

О скорости сходимости эмпирических байесовских оценок

В. Казакявичюс (ВУ)

В статье рассматривается задача эмпирического байесовского оценивания вещественного параметра при квадратической функции потерь. Доказано, что в широком классе параметрических моделей не существует эмпирических байесовских оценок, сходящихся к байесовской оценке со скоростью $O(n^{-1})$.

Сначала напомним необходимые понятия из теории эмпирического байесовского оценивания.

Пусть $(x_1, \theta_1), \dots, (x_n, \theta_n)$, (x, θ) суть независимые одинаково распределенные случайные векторы со значениями в $X \times \Theta$, где X есть произвольное измеримое пространство, а $\Theta \subset \mathbb{R}$. На основании значений x_1, \dots, x_n и x нужно оценить ненаблюдаемое значение θ .

Пусть, далее, $(P_\theta | \theta \in \Theta)$ есть измеримое семейство распределений на X , описывающее условное распределение x относительно θ , а Π – некоторое множество априорных распределений на Θ . Каждое $\pi \in \Pi$ индуцирует интегральный оператор M_π в пространстве измеримых функций на $(X \times \Theta)^{n+1}$, действующий по формуле

$$M_\pi f(x_1, \theta_1, \dots, x_n, \theta_n, x, \theta) \\ = \int d\pi(\theta_1) dP_{\theta_1}(x_1) \dots d\pi(\theta) dP_\theta(x) f(x_1, \theta_1, \dots, x_n, \theta_n, x, \theta).$$

Далее будем считать, что семейство (P_θ) доминировано некоторой σ -конечной мерой μ и через p_θ обозначим плотность P_θ относительно μ .

Хорошо известно, что среднеквадратический риск эмпирической оценки $t_n(x_1, \dots, x_n, x)$ разлагается в сумму

$$M_\pi (t_n(x_1, \dots, x_n, x) - \theta)^2 = M_\pi (t_n(x_1, \dots, x_n, x) - \hat{\theta}_\pi(x))^2 + M_\pi (\hat{\theta}_\pi(x) - \theta)^2, \quad (1)$$

где

$$\hat{\theta}_\pi(x) = \frac{\int \theta p_\theta(x) d\pi(\theta)}{\int p_\theta(x) d\pi(\theta)}$$

есть байесовская оценка параметра θ , соответствующая априорному распределению π .

Поскольку π считается неизвестным, оценка $\hat{\theta}_\pi$ не может быть вычислена. Для оценивания неизвестного априорного распределения (или, точнее, функции $\hat{\theta}_\pi$) и предназначен так называемый архив x_1, \dots, x_n . Из (1) следует, что эмпирическая оценка

тем лучше, чем меньше она отклоняется от байесовской. Поэтому качество эмпирической оценки $t_n(x_1, \dots, x_n, x)$ естественно измерять величиной

$$\rho(t_n) = \sup_{\pi \in \Pi} M_{\pi}(t_n(x_1, \dots, x_n, x) - \hat{\theta}_{\pi}(x))^2.$$

Для любого $\theta \in \Theta$ обозначим

$$B(\theta) = \left\{ \theta' \in \Theta \mid \int_{\{p_{\theta'} \neq 0\}} p_{\theta'} d\mu = 1, \int_{\{p_{\theta'} \neq 0\}} p_{\theta'}^2 / p_{\theta} d\mu < \infty \right\}.$$

Основной наш результат содержится в следующей теореме.

ТЕОРЕМА. Если $\theta_1, \dots, \theta_k \in B(\theta_0)$, $P_{\theta_i} \neq P_{\theta_j}$ при $i \neq j$ и Π содержит все априорные распределения, сосредоточенные в $\{\theta_0, \dots, \theta_k\}$, то для любой эмпирической оценки t_n справедливо неравенство

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} n\rho(t_n) \geq \sum_{i=1}^k (\theta_i - \theta_0)^2.$$

Следствие. Если $P_{\theta} \neq P_{\theta'}$ при $\theta \neq \theta'$, Π содержит все априорные распределения, сосредоточенные в конечных подмножествах Θ , и для некоторого $\theta_0 \in \Theta$ множество $B(\theta_0)$ несчетно, то не существует эмпирических оценок, сходящихся к байесовской со скоростью $O(n^{-1})$.

В качестве примера рассмотрим задачу оценивания среднего нормального распределения при известной дисперсии σ_0^2 . Здесь $X = \Theta = \mathbb{R}$, μ – мера Лебега и

$$p_{\theta}(x) = \exp\{-(x - \theta)^2 / (2\sigma_0^2)\}.$$

Поскольку

$$\int \frac{p_{\theta}^2(x)}{p_{\theta_0}(x)} dx = \int \exp\left\{-\frac{x^2}{2\sigma_0^2} + \frac{2\theta - \theta_0}{\sigma_0^2}x - \frac{2\theta^2 - \theta_0^2}{2\sigma_0^2}\right\} dx < \infty,$$

то $B(\theta_0) = \Theta = \mathbb{R}$ и из сформулированного выше следствия вытекает, что в "непараметрическом случае" (т.е. когда множество априорных распределений достаточно велико) $n\rho(t_n) \rightarrow \infty$ для любой эмпирической оценки t_n .

Этот пример типичен для экспоненциальных семейств и поэтому наш результат подтверждает одно из предположений Сингха [5].

Теперь докажем основную нашу теорему.

Пусть

$$U = \left\{ u \in \mathbb{R}^k \mid u_1, \dots, u_k > 0, \sum_{i=1}^k u_i < 1 \right\}$$

и π_u (для $u \in \bar{U}$) есть такое распределение на $\{\theta_0, \dots, \theta_k\}$, что $\pi_u(\{\theta_i\}) = u_i$ для $i = 1, \dots, k$ (и, следовательно, $\pi_u(\{\theta_0\}) = 1 - \sum_{i=1}^k u_i$). Через $p(u, x)$ и $\hat{\theta}(u, x)$ обозначим безусловную плотность x и байесовскую оценку θ , соответствующие априорному распределению π_u , т.е.

$$p(u, x) = \left(1 - \sum_{i=1}^k u_i\right) p_{\theta_0}(x) + \sum_{i=1}^k u_i p_{\theta_i}(x)$$

и

$$\hat{\theta}(u, x) = \frac{\left(1 - \sum_{i=1}^k u_i\right) \theta_0 p_{\theta_0}(x) + \sum_{i=1}^k u_i \theta_i p_{\theta_i}(x)}{p(u, x)}.$$

Из неравенств

$$p(u, x) \geq u_i p_{\theta_i}(x) \quad (1 \leq i \leq k) \quad \text{и} \quad p(u, x) \geq \left(1 - \sum_{i=1}^k u_i\right) p_{\theta_0}(x)$$

следует, что для любого компакта $K \subset U$ существует такая константа $c(K) < \infty$, что

$$p_{\theta_i}(x) \leq c(K) p(u, x)$$

для всех $0 \leq i \leq k$ и $u \in K$. Если v есть другая точка из K , то

$$p(v, x) \leq \left(1 - \sum_{i=1}^k v_i\right) c(K) p(u, x) + \sum_{i=1}^k v_i c(K) p(u, x) = c(K) p(u, x).$$

Имея в виду это замечание, докажем непрерывную дифференцируемость $\sqrt{p(u, x)}$, как отображения из U в $L^2(\mu)$. Пусть $u^* \in U$ и V – такая выпуклая окрестность точки u^* , что $\bar{V} \subset U$. Положим

$$\psi_i(u, x) = \frac{\partial \sqrt{p(u, x)}}{\partial u_i} = \frac{p_{\theta_i}(x) - p_{\theta_0}(x)}{2\sqrt{p(u, x)}}$$

и $\psi(u, x) = (\psi_1(u, x), \dots, \psi_k(u, x))$. Очевидно, что $|\psi_i(u, x)| \leq c(\bar{V})^{3/2} \sqrt{p(u^*, x)}$ для любого $u \in V$. В силу теоремы о среднем значении для $u \in V$ имеем

$$\begin{aligned} |\psi_i(u, x) - \psi_i(u^*, x)| &= \frac{|\psi_i(u, x)|}{\sqrt{p(u^*, x)}} |\sqrt{p(u^*, x)} - \sqrt{p(u, x)}| \\ &\leq \frac{|\psi_i(u, x)|}{\sqrt{p(u^*, x)}} \sup_{u' \in V} \|\psi(u', x)\| \|u - u^*\| \leq \\ &\leq \sqrt{k} c(\bar{V})^3 \sqrt{p(u^*, x)} \|u - u^*\|. \end{aligned}$$

Из полученного неравенства следует непрерывность ψ , как функции из U в $L^2(\mu)$. С другой стороны, в силу известного следствия из теоремы о среднем значении [4, гл.3, параграф 5, теорема 13, следствие 1]

$$\begin{aligned} & |\sqrt{p(u, x)} - \sqrt{p(u^*, x)} - \psi^\top(u^*, x)(u - u^*)| \\ & \leq \sup_{0 < t < 1} \|\psi((1-t)u + tu^*, x) - \psi(u^*, x)\| \|u - u^*\| \\ & \leq kc(\bar{V})^3 \sqrt{p(u^*, x)} \|u - u^*\|^2. \end{aligned}$$

Следовательно, ψ является производной $\sqrt{p(u, x)}$ как отображения из U в $L^2(\mu)$.

Подобным образом доказывается непрерывная дифференцируемость $\hat{\theta}(u, x)$ как отображения из U в $L^2(p(u^*, \cdot) \cdot \mu)$. Производную этой функции обозначим через $\varphi(u, x) = (\varphi_1(u, x), \dots, \varphi_k(u, x))$; итак

$$\varphi_i(u, x) = \frac{\partial \hat{\theta}(u, x)}{\partial u_i} = \frac{\theta_i p_{\theta_i}(x) - \theta_0 p_{\theta_0}(x)}{p(u, x)} - \hat{\theta}(u, x) \frac{p_{\theta_i}(x) - p_{\theta_0}(x)}{p(u, x)}.$$

Через $J(u)$ обозначим информационную матрицу Фишера семейства плотностей $p(u, \cdot)$:

$$J(u) = 4 \int \psi(u, x) \psi^\top(u, x) d\mu(x).$$

Если для некоторого $u \in U$ матрица $J(u)$ вырождена, то найдется такой ненулевой вектор $a \in \mathbb{R}^k$, что

$$0 = a^\top J(u) a = 4 \int a^\top \psi(u, x) \psi^\top(u, x) a d\mu(x) = 4 \int |a^\top \psi(u, x)|^2 d\mu(x).$$

Поэтому $a^\top \psi(u, x) = 0$ и, следовательно,

$$0 = \sum_{i=1}^n a_i (p_{\theta_i}(x) - p_{\theta_0}(x)) = - \sum_{i=1}^k a_i p_{\theta_0}(x) + \sum_{i=1}^k a_i p_{\theta_i}(x)$$

почти всюду по мере μ .

Положим для краткости $a_0 = - \sum_{i=1}^k a_i$. Тогда $\sum_{i=0}^k a_i P_{\theta_i} = 0$ и, следовательно,

$$\sum_{i=0}^k a_i^+ P_{\theta_i} = \sum_{i=0}^k a_i^- P_{\theta_i}, \quad (2)$$

где, как обычно, $a_i^+ = \max\{0, a_i\}$ и $a_i^- = \max\{0, -a_i\}$. Поскольку $\sum_{i=0}^k a_i = 0$, то $\sum_{i=0}^k a_i^+$ и $\sum_{i=0}^k a_i^-$ есть одно и то же число, а так как a определяется с точностью до постоянного множителя, это число можем считать равным 1.

Пусть π^+ и π^- суть вероятностные меры на $\{\theta_0, \dots, \theta_k\}$, точкам θ_i приписывающие массы a_i^+ и a_i^- . Равенство (2) тогда означает, что безусловные распределения x ,

соответствующие априорным распределениям π^+ и π^- , совпадают. В статье [3] доказано, что тогда не существует эмпирических оценок, сходящихся к байесовской. Поэтому утверждение доказываемой теоремы в этом случае очевидно.

Далее матрицы $J(u)$ будем считать невырожденными.

Фиксируем произвольные $u^* \in U, a, b > 0$ и положим

$$K_n(b) = \{u^* + n^{-1/2}J(u^*)^{-1/2}z \mid |z_1| \leq b, \dots, |z_k| \leq b\} \text{ и } w_a(t) = \min\{t^2, a\}.$$

В силу неравенства треугольника

$$\begin{aligned} \sqrt{n\rho(t_n)} &\geq \sup_{u \in K_n(b)} \left\{ nM_{\pi_u} (t_n(x_1, \dots, x_n, x) - \hat{\theta}(u, x))^2 \right\}^{1/2} \\ &\geq \sup_{u \in K_n(b)} \left\{ nM_{\pi_u} (t_n(x_1, \dots, x_n, x) - \hat{\theta}(u^*, x) - \varphi^\top(u^*, x)(u - u^*))^2 \right\}^{1/2} \\ &\quad - \sup_{u \in K_n(b)} \left\{ n \int (\hat{\theta}(u, x) - \hat{\theta}(u^*, x) - \varphi^\top(u^*, x)(u - u^*))^2 p(u, x) d\mu(x) \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (3)$$

Если n достаточно велико, то $p(u, x) \leq cp(u^*, x)$ для всех $u \in K_n(b)$ и из дифференцируемости $\hat{\theta}(u, x)$ следует, что второе слагаемое в правой части неравенства (3) есть $o(1)$. С другой стороны, квадрат первого слагаемого не меньше

$$\begin{aligned} &\sup_{u \in K_n(b)} M_{\pi_u} w_a \left(\sqrt{n} [t_n(x_1, \dots, x_n, x) - \hat{\theta}(u^*, x) - \varphi^\top(u^*, x)(u - u^*)] \right) \\ &\geq \sup_{u \in K_n(b)} M_{\pi_u} \int w_a \left(\sqrt{n} [t_n(x_1, \dots, x_n, x) - \hat{\theta}(u^*, x) - \varphi^\top(u^*, x)(u - u^*)] \right) \\ &\quad \times p(u^*, x) d\mu(x) - a \sup_{u \in K_n(b)} \int |p(u, x) - p(u^*, x)| d\mu(x). \end{aligned}$$

Из неравенства

$$|p(u, x) - p(u^*, x)| \leq \sum_{i=1}^k |u_i - u_i^*| (p_{\theta_i}(x) + p_{\theta_0}(x))$$

следует, что и здесь второе слагаемое есть $o(1)$. С первым слагаемым произведя такие же преобразования как в доказательстве известной теоремы об асимптотической нижней границе для риска минимаксной оценки [2, гл. II, теорема 12.1] и переходя к пределу при $a, b \rightarrow \infty$, получим следующее неравенство:

$$\begin{aligned} \liminf_{n \rightarrow \infty} n\rho(t_n) &\geq (2\pi)^{-k/2} \int_{\mathbb{R}^k} dz \int \left(\varphi^\top(u^*, x) J^{-1/2}(u^*) z \right)^2 e^{-\|z\|^2/2} p(u^*, x) d\mu(x) \\ &= \int \varphi^\top(u^*, x) J^{-1}(u^*) \varphi(u^*, x) p(u^*, x) d\mu(x). \end{aligned} \quad (4)$$

Обозначим правую часть через $\sigma^2(u^*)$. Чтобы как то оценить эту величину, найдем ее предел при $u^* \rightarrow 0$.

Если $\sum_{i=1}^k u_i < \varepsilon$, то

$$|4\psi_i(u, x)\psi_j(u, x)| \leq \frac{(p_{\theta_i}(x) + p_{\theta_0}(x))(p_{\theta_j}(x) + p_{\theta_0}(x))}{(1 - \varepsilon)p_{\theta_0}(x)} \in L^1(\mu).$$

Поэтому из теоремы Лебега о мажорированной сходимости следует, что

$$J_{ij}(u) = 4 \int \psi_i(u, x)\psi_j(u, x)d\mu(x) \rightarrow 4 \int \psi_i(0, x)\psi_j(0, x)d\mu(x) = J_{ij}(0)$$

при $u \rightarrow 0$. Но тогда $J(u) \rightarrow J(0)$ и поэтому $J^{-1}(u) \rightarrow J^{-1}(0)$ при $u \rightarrow 0$.

Подобным образом из неравенства

$$\begin{aligned} & |\varphi_i(u, x)\varphi_j(u, x)p(u, x)| \\ & \leq \frac{(2 \max\{|\theta_0|, \dots, |\theta_k|\})^2 (p_{\theta_i}(x) + p_{\theta_0}(x))(p_{\theta_j}(x) + p_{\theta_0}(x))}{1 - \varepsilon p_{\theta_0}(x)} \in L^1(\mu) \end{aligned}$$

и той же теоремы Лебега вытекает, что

$$\sigma^2(u) = \sum_{i,j=1}^k J_{ij}^{-1}(u) \int \varphi_i(u, x)\varphi_j(u, x)p(u, x)d\mu(x) \rightarrow \sigma^2(0),$$

где

$$\sigma^2(0) = \sum_{i,j=1}^k J_{ij}^{-1}(0) \int \varphi_i(0, x)\varphi_j(0, x)p(0, x)d\mu(x) = \int \varphi^T(0, x)J^{-1}(0)\varphi(0, x)dP_{\theta_0}(x).$$

Следовательно, после перехода в (4) к пределу при $u^* \rightarrow 0$ получаем неравенство

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} n\rho(t_n) \geq \sigma^2(0).$$

Докажем, что $\sigma^2(0)$ есть квадрат нормы Гильберта–Шмидта некоторого линейного оператора. Для этого положим

$$\xi_i = p_{\theta_i}/p_{\theta_0} - 1$$

и в гильбертовом пространстве $L^2(P_{\theta_0})$ рассмотрим два конечномерных подпространства: E_0 , порожденное множеством функций $\{\xi_1, \dots, \xi_k\}$, и E , порожденное множеством E_0 и тождественной единичной функцией 1. Пусть T_0 есть линейный оператор из E_0 в E , переводящий ξ_i в $\varphi_i(0, \cdot)$. Такое определение корректно, так как семейство $\{\xi_i | 1 \leq i \leq k\}$ линейно независимо, а $\varphi_i(0, \cdot) = (\theta_i - \theta_0)p_{\theta_i}/p_{\theta_0} \in E$.

Квадрат нормы Гильберта–Шмидта оператора T_0 по определению равен

$$\|T_0\|_2^2 = \sum_{i=1}^k \|T_0\eta_i\|^2,$$

где $(\eta_i | 1 \leq i \leq k)$ есть произвольный ортонормированный базис в E_0 . Пусть I означает единичную матрицу, $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_k)$, $\eta = (\eta_1, \dots, \eta_k)$ и C – такая $(k \times k)$ -матрица, что $\eta = C\xi$. Тогда

$$I = \int \eta\eta^\top dP_{\theta_0} = \int C\xi\xi^\top C^\top dP_{\theta_0} = CJ(0)C^\top,$$

т.е. $J^{-1}(0) = C^\top C$. С другой стороны,

$$\begin{aligned} \|T_0\|^2 &= \sum_{i=1}^k \int (T_0\eta_i)^2 dP_{\theta_0} = \int (T_0\eta)^\top (T_0\eta) dP_{\theta_0} = \int (C\varphi(0, \cdot))^\top (C\varphi(0, \cdot)) dP_{\theta_0} \\ &= \int \varphi(0, \cdot) C^\top C \varphi(0, \cdot) dP_{\theta_0} = \sigma^2(0). \end{aligned}$$

Продолжим T_0 до оператора T , определенного на всем E , полагая $T1 = 0$. Единичная функция ортогональна всем ξ_i , так как

$$\int \xi_i dP_{\theta_0} = \int (p_{\theta_i} - p_{\theta_0}) d\mu = 0.$$

Поэтому норма Гильберта–Шмидта продолженного оператора не изменится:

$$\|T\|_2^2 = \|T_0\|_2^2 = \sigma_0^2.$$

Но T переводит $p_{\theta_i}/p_{\theta_0}$ в $\varphi_i(0, \cdot) = (\theta_i - \theta_0)p_{\theta_i}/p_{\theta_0}$, т.е. числа $\theta_i - \theta_0$ являются собственными значениями оператора T . Поэтому утверждение теоремы вытекает из следующего факта функционального анализа: квадрат нормы Гильберта–Шмидта линейного оператора в конечномерном пространстве не больше суммы квадратов модулей его собственных значений [1, гл. 11, параграф 6, лемма 21 и следствие 3].

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Данфорд Н., Шварц Дж. Т., *Линейные операторы*, т. II, Мир, М., 1966.
- [2] Ибрагимов И. А., Хасьминский Р. З., *Асимптотическая теория оценивания*, Наука, М., 1979.
- [3] Казакиявичюс В., Условия существования эмпирически байесовских оценок и оптимизация границ Большева, *Изв. ВУЗов. Матем.*, 11 (1983), 67–73.
- [4] Шварц Л., *Анализ*, т. I, Мир, М., 1979.
- [5] Singh R. S., Empirical Bayes estimation in Lebesgue-exponential families with rates near the best possible rate, *Ann. Statist.*, 7(4) (1979), 890–902.