|\eta\|^2$) или в более общем случае плотности $p_\xi(x, \mathbf{a})$ величины $\|\xi - \mathbf{a}\|^2$ для всех $\mathbf{a} \in \mathbb{H}$. Следующая теорема дает равномерные оценки плотности.

Теорема 3.2. Пусть ξ является гауссовским элементом в \mathbb{H} с нулевым средним и ковариационным оператором Σ_ξ . Тогда для любого \mathbf{a}

$$(3.4) \quad \sup_{x \geq 0} p_\xi(x, \mathbf{a}) \lesssim \kappa(\Sigma_\xi),$$

где $\kappa(\Sigma_\xi)$ определено в (3.1). В частности, $\kappa(\Sigma_\xi) \lesssim (\Lambda_{1\xi} \Lambda_{2\xi})^{-1/2}$.

Т.к. $\xi \stackrel{\text{d}}{=} \sum_{j=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_{j\xi}} Z_j \mathbf{e}_{j\xi}$, то отсюда следует, что $\|\xi\|^2 \stackrel{\text{d}}{=} \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_{j\xi} Z_j^2$. Здесь и далее $\{\mathbf{e}_{j\xi}\}_{j=1}^{\infty}$ ортонормированный базис из собственных векторов Σ_ξ , соответствующих $\{\lambda_{j\xi}\}_{j=1}^{\infty}$. В случае $\mathbb{H} = \mathbb{R}^p$, $\mathbf{a} = 0$, $\Sigma_\xi \asymp \mathbf{I}$ распределение $\|\xi\|^2$ близко к распределению χ^2 с p степенями свободы и

$$\sup_{x \geq 0} p_\xi(x, 0) \asymp p^{-1/2}.$$

Следовательно, оценка (3.4) дает правильную зависимость от размерности p , так как $\kappa(\Sigma_\xi) \asymp p^{-1/2}$. Однако, доказательство нижних оценок для $\sup_{x \geq 0} p_\xi(x, \mathbf{a})$ в общем случае остается открытой проблемой. Другим возможным обобщением являются неравномерные оценки для $\|\xi - \mathbf{a}\|^2$. В этом направлении мы можем показать, что для любого $\lambda > \lambda_{1\xi}$

$$p_\xi(x, \mathbf{a}) \leq \frac{\exp(-(x^{1/2} - \|\mathbf{a}\|)^2 / (2\lambda))}{2\sqrt{\lambda_{1\xi} \lambda_{2\xi}}} \prod_{j=3}^{\infty} (1 - \lambda_{j\xi} / \lambda)^{-1/2};$$

см. [48][Лемма В.1]. Остается открытым вопрос о возможности замены $\lambda_{k\xi}$ в знаменателе на $\Lambda_{k\xi}$, $k = 1, 2$.

В качестве следствия основной Теоремы 3.2 сформулируем неравенство антиконцентрации для квадрата нормы гауссовского элемента, которое является безразмерным. В случае “высокой размерности”, оценка будет зависеть только от нормы Фробениуса Σ_ξ .

Теорема 3.3 (оценка попадания в ε -полосу). Пусть ξ гауссовский элемент в \mathbb{H} с нулевым средним и ковариационным оператором Σ_ξ . Для произвольного $\varepsilon > 0$ имеет место следующее неравенство

$$\sup_{x>0} \mathbb{P}(x < \|\xi - \mathbf{a}\|^2 < x + \varepsilon) \lesssim \kappa(\Sigma_\xi) \varepsilon$$

где $\kappa(\Sigma_\xi)$ определено в (3.1). В частности, $\kappa(\Sigma_\xi)$ может быть заменено на $(\Lambda_{1\xi} \Lambda_{2\xi})^{-1/2}$.

Обсуждение нижних оценок в Теореме 3.1 и Теореме 3.3 можно найти в [48].

3.2 Приложения

В этом разделе приводятся примеры приложений, в которых полученные результаты играют важную роль.

3.2.1 Бутстреп метод для построения доверительных интервалов на основе оценок максимального правдоподобия

Рассмотрим выборку $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)^\top$ н.о.р.с.в. с совместным распределением $\mathbb{P} = \prod_{i=1, \dots, n} P_i$. Предположим, что \mathbb{P} принадлежит параметрическому семейству мер $(\mathbb{P}_\theta, \theta \in \Theta \subseteq \mathbb{R}^p)$ с доминирующей мерой μ . В этом случае $\mathbb{P} = \mathbb{P}_{\theta^*}$ для $\theta^* \in \Theta$. Логарифм соответствующей функции правдоподобия может быть записан в виде суммы $\ell_i(Y_i, \theta)$:

$$L(\theta) := \log \frac{d\mathbb{P}_\theta}{d\mu}(\mathbf{Y}) = \sum_{i=1}^n \ell_i(Y_i, \theta), \quad \ell_i(Y_i, \theta) = \log \frac{dP_{i,\theta}}{d\mu_i}(Y_i).$$

Оценка максимального правдоподобия (ОМП) $\tilde{\theta}$ параметра θ^* определяется как точка максимума $L(\theta)$

$$\tilde{\theta} := \operatorname{argmax}_{\theta \in \Theta} L(\theta), \quad L(\tilde{\theta}) := \max_{\theta \in \Theta} L(\theta).$$

Если параметрическое предположение не выполняется, то в качестве θ^* возьмем наилучшее приближение

$$\theta^* := \operatorname{argmax}_{\theta \in \Theta} \mathbb{E} L(\theta).$$

Доверительный интервал $E(\zeta)$ для θ^* , построенный на основе ОМП, определяется следующим образом

$$E(\zeta) := \{\theta: L(\tilde{\theta}) - L(\theta) \leq \zeta\}.$$

Значение ζ выбирается таким образом, чтобы вероятность попадания в доверительный интервал была равна $1 - \alpha$

$$(3.5) \quad \mathbb{P}(\theta^* \notin E(\zeta)) \leq \alpha.$$

К сожалению, в таком случае нам необходимо знать распределение \mathbb{P} . Бутстреп метод позволяет обойти эту проблему. Определим взвешенную сумму логарифмов функций правдоподобия $L^\circ(\theta)$

$$L^\circ(\theta) = \sum_{i=1}^n \ell_i(Y_i, \theta) w_i,$$

где случайные веса w_i являются н.о.р.с.в., не зависящими от \mathbf{Y} . Далее, для простоты, мы предположим, что $w_i \sim \mathcal{N}(1, 1)$. Соответствующий доверительный интервал может быть определен следующим образом

$$E^\circ(\zeta) := \{\theta: \sup_{\theta' \in \Theta} L^\circ(\theta') - L^\circ(\theta) \leq \zeta\}.$$

Обозначим условную вероятность $\mathbb{P}^\circ(\cdot) := \mathbb{P}(\cdot | \mathbf{Y})$. В отличие от исходного распределения, бутстреп-распределение и соответствующий квантиль ζ° известны и

$$\mathbb{P}^\circ(\tilde{\theta} \notin E^\circ(\zeta^\circ)) = \mathbb{P}^\circ\left(\sup_{\theta \in \Theta} L^\circ(\theta) - L^\circ(\tilde{\theta}) > \zeta^\circ\right) = \alpha.$$

Бутстреп метод предлагает использовать ζ° вместо ζ . При этом для выполнения (3.5) необходимо показать состоятельность бутстреп-метода, а именно для больших n

$$\mathbb{P}(\theta^* \notin E(\zeta^\circ)) = \mathbb{P}(L(\tilde{\theta}) - L(\theta^*) > \zeta^\circ) \approx \alpha;$$

см., например, [101]. Мы не приводим полное доказательство данного факта, но отметим, что ключевым является следующее приближение

$$(3.6) \quad \begin{aligned} \sup_{\theta \in \Theta} L(\theta) - L(\theta^*) &\approx \frac{1}{2} \|\xi + \mathbf{a}\|^2, \\ \sup_{\theta \in \Theta} L^\circ(\theta) - L^\circ(\tilde{\theta}) &\approx \frac{1}{2} \|\xi^\circ\|^2, \end{aligned}$$

где ξ является гауссовским вектором с ковариационной матрицей Σ ,

$$\Sigma := D^{-1} \text{Var}[\nabla L(\theta^*)] D^{-1}, \quad D^2 = -\nabla^2 \mathbb{E} L(\theta^*),$$

а вектор ξ° имеет условное (при фиксированном \mathbf{Y}) гауссовское распределение относительно \mathbb{P}° с ковариационной матрицей Σ°

$$\Sigma^\circ := D^{-1} \left(\sum_{i=1}^n \nabla \ell_i(Y_i, \theta^*) \{ \nabla \ell_i(Y_i, \theta^*) \}^\top \right) D^{-1}.$$

Вектор \mathbf{a} в (3.6) представляет собой смещение (modeling bias) и равен нулю, если выполнено параметрическое предположение $\mathbb{P} = \mathbb{P}_{\theta^*}$. Матричное неравенство Бернштейна гарантирует, что Σ° близка к Σ в операторной норме для больших n ; см., например, [107]. Этот факт влечет состоятельную бутстреп-метода в слабом смысле в предположении, что выполнено параметрическое предположение. Однако, для получения неасимптотических оценок бутстреп-аппроксимации необходимо оценить расстояние между гауссовскими мерами $\mathcal{N}(\mathbf{a}, \Sigma)$ и $\mathcal{N}(0, \Sigma^\circ)$. В работе [101] использует подход, основанный на применении неравенства Пинскера, которое дает оценку на расстояние полной вариации $\|\cdot\|_{\text{TV}}$ между мерами через расстояние Кульбака – Лейблера. Соответствующая оценка содержит норму Фробениуса $\|\cdot\|_{\text{Fr}}$ матрицы $\Sigma^{-1/2} \Sigma^\circ \Sigma^{-1/2} - \mathbf{I}_p$ и норму вектора $\beta := \Sigma^{-1/2} \mathbf{a}$:

$$(3.7) \quad \|\mathcal{N}(\mathbf{a}, \Sigma) - \mathcal{N}(0, \Sigma^\circ)\|_{\text{TV}} \leq \frac{1}{2} \left(\|\Sigma^{-1/2} \Sigma^\circ \Sigma^{-1/2} - \mathbf{I}_p\|_{\text{Fr}} + \|\Sigma^{-1/2} \mathbf{a}\| \right);$$

см, например, [101]. Используя Теорему 3.1 и Следствие 3.1, мы получим

$$(3.8) \quad \left| \mathbb{P}(\|\xi + \mathbf{a}\|^2 > 2\zeta^\circ) - \alpha \right| \leq \frac{\mathbf{C}}{\|\Sigma\|_{\text{Fr}}} \left(\|\Sigma - \Sigma^\circ\|_1 + \|\mathbf{a}\|^2 \right).$$

Условие “небольшого модельного смещения” на \mathbf{a} из работы [101] означает, что величина $\|\Sigma^{-1/2} \mathbf{a}\|$ мала и гарантирует, что возможное модельное смещение не влияет на состоятельность бутстреп-метода. Сравнение (3.8) и (3.7) показывает ряд преимуществ (3.8). Во-первых, слагаемое, отвечающее за “смещение” пропорционально квадрату \mathbf{a} , в то время как оценка (3.7) зависит от нормы $\Sigma^{-1/2} \mathbf{a}$, т.е. от всего спектра Σ . Нормировка $\Sigma^{-1/2}$ может существенно влиять на вектор \mathbf{a} в тех направлениях, где малы с.з. Σ . Заметим, что оценка (3.8) содержит только квадрат нормы $\|\mathbf{a}\|^2$ и норму Фробениуса Σ . Далее, норма Фробениуса $\|\Sigma^{-1/2} \Sigma^\circ \Sigma^{-1/2} - \mathbf{I}_p\|_{\text{Fr}}$ может быть значительно больше $\|\Sigma - \Sigma^\circ\|_1 / \|\Sigma\|_{\text{Fr}}$ по тем же причинам.

3.2.2 Влияние априорного распределения в линейной гауссовской модели

Рассмотрим линейную регрессионную модель

$$Y_i = \Psi_i^\top \theta + \varepsilon_i$$

Если предположить, что $\varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$, то логарифм функции правдоподобия будет иметь вид

$$L(\theta) = -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (Y_i - \Psi_i^\top \theta)^2 + R = -\frac{1}{2\sigma^2} \|\mathbf{Y} - \Psi^\top \theta\|^2 + R,$$

где слагаемое R не зависит от θ . Рассмотрим гауссовское априорное распределение $\pi = \pi_G = \mathcal{N}(0, G^{-2})$. Тогда апостериорное распределение имеет вид

$$\vartheta_G | \mathbf{Y} \propto \exp\left(L(\theta) - \frac{1}{2}\|G\theta\|^2\right) \propto \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\|\mathbf{Y} - \Psi^\top \theta\|^2 - \frac{1}{2}\|G\theta\|^2\right).$$

Определим функцию $L_G(\theta) := L(\theta) - \frac{1}{2}\|G\theta\|^2$ и перепишем ее в следующем виде

$$L_G(\theta) = L_G(\check{\theta}_G) - \frac{1}{2}\|D_G(\theta - \check{\theta}_G)\|^2,$$

где

$$\begin{aligned} \check{\theta}_G &:= (\Psi\Psi^\top + \sigma^2 G^2)^{-1} \Psi\mathbf{Y}, \\ D_G^2 &:= \sigma^{-2} \Psi\Psi^\top + G^2. \end{aligned}$$

В частности, апостериорное распределение $\mathbb{P}(\vartheta_G | \mathbf{Y})$ параметра ϑ_G при заданной выборке \mathbf{Y} будет $\mathcal{N}(\check{\theta}_G, D_G^{-2})$. Определим следующее достоверное множество (credible set)

$$E_G(\mathbf{r}) = \{\theta: \|W(\theta - \check{\theta}_G)\| \leq \mathbf{r}\},$$

где W заданное линейное отображение из \mathbb{R}^p . Найдем такое \mathbf{r}_G , что

$$(3.9) \quad \mathbb{P}\left(\|W(\vartheta_G - \check{\theta}_G)\| \geq \mathbf{r}_G | \mathbf{Y}\right) = \alpha.$$

Так как $\vartheta_G \sim \mathcal{N}(\check{\theta}_G, D_G^{-2})$, то последнее равенство можно переписать в следующем виде

$$(3.10) \quad \mathbb{P}(\|\xi_G\| \geq \mathbf{r}_G) = \alpha,$$

где вектор $\xi_G \sim \mathcal{N}(0, \Sigma_G)$ и $\Sigma_G = W D_G^{-2} W^\top$. Рассмотрим вопрос влияния выбора априорного распределения на соответствующее достоверное множество. Другими словами, влияние матрицы G на достоверное множество. Для этого рассмотрим другое априорное распределение $\pi_1 = \mathcal{N}(0, G_1^{-2})$ с ковариационной матрицей G_1^{-2} . Соответствующее апостериорное распределение ϑ_{G_1} является нормальным с параметрами $\check{\theta}_{G_1} = (\Psi\Psi^\top + \sigma^2 G_1^2)^{-1} \Psi\mathbf{Y}$ и $D_{G_1}^2 = \sigma^{-2} \Psi\Psi^\top + G_1^2$. Рассмотрим апостериорную вероятность достоверного множества $E_G(\mathbf{r}_G)$:

$$\mathbb{P}\left(\|W(\vartheta_{G_1} - \check{\theta}_G)\| \geq \mathbf{r}_G | \mathbf{Y}\right).$$

Последнее равенство может быть записано в виде

$$\mathbb{P}\left(\|\xi_{G_1} + \mathbf{a}\| \geq r_G\right),$$

где $\xi_{G_1} \sim \mathcal{N}(0, \Sigma_{G_1})$, $\Sigma_{G_1} = W D_{G_1}^{-2} W^\top$ и

$$\mathbf{a} := W(\check{\theta}_{G_1} - \check{\theta}_G).$$

Таким образом,

$$\left| \mathbb{P}\left(\|W(\vartheta_{G_1} - \check{\theta}_G)\| \geq r_G \mid \mathbf{Y}\right) - \alpha \right| \leq \sup_{r>0} \left| \mathbb{P}\left(\|\xi_{G_1} + \mathbf{a}\| \geq r\right) - \mathbb{P}\left(\|\xi_G\| \geq r\right) \right|.$$

Неравенство Пинскера позволяет оценить расстояние между $\mathcal{N}(0, \Sigma_G)$ и $\mathcal{N}(\mathbf{a}, \Sigma_{G_1})$

$$(3.11) \quad \|\mathcal{N}(0, \Sigma_G) - \mathcal{N}(\mathbf{a}, \Sigma_{G_1})\|_{\text{TV}} \leq \mathfrak{c} \left(\|\Sigma_G^{-1/2} \Sigma_{G_1} \Sigma_G^{-1/2} - \mathbf{I}_p\|_{\text{Fr}} + \|\Sigma_{G_1}^{-1/2} \mathbf{a}\| \right);$$

см., например, [86]. Результаты настоящего раздела позволяют значительно улучшить данный результат. В частности, в оценку войдут ядерная норма $\|\Sigma_G - \Sigma_{G_1}\|_1$, норма вектора \mathbf{a} и норма Фробениуса Σ_G . Если $G^2 \geq G_1^2$, тогда $\Sigma_G \leq \Sigma_{G_1}$ и

$$\|\Sigma_G - \Sigma_{G_1}\|_1 = \text{Tr} \Sigma_{G_1} - \text{Tr} \Sigma_G.$$

Теорема 3.1 и Следствие 3.1 влекут оценку

$$\left| \mathbb{P}\left(\|W(\vartheta_{G_1} - \check{\theta}_G)\| \geq r_G \mid \mathbf{Y}\right) - \alpha \right| \leq \frac{\mathfrak{c}(\text{Tr} \Sigma_{G_1} - \text{Tr} \Sigma_G + \|\mathbf{a}\|^2)}{\|\Sigma_G\|_{\text{Fr}}}.$$

Полученная оценка значительно улучшает оценку (3.11); см. обсуждение в конце предыдущего параграфа.

3.2.3 Непараметрический байесовский вывод

Одним из центральных вопросов непараметрического байесовского подхода является использование достоверных множеств в качестве доверительных интервалов для истинного среднего $\mathbb{E} \mathbf{Y} = f = \Psi^\top \theta^*$. Рассмотрим модель $\mathbf{Y} = f + \varepsilon = \Psi^\top \theta + \varepsilon$ в \mathbb{R}^n с однородным гауссовским шумом $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 \mathbf{I}_n)$ и априорным гауссовским распределением $\mathcal{N}(0, G^{-2})$ на параметр θ . Достоверное множество $E_G(r)$ для ϑ_G позволяет построить доверительное множество $\mathcal{E}_G(r)$ для $f = \Psi^\top \theta$:

$$\mathcal{E}_G(r) = \{f = \Psi^\top \theta: \|\mathbf{A} \Psi^\top (\theta - \check{\theta}_G)\| \leq r\},$$

где \mathbf{A} некоторое линейное отображение. Радиус $r = r_G$ выбран таким образом, чтобы гарантировать достоверность уровня $1 - \alpha$ для множества $\mathcal{E}_G(r_\alpha)$, см. (3.9) и (3.10), где $W = \mathbf{A} \Psi^\top$, $\Sigma_G = \mathbf{A} \Psi^\top D_G^{-2} \Psi \mathbf{A}^\top = \sigma^2 \mathbf{A} \Pi_G \mathbf{A}^\top$ и $\Pi_G = \Psi^\top (\Psi \Psi^\top + \sigma^2 G^2)^{-1} \Psi$. Вероятность попадания в доверительное множество для f задается следующим образом

$$\mathbb{P}(f \in \mathcal{E}_G(r)) = \mathbb{P}(\|\mathbf{A}(f - \Psi^\top \check{\theta}_G)\| \leq r) = \mathbb{P}(\|\mathbf{A} \Psi^\top (\theta^* - \check{\theta}_G)\| \leq r).$$

Цель - показать, что данная вероятность близка к $1 - \alpha$. Для апостериорного среднего $\check{\theta}_G = (\Psi\Psi^\top + \sigma^2 G^2)^{-1} \Psi\mathbf{Y}$, выполнено следующее равенство

$$\mathbb{E}[\mathbf{A}(f - \Psi^\top \check{\theta}_G)] = \mathbf{A}(\mathbf{I} - \Pi_G)f =: \mathbf{a}.$$

Далее,

$$\Sigma := \text{Var}\{\mathbf{A}(f - \Psi^\top \check{\theta}_G)\} = \text{Var}\{\mathbf{A}\Pi_G \varepsilon\} = \sigma^2 \mathbf{A}\Pi_G^2 \mathbf{A}^\top$$

и, следовательно, вектор $\mathbf{A}(f - \Psi^\top \check{\theta}_G)$ имеет нормальное распределение относительно \mathbb{P} со средним $\mathbf{a} = \mathbf{A}(\mathbf{I} - \Pi_G)f$ и дисперсией $\Sigma = \sigma^2 \mathbf{A}\Pi_G^2 \mathbf{A}^\top$. Таким образом,

$$\mathbb{P}(f \in \mathcal{E}_G(r)) = \mathbb{P}(\|\mathbf{a} + \xi\| \leq r).$$

Здесь $\xi \sim \mathcal{N}(0, \Sigma)$. Следовательно, необходимо сравнить две вероятности

$$\mathbb{P}(\|\mathbf{a} + \xi\| \leq r) \text{ против } \mathbb{P}(\|\xi_G\| \leq r)$$

для всех $r \geq 0$. Отметим, что в литературе рассматривались только специальные случаи; см., например, [62, 20, 86, 23, 24, 6]. Более того, большинство результатов носят асимптотический характер и не могут быть напрямую перенесены на неасимптотический случай. Заметим, что ковариационные операторы $\Sigma = \sigma^2 \mathbf{A}\Pi_G^2 \mathbf{A}^\top$ и $\Sigma_G = \sigma^2 \mathbf{A}\Pi_G \mathbf{A}^\top$ удовлетворяют $\Sigma \leq \Sigma_G$. Отсюда следует, что

$$\|\Sigma_G - \Sigma\|_1 = \text{Tr} \Sigma_G - \text{Tr} \Sigma.$$

Теорема 3.1 и Следствие 3.1 позволяют получить следующий результат

$$|\mathbb{P}(f \notin \mathcal{E}_G(r_G)) - \alpha| \leq \frac{\mathfrak{C}(\text{Tr} \Sigma_G - \text{Tr} \Sigma + \|\mathbf{a}\|^2)}{\|\Sigma\|_{\text{Fr}}}.$$

Правая часть данного неравенства может быть легко вычислена. Величина $\|\mathbf{a}\| = \mathbf{A}(\mathbf{I} - \Pi_G)f$ мала при достаточно общих условиях на f . Величина

$$\text{Tr} \Sigma_G - \text{Tr} \Sigma = \sigma^2 \text{Tr}\{\mathbf{A}(\Pi_G - \Pi_G^2)\mathbf{A}^\top\}$$

мала при стандартных условиях на матрицу признаков Ψ и спектр G^2 ; см., например [100].

3.2.4 Центральная предельная теорема в конечномерных и бесконечномерных пространствах

Полученные в настоящей главе оценки играют важную роль в многомерной центральной предельной теореме, в которой изучается аппроксимация вероятности попадания суммы независимых случайных векторов в выпуклые множества и, в частности, нецентрированные шары. Применение неравенства сглаживания требует вычисления вероятности попадания в окрестность границы выпуклого множества, см., например, [13], [12]. Этот вопрос тесно связан с неравенством анти-концентрации, рассмотренным в Теореме 3.3. Отметим, что в последние годы исследованию неравенств анти-концентрации для взвешенных сумм случайных величин было уделено достаточно много внимания, особенно, в теории случайных матриц и теории чисел. Заинтересованный читатель может обратиться к работам [96], [50].

Пусть Y_1, \dots, Y_n – н.о.р. случайные векторы в \mathbb{R}^p . Предположим, что все векторы имеют нулевое среднее и ковариационный оператор Σ . Обозначим через X гауссовский вектор в \mathbb{R}^p с нулевым средним и ковариационным оператором Σ . Нас интересуют оценки на

$$(3.12) \quad \delta(\mathbf{C}) = \sup_{A \in \mathbf{C}} \left| \mathbb{P} \left(\frac{Y_1 + \dots + Y_n}{\sqrt{n}} \in A \right) - \mathbb{P}(X \in A) \right|,$$

где \mathbf{C} некоторый класс борелевских множеств. Как отмечалось выше, вероятность попадания в окрестность множества $A \in \mathbf{C}$, играет важную роль при оценивании $\delta(\mathbf{C})$. Предположим, что \mathbf{C} удовлетворяет следующим условиям:

(i) Класс \mathbf{C} инвариантен относительно симметричных аффинных преобразований, т.е. $\mathbf{D}A + \mathbf{a} \in \mathbf{C}$, если $A \in \mathbf{C}$, $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^p$ и $\mathbf{D} : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^p$ линейный симметричный обратимый оператор.

(ii) Для любого $\varepsilon > 0$, $A^\varepsilon, A^{-\varepsilon} \in \mathbf{C}$, если $A \in \mathbf{C}$, где

$$A^\varepsilon = \{x \in \mathbb{R}^p : \rho_A(x) \leq \varepsilon\} \text{ и } A^{-\varepsilon} = \{x \in A : B_\varepsilon(x) \subset A\},$$

и $\rho_A(x) = \inf_{y \in A} |x - y|$ – расстояние между $A \subset \mathbb{R}^p$ и $x \in \mathbb{R}^p$. Здесь $B_\varepsilon(x) = \{y \in \mathbb{R}^p : |x - y| \leq \varepsilon\}$.

Обозначим через X_0 гауссовский вектор в \mathbb{R}^p с нулевым средним и тождественным ковариационным оператором I . Предположим дополнительно, что класс \mathbf{C} в (3.12) удовлетворяет следующему дополнительному условию. Для всех $A \in \mathbf{C}$ и $\varepsilon > 0$

$$(3.13) \quad \mathbb{P}(X_0 \in A^\varepsilon \setminus A) \leq a_p \varepsilon, \quad \mathbb{P}(X_0 \in A \setminus A^{-\varepsilon}) \leq a_p \varepsilon,$$

где $a_p = a_p(\mathbf{C})$ – изопериметрическая константа класса \mathbf{C} . Например, если \mathbf{C} представляет собой множество всех выпуклых подмножеств \mathbb{R}^p , то $a_p \leq 4p^{1/4}$; см. [5].

Известно (см [12][Теорема 1.2]), что если \mathbf{C} удовлетворяет условиям (i), (ii) и (3.13), то для некоторой абсолютной константы C

$$(3.14) \quad \delta(\mathbf{C}) \leq C(1 + a_p) \mathbb{E}|Y_1|^3 / \sqrt{n}.$$

Таким образом, неравенства (3.13), или величина a_p , играют ключевую роль при оценивании правой части (3.14).

Рассмотрим бесконечномерный случай. К сожалению, даже если \mathbf{C} является достаточно малым классом "хороших" множеств, например, классом всех шаров, сходимость $\mathbb{P}((Y_1 + \dots + Y_n)/\sqrt{n} \in A)$ к $\mathbb{P}(X \in A)$ для каждого $A \in \mathbf{C}$ не может быть равномерной по $A \in \mathbf{C}$; см., например, [98][стр. 69–70]. Однако, сходимость будет равномерной если рассмотреть класс всех шаров с фиксированным центром \mathbf{a} . Такие классы множеств естественным образом возникают в различных статистических задачах; см., например [90] или результаты из предыдущих параграфов. Аналогично неравенствам (3.13) необходимо получить оценки на вероятность $\mathbb{P}(x < \|X - \mathbf{a}\|^2 < x + \varepsilon)$ для гауссовского элемента X в гильбертовом пространстве \mathbb{H} . В силу Теоремы 3.3 при некоторых предположениях

$$\mathbb{P}(x < \|X - \mathbf{a}\|^2 < x + \varepsilon) \leq \frac{\mathbf{C} \varepsilon}{\|\Sigma\|_{\text{Fr}}}$$

где \mathbf{C} абсолютная константа.

3.2.5 Доверительные множества для спектральных проекторов ковариационных матриц

Рассмотрим последовательность независимых одинаково распределенных случайных векторов (н.о.р.с.в.) X, X_1, \dots, X_n , принимающих значения в \mathbb{R}^p . Предположим, что $\mathbb{E} X = 0$ и $\mathbb{E} \|X\|^2 < \infty$. Пусть $\Sigma := \mathbb{E}(XX^\top)$ – ковариационная матрица вектора X . Наряду с истинной ковариационной матрицей Σ мы также рассмотрим выборочную ковариационную матрицу $\hat{\Sigma}$, построенную по наблюдениям X_1, \dots, X_n :

$$\hat{\Sigma} := \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n X_j X_j^\top = \frac{1}{n} \mathbf{X} \mathbf{X}^\top.$$

Здесь и далее $\mathbf{X} := [X_1, \dots, X_n] \in \mathbb{R}^{p \times n}$

В большинстве статистических приложений истинная ковариационная матрица Σ обычно неизвестна и на практике ее заменяют выборочным аналогом $\hat{\Sigma}$. Точность оценивая Σ с помощью $\hat{\Sigma}$, в частности в случае, когда p много больше n , активно изучается в литературе. Мы отсылаем читателя к работам [107] и [110]. Оценка в терминах *эффективного ранга*, $r(\Sigma) := \text{Tr}(\Sigma)/\|\Sigma\|$, получена недавно в [65] и [55]. Эти оценки могут быть использованы для восстановления отдельных собственных значений (с.з.) Σ в случае, когда существует лакуна спектра (spectral gap) между собственными значениями Σ .

В настоящей работе рассматривается задача восстановления спектральных проекторов на подпространство натянутое на собственные векторы, отвечающие собственным значениям Σ . Задачи восстановления спектральных проекторов, а также собственных векторов и собственных подпространств ковариационных матриц высокой размерности по выборке наблюдений является одной из ключевых задач статистики и имеет непосредственное отношение к задачам снижения размерности. В частности, широко распространенный метод главных компонент состоит в том, что данные высокой размерности проецируются на подпространства, натянутые на первые собственные векторы, отвечающие наибольшим собственным значениям. Однако, проблема восстановления спектральных проекторов ковариационных матриц высокой размерности изучена недостаточно. Недавно в [66] были получены неасимптотические оценки нормы Фробениуса расстояния между выборочным и истинным проекторами $\|\mathbf{P}_r - \hat{\mathbf{P}}_r\|_2$, а также исследовано асимптотическое поведение для больших выборок. Из [66] вытекает, что, зная моментные характеристики наблюдаемых случайных величин, можно строить асимптотические доверительные множества для истинного проектора \mathbf{P}_r . Однако эти моментные характеристики, как правило, мы не знаем. С другой стороны хорошо известно, что такие асимптотические результаты применимы только для выборок очень большого объема. В частности, это связано с тем, что скорость сходимости нормированных U-статистик, возникающих в данной задаче, к предельному закону слишком медленная.

Для формулировки основного результата введем понятие лакуны спектра и определим выборочный аналог спектрального проектора \mathbf{P}_r . Обозначим через $\sigma_j, j = 1, \dots, p$, упорядоченные по невозрастанию собственные значения (с.з.) Σ и $\mathbf{u}_j, j = 1, \dots, p$, – соответствующие им собственные векторы (с.в.). Матрица Σ может быть записана в терминах своего спектрального разложения, а именно $\Sigma = \sum_{j=1}^p \sigma_j \mathbf{u}_j \mathbf{u}_j^\top$. Пусть теперь $\mu_j, j = 1, \dots, q, q \leq p$ – различные с.з матрицы Σ и $\mathbf{P}_r, r = 1, \dots, q$ – соответствующие спектральные проекторы, т.е. $\mathbf{P}_r = \sum_{j: \sigma_j = \mu_r} \mathbf{u}_j \mathbf{u}_j^\top$. Тогда можно записать

$$\Sigma = \sum_{r=1}^q \mu_r \mathbf{P}_r.$$

Обозначим $\Delta_r := \{j: \sigma_j = \mu_r\}$. Легко видеть, что $|\Delta_r| = m_r$, где $m_r := \text{Rank}(\mathbf{P}_r)$. Определим для всех $r \geq 1$ величины $g_r := \mu_r - \mu_{r+1} > 0$, и пусть $\bar{g}_r := \min(g_{r-1}, g_r)$ для $r \geq 2$ и $\bar{g}_1 := g_1$. Величину \bar{g}_r будем называть r -ой *лакуной спектра* (spectral gap), соответствующей с.з. μ_r .

Рассмотрим теперь $\widehat{\Sigma}$ и запишем ее в терминах спектрального разложения $\widehat{\Sigma} = \sum_{j=1}^p \widehat{\sigma}_j \widehat{\mathbf{u}}_j \widehat{\mathbf{u}}_j^\top$, где $\widehat{\sigma}_1 \geq \widehat{\sigma}_2 \geq \dots \geq \widehat{\sigma}_p$, $\widehat{\mathbf{u}}_1, \dots, \widehat{\mathbf{u}}_p$ — с.з. и соответствующие им с.в. матрицы $\widehat{\Sigma}$. Следуя [66], определим *кластеры* с.з. $\widehat{\sigma}_j, j \in \Delta_r$. Пусть $\widehat{\mathbf{E}} := \widehat{\Sigma} - \Sigma$. Легко показать, что

$$\inf_{j \notin \Delta_r} |\widehat{\sigma}_j - \mu_r| \geq \bar{g}_r - \|\widehat{\mathbf{E}}\|, \quad \sup_{j \in \Delta_r} |\widehat{\sigma}_j - \mu_r| \leq \|\widehat{\mathbf{E}}\|.$$

Предположим, что $\|\widehat{\mathbf{E}}\| \leq \bar{g}_r/2$. Тогда все $\widehat{\sigma}_j, j \in \Delta_r$ принадлежат интервалу $(\mu_r - \|\widehat{\mathbf{E}}\|, \mu_r + \|\widehat{\mathbf{E}}\|) \subset (\mu_r - \bar{g}_r/2, \mu_r + \bar{g}_r/2)$, а все остальные с.з. $\widehat{\Sigma}$ лежат вне интервала $(\mu_r - (\bar{g}_r - \|\widehat{\mathbf{E}}\|), \mu_r + (\bar{g}_r - \|\widehat{\mathbf{E}}\|)) \supset [\mu_r - \bar{g}_r/2, \mu_r + \bar{g}_r/2]$. Если дополнительно потребовать, чтобы $\|\widehat{\mathbf{E}}\| < \frac{1}{4} \min_{1 \leq s \leq r} \bar{g}_s =: \bar{\delta}_r$, то множество $\{\widehat{\sigma}_j, j \in \cup_{s=1}^r \Delta_s\}$ состоит из r кластеров. Диаметр каждого кластера строго меньше $2\bar{\delta}_r$, а расстояние между любыми двумя кластерами больше $2\bar{\delta}_r$. Обозначим через $\widehat{\mathbf{P}}_r$ — проектор на подпространство, натянутое на $\widehat{\mathbf{u}}_j, j \in \Delta_r$.

Как уже отмечалось выше, в [66] установлена асимптотическая нормальность величины $\|\widehat{\mathbf{P}}_r - \mathbf{P}_r\|_2^2$:

$$(3.15) \quad \mathcal{L} \left(\frac{\|\widehat{\mathbf{P}}_r - \mathbf{P}_r\|_2^2 - \mathbb{E} \|\widehat{\mathbf{P}}_r - \mathbf{P}_r\|_2^2}{\text{Var}^{1/2}(\|\widehat{\mathbf{P}}_r - \mathbf{P}_r\|_2^2)} \right) \approx \mathcal{N}(0, 1),$$

Этот результат позволяет построить асимптотические доверительные множества для неизвестного проектора \mathbf{P}_r вида

$$\left\{ \mathbf{P}_r : \frac{\|\widehat{\mathbf{P}}_r - \mathbf{P}_r\|_2^2 - \mathbb{E} \|\widehat{\mathbf{P}}_r - \mathbf{P}_r\|_2^2}{\text{Var}^{1/2}(\|\widehat{\mathbf{P}}_r - \mathbf{P}_r\|_2^2)} \leq z_\alpha \right\},$$

где z_α — квантиль порядка нормального распределения. Основными недостатками данной работы могут служить медленная скорость сходимости к нормальному закону в (3.15), которая требует большого объема выборки. Более того, требуется оценить величины $\mathbb{E} \|\widehat{\mathbf{P}}_r - \mathbf{P}_r\|_2^2$ и $\text{Var}(\|\widehat{\mathbf{P}}_r - \mathbf{P}_r\|_2^2)$, которые зависят от неизвестной Σ . Отметим, что в [66] предлагается статистическая процедура, в рамках которой выборка делится на три равные части. По первой и второй частям выборки оцениваются математическое ожидание и дисперсия $\|\widehat{\mathbf{P}}_r - \mathbf{P}_r\|_2^2$, а третья используется для построения доверительного множества.

В настоящей работе нас будет интересовать оценка квантиля

$$\gamma_\alpha := \inf \left\{ \gamma > 0 : \mathbb{P}^\circ \left(n \|\widehat{\mathbf{P}}_r - \mathbf{P}_r\|_2^2 > \gamma \right) \leq \alpha \right\}. \quad (3.16)$$

Мы предлагаем статистическую процедуру оценки γ_α , основанную на бутстреп-методе. Данный подход: 1) не использует асимптотическое распределение $\|\widehat{\mathbf{P}}_r - \mathbf{P}_r\|_2^2$; 2) не требует вычисления соответствующих моментов $\|\widehat{\mathbf{P}}_r - \mathbf{P}_r\|_2^2$; 3) не требует разбиения выборки на несколько частей; 4) обеспечивает явную оценку качества бутстреп-аппроксимации.

Отметим, что бутстреп-метод является одним из самых распространенных статистических методов построения доверительных множеств. Однако, существующая теория доказывает возможность применения этого метода в основном для параметрических моделей. Обобщение на случай, когда размерность

пространства может быть много больше объема выборки сталкивается с различными проблемами. Отметим в данном направлении работы [101], [29]. В настоящей работе мы расширяем возможность применения бутстреп-метода для построения доверительных множеств для спектральных проекторов. Дополнительно отметим здесь, что спектральные проекторы нелинейным образом зависят от ковариационной матрицы, которая в свою очередь является квадратичной функцией исходного распределения, что вызывает дополнительные трудности.

Определим *взвешенную* (или *бутстреп*) версию матрицы $\widehat{\Sigma}$ с помощью:

$$\Sigma^\circ := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n w_i X_i X_i^\top,$$

где w_1, \dots, w_n – н.о.р. с.в. $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)$, такие, что $\mathbb{E} w_1 = 1$, $\text{Var} w_1 = 1$. В качестве примера можно рассмотреть н.о.р. гауссовские веса $w_i \sim \mathcal{N}(1, 1)$. Обозначим условную вероятность $\mathbb{P}^\circ(\cdot) := \mathbb{P}(\cdot | \mathbf{X})$ и соответствующее математическое ожидание через \mathbb{E}° . Легко видеть, что если выборка фиксирована, а случайными являются только веса w_i , то математическим ожиданием Σ° является известная матрица $\widehat{\Sigma}$, т.е. $\mathbb{E}^\circ \Sigma^\circ = \widehat{\Sigma}$. Эта ситуация противоположна ситуации $\mathbb{E} \widehat{\Sigma} = \Sigma$, в которой математическое ожидание является неизвестной величиной.

Запишем $\Sigma^\circ = \sum_{j=1}^p \sigma_j^\circ \mathbf{u}_j^\circ \mathbf{u}_j^{\circ\top}$ и определим спектральные проекторы \mathbf{P}_r° , как ортогональные проекторы на подпространство, натянутое на $\mathbf{u}_j^\circ, j \in \Delta_r$. Для заданного уровня α мы определим квантиль γ_α° (ср. с (3.16)):

$$(3.17) \quad \gamma_\alpha^\circ := \min \left\{ \gamma > 0: \mathbb{P}^\circ \left(n \|\mathbf{P}_r^\circ - \widehat{\mathbf{P}}_r\|_2^2 > \gamma \right) \leq \alpha \right\}.$$

Заметим, что γ_α° зависит от выборки \mathbf{X} . Идея метода состоит в том, чтобы использовать γ_α° для построения следующего доверительного множества $\mathcal{E}(\alpha) := \{ \mathbf{P}: n \|\mathbf{P} - \widehat{\mathbf{P}}_r\|_2^2 \leq \gamma_\alpha^\circ \}$. Таким образом необходимо показать, что

$$\mathbb{P}(\mathbf{P}_r \notin \mathcal{E}(\alpha)) = \mathbb{P}(n \|\mathbf{P}_r - \widehat{\mathbf{P}}_r\|_2^2 > \gamma_\alpha^\circ) \approx \alpha.$$

Введем следующую блочную матрицу

$$\Gamma_r := \begin{pmatrix} \Gamma_{r1} & \mathbf{O} & \dots & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \Gamma_{r2} & \mathbf{O} \dots & \mathbf{O} \\ \dots & & & \\ \mathbf{O} & \dots & \mathbf{O} & \Gamma_{rq} \end{pmatrix},$$

где $\Gamma_{rs}, s \neq r$ – диагональные матрицы размера $m_r m_s \times m_r m_s$ со значениями $2\mu_r \mu_s / (\mu_r - \mu_s)^2$ на главной диагонали. Обозначим через $\lambda_1(\Gamma_r) \geq \lambda_2(\Gamma_r) \geq \dots$ – с.з. Γ_r . Отметим, что доступные оценки качества аппроксимации Σ с помощью, $\widehat{\Sigma}$ позволяют восстанавливать с.з. Σ с точностью $O(1/\sqrt{n})$. Таким образом, часть спектра Σ , которая оказывается меньше уровня $O(1/\sqrt{n})$ не может быть оценена. Такие же рассуждения можно применить к матрице Γ_r . Определим величину \mathbf{m} :

$$\lambda_{\mathbf{m}}(\Gamma_r) \geq \text{Tr} \Gamma_r \left(\sqrt{\frac{\log n}{n}} + \sqrt{\frac{\log p}{n}} \right) \geq \lambda_{\mathbf{m}+1}(\Gamma_r). \quad (3.18)$$

Обозначим через $\mathbf{P}_{\mathbf{m}}$ – проектор на подпространство, натянутое на собственные векторы Γ_r , соответствующие первым \mathbf{m} с.з. Следующая теорема представляет основной результат настоящей работы.

Теорема 3.4. *Предположим, что наблюдения X, X_1, \dots, X_n являются н.о.р. гауссовскими векторами в \mathbb{R}^P с нулевым средним и ковариационной матрицей $\mathbb{E}XX^\top = \Sigma$. Для любого $\alpha : 0 < \alpha < 1$ определим соответствующий квантиль γ_α° с помощью (3.17), где дополнительно потребуем, чтобы веса $w_i \sim \mathcal{N}(1, 1)$ для всех $i = 1, \dots, n$. Тогда имеет место следующая оценка*

$$\left| \alpha - \mathbb{P}\left(n\|\widehat{\mathbf{P}}_r - \mathbf{P}_r\|_2^2 > \gamma_\alpha^\circ\right) \right| \lesssim \diamond,$$

где

$$\begin{aligned} \diamond := & \frac{\mathfrak{m} \operatorname{Tr} \Gamma_r}{\sqrt{\lambda_1(\Gamma_r)\lambda_2(\Gamma_r)}} \left(\sqrt{\frac{\log n}{n}} + \sqrt{\frac{\log p}{n}} \right) + \frac{\operatorname{Tr}(\mathbf{I} - \Pi_{\mathfrak{m}})\Gamma_r}{\sqrt{\lambda_1(\Gamma_r)\lambda_2(\Gamma_r)}} \\ & + \frac{m_r \operatorname{Tr}^3 \Sigma}{\bar{g}_r^3 \sqrt{\lambda_1(\Gamma_r)\lambda_2(\Gamma_r)}} \left(\sqrt{\frac{\log^3 n}{n}} + \sqrt{\frac{\log^3 p}{n}} \right) \end{aligned}$$

и величина \mathfrak{m} определена с помощью (3.18).

Детали доказательства Теоремы 3.4 см. в [83]. Обозначим основные шаги доказательства. Можно показать (см/ [83][Раздел 4.2])

$$\mathbf{X}\text{-мир:} \quad \mathcal{L}(n\|\widehat{\mathbf{P}}_r - \mathbf{P}_r\|_2^2) \approx \mathcal{L}(\|\xi\|^2), \quad \xi \sim \mathcal{N}(0, \Gamma_r),$$

где матрица Γ_r определена в (3.18). Далее, в [83][Section 4.3] показано, что в "мире бутстреп"

$$\text{Бутстреп мир:} \quad \mathcal{L}(n\|\mathbf{P}_r^\circ - \widehat{\mathbf{P}}_r\|_2^2) \approx \mathcal{L}(\|\xi^\circ\|^2), \quad \xi^\circ \sim \mathcal{N}(0, \Gamma_r^\circ),$$

где матрица Γ_r° определена в [83][Формула 24]. Для сравнения ξ и ξ° мы можем применить Теорему 3.1.

Для вычисления γ_α° можно использовать численную процедуру. Сгенерируем M независимых выборок $\{w_1, \dots, w_n\}$ и построим эмпирическую функцию $n\|\mathbf{P}_r^\circ - \widehat{\mathbf{P}}_r\|_2^2$. Стандартные аргументы, см., например [99][Раздел 5.1], и [83][Теорема 5] показывают, что аппроксимация по методу Монте-Карло имеет порядок $M^{-1/2}$. Теорема 3.4 позволяет использовать γ_α° вместо γ_α , если \diamond достаточно мало.

В заключении мы проиллюстрируем результат на искусственном примере.

Пример 1. Пусть n обозначает размер выборки. Мы рассмотрим различные значения n , а именно $n = 100, 300, 500, 1000, 2000, 3000$. Пусть X_1, \dots, X_n имеют нормальное распределение в \mathbb{R}^P с нулевым средним и ковариационной матрицей Σ . Величина p и выбор Σ будут описаны ниже. Распределение $n\|\widehat{\mathbf{P}}_1 - \mathbf{P}_1\|_2^2$ оценивается по $M = 3000$ выборкам из нормального распределения с нулевым средним и ковариационной матрицей Σ . Бутстреп распределение для заданного X вычисляется по $M = 3000$ выборкам бутстреп весов $\{w_1, \dots, w_n\}$. Так как распределение является случайным и зависит от X , мы используем медианное значение, посчитанное по 50 реализациям X . Пусть $p = 500$, $\mu_1 = 36, \mu_2 = 30, \mu_3 = 25, \mu_4 = 19$ и все остальные с.з. $\mu_s, s = 5, \dots, 500$ равномерно распределены на отрезке $[1, 5]$. В этом примере $\bar{g}_1 = 6$ и $r(\Sigma) = 51.79$. На Рис. 1 показаны PP-графики для эмпирического распределения $n\|\widehat{\mathbf{P}}_1 - \mathbf{P}_1\|_2^2$ и его бутстреп аналога. В Таблице 2 собраны значения соответствующих бутстреп квантилей.

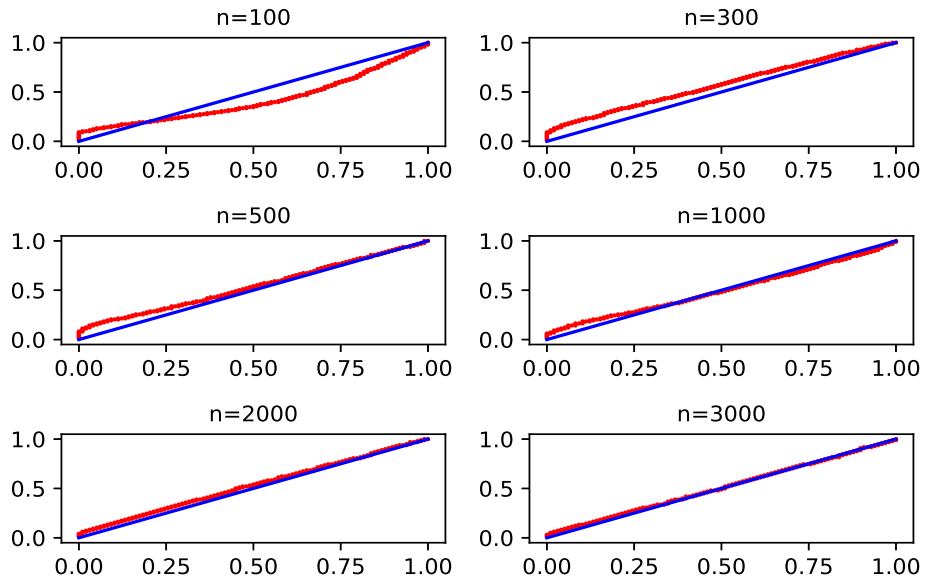


Рис. 1: PP-графики для бутстреп метода из Примера 1.

Таблица 2: Вероятность покрытия (англ. coverage probabilities) для Примера 1. Для каждого n в первой строке представлены медианные значения вероятностей покрытия, а во второй — соответствующие интерквартильные размахи

n	Уровни					
	0.99	0.95	0.90	0.85	0.80	0.75
100	0.997	0.986	0.954	0.924	0.889	0.850
	0.004	0.026	0.052	0.074	0.091	0.104
300	0.992	0.937	0.873	0.812	0.754	0.692
	0.026	0.093	0.165	0.207	0.236	0.271
500	0.988	0.962	0.902	0.846	0.788	0.623
	0.054	0.139	0.227	0.264	0.323	0.174
1000	0.992	0.974	0.943	0.890	0.841	0.783
	0.021	0.062	0.114	0.066	0.153	0.170
2000	0.988	0.954	0.891	0.843	0.795	0.741
	0.021	0.059	0.081	0.098	0.126	0.142
3000	0.994	0.961	0.908	0.864	0.815	0.763
	0.016	0.053	0.073	0.081	0.092	0.101

4 Линейная стохастическая аппроксимация и приложения

В этой главе рассматривается алгоритм линейной стохастической аппроксимации (ЛСА) для решения системы линейных уравнений $\bar{\mathbf{A}}\theta = \bar{\mathbf{b}}$, имеющей единственное решение θ^* . Алгоритм ЛСА строится по наблюдениям $\{(\mathbf{A}(Z_n), \mathbf{b}(Z_n))\}_{n \in \mathbb{N}}$, где $\mathbf{A} : Z \rightarrow \mathbb{R}^{d \times d}$, $\mathbf{b} : Z \rightarrow \mathbb{R}^d$ – измеримые функции, и $(Z_k)_{k \in \mathbb{N}}$ представляет собой последовательность

1. н.о.р. с.в. с распределением π , удовлетворяющим

$$\mathbb{E}[\mathbf{A}(Z_1)] = \bar{\mathbf{A}} \text{ и } \mathbb{E}[\mathbf{b}(Z_1)] = \bar{\mathbf{b}}. \quad (4.1)$$

2. или цепь Маркова, принимающую значения в произвольном пространстве Z , допускающую единственное инвариантное распределение π и $\lim_{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E}[\mathbf{A}(Z_n)] = \bar{\mathbf{A}}$, $\lim_{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E}[\mathbf{b}(Z_n)] = \bar{\mathbf{b}}$.

Зададим последовательность шагов $\{\alpha_n\}_{n \in \mathbb{N}}$, $\alpha_n > 0$. Тогда алгоритм ЛСА представляет собой итерационную последовательность $\{\theta_n\}_{n \in \mathbb{N}}$

$$\theta_n = \theta_{n-1} - \alpha_n \{\mathbf{A}(Z_n)\theta_{n-1} - \mathbf{b}(Z_n)\}, \quad (4.2)$$

стартующую из начальной точки θ_0 . Алгоритм (4.2) покрывает большое количество алгоритмов. ЛСА возникает при анализе алгоритмов идентификации и управления линейными системами. Первые результаты по анализу алгоритмов ЛСА в основном были посвящены этим двум областям и носили асимптотический характер; см. [43, 51, 53, 74] и список литературы там.

Алгоритмы ЛСА занимают центральную роль в обучении с подкреплением, например, в алгоритмах TD с линейной функциональной аппроксимацией. [103, 15]. В первых работах на эту тему [15, 108, 14] были получены условия для асимптотической сходимости. В случае $(Z_i)_{i \in \mathbb{N}^*}$ является н.о.р. последовательностью случайных величин, [69, 30] исследовали среднеквадратичную ошибку (далее MSE). В недавних работах [16, 102, 27] рассматривался случай, когда $(Z_i)_{i \in \mathbb{N}^*}$ является цепью Маркова. Были получены соответствующие неасимптотические оценки. Во многих приложениях также возникает двухмасштабная линейная стохастическая аппроксимация; см. [54, 112, 37, 63].

4.1 Алгоритм ЛСА, управляемый цепью Маркова с произвольным пространством состояний

Результаты раздела опубликованы в работе [42].

Алгоритм ЛСА изучен при достаточно ограничительных предположениях, таких как (i) равномерная геометрическая эргодичность (UGE) цепи Маркова и/или (ii) равномерно ограниченные функции \mathbf{A}, \mathbf{b} , т.е. $\sup_{z \in Z} \{\|\mathbf{A}(z)\| + \|\mathbf{b}(z)\|\} < +\infty$. Условие UGE подразумевает, что пространство состояний цепи Маркова конечно или компактно и не обобщается на случай общих (неограниченных) пространств состояний. Заметим, что во многих приложениях возникают именно неограниченные пространства состояний; см., например, [74] и [15, с. 305].

В настоящей главе мы докажем оценки на моменты ошибки аппроксимации алгоритма ЛСА, управляемого марковским шумом. Результаты применимы при достаточно общих предположения (i) $(Z_i)_{i \in \mathbb{N}^*}$ цепь Маркова с общим (в том числе неограниченным) пространством состояний, удовлетворяющая мультипликативному или супер условию Ляпунова (англ. super-Lyapunov drift condition), и (ii) для некоторой константы $C \geq 0$, для всех $z \in Z$, $\|\mathbf{A}(z)\| \leq$

$CW_1(z)$, $\|\mathbf{b}(z)\| \leq CW_2(z)$, где функции $W_1, W_2 : \mathbb{R}_+ \rightarrow [1, +\infty)$ согласованы с условием (i). Эти условия слабее условий, используемых в предыдущих работах. В частности, \mathbf{A}, \mathbf{b} могут быть неограниченными.

Для фиксированных $m, n \in \mathbb{N}$, $m < n$ и $z_{m+1:n} = (z_{m+1}, \dots, z_n) \in \mathbb{Z}^{n-m}$, определим

$$\Gamma_{m+1:n}(z_{m+1:n}) = \prod_{i=m+1}^n \{\mathbf{I}_d - \alpha_i \mathbf{A}(z_i)\}.$$

Ключевым этапом доказательства оценок является доказательство экспоненциальной устойчивости произведений матриц $\Gamma_{m+1:n}(Z_{m+1:n})$, для $m, n \in \mathbb{N}$, $m < n$. Предположим $(Z_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ эргодическая цепь Маркова, такая что для всех $z \in \mathbb{Z}$, существуют пределы $\bar{\mathbf{A}} = \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}_z[\mathbf{A}(Z_n)]$, $\bar{\mathbf{b}} = \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}_z[\mathbf{b}(Z_n)]$. В дополнении к этому потребуем, чтобы матрица $-\bar{\mathbf{A}}$ была матрицей Гурвитца, т.е. действительные части собственных значений являются отрицательными числами. Обозначим через θ^* единственное решение системы линейных уравнений $\bar{\mathbf{A}}\theta^* = \bar{\mathbf{b}}$. Для любого $n \in \mathbb{N}$ ошибка n -ой итерации алгоритма ЛСА $\tilde{\theta}_n = \theta_n - \theta^*$ может быть представлена следующим образом

$$\tilde{\theta}_n = \sum_{j=1}^n \alpha_j \Gamma_{j+1:n}(Z_{j+1:n}) \bar{\varepsilon}(Z_j) + \Gamma_{1:n}(Z_{1:n}) \tilde{\theta}_0, \quad (4.3)$$

где $\bar{\varepsilon}(Z_j) = \mathbf{b}(Z_j) - \bar{\mathbf{b}} - \{\mathbf{A}(Z_j) - \bar{\mathbf{A}}\}\theta^*$. Очевидно, что для получения оценки p -го момента $\{\|\tilde{\theta}_n\|\}_{n \in \mathbb{N}}$ необходимо, чтобы последовательность случайных матриц $\{\mathbf{A}(Z_i)\}_{i \in \mathbb{N}^*}$ была (V, q) -экспоненциально устойчивой. Напомним, что для $q \geq 1$ и функции $V : \mathbb{Z} \rightarrow [1, \infty)$, $\{\mathbf{A}(Z_i)\}_{i \in \mathbb{N}^*}$ называется (V, q) -экспоненциально устойчивой, если существуют $\mathbf{a}_q, C_q > 0$ и $\alpha_{\infty, q} < \infty$, такие что для любой положительной последовательности шагов $(\alpha_i)_{i \in \mathbb{N}^*}$, удовлетворяющей $\sup_{i \in \mathbb{N}^*} \alpha_i \leq \alpha_{\infty, q}$, $z \in \mathbb{Z}$, $m, n \in \mathbb{N}$, $m < n$,

$$\mathbb{E}_z[\|\Gamma_{m+1:n}(Z_{m+1:n})\|^q] \leq C_q \exp(-\mathbf{a}_q \sum_{i=m+1}^n \alpha_i) V(z). \quad (4.4)$$

Интуитивно, (V, q) -экспоненциальная устойчивость означает, что q -ый момент произведения случайных матриц $\Gamma_{m+1:n}(Z_{m+1:n})$ ведет себя аналогично произведению *детерминированных* матриц $G_{m+1:n} = \prod_{i=m+1}^n (\mathbf{I}_d - \alpha_i \bar{\mathbf{A}})$, в предположении, что $-\bar{\mathbf{A}}$ является матрицей Гурвитца.

Фиксируем $p, q, r \in \mathbb{N}^*$, такие что $p^{-1} = q^{-1} + r^{-1}$. Предположим, что последовательность $\{\mathbf{A}(Z_i)\}_{i \in \mathbb{N}^*}$ является (V, q) -экспоненциально устойчивой для некоторого $q > 1$, r -ый момент $\|\bar{\varepsilon}(Z_n)\|$ и начальная ошибка $\tilde{\theta}_0$ ограничены. Используя (4.3) и неравенство Гельдера, мы можем получить оценку на p -ый момент, $\mathbb{E}_z^{1/p}[\|\tilde{\theta}_n\|^p]$. Заметим, что оценка на r -ый момент $\|\bar{\varepsilon}(Z_n)\|$ следует из классического условия Ляпунова, которое в свою очередь вытекает из мультипликативного условия Ляпунова.

В этом разделе будут получены

- (V, q) -экспоненциальная устойчивость $\{\mathbf{A}(Z_k)\}_{k \in \mathbb{N}^*}$ и явные выражения для констант, появляющихся в (4.4); см. Теорема 4.1. Сравнивая с предыдущими работами, этот результат может применен в случае, когда функции $\mathbf{A}(\cdot)$ не являются ограниченными и симметричными, а цепь Маркова $(Z_k)_{k \in \mathbb{N}^*}$ принимает значения в произвольном (возможно неограниченном) пространстве состояний и не обязана быть равномерно геометрически эргодической. Дальнейшее обсуждение условий приводится после Теоремы 4.1.
- получим неасимптотические оценки и асимптотическое разложение для p -го момента ошибки $(\tilde{\theta}_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ алгоритма ЛСА (4.3). Более точно, показывается, что $\mathbb{E}_z^{1/p}[\|\tilde{\theta}_n\|^p] = \mathcal{O}(\alpha_n^{1/2}) V_p(z)$ для фиксированного шага $\alpha_n \equiv \alpha$ (где α достаточно мало) или невозрастающей последовательности шагов, удовлетворяющей некоторым общим условиям (в частности,

$\alpha_n = C/(n + n_0)^t$, для $t \in (0, 1]$; см. Теорема 4.2. В ходе анализа ошибки алгоритма ЛСА $\tilde{\theta}_n$, мы выделим ведущее слагаемое $J_n^{(0)}$, которое представляет собой взвешенную линейную статистику $(\tilde{\varepsilon}(Z_n))_{n \in \mathbb{N}^*}$. Далее, ведущее слагаемое $J_n^{(0)}$ и остаточный член $H_n^{(0)} = \tilde{\theta}_n - J_n^{(0)}$ допускают разделение масштабов. Например, если $\alpha_n = C/(n + n_0)$, то оценка p -го момент ведущего слагаемого имеет вид $\mathcal{O}(n^{-1/2})V_p(z)$, а остаточного члена $\mathcal{O}(n^{-1} \log(n))V_p(z)$; см. Теорема 4.3.

- наконец, мы применим наш результат для анализа алгоритмов ТД с линейной функциональной аппроксимацией. Приводятся достаточные условия на марковский процесс наград (Markov Reward Process) с произвольным (возможно неограниченным) пространством состояний (с неограниченными наградами и векторами признаков), чтобы были выполнены условия Теорем 4.2 и 4.3.

4.1.1 Основные результаты

Рассмотрим цепь Маркова $(Z_k)_{k \in \mathbb{N}}$ с ядром P . Без потери общности предположим, что $(Z_k)_{k \in \mathbb{N}}$ является каноническим процессом, соответствующим P на $(\mathbb{Z}^{\mathbb{N}}, \mathcal{Z}^{\otimes \mathbb{N}})$. Обозначим через \mathbb{P}_μ и \mathbb{E}_μ соответствующие вероятностное распределение и математическое ожидание, отвечающие начальному распределению μ . По построению, для любого $A \in \mathcal{Z}$, $\mathbb{P}_\mu(Z_k \in A | Z_{k-1}) = P(Z_{k-1}, A)$, \mathbb{P}_μ -п.в. В случае $\mu = \delta_z$, $z \in \mathbb{Z}$, для простоты будем писать \mathbb{P}_z и \mathbb{E}_z вместо \mathbb{P}_μ и \mathbb{E}_μ . Предположим, что выполнено следующее условие

UE 1. *Марковское ядро $P : \mathbb{Z} \times \mathcal{Z} \rightarrow \mathbb{R}_+$ является неприводимым и апериодическим. Существуют константы $c > 0, b > 0, \delta \in (1/2, 1]$, $R_0 \geq 0$ и функция $V : \mathbb{Z} \rightarrow [e, \infty)$, такие что для $W = \log V$, $C_0 = \{z : W(z) \leq R_0\}$, $C_0^c = \{z : W(z) > R_0\}$ выполнено неравенство*

$$PV(z) \leq \exp[-cW^\delta(z)]V(z)1_{\{C_0^c\}}(z) + b1_{\{C_0\}}(z). \quad (4.5)$$

В дополнении потребуем, что для любого $R \geq 1$, множества $\{z : W(z) \leq R\}$ являются $(m_R, \varepsilon_R \nu)$ -малыми для P , где $m_R \in \mathbb{N}^$, $\varepsilon_R \in (0, 1]$ и ν вероятностная мера на $(\mathbb{Z}, \mathcal{Z})$.*

На произвольном пространстве состояний $(\mathbb{Z}, \mathcal{Z})$, неприводимость означает, что марковское ядро P допускает достижимые малые множества; см. [38, Глава 9]. Условие (4.5) в UE 1 называется мультипликативным или супер условием Ляпунова и играет ключевую роль при изучении вероятностей больших отклонений для аддитивных функционалов от цепей Маркова; см. [109]. Формула (4.5) влечет классическое условие Фостера–Ляпунова, $PV(z) \leq \lambda V(z) + b1_{\{C_0\}}(z)$, где

$$\lambda = \exp(-c \inf_{C_0^c} W^\delta) \leq \exp(-c) < 1. \quad (4.6)$$

Из [38, Теорема 15.2.4] следует, что в предположении UE 1 марковское ядро P является V -равномерно геометрически эргодичным и допускает единственное инвариантное распределение π , т.е. существует $\rho \in (0, 1)$ и $B_V < \infty$, такие что для $z \in \mathbb{Z}$ и $n \in \mathbb{N}$,

$$\|P^n(z, \cdot) - \pi\|_V \leq B_V \rho^n V(z). \quad (4.7)$$

UE 1 является специальным случаем условия **(DV3)**, которое играет ключевую роль в мультипликативной регулярности цепей Маркова [68, 67]. Важным следствием условия UE 1 является оценка на следующие произведения (см. [42][Лемма 9] и [67, Theorem 1.2]): для всех $z \in \mathbb{Z}$, $n \in \mathbb{N}$, и невозрастающей последовательности $(\alpha_i)_{i \in \mathbb{N}^*} \subset [0, 1]$, имеет место

$$\mathbb{E}_z[\exp\{c \sum_{k=0}^{n-1} \alpha_k W^\delta(Z_k)\}] \leq \exp\{b \sum_{k=0}^{n-1} \alpha_k\} \exp\{\alpha_1 W(z)\},$$

где $\tilde{b} = \log b + \sup_{r \geq e} \{cr^\delta - r\}$ and c определено в (4.5). UE 1 выполнено с $\delta = 1$ для гауссовской линейной авторегрессионной модели и нелинейных авторегрессионных процессов, в которых процесс инноваций имеет экспоненциальные моменты, см., например, [89].

Введем дополнительные ограничения на \mathbf{A} . Фиксируем $\varepsilon > 0$.

A 1 (ε). Существует константа $C_A > 0$, такая что для всех $1 \leq i, j \leq d$, элемент в позиции (i, j) матрицы \mathbf{A} удовлетворяет $\|[\mathbf{A}]_{i,j}\|_{W^\beta} \leq C_A$, где $\beta < \min(2\delta - 1, \delta/(1 + \varepsilon))$ и δ задано в UE 1.

A 2. Квадратная матрица $-\bar{\mathbf{A}} = -\mathbb{E}_\pi[\mathbf{A}(Z_0)]$ является матрицей Гурвитца.

A1(ε), A2 являются стандартными условиями при анализе ЛСА. Условие A 2 гарантирует существование и единственность решения θ^* уравнения $\bar{\mathbf{A}}\theta = \bar{\mathbf{b}}$. Это условие является необходимым и достаточным условием для того, чтобы решение ОДУ $\dot{\theta}_t = -\bar{\mathbf{A}}\theta_t$ экспоненциально быстро сходилось; см. [59, Лемма 4.1.2]. Аналогичные результаты имеют место для дискретных систем $\theta_{n+1}^d - \theta_n^d = -\alpha \bar{\mathbf{A}}\theta_n^d$.

Утверждение 4.1 (см. [88][Лемма 9.1, р. 140]). / Предположим, что $-\bar{\mathbf{A}}$ является матрицей Гурвитца. Существует единственная положительно определенная матрица Q , удовлетворяющая уравнению Ляпунова $\bar{\mathbf{A}}^\top Q + Q\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{I}$. Далее, положим

$$a = \|Q\|^{-1}/2, \quad \text{и} \quad \alpha_\infty = (1/2)\|\bar{\mathbf{A}}\|_Q^{-2}\|Q\|^{-1}. \quad (4.8)$$

Тогда для любого $\alpha \in [0, \alpha_\infty]$, выполнено неравенство $\|\mathbf{I} - \alpha\bar{\mathbf{A}}\|_Q^2 \leq 1 - \alpha$. Если дополнительно потребовать, что $\alpha \leq \|Q\|^2$, тогда $1 - \alpha \geq 1/2$.

В частности, из последнего утверждения следует, что дискретная система экспоненциально быстро сходится $\|\theta_{n+1}^d\| \leq \sqrt{\kappa_Q}(1 - \alpha)^{n/2}\|\theta_0^d\|$ for $\alpha \in (0, \alpha_\infty)$.

Следующая теорема представляет (V, p) -экспоненциальную устойчивость последовательности $\{\mathbf{A}(Z_k)\}_{k \in \mathbb{N}^*}$. Для простоты обозначений, мы будем писать $\Gamma_{m+1:n} = \Gamma_{m+1:n}(Z_{m+1:n})$.

Теорема 4.1. Фиксируем $\varepsilon > 0$ и пусть выполнены условия UE 1, A 1(ε) и A 2. Тогда для любого $p \geq 1$ существует $\alpha_{\infty,p} > 0$, заданное в [42][Формула 87], такое что для любой невозрастающей последовательности $(\alpha_k)_{k \in \mathbb{N}^*}$, $\alpha_1 \in (0, \alpha_{\infty,p})$, $z_0 \in Z$ и $m, n \in \mathbb{N}$, $m < n$, выполнено

$$\mathbb{E}_{z_0}^{1/p}[\|\Gamma_{m+1:n}\|^p] \leq C_{\text{st},p} e^{-(a/4)\sum_{\ell=m+1}^n \alpha_\ell} V^{1/2p}(z_0), \quad (4.9)$$

Константы a , $C_{\text{st},p}$ и h определены в (4.8), [42][Формула 89], and [42][Формула 86], соответственно.

Данный результат показывает, что если $(\alpha_k)_{k \in \mathbb{N}^*}$ удовлетворяет $\sum_{k \in \mathbb{N}^*} \alpha_k = +\infty$, то

$$\mathbb{E}_z^{1/p}[\|\Gamma_{m+1:n}\|^p] \rightarrow 0$$

как только $(n - m) \rightarrow \infty$ для любого $p \geq 1$. Более того, скорость сходимости аналогична случаю произведения детерминированных матриц $\|G_{m+1:n}\| = \|\prod_{i=m+1}^n (\mathbf{I}_d - \alpha_i \bar{\mathbf{A}})\| \lesssim e^{-a\sum_{\ell=m+1}^n \alpha_\ell}$.

Теорема 4.1 обобщает предыдущие работы. [51, 52] использовали немного другие условия, позволяющие рассматривать немарковские случайные процессы, удовлетворяющие более общим условиям перемешивания (например ϕ - или β -перемешивание). Как мы увидим позже, если использовать эти результаты для цепей Маркова, то результаты настоящей главы значительно улучшают последние. [89] доказали (V, q) -экспоненциальную устойчивость для цепей Маркова с произвольным пространством состояний при условии близком к UE 1.

Однако, [89] предполагают фиксированный размер шага и $\bar{\mathbf{A}}(z)$ симметричная неотрицательно определенная матрица для всех $z \in \mathbf{Z}$. Неотрицательная определенность играет ключевую роль в анализе. В этом случае, для всех $z \in \mathbf{Z}$, операторная норма $\|\mathbf{I}_d - \alpha \mathbf{A}(z)\| \leq 1$, если $\|\mathbf{A}(z)\| \leq \alpha^{-1}$ для $\alpha > 0$. Данное неравенство не выполняется для произвольных матричных функций $\mathbf{A}(z)$. Аналогичные результаты при условии, что $\mathbf{A}(z)$ симметричная матрица для $z \in \mathbf{Z}$, получены в [35]. Анализ этой работы основан на теории возмущения линейных операторов в банаховом пространстве и спектральной теории. Однако, оценки из [35] носят качественный характер и из них сложно получить неасимптотические оценки. Более того, ограничения, налагаемые предыдущими работами, сужают круг применения, в частности, для анализа алгоритмов обучения с подкреплением. Как мы увидим позже, в алгоритмах ТД с линейной функциональной аппроксимацией появляются несимметричные матрицы \mathbf{A} . Результат настоящей главы (см. Теорема 4.1) может быть применен для случая, когда $\mathbf{A}(z)$ не является неотрицательной определенной симметричной матрицей, но является матрицей Гурвитца.

Заметим, что случай равномерно геометрически эргодических цепей Маркова является частным случаем условия UE 1. В этом случае все множество \mathbf{Z} является малым, а функция V может быть выбрана константной. Вместе с условием, что функция $\mathbf{A}(\cdot)$ ограничена, экспоненциальная устойчивость была доказана в [102, 37, 63, 27]. В частности, результаты этой работы могут быть применены к рекурсии вида $y_0 = y$, $y_{n+1} = \{\mathbf{I}_d - \alpha_{n+1} \mathbf{A}(Z_{n+1})\} y_n$, $n \in \mathbb{N}$. Изучая разложение:

$$y_{n+1} = \{\mathbf{I}_d - \alpha_{n+1} \bar{\mathbf{A}}\} y_n - \alpha_{n+1} (\mathbf{A}(Z_{n+1}) - \bar{\mathbf{A}}) y_n, \quad \forall n \in \mathbb{N}, \quad (4.10)$$

были получены неравенства на $\mathbb{E}_{z_0} [\|y_{n+1}\|^p] = \mathbb{E}_{z_0} [\|\Gamma_{1:n+1} y\|^p]$. Однако, обобщение этого подхода на более широкий класс цепей Маркова (например, UE 1) или неограниченные функции $\mathbf{A}(\cdot)$ представляется невозможным.

4.1.2 Приложение к алгоритму линейной стохастической аппроксимации

В этом разделе мы применим Теорему 4.1 для анализа алгоритма ЛСА, управляемого марковским шумом. Сначала введем ограничения на функции $\mathbf{b}(\cdot)$ и размер шага. Последний может быть фиксированным или убывающим. Зафиксируем $K \in \mathbb{N}^*$ и рассмотрим следующие условия

А 3 (K). Существует константа $C_{b,K} > 0$, такая что $\max_{1 \leq \ell \leq d} \|\mathbf{b}_\ell\|_{V^{1/K}} \leq C_{b,K}$, где через \mathbf{b}_ℓ обозначен ℓ -ый элемент вектора \mathbf{b} .

А 4. Существует константа $0 < c_\alpha \leq a/16$, такая что для $k \in \mathbb{N}$, $\alpha_k/\alpha_{k+1} \leq 1 + \alpha_{k+1} c_\alpha$.

Легко проверить, что А 4 выполнено для убывающей последовательность шагов $\alpha_n = C_\alpha (n + n_0)^{-t}$, $t \in (0, 1]$ и фиксированного шага.

Теорема 4.2. Пусть $K \geq 8$. Предположим, что выполнены UE 1, А 1(ε), А 2 и А 3(K). Для любого $2 \leq p \leq K/4$, существует $\alpha_{\infty,p}^{(0)}$, определенная в [42][Формула 25], такая что для любой невозрастающей последовательности $(\alpha_k)_{k \in \mathbb{N}^*}$, удовлетворяющей $\alpha_1 \in (0, \alpha_{\infty,p}^{(0)})$ и А 4, $z \in \mathbf{Z}$, и $n \in \mathbb{N}$, выполнено

$$\mathbb{E}_z^{1/p} [\|\tilde{\theta}_n\|^p] \leq M_0 C_{st,2p} e^{-(a/4) \sum_{\ell=1}^n \alpha_\ell V^{1/(4p)}(z)} + (C_{J,p}^{(0)} + C_{H,p}^{(0)}) \sqrt{\alpha_n} V^{2/K+1/(4p)}(z), \quad (4.11)$$

где $M_0 = \mathbb{E}_z^{1/(2p)} [\|\tilde{\theta}_0\|^{2p}]$ и $C_{J,p}^{(0)}, C_{H,p}^{(0)}$ определены в [42][Формула 32], [42][Формула 34] соответственно.

В большинстве случаев распределение начальной точки $\tilde{\theta}_0$ не зависит от начального состояния марковской цепи z . В этом случае $\mathbb{E}_z^{1/(2p)}[\|\tilde{\theta}_0\|^{2p}]$ является константой. Для достаточно малого размера шага, Теорема 4.2 показывает, что L_p норма вектора ошибки сходится к нулю в предположении, что марковская цепь удовлетворяет UE 1. Данный результат обобщает результат работы [102].

Напомним, что ошибка аппроксимации $\tilde{\theta}_{n+1} = \theta_{n+1} - \theta^*$ может быть переписана в следующем виде

$$\tilde{\theta}_{n+1} = \Gamma_{1:n+1}\tilde{\theta}_0 + \sum_{j=1}^{n+1} \alpha_j \Gamma_{j+1:n+1} \bar{\varepsilon}(Z_j) \equiv \tilde{\theta}_{n+1}^{(\text{tr})} + \tilde{\theta}_{n+1}^{(\text{fl})}. \quad (4.12)$$

Используя неравенство Гёльдера и Теорему 4.1, транзитивное слагаемое $\tilde{\theta}_{n+1}^{(\text{tr})}$ может быть оценено следующим образом

$$\mathbb{E}_z^{1/p}[\|\tilde{\theta}_{n+1}^{(\text{tr})}\|^p] \leq \mathbb{E}_z^{1/(2p)}[\|\Gamma_{1:n+1}\|^{2p}] \mathbb{E}_z^{1/(2p)}[\|\tilde{\theta}_0\|^{2p}] \leq M_0 C_{\text{st},2p} e^{-(a/4) \sum_{\ell=1}^{n+1} \alpha_\ell} V^{1/(4p)}(z).$$

Для оценки слагаемого $\tilde{\theta}_{n+1}^{(\text{fl})}$ мы заметим, что $\tilde{\theta}_{n+1}^{(\text{fl})} = J_{n+1}^{(0)} + H_{n+1}^{(0)}$, где

$$\begin{aligned} J_{n+1}^{(0)} &= (\text{Id} - \alpha_{n+1}A) J_n^{(0)} + \alpha_{n+1} \bar{\varepsilon}(Z_{n+1}), & J_0^{(0)} &= 0, \\ H_{n+1}^{(0)} &= (\text{Id} - \alpha_{n+1}\mathbf{A}(Z_{n+1})) H_n^{(0)} - \alpha_{n+1} \tilde{\mathbf{A}}(Z_{n+1}) J_n^{(0)}, & H_0^{(0)} &= 0, \end{aligned} \quad (4.13)$$

и $\tilde{\mathbf{A}}(z) = \mathbf{A}(z) - A$. Далее, заметим, что

$$J_{n+1}^{(0)} = \sum_{j=1}^{n+1} \alpha_j G_{j+1:n+1} \bar{\varepsilon}(Z_j), \quad H_{n+1}^{(0)} = - \sum_{j=1}^{n+1} \alpha_j \Gamma_{j+1:n+1} \tilde{\mathbf{A}}(Z_j) J_{j-1}^{(0)}. \quad (4.14)$$

Неравенство Розенталя для марковских цепей дает возможность написать следующую оценку

$$\mathbb{E}_z^{1/p}[\|J_{n+1}^{(0)}\|^p] \leq C_{J,p}^{(0)} \sqrt{\alpha_{n+1}} V^{1/K}(z), \quad (4.15)$$

Для анализа $H_{n+1}^{(0)}$ мы применим дважды неравенство Гёльдера и получим

$$\mathbb{E}_z^{1/p}[\|H_{n+1}^{(0)}\|^p] \leq \sum_{j=1}^{n+1} \alpha_j \mathbb{E}_z^{1/(2p)}[\|\Gamma_{j+1:n+1}\|^{2p}] \mathbb{E}_z^{1/(4p)}[\|\tilde{\mathbf{A}}(Z_j)\|^{4p}] \mathbb{E}_z^{1/(4p)}[\|J_{j-1}^{(0)}\|^{4p}].$$

Применяя оценку (4.15), получим

$$\mathbb{E}_z^{1/p}[\|H_{n+1}^{(0)}\|^p] \leq C_{H,p}^{(0)} \sqrt{\alpha_{n+1}} V^{2/K+1/(4p)}(z). \quad (4.16)$$

Уточнение оценки $\mathbb{E}_z^{1/p}[\|\tilde{\theta}_n^{(\text{fl})}\|^p]$ Возможно получить оценку $\mathbb{E}_z^{1/p}[\|H_n^{(0)}\|^p]$, которая ведет себя лучше чем оценка $\mathcal{O}(\sqrt{\alpha_n})$, полученная в (4.16). Имея такую оценку, мы сможем показать, что слагаемое $J_n^{(0)}$ является ведущим в разложении $\tilde{\theta}_{n+1}^{(\text{fl})} = J_{n+1}^{(0)} + H_{n+1}^{(0)}$. Аналогично (4.13), представим $H_n^{(0)}$ в виде $H_n^{(0)} = J_n^{(1)} + H_n^{(1)}$, где

$$\begin{aligned} J_{n+1}^{(1)} &= (\text{Id} - \alpha_{n+1}A) J_n^{(1)} - \alpha_{n+1} \tilde{\mathbf{A}}(Z_{n+1}) J_n^{(0)}, & J_0^{(1)} &= 0, \\ H_{n+1}^{(1)} &= (\text{Id} - \alpha_{n+1}\mathbf{A}(Z_{n+1})) H_n^{(1)} - \alpha_{n+1} \tilde{\mathbf{A}}(Z_{n+1}) J_n^{(1)}, & H_0^{(1)} &= 0. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Для убывающего шага мы введем еще одно условие, которое усиливает А 4.

А 5. $\mathcal{A}_0 < \infty$, где $\mathcal{A}_n = \sum_{\ell=n}^{\infty} \alpha_\ell^2$. Существует константа $0 < c_\alpha \leq a/32$, такая что $k \in \mathbb{N}$, $\alpha_k/\alpha_{k+1} \leq 1 + \alpha_{k+1} c_\alpha$ и $\alpha_k/\mathcal{A}_{k+1} \leq (2/3) c_\alpha$.

Легко проверить, что А 5 выполнено для убывающей последовательности $\alpha_n = C_\alpha (n + n_0)^{-t}$, $t \in (\frac{1}{2}, 1]$.

Теорема 4.3. Пусть $K \geq 32$ и предположим, что выполнены UE 1, A 1(ε), A 2, and A 3(K). Для любого $2 \leq p \leq K/16$ и любой невозрастающей последовательности $(\alpha_k)_{k \in \mathbb{N}}$, удовлетворяющей $\alpha_0 \in (0, \alpha_{\infty, p}^{(1)})$, $\alpha_k \equiv \alpha$ или A 5, для $z \in \mathbb{Z}$, $n \in \mathbb{N}$, выполнено

$$\mathbb{E}_z^{1/p}[\|H_n^{(0)}\|^p] \leq V^{3/K+9/(16p)}(z) \begin{cases} C_p^{(f)} \alpha \sqrt{\log(1/\alpha)}, & \text{если } \alpha_n \equiv \alpha, \\ C_p^{(d)} \sqrt{\alpha_n \mathcal{A}_n \log(1/\alpha_n)}, & \text{если выполнено A 5,} \end{cases} \quad (4.18)$$

Здесь $\alpha_{\infty, p}^{(1)}$, $C_p^{(f)}$, $C_p^{(d)}$ определены в [42][Формула 92], [42][Формула 94] соответственно.

Теорема показывает, что предыдущая оценка $\mathbb{E}_z^{1/p}[\|H_n^{(0)}\|^p] = \mathcal{O}(\sqrt{\alpha_n})$ может быть уточнена до оценки $\mathcal{O}(\sqrt{\alpha_n \mathcal{A}_n \log(1/\alpha_n)})$. Возьмем, например, шаг $\alpha_n = C_a(n + n_0)^{-1}$. Результат теоремы показывает разделение масштабов

$$\tilde{\theta}_n^{(H)} = J_n^{(0)} + H_n^{(0)} \quad \text{with} \quad \mathbb{E}_z^{1/p}[\|J_n^{(0)}\|^p] = \mathcal{O}(n^{-1/2}), \quad \mathbb{E}_z^{1/p}[\|H_n^{(0)}\|^p] = \mathcal{O}(n^{-1} \sqrt{\log n}).$$

4.1.3 Алгоритмы TD с линейной функциональной аппроксимацией

Следуя обозначениям из монографии [104, Глава 12], рассмотрим дисконтированный марковский процесс наград (англ. discounted Markov Reward Process (MRP)), который определяется как кортеж $(\mathbf{X}, \mathbf{Q}, \mathbf{R}, \gamma)$. Здесь \mathbf{Q} переходное ядро, определенное на пространстве состояний $(\mathbf{X}, \mathcal{X})$. Мы не предполагаем, что \mathbf{X} является конечным или счетным. Единственное требование, что \mathcal{X} является счетно порожденным (для простоты можно считать, что $\mathbf{X} = \mathbb{R}^d$). Для любого фиксированного $x \in \mathbf{X}$, величина $\mathbf{R}(x)$ представляет награду за посещение состояния x . Функция наград может быть неограниченной. Наконец, $\gamma \in (0, 1)$ представляет собой дисконтирующий множитель. Ценовая функция $V^* : \mathbf{X} \rightarrow \mathbb{R}$ определяется как сумма дисконтированных наград $V^*(x) = \mathbb{E}_x[\sum_{k=0}^{\infty} \gamma^k \mathbf{R}(X_k)]$.

Пусть $d \in \mathbb{N}^*$. Мы поставим в соответствие каждому состоянию $x \in \mathbf{X}$ вектор признаков $\psi(x) \in \mathbb{R}^d$ и приблизим $V^*(x)$ с помощью линейной комбинации $V_\theta(x) = \psi(x)^\top \theta$; см. [108, 104]. Алгоритм TD представляет собой следующую итерационную последовательность

$$\theta_{k+1} = \theta_k + \alpha_{k+1} \varphi_k \{ \mathbf{R}(X_k) + \gamma \psi(X_{k+1})^\top \theta_k - \psi(X_k)^\top \theta_k \}, \quad (4.19)$$

где $\{\varphi_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ последовательность векторов, которые будем называть следом (англ. eligibility vectors). Для алгоритма TD(0), $\varphi_k = \psi(X_k)$. Для алгоритма TD(λ), $\varphi_k = (\lambda \gamma) \varphi_{k-1} + \psi(X_k)$. Заметим, что TD(λ), (4.19), соответствует (4.2), где $Z_k = (X_k, X_{k+1}, \varphi_k)$ и $\mathbf{A}(Z_k) = -\varphi_k (\psi(X_k)^\top - \gamma \psi(X_{k+1})^\top)$, $b(Z_k) = \varphi_k \mathbf{R}(X_k)$. В работе [102] удалось проанализировать алгоритм TD(λ), хотя последовательность $(Z_k)_{k \in \mathbb{N}^*}$ не является равномерно эргодической. В самом деле, ключевым аргументом является применение [15, Лемма 6.7], которая утверждает, что если \mathbf{Z} конечное пространство состояний и $(X_k)_{k \in \mathbb{N}}$ является равномерно эргодической, то $\|\mathbb{E}_z[\mathbf{A}(Z_k)] - \mathbf{A}\| \leq C \rho^k$ и $\|\mathbb{E}_z[b(Z_k)] - \mathbf{b}\| \leq C \rho^k$, для всех $z \in \mathbf{Z}$, $k \in \mathbb{N}^*$ и для некоторых $C \geq 0$, $\rho \in (0, 1)$. Эти неравенства постулируются в качестве условий в [102]. Очевидно, что результат [15, Лемма 6.7] не может быть обобщен на случай произвольных (возможно неограниченных) пространств состояний.

Мы немного изменим задачу и рассмотрим τ -усеченную версию следов

$$\varphi_k = \phi_\tau(X_{k-\tau+1:k}) \quad \text{где} \quad \phi_\tau(x_{0:\tau-1}) = \sum_{s=0}^{\tau-1} (\lambda \gamma)^s \psi(x_{\tau-1-s}). \quad (4.20)$$

Алгоритм TD(0) является частным случаем (4.20), если положить $\tau = 1$. Мы также можем получить приближенную версию алгоритма TD(λ) при $\tau \rightarrow \infty$. Рекурсия (4.19) со следами (4.20) представляет собой частный случай (4.2). Для

этого определим $Z_k = [X_{k-\tau}, \dots, X_k]^\top$ и заметим, что (4.19) может быть получено из (4.2), если определить следующие матрицы/векторы для $z = [x_0, \dots, x_\tau]^\top = x_{0:\tau} \in \mathcal{X}^{\tau+1}$,

$$\mathbf{A}(z) = \phi_\tau(x_{0:\tau-1})\{\psi(x_{\tau-1}) - \gamma\psi(x_\tau)\}^\top, \quad \mathbf{b}(z) = \phi_\tau(x_{0:\tau-1})\mathbf{R}(x_{\tau-1}). \quad (4.21)$$

Введем следующие предположения.

М 1. Марковское ядро $Q : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}_+$ является неприводимым и сильно аperiodическим. Существуют $c > 0, b > 0, \delta \in (1/2, 1], R_0 \geq 0$ и $\tilde{V} : \mathcal{X} \rightarrow [e, \infty)$, такие что

$$Q\tilde{V}(x) \leq \exp[-c\tilde{W}^\delta(x)]\tilde{V}(x)\mathbf{b1}_{\mathcal{C}_0^c}(x) + b\mathbf{b1}_{\mathcal{C}_0}(x), \quad (4.22)$$

где $\tilde{W} = \log \tilde{V}$, $\mathcal{C}_0 = \{x : \tilde{W}(x) \leq R_0\}$, $\mathcal{C}_0^c = \{x : \tilde{W}(x) > R_0\}$. В дополнении, для любого $R \geq 1$, множества $\{x : \tilde{W}(x) \leq R\}$ являются $(1, \varepsilon_R \nu)$ -малыми для Q , где $\varepsilon_R \in (0, 1]$ и ν некоторая вероятностная мера $(\mathcal{X}, \mathcal{X})$.

Из [38, Теорема 15.2.4] следует, что марковское ядро Q допускает единственное инвариантное распределение π_0 .

М 2. $\pi_0(\psi\psi^\top)$ положительно определенная матрица.

Мы покажем, что если выполнены условия М 1, М 2, то алгоритм TD(λ) с последовательность следов (4.19) удовлетворяет условиям раздела 4.1.2. В этом случае, в качестве пространства состояний выступает $Z = \mathcal{X}^{\tau+1}$, а марковское ядро P определяется для каждого $z = x_{0:\tau} \in \mathcal{X}^{\tau+1}$ с помощью

$$P(x_{0:\tau}; dx'_{0:\tau}) = \prod_{\ell=1}^{\tau} \delta_{x_\ell}(dx'_{\ell-1})Q(x_\tau, dx'_\tau), \quad (4.23)$$

где δ_x обозначает меру Дирака, сосредоточенную в точке $x \in \mathcal{X}$.

1. Из [42][Лемма 35] следует, что P является неприводимым, аperiodическим и имеет единственное инвариантное распределение $\pi(dx_{0:\tau}) = \pi_0(dx_0) \prod_{\ell=1}^{\tau} Q(x_{\ell-1}, dx_\ell)$. В силу [42][Лемма 36], мультипликативное условие Ляпунова (4.5) выполнено для функции

$$V(x_{0:\tau}) = \exp\left(c_0 \sum_{i=0}^{\tau-1} (i+1)\tilde{W}^\delta(x_i) + \tilde{W}(x_\tau)\right),$$

где c_0 определено в [42][Формула 121]. Следовательно, имеет место UE 1.

2. Пусть $\|\psi(x)\| \leq C_\psi W^{\beta/2}(x)$ и для $K \geq 1$, $|\mathbf{R}(x)| \leq C_{R,K} V^{1/2K}(x)$, где $C_\psi, C_{R,K} > 0$ некоторые константы. Тогда А 1(ε) и А 3(K) выполнены с

$$\bar{C}_A = (1 + \gamma) C_\psi^2 / (1 - \lambda\gamma), \quad \bar{C}_{b,K} = C_{R,K} C_\psi (\beta K / e)^{\beta/2} / (1 - \lambda\gamma). \quad (4.24)$$

3. Формула (4.21) влечет

$$A = \sum_{\ell=0}^{\tau-1} \mathbb{E}_{\pi_0}[\psi(X_{\tau-1-\ell})\{\psi(X_{\tau-1}) - \gamma\psi(X_\tau)\}^\top].$$

Условие А 2 следует из [42][Лемма 33].

Собирая вместе полученные результаты, мы получим, что все условия необходимые для Теоремы 4.2 выполнены. Таким образом, мы получили L_p ошибка алгоритма TD(λ) (4.19) (с усеченными следами) сходится со скоростью сходимости, указанной в (4.11).

4.2 Точные оценки скорости сходимости с большой вероятностью алгоритма ЛСА с фиксированным шагом и в случае независимых наблюдений

Результаты настоящего раздела опубликованы в [41].

В этом разделе мы рассмотрим случай независимого шума $(Z_k)_{k \in \mathbb{N}}$ и постоянного шага $\alpha_n \equiv \alpha$. Для упрощения записи мы будем писать $\mathbf{A}_n = \mathbf{A}(Z_n)$, $\mathbf{b}_n = \mathbf{b}(Z_n)$. Мы получим новые результаты для концентрации нормы произведения случайных матриц. Эти результаты уточняют результаты (4.4). Мы также получим оценки с высокой вероятностью для ошибки алгоритма ЛСА при достаточно общих ограничениях на $\{(\mathbf{A}_n, \mathbf{b}_n) : n \in \mathbb{N}^*\}$. Мы покажем, что возможно получить только полиномиальную концентрацию, порядок которой зависит от размера шага алгоритма ЛСА. Более того, данный результат невозможно улучшить без дополнительных предположений на последовательность $\{\mathbf{A}_n : n \in \mathbb{N}^*\}$, и, в частности, невозможно получить гауссовскую или экспоненциальную концентрацию. Наконец, мы получаем оценки, оптимальные по количеству итераций и по размеру шага. Ведущее слагаемое в разложении для ошибки аппроксимации ЛСА содержит ковариационную матрицу, появляющуюся в центральной предельной теореме.

Основные результаты настоящего раздела будут доказаны при следующих предположениях.

А 6. $\{(\mathbf{A}_n, \mathbf{b}_n)\}_{n \in \mathbb{N}^*}$ является последовательностью н.о.р. элементов (матриц и векторов).

1. $\mathbb{E}[\mathbf{b}_1] = \bar{\mathbf{b}}$ и существует константа $\bar{C}_b > 0$, такая что для любого $u \in \mathbb{S}^{d-1}$, $u^\top (\mathbf{b}_1 - \bar{\mathbf{b}}) \in \text{SG}(\bar{C}_b^2)$.
2. Существует константа $\bar{C}_A > 0$, такая что $\|\mathbf{A}_1\| \leq \bar{C}_A$ п.н.
3. Матрица $-\bar{\mathbf{A}} = -\mathbb{E}[\mathbf{A}_1]$ является матрицей Гурвица.

Оба условия А 6-1, 2 являются стандартными при анализе ЛСА; см., например, [30, 102, 76].

В этом разделе мы получим оценки с высокой вероятностью на проекции ошибки алгоритма ЛСА $u^\top \{\theta_n - \theta^*\}$ для любых $n \in \mathbb{N}$, $u \in \mathbb{S}^{d-1}$.

Ниже приводится контрпример, который показывает, что если предположить А 6 и зафиксировать $\alpha > 0$, то существует $\bar{p} > 0$, такое что $\lim_{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E}[\|\theta_n - \theta^*\|^p] = +\infty$ для $p \geq \bar{p}$. Как следствие, нельзя получить экспоненциальные вероятностные оценки на $\{\|\theta_n - \theta^*\| : n \in \mathbb{N}\}$.

Пример 2. Рассмотрим (4.2) в случае $d = 1$. Положим $\mathbf{b}_n = 0$ для любого $n \in \mathbb{N}^*$ и пусть $\{\mathbf{A}_n : n \in \mathbb{N}^*\}$ последовательность н.о.р. симметричных бернуллиевских случайных величин с параметром $q_A \in (1/2, 1)$:

$$\mathbf{A}_n = \begin{cases} 1 & \text{с вероятностью } q_A, \\ -1 & \text{с вероятностью } 1 - q_A. \end{cases} \quad (4.25)$$

Этот случай соответствует $\theta^* = 0$ и итеративной последовательности $\theta_n = \prod_{k=1}^n (1 - \alpha \mathbf{A}_k) \theta_0$ с некоторым $\theta_0 \neq 0$. Для любого $p \geq 1$ и $\alpha \in (0, 1)$

$$\mathbb{E}[\|\theta_n\|^p] = \{q_A(1 - \alpha)^p + (1 - q_A)(1 + \alpha)^p\}^n |\theta_0|^p.$$

Используя нижние оценки $(1 - \alpha)^p \geq 1 - \alpha p$ и $(1 + \alpha)^p \geq 1 + \alpha p + p(p - 1)\alpha^2/2$, мы получим для любого $p \geq 1$ и $\alpha \in (0, 1)$,

$$\mathbb{E}[\|\theta_n\|^p] \geq \{1 - p\alpha[(2q_A - 1) - (p - 1)\alpha(1 - q_A)/2]\}^n |\theta_0|^p.$$

Если $\alpha \in (0, 1)$ фиксировано, то для любого $p > \bar{p}_{q,\alpha} = 1 + 2(2q_A - 1)/[\alpha(1 - q_A)]$, следует, что $\lim_{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E}[|\theta_n|^p] = +\infty$. С другой стороны, если $\alpha \in (0, 2(2q_A - 1)/(1 - q_A))$, то $\lim_{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E}[\theta_n^2] = 0$. Таким образом, $\{\theta_n, n \in \mathbb{N}\}$ сходится по распределению к распределению Дирака, сосредоточенному в 0, которое является единственным инвариантным распределением соответствующей цепи Маркова. В этом случае инвариантное распределение имеет моменты порядка p для любого $p \geq 0$. Следует отметить, что предельное распределение не всегда имеет моменты всех порядков, если выполнено только условие А 6. Рассмотрим последовательность $\{\theta_n, n \in \mathbb{N}\}$, определенную в (4.2), где $\{\mathbf{A}_n, n \in \mathbb{N}^*\}$ заданы в (4.25), а $\{\mathbf{b}_n, n \in \mathbb{N}^*\}$ является последовательность н.о.р. стандартных гауссовских с.в., не зависящих от $\{\mathbf{A}_n, n \in \mathbb{N}^*\}$. Мы показываем в [41][Приложение В.2], что существует $\alpha_{2,\infty}$, такое что для любого $\alpha \in (0, \alpha_{2,\infty}]$ цепь Маркова $\{\theta_n, n \in \mathbb{N}\}$ допускает единственное инвариантное распределение π_α . Далее, для любого $\alpha \in (0, \alpha_{2,\infty}]$ существует $p_\alpha \geq 1$, такое что $\int_{\mathbb{R}} |\theta|^p d\pi_\alpha(\theta) = +\infty$ для любого $p \geq p_\alpha$.

Однако, возможно получить равномерные оценки на моменты порядка p для $\{\|\theta_n - \theta\| : n \in \mathbb{N}\}$, если усилить условия А 6-3. Рассмотрим следующее условие.

А 7. Существует $\tilde{\alpha} \in (0, 1)$, $\tilde{\alpha}_\infty > 0$ и положительно определенная матрица $\tilde{Q} \in \mathbb{R}^{d \times d}$, такие что почти всюду для любого $\alpha \in (0, \tilde{\alpha}_\infty]$, $\|\mathbf{I} - \alpha \mathbf{A}_1\|_{\tilde{Q}} < 1 - \tilde{\alpha}$.

Условие, аналогичное А 7, рассматривалось в работа [25] для анализа схемы стохастической аппроксимации с убывающим шагом. Например, А 7 выполнено в случае регуляризованной линейной регрессии. Положим $\mathbf{A}_1 = \lambda \mathbf{I} + \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_1^\top$, для некоторого $\lambda > 0$, и предположим, что $\|\mathbf{a}_1\|$ ограничено почти наверное. Алгоритм ЛСА (4.2) приближает единственное решение $(\lambda \mathbf{I} + \mathbb{E}[\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_1^\top])\theta = \bar{\mathbf{b}}$.

С другой стороны, примеры когда А 7 не выполнено не являются редкими. Рассмотрим алгоритм TD(0) с линейной функциональной аппроксимацией. В обозначениях предыдущего параграфа

$$\mathbf{A}_n = \psi(x_n)\{\psi(x_n) - \gamma\psi(x'_n)\}^\top, \quad \mathbf{b}_n = \mathbf{R}(x_n)\phi(x_n). \quad (4.26)$$

Предположим, что x_n генерируются из инвариантного распределения ядра \mathbf{P} и $x'_n \sim \mathbf{P}(x_n, \cdot)$. Легко видеть, что А 6 выполнено, если $\|\phi(x)\|$, $\mathbf{R}(x)$ ограничены для всех $x \in \mathbf{X}$ [108]. Однако, А 7 нарушается, так как \mathbf{A}_n имеет ранг равный единице.

Наш следующий шаг получить моментные оценки на норму произведения случайных матриц

$$\Gamma_{m:n}^{(\alpha)} = \prod_{i=m}^n (\mathbf{I} - \alpha \mathbf{A}_i), \quad m, n \in \mathbb{N}^*, \quad m \leq n. \quad (4.27)$$

Здесь, как и прежде, для матриц $\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_N$, мы используем обозначения $\prod_{\ell=i}^j \mathbf{A}_\ell = \mathbf{A}_j \dots \mathbf{A}_i$, если $i \leq j$ и предполагаем, что $\prod_{\ell=i}^j \mathbf{A}_\ell = \mathbf{I}_d$, если $i > j$. Математическое ожидание произведения матриц обозначим через $G_{m:n}^{(\alpha)} = \mathbb{E}[\Gamma_{m:n}^{(\alpha)}] = (\mathbf{I} - \alpha \mathbf{A})^{n-m+1}$.

4.2.1 Моментные и с большой вероятностью оценки на произведения случайных матриц

Напомним, что в силу Утверждения 4.1 норма $G_{1:n}^{(\alpha)} = \mathbb{E}[\Gamma_{1:n}^{(\alpha)}]$ убывает экспоненциально быстро по n , так как $\|G_{1:n}^{(\alpha)}\| \leq \sqrt{\kappa_Q}(1 - \alpha a)^{n/2}$. Мы ожидаем, что похожий эффект имеет место для моментных оценок $\|\Gamma_{1:n}^{(\alpha)}\|$. В этом разделе мы покажем, что если p фиксировано, тогда существует $\alpha_{p,\infty} > 0$, такое что для

любого $\alpha \in (0, \alpha_{p,\infty}]$, момент порядка p нормы $\Gamma_{m:n}^{(\alpha)}$ убывает экспоненциально быстро по $n - m$.

Следующий результат представляет собой основной результат для произведений случайных матриц. Доказательство основано на общем подходе, предложенном в работе [58].

Утверждение 4.2. Пусть $\{\mathbf{Y}_\ell, \ell \in \mathbb{N}\}$ последовательность независимых случайных матриц и P положительно определенная матрица. Предположим, что для любого $\ell \in \mathbb{N}$ существуют $m_\ell \in (0, 1)$ и $\sigma_\ell > 0$, такие что $\|\mathbb{E}[\mathbf{Y}_\ell]\|_P^2 \leq 1 - m_\ell$ и $\|\mathbf{Y}_\ell - \mathbb{E}[\mathbf{Y}_\ell]\|_P \leq \sigma_\ell$ п.в. Определим $\mathbf{Z}_n = \prod_{\ell=0}^n \mathbf{Y}_\ell = \mathbf{Y}_n \mathbf{Z}_{n-1}$, где $n \geq 1$ и \mathbf{Z}_0 некоторая заданная (случайная) матрица. Тогда для любого $2 \leq q \leq p$ и $n \geq 1$,

$$\|\mathbf{Z}_n\|_{p,q}^2 \leq \kappa_P \prod_{\ell=1}^n (1 - m_\ell + (p-1)\sigma_\ell^2) \left\| P^{1/2} \mathbf{Z}_0 P^{-1/2} \right\|_{p,q}^2. \quad (4.28)$$

Напомним, что $\kappa_P = \lambda_{\min}^{-1}(P) \lambda_{\max}(P)$.

Для того, чтобы оценить $\Gamma_{1:n}^{(\alpha)}$, используя Утверждение 4.2, мы положим $\mathbf{Y}_\ell = \mathbf{I} - \alpha \mathbf{A}_\ell$, $\ell \geq 1$, $\mathbf{Y}_0 = \mathbf{I}$. Так как $-\bar{\mathbf{A}}$ является матрицей Гурвитца, то, применяя Утверждение 4.1, получим $\|\mathbb{E}[\mathbf{Y}_\ell]\|_Q^2 = \|\mathbf{I} - \alpha \bar{\mathbf{A}}\|_Q^2 \leq 1 - a\alpha$. Далее, А 6-2 влечет, что почти наверное

$$\|\mathbf{Y}_\ell - \mathbb{E}[\mathbf{Y}_\ell]\|_Q = \alpha \|\mathbf{A}_\ell - \bar{\mathbf{A}}\|_Q \leq 2\alpha \sqrt{\kappa_Q} \bar{C}_A = b_Q \alpha.$$

Таким образом, (4.28) имеет место, где $m_\ell = a\alpha$ и $\sigma_\ell = b_Q \alpha$. Так как $\|\mathbf{I}\|_p = d^{1/p}$, то мы приходим к следующему результату.

Следствие 4.3. Пусть выполнены А 6-2-3. Тогда для любого $\alpha \in [0, \alpha_\infty]$, $2 \leq q \leq p$, и $n \in \mathbb{N}$,

$$\mathbb{E}^{1/q} \left[\|\Gamma_{1:n}^{(\alpha)}\|_q \right] \leq \left\| \Gamma_{1:n}^{(\alpha)} \right\|_{p,q} \leq \sqrt{\kappa_Q} d^{1/p} (1 - a\alpha + (p-1)b_Q^2 \alpha^2)^{n/2}, \quad (4.29)$$

где α_∞ определено в (4.8) и $b_Q = 2\sqrt{\kappa_Q} \bar{C}_A$.

Заметим, что Следствие 4.3 влечет $\sup_{n \in \mathbb{N}} \mathbb{E}[\|\Gamma_{1:n}^{(\alpha)}\|^p] < +\infty$ для любого $\alpha \in (0, \alpha_{p,\infty}]$, где

$$\alpha_{p,\infty} = \alpha_\infty \wedge a / (2b_Q^2(p-1)). \quad (4.30)$$

Такой выбор ограничения на шаг α , зависящий от p является необходимым, как показывает Пример 2. Используя Следствие 4.3, можем получить оценки с высокой вероятностью.

Следствие 4.4. Пусть выполнены А 6-2-3. Тогда для любого $\alpha \in (0, \alpha_\infty)$, где α_∞ определено (4.8), $\delta \in (0, 1)$ и $n \in \mathbb{N}$, с вероятностью не менее $1 - \delta$,

$$\|\Gamma_{1:n}^{(\alpha)}\| \leq \sqrt{\kappa_Q} \exp \left[-(a\alpha - \alpha^2 b_Q^2 n) / 2 + b_Q \alpha \sqrt{2n \log(d/\delta)} \right].$$

Отметим, что этот результат является неулучшаемым по δ . См., пример из работы [41], который продолжает Пример 2.

В завершении сформулируем результат, в котором ослаблено условие А 6-2:

Утверждение 4.5. Пусть выполнены условия А 6-3, $\|\mathbf{A}_1 - \bar{\mathbf{A}}\| \in \text{SG}(\bar{C}'_A)$ для некоторого $\bar{C}'_A > 0$. Тогда для любого $\alpha \in (0, \alpha_\infty)$, где α_∞ определено (4.8), $2 \leq q \leq p$, и $n \in \mathbb{N}$,

$$\mathbb{E}^{1/q} \left[\|\Gamma_{1:n}^{(\alpha)}\|_q \right] \leq \left\| \Gamma_{1:n}^{(\alpha)} \right\|_{p,q} \leq \sqrt{\kappa_Q} d^{1/p} (1 - a\alpha + q(p-1)(b'_Q)^2 \alpha^2)^{n/2}. \quad (4.31)$$

Здесь $b'_Q = 2\sqrt{\kappa_Q} \bar{C}'_A$.

Неасимптотические оценки ошибки аппроксимации ЛСА алгоритма
Используя результаты раздела 4.2.1 и разложение (см. (4.12))

$$\theta_n - \theta^* = \tilde{\theta}_n^{(\text{tr})} + \tilde{\theta}_n^{(\text{fl})}, \quad \tilde{\theta}_n^{(\text{tr})} = \Gamma_{1:n}^{(\alpha)} \{\theta_0 - \theta^*\}, \quad \tilde{\theta}_n^{(\text{fl})} = \alpha \sum_{j=1}^n \Gamma_{j+1:n}^{(\alpha)} \bar{\varepsilon}_j, \quad (4.32)$$

мы получим оценки с высокой вероятностью на величину $u^\top \{\theta_n - \theta^*\}$ для любого $n \in \mathbb{N}$ и $u \in \mathbb{S}^{d-1}$. Вначале рассмотрим транзитивное слагаемое $\tilde{\theta}_n^{(\text{tr})}$.

Утверждение 4.6. Пусть выполнено А6 и зафиксируем $p_0 \geq 2$. Тогда для любого $n \in \mathbb{N}^*$, $\alpha \in (0, \alpha_{p_0, \infty})$, где $\alpha_{p_0, \infty}$ определено в (4.30), $u \in \mathbb{S}^{d-1}$ и $\delta \in (0, 1)$, с вероятностью не менее $1 - \delta$

$$|u^\top \Gamma_{1:n}^{(\alpha)} (\theta_0 - \theta^*)| \leq \sqrt{\kappa_Q} d^{1/p_0} (1 - a\alpha/4)^n \|\theta_0 - \theta^*\| \delta^{-1/p_0},$$

где a определено в (4.8).

Утверждение 4.6 дает возможность получить оценки с высокой вероятностью полиномиальные по δ оценки. Как уже отмечалось, основная причина кроется в оценках на $\|\Gamma_{1:n}^{(\alpha)}\|$

Обратимся теперь к слагаемому $\tilde{\theta}_n^{(\text{fl})}$, определенному в (4.32). Заметим, что в предположении А6, последовательность $\{\bar{\varepsilon}_n, n \in \mathbb{N}\}$ является н.о.р. Рассмотрим представление

$$\tilde{\theta}_n^{(\text{fl})} = \alpha \sum_{j=1}^n \Gamma_{j+1:n}^{(\alpha)} \bar{\varepsilon}_j = J_n^{(\alpha, 0)} + H_n^{(\alpha, 0)}, \quad (4.33)$$

где $\{(J_n^{(\alpha, 0)}, H_n^{(\alpha, 0)}) : n \in \mathbb{N}\}$ определены рекуррентно по $n \geq 0$

$$\begin{aligned} J_{n+1}^{(\alpha, 0)} &= (\mathbf{I} - \alpha \bar{\mathbf{A}}) J_n^{(\alpha, 0)} + \alpha \bar{\varepsilon}_{n+1}, & J_0^{(\alpha, 0)} &= 0, \\ H_{n+1}^{(\alpha, 0)} &= (\mathbf{I} - \alpha \mathbf{A}_n) H_n^{(\alpha, 0)} - \alpha (\mathbf{A}_{n+1} - \bar{\mathbf{A}}) J_n^{(\alpha, 0)}, & H_0^{(\alpha, 0)} &= 0. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Решая рекуррентные уравнения, мы получим

$$J_n^{(\alpha, 0)} = \alpha \sum_{j=1}^n G_{j+1:n}^{(\alpha)} \bar{\varepsilon}_j, \quad H_n^{(\alpha, 0)} = -\alpha \sum_{j=1}^n \Gamma_{j+1:n}^{(\alpha)} (\mathbf{A}_j - \bar{\mathbf{A}}) J_{j-1}^{(\alpha, 0)}.$$

Заметим, что $J_n^{(\alpha, 0)}$ представляет собой линейную статистику от независимых векторов $\{\bar{\varepsilon}_j, j \in \{1, \dots, n\}\}$. Покажем, что $J_n^{(\alpha, 0)}$ представляет собой ведущее слагаемое при $\alpha \downarrow 0$. Обозначим для фиксированного $n \in \mathbb{N}^*$ и $\alpha > 0$, ковариационную матрицу $J_n^{(\alpha, 0)}$ через

$$\Sigma_n^\alpha = \text{Cov}(J_n^{(\alpha, 0)}). \quad (4.35)$$

Получим следующее утверждение.

Утверждение 4.7. Пусть выполнены А6. Тогда для любого $n \in \mathbb{N}^*$, $\alpha \in (0, \alpha_\infty]$, где α_∞ определено в (4.8), $u \in \mathbb{S}^{d-1}$ и $\delta \in (0, 1)$, с вероятностью не менее $1 - \delta$,

$$|u^\top J_n^{(\alpha, 0)}| < \mathbf{D}_1 \sqrt{\{u^\top \Sigma_n^\alpha u\} \log(2/\delta)} + \alpha \sqrt{1 + \log(1/(a\alpha))} \mathbf{D}_2 \log^{3/2}(2/\delta). \quad (4.36)$$

Здесь $\mathbf{D}_1 = 60\sqrt{3}e^{4/3}$ и \mathbf{D}_2 определены в [41]/Формула 49).

Рассмотрим ковариационную матрицу $J_n^{(\alpha,0)}$ и ее зависимость от n и α . Заметим, что для любого $\alpha \in (0, \alpha_{2,\infty}]$, $\{\Sigma_n^\alpha, n \in \mathbb{N}^*\}$ сходится к $\alpha \Sigma^\alpha$ при $n \rightarrow \infty$ где $\Sigma^\alpha = \alpha \sum_{k=0}^{\infty} G_{1:k} \Sigma_\varepsilon G_{1:k}^\top$ единственное решение уравнения Рикатти

$$\bar{A} \Sigma^\alpha + \Sigma^\alpha \bar{A}^\top - \alpha \bar{A} \Sigma^\alpha \bar{A}^\top = \Sigma_\varepsilon, \quad \text{где } \Sigma_\varepsilon = \mathbb{E}[\varepsilon_1 \varepsilon_1^\top]. \quad (4.37)$$

Отметим, что нас интересует только случай, когда Σ_ε имеет полный ранг. Используя Утверждение 4.1, можно показать, что для $n \geq 0$,

$$\|\Sigma_n^\alpha - \alpha \Sigma^\alpha\| \leq \alpha^2 \sum_{k>n} \|G_{1:k}\|^2 \|\Sigma_\varepsilon\| \leq \alpha a^{-1} \kappa_Q \|\Sigma_\varepsilon\| (1 - \alpha a)^n. \quad (4.38)$$

Получим теперь разложение Σ^α по α . Хорошо известно, что при $\alpha \downarrow 0$, Σ^α сходится к Σ , которое является единственным решением уравнения Ляпунова (см. [88, Лемма 9.1])

$$\bar{A} \Sigma + \Sigma \bar{A}^\top = \Sigma_\varepsilon. \quad (4.39)$$

Следующий результат показывает, что скорость сходимости Σ^α к Σ имеет порядок шага α .

Утверждение 4.8. Пусть выполнено А 6-3. Тогда для любого $\alpha \in (0, \alpha_\infty]$, где α_∞ определено в (4.8),

$$\|\Sigma^\alpha - \Sigma\|_Q \leq \alpha a^{-1} \|\bar{A} \Sigma \bar{A}^\top\|_Q.$$

Здесь Σ^α и Σ определены в (4.37) и (4.39) соответственно, а a определено в (4.8).

Для того, чтобы завершить оценивание $\tilde{\theta}_n^{(\text{fl})}$ необходимо рассмотреть $H_n^{(\alpha,0)}$. Действуя аналогично(4.34), мы рассмотрим разложение $H_n^{(\alpha,0)} = J_n^{(\alpha,1)} + H_n^{(\alpha,1)}$, где $\{(J_n^{(\alpha,1)}, H_n^{(\alpha,1)}) : n \in \mathbb{N}\}$ определены с помощью рекуррентных соотношений $n \geq 0$:

$$\begin{aligned} J_{n+1}^{(\alpha,1)} &= (I - \alpha \bar{A}) J_n^{(\alpha,1)} - \alpha (\mathbf{A}_{n+1} - \bar{A}) J_n^{(\alpha,0)}, & J_0^{(\alpha,1)} &= 0, \\ H_{n+1}^{(\alpha,1)} &= (I - \alpha \mathbf{A}_{n+1}) H_n^{(\alpha,1)} - \alpha (\mathbf{A}_{n+1} - \bar{A}) J_n^{(\alpha,1)}, & H_0^{(\alpha,1)} &= 0. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Следующий результат дает оценку на $\{(J_n^{(\alpha,1)}, H_n^{(\alpha,1)}) : n \in \mathbb{N}\}$.

Утверждение 4.9. Пусть выполнены А 6 и $p_0 \geq 2$. Тогда для любого $n \in \mathbb{N}$, $\alpha \in (0, \alpha_{p_0,\infty})$, где $\alpha_{p_0,\infty}$ определено в (4.30), $u \in \mathbb{S}^{d-1}$ и $\delta \in (0, 1/2)$, с вероятностью не менее $1 - 2\delta$

$$|u^\top J_n^{(\alpha,1)}| < e D_3 \alpha \log^2(1/\delta), \quad |u^\top H_n^{(\alpha,1)}| < D_4 \alpha p_0^2 \delta^{-1/p_0}. \quad (4.41)$$

Здесь D_3 и D_4 заданы [41][Формула 57 и 60].

Объединяя предыдущие результаты, мы получим основной результат настоящей главы.

Теорема 4.4. Пусть выполнены А 6 и фиксируем $p_0 \geq 2$. Тогда для любого $n \in \mathbb{N}$, $\alpha \in (0, \alpha_{p_0,\infty})$, где $\alpha_{p_0,\infty}$ определено в (4.30), $u \in \mathbb{S}^{d-1}$ и $\delta \in (0, 1/4)$, с вероятностью не менее $1 - 4\delta$,

$$\alpha^{-1/2} |u^\top (\theta_n - \theta^*)| < D_1 \sqrt{\{u^\top \Sigma^\alpha u\} \log(2/\delta)} + \alpha^{1/2} q^{(1)}(\alpha, \delta) + (1 - \alpha a/4)^n \Delta^{(1)}(\alpha, \delta). \quad (4.42)$$

Здесь Σ^α единственное решение уравнения (4.37), $D_1 = 60\sqrt{3}e^{4/3}$, а определено в (4.8),

$$\begin{aligned} q^{(1)}(\alpha, \delta) &= (e D_3 \log^2(1/\delta) + \sqrt{1 + \log(1/\alpha a)} D_2 \log^{3/2}(2/\delta)) + D_4 p_0^2 \delta^{-1/p_0}, \\ \Delta^{(1)}(\alpha, \delta) &= D_1 \sqrt{a^{-1} \kappa_Q \|\Sigma_\varepsilon\| \log(2/\delta)} + \sqrt{\kappa_Q} d^{1/p_0} \|\theta_0 - \theta^*\| \alpha^{-1/2} \delta^{-1/p_0}, \end{aligned} \quad (4.43)$$

где κ_Q и Σ_ε определены в (4.8) и (4.37) соответственно.

Обсудим полученный результат. Заметим, что $\Delta^{(1)}(\alpha, \delta)$ убывает экспоненциально быстро по n . Величины $q^{(1)}(\alpha, \delta)$ и $\Delta^{(1)}(\alpha, \delta)$ имеют порядок δ^{-1/p_0} при $\delta \rightarrow 0$, и, следовательно, (4.42) гарантирует только полиномиальные оценки на вероятность для алгоритма ЛСА. Поведение (4.42) по α обсуждается в следующем разделе.

При выполнении условия А 7 мы можем получить более точные оценки на $H_n^{(\alpha, 1)}$.

Утверждение 4.10. Пусть выполнены А 6 и А 7. Тогда для любого $n \in \mathbb{N}$, $\alpha \in (0, \alpha_\infty \wedge \tilde{\alpha}_\infty)$, где $\alpha_\infty, \tilde{\alpha}_\infty$ определены в (4.8), А 7 соответственно, $u \in \mathbb{S}^{d-1}$ и $\delta \in (0, 1/2)$, с вероятностью не менее $1 - 2\delta$,

$$|u^\top J_n^{(\alpha, 1)}| < eD_3\alpha \log^2(1/\delta), \quad |u^\top H_n^{(\alpha, 1)}| < eD_5\alpha \log^2(1/\delta). \quad (4.44)$$

Здесь D_3 и D_5 определены в [41] [Формула 57 и 61].

В качестве следствия мы можем получить экспоненциальные по δ оценки на вероятность.

Теорема 4.5. Пусть выполнены А 6 и А 7. Тогда для любого $n \in \mathbb{N}$, $\alpha \in (0, \alpha_\infty \wedge \tilde{\alpha}_\infty)$, $u \in \mathbb{S}^{d-1}$ и $\delta \in (0, 1/4)$, с вероятностью не менее $1 - 4\delta$

$$\alpha^{-1/2} |u^\top (\theta_n - \theta^*)| < D_1 \sqrt{\{u^\top \Sigma^\alpha u\} \log(2/\delta)} + \alpha^{1/2} q^{(2)}(\alpha, \delta) + (1 - \alpha\tilde{\alpha})^{n/2} \Delta^{(2)}(\alpha, \delta).$$

Здесь $D_1 = 60\sqrt{3}e^{4/3}$, Σ^α решение уравнения (4.37),

$$\begin{aligned} q^{(2)}(\alpha, \delta) &= e(D_3 + D_5) \log^2(1/\delta) + \sqrt{1 + \log(1/\tilde{\alpha})} D_2 \log^{3/2}(2/\delta), \\ \Delta^{(2)}(\alpha, \delta) &= D_1 \sqrt{\tilde{\alpha}^{-1} \kappa_{\tilde{Q}} \|\Sigma_\varepsilon\| \log(2/\delta)} + \kappa_{\tilde{Q}}^{1/2} \|\theta_0 - \theta^*\| \alpha^{-1/2}, \end{aligned} \quad (4.45)$$

где Σ_ε определено в (4.37).

Оптимальность полученных оценок по α : анализ $(\theta_n)_{n \in \mathbb{N}}$ как цепи Маркова Последовательность $\{\theta_n, n \in \mathbb{N}\}$, определенная в (4.2), является цепью Маркова. Мы покажем, что оценка Теоремы 4.4 имеет структуру неравенства Бернштейна по α . Обозначим через R_α марковское ядро, отвечающее последовательности $\{\theta_n : n \in \mathbb{N}\}$. Сначала мы покажем, что если α достаточно мало, то R_α является W_2 -геометрически эргодическим и дадим представление для инвариантного распределения в терминах бесконечного ряда.

Теорема 4.6. Пусть выполнено А 6. Тогда для любого $\alpha \in (0, \alpha_{2, \infty})$, где $\alpha_{2, \infty}$ определено в (4.30), R_α допускает единственное инвариантное распределение $\pi_\alpha \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)$ и для любого $n \in \mathbb{N}$,

$$W_2^2(\delta_\theta R_\alpha^n, \pi_\alpha) \leq \sqrt{\kappa_Q d (1 - \alpha\alpha/2)^n} \int_{\mathbb{R}^d} \|\tilde{\theta} - \theta\|^2 d\pi_\alpha(\tilde{\theta}). \quad (4.46)$$

Далее, если $\{(\mathbf{A}_k, \mathbf{b}_k) : k \in \mathbb{N}_-\}$ является последовательности н.о.о. с.в., имеющих такое же распределение как у $(\mathbf{A}_1, \mathbf{b}_1)$, тогда существует следующий предел

$$\theta_\infty^{(\alpha)} = \lim_{n \rightarrow -\infty} \theta_n^{(\alpha, \leftarrow)}, \quad \theta_n^{(\alpha, \leftarrow)} = \alpha \sum_{k=n}^1 \Gamma_{k:0} \mathbf{b}_{k-1}, \quad \Gamma_{k:0} = \prod_{i=k}^0 (\mathbf{I}_d - \alpha \mathbf{A}_i), \quad (4.47)$$

почти наверное и в смысле L^2 , и имеет распределение π_α :

На основе Теоремы 4.4, мы получим следующее неравенство концентрации для семейства распределений $\{\pi_\alpha : \alpha \in (0, \alpha_{2, \infty})\}$ вокруг θ^* .

Теорема 4.7. Пусть выполнено А 6 и фиксируем $p_0 \geq 2$. Тогда для любого $\alpha \in (0, \alpha_{p_0, \infty})$, где $\alpha_{p_0, \infty}$ определено в (4.30), $u \in \mathbb{S}^{d-1}$ и $\delta \in (0, 1/4)$, с вероятностью не менее $1 - 4\delta$,

$$\alpha^{-1/2} |u^\top (\theta_\infty^{(\alpha)} - \theta^*)| < D_1 \sqrt{\{u^\top \Sigma u\} \log(2/\delta)} + \alpha^{1/2} [a^{-1/2} \|\bar{A} \Sigma \bar{A}^\top\|_Q^{1/2} + q^{(1)}(\alpha, \delta)]. \quad (4.48)$$

Здесь Σ единственное решение (4.39), $D_1 = 60\sqrt{3}e^{4/3}$, a определено в (4.8), и $q^{(1)}(\alpha, \delta)$ определено в (4.43).

Снова отметим, что вероятность убывает полиномиально по δ и, как показано в Примере 2, не может быть улучшена для фиксированного α . Ведущим слагаемым в (4.48) при $\alpha \downarrow 0$ является $\sqrt{D_1 \{u^\top \Sigma u\}}$. Далее, мы покажем, что имеет место центральная предельная теорема для семейства $(\theta_\infty^{(\alpha)})_{\alpha \in (0, \alpha_{2, \infty}]}$, где Σ играет роль асимптотической ковариационной матрицы. Таким образом, (4.48) представляет собой неравенство Бернштейна по α , и в этом смысле (4.48) является оптимальным. Определим для любого $\alpha \in (0, \alpha_{2, \infty}]$,

$$\tilde{\theta}_\infty^{(\alpha)} = \alpha^{-1/2} \{\theta_\infty^{(\alpha)} - \theta^*\}. \quad (4.49)$$

Теорема 4.8. Пусть выполнено А 6. Тогда семейство $\{\tilde{\theta}_\infty^{(\alpha)} : \alpha \in (0, \alpha_{2, \infty}]\}$ сходится по распределению при $\alpha \downarrow 0$ к гауссовскому случайному вектору с нулевым средним и ковариационной матрицей Σ , определенной в (4.39).

Заметим, что этот результат был ранее получен [87, Теорема 1] для общей задачи стохастической аппроксимации, но при более сильных условиях на $\{\varepsilon_n, n \in \mathbb{N}^*\}$. В частности, предполагалось, что распределение ε_1 имеет абсолютно непрерывную относительно меры Лебега плотность. Мы ослабили это условие и предложили новое доказательство.

5 Снижение дисперсии в МСМС алгоритмах

Результаты настоящего раздела опубликованы в [8] и [11].

Методы снижения дисперсии направлены на уменьшение стохастической ошибки в оценках, полученных по методу Монте-Карло; см. [92], [95], [47] и [46] в качестве введения в данную область. В недавнее время в литературе появился значительный интерес к методам снижения дисперсии для зависимых последовательностей, а также приложениям к байесовскому оцениванию и обучению с подкреплением; см, например, [79], [61], [33], [26], [2] и литературу в этих работах.

Рассмотрим классическую задачу вычисления математического ожидания функции $f : \mathcal{X} \mapsto \mathbb{R}$ относительно вероятностной меры π на измеримом пространстве $(\mathcal{X}, \mathcal{X})$, т.е. $\pi(f) = \int_{\mathcal{X}} f(x)\pi(dx)$. Допустим сначала, что возможно сгенерировать выборку $(X_k)_{k=0}^{N-1}$ из независимых и одинаково распределенных случайных величин из плотности π . Естественной оценкой для $\pi(f)$ является выборочное среднее

$$\pi_N(f) := N^{-1} \sum_{k=0}^{N-1} f(X_k), \quad N \in \mathbb{N}.$$

Используя центральную предельную теорему, можно построить асимптотические доверительные интервалы для $\pi(f)$ вида $\pi_N(f) \pm \mathfrak{q} N^{-1/2} (\text{Var}_{\pi}(f))^{1/2}$, где \mathfrak{q} – квантиль стандартного нормального распределения и $\text{Var}_{\pi}(f) = \int_{\mathcal{X}} \{f(x) - \pi(f)\}^2 \pi(dx)$. Общим подходом к снижению дисперсии $\text{Var}_{\pi}(f)$ является метод контрольных переменных, который состоит в выборе функции g из множества функций \mathcal{G} , таких что $\pi(g) = 0$ и $\text{Var}_{\pi}(f - g) \ll \text{Var}_{\pi}(f)$. Такая функция g называется *контрольной переменной* (CV). Естественным подходом для поиска подходящей контрольной переменной $g \in \mathcal{G}$ является минимизация эмпирической дисперсии

$$D_n(f - g) = (n - 1)^{-1} \sum_{k=0}^{n-1} (f(X_k) - g(X_k) - \pi_n(f - g))^2. \quad (5.1)$$

Такой метод называется методом снижения эмпирической дисперсии (англ. Empirical Variance Minimisation или, для краткости, EVM). Теоретические свойства EVM метода изучены в недавних работах [7] и [10]. Во многих практических задачах генерирование независимой выборки из распределения π недоступно. Тем не менее, часто можно получить нестационарную последовательность зависимых случайных величин $(X_k)_{k=0}^{\infty}$, маргинальное распределение которых сходится к π . Данная ситуация возникает, например, в байесовской статистике, где распределение π представляет собой апостериорное распределение, а последовательность $(X_k)_{k=0}^{\infty}$ получается с помощью метода МСМС. При достаточно общих предположениях имеет место центральная предельная теорема, которая позволяет построить доверительные множества для $\pi(f)$ вида

$$\left[\pi_N(f) - \mathfrak{q} \sqrt{\frac{V_{\infty}(f)}{N}}, \pi_N(f) + \mathfrak{q} \sqrt{\frac{V_{\infty}(f)}{N}} \right]. \quad (5.2)$$

Здесь $V_{\infty}(f)$ – асимптотическая дисперсия, которая определяется с помощью предела

$$V_{\infty}(f) := \lim_{N \rightarrow \infty} N \cdot \mathbb{E} \left[(\pi_N(f) - \pi(f))^2 \right]. \quad (5.3)$$

Разумным подходом выбора контрольной переменной $g \in \mathcal{G}$ в данном случае является минимизация асимптотической дисперсии $V_{\infty}(f - g)$. Если в качестве оценки $V_{\infty}(f - g)$ выбрать спектральную оценку дисперсии, то мы придем к

методу минимизации эмпирической спектральной оценки дисперсии (Empirical Spectral Variance Minimization или, кратко, ESVM); см. [9].

В настоящей главе большое внимание будет уделяться случаю, когда $X = \mathbb{R}^d$ и π имеет гладкую всюду положительную плотность (также обозначаемую через π) относительно меры Лебега, такую что $\nabla U := -\nabla \log \pi$ может быть вычислено в каждой точке. Ниже мы рассмотрим методы генерирования данных, основанные на динамике Ланжевена, которая определяется с помощью СДУ

$$dY_t = -\nabla U(Y_t) dt + \sqrt{2}dW_t, \quad (5.4)$$

где $(W_t)_{t \geq 0}$ стандартный Винеровский процесс. Заметим, что ∇U не зависит от нормировочной константы плотности π , которая обычно неизвестна, например, в задачах байесовского оценивания. При некоторых технических предположениях, распределение Y_t сходится к π при $t \rightarrow \infty$, см. [93]. Градиентные алгоритмы МСМС основаны на дискретизации по времени динамики (5.4). В байесовской постановке, основной проблемой данного алгоритма является сложность вычисления градиента ∇U , которая растет пропорционально объему выборки K , что может быть сильно затратно по времени. Чтобы обойти эту проблему, в [111] было предложено заменить "полный" градиент ∇U на его стохастическую ошибку, построенную по усреднению значений градиента, посчитанного в случайном набору точек выборки (далее такой набор будем называть *пакетом* (англ. *minibatch*)). Этот алгоритм, называемый Динамикой Ланжевена с стохастическим градиентом (англ. Stochastic Gradient Langevin Dynamics (SGLD)), стал ключевым алгоритмом МСМС в задаче байесовского оценивания для больших наборов данных. Анализ сходимости SGLD и его свойства изучены в работах [75], [106], [80], [32]. В этих работах показано, что использование стохастического градиента сопряжено с определенными проблемами: хотя эмпирическая оценка градиента является несмещенной, ее дисперсия может быть очень большой, что оказывает сильное влияние на вычислительные преимущества SGLD [32]. Существует несколько подходов, в которых предлагается уменьшить дисперсию стохастической оценки "полного" градиента, основанных на аналогичных методах из стохастической оптимизации; см. [94], [61], и [33]. В работе [39] изучались свойства алгоритмов Stochastic Average Gradient (SAGA) и Stochastic Variance Reduced Gradient (SVRG). Эти результаты были существенно улучшены в [32], [26], [22]. В заключении отметим, что существуют и другие методы снижения дисперсии; см., например, [2] и [114]).

Настоящая глава организована следующим образом. В разделе 5.1 исследуется алгоритм ESVM. В частности, описание ESVM алгоритма дано в разделе 5.1.1. В разделе 5.1.2 изучаются теоретические свойства ESVM алгоритма для асимптотически стационарных зависимых последовательностей. Приводится общая оценка на избыточную дисперсию $V_\infty(f - \hat{g}_n) - \inf_{g \in \mathcal{G}} V_\infty(f - g)$, где контрольная переменная $\hat{g}_n \in \mathcal{G}$ выбирается таким образом, чтобы минимизировать спектральную оценку дисперсии V_n , построенную по наблюдениям $(X_k)_{k=0}^{n-1}$, т.е. $\hat{g}_n \in \operatorname{argmin} V_n(f - g)$. Точное определение V_n дано в разделе 5.1.1. В разделе 5.2 полученные результаты применяются для цепей Маркова, которые являются равномерно геометрически эргодическими в метрике Кенторовича–Вассерштейна. Раздел 5.2.1 посвящен динамике Ланжевена, а в разделе 5.2.2 мы используем ESVM алгоритм для снижения дисперсии в алгоритмах со стохастическим градиентом. Показывается, что в обоих случаях избыточная дисперсия может быть оценена (с точностью до логарифмических множителей) как

$$V_\infty(f - \hat{g}_n) - \inf_{g \in \mathcal{G}} V_\infty(f - g) = O(n^{-1/2}).$$

В частности, это позволяет строить доверительные интервалы (для фиксиро-

ванной выборки, используемой для обучения \widehat{g}_n) вида

$$\pi_N(f - \widehat{g}_n) \pm \mathfrak{q} \sqrt{\frac{\inf_{g \in \mathcal{G}} V_\infty(f - g) + Cn^{-1/2}}{N}},$$

где $C > 0$ некоторая константа. Заметим, что полученные доверительные интервалы значительно точнее интервалов, полученных в (5.2), если n большое и $\inf_{g \in \mathcal{G}} V_\infty(f - g)$ мало. Последнее условие выполняется, если класс \mathcal{G} достаточно богатый. В разделе 5.3, мы иллюстрируем алгоритм снижения дисперсии на различных примерах.

5.1 Минимизация эмпирической спектральной оценки дисперсии

5.1.1 Метод

Пусть $(\Omega, \mathfrak{F}, (\mathfrak{F}_k)_{k \geq 0}, \mathbb{P}^\circ)$ – вероятностное пространство с заданной на нем фильтрацией, $(X_k)_{k=0}^\infty$ – случайный процесс, адаптированный к $(\mathfrak{F}_k)_{k \geq 0}$ и принимающий значения в X . Пусть для функции $f : \mathsf{X} \rightarrow \mathbb{R}$ выполнено $\pi(f^2) < \infty$ и $\mathbb{E}[f^2(X_k)] < \infty$ для всех $k \in \mathbb{N}$. Обозначим через \mathcal{G} множество контрольных переменных, т.е. таких функций $g \in \mathcal{G}$, что $\pi(g^2) < \infty$, $\pi(g) = 0$ и $\mathbb{E}[g^2(X_k)] < \infty$ для всех $k \in \mathbb{N}$. Примеры класса \mathcal{G} приводятся ниже в разделе 5.2. Обозначим класс функций вида $h = f - g$, где $g \in \mathcal{G}$, через \mathcal{H} , т.е. $\mathcal{H} := \{f - g : g \in \mathcal{G}\}$. Для простоты будем писать $\tilde{h} = h - \pi(h)$.

Для того, чтобы гарантировать существование V_∞ , мы наложим дополнительные условия.

CS 1. Для любой функции $h \in \mathcal{H}$, существует симметричная, суммируемая и положительно определенная последовательность $(\rho^{(h)}(\ell))_{\ell \in \mathbb{Z}}$, удовлетворяющая

- 1) $\rho^{(h)}(0) = \text{Var}_\pi(h)$,
- 2) Существует константа $R > 0$, не зависящая от h , такая что для любого $\ell \in \mathbb{N}_0$,
$$\sum_{k \in \mathbb{N}_0} \left| \mathbb{E}[\tilde{h}(X_k)\tilde{h}(X_{k+\ell})] - \rho^{(h)}(\ell) \right| \leq R,$$
- 3) $\lim_{\ell \rightarrow \infty} \sum_{k \in \mathbb{N}_0} \left| \mathbb{E}[\tilde{h}(X_k)\tilde{h}(X_{k+\ell})] - \rho^{(h)}(\ell) \right| = 0.$

Утверждение 5.1. Пусть выполнено условие CS1. Тогда, для любой функции $h \in \mathcal{H}$, асимптотическая дисперсия $V_\infty(h)$, определенная в (5.3), существует и может быть представлена в виде ряда

$$V_\infty(h) = \sum_{\ell \in \mathbb{Z}} \rho^{(h)}(\ell). \quad (5.5)$$

Спектральная оценка дисперсии $V_n(h)$ основана на срезке ряда и перевзвешивании автоковариационных функций :

$$V_n(h) := \sum_{|\ell| < b_n} w_n(\ell) \rho_n^{(h)}(\ell), \quad (5.6)$$

где w_n – ядро, b_n – ширина окна и $\rho_n^{(h)}(\ell)$ – выборочная ковариация, определяемая с помощью

$$\rho_n^{(h)}(\ell) = \rho_n^{(h)}(-\ell) := n^{-1} \sum_{k=0}^{n-\ell-1} (h(X_k) - \pi_n(h))(h(X_{k+\ell}) - \pi_n(h)). \quad (5.7)$$

Здесь b_n целое число, зависящее от n , ядро w_n имеет вид $w_n(\ell) = w(\ell/b_n)$, где w – симметричная, неотрицательно определенная функция с носителем $[-1, 1]$,

такая что $\sup_{y \in [0,1]} |w(y)| \leq 1$ и $w(y) = 1$ для $y \in [-1/2, 1/2]$. Существуют другие оценки асимптотической дисперсии $V_\infty(h)$; см. [44] и список литературы в этой статье. ESVM оценка имеет вид

$$\hat{h}_n \in \operatorname{argmin}_{h \in \mathcal{H}} V_n(h). \quad (5.8)$$

Псевдокод ESVM метода представлен в Алгоритме 1.

Algorithm 1: Алгоритм минимизации эмпирической спектральной оценки дисперсии (ESVM)

Вход: две независимые последовательности: $\mathbf{X}_n = (X_k)_{k=0}^{n-1}$ и $\mathbf{X}'_N = (X'_k)_{k=0}^{N-1}$.

1. Выберем класс \mathcal{G} функций с $\pi(g) = 0$ для всех $g \in \mathcal{G}$.

2. Найти $\hat{g}_n \in \operatorname{argmin}_{g \in \mathcal{G}} V_n(f - g)$, где V_n вычислено по набору \mathbf{X}_n .

Выход: $\pi_N(f - \hat{g}_n)$ вычислено на основе \mathbf{X}'_N .

5.1.2 Теоретический анализ

Для нужд теоретического анализа, вместо поиска функции минимизирующей спектральную дисперсию в классе \mathcal{H} , мы будем решать задачу оптимизации на конечной аппроксимации (сети) класса \mathcal{H} . Оказывается, что обе оценки имеют похожие свойства. Зафиксируем $\varepsilon > 0$. Предположим, что класс \mathcal{H} вполне ограничен. Пусть \mathcal{H}_ε обозначает минимальную ε -сеть в $L^2(\pi)$ -норме, т.е., наименьший возможный (конечный) набор функций из $\mathcal{H}_\varepsilon \subset \mathcal{H}$, таких что для любой $h \in \mathcal{H}$ существует $h_\varepsilon \in \mathcal{H}_\varepsilon$, такая что расстояние между h и h_ε в $L^2(\pi)$ -норме меньше или равно ε . Мощность \mathcal{H}_ε называется числом покрытий и обозначается через $|\mathcal{H}_\varepsilon|$. Определим

$$\hat{h}_{n,\varepsilon} \in \operatorname{argmin}_{h \in \mathcal{H}_\varepsilon} V_n(h).$$

Введем дополнительное условие на $(\rho^{(h)}(\ell))_{\ell \in \mathbb{Z}}$ из условия CS1.

CD 1. *Существуют константы $\varsigma > 0$ и $\lambda \in [0, 1)$, такие что для всех $h \in \mathcal{H}$ и $\ell \in \mathbb{N}_0$,*

$$|\rho^{(h)}(\ell)| \leq \varsigma \lambda^\ell.$$

Следующая теорема представляет собой основной результат данной главы.

Теорема 5.1. *Предположим, что выполнены условия CS1 и CD1. Дополнительно потребуем, что для любого $n \in \mathbb{N}$ существует убывающая непрерывная функция α_n , удовлетворяющая условию*

$$\sup_{h \in \mathcal{H}} \mathbb{P}\left(|V_n(h) - \mathbb{E}[V_n(h)]| > t\right) \leq \alpha_n(t), \quad t > 0.$$

Тогда, для любого $\delta \in (0, 1)$ и $\varepsilon > 0$ с вероятностью не менее $1 - \delta$ имеет место неравенство

$$\begin{aligned} V_\infty(\hat{h}_{n,\varepsilon}) - \inf_{h \in \mathcal{H}} V_\infty(h) &\lesssim \alpha_n^{-1}\left(\frac{\delta}{2|\mathcal{H}_\varepsilon|}\right) + (\sqrt{Rn}^{-1/2} + \sqrt{D})b_n\varepsilon + \sqrt{RD}b_n n^{-1/2} \\ &\quad + (R + \varsigma(1 - \lambda)^{-1})b_n n^{-1} + \varsigma(1 - \lambda)^{-2}n^{-1} + \varsigma(1 - \lambda)^{-1}\lambda^{b_n/2}, \end{aligned}$$

где α_n^{-1} обратная функция к α_n и $D = \sup_{h \in \mathcal{H}} \operatorname{Var}_\pi(h)$.

При некоторых дополнительных предположениях на число покрытий множества \mathcal{H} и функцию $\alpha_n(t)$, подходящий выбор ε -сети и ширины окна b_n , приводит к следующей оценке

$$V_\infty(\widehat{h}_{n,\varepsilon}) - \inf_{h \in \mathcal{H}} V_\infty(h) \lesssim n^{-1/(2+\rho)} \quad \text{для некоторого } \rho > 0,$$

которая имеет место с большой вероятностью. Здесь и далее \lesssim обозначает неравенство, которое выполнено с точностью до константы, зависящей от λ , R , D и ς . В следующем разделе мы применим Теорему 5.1 для анализа ESVM метода для конкретных зависимых последовательностей.

5.2 Приложения

Теорема 5.1 может быть применена для различных видов последовательностей зависимых случайных величин, удовлетворяющих условиям CS 1 и CD 1. Пусть (X, d) является полным сепарабельным метрическим пространством с борелевской σ -алгеброй \mathcal{X} . Пусть P – марковское ядро на (X, \mathcal{X}) . Обозначим $\Omega = X^{\mathbb{N}}$, $\mathfrak{F} = \mathcal{X}^{\mathbb{N}}$, и пусть $(X_k)_{k=0}^\infty$ является координатным процессом, а $\mathfrak{F}_k = \sigma(X_\ell, \ell \leq k)$ – естественная фильтрация. Тогда для любой вероятностной меры ξ на (X, \mathcal{X}) существует единственная вероятностная мера \mathbb{P}_ξ на $(X^{\mathbb{N}}, \mathcal{X}^{\otimes \mathbb{N}})$, такая что координатный процесс $(X_k)_{k=0}^\infty$ является марковским процессом с ядром P и начальным распределением ξ . Обозначим через \mathbb{E}_ξ соответствующее математическое ожидание. Мы рассмотрим случай, когда ядро P является W_p^d -равномерно эргодическим для $p = 1$ или $p = 2$.

W 1 (p). *Существует точка $x_0 \in X$, такая что $\int_X d(x_0, x)P(x_0, dx) < \infty$, и константа $\Delta_p(P) \in [0, 1)$, такая что*

$$\sup_{(x, x') \in X^2, x \neq x'} \frac{W_p^d(\delta_x P, \delta_{x'} P)}{d(x, x')} = \Delta_p(P).$$

Из [38, Теорема 20.3.4] следует, что если условие W 1 (p) выполнено для некоторого $p \geq 1$, то для ядра P существует единственное инвариантное распределение π . Более того, $\pi \in \mathbb{S}_p(X, d)$, и для любого распределения $\xi \in \mathbb{S}_p(X, d)$,

$$W_p^d(\xi P^n, \pi) \leq \Delta_p^n(P) W_p^d(\xi, \pi), \quad n \in \mathbb{N}. \quad (5.9)$$

Для упрощения записи мы будем писать $\Delta_p = \Delta_p(P)$. Мы начнем с общего результата для марковских ядер, удовлетворяющих W 1 (2). Мы покажем, что это условие влечет CS 1 и CD 1 для класса \mathcal{H} , являющегося подклассом липшицевых функций, и докажем экспоненциальное неравенство концентрации для $V_n(h)$, $h \in \mathcal{H}$. Как было показано в [78] и [36], для изучения концентрации W_2^d -эргодичных цепей Маркова удобно использовать транспортные–информационные неравенства.

Определение 5.2. *Для $p \geq 1$, будем говорить, что мера $\mu \in \mathbb{M}_1(X)$ удовлетворяет L^p -транспортному–информационному неравенству с константой $\alpha > 0$, если для всех $\nu \in \mathbb{M}_1(X)$, $W_p^d(\mu, \nu) \leq \sqrt{2\alpha \text{KL}(\nu|\mu)}$. Для краткости будем писать $\mu \in T_p(\alpha)$.*

L^p -транспортные–информационные неравенства хорошо изучены в литературе, см., например, [4]. Случаи $p = 1$ и $p = 2$ представляют собой особый интерес. Соотношения между $T_1(\alpha)$ и неравенствами концентрации получены в [70] и [17]. В частности, известно, что $T_1(\alpha)$ эквивалентно гауссовской концентрации для всех липшицевых функций, см. [17]. Можно показать, что $T_2(\alpha)$ сильнее чем $T_1(\alpha)$. $T_2(\alpha)$ было получено для стандартной гауссовской

меры на \mathbb{R}^d в работе [105]. Далее, результат Бакри-Эмери [3] влечет, что мера $\pi(dx) = e^{-U(x)}dx$ удовлетворяет $T_2(\alpha)$, если $\nabla^2 U \geq \alpha^{-1}I$, см. [4, Глава 9.6]. Известно, $T_2(\alpha)$ устойчиво относительно независимой и марковской тензоризации; см. [85] и [36].

Основной результат для W_2^d -эргодических цепей Маркова представлен ниже.

Утверждение 5.3. Пусть $\mathcal{H} \subseteq \text{Lip}_d(L)$ и предположим, что выполнено условие $W1(2)$. Тогда, для любого начального распределения $\xi \in \mathbb{S}_2(X, d)$, выполнено условие $CS1$, в котором

$$\rho^{(h)}(\ell) = \mathbb{E}_\pi[\tilde{h}(X_0)\tilde{h}(X_{|\ell|})], \quad R = A_1 L^2 (1 - \Delta_2)^{-1} W_2(\xi, \pi), \quad (5.10)$$

где A_1 – константа, явный вид которой можно найти в [11][Формула A.12]. Далее, выполнено условие $CD1$, в котором

$$\varsigma = L\sqrt{D} \left[\int \{W_2^d(\delta_x, \pi)\}^2 \pi(dx) \right]^{1/2}, \quad \lambda = \Delta_2, \quad D = \sup_{h \in \mathcal{H}} \text{Var}_\pi(h). \quad (5.11)$$

Наконец, если $P(x, \cdot) \in T_2(\alpha)$ для любого $x \in X$ и некоторого $\alpha > 0$, тогда для любого начального распределения $\xi \in T_2(\alpha)$, $n \in \mathbb{N}$ и $t > 0$,

$$\mathbb{P}_\xi(|V_n(h) - \mathbb{E}_\xi[V_n(h)]| \geq t) \leq 2 \exp\left(-\frac{(1 - \Delta_2)^2 n t^2}{c \alpha L^2 b_n^2 (D + R n^{-1} + t)}\right), \quad (5.12)$$

где $c > 0$ – абсолютная константа.

Отметим, что достаточно ограничительное условие $P(x, \cdot) \in T_2(\alpha)$ может быть ослаблено. Также можно заменить $W1(2)$ на $W1(1)$. Однако, в этом случае условия $CS1$ и $CD1$ могут быть проверены для множества \mathcal{H} , являющегося подмножеством ограниченных липшецевых функций. Также в этом случае удастся проверить более слабую концентрацию, чем в (5.12).

Утверждение 5.4. Пусть $\mathcal{H} \subset \text{Lip}_{b,d}(L, B)$ и предположим, что имеет место условие $W1(1)$. Тогда для любого начального распределения $\xi \in \mathbb{S}_1(X, d)$ выполнено условие $CS1$, в котором

$$\rho^{(h)}(\ell) = \mathbb{E}_\pi[\tilde{h}(X_0)\tilde{h}(X_{|\ell|})], \quad R = A_2 B (1 - \Delta_1^{1/2})^{-1}, \quad (5.13)$$

где A_2 – константа, явный вид которой можно найти в [11][Eq. A.18]. Далее, выполнено условие $CD1$, в котором

$$\varsigma = 2LB \int W_1^d(\delta_x, \pi) \pi(dx), \quad \lambda = \Delta_1, \quad D = \sup_{h \in \mathcal{H}} \text{Var}_\pi(h). \quad (5.14)$$

Наконец, для любого $p \in \mathbb{N}$,

$$\mathbb{P}_\xi(|V_n(h) - \mathbb{E}_\xi[V_n(h)]| \geq t) \leq \frac{C_{R,1}^p B^{2p} b_n^{3p/2} p^p}{n^{p/2} t^p} + \frac{C_{R,2}^p B^{2p} b_n^{2p} p^{2p}}{n^{p-1} t^p}, \quad (5.15)$$

где константы $C_{R,1}$ и $C_{R,2}$ определены в [11][Формула A.28].

5.2.1 Динамика Ланжевена

Рассмотрим случай $X = \mathbb{R}^d$ и предположим, что распределение π имеет п.в. положительную плотность относительно меры Лебега, т.е. $\pi(\theta) = Z^{-1} e^{-U(\theta)}$,

где $Z = \int e^{-U(\vartheta)} d\vartheta$ – нормировочная константа. Рассмотрим дискретизацию СДУ Ланжевена (5.4),

$$\theta_{k+1} = \theta_k - \gamma \nabla U(\theta_k) + \sqrt{2\gamma} \xi_{k+1}, \quad (5.16)$$

где параметр $\gamma > 0$ отвечает за шаг дискретизации и $(\xi_k)_{k=1}^\infty$ – последовательность н.о.р. стандартных гауссовских d -мерных векторов. Инвариантное распределение для марковской цепи (5.16) отличается от исходного распределения π , но сходится к последнему при $\gamma \rightarrow 0$ и некоторых дополнительных предположениях на потенциал U . Идея генерировать данные из распределения π с помощью (5.16) восходит к работе [93]. В этой работе данный алгоритм получил название Unadjusted Langevin Algorithm (ULA). Рассмотрим следующее предположения на потенциал U .

ULA 1. *Функция U непрерывно дифференцируемая в \mathbb{R}^d и ее градиент ∇U удовлетворяет следующим условиям:*

- 1) *Липшицевость:* Существует константа $L_U > 0$, такая что для всех $\theta, \theta' \in \mathbb{R}^d$ выполняется $\|\nabla U(\theta) - \nabla U(\theta')\| \leq L_U \|\theta - \theta'\|$;
- 2) *Сильная выпуклость:* существует константа $m_U > 0$, такая что для всех $\theta, \theta' \in \mathbb{R}^d$ выполняется $U(\theta') \geq U(\theta) + \langle \nabla U(\theta), \theta' - \theta \rangle + (m_U/2) \|\theta' - \theta\|^2$.

Исследованию алгоритма ULA при сформулированных выше условиях посвящены работы [40] и [31]. В частности, в работе [40] показано, что марковское ядро $P_\gamma^{(\text{ULA})}$ является W_2^d -равномерно эргодичным в предположении ULA1. Для удобства читателя, мы сформулируем соответствующее утверждение (см. [40, Утверждение 3]).

Утверждение 5.5. *Пусть выполнено ULA 1 и положим $\kappa = 2m_U L_U / (m_U + L_U)$. Тогда для любого шага $\gamma \in (0, 2/(m_U + L_U))$, $P_\gamma^{(\text{ULA})}$ удовлетворяет W_1 (2), в котором $d(\vartheta, \vartheta') = \|\vartheta - \vartheta'\|$ и $\Delta_2 = \sqrt{1 - \kappa\gamma}$. Далее, $P_\gamma^{(\text{ULA})}$ допускает единственное инвариантное распределение $\pi_\gamma^{(\text{ULA})}$.*

В работе [40, Следствие 7] показано, что для любого шага $\gamma \in (0, 2/(m_U + L_U))$,

$$W_2^d(\pi, \pi_\gamma^{(\text{ULA})}) \leq \sqrt{2}\kappa^{-1/2} L_U \gamma^{1/2} \{\kappa^{-1} + \gamma\}^{1/2} \{2d + dL_U^2 \gamma / m_U + dL_U^2 \gamma^2 / 6\}^{1/2}.$$

Определим соответствующую асимптотическую дисперсию

$$V_\infty^{(\text{ULA})}(h) := \sum_{\ell \in \mathbb{Z}} \mathbb{E}_{\pi_\gamma^{(\text{ULA})}} \left[(h(X_0) - \pi_\gamma^{(\text{ULA})}(f)) (h(X_{|\ell|}) - \pi_\gamma^{(\text{ULA})}(f)) \right].$$

Так как на каждом шаге алгоритма ULA вычисляется значение градиента ∇U , то естественным способом выбора контрольной переменной является метод, основанный на уравнении Стейна (см, например, [1], [79] и [84]),

$$g_\phi(\theta) = -\langle \phi(\theta), \nabla U(\theta) \rangle + \text{div}(\phi(\theta)), \quad (5.17)$$

где $\phi : \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{R}^d$ непрерывно дифференцируемая липшицева функция и $\text{div}(\phi)$ – дивергенция ϕ . При достаточно общих предположениях на π и ϕ , интегрирование по частям ведет к соотношению $\pi(g_\phi) = 0$ (см. [79, Утверждения 1 и 2]). Заметим, что если $\phi(\theta) \equiv b$, $b \in \mathbb{R}^d$, то $g_b(\theta) = -\langle b, \nabla U(\theta) \rangle$. Предположим, что $f \in \text{Lip}_d(L_1)$ и выполнено условие ULA 1. Тогда для параметрического класса $\mathcal{H} = \{f - g_b : \|b\| \leq B\}$, справедливо $\mathcal{H} \subset \text{Lip}_d(\max(L_1, BL_U))$. Существуют и другие способы построения контрольных переменных. Мы отправляем заинтересованных читателей обратиться к работам [57], [34] и [21]. Из Теоремы 5.1 и Утверждения 5.3 следует основной результат раздела.

Теорема 5.2. Пусть $\mathcal{H} \subset \text{Lip}_d(L)$ и предположим, что выполнено ULA 1. Дополнительно предположим, что $\xi \in T_2(\beta)$ для некоторого $\beta > 0$. Зафиксируем произвольное $\gamma \in (0, 2/(m_U + L_U))$ и положим $b_n = 2\lceil \log(n)/\log(1/\Delta_2) \rceil$, где $\Delta_2 = \sqrt{1 - \kappa\gamma}$ и $\kappa = 2m_U L_U/(m_U + L_U)$. Тогда, для любого $\varepsilon > 0$ и $\delta \in (0, 1)$, с вероятностью не менее $1 - \delta$ выполнено

$$\begin{aligned} V_\infty^{(\text{ULA})}(\widehat{h}_{n,\varepsilon}) - \inf_{h \in \mathcal{H}} V_\infty^{(\text{ULA})}(h) \\ \lesssim \mathbf{C}_1 \varepsilon \log(n) + \mathbf{C}_2 \sqrt{\frac{\log^2(n) \log(|\mathcal{H}_\varepsilon|/\delta)}{n}} + \mathbf{C}_3 \frac{\log^2(n) \log(|\mathcal{H}_\varepsilon|/\delta)}{n}, \end{aligned}$$

где

$$\mathbf{C}_1 = \frac{\sqrt{R} + \sqrt{D}}{\kappa\gamma}, \quad \mathbf{C}_2 = \frac{L\sqrt{(\beta \vee \gamma)(D+R)}}{\kappa^2\gamma^2} + \frac{\sqrt{DR}}{\kappa\gamma}, \quad \mathbf{C}_3 = \frac{L^2(\beta \vee \gamma)}{\kappa^4\gamma^4} + \frac{R}{\kappa\gamma} + \frac{\varsigma}{\kappa^2\gamma^2}.$$

Здесь R, ς определены в Утверждении 5.3 и $D = \sup_{h \in \mathcal{H}} \text{Var}_{\pi_\gamma^{(\text{ULA})}}(h)$.

Следствие 5.6. В условиях Теоремы 5.2:

1) если класс \mathcal{H} является параметрическим, т.е. $|\mathcal{H}_\varepsilon| \leq C_\rho \varepsilon^{-\rho}$ для всех $\varepsilon \in (0, 1)$ и некоторых констант $C_\rho, \rho > 0$, то с вероятностью не менее $1 - 1/n$,

$$V_\infty^{(\text{ULA})}(\widehat{h}_{n,\varepsilon}) - \inf_{h \in \mathcal{H}} V_\infty^{(\text{ULA})}(h) \lesssim n^{-1/2} \log^{1/2}(n),$$

2) если класс \mathcal{H} является непараметрическим, т.е. $|\mathcal{H}_\varepsilon| \leq C_\rho \exp(\varepsilon^{-\rho})$ для всех $\varepsilon \in (0, 1)$ и некоторых констант $C_\rho, \rho > 0$, тогда с вероятностью не менее $1 - 1/n$,

$$V_\infty^{(\text{ULA})}(\widehat{h}_{n,\varepsilon}) - \inf_{h \in \mathcal{H}} V_\infty^{(\text{ULA})}(h) \lesssim n^{-1/(2+\rho)}.$$

Здесь \lesssim обозначает неравенство, выполненное с точностью до некоторых констант, зависящих от ρ и других констант из Теоремы 5.2. Далее, если константа $\pi_\gamma^{(\text{ULA})}(f)$ лежит в классе \mathcal{H} , то $\inf_{h \in \mathcal{H}} V_\infty^{(\text{ULA})}(h) = 0$ и указанные выше оценки выполнены для асимптотической дисперсии.

5.2.2 Обобщения на случай стохастического градиента

В настоящем разделе мы рассмотрим случай, когда π является апостериорной плотностью в задачах байесовского оценивания, т.е. $\pi(\theta) \propto \exp(-U(\theta))$, где $U(\theta) = U_0(\theta) + \sum_{i=1}^K U_i(\theta)$ и K – число наблюдений. Вычисление $\nabla U(\theta)$ в каждой точке требует линейного по K количества операций. Следовательно, алгоритм ULA является неэффективным в данном случае. Одним из возможных подходов, предложенным в [111], является замена $\nabla U(\theta)$ на несмещенную оценку. Шаг такого алгоритма имеет вид

$$\begin{aligned} \theta_{k+1} &= \theta_k - \gamma G(\theta_k, S_{k+1}) + \sqrt{2\gamma} \xi_{k+1}, \\ G(\theta, S) &= \nabla U_0(\theta) + KM^{-1} \sum_{i \in S} \nabla U_i(\theta), \end{aligned} \tag{5.18}$$

где каждый набор индексов $S_{k+1} \subset S_M$ (здесь S_M множество всех подмножеств S множества $\{1, \dots, K\}$, таких что $|S| = M$) получен независимо от \mathcal{F}_k (здесь $(\mathcal{F}_k)_{k \geq 0}$ естественная фильтрация процесса $\{(\theta_\ell, S_\ell)\}_{\ell \geq 0}$) из равномерного распределения на S_M . Заметим, что $\mathbb{E}[G(\theta_k, S_{k+1}) | \mathcal{F}_k] = \nabla U(\theta_k)$, т.е. $G(\theta_k, S_{k+1})$ является несмещенной оценкой градиента $\nabla U(\theta_k)$. Такой алгоритм

мы будем называть динамикой Ланжевена со стохастическим градиентом (англ. Stochastic Gradient Langevin Dynamics или, кратко, SGLD). Отметим также другие подходы, в которых вместо стохастического градиента (5.18) используются более сложные оценки градиента, имеющие меньшую дисперсию. В работе [2] предложен метод SGLD с неподвижной точкой (SGLD fixed-point или SGLD-FP). Этот метод применяется в случае, если апостериорное распределение является сильно логарифмически вогнутым. Зафиксируем точку $\hat{\theta} \in \Theta$. Обычно эта точка выбирается вблизи моды апостериорного распределения. Оценим градиент $\nabla U(\theta)$ с помощью

$$G_{\text{FP}}(\theta, S) = \nabla U_0(\theta) + KM^{-1} \sum_{i \in S} (\nabla U_i(\theta) - \nabla U_i(\hat{\theta})) + \sum_{i=1}^K \nabla U_i(\hat{\theta}). \quad (5.19)$$

Алгоритм SGLD-FP получается подстановкой данной оценки в (5.18).

Более сложные методы снижения дисперсии используют референсные значения $(g_k^i)_{i=1}^K$ градиента $(\nabla U_i)_{i=1}^K$ из предыдущих итераций (и не только с последней итерации); как следствие, полученная последовательность $(\theta_k)_{k=0}^\infty$ может не являться марковской. Популярным примером служит алгоритм SAGALD, [94, 33]. Если $i \in S_k$, то референсное значение обновляется, т.е., $g_{k+1}^i = \nabla U_i(\theta_k)$. Иначе, референсное значение остается неизменным, т.е., $g_{k+1}^i = g_k^i$. В качестве оценки градиента берется следующая

$$G_{\text{SAGA}}^k(\theta, S) = \nabla U_0(\theta) + KM^{-1} \sum_{i \in S} (\nabla U_i(\theta) - g_k^i) + g_k, \quad g_k = \sum_{i=1}^K g_k^i. \quad (5.20)$$

Рекурсивная последовательность инициализируется с помощью $g_0^i = \nabla U_i(\theta_0)$, $i \in \{1, \dots, K\}$, и $g_0 = \sum_{i=1}^K g_0^i$. Далее, градиент вычисляется по формуле (5.20) и подставляется в (5.18).

Для теоретического анализа алгоритмов SGLD и SGLD-FP нам понадобится следующие условия. Для простоты мы рассмотрим только алгоритм SGLD. Выкладки для SGLD-FP проводятся аналогичным образом.

SGLD1. Функция $U(\theta) = U_0(\theta) + \sum_{i=1}^K U_i(\theta)$ удовлетворяет следующим условиям.

- 1) *Липшицевость градиента:* для любого $i \in \{0, \dots, K\}$, U_i непрерывно дифференцируемы в \mathbb{R}^d и существует константа $\tilde{L}_U > 0$, такая что для всех $\theta, \theta' \in \mathbb{R}^d$ выполняется $\|\nabla U_i(\theta) - \nabla U_i(\theta')\| \leq \tilde{L}_U \|\theta - \theta'\|$;
- 2) *Выпуклость:* для любого $i \in \{0, \dots, K\}$, U_i выпуклая функция;
- 3) *Сильная выпуклость:* существует константа $m_U > 0$, такая что для всех $\theta, \theta' \in \mathbb{R}^d$ выполнено $U(\theta') \geq U(\theta) + \langle \nabla U(\theta), \theta' - \theta \rangle + (m_U/2) \|\theta' - \theta\|^2$.

Перейдем к построению контрольных переменных. Следуя работе [45], мы заменим ∇U на выборочный аналог $G(\theta, S)$. Тогда контрольная переменная имеет вид

$$g_\phi(\theta, S) = -\langle \phi(\theta), G(\theta, S) \rangle + \text{div}(\phi(\theta)). \quad (5.21)$$

Контрольная переменная g_ϕ зависит от пары (θ, S) . Пусть $\mathcal{H} = \{f(\theta) - g_\phi(x) : \phi \in \Phi\}$, где $x = (\theta, S) \in \mathbf{X} = \Theta \times \mathbf{S}_M$. Рассмотрим другую последовательность $(\tilde{S}_k)_{k=0}^\infty$ независимых наборов индексов, равномерно распределенных на \mathbf{S}_M , таких что для любого k , \tilde{S}_k не зависит от \mathcal{F}_k . Обозначим через P_{SGLD} марковское ядро алгоритма SGLD, и пусть Υ_M обозначает равномерное распределение на \mathbf{S}_M . Положим $\bar{P} := P_{\text{SGLD}} \otimes \Upsilon_M$ и определим $X_k = (\theta_k, \tilde{S}_k)$.

Утверждение 5.7. Пусть выполнено условие SGLD1. Тогда для любого шага $\gamma \in (0, \tilde{L}_U^{-1}(K+1)^{-1})$, \bar{P} удовлетворяет W1 (2) с $\Delta_2 = \sqrt{1 - \gamma m_U}$ и $\mathbf{d}(x, x') = \|\vartheta - \vartheta'\| + \mathbf{b}1_{S \neq S'}$ для любых $x = (\vartheta, S)$ и $x' = (\vartheta', S')$. Далее, \bar{P} допускает единственное инвариантное распределение $\bar{\pi} = \pi_\gamma^{(\text{SGLD})} \otimes \Upsilon_M$.

Определим соответствующую асимптотическую дисперсию

$$V_\infty^{(\text{SGLD})}(h) := \sum_{\ell \in \mathbb{Z}} \mathbb{E}_{\bar{\pi}} \left[(h(X_0) - \bar{\pi}(f))(h(X_{|\ell|}) - \bar{\pi}(f)) \right].$$

Теорема 5.3. Пусть $\mathcal{H} \subseteq \text{Lip}_{b,d}(L, B)$ и предположим, что имеет место условие SGLD1. Зафиксируем $\gamma \in (0, \tilde{L}_U^{-1}(K+1)^{-1})$ и положим $b_n = 2\lceil \log(n)/\log(1/\Delta_1) \rceil$, где $\Delta_1 = \sqrt{1 - \gamma m_U}$. Тогда, для всех $\varepsilon > 0$ и $\delta \in (0, 1)$, с вероятностью не менее $1 - \delta$

$$\begin{aligned} & V_\infty^{(\text{SGLD})}(\hat{h}_{n,\varepsilon}) - \inf_{h \in \mathcal{H}} V_\infty^{(\text{SGLD})}(h) \\ & \lesssim C_4 \varepsilon \log(n) + C_5 \sqrt{\frac{\log^5(n)}{n}} \left(\frac{|\mathcal{H}_\varepsilon|}{\delta} \right)^{1/\log(n)} + C_6 \frac{\log n}{n}, \end{aligned}$$

где

$$C_4 = \frac{\sqrt{R} + \sqrt{D}}{m_U \gamma}, \quad C_5 = \frac{B^2 R_1(L, \xi)}{(m_U \gamma)^2} + \frac{B^2 R_2(L, \xi)}{(m_U \gamma)^{4+2/\log n}} + \frac{\sqrt{RD}}{m_U \gamma}, \quad C_6 = \frac{D(m_U \gamma) + \varsigma}{(m_U \gamma)^2}.$$

Константы R, ς определены в Утверждении 5.4, $D = \sup_{h \in \mathcal{H}} \text{Var}_{\pi_\gamma^{(\text{SGLD})}}(h)$, и $R_1(L, \xi), R_2(L, \xi)$ могут быть найдены в [11][Формула A.27].

Следствие 5.8. Пусть выполнены условия Теоремы 5.3 и класс \mathcal{H} является параметрическим, т.е. $|\mathcal{H}_\varepsilon| \leq C_\rho \varepsilon^{-\rho}$ для всех $\varepsilon \in (0, 1)$ и некоторой константы $C_\rho, \rho > 0$. Тогда с вероятностью не менее $1 - 1/n$,

$$V_\infty^{(\text{SGLD})}(\hat{h}_{n,\varepsilon}) - \inf_{h \in \mathcal{H}} V_\infty^{(\text{SGLD})}(h) \lesssim n^{-1/2} \log^{5/2}(n).$$

Здесь \lesssim обозначает неравенство, выполненное с точностью до некоторых констант, зависящих от ρ и других констант из Теоремы 5.3. Далее, если дополнительно потребовать, что $\bar{\pi}(f) \in \mathcal{H}$, тогда $\inf_{h \in \mathcal{H}} V_\infty^{(\text{SGLD})}(h) = 0$ и указанные выше оценки выполнены для асимптотической дисперсии.

Замечание 1. Если класс \mathcal{H} строится с помощью контрольных переменных Стейна, то можно гарантировать, что $\mathcal{H} \subseteq \text{Lip}_{b,d}(L, B)$, если взять гладкие функции ϕ с компактным носителем (например, применяя к гладкой функции ϕ сглаживающий оператор).

5.3 Эксперименты

В этом разделе мы численно сравним два метода снижения дисперсии: метод снижения эмпирической дисперсии (EVM), в котором контрольная переменная находится с помощью минимизации маргинальной дисперсии, см. (5.1), и метод ESVM, см. (5.6). Численные реализации доступны по ссылке https://github.com/svsamsonov/vr_sg_mcmc.

5.3.1 Игрушечный пример

Рассмотрим мультимодальное распределение в \mathbb{R}^2 из работы [91]. Пусть $\pi(x_1, x_2) = Z^{-1} e^{-U(x_1, x_2)}$, где Z – нормировочная константа и

$$U(x_1, x_2) = \frac{(\|x\| - \mu)^2}{2M^2} - \log \left(e^{-(x_1 - \mu)^2 / 2\sigma^2} + e^{-(x_1 + \mu)^2 / 2\sigma^2} \right).$$

Выберем $M = 1$ и $\mu = \sigma = 3$. Линии уровни плотности изображены на Рисунке 2. Оценим $\pi(f)$ для функции $f(x_1, x_2) = x_1 + x_2$, используя алгоритм ULA. Параметрический класс g_φ в (5.17) строится с помощью функций $\varphi(x) = \sum_{k=1}^p \beta_k \psi_k(x)$, где $\psi_k = e^{-\|x - \mu_k\|^2 / 2\sigma_\psi^2}$, μ_k являются центрами равномерной решетки в $[-3, 3] \times [-3, 3]$ и $\sigma_\psi = 2$. Доверительные интервалы, построенные по 100 оценкам с помощью методов EVM и ESVM представлены на Рисунке 2. На этом же рисунке справа представлены автоковариационные функции для траекторий, полученных без и с добавлением контрольных переменных, построенных с помощью методов ESVM and EVM. Из рисунка видно, что автоковариации высоких порядков быстро убывают для метода ESVM. Отметим, что метод EVM минимизирует только маргинальную дисперсию (соответствующую автоковариации нулевого порядка).

Эксперимент	n_{burn}	n_{test}	γ	размер пакета
Игрушечный пример, раздел 5.3.1	10^3	10^4	0.1	-
Гауссовская смесь, раздел 5.3.2	10^4	10^5	0.01	10

Таблица 3: Гиперпараметры экспериментов

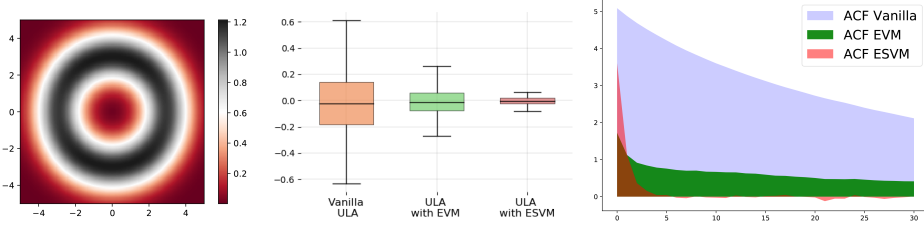


Рис. 2: Игрушечный пример, раздел 5.3.1. Слева направо: (1) профиль плотности, (2) доверительные интервалы, построенные по 100 оценкам для простой ULA, ULA с EVM и ULA с ESVM, (3) выборочные автоковариационные функции для траектории с и без добавления контрольных переменных, построенных с помощью ESVM и EVM.

5.3.2 Модель гауссовских смесей

Рассмотрим задачу оценивания среднего значения апостериорного распределения для неизвестного параметра μ , построенного по заданной выборке $(X_k)_{k=0}^{K-1}$, $K = 100$, из смеси нормальных распределений

$$0.5 \mathcal{N}(-\mu, \sigma^2) + 0.5 \mathcal{N}(\mu, \sigma^2) \quad \text{с параметрами } \mu = 1, \sigma^2 = 1,$$

и в качестве априорного распределения μ выбирается $\mathcal{N}(0, \sigma_\mu^2)$, $\sigma_\mu^2 = 100$. Плотность апостериорного распределения для параметра μ представлена на Рисунке 3. Это распределение имеет две моды, соответствующие $\mu = 1$ и $\mu = -1$. Для генерирования выборки из апостериорного распределения мы используем алгоритм SGLD. Параметрический класс g_φ в (5.21) строится с помощью функций $\varphi(x) = \beta_0 x^2 + \beta_1 x + \beta_2$. Доверительные интервалы построены по 100 оценкам, полученным с помощью методов EVM и ESVM, а также автоковариационные функции представлены на Рисунке 3. Отметим, что увеличение автоковариации 0-го порядка у алгоритма ESVM объясняется дополнительной случайностью в (5.21).

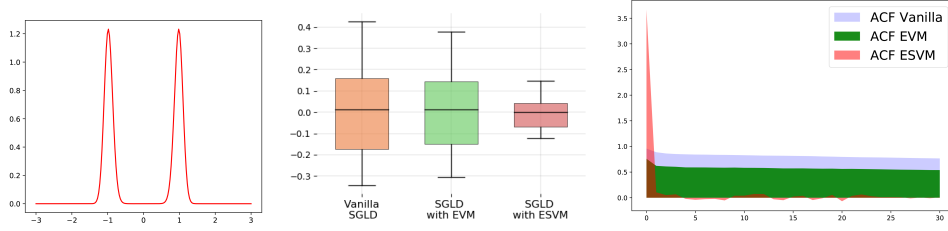


Рис. 3: Модель гауссовских смесей, раздел 5.3.2. Слева направо: (1) плотность апостериорного распределения, (2) доверительные множества, построенные по 100 оценкам для простого SGLD, SGLD с применением EVM и SGLD с применением ESVM, (3) выборочные автоковариационные функции для траектории с и без добавления контрольных переменных, построенных с помощью ESVM и EVM.

5.3.3 Байесовская логистическая регрессия

Имеется набор зависимых переменных $y_i \in \{-1, 1\}$, $i = 1, \dots, K$, набор независимых переменных $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$ и неизвестный вектор параметров θ . Вероятностная модель задается с помощью условной вероятности $p(y_i | \mathbf{x}_i, \theta) = (1 + e^{-y_i \langle \theta, \mathbf{x}_i \rangle})^{-1}$. В качестве априорного распределения на параметр θ рассматривается $\mathcal{N}_d(0, g(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1})$, где $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N]$ матрица размера $K \times d$, а g некоторый параметр, см. [56, Раздел 2]. Положим $\tilde{\mathbf{x}}_i = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1/2} \mathbf{x}_i$ и $\tilde{\theta} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{1/2} \theta$. Тогда $\langle \theta, \mathbf{x}_i \rangle = \langle \tilde{\theta}, \tilde{\mathbf{x}}_i \rangle$ и $\tilde{\theta} \sim \mathcal{N}_d(0, g\mathbf{I}_d)$.

Мы будем сравнивать методы EVM и ESVM на двух наборах данных из базы данных UCI. Первый набор данных называется EEG и содержит $N = 14980$ наблюдений в размерности $d = 15$. Второй набор данных называется SUSY и содержит $N = 500000$ наблюдений в размерности $d = 19$. Сначала мы разобьем данные на обучающую выборку $\mathcal{T}_N^{\text{train}} = [(y_i, \mathbf{x}_i)]_{i=1}^N$ и тестовую $\mathcal{T}_K^{\text{test}} = [(y'_i, \mathbf{x}'_i)]_{i=1}^K$, выбрав случайно $K = 100$ наблюдений из данных. Далее, мы используем алгоритмы SGLD-FP и SAGA-LD для получения выборки из апостериорного распределения $p(\tilde{\theta} | \mathcal{T}_N^{\text{train}})$. С помощью полученной выборки $(\tilde{\theta}_k)_{k=0}^{n-1}$ мы оценим предсказание для фиксированной точки из тестовой выборки (y', \mathbf{x}') , то есть $p(y' | \mathbf{x}') = \int_{\mathbb{R}^d} p(y' | \mathbf{x}', \tilde{\theta}) p(\tilde{\theta} | \mathcal{T}_N^{\text{train}}) d\tilde{\theta}$, вычислив оценку $n^{-1} \sum_{k=0}^{n-1} f(\tilde{\theta}_k)$ для $f(\tilde{\theta}) = p(y' | \mathbf{x}', \tilde{\theta})$. Мы также оценим среднее предсказаний по всему тестовому набору $\mathcal{T}_K^{\text{test}}$, вычислив оценку $f(\tilde{\theta}) = K^{-1} \sum_{i=1}^K p(y'_i | \mathbf{x}'_i, \tilde{\theta})$. Доверительные интервалы для среднего предсказания приведены на Figure 4. Заметим, что алгоритм ESVM значительно уменьшает дисперсию для SGLD-FP и SAGA-LD.

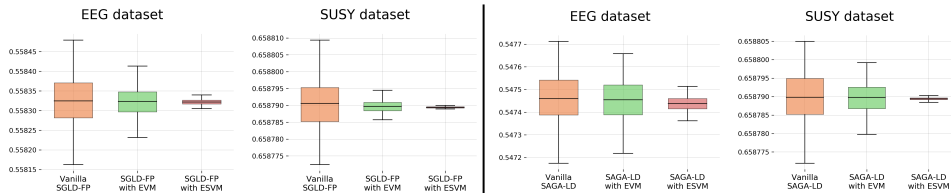


Рис. 4: Байесовская логистическая регрессия для наборов данных EEG и SUSY, раздел 5.3.3. Доверительные интервалы, построенные по 100 оценкам среднего предсказания (1) левая половина: простой SGLD-FP, SGLD-FP с EVM и SGLD-FP с ESVM, (2) правая половина: простой SAGA-LD, SAGA-LD с EVM и SAGA-LD с ESVM.

Для набора данных EEG на Рисунке 5 представлены траектории $f(\tilde{\theta}_m) = K^{-1} \sum_{i=1}^K p(y'_i | \mathbf{x}'_i, \tilde{\theta}_m)$ для 500 последовательных наблюдений $\tilde{\theta}_m$ с добавлением

и без добавления контрольных переменных, полученных с помощью алгоритма ESVM. Мы также приводим графики соответствующих выборочных автоковариационных функций. Снова, так как алгоритм EVM пытается минимизировать только 0-ую автоковариацию, то автоковариационная функция убывает медленнее, чем для алгоритма ESVM. На Рисунке 6 показана как меняется автоковариационная функция при изменении размера пакета. Отметим, что даже для малых размеров пакетов алгоритм ESVM может убрать корреляции, а алгоритм EVM практически не справляется.

Эксперимент	n_{burn}	n_{train}	n_{test}	γ	размер пакета
Логистическая регрессия, набор данных EEG	10^4	10^4	10^5	0.1	15
Логистическая регрессия, набор данных SUSY	10^5	10^5	10^6	0.1	50

Таблица 4: Гиперпараметры экспериментов

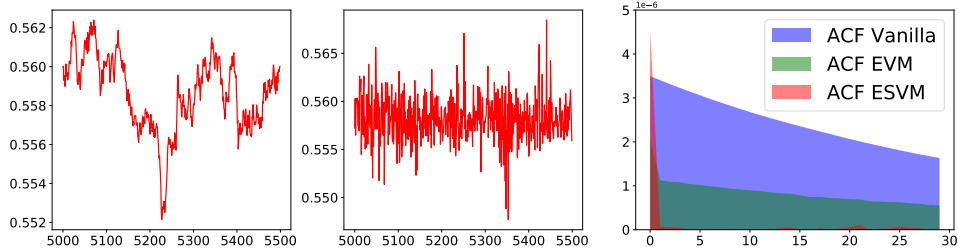


Рис. 5: Байесовская логистическая регрессия для набора данных Section 5.3.3. Слева направо: (1) часть траектории без алгоритма ESVM, (2) часть траектории с алгоритмом ESVM, (3) выборочные автоковариационные функции для траектории с и без добавления контрольных переменных, построенных с помощью ESVM и EVM.

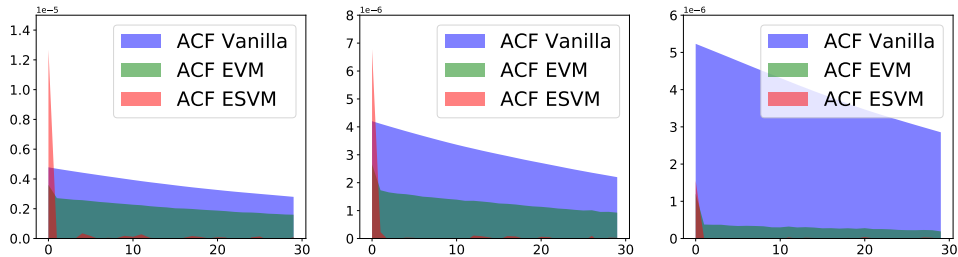


Рис. 6: Байесовская логистическая регрессия для набора данных EEG, раздел 5.3.3. Сравнение графиков автоковариационных функций для разных размеров пакетов. Слева направо: размер пакета 5, 15, 150 соответственно.

5.3.4 Байесовская вероятностная матричная факторизация

Байесовская матричная факторизация: Классической задачей в рекомендательных системах является предсказание оценки клиента какого-то товара по оценкам данного товара другими пользователями. Распространенным подходом к этой задаче является матричная факторизация с помощью байесовского вывода; см., например, [97].

Более конкретно: нас интересует аппроксимация матрицы $R \in \mathbb{R}^{M \times N}$, где M — количество клиентов, N — количество товаров и где $R_{i,j}$ является оценкой i -ого клиента j -ого товара. Так как обычно клиенты не оценивают все товары, мы наблюдаем только часть матрицы R и хотим предсказать возможные оценки в оставшейся части. В задаче матричной факторизации матрица R

представляется в виде $R = U^T V + C$, где $U \in \mathbb{R}^{D \times M}$, $V \in \mathbb{R}^{D \times N}$ и $C \in \mathbb{R}^{M \times N}$ — матрица смещений с элементами $C_{i,j} = a_i + b_j$, $a \in \mathbb{R}^M$, $b \in \mathbb{R}^N$. В экспериментах мы предполагаем, что ранг матрицы D равен 10. Наивным решением данной задачи был бы поиск

$$U, V, a, b = \operatorname{argmin}_{U, V, a, b} \sum_{(i,j) \in I_{\text{train}}} (R_{i,j} - \langle U_i, V_j \rangle - a_i - b_j)^2,$$

где I_{train} — обучающая выборка оценок. К сожалению, данный оптимизационный критерий приводит к значительному переобучению модели.

$$U, V, a, b = \operatorname{arg} \min_{U, V, a, b} \sum_{(i,j) \in I_{\text{train}}} (R_{i,j} - \langle U_i, V_j \rangle - a_i - b_j)^2 + \lambda_U \|U\|^2 + \lambda_V \|V\|^2 + \lambda_a \|a\|^2 + \lambda_b \|b\|^2,$$

Возможным подходом к уменьшению переобучения является пенализация модели:

$$U, V, a, b = \operatorname{arg} \min_{U, V, a, b} \sum_{(i,j) \in I_{\text{train}}} (R_{i,j} - \langle U_i, V_j \rangle - a_i - b_j)^2 + \lambda_U \|U\|^2 + \lambda_V \|V\|^2 + \lambda_a \|a\|^2 + \lambda_b \|b\|^2,$$

но это требует тщательного подбора коэффициентов $\lambda_U, \lambda_V, \lambda_a, \lambda_b$. Байесовский подход имеет преимущество, так как для него не нужно подбирать коэффициенты; см., например, [97]. Мы рассмотрим упрощенную модель из [28]:

$$\lambda_U, \lambda_V, \lambda_a, \lambda_b \sim \Gamma(1, 1), \quad U_{k,i} \sim \mathcal{N}(0, \lambda_U^{-1}), \quad V_{k,j} \sim \mathcal{N}(0, \lambda_V^{-1}), \\ a_i \sim \mathcal{N}(0, \lambda_a^{-1}), \quad b_j \sim \mathcal{N}(0, \lambda_b^{-1}), \quad R_{i,j} | U, V \sim \mathcal{N}(\langle U_i, V_j \rangle + a_i + b_j, \tau^{-1}).$$

Для генерации выборки из апостериорного распределения $p(\Theta | R)$ с $\Theta = \{U, V, a, b, \lambda_U, \lambda_V, \lambda_a, \lambda_b\}$ мы будем использовать следующую двухшаговую процедуру:

1. Сгенерируем $p(U, V, a, b | R, \lambda_U, \lambda_V, \lambda_a, \lambda_b)$ используя SGLD или SGLD-FP с размером блоков 5000 с шагом $\gamma = 10^{-4}$. Сгенерируем 1000 шагов до обновления весов $\lambda_U, \lambda_V, \lambda_a, \lambda_b$;
2. Сгенерируем новый λ из $p(\lambda_U, \lambda_V, \lambda_a, \lambda_b | U, V, a, b)$, используя метод Гиббса.

Работа алгоритма тестируется на наборе данных Movielen $ml - 100k$. Следуя работе [2], мы применим контрольные переменные на этапе пост-обработки. Целевой функцией является среднеквадратичная ошибка на тестовой выборке, $f(U, V, a, b) = \sum_{(i,j) \in I_{\text{test}}} (R_{i,j} - \langle U_i, V_j \rangle - a_i - b_j)^2$. В силу того, что размерность вектора параметров очень высокая, мы рассматриваем контрольные переменные только первого порядка. Часть траектории, полученная с помощью алгоритмов SGLD- и SGLD-FP до и после добавления контрольной переменной, а также соответствующие доверительные интервалы представлены на Figure 7.

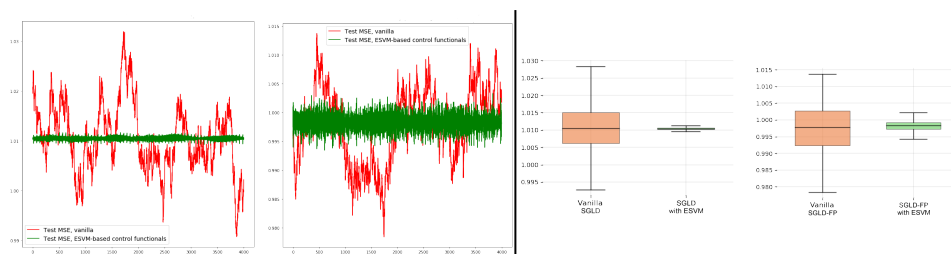


Рис. 7: Байесовская вероятностная матричная факторизация, раздел 5.3.4. Левая половина: тестовая MSE траектория для алгоритмов SGLD (слева) и SGLD-FP (справа) с и без добавления ESVM. Правая половина: доверительные интервалы для тестовой MSE траектории для алгоритмов SGLD (слева) и SGLD-FP (справа).

6 Заключение

Настоящая диссертационная работа основана на публикациях [48, 81, 83, 82, 8, 11, 64, 42, 41, 49].

Перечислим основные полученные в данной диссертации результаты, которые выносятся на защиту:

1. Оптимальные неасимптотические оценки на расстояние Колмогорова между гауссовскими мерами шаров в гильбертовом пространстве
2. Оценки в неравенстве анти-концентрации для квадрата нормы нецентрированного гауссовского элемента в гильбертовом пространстве.
3. Бутстреп метод для построения доверительных интервалов для проекторов ковариационной матрицы
4. Экспоненциальная устойчивость последовательностей матрично-значных функций, управляемых последовательность н.о.р. наблюдений или цепью Маркова с произвольным (возможно неограниченным) пространством состояний
5. Неасимптотические оценки на p -ый момент ошибки ЛСА алгоритма с фиксированным или невозрастающим шагом, управляемого н.о.р. или марковским шумом
6. Новый метод снижения дисперсии для аддитивных функционалов от зависимых последовательностей.

7 Благодарность

Диссертация выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

Список литературы

- [1] Roland Assaraf и Michel Caffarel. “Zero-variance principle for Monte Carlo algorithms”. В: *Phys. Rev. Lett.* 83.23 (1999), с. 4682–4685.
- [2] Jack Baker, Paul Fearnhead, Emily B Fox и Christopher Nemeth. “Control variates for stochastic gradient MCMC”. В: *Statistics and Computing* 29.3 (2019), с. 599–615.
- [3] Dominique Bakry и Michel Émery. “Diffusions hypercontractives”. В: *Séminaire de probabilités de Strasbourg* 19 (1985), с. 177–206.
- [4] Dominique Bakry, Ivan Gentil и Michel Ledoux. *Analysis and geometry of Markov diffusion operators*. Т. 348. Springer Science & Business Media, 2013.
- [5] Keith Ball. “The reverse isoperimetric problem for Gaussian measure”. В: *Discrete Comput. Geom.* 10.4 (1993), с. 411–420. ISSN: 0179-5376. DOI: 10.1007/BF02573986. URL: <https://doi.org/10.1007/BF02573986>.
- [6] Eduard Belitser. “On coverage and local radial rates of credible sets”. В: *Ann. Statist.* 45.3 (2017), с. 1124–1151. ISSN: 0090-5364. DOI: 10.1214/16-AOS1477. URL: <https://doi.org/10.1214/16-AOS1477>.
- [7] D Belomestny, L Iosipoi и N Zhivotovskiy. “Variance reduction via empirical variance minimization: convergence and complexity”. В: *arXiv preprint, arXiv:1712.04667* (2017).

- [8] D. Belomestny, L. Iosipoi, E. Moulines, A. Naumov и S. Samsonov. “Variance reduction for Markov chains with application to MCMC”. B: *Stat. Comput.* 30.4 (2020), c. 973–997. ISSN: 0960-3174. DOI: 10.1007/s11222-020-09931-z. URL: <https://doi.org/10.1007/s11222-020-09931-z>.
- [9] D. Belomestny, L. Iosipoi, E. Moulines, A. Naumov и S. Samsonov. “Variance reduction for Markov chains with application to MCMC”. B: *Statistics and Computing* 30.4 (2020), c. 973–997.
- [10] D. V. Belomestny, L. S. Iosipoi и N. K. Zhivotovskiy. “Variance Reduction in Monte Carlo Estimators via Empirical Variance Minimization”. B: *Doklady Mathematics* 98.2 (2018), c. 494–497.
- [11] Denis Belomestny, Leonid Iosipoi, Eric Moulines, Alexey Naumov и Sergey Samsonov. “Variance Reduction for Dependent Sequences with Applications to Stochastic Gradient MCMC”. B: *SIAM/ASA J. Uncertain. Quantif.* 9.2 (2021), c. 507–535. DOI: 10.1137/19M1301199. URL: <https://doi.org/10.1137/19M1301199>.
- [12] V. Bentkus. “A Lyapunov type bound in \mathbf{R}^d ”. B: *Teor. Veroyatn. Primen.* 49.2 (2004), c. 400–410. ISSN: 0040-361X. DOI: 10.1137/S0040585X97981123. URL: <https://doi.org/10.1137/S0040585X97981123>.
- [13] V. Bentkus. “On the dependence of the Berry-Esseen bound on dimension”. B: *J. Statist. Plann. Inference* 113.2 (2003), c. 385–402. ISSN: 0378-3758. DOI: 10.1016/S0378-3758(02)00094-0. URL: [https://doi.org/10.1016/S0378-3758\(02\)00094-0](https://doi.org/10.1016/S0378-3758(02)00094-0).
- [14] A. Benveniste, M. Métivier и P. Priouret. *Adaptive algorithms and stochastic approximations*. Т. 22. Springer Science & Business Media, 2012.
- [15] D. P. Bertsekas и J. N. Tsitsiklis. *Neuro-dynamic programming*. Belmont, MA: Athena Scientific, 1996.
- [16] J. Bhandari, D. Russo и R. Singal. “A Finite Time Analysis of Temporal Difference Learning With Linear Function Approximation”. B: *Conference On Learning Theory*. 2018, c. 1691–1692.
- [17] S. G. Bobkov и F. Götze. “Exponential Integrability and Transportation Cost Related to Logarithmic Sobolev Inequalities”. English (US). B: *Journal of Functional Analysis* 163.1 (апр. 1999), c. 1–28. ISSN: 0022-1236.
- [18] Sergey G. Bobkov, Alexey A. Naumov и Vladimir V. Ulyanov. “Two-sided inequalities for the density function’s maximum of weighted sum of chi-square variables”. B: *arXiv e-prints*, arXiv:2012.10747 (дек. 2020), arXiv:2012.10747. arXiv: 2012.10747 [math.PR].
- [19] Vladimir I. Bogachev. *Gaussian measures*. Т. 62. Mathematical Surveys and Monographs. American Mathematical Society, Providence, RI, 1998, c. xii+433. ISBN: 0-8218-1054-5. DOI: 10.1090/surv/062. URL: <https://doi.org/10.1090/surv/062>.
- [20] Dominique Bontemps. “Bernstein-von Mises theorems for Gaussian regression with increasing number of regressors”. B: *Ann. Statist.* 39.5 (2011), c. 2557–2584. ISSN: 0090-5364. DOI: 10.1214/11-AOS912. URL: <https://doi.org/10.1214/11-AOS912>.
- [21] Nicolas Brosse, Alain Durmus, Sean Meyn и Eric Moulines. “Diffusion approximations and control variates for MCMC”. B: *arXiv preprint, arXiv:1808.01665* (2018).
- [22] Nicolas Brosse, Alain Durmus и Eric Moulines. “The promises and pitfalls of Stochastic Gradient Langevin Dynamics”. B: *Proceedings of the 32nd International Conference on Neural Information Processing Systems*. NIPS’18. 2018, c. 8278–8288.

- [23] Ismaël Castillo. “A semiparametric Bernstein–von Mises theorem for Gaussian process priors”. B: *Probab. Theory Related Fields* 152.1-2 (2012), c. 53–99. ISSN: 0178-8051. DOI: 10.1007/s00440-010-0316-5. URL: <https://doi.org/10.1007/s00440-010-0316-5>.
- [24] Ismaël Castillo и Richard Nickl. “Nonparametric Bernstein-von Mises theorems in Gaussian white noise”. B: *Ann. Statist.* 41.4 (2013), c. 1999–2028. ISSN: 0090-5364. DOI: 10.1214/13-AOS1133. URL: <https://doi.org/10.1214/13-AOS1133>.
- [25] Siddharth Chandak и Vivek S. Borkar. “Concentration of Contractive Stochastic Approximation and Reinforcement Learning”. B: *arXiv:2106.14308* (2021).
- [26] Niladri S Chatterji, Nicolas Flammarion, Yi-An Ma, Peter L Bartlett и Michael I Jordan. “On the Theory of Variance Reduction for Stochastic Gradient Monte Carlo”. B: *Proceedings of Machine Learning Research* 80 (2018).
- [27] S. Chen, A. Devraj, A. Busic и S. Meyn. “Explicit mean-square error bounds for monte-carlo and linear stochastic approximation”. B: *International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*. PMLR. 2020, c. 4173–4183.
- [28] Tianqi Chen, Emily B. Fox и Carlos Guestrin. “Stochastic Gradient Hamiltonian Monte Carlo”. B: *Proceedings of the 31st International Conference on International Conference on Machine Learning - Volume 32*. ICML’14. 2014, c. 1683–1691.
- [29] Victor Chernozhukov, Denis Chetverikov и Kengo Kato. “Central limit theorems and bootstrap in high dimensions”. B: *Ann. Probab.* 45.4 (2017), c. 2309–2352. ISSN: 0091-1798. DOI: 10.1214/16-AOP1113. URL: <https://doi.org/10.1214/16-AOP1113>.
- [30] Gal Dalal, Balázs Szörényi, Gugan Thoppe и Shie Mannor. “Finite sample analyses for TD(0) with function approximation”. B: *Thirty-Second AAAI Conference on Artificial Intelligence*. 2018.
- [31] Arnak Dalalyan. “Theoretical guarantees for approximate sampling from smooth and log-concave densities”. B: *Journal of the Royal Statistical Society Series B (Statistical Methodology)* 79.3 (2017), c. 651–676.
- [32] Arnak S. Dalalyan и Avetik G. Karagulyan. “User-friendly guarantees for the Langevin Monte Carlo with inaccurate gradient”. B: *Stoch. Proc. Appl.* 129.12 (2019), c. 5278–5311.
- [33] Aaron Defazio, Francis Bach и Simon Lacoste-Julien. “SAGA: A Fast Incremental Gradient Method with Support for Non-Strongly Convex Composite Objectives”. B: *Advances in Neural Information Processing Systems*. 2014, c. 1646–1654.
- [34] Petros Dellaportas и Ioannis Kontoyiannis. “Control variates for estimation based on reversible Markov chain Monte Carlo samplers”. B: *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)* 74.1 (2012), c. 133–161.
- [35] B. Delyon и A. Yuditsky. “On Small Perturbations of Stable Markov Operators: Unbounded Case”. B: *Theory Probab. Appl.* 43.4 (1999), c. 577–587.
- [36] H. Djellout, A. Guillin и L. Wu. “Transportation cost-information inequalities and applications to random dynamical systems and diffusions”. B: *Ann. Probab.* 32.3B (2004), c. 2702–2732. ISSN: 0091-1798.
- [37] Thinh T Doan. “Finite-Time Analysis and Restarting Scheme for Linear Two-Time-Scale Stochastic Approximation”. B: *arXiv preprint arXiv:1912.10583* (2019).

- [38] Randal Douc, Eric Moulines, Pierre Priouret и Philippe Soulier. *Markov chains*. Springer Series in Operations Research and Financial Engineering. Springer, Cham, 2018, с. xviii+757. ISBN: 978-3-319-97703-4; 978-3-319-97704-1.
- [39] Kumar Avinava Dubey, Sashank J Reddi, Sinead A Williamson, Barnabas Poczos, Alexander J Smola и Eric P Xing. “Variance Reduction in Stochastic Gradient Langevin Dynamics”. В: *Advances in Neural Information Processing Systems*. 2016, с. 1154–1162.
- [40] Alain Durmus и Eric Moulines. “High-dimensional Bayesian inference via the Unadjusted Langevin Algorithm”. В: *Bernoulli* 25.4A (нояб. 2019), с. 2854–2882.
- [41] Alain Durmus, Eric Moulines, Alexey Naumov, Sergey Samsonov, Kevin Scaman и Hoi-To Wai. “Tight High Probability Bounds for Linear Stochastic Approximation with Fixed Stepsize”. В: *NeurIPS*. 2021.
- [42] Alain Durmus, Eric Moulines, Alexey Naumov, Sergey Samsonov и Hoi-To Wai. “On the Stability of Random Matrix Product with Markovian Noise: Application to Linear Stochastic Approximation and TD Learning”. В: *Proceedings of Thirty Fourth Conference on Learning Theory*. Под ред. Mikhail Belkin и Samory Kpotufe. Т. 134. Proceedings of Machine Learning Research. PMLR, 15–19 Aug 2021, с. 1711–1752. URL: <https://proceedings.mlr.press/v134/durmus21a.html>.
- [43] E. Eweda и O. Macchi. “Quadratic mean and almost-sure convergence of unbounded stochastic approximation algorithms with correlated observations”. В: *Ann. Inst. H. Poincaré Sect. B (N.S.)* 19.3 (1983), с. 235–255. ISSN: 0020-2347.
- [44] James M. Flegal и Galin L. Jones. “Batch means and spectral variance estimators in Markov chain Monte Carlo”. В: *Ann. Statist.* 38.2 (апр. 2010), с. 1034–1070.
- [45] Nial Friel, Antonietta Mira и Chris. J. Oates. “Exploiting Multi-Core Architectures for Reduced-Variance Estimation with Intractable Likelihoods”. В: *Bayesian Analysis* 11.1 (2015), с. 215–245.
- [46] Paul Glasserman. *Monte Carlo Methods in Financial Engineering*. Т. 53. Springer Science & Business Media, 2013.
- [47] Emmanuel Gobet. *Monte-Carlo Methods and Stochastic Processes*. CRC Press, Boca Raton, FL, 2016, с. xxv+309. ISBN: 978-1-4987-4622-9.
- [48] Friedrich Götze, Alexey Naumov, Vladimir Spokoiny и Vladimir Ulyanov. “Large ball probabilities, Gaussian comparison and anti-concentration”. В: *Bernoulli* 25.4A (2019), с. 2538–2563. ISSN: 1350-7265. DOI: 10.3150/18-BEJ1062. URL: <https://doi.org/10.3150/18-BEJ1062>.
- [49] Friedrich Götze, Alexey Naumov и Alexander Tikhomirov. “Distribution of linear statistics of singular values of the product of random matrices”. В: *Bernoulli* 23.4B (2017), с. 3067–3113. ISSN: 1350-7265. DOI: 10.3150/16-BEJ837. URL: <https://doi.org/10.3150/16-BEJ837>.
- [50] Friedrich Götze и Andrei Yu. Zaitsev. “New applications of Arak’s inequalities to the Littlewood-Offord problem”. В: *Eur. J. Math.* 4.2 (2018), с. 639–663. ISSN: 2199-675X. DOI: 10.1007/s40879-018-0215-3. URL: <https://doi.org/10.1007/s40879-018-0215-3>.
- [51] L. Guo. “Stability of recursive stochastic tracking algorithms”. В: *SIAM Journal on Control and Optimization* 32.5 (1994), с. 1195–1225.

- [52] L. Guo и L. Ljung. “Exponential stability of general tracking algorithms”. В: *IEEE Transactions on Automatic Control* 40.8 (1995), с. 1376–1387.
- [53] L. Guo и L. Ljung. “Performance analysis of general tracking algorithms”. В: *IEEE Transactions on Automatic Control* 40.8 (1995), с. 1388–1402.
- [54] H. Gupta, R Srikant и L. Ying. “Finite-time performance bounds and adaptive learning rate selection for two time-scale reinforcement learning”. В: *Advances in Neural Information Processing Systems*. 2019, с. 4706–4715.
- [55] Ramon van Handel. “Structured random matrices”. В: *Convexity and concentration*. Т. 161. IMA Vol. Math. Appl. Springer, New York, 2017, с. 107–156.
- [56] Timothy E Hanson, Adam J Branscum, Wesley O Johnson и др. “Informative g -Priors for Logistic Regression”. В: *Bayesian Analysis* 9.3 (2014), с. 597–612.
- [57] Shane G Henderson. “Variance reduction via an approximating Markov process”. Дис. . . . док. Stanford University, 1997.
- [58] De Huang, Jonathan Niles-Weed, Joel A Tropp и Rachel Ward. “Matrix Concentration for Products”. В: *arXiv preprint arXiv:2003.05437* (2020).
- [59] B. Jacob и H. Zwart. *Linear Port-Hamiltonian Systems on Infinite-dimensional Spaces*. Operator Theory: Advances and Applications 223. 10.1007/978-3-0348-0399-1. Springer, 2012. ISBN: 978-3-0348-0398-4. DOI: 10.1007/978-3-0348-0399-1.
- [60] Norman L. Johnson, Samuel Kotz и N. Balakrishnan. *Continuous univariate distributions. Vol. 1*. Second. Wiley Series in Probability and Mathematical Statistics: Applied Probability and Statistics. A Wiley-Interscience Publication. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1994, с. xxii+756. ISBN: 0-471-58495-9.
- [61] Rie Johnson и Tong Zhang. “Accelerating Stochastic Gradient Descent Using Predictive Variance Reduction”. В: *Advances in Neural Information Processing Systems*. 2013, с. 315–323.
- [62] Iain M. Johnstone. “High dimensional Bernstein–von Mises: simple examples”. В: *Borrowing strength: theory powering applications—a Festschrift for Lawrence D. Brown*. Т. 6. Inst. Math. Stat. (IMS) Collect. Inst. Math. Statist., Beachwood, OH, 2010, с. 87–98.
- [63] M. Kaledin, E. Moulines, A. Naumov, V. Tadic и Hoi-To Wai. “Finite time analysis of linear two-timescale stochastic approximation with Markovian noise”. В: *Conference On Learning Theory*. 2020.
- [64] Maxim Kaledin, Eric Moulines, Alexey Naumov, Vladislav Tadic и Hoi-To Wai. “Finite Time Analysis of Linear Two-timescale Stochastic Approximation with Markovian Noise”. В: *Proceedings of Thirty Third Conference on Learning Theory*. Под ред. Jacob Abernethy и Shivani Agarwal. Т. 125. Proceedings of Machine Learning Research. PMLR, 2020, с. 2144–2203. URL: <http://proceedings.mlr.press/v125/kaledin20a.html>.
- [65] Vladimir Koltchinskii и Karim Lounici. “Concentration inequalities and moment bounds for sample covariance operators”. В: *Bernoulli* 23.1 (2017), с. 110–133. ISSN: 1350-7265. DOI: 10.3150/15-BEJ730. URL: <https://doi.org/10.3150/15-BEJ730>.
- [66] Vladimir Koltchinskii и Karim Lounici. “Normal approximation and concentration of spectral projectors of sample covariance”. В: *Ann. Statist.* 45.1 (2017), с. 121–157. ISSN: 0090-5364. DOI: 10.1214/16-AOS1437. URL: <https://doi.org/10.1214/16-AOS1437>.

- [67] I. Kontoyiannis и S. Meyn. “Large deviations asymptotics and the spectral theory of multiplicatively regular Markov processes”. B: *Electronic Journal of Probability* 10 (2005), с. 61–123.
- [68] I. Kontoyiannis и S. P. Meyn. “Spectral theory and limit theorems for geometrically ergodic Markov processes”. B: *Ann. Appl. Probab.* 13.1 (2003), с. 304–362. ISSN: 1050-5164. DOI: 10.1214/aoap/1042765670. URL: <https://doi.org/10.1214/aoap/1042765670>.
- [69] C. Lakshminarayanan и C. Szepesvari. “Linear stochastic approximation: How far does constant step-size and iterate averaging go?” B: *International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*. 2018, с. 1347–1355.
- [70] M. Ledoux. *The Concentration of Measure Phenomenon*. Т. 89. AMS Surveys и Monographs, 2001.
- [71] Michel Ledoux и Michel Talagrand. *Probability in Banach spaces*. Classics in Mathematics. Isoperimetry and processes, Reprint of the 1991 edition. Springer-Verlag, Berlin, 2011, с. xii+480. ISBN: 978-3-642-20211-7.
- [72] W. V. Li и Q.-M. Shao. “Gaussian processes: inequalities, small ball probabilities and applications”. B: *Stochastic processes: theory and methods*. Т. 19. Handbook of Statist. North-Holland, Amsterdam, 2001, с. 533–597. DOI: 10.1016/S0169-7161(01)19019-X. URL: [https://doi.org/10.1016/S0169-7161\(01\)19019-X](https://doi.org/10.1016/S0169-7161(01)19019-X).
- [73] Mikhail Lifshits. *Lectures on Gaussian processes*. SpringerBriefs in Mathematics. Springer, Heidelberg, 2012, с. x+121. ISBN: 978-3-642-24938-9; 978-3-642-24939-6. DOI: 10.1007/978-3-642-24939-6. URL: <https://doi.org/10.1007/978-3-642-24939-6>.
- [74] Lennart Ljung. “Recursive identification algorithms”. B: *Circuits, Systems and Signal Processing* 21.1 (2002), с. 57–68.
- [75] Yi-An Ma, Tianqi Chen и Emily Fox. “A Complete Recipe for Stochastic Gradient MCMC”. B: *Advances in Neural Information Processing Systems*. 2015, с. 2917–2925.
- [76] Odile Macchi и Eweda Eweda. “Second-order convergence analysis of stochastic adaptive linear filtering”. B: *IEEE Transactions on Automatic Control* 28.1 (1983), с. 76–85.
- [77] A. S. Markus. “Eigenvalues and singular values of the sum and product of linear operators”. B: *Uspehi Mat. Nauk* 19.4 (118) (1964), с. 93–123. ISSN: 0042-1316.
- [78] K. Marton. “Bounding \bar{d} -distance by informational divergence: a method to prove measure concentration”. B: *Ann. Probab.* 24.2 (amp. 1996), с. 857–866.
- [79] Antonietta Mira, Reza Solgi и Daniele Imparato. “Zero variance Markov chain Monte Carlo for Bayesian estimators”. B: *Statistics and Computing* 23.5 (2013), с. 653–662.
- [80] Tigran Nagapetyan, Andrew B Duncan, Leonard Hasenclever, Sebastian J Vollmer, Lukasz Szpruch и Konstantinos Zygalakis. “The True Cost of Stochastic Gradient Langevin Dynamics”. B: *arXiv preprint, arXiv:1706.02692* (2017).
- [81] A. A. Naumov, V. G. Spokoiny, Yu. E. Tavyrikov и V. V. Ulyanov. “Nonasymptotic Estimates for the Closeness of Gaussian Measures on Balls”. B: *Doklady Mathematics* 98.2 (2018), с. 490–493. DOI: 10.1134/S1064562418060248. URL: <https://doi.org/10.1134/S1064562418060248>.

- [82] A. A. Naumov, V. G. Spokoyny и V. V. Ulyanov. “Confidence Sets for Spectral Projectors of Covariance Matrices”. B: *Doklady Mathematics* 98.2 (2018), с. 511–514. DOI: 10.1134/S1064562418060285. URL: <https://doi.org/10.1134/S1064562418060285>.
- [83] Alexey Naumov, Vladimir Spokoyny и Vladimir Ulyanov. “Bootstrap confidence sets for spectral projectors of sample covariance”. B: *Probab. Theory Related Fields* 174.3-4 (2019), с. 1091–1132. ISSN: 0178-8051. DOI: 10.1007/s00440-018-0877-2. URL: <https://doi.org/10.1007/s00440-018-0877-2>.
- [84] Chris J Oates, Mark Girolami и Nicolas Chopin. “Control functionals for Monte Carlo integration”. B: *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)* 79.3 (2017), с. 695–718.
- [85] F. Otto и C. Villani. “Generalization of an Inequality by Talagrand and Links with the Logarithmic Sobolev Inequality”. B: *Journal of Functional Analysis* 173.2 (2000), с. 361–400.
- [86] Maxim Panov и Vladimir Spokoyny. “Finite sample Bernstein–von Mises theorem for semiparametric problems”. B: *Bayesian Anal.* 10.3 (2015), с. 665–710. ISSN: 1936-0975. DOI: 10.1214/14-BA926. URL: <https://doi.org/10.1214/14-BA926>.
- [87] G. Pflug. “Stochastic Minimization with Constant Step-Size: Asymptotic Laws”. B: *SIAM Journal on Control and Optimization* 24.4 (1986), с. 655–666. DOI: 10.1137/0324039. eprint: <https://doi.org/10.1137/0324039>. URL: <https://doi.org/10.1137/0324039>.
- [88] A. S. Poznyak. *Advanced Mathematical Tools for Automatic Control Engineers: Deterministic Techniques*. Oxford: Elsevier, 2008.
- [89] P. Priouret и A. Veretenikov. “A remark on the stability of the LMS tracking algorithm”. B: *Stochastic analysis and applications* 16.1 (1998), с. 119–129.
- [90] Yuri V. Prokhorov и Vladimir V. Ulyanov. “Some approximation problems in statistics and probability”. B: *Limit theorems in probability, statistics and number theory*. T. 42. Springer Proc. Math. Stat. Springer, Heidelberg, 2013, с. 235–249. DOI: 10.1007/978-3-642-36068-8_11. URL: https://doi.org/10.1007/978-3-642-36068-8_11.
- [91] Danilo Jimenez Rezende и Shakir Mohamed. “Variational Inference with Normalizing Flows”. B: *arXiv preprint arXiv:1505.05770* (2015).
- [92] Christian P. Robert и George Casella. *Monte Carlo Statistical Methods*. Springer, New York, 1999.
- [93] G. O. Roberts и R. L. Tweedie. “Exponential convergence of Langevin distributions and their discrete approximations”. B: *Bernoulli* 2.4 (1996), с. 341–363. ISSN: 1350-7265.
- [94] Nicolas L. Roux, Mark Schmidt и Francis R. Bach. “A Stochastic Gradient Method with an Exponential Convergence Rate for Finite Training Sets”. B: *Advances in Neural Information Processing Systems* 25. 2012, с. 2663–2671.
- [95] Reuven Y. Rubinstein и Dirk P. Kroese. *Simulation and the Monte Carlo Method*. T. 10. John Wiley & Sons, 2016.
- [96] Mark Rudelson и Roman Vershynin. “The Littlewood–Offord problem and invertibility of random matrices”. B: *Adv. Math.* 218.2 (2008), с. 600–633. ISSN: 0001-8708. DOI: 10.1016/j.aim.2008.01.010. URL: <https://doi.org/10.1016/j.aim.2008.01.010>.
- [97] R. Salakhutdinov и A. Mnih. “Bayesian Probabilistic Matrix Factorization Using Markov Chain Monte Carlo”. B: *Proceedings of the 25th International Conference on Machine Learning (ICML-08)*. 2008, с. 880–887.

- [98] Vjačeslav V. Sazonov. *Normal approximation—some recent advances*. T. 879. Lecture Notes in Mathematics. Springer-Verlag, Berlin-New York, 1981, c. vii+105. ISBN: 3-540-10863-7.
- [99] Jun Shao. *Mathematical statistics*. Second. Springer Texts in Statistics. Springer-Verlag, New York, 2003, c. xvi+591. ISBN: 0-387-95382-5. DOI: 10.1007/b97553. URL: <https://doi.org/10.1007/b97553>.
- [100] Vladimir Spokoiny. “Penalized maximum likelihood estimation and effective dimension”. B: *Ann. Inst. Henri Poincaré Probab. Stat.* 53.1 (2017), c. 389–429. ISSN: 0246-0203. DOI: 10.1214/15-AIHP720. URL: <https://doi.org/10.1214/15-AIHP720>.
- [101] Vladimir Spokoiny и Mayya Zhilova. “Bootstrap confidence sets under model misspecification”. B: *Ann. Statist.* 43.6 (2015), c. 2653–2675. ISSN: 0090-5364. DOI: 10.1214/15-AOS1355. URL: <https://doi.org/10.1214/15-AOS1355>.
- [102] R. Srikant и Lei Ying. “Finite-Time Error Bounds For Linear Stochastic Approximation and TD Learning”. B: *Conference on Learning Theory*. 2019.
- [103] Richard S. Sutton. “Learning to predict by the methods of temporal differences”. B: *Machine Learning* 3.1 (авг. 1988), c. 9–44. ISSN: 1573-0565. DOI: 10.1007/BF00115009.
- [104] Richard S. Sutton и Andrew G. Barto. *Reinforcement Learning: An Introduction*. Second. The MIT Press, 2018.
- [105] M. Talagrand. “Transportation cost for Gaussian and other product measures”. B: *Geom. Funct. Anal.* 6.3 (1996), c. 587–600. ISSN: 1016-443X.
- [106] Yee Whye Teh, Alexandre H Thiery и Sebastian J Vollmer. “Consistency and Fluctuations for Stochastic Gradient Langevin Dynamics”. B: *The Journal of Machine Learning Research* 17.1 (2016), c. 193–225.
- [107] Joel A. Tropp. “User-friendly tail bounds for sums of random matrices”. B: *Found. Comput. Math.* 12.4 (2012), c. 389–434. ISSN: 1615-3375. DOI: 10.1007/s10208-011-9099-z. URL: <https://doi.org/10.1007/s10208-011-9099-z>.
- [108] J. N. Tsitsiklis и B. Van Roy. “An analysis of temporal-difference learning with function approximation”. B: *IEEE Transactions on Automatic Control* 42.5 (май 1997), c. 674–690. ISSN: 2334-3303. DOI: 10.1109/9.580874.
- [109] S. Varadhan. *Large deviations and applications*. SIAM, 1984.
- [110] Roman Vershynin. “Introduction to the non-asymptotic analysis of random matrices”. B: *Compressed sensing*. Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2012, c. 210–268.
- [111] M. Welling и Y. W. Teh. “Bayesian Learning via Stochastic Gradient Langevin Dynamics”. B: *Proceedings of the 28th International Conference on Machine Learning (ICML-11)*. 2011, c. 681–688.
- [112] Tengyu Xu, Shaofeng Zou и Yingbin Liang. “Two time-scale off-policy TD learning: Non-asymptotic analysis over Markovian samples”. B: *Advances in Neural Information Processing Systems*. 2019, c. 10633–10643.
- [113] Vadim Yurinsky. *Sums and Gaussian vectors*. T. 1617. Lecture Notes in Mathematics. Springer-Verlag, Berlin, 1995, c. xii+305. ISBN: 3-540-60311-5. DOI: 10.1007/BFb0092599. URL: <https://doi.org/10.1007/BFb0092599>.
- [114] Difan Zou, Pan Xu и Quanquan Gu. “Subsampled Stochastic Variance-Reduced Gradient Langevin Dynamics”. B: *International Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence*. 2018.