基于核的无重叠离策略估计：超越半参数效率的实例最优性

Wenlong Mou[◇] Peng Ding[†] Martin J. Wainwright[◇,†,‡] Peter L. Bartlett[◇,†] *

电气工程与计算机科学系[◇]统计系[†]加州大学伯克利分校

信息与决策系统实验室[‡]统计与数据科学中心[‡]电气工程与计算机科学及数学系 麻省理工学院

Google Research*

arXiv:2301.06240v1 [math.ST] 16 Jan 2023

摘要

我们研究基于观测数据估计线性泛函的最优程序。在许多此类问题中，常用的一个假设是严格重叠性，即重要性比率一致有界；该比率衡量观测数据对感兴趣方向的覆盖程度。若这一假设不成立，经典半参数效率界很容易变为无穷大，因此实例最优风险取决于用于建模回归函数的函数类。对于任意凸对称函数类 $\mathcal{F}$，我们推导出一个非渐近局部极小极大界，用于刻画估计一大类线性泛函时的均方误差。该下界细化了经典半参数效率界，并与泛函估计中的连续性模建立了联系。当 $\mathcal{F}$是再生核希尔伯特空间时，我们通过分析一种计算简单的回归估计量，证明这一界可在常数因子范围内达到。我们将一般性结果应用于多种示例，从而揭示了一系列速率；这些速率介于经典半参数效率理论（具有$\sqrt{n}$-一致性）与非参数函数估计相关的较慢极小极大收敛率之间。

–

1 引言

基于观测数据的估计与推断问题广泛存在于各种应用中，并由因果推断、计量经济学和强化学习等领域加以研究。这类问题中有一个有趣的子类具有半参数性质：它们涉及在存在一个或多个未知非参数“干扰”函数的情况下，估计线性泛函的值。

更具体地说，假设我们观测到 n 个独立同分布三元组，其形式为 (X_i, A_i, Y_i)，每个三元组均按照以下程序抽取

- 状态变量 X_i 从状态空间 $\mathbb{X}$上的某个分布 ξ^* 中抽取。
- 动作变量 A_i 按照条件分布 $A_i \mid X_i \sim \pi(\cdot \mid X_i)$ 抽取，其中 π是一种行为策略，在因果推断文献中也称为倾向得分。
- 结果变量 Y_i 的条件期望为 $\mathbb{E}\big[Y_i \mid X_i, A_i\big] = \mu^*(X_i, A_i)$，其中 μ^* 是回归函数，也称为处理效应。

分布 ξ^* 和回归函数 μ^* 均未知，而我们希望估计一个依赖于二者的已知泛函。更确切地说，给定一个已知的函数族 $\{\omega(\cdot \mid x) \mid x \in \mathbb{X}\}$，其中每个 $\omega(\cdot \mid x)$都是动作空间 $\mathbb{A}$上的有符号Radon测度，考虑泛函

$$(\mu, \xi) \mapsto \mathcal{L}_\omega(\mu, \xi) := \mathbb{E}_{X \sim \xi}\left[\int_{\mathbb{A}} \mu^*(X, a) d\omega(a \mid X)\right] = \int_{\mathbb{X}} \int_{\mathbb{A}} \mu^*(x, a)\, d\omega(a \mid x)\, d\xi(x). \quad (1)$$

我们的目标是估计 $\tau^* := \mathcal{L}_\omega(\mu^*, \xi^*)$——即该泛函在未知二元组 (μ^*, ξ^*) 处的取值。行为策略 π 也是未知的，并且它作为另一个非参数干扰项发挥作用，因为它会影响我们所观测样本 (X_i, A_i) 的联合分布。这种设定的特殊情形包括估计平均处理效应（ATE），以及对上下文老虎机问题进行离策略评估。我们还考虑一种变体：不对 $X \sim \xi$ 取期望，而是在固定状态 x_0 处进行评估。后一种设定适用于条件平均处理效应（CATE）。

在各种设定下——对回归函数和行为策略施加特定假设——基于 τ^* 的 n 样本所得到的估计量都能以经典的 $\sqrt{n}$ 速率收敛。此外，借助半参数效率的经典概念 [Lev78]，我们可以进一步理解伴随这一 $\sqrt{n}$ 速率 [Hah98] 的最优依赖于实例的常数。然而，在实践中同样值得关注的各种设定下，效率界可能是无穷大的，此时经典的 $\sqrt{n}$ 收敛不再成立。这个问题并非仅仅具有理论意义：许多针对 τ^* 的标准估计量以经典理论为依据，因此在应用于此类问题时不再表现良好。

概括而言，至少有两类现象会使经典 $\sqrt{n}$一致性失效。第一，如果回归函数和行为策略都需要从复杂度很高的类中估计，那么估计它们所面临的困难——而非目标泛函固有的波动——可能会占据主导地位。例如，论文 [Rob+09]研究了若干涉及 H¨older 类的此类情形；有关条件平均处理效应估计的相关结果，另见论文 [KBW22] 。第二，半参数效率界涉及比率 $\frac{d\omega}{d\pi}$ 的若干矩。这个所谓的重要性比率衡量观测数据在行为策略 π的控制下，对估计该泛函所相关空间区域的“覆盖”程度。如果这种覆盖特别差，那么重要性比率可能不存在有限矩，甚至可能根本不存在。半参数效率失效的后一种原因，正是本文提出的理论与方法的主要动机。

在基于观察性研究进行因果推断的文献中，通常会施加所谓的严格重叠条件 [HIR03; Che+18; Su+23]。严格重叠条件意味着对重要性比率施加一致界，因此排除了矩为无穷大的可能性。与此密切相关的老虎机和强化学习文献中，也经常出现此类一致有界性条件。一方面，已知从最坏情形的角度看，这一条件是必要的：正如 Khan 和 Tamer [KT10], 所示，若既不施加严格重叠条件，也不对回归函数施加结构条件，就不再可能获得 $\sqrt{n}$-一致性。然而，值得注意的是，一致有界性条件可能相当严格。例如，在一些近期研究中，D'Amour 等人 [D'A+21] 表明，该条件排除了许多具有实际意义的有趣情形，尤其是在模型涉及高维协变量时。受这一两难困境的启发，过去和目前有一系列研究（例如， [CHT04; HW21; MW20]）提出了利用回归函数某种结构的估计量。尽管取得了这些进展，我们目前

对于不施加严格重叠条件时如何基于观测数据估计线性泛函的最优方法，我们的理解仍相对有限。

在这一背景下，本文的主要贡献是深入探讨在没有（严格）重叠的情况下估计线性泛函的最优方法的性质。我们的第一个主要结果是给出任意估计量均方误差的一般非渐近下界。该下界涉及一个新颖的方差泛函，它同时取决于用于建模回归函数的函数类 $\mathcal{F}$ 以及重要性比率的行为。关于上界，我们重点研究再生核希尔伯特空间（RKHSs）这一回归函数模型类，并给出一个计算上简单的程序，实现我们的局部极小极大下界。因此，对于基于 RKHS 的回归函数模型，我们能够将依赖于实例的非渐近局部极小极大风险确定到一个常数前因子以内。正如我们通过一系列示例所展示的，这一均方误差可能呈现多种速率，从行为良好问题中的经典 $\sqrt{n}$一致性，到重要性比率表现很差时显著更慢的非参数速率。

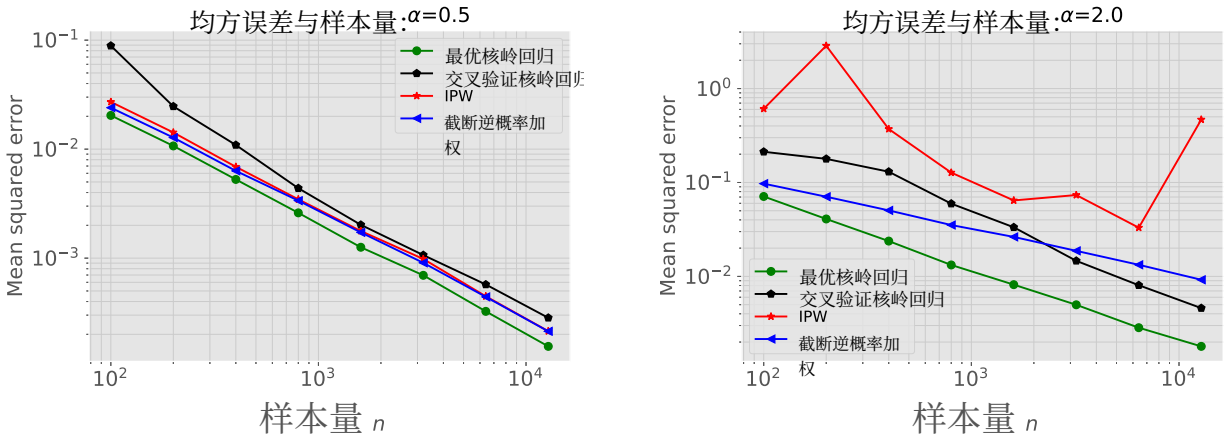
1.1 一个示例性模拟

为了帮助理解下文的结果，我们考虑一类简单问题，其中严格重叠假设不成立，并将本文提出的估计量与其他替代方法的表现进行比较。更具体地说，我们考虑一个缺失数据问题，其中动作 $a \in \mathbb{A} = \{0, 1\}$ 是表示“缺失”的指示变量。给定状态空间 $\mathbb{X} = [0, 1]$，我们构造权重函数 ω 和行为策略 π，使重要性比率的形式为

$$\frac{d\omega}{d\pi}(0 \mid x) = 1, \quad \text{and} \quad \frac{d\omega}{d\pi}(1 \mid x) \sim (1 - x)^{-\alpha} \qquad \text{where } \alpha \geq 0 \text{ is a parameter.} \tag{2}$$

参数 α 控制重要性比率尾部的厚重程度：当 $\alpha = 0$ 时，重要性比率只是一个常数；而随着 α 增大，其尾部会越来越厚。当超过 $\alpha > 1$ 时，它不再具有有限的二阶矩，而这个转变点颇为有趣。

在图1中，我们比较了四种不同方法的表现：经典的逆倾向加权（IPW）估计量 [Ros87]，（第4节将对此进行更详细的介绍）；IPW 的截断版本 [KT10]；本文提出的最优基于核的方法（Opt-KRR）；以及一种次优的基于核的方法，其中正则化参数通过交叉验证（CV）选择（CV-KRR）。在每个面板中，对于每个估计量 $\widehat{\tau}_n$，我们绘制均方误差 $\mathbb{E}[(\widehat{\tau}_n - \tau^*)^2]$ 相对于样本量 n 的关系，采用双对数尺度。面板（a）对应于设定 $\alpha = 0.5$：在这种情况下，我们的理论预测极小极大均方误差应以 n^{-1} 的速率衰减，这与经典区间中 $\sqrt{n}$-一致性的均方误差预期相符。对于这个问题，四种方法的表现都相对稳定；对于我们提出的方法（Opt-KRR），对 log-MSE 关于 $\log n$ 进行线性回归，得到的斜率估计为 -1.00 ± 0.01。相比之下，面板（b）呈现出截然不同的行为：通过设定 $\alpha = 2.0$，我们得到一个难得多的问题。在这里，由于重要性比率的重尾，IPW 的表现非常不稳定；截断版本的表现更稳定，但其误差仍大于 Opt-KRR。事实上，本文给出的理论应用于这一族时预测[3]：对于任意 $\alpha > 1$，最优均方误差应以 $n^{-\alpha+2}$ 的速率衰减。因此，如果设定 $\alpha = 2$，我们预计误差衰减的指数为 $-3/4$。为了估计 Opt-KRR 的衰减速率，我们再次对 log MSE 关于 log(n)进行线性回归，得到估计斜率 -0.76 ± 0.01。再次地，我们看到其与理论高度一致。



(a) 轻尾： $\alpha = 0.5$ (b) 重尾： $\alpha = 2.0$

图1. 四种不同估计量的均方误差随样本量变化的双对数图 n，针对 τ^*：本文分析了 Opt-KRR 程序，而 CV-KRR 是一种相关方法，其正则化参数通过交叉验证选取。我们还将其与经典的逆概率加权估计以及逆概率加权的截断版本进行比较。(a) 设置 $\alpha = 0.5$ 得到的倾向得分具有轻尾，我们的理论预测 Opt-KRR 的均方误差呈经典的 n^{-1} 衰减。(b) 设置 $\alpha = 2.0$ 得到的是一个重尾问题，我们的理论保证 Opt-KRR 以 $n^{-3/4}$ 的速率达到一致性。

1.2 我们的贡献

我们总结本文后续部分所作出的贡献。

• 首先，在回归函数属于已知函数类的设定下，我们为基于观测数据估计线性泛函建立了一般的非渐近局部极小极大下界。该下界由一个变分问题定义，该问题刻画了函数类的几何结构与重要性比率之间的相互作用。由于证明基于 Le Cam 两点法，该下界的部分内容涉及某种连续模。

• 其次，针对回归函数属于再生核希尔伯特空间（RKHS）中一个球的情形，我们分析了一类多阶段结果回归估计量。在对 RKHS 和条件协方差函数施加一定正则性条件后，我们建立了一个非渐近上界，该上界与我们的极小极大下界相匹配（相差一个常数因子）。

• 第三，我们将一般性结果应用于一系列问题，以此展示该结果，并得到多种新颖的极小极大速率。对于重要性比率在某些点发散时的处理效应估计，我们证明，极小极大风险取决于这种奇异性与希尔伯特空间几何结构之间的相互作用。在连续状态与动作的上下文老虎机场景中，我们给出了关于确定性策略离策略评估的结果，从而获得了能够适应状态-动作空间复杂度的新颖极小极大速率。

值得注意的是，我们的多阶段核估计量无需了解底层的行为策略或倾向得分 π。从实现角度来看，这一性质极具吸引力。同时，就均方误差而言，其性能达到了我们的极小极大下界；该下界适用于更广泛的估计量族，包括那些了解行为策略的估计量。因此，我们的结果带来了一个有趣的启示：只要

回归函数属于再生核希尔伯特空间，了解行为策略对确定极小极大风险率不起作用。这与¨非 Donsker 型的 Hölder 类形成鲜明对比，在后者中，模型的两个部分都发挥着重要作用 [Rob+09；KBW22]最后，尽管极小极大风险本身取决于行为策略，但我们的基于核的估计量中的调优参数并不取决于它。

记号：本文将无限维向量（相应地，矩阵）在形式上定义为从正整数（相应地，正整数对）到实数的映射。给定一个无限维矩阵 A 和一个向量 z，我们将它们的乘积逐点定义为

$$[Az]_i := \sum_{j=1}^{+\infty} A_{i,j} z_j, \quad \text{for each } i = 1, 2, \ldots,$$

假设每个求和都绝对收敛。

令 $\ell_0(\mathbb{N})$ 表示有限支撑的无限维向量集合——也就是说，只有有限个非零元素的向量。若无限维对称矩阵 A 满足以下条件，我们称其为半正定，记作 $A \succeq 0$:

$$x^\top A x \geq 0, \quad \text{for any } x \in \ell_0(\mathbb{N}).$$

注意，对于任意向量空间 $\mathbb{V}$，若其中的 $\ell_0(\mathbb{N})$ 稠密，且矩阵 A 将 $\mathbb{V}$ 映射到$\mathbb{V}^*$，则可以轻松扩展该定义，使其对任意 $x \in \mathbb{V}$都满足 $x^\top A x \geq 0$。采用这一记号，我们还可以定义半正定序 $A \succeq B$，条件是 $A - B \succeq 0$。

类似地，我们可以定义无限维矩阵的逆。对于任意 $x \in \ell_0(\mathbb{N})$，若 $B = A^{-1}$ if$B \cdot (Ax) = A(Bx) = x$，则称其为 $B = A^{-1}$ if$B \cdot (Ax) = A(Bx) = x$。再次强调，假设 A 和 B 都是在适当定义的空间上作用的有界线性算子，那么通过密度论证，这一定义可以轻松推广到更大的向量空间。

1.3 相关工作

现在，我们来讨论几类相关工作，以便将我们的研究置于更广阔的背景之中。

非参数／半参数估计的实例最优性：对于正则参数模型，Le Cam 和 Hajek 提出的经典局部渐近极小极大（LAM）框架 [LC60；H´aj72] 刻画了估计量的实例最优行为 $n \to \infty$。Levit [Lev78] 通过考察所有有限维子模型的集合，将这一框架推广到了半参数情形。对于本文所考虑的特定线性泛函估计问题类，Hahn [Hah98] 阐述了渐近下界，而我们近期的研究 [MWB22] 则在非渐近框架下研究了同一问题。

超越经典的 $\sqrt{n}$-情形，在各种设定下，半参数和非参数估计已建立了依赖于实例的最优性。在相关文献中，针对索引空间回归 [Pin80；BLZ97], 谱密度估计 [KI86], 以及形状约束估计 [HZ20]，研究者获得了精确的局部渐近极小极大风险。对于涉及线性泛函的估计问题，Donoho [Don94] 建立了某类极小极大线性估计量的信息论最优性（在常数因子意义下）；在回归情形中，该框架适用于固定设计问题，而非

本文所关注的随机设计情形。Speckman 采用样条方法研究固定设计回归，其未发表的工作 [Spe79] 基于一类欠平滑估计量。这些基于样条的估计量是本文针对随机设计情形所考虑的更一般的再生核希尔伯特空间框架的特例，我们同样发现某种形式的欠平滑是最优的。尽管前述所有结果都表述为全局极小极大风险，但由于底层模型的位置族结构以及简化的噪声假设，这些界也具有实例最优性，只是其精细程度较低。

离策略估计的重叠与覆盖假设：重叠假设最早由 Rosenbaum 和 Rubin [RR83],提出，要求行为策略或倾向得分取值位于开区间 (0, 1) 内。[1] 在我们的广义设定中，重叠假设等价于要求重要性比率 $\frac{d\omega}{d\pi}$ 处处存在。该条件与无混杂假设共同意味着平均处理效应 [RR83],可识别，但可能导致任意缓慢的收敛速率。文献中一种常见的选择是强得多的严格重叠假设 [HIR03; Che+18]，它要求重要性比率一致有界。Khan 和 Tamer [KT10] 表明，在最坏情形下，严格重叠是实现一致 $\sqrt{n}$性的一项必要条件。另一方面，近期研究 [D'A+21] 指出，在一些自然的高维问题设定中，严格重叠条件可能过于苛刻。通过对回归函数作出更强假设，可以放宽严格重叠条件 [CHT04; HLL20]，同时仍能在该 $\sqrt{n}$ 区域内达到半参数效率界。半参数效率界变为无穷大的情形称为非正则可识别区域，过去的一些研究对此进行了探讨 [KT10; MW20], ，其中针对某些特殊情形提出并分析了逆概率加权估计量的截断版本。此外，模拟和真实数据实验研究均记录了各种估计量在表现上的不稳定性 [LD04; KS07; Fr¨o04]。

重要性比率的一致有界性也是老虎机和强化学习文献中的一个典型假设。针对老虎机算法的离策略评估，Wang 等人 [WAD17] 提出了一种涉及截断重要性比率的"切换估计量"。Ma 等人 [Ma+22]证明了该程序对于多臂老虎机而言是最坏情形下最优的。对于离策略强化学习问题，重要性比率的一致界（称为覆盖系数或集中系数）见于多篇论文 [KU20； Y W20； XJ21]。与我们的结果最为相关的是论文 [ZWB21], 中的界，该界适用于采用线性函数近似的马尔可夫决策过程，并对行为策略与目标策略之间的重叠进行了更细粒度的测度。

用于离策略估计的核方法与非参数方法：此外，已有一系列研究探讨了在不同结构条件下估计平均处理效应的各种非参数程序。在严格重叠条件与 H¨older 条件（分别施加于重要性比率和回归函数）相结合时，已有研究确立了平均处理效应估计的极小极大收敛率 [Rob+09; Rob+08]，不过其前置因子取决于具体实例，未必是最优的。在本文考察的 Donsker 区域中，由于存在严格重叠性，这些极小极大收敛率与经典的 $\sqrt{n}$速率一致。我们的结果揭示了缺乏严格重叠性时可能出现的不同现象——更具体地说，最优速率不仅取决于重要性

[1]在经典二元处理设定中，动作空间为 $\mathbb{A} = \{0, 1\}$，倾向得分定义为 $\pi(x) := \mathbb{P}(A = 1|X = x)$。

比率和回归函数类的复杂度，还取决于重要性比率中的任何奇异性，以及它与待估计泛函之间的相互作用。此外，我们的结果也适用于单点线性泛函的估计，这是对条件平均处理效应或异质性平均处理效应的推广。同样聚焦于 H¨older 类，近期一些研究 [GH20；KBW22] 提出了速率最优的非参数程序。近年来，凭借灵活性和计算上的可处理性，基于核的方法成为因果估计领域的研究重点 [Sin20；SXG20；NW21], ，相关研究已针对各种泛函开发了基于核的估计量。

近期关于离策略估计的研究探讨了极小极大线性估计量的应用。在固定设计设置中，论文 [AK21；Kal18；Kal20] 将极小极大线性估计量的经典框架 [Don94；Spe79] 应用于样本平均处理效应（SATE）的估计问题，并给出了渐近和非渐近两类保证。Hirshberg等人 [HMZ19] 研究了当回归函数属于再生核希尔伯特空间时，用于估计处理效应的极小极大线性估计量；与经典研究 [Spe79], 一样，该估计量可以改写为标准核岭回归估计的形式，我们在更简单的同方差设置中分析的两阶段过程也可以如此改写。在严格重叠条件和一些额外正则性假设下，他们证明了渐近效率，并给出了经验损失函数的非渐近界。在更一般的设定中，Hirshberg和Wager [HW21]提出了一种增广极小极大线性估计量，并建立了非渐近正态近似结果。将他们的结果用于离策略估计时，可以在具有有限半参数效率界的经典区间内得到非渐近正态近似，且不依赖严格重叠假设。与我们的结果相比，一个重要差异在于，他们的界同时涉及估计误差和与重要性比率（通过Riesz表示元）相关的逼近误差；而我们的方法中不会出现这类项。

2 问题设定与预览

我们在第2.1 节首先精确表述问题，并讨论一些示例。在第2.2节中，我们描述经典半参数效率界，并详细说明我们的分析如何超越这一界。

2.1 问题设定与一些示例

给定状态空间 $\mathbb{X}$ 上的某个概率分布 ξ^*，假设我们观测到 n 个独立同分布三元组 $(X_i,\ A_i,\ Y_i)$，其中 $X_i \sim \xi^*$，并且

$$A_i \mid X_i \sim \pi(\cdot \mid X_i), \quad \text{and} \quad \mathbb{E}\big[Y_i \mid X_i, A_i\big] = \mu^*(X_i, A_i), \qquad \text{for } i = 1, 2, \ldots, n. \tag{3}$$

除回归函数 μ^*外，我们的分析还涉及条件方差函数

$$\sigma^2(x, a) := \mathbb{E}\Big[\,|Y - \mu^*(X, A)|^2 \mid X = x, A = a\Big], \tag{4}$$

假设对于任意一对 $(x,\ a) \in \mathbb{X} \times \mathbb{A}$，该函数均存在。

如前所述，给定动作空间 $\mathbb{A}$ 上的一组有符号Radon测度 $\omega(\cdot \mid x)$，每个 $x \in \mathbb{X}$ 对应一个测度，我们的目标是估计双线性泛函在 ω和 $\cdot \mid x$ 处的值 $\tau^* = \mathcal{L}_\omega(\mu^*,\ \xi^*)$

$$(\mu, \xi) \mapsto \mathcal{L}_\omega(\mu, \xi) := \int_{\mathbb{X}} \int_{\mathbb{A}} \mu(x, a) d\omega(a \mid x) d\xi(x) \tag{5}$$

我们要求定义 $\mathcal{L}_\omega$ 的有符号测度满足以下条件

$$\int_{\mathbb{A}} d\,|\omega(a \mid x)| \leq 1 \qquad \text{for each } x \in \mathbb{X}. \tag{6}$$

当每个 $\omega(\cdot \mid x)$ 都是条件概率分布时，这一条件会自动成立，例如上下文老虎机的离策略评估。

实践中会出现各种类型的权重函数 ω：

平均处理效应（ATE）： 当动作空间为二元集合 $\mathbb{A} = \{0, 1\}$，且权重函数 $\omega(a \mid x) = a - \frac{1}{2}$ 对所有 x 都成立时，会得到这一线性泛函。采用这一选择后，我们有

$$\tau^* = \frac{1}{2}\mathbb{E}_{X \sim \xi^*}\Big[\mu^*(X, 1) - \mu^*(X, 0)\Big],$$

因此，τ^* 与通常的平均处理效应成正比（即相差一个系数 $1/2$，该系数源于我们所选的归一化方式）。

多臂上下文老虎机的离策略评估： 在上下文老虎机的多臂设定中，我们有一个有限动作空间 $\mathbb{A}$，每个权重函数 $\omega(\cdot \mid x)$ 都定义了动作空间上的一个条件概率分布，可将其解释为随机策略。我们称权重函数 ω 定义了**目标策略**，而条件分布 π 定义了**行为策略**。

具有连续臂的上下文老虎机： 在这种情况下，我们将动作空间 $\mathbb{A}$ 取为 $\mathbb{R}^d$ 的一个紧子集。对于确定性目标策略 $T\colon \mathbb{X} \to \mathbb{A}$，令 $\omega(\cdot \mid x)$ 为位于 $T(x)$ 处的单位原子质量。

除了泛函（5）之外，另一个值得关注的是将关于 $X \sim \xi^*$ 的期望替换为在已知状态 x_0 处取值所得到的变体，即

$$\mathcal{L}_\omega(\mu^*, \delta_{x_0}) := \int_{\mathbb{A}} \mu^*(x_0, a) d\omega(a \mid x_0), \tag{7}$$

其中，δ_{x_0} 可以看作位于 x_0处的点质量。虽然该泛函由 δ_{x_0}确定，但样本 X_i 本身仍是从状态空间上的分布 ξ^* 中抽取的。

泛函（7）的具体例子包括因果推断文献中的条件平均处理效应（CATE）；而在离策略强化学习中，它包括基于离策略观测值评估固定状态 x_0 下策略的问题。

2.2 超越经典半参数效率

本节将说明本文如何超越经典半参数效率。

经典结果回顾： 我们首先解释通常所说的半参数效率界；当重要性比率 $\frac{d\omega}{d\pi}$ 存在且其矩受到适当控制时，这一界才有意义。在这些条件下，可以获得 τ^* 的估计值 $\widehat{\tau}_n$，其收敛速率为 $1/\sqrt{n}$。因此，我们可以考察缩放误差 $\sqrt{n}(\widehat{\tau}_n - \tau^*)$ 所对应的方差，尤其是能够达到的最小方差。对于估计 $\tau^* = \mathcal{L}_\omega(\mu^*, \xi^*)$，它

已知 [Hah98] 从半参数效率的意义上说，能够达到的最小方差为

$$V_{semi}^2(\mu^*, \tfrac{d\omega}{d\pi}) = \underbrace{\mathrm{var}_{X\sim\xi^*}\Big(\int_{\mathbb{A}} \mu^*(X,a)d\omega(a\mid X)\Big)}_{V_{\xi^*}^2(\mu^*)} + \underbrace{\mathbb{E}_{\xi^*\cdot\pi}\Big\{\big[\tfrac{d\omega}{d\pi}(A\mid X)\big]^2\,\sigma^2(X,A)\Big\}}_{V_\sigma^2(\frac{d\omega}{d\pi})}, \tag{8}$$

其中 $\mathbb{E}_{\xi^*\cdot\pi}$ 表示对一对 $X\sim\xi^*$ 和 $A\sim\pi(\cdot\mid X)$ 取期望。

这个最优方差由两项组成。第一项 $V_{\xi^*}^2(\mu^*)$ 描述了从 ξ^* 中随机抽取状态时，τ^* 的估计所产生的波动。该项取决于回归函数 μ^*，但不取决于条件方差函数 σ^2。相反，第二项 $V_\sigma^2(\frac{d\omega}{d\pi})$ 既取决于重要性比率 $\frac{d\omega}{d\pi}$，也取决于条件方差函数 σ^2，而不取决于回归函数：它刻画了噪声与重要性比率 $\frac{d\omega}{d\pi}$ 之间的相互作用。若重要性比率表现不佳，正是后一项可能发散，因此在我们的分析中，这一项采用了更精细的形式。

非渐近界：在此背景下，我们的主要贡献是通过以下方式超越经典的（渐近）半参数效率：

- 我们采用 Le Cam 方法，证明在缺乏重叠条件的情况下，基于观测数据估计泛函的一般性非渐近极小极大下界；但要求 μ^*属于凸函数类 $\mathcal{F}$。
- 当 $\mathcal{F}$ 是再生核希尔伯特空间（RKHS）时，我们证明这一下界可由一个四阶段核回归程序达到，并计算出极小极大风险的显式表示（除常数因子外是精确的）。

下面介绍 RKHS 情形下非渐近极小极大风险的显式表示。考虑一个 RKHS $\mathcal{H}$，它是 $\mathbb{L}^2(\xi^*\cdot\pi$的子集，并假设回归函数 μ^* 属于该空间中半径为 $\mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R$的希尔伯特球。我们证明，非渐近极小极大风险会将经典半参数效率界（R）中的第二项 $V_\sigma^2(\frac{d\omega}{d\pi}$)替换为一个与 RKHS 相关特征值和特征函数有关的新量。更具体地说，任何 Mercer 类型的 RKHS 都对应一列 $\{\lambda_j\}_{j=1}^\infty$ 正特征值，以及与之对应的特征函数 $\{\phi_j\}_{j=1}^\infty$。令$\mathbf{\Lambda} = \mathrm{diag}\{\lambda_j\}_{j=1}^\infty$ 为由这些特征值定义的对角矩阵，并利用这些特征函数定义一个无限维向量 $u = u(\xi^*)$，其元素为

$$(\bar{u})_j := \mathbb{E}_{X\sim\xi^*}\Big[\int_{\mathbb{A}} \phi_j(X,a)d\omega(a\mid X)\Big] \qquad \text{for } j=1,2,\ldots, \tag{9a}$$

以及元素为 $\mathbf{\Gamma}_\sigma$ 的无限维矩阵

$$[\mathbf{\Gamma}_\sigma]_{jk} := \mathbb{E}_{\xi^*\cdot\pi}\Big[\tfrac{1}{\sigma^2(X,A)}\phi_j(X,A)\phi_k(X,A)\Big] \qquad \text{for } j,k=1,2,\ldots. \tag{9b}$$

我们证明，当回归函数 μ^* 位于该再生核希尔伯特空间内半径为 R 的球中时，估计 τ^* 的极小极大均方误差与$\frac{1}{n}\{V_{\xi^*}^2(\mu^*) + \tilde{V}_{\sigma,\,n}^2(\pi,\ \omega;\ \mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R))\}$成正比，其中

$$\tilde{V}_{\sigma,n}^2(\pi,\omega;\mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R)) := \bar{u}^\top\Big(\mathbf{\Gamma}_\sigma + \tfrac{1}{R^2 n}\mathbf{\Lambda}^{-1}\Big)^{-1}\bar{u}. \tag{10}$$

注意，$\tilde{V}^2_{\sigma,\,n}(\pi,\ \omega;\ \mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R))$取决于（以及其他量）样本量 n，并且实际上可能随着 $n \to \infty$ 增大而发散。这种发散会导致估计泛函 τ^*的非参数速率。事实上，图1 中的面板 (b) 展示了这一现象在某个特定情形下的示例。

与经典半参数效率的联系：为了理解我们的结果与经典半参数效率界（8）之间的联系，我们来考虑[2]以下特殊情形：

- 重要性比率 $\frac{d\omega}{d\pi}$ 存在，且经典半参数效率界有限。
- 该问题满足同方差条件，条件方差函数 $\sigma^2(x,\ a) = \sigma^2$对所有点对 $(x,\ a)$ 均为常数。

在同方差条件下，矩阵 $\mathbf{\Gamma}_\sigma$ 是对角矩阵，其对角线元素为 $\frac{1}{\sigma^2}$；这是因为特征函数在 $\mathbb{L}^2(\xi^* \cdot \pi)$ 中正交归一。由于矩阵 $\mathbf{\Lambda}^{-1}$ 也是对角矩阵，我们得到

$$\tilde{V}^2_{\sigma,n}(\pi,\omega;\mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R)) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\bar{u}_j^2}{\frac{1}{\bar{\sigma}^2} + \frac{1}{R^2 n \lambda_j}} \ \le\ \bar{\sigma}^2 \sum_{j=1}^{\infty} \bar{u}_j^2. \tag{11a}$$

当重要性比率 $\frac{d\omega}{d\pi}$ 存在时，我们可以写成

$$[\bar{u}]_j := \mathbb{E}_{X\sim\xi^*}\Big[\int_{\mathbb{A}} \phi_j(X,a) d\omega(a \mid X)\Big] \ =\ \mathbb{E}_{\xi^*\cdot\pi}\big[\phi_j(X,A)\tfrac{d\omega}{d\pi}(A \mid X)\big], \tag{11b}$$

因此，$u_{\mathcal{F}}$ 是 $\frac{d\omega}{d\pi}$ 在特征基 $\{\phi_j\}_{j\ge 1}$下展开时的基系数。于是，由帕塞瓦尔定理可知，方程（11a）意味着

$$\tilde{V}^2_{\sigma,n}(\pi,\omega;\mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R)) \le \mathbb{E}_{\xi^*\cdot\pi}\Big[\big(\frac{d\omega}{d\pi}(A \mid X)\big)^2 \bar{\sigma}^2\Big] \ =\ V^2_\sigma(\tfrac{d\omega}{d\pi}), \tag{11c}$$

因此，希尔伯特空间限制泛函始终不超过经典的半参数量 $V^2_\sigma(\frac{d\omega}{d\pi})$。事实上，当半参数效率界有限且再生核希尔伯特空间足够丰富——即“通用”——时，$\tilde{V}^2_{\sigma,\,n}(\pi,\ \omega;\ \mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R))$ 会随着 $V^2_\sigma(\frac{d\omega}{d\pi})$ 趋于无穷而收敛。异方差噪声下，这些结论也都普遍成立，详见第1 和2条命题，这些命题将在第3.1.2节中给出。

3 主要结果及其推论

现在，我们将准确陈述主要结果，并讨论这些结果对若干示例的影响。在第3.1.1节中，我们陈述并证明适用于任意凸对称函数类的非渐近下界 $\mathcal{F}$，该函数类用于刻画回归函数。在第3.1.2节中，我们将这些下界具体化到再生核希尔伯特空间，并推导出上一节讨论的泛函（10）。

在第3.2节中，我们转而探讨互补问题：为再生核希尔伯特空间推导上界。我们先在第3.2.1节讨论较简单的同方差情形，然后再转向更具挑战性的异方差情形，见第3.2.2节。最后，第3.3节将探讨这些结果对若干具体示例的影响。

[2]请注意，我们的理论并不要求这些假设，但施加这些假设有助于阐明其与经典半参数效率之间的联系。

3.1 非渐近下界

假设我们使用定义在状态-动作空间 $\mathbb{X} \times \mathbb{A}$ 上的实值函数类 $\mathcal{F}$ 来建模回归函数 μ^*。本节将证明关于平均量 $\tau^* = \mathcal{L}_\omega(\mu^*, \xi^*)$ 和单点量 $\tau^*_{x_0} = \mathcal{L}_\omega(\mu^*, \delta_{x_0})$ 的一些非渐近极小极大下界。为以统一方式涵盖这两种情形，对于状态空间 $\mathbb{X}$ 上的任意分布 ν，定义[3]

$$V_{\sigma,n}(\nu, \pi, \omega; \mathcal{F}) := \sqrt{n} \sup_{f \in \mathcal{F}} \left\{ \mathcal{L}_\omega(f, \nu) \mid \mathbb{E}_{\xi^* \cdot \pi}\left[\frac{f^2(X,A)}{\sigma^2(X,A)}\right] \le \frac{1}{4n} \right\}. \tag{12}$$

3.1.1 一般下界

局部极小极大界描述了最优估计量在给定问题实例的局部邻域内的表现。对于当前问题，我们通过二元组 $\mathcal{I}^* = (\mu^*, \xi^*)$ 定义给定的问题实例。所有实例共用行为策略 π、条件方差函数 σ^2 和权重函数 ω。给定实例 $\mathcal{I}^*$ 的局部邻域定义为

$$\mathcal{N}_n(\mu^*, \xi^*) := \left\{ \xi \text{ s.t. } \chi^2(\xi \mid\mid \xi^*) \le \frac{1}{n}, \text{ and } \mu \in \mathcal{F} \text{ s.t. } \|\mu - \mu^*\|^2_{\mathbb{L}^2(\xi^* \cdot \pi)} \le \frac{\bar{\sigma}^2}{n} \right\}, \tag{13}$$

并由此定义局部极小极大风险

$$\mathcal{M}_n(\mathcal{I}^*; \mathcal{F}) := \inf_{\widehat{\tau}_n} \sup_{(\mu,\, \xi)\, \in \mathcal{N}_n(\mu^*, \xi^*)} \mathbb{E}\left[|\widehat{\tau}_n - \mathcal{L}_\omega(\mu, \xi)|^2 \right], \quad \text{and} \tag{14a}$$

$$\mathcal{M}_n(\mathcal{I}^*, x_0; \mathcal{F}) := \inf_{\widehat{\tau}_n} \sup_{\mu \in \mathcal{N}_n(\mu^*, \xi^*)} \mathbb{E}\left[|\widehat{\tau}_n - \mathcal{L}_\omega(\mu, \delta_{x_0})|^2 \right]. \tag{14b}$$

稍微滥用一下记号，在定义（14b）中，我们写作 $\mu \in \mathcal{N}_n(\mu^*, \xi^*)$ 表示（μ, ξ^*）$\in \mathcal{N}_n(\mu^*, \xi^*)$。本文其余部分中，若上下文含义明确，我们将在记号中省略 $\mathcal{I}^*$。

在陈述估计 $\mathcal{L}_\omega(\mu^*, \xi^*)$ 的下界时，我们要求观测值中的有效噪声——即 $Z(X) := \left(\int_{\mathbb{A}} \mu^*(X, a) d\omega(a \mid X) - \tau^* \right)$ 对于 $X \sim \xi^*$——具有有界峰度：

$$\|Z\|_{2\to 4} := \frac{\sqrt{\mathbb{E}[Z^4]}}{\mathbb{E}[Z^2]} \le c_{2\to 4}(\xi^*) < \infty. \tag{15}$$

具备这一条件后，我们可以陈述一个下界。

定理1。 存在一个通用常数 c，使得对于任意问题实例 $\mathcal{I}^* = (\mu^*, \xi^*)$，若满足 $\mu^* \in \frac{1}{2}\mathcal{F}$：

（a）在矩条件 (15) 成立且给定样本量 $n \ge 16 c^2_{2\to 4}(\xi^*)$时，局部极小极大风险 (14a) 的下界为

$$\mathcal{M}_n(\mathcal{I}^*, \mathcal{F}) \ge \frac{c}{n} \left\{ V^2_{\xi^*}(\mu^*) + V^2_{\sigma,n}(\xi^*, \pi, \omega; \mathcal{F}) \right\}. \tag{16a}$$

[3]为解释我们的记号选择，在特殊情形 $\nu = \xi^*$ 且 $\mathcal{F} = \mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R)$ 下，该泛函与我们先前定义的量 $\tilde{V}^2_{\sigma,\, n}(\pi, \omega; \mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R))$ 成正比，详见下文（参见第 1 节中的 3.1.2）。

(b) 给定样本量 $n \geq 16$时，局部极小极大风险 (14b) 的下界为

$$\mathcal{M}_n(\mathcal{I}^*, x_0; \mathcal{F}) \geq \frac{c}{n} V^2_{\sigma,n}(\delta_{x_0}, \pi, \omega; \mathcal{F}). \tag{16b}$$

证明见第 5.1节。

下界（16a）由两项组成。第一项 $V^2_{\xi^*}(\mu^*)$ 刻画了由于不知道分布 ξ^*而产生的不确定性；在我们的下界中，通过对 ξ^*的允许扰动应用勒卡姆论证即可得到该项。第二项刻画了由加性噪声与行为策略可能缺乏覆盖性共同引起的有效噪声 π。

读者应注意下界（16a）与下界（ ξ^*-平均泛函适用的16b）之间的差异，后者适用于单点泛函。后一个下界具有类似形式，只是项 $V^2_{\xi^*}(\mu^*)$ 不再出现。在这里，对 ξ^* 的了解并不重要，因为待估计的泛函是已知的，并且不依赖于它。

值得强调的是，定理 1 及其推论都是针对固定的 行为策略 π陈述的。因此，所述下界甚至适用于知道行为策略的“神谕”估计量。在实践中，这个函数通常是未知的，尤其是在因果推断中的观察性研究中。然而，正如我们将在下一节中展示的，当我们专门讨论再生核希尔伯特空间时（参见后续的定理 2和3 ），可以通过一种无需了解策略 π的简单程序达到该下界（差一个普适常数）。因此，我们理论的一个令人惊讶的推论是，至少对于 RKHS 情形，关于行为策略 π 的知识不会影响极小极大风险。这一陈述在一般情况下并不成立，过去关于 H¨older 类 [、Rob+09；KBW22]的研究已证明了这一点。

我们还注意到，定理 1 中的下界与固定设计回归中线性泛函估计方面的既有研究相关（例如， [Spe79；SS95；Don94]）。与这些研究一样，量（12）可以视为泛函 $f \mapsto \mathcal{L}_\omega(f, \nu)$的连续模。相较之下，我们的研究讨论的是随机设计情形，因此证明技术有所不同。此外，定理 1中的下界并非总能达到；具体而言，如上所述，对于某些类型的 H¨older 类以及未知行为策略，要得到尖锐下界，需要运用涉及混合分布的论证（而非定理 1所依据的两点勒卡姆论证）。

3.1.2 再生核的显式表示

如第2.2节所述，当 $\mathcal{F}$ 是一个再生核希尔伯特空间（RKHS）时，我们的极小极大下界是紧的（相差一个常数因子），且最优风险有显式表达式。为建立问题，我们考虑属于 $\mathbb{L}^2(\mathbb{P}^*)$ 的一个子集的函数，其中 $d\mathbb{P}^*(x, a) = d\xi^*(x)\, d\pi(a \mid x)$ 是定义在 $\mathbb{U} := \mathbb{X} \times \mathbb{A}$上的分布。特别地，令 $\mathcal{K}$ 为定义在笛卡尔积空间 $\mathbb{U} \times \mathbb{U}$上的实值核函数。我们假设该核函数连续且半正定，并令 $\mathbb{H}$ 为其对应的再生核希尔伯特空间（RKHS）。与该核函数对应的是核积分算子

$$f \mapsto \mathcal{K}(f)(z) := \int_{\mathbb{U}} \mathcal{K}(u, u') f(z') d\mathbb{P}^*(u')$$

根据 Mercer定理， [Mer09], 在温和的正则性条件下，该算子具有实特征值 $\{\lambda_j\}_{j=1}^{\infty}$；由于半正定性的假设，这些特征值均为非负数，并对应特征函数 $\{\phi_j\}_{j=1}^{\infty}$ ，它们在 $\mathbb{L}^2$（$\mathbb{P}^*$）中正交归一。在此记号下，极小极大风险可用这些序列表示。

回顾量 12 的定义: $V_{\sigma n}(\nu,\ \pi,\ \omega;\ \mathcal{F})$，其中 $\nu=\xi^*$ 或 $\nu=\delta_{x_0}$ 是本文主要关注的两种情形。对于状态空间上的任意分布 ν ，我们定义无限维向量 $u(\nu)$，其分量为

$$\bar{u}_j(\nu) := \mathbb{E}_{X\sim\nu}\Big[\int_{\mathbb{A}} \phi_j(X,a)d\omega(a\mid X)\Big]. \tag{17a}$$

该向量是我们先前定义（9a）的推广，先前的定义专用于 $\nu=\xi^*$。我们还回顾方程（9b）中的无限维矩阵 $\mathbf{\Gamma}_\sigma$ ，其元素为

$$[\mathbf{\Gamma}_\sigma]_{jk} := \mathbb{E}_{\xi^*\cdot\pi}\Big[\tfrac{1}{\sigma^2(X,A)}\phi_j(X,A)\phi_k(X,A)\Big], \tag{17b}$$

以及对角矩阵 $\mathbf{\Lambda}=\mathrm{diag}\{\lambda_j\}_{j=1}^{\infty}$。根据这些定义，我们有

命题 1。 对于再生核希尔伯特空间球 $\mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R)$: $=\{f\ \mid\ \|f\|_{\mathbb{H}}\le R\}$ 以及状态空间上的任意分布 ν ，我们有

$$\frac{1}{2}\,V^2_{\sigma,n}(\nu,\pi,\omega;\mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R)) \overset{(a)}{\le} \bar{u}^T(\nu)\Big(\mathbf{\Gamma}_\sigma+\tfrac{1}{R^2n}\mathbf{\Lambda}^{-1}\Big)^{-1}\bar{u}(\nu) \overset{(b)}{\le} 4\,V^2_{\sigma,n}(\nu,\pi,\omega;\mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R)). \tag{18}$$

证明见第 5.2.1 节。

如第 2.2 节所述，该泛函与经典半参数效率界密切相关。以下结果明确了这种联系：

命题 2。在命题 *1*的设定下，如果再生核希尔伯特空间 $\mathbb{H}$ 在 $\mathbb{L}^2(\xi^*\cdot\pi)$ 中稠密，且$V_{semi}(\mu^*,\frac{d\omega}{d\pi})<+\infty$，那么有

$$\lim_{n\to\infty} V_{\sigma,n}(\xi^*,\pi,\omega;\mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R)) = \frac{1}{2}\sqrt{\mathbb{E}_{\xi^*\cdot\pi}\Big[\Big(\frac{d\omega}{d\pi}(A\mid X)\Big)^2\cdot\sigma^2(X,A)\Big]}.$$

证明见第 5.2.2节。

3.2 达到核类的下界

现在我们说明，当假设回归函数μ^* 属于某个再生核希尔伯特空间（RKHS）时，如何达到定理 3.1.2中的下界。关于 RKHS 的设定见第 3.1.2节。我们的理论通过以下有效维数概念涉及这些特征值和特征函数：

$$D(\rho) := \sup_{(x,a)\in\mathbb{X}\times\mathbb{A}}\sum_{j=1}^{\infty}\frac{\lambda_j\phi_j^2(x,a)}{\lambda_j+\rho} \qquad \text{for any scalar } \rho>0. \tag{19}$$

关于有效维数的类似概念已在以往工作中使用 [Zha02; CDV07]。粗略而言，量 $D(\rho$刻画了尺度 $\rho>0$下再生核希尔伯特空间的全局复杂度。

3.2.1 同方差情形

我们先来介绍一个更简单（但可能不是最优）的界，它忽略了任何可能存在的异方差性。更具体地说，我们假设条件方差函数一致有界，即对所有配对 $(x,\ a)$ $\sigma^2(x,\ a) \leq \bar{\sigma}^2$ 和 $(x,\ a)$，都有该性质，并证明关于 $\bar{\sigma}$ 的结果。

在这种情形下，程序的描述非常简单，由两个步骤组成 .

两阶段过程： 给定一个大小为 $2n$ 的数据集，我们将其等分为两个集合 $(X_i^{(\mathrm{I})},\ A_i^{(\mathrm{I})},\ Y_{(\mathrm{I})\,i})_{i\in[n]}$ 和 $(X_i^{(\mathrm{II})},\ A_i^{(\mathrm{II})},\ Y_{(\mathrm{II})\,i})_{i\in[n]}$，每个集合的大小为 n。我们程序中的每个步骤都会使用其中一个数据分割。

第一阶段： 给定正则化参数 $\rho_n > 0$，在数据分割 I 上计算核岭回归（KRR）估计量：

$$\widehat{\mu}_n := \arg\min_{f\in\mathbb{H}} \Big\{ \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \big(Y_i^{(\mathrm{I})} - f(X_i^{(\mathrm{I})}, A_i^{(\mathrm{I})})\big)^2 + \rho_n \|f\|_{\mathbb{H}}^2 \Big\}. \tag{20a}$$

第二阶段： 使用估计量 $\widehat{\mu}_n$ 和数据分割 II 计算经验平均值

$$\widehat{\tau}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \Big\{ \int_{\mathbb{A}} \widehat{\mu}_n(X_i^{(\mathrm{II})}, a) d\omega(a \mid X_i^{(\mathrm{II})}) \Big\} \tag{20b}$$

在实践中，为了最有效地利用数据，也可以进行某种形式的交叉拟合（例如，[Che+18]）。不过，鉴于我们的主要目标是展示定理 1 中的下界在常数因子意义下能够达到，因此只需关注此处给出的更简单程序即可。

假设： 在分析该方法时，我们假设核函数 $\mathcal{K}$ 是κ-一致有界的：

$$\sup_{(x,a)\in\mathbb{X}\times\mathbb{A}} \mathcal{K}\big((x,a),(x,a)\big) \leq \kappa^2. \tag{Kbou(κ)}$$

核方法文献中经常采用这一条件。例如，定义在紧域 $\mathbb{X}\times\mathbb{A}$上的任意连续核函数 $\mathcal{K}$ 都满足该条件。

此外，我们假设零均值噪声变量 $W(x,a) := Y - \mu^*(x,a)$ 一致为 γ-次高斯，这意味着对于所有数对 (x,a)，都有

$$\mathbb{E}\big[e^{tW(x,a)}\big] \leq e^{\frac{t^2\gamma^2}{2}} \qquad \text{for all } t\in\mathbb{R}. \tag{subG(γ)}$$

现在可以陈述我们的第一个主要上界。它要求样本量与尺度 ρ_n 下有效维数之比具有如下下界：

$$\frac{n}{D(\rho_n)} \geq c\frac{\gamma^2}{\bar{\sigma}^2}\log\Big(\frac{nR\kappa}{\bar{\sigma}\delta}\Big)\cdot\log^2(n) \qquad \text{where } \rho_n = \tfrac{\bar{\sigma}^2}{R^2 n}, \tag{21a}$$

对于一个普适的常数 $c>0$。我们将在陈述之后更详细地讨论这一条件 t.

我们的结果涉及高阶项

$$\mathcal{H}_n(\delta) := c\frac{\log(1/\delta)}{n}\Big\{\kappa R + \gamma\sqrt{D(\rho_n)}\log(n)\Big\}, \tag{21b}$$

其中，$\delta \in (0,1)$ 是用户指定的失效概率。可以验证，在样本量条件（21a）下，有 $\mathcal{H}_n(\delta) = o(n^{-1/2})$，因此该项在分析中是高阶项。最后，我们上界中的主导项为

$$V_{\bar{\sigma},n}(\xi^*,\pi,\omega;\mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R))^2 := \bar{\sigma}^2\sum_{j=1}^{\infty}\frac{\lambda_j\bar{u}_j^2}{\lambda_j + \frac{\bar{\sigma}^2}{R^2 n}}. \tag{21c}$$

定理 2。 在满足 (Kbou(κ)) 和 (subG(γ)) 条件的情况下，假设 $\mu^* \in \mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R)$，则存在一个普适常数 $c > 0$，使得对于任意 $\delta \in (0,1)$ 以及满足界 $2n$ 的样本量 $2n$，若其满足 (21a)。则采用正则化 $\rho_n = \frac{\bar{\sigma}^2}{R^2 n}$ 计算得到的两阶段估计量 $\widehat{\tau}_n$ 满足

$$|\widehat{\tau}_n - \tau^*| \le c\Big\{V_{\xi^*}(\mu^*) + V_{\bar{\sigma},n}(\xi^*,\pi,\omega;\mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R))\Big\}\sqrt{\tfrac{\log(1/\delta)}{n}} + \mathcal{H}_n(\delta), \tag{22}$$

以至少 $1-\delta$ 的概率。

证明见第 5.3节。

下面我们对这一结果及其与下界的联系作几点评论。

与定理 1 的比较：正如所指出的，界（22）中的主导项是第一项。当噪声为同方差（即条件方差为常数）时，第一项与定理 1 给出的下界仅相差常数因子和对数因子[4]以及失效概率 δ。当条件方差函数不是常数时，我们的界（22）便不再与定理 1相匹配。我们在第 3.2.2 节弥补这一不足，在该节中，我们分析一种更精细的四阶段程序，它能够适应异方差性。

需要强调的是，定理 2 中分析的两阶段估计量不需要了解行为策略 π。与此同时，正如我们刚才所述，对于同方差噪声，它与定理 1中的下界相匹配；该下界甚至适用于已知策略的预言机估计量。因此，我们得出结论：至少在再生核希尔伯特空间这一特殊情形下，了解行为策略不会改变极小极大风险（除非可能影响常数因子）。

调优参数：估计量中唯一的调优参数是正则化权重 $\rho_n = \frac{\bar{\sigma}^2}{R^2 n}$。该选择取决于信噪比（由比值 $R^2/\bar{\sigma}^2$ 衡量），但不取决于核特征值或问题的其他方面。我们注意到，在线性泛函估计的固定设计情形下，这一选择也见于经典研究

[4]虽然我们给出了一个高概率保证，但只需稍作修改，就能得到一个具有均方误差保证的估计量。特别地，由于 $|\tau^*| \le \sup_{x,\ a}|\mu^*(x,\ a)| \le R\sqrt{\kappa}$，根据柯西–施瓦茨不等式，我们可以构造一个截断估计量

$$\widetilde{\tau}_n := \operatorname{sgn}(\widehat{\tau}_n)\cdot\min\left\{|\widehat{\tau}_n|, R\sqrt{\kappa}\right\}.$$

根据构造，我们有 $|\widetilde{\tau}_n - \tau^*| \le |\widehat{\tau}_n - \tau^*|$ 几乎处处成立；又由于 $\widetilde{\tau}_n$ 是一个有界随机变量，因此定理 2 中建立的高概率界可以转换为均方误差界，其主导项与定理1 相差一个常数因子。

情形 [Spe79; SS95], 但在我们的随机设计情形中，导出这一选择的分析方法截然不同。

正则化参数的衰减速率 $\rho_n \asymp n^{-1}$ 远快于估计完整回归函数时达到最优均方误差所需的标准速率（参见 [Wai19], 第 13 章）。因此，我们的程序第一阶段会输出一个欠平滑的回归函数估计值 μ^*，并在第二阶段使用该估计值，从而得到泛函的最优估计。这种差异源于，估计 μ^* 的泛函时所涉及的偏差-方差权衡，与估计完整回归函数 μ^*时所涉及的权衡截然不同。具体而言，估计泛函时，我们只需为目标泛函方向上的方差付出代价，而正则化引入的偏差则完全体现在估计误差中。

样本量下界：最后，我们来讨论所需的样本量下界（21a）。有多种条件可以确保（21a）成立。例如，在各种例子中，可以证明有效维数满足以下界

$$D(\rho) \le \frac{D_0}{\rho^{1-s}} \qquad \text{for some scalar } s \in (0,1]. \tag{23}$$

在第3.3节中，我们将讨论若干满足该增长条件的具体应用。在界（23）下，只要21a）中的样本量条件成立

$$\frac{n}{\log^{3/s}\left(\frac{nR\kappa}{\bar{\sigma}\delta}\right)} \ge cD_0^{1/s} R^{\frac{2}{s}-2} \gamma^{\frac{2}{s}} \bar{\sigma}^{2-\frac{4}{s}}.$$

在附录A中，我们给出若干条件，在这些条件下，有效维数满足某个增长条件，从而确保样本量条件（21a）能够成立。此外，在附录B中，我们还给出不依赖任何额外增长条件的替代性保证。

3.2.2 推广至异方差性

现在我们转向更具挑战性的问题：如何在异方差情形下实现极小极大最优风险。在这种情形下，我们提出并分析一种四阶段程序。由于条件方差函数非常数且未知，我们需要对其进行估计，而四阶段程序的前两个步骤专门用于此任务。

先从整体上介绍一下。第一阶段生成回归函数 μ^* 的一个粗略估计$\widetilde{\mu}_n$。在第二阶段，我们首先使用 $\widetilde{\mu}_n$，为一组新的三元组 $\mathcal{S}$ 计算与之相关的噪声平方估计值 $Z_i := \left\{Y_i - \widetilde{\mu}_n(X_i, A_i)\right\}^2$（$\{、Y_i,\ X_i,\ A_i\}_{i\in\mathcal{S}}$）。然后，我们计算一个如下形式的条件方差函数估计值

$$\widehat{\sigma}_n^2 := \mathcal{A}\Big(\{(X_i, A_i, Z_i)\}_{i\in\mathcal{S}}\Big), \tag{24}$$

对于经过适当选择的估计量 $\mathcal{A}$。我们允许条件方差估计量 $\mathcal{A}$ 根据应用场景采用不同形式，因此我们的设定提供了一系列由这一选择索引的可能程序。在理论中，我们对估计量的精度要求相对宽松，并将其称为 稳健逐点精度。

现在让我们更详细地说明全部四个阶段。给定样本量 $4n$，我们将数据均分为四个部分，并执行以下四个步骤：

第一阶段： 使用第一个数据集 $(X_i^{(\mathrm{I})},\ A_i^{(\mathrm{I})},\ Y_{(\mathrm{I})\,i})_{i=1}^n$ 和正则化参数 $\rho_n > 0$，计算初始估计

$$\widetilde{\mu}_n := \arg\min_{\mu\in\mathbb{H}} \Big\{ \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \big(Y_i^{(\mathrm{I})} - \mu(X_i^{(\mathrm{I})}, A_i^{(\mathrm{I})})\big)^2 + \rho_n^{(\mathrm{I})}\|\mu\|_{\mathbb{H}}^2 \Big\}. \tag{25a}$$

第二阶段： 使用第二个数据集 $(X_i^{(\mathrm{II})},\ A_i^{(\mathrm{II})},\ Y_{(\mathrm{II})\,i})_{i=1}^n$ 并采用程序 $\mathcal{A}$，计算噪声平方估计 $Z_i^{(\mathrm{II})} := (Y_{(\mathrm{II})\,i} - \widetilde{\mu}_n(X_i^{(\mathrm{II})},\ A_i^{(\mathrm{II})}))^2$，基于初始估计（25a），然后计算估计量

$$\widehat{\sigma}_n^2 := \mathcal{A}\Big(\big\{X_i^{(\mathrm{II})}, A_i^{(\mathrm{II})}, Z_i^{(\mathrm{II})}\big\}_{i\in[n]}\Big) \qquad \text{of the conditional variance function.} \tag{25b}$$

第三阶段： 使用第三个数据集 $(X_i^{(\mathrm{III})},\ A_i^{(\mathrm{III})},\ Y_{(\mathrm{III})\,i})_{i=1}^n$、正则化参数 $\rho_n^{(\mathrm{III})} > 0$ 和估计函数 $\widehat{\sigma}_n^2$，计算加权回归估计量

$$\widehat{\mu}_n := \arg\min_{\mu\in\mathbb{H}} \Big\{ \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \frac{1}{\widehat{\sigma}_n^2(X_i^{(\mathrm{III})}, A_i^{(\mathrm{III})})} \big(Y_i^{(\mathrm{III})} - \mu(X_i^{(\mathrm{III})}, A_i^{(\mathrm{III})})\big)^2 + \rho_n^{(\mathrm{III})}\|\mu\|_{\mathbb{H}}^2 \Big\}. \tag{25c}$$

第四阶段： 使用第四个数据集 $(X_i^{(\mathrm{IV})},\ A_i^{(\mathrm{IV})},\ Y_{(\mathrm{IV})\,i})_{i=1}^n$ 以及加权回归估计量（25c），计算经验平均值

$$\widehat{\tau}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \int \widehat{\mu}_n(X_i^{(\mathrm{IV})}, a)\, d\omega(a \mid X_i^{(\mathrm{IV})}) \tag{25d}$$

我们指出，在文献中，利用估计的条件方差进行重新加权的思路已应用于线性模型的参数估计。关于详细讨论，参见论文 [RW17] 及其中的参考文献。现在我们转向对四阶段程序的分析。我们不分析某个特定的条件方差函数估计量 $\mathcal{A}$，而是提出一个抽象条件，以涵盖多种不同的估计量

稳健逐点方差估计量： 该性质用于证明估计量 $\mathcal{A}$ 能够在逐点意义下提供 ε精确的估计：对于任意固定的点对 $(x_0,\ a_0)$，以至少 $1-\delta$ 的概率，我们有

$$\Big|\mathcal{A}\Big(\{X_i, A_i, Z_i\}_{i\in[n]}\Big)(x_0, a_0) - \sigma^2(x_0, a_0)\Big| \le \varepsilon. \tag{26}$$

关键在于量化输入 Z_i 作为噪声平方 $(Y_i - \mu^*(X_i,\ A_i))^2$ 的近似值时所产生的误差如何影响这一保证。为此，我们通过定义在输入 $(\varepsilon,\ \delta)$ 上的一对函数来实现，这两个函数分别称为容差函数 t 和样本阈值 M。

定义1. 程序 $\mathcal{A}$ 是(t, M)-逐点稳健的，当对于任意一对$(\varepsilon, \delta) \in [0,1]^2$，任意大小为 $n \ge M$的(ε, δ)数据集 $\{Z_i\}_{i=1}^n$，其中包含的变量满足对每个 $i \in [n]$[5]

$$\big|\mathbb{E}[Z_i \mid X_i, A_i] - \sigma^2(X_i, A_i)\big| \le t(\varepsilon,\delta) \quad \textit{and} \quad \|Z_i \mid X_i, A_i\|_{\psi_1} \le 4\big(\gamma^2 + t(\varepsilon,\delta)\big), \tag{27}$$

[5]在定义（27）中，量 γ是次高斯参数（参见条件（subG(γ)）），而$\|\cdot\|_{\psi_1}$是 Orlicz(1)范数，即次指数参数。

那么，对于任意固定的一对 $(x_0,\ a_0)$，界 (26) 以概率 $1-\delta$ 成立。

有多种估计量满足稳健逐点风险性质；更多讨论请参见附录D。

为了分析四阶段程序，我们需要对条件方差函数增加一个条件：存在标量 $0<\sigma\le\bar{\sigma}<\infty$，使得

$$\sigma(x,a)\in[\underline{\sigma},\bar{\sigma}]\quad\text{for all }(x,a). \tag{σ-INT}$$

我们还要求样本量满足以下下界

$$\frac{n}{D(\rho_n^{(\mathrm{I})})}\ge\Big\{c\frac{\gamma^2}{\underline{\sigma}^2}\log\big(\frac{nR\kappa}{\underline{\sigma}\delta}\big)\cdot\log^2 n\Big\}, \tag{28a}$$

$$n\ge M\big(\underline{\sigma}/2,\delta/(2n)\big)\quad\text{and}\quad\frac{n}{\gamma D(\rho_n^{(\mathrm{I})})\log(n/\delta)}\ge\frac{1}{t\big(\frac{\underline{\sigma}^2}{2},\frac{\delta}{2n}\big)}. \tag{28b}$$

有了这些设定，我们现在可以给出关于四阶段程序的保证。请注意，该程序有两个调优参数：第一阶段回归中的正则化参数 $\rho_n^{(\mathrm{I})}$，以及第三阶段加权回归中的正则化参数 $\rho_n^{(\mathrm{III})}$。我们的保证适用于使用以下参数的程序

$$\rho_n^{(\mathrm{I})}=\frac{\bar{\sigma}^2}{R^2 n}\quad\text{and}\quad\rho_n^{(\mathrm{III})}=\frac{1}{R^2 n}. \tag{29}$$

定理 3。 除定理 2的假设外，假设条件方差函数满足区间条件 (σ-INT)，估计量 $\mathcal{A}$ 是 $(t,\ M)$-稳健的，且样本量 $4n$ 满足下界 (28a) 和 (28b)。那么，使用方程 (29)中的正则化参数，四阶段程序会得到一个估计值 $\widehat{\tau}_n$，使得

$$|\widehat{\tau}_n-\tau^*|\le c\Big\{V_{\xi^*}(\mu^*)+V_{\sigma,n}(\xi^*,\pi,\omega;\mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R))\Big\}\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}}+\mathcal{H}_n(\delta), \tag{30}$$

具有概率性 $1-\delta$，其中高阶项 $\mathcal{H}_n(\delta)$ 已在前文定义 (21b) .[6]

证明见第 5.4 节。

这里有几点值得说明。首先，定理3 能够适应观测噪声的异方差特性——项 $V_{\sigma,\ n}^2(\xi^*,\ \pi,\ \omega;\ \mathcal{F})$ 涉及实际的条件方差σ，而非其一致上界 $\bar{\sigma}$。借助这种精细刻画的方差，界（30）实现了定理 1中的依实例而定的最优性结果，误差仅在于普适常数和高阶项。（关于高概率界与均方误差界之间的联系，见脚注 4 。）

我们注意到，样本量条件 (28a) 略强于定理 2 中使用的条件 (21a)，其中分母中的方差上界 $\bar{\sigma}^2$ 被下界 σ^2取代。定理3 还要求额外的样本量条件 (28b)，这是由稳健逐点估计量的样本复杂度 $\widehat{\sigma}_n$所决定的。

[6]我们在其表达式中取 $\rho_n=\rho_n^{(\mathrm{I})}$。

扩展至单点泛函估计： 现在我们将结果扩展到单点泛函 $\tau^*(x_0) := \mathcal{L}_\omega(\mu^*, \delta_{x_0})$ 的估计。在这种情况下，目标泛函已知，因此无需执行四阶段程序的第四阶段。只需将数据总共分为三折，并直接代入回归函数 $\widehat{\mu}_n$，即可得到估计量

$$\widehat{\tau}_n(x_0) := \mathcal{L}_\omega(\widehat{\mu}_n, \delta_{x_0}) = \int_{\mathbb{A}} \widehat{\mu}_n(x_0, a) d\omega(a \mid x_0). \tag{31}$$

该估计量满足最优保证，与定理1(b)的结果相差至多一个常数因子。特别地，在定理3的设定下，对任意 $x_0 \in \mathbb{X}$，都有

$$|\widehat{\tau}_n(x_0) - \tau^*(x_0)| \le c \cdot V_{\sigma,n}(\delta_{x_0}, \pi, \omega; \mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R)) \sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}}, \tag{32}$$

以 $1 - \delta$的概率成立。证明见第5.4.4 节。

下面说明几点。首先，方程（32）中的上界与定理1(b)中的局部极小极大下界相差至多普适常数因子，体现了其在依赖于实例的意义下的最优性。[7] 与定理2 和3不同，最优的依赖于实例的风险（在普适常数范围内）无需额外的高阶项即可实现。（32）中的参数选择和样本量要求与定理3完全相同，且不依赖于查询点 x_0。这种自适应性使该估计量在实践中很有用，可以采用即插即用的方法：只需运行四阶段框架（25）的阶段 I–III，并生成一个估计量 $\widehat{\mu}_n$。利用另一折数据将该估计量代入方程（25d），或针对任意查询点 x_0代入方程（31），即可始终获得最优且自适应的保证。

3.3 若干具体示例的推论

本节将阐述一般理论对若干特定问题类别的推论，包括无重叠的缺失数据问题（第 3.3.1 节），并在第 1 节中给出了一个说明性模拟。

3.3.1 一个不满足重叠假设的缺失数据示例

考虑经典缺失数据设定，其中动作空间为 $\mathbb{A} = \{0, 1\}$，且对于任意 $x \in \mathbb{X}$，权重由 $\omega(a \mid x) = a$ 给出。不失一般性地，假设当 $A = 0$ 时，$Y = 0$。我们稍微滥用记号，使用 $\mu^* : \mathbb{X} \to \mathbb{R}$ 表示结果函数$\mu^*(\cdot, 1)$，并使用 $\pi : \mathbb{X} \to [0, 1]$ 表示倾向得分 $\pi(1 \mid \cdot)$。类似地，我们用 $\mathcal{K}(x, x')$ 表示 $\mathcal{K}((x, 1), (x', 1))$，并令核函数在任一自变量的动作等于 0 时取 0。在这种简化记号下，$\mathbb{L}^2(\xi^* \cdot \pi)$ 的内积形式为

$$\langle f_1, f_2 \rangle := \int_{\mathbb{X}} f_1(x) f_2(x) \pi(x) d\xi^*(x),$$

我们关注的是估计平均处理效应及其条件对应量

$$\tau^* := \mathbb{E}_\xi\big[\mu^*(X)\big], \quad \text{and} \quad \mathcal{L}_\omega(\mu^*, \delta_{x_0}) := \mu^*(x_0).$$

[7] 按照脚注 4中的讨论，可以通过一种简单的截断方法，轻松地将高概率界转换为均方误差界。

具体而言，我们令状态空间为单位区间 $\mathbb{X} = [0,1]$ ，并令输入分布 ξ 为 $\mathbb{X}$ 上的均匀分布。为了说明缺乏重叠条件对风险的影响，给定标量 $\alpha > 0$，我们构造如下倾向得分函数

$$\pi(x) = (1-x)^{\alpha} \quad \text{for any } x \in [0,1]. \tag{33}$$

我们的目标是理解重要性比率中具有局部 α阶多项式增长的奇异性的影响。此类奇异性的具体位置，以及除存在这一 α阶奇异性之外的任何性质，都与我们的比较无关，因此我们选择式（33）这一特定形式，以便于技术处理。

我们考虑一个再生核希尔伯特空间 $\mathbb{H}$，它对应于 $[0,1]$ 上的一阶索博列夫空间（见 [Wai19],第 12 章）。其核函数为 $K(x, x') = \min\{x, x'\}$，相应的再生核希尔伯特空间 $\mathbb{H}$ 由满足 $f(0) = 0$，并且

$$\|f\|_{\mathbb{H}}^2 := \int_0^1 \big(f'(x)\big)^2 dx < +\infty.$$

我们假设回归函数 $\mu^* : \mathbb{X} \to \mathbb{R}$ 属于该再生核希尔伯特空间，其中 $\|\mu^*\|_{\mathbb{H}} \le 1/2$。最后，对于任意状态-动作对 (x, a)，我们将条件方差设为 $\sigma^2(x, a) \equiv 1$，并假设次高斯参数 γ 为常数量级。

在此设定下，我们可以计算各种线性泛函的极小极大速率。本节中，我们始终用记号 $a_n \asymp b_n$ 表示比值 a_n/b_n 满足依赖于常数（α，x_0）的有限正上界和下界，且这些界与n无关。如前所述，在记号 $\mathcal{M}_n\big(\mathcal{I}^*, \mathcal{F}\big)$ 和$\mathcal{M}_n\big(\mathcal{I}^*, x_0$中，我们省略了问题实例 $\mathcal{I}^*$；$\mathcal{F}\big)$ 表示极小极大风险速率。

推论 1。在上述设定下，对于任意函数 $\mu^* \in \mathbb{B}_{\mathbb{H}}(1/2)$，估计线性泛函 τ^* 的极小极大风险为

$$\mathcal{M}_n\big(\mathbb{B}_{\mathbb{H}}(1)\big) \asymp \begin{cases} n^{-1} & \alpha < 1, \\ n^{-1}\log n & \alpha = 1, \\ n^{-\frac{3}{\alpha+2}} & \alpha > 1. \end{cases} \tag{34a}$$

对于单点泛函 $\mathcal{L}_\omega(\mu^*, \delta_{x_0})$，我们有

$$\mathcal{M}_n\big(x_0; \mathbb{B}_{\mathbb{H}}(1)\big) \asymp \begin{cases} 0 & x_0 = 0, \\ n^{-1/2} & x_0 \in (0,1), \\ n^{\frac{-1}{2+\alpha}} & x_0 = 1, \end{cases} \tag{34b}$$

见附录E.1 中的证明。

有几点值得说明。对于平均处理效应 τ^*，估计的最优速率会根据局部增长指数 α 发生相变。在 $\alpha \in [0,1)$ 的情形下，重要性比率的性质足够良好，经典量V_{semi} 是有限的，因此我们能够以经典的 $\sqrt{n}$ 速率收敛。当$\alpha \ge 1$时，速率会变慢，此时方差 V_{semi}^2 是无穷大。α 的值越大，$x = 1$邻域内的观测值就越少，进而导致收敛速率变慢。请注意，即使目标 τ^* 被定义为区间 $[0,1]$，上的全局平均，最优收敛速率仍然

受到区间内奇异性的影响。[8] 最后要指出，尽管推论 1呈现了广泛的速率范围，但这些速率都可以自适应地达到——也就是说，使用一种无需了解行为策略 π 或指数 α的估计量。

我们对条件平均处理效应 $\mathcal{L}_\omega(\mu^*, \delta_{x_0})$作几点说明。在这种情况下，当 $x_0 = 0$时，问题变得简单，因为索博列夫空间 $\mathbb{H}$中的函数满足 $\mu^*(0) = 0$。对于任意 $n^{-1/2}$，最优速率为 $x_0 \in (0, 1)$，这对应于文献中索博列夫回归的极小极大单点速率 [Tsy08]。当 $x_0 = 1$时，极小极大速率要慢得多，此时结果观测值的稀缺程度由指数 α控制。与平均处理效应的情形一样，这些速率可以通过一个无需了解函数 π的估计量达到。

3.3.2 连续动作的离策略评估

现在我们考虑连续臂赌博机设置。为简单起见，我们采用状态空间$\mathbb{X} = [0,1]^{d_x}$和动作空间 $\mathbb{A} = [0,1]^{d_a}$，并令分布 ξ、 $\pi(\cdot \mid x)$分别为空间 $\mathbb{X}$ 和 $\mathbb{A}$上的均匀分布，对任意 $x \in \mathbb{X}$均如此。给定标量$s > (d_x + d_a)/2$，我们令再生核希尔伯特空间 $\mathbb{H} = \mathbb{H}^s$ 为阶数为 s的索博列夫空间，并施加周期边界条件（因此，状态-动作空间可视为环面）。

在这一设定下，特征函数由环面 $\mathbb{T}^{d_x+d_a}$ 上的标准（复）傅里叶基给出，可写成乘积形式

$$\Big\{(x,a) \mapsto \phi_j(x)\psi_k(a)\Big\}_{j,k\geq 0},$$

其中， $\{\phi_j\}_{j\geq 0}$ 和 $\{\psi_k\}_{k\geq 0}$ 分别是环面 $\mathbb{T}^{d_x}$ 和 $\mathbb{T}^{d_a}$ 上的傅里叶基。注意，这些特征函数的上确界范数一致有界。

在本节中，我们将问题参数 (d_x, d_a, s) 视为通用常数，并省略仅依赖于这些参数的常数因子。对于索博列夫空间 $\mathbb{H}^s$，令 $\lambda_{j,k}$为由 j, k 索引的特征函数所对应的特征值，它满足衰减条件（见 [BTA11]）

$$\lambda_{j,k} \asymp \min\Big\{j^{-2s/d_x}, k^{-2s/d_a}\Big\}. \tag{35}$$

结合特征值衰减假设和特征函数的有界性条件，可以验证条件(Kbou(κ))成立；特别地，我们有

$$\kappa^2 := \sup_{x,a}\sum_{j,k\geq 0}\lambda_{j,k}\phi_j^2(x)\psi_k^2(a) \leq \sup_{x,a}\sum_{j,k\geq 0}\lambda_{j,k} < \infty,$$

其中，最后一个不等式由 $s > (d_a + d_x)/2$ 这一事实推出。

给定确定性目标策略 $T\colon \mathbb{X} \to \mathbb{A}$，对于 $x \in \mathbb{X}$，我们令 $\omega(\cdot \mid x)$ 为 $T(x)$ 上的原子测度，因此，所关注的线性泛函具有以下形式：

$$\tau^* := \int_{\mathbb{X}} \mu^*(x, T(x))dx, \quad \text{and} \quad \mathcal{L}_\omega(\mu^*, \delta_{x_0}) := \mu^*(x_0, T(x_0)).$$

最后，我们令条件方差函数为单位值 $\sigma^2 \equiv 1$，并假设次高斯参数 γ 的阶为 1。令 μ^* 为希尔伯特球 $\mathbb{B}_{\mathbb{H}}(1/2)$ 中的任意函数。

[8]附录中的证明E.1 可以轻松推广到在 $[0,1]$, 的任意有限子集上取零的倾向得分函数，除零点附近的局部增长条件外，其行为可以任意。

请注意，在此例中，重要性比率 $\frac{d\omega}{d\pi}$ 未定义，因为对于任意 $x \in \mathbb{X}$，测度 $\omega(\cdot \mid x)$ 都是原子的。尽管如此，仍然可以进行估计，而我们的一般框架能够精确刻画极小极大风险，具体如下。

推论 2. 在上述设定下，我们有

$$\mathcal{M}_n\big(\mathbb{B}_{\mathbb{H}}(1)\big) \asymp \frac{\mathrm{var}_\xi\left(\mu^*(X, T(X))\right)}{n} + \sum_{j,k\geq 1} \frac{|\langle \phi_j,\, \psi_k \circ T\rangle|^2}{n + j^{2s/d_x} + k^{2s/d_a}}, \tag{36a}$$

$$\mathcal{M}_n\big(x_0; \mathbb{B}_{\mathbb{H}}(1)\big) \asymp n^{\frac{d_a+d_x}{2s}-1}, \quad \textit{for any } x_0 \in \mathbb{T}^{d_x}. \tag{36b}$$

此外，在最坏情形的目标策略下，我们有

$$\sup_T \mathcal{M}_n\big(\mathbb{B}_{\mathbb{H}}(1)\big) \asymp n^{\frac{d_a}{2s}-1}. \tag{36c}$$

证明见附录E.2 。

下面给出几点说明。对于单点泛函 $\mathcal{L}_\omega(\mu^*, \delta_{x_0})$，方程（36b）给出的最优速率，恰好等于在点（$d_a + d_x$）估计一个（$x_0, T(x_0)$ 维索об列夫函数的最优速率。对于平均泛函 τ^*，在最坏情形下，由于状态空间中的平均效应，我们只需考虑动作空间的维度 d_a 。此外，估计的精确复杂度由方程（36a）刻画，它取决于目标策略 T的性质。估计量 $\widehat{\tau}_n$可达到这样的实例最优风险。最后需要指出，尽管推论 2 针对的是确定性目标策略 T，该结果可自然推广到一般的随机化目标策略。

4 模拟研究

在本节中，我们展示若干模拟研究的结果，并将我们提出的程序与其他方法进行比较。具体而言，我们针对两类缺失数据问题开展实验：一类由第 3.3.1 节讨论的奇异重要性比率族定义，另一类是 Khan 和 Tamer 提出的重尾示例 [KT10], 及其若干推广。这两个示例使我们能够探讨无界重要性比率可能产生的两种不同方式。

具体而言，我们开展实验，目标是基于缺失数据估计处理效应。设状态空间为实数轴 $\mathbb{X} = \mathbb{R}$，动作空间为二元空间， $\mathbb{A} = \{0, 1\}$。我们用动作 $a \in \mathbb{A}$ 来建模缺失情况，因此当且仅当 Y时，我们才能观测到结果 $A = 1$。为简单起见，我们稍微滥用一下记号，用 μ^*表示函数 $\mu^*(\cdot, 1)$。类似地，我们用 π 表示函数 $\pi(1 \mid \cdot)$。目标是估计线性泛函（1），其中 $\omega(a \mid x) = a$，即：

$$\tau^* = \mathbb{E}_\xi\big[\mu^*(X)\big].$$

本节中，我们考虑 $\sigma^2(x, a) \equiv 1$ 条件下的同方差情形。根据方程（8），该问题的半参数效率界为

$$V_{semi}^2 = \mathrm{var}_\xi^*\left(\mu^*(X)\right) + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\xi(x)}{\pi(x)} dx, \tag{37}$$

它可能是有限的，也可能不是。

本节余下部分将介绍并讨论仿真问题实例的构造，以及我们考虑的各种估计量选择。随后，我们将呈现模拟结果。

四种可能的估计量：我们比较了四种可能的平均处理效应估计量的表现，其中两种基于逆倾向权重，另外两种（包括我们的估计量）基于结果回归。

首先，我们考虑朴素逆倾向加权（IPW）估计量，其定义如下：

$$\widehat{\tau}_{n,\mathrm{ipw}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{Y_i A_i}{\pi(X_i)}. \tag{38}$$

请注意，估计量 $\widehat{\tau}_{n,\mathrm{ipw}}$ 的期望始终有限，其中 $\mathbb{E}[\widehat{\tau}_{n,\mathrm{ipw}}] = \tau^*$。假设结果函数有界，则 $\widehat{\tau}_{n,\mathrm{ipw}}$ 的方差（若存在）为

$$\mathbb{E}\big[\,|\widehat{\tau}_{n,\mathrm{ipw}} - \tau^*|^2\,\big] \asymp n^{-1}\Big(V_{semi}^2 + \mathbb{E}_\xi\big[\frac{1+[\mu^*(X)]^2}{\pi(X)}\big]\Big) \asymp \frac{1}{n}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\xi(x)}{\pi(x)}dx.$$

一般而言，若二阶矩不存在，朴素 IPW 估计量可能收敛至重尾稳定律，其速率慢于 ¨ıve IPW estimator may converge to aheavy-tailed stable law,at arateslowerthan $\sqrt{n}$。（参见 [Kal97],第 14 章）

Khan 和 Tamer [KT10] 建议通过剔除倾向得分极小的数据来改进朴素¨ıve IPW。给定截断水平 γ_n，我们定义估计量

$$\widehat{\tau}_{n,\mathrm{trunc}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{Y_i A_i}{\pi(X_i)}\mathbf{1}[\pi(X_i)\geq\gamma_n], \tag{39}$$

其中 $\mathbf{1}[\pi(X_i) \geq \gamma_n]$ 在 $\pi(X_i) \geq \gamma_n$时等于 1，否则等于 0。

现在，我们转向两阶段框架（20）中定义的、基于核岭回归的结果回归估计量。为了改善普适常数因子（我们的理论未涵盖这些因子），我们采用交叉拟合程序，即根据框架（20）生成一个估计量$\widehat{\tau}_n^{(\mathrm{I})}$。交换（$X_i^{(\mathrm{I})}$、$A_i^{(\mathrm{I})}$、$Y_{(\mathrm{I})\,i}$）和（$X_i^{(\mathrm{II})}$、$A_i^{(\mathrm{II})}$、$Y_{(\mathrm{II})\,i}$）的角色，并应用相同的两阶段框架，可得到另一个估计量 $\widehat{\tau}_n^{(\mathrm{II})}$，最终估计量定义为

$$\widehat{\tau}_n = \frac{1}{2}\big(\widehat{\tau}_n^{(\mathrm{I})} + \widehat{\tau}_n^{(\mathrm{II})}\big). \tag{40}$$

对于正则化参数 ρ_n，我们考虑两种可能的选择：

- 最优选择：根据方程（21a）中的最优理论预测，我们对任意 $n > 0$设定$\rho_n = \frac{0.5}{n}$。我们将此估计量称为$\widehat{\tau}_{n,\,\mathrm{opt}}$。
- 交叉验证：对于每个样本量 n，我们使用交叉验证来寻找使预测 μ^* 的均方误差最小的正则化参数。我们将此估计量称为$\widehat{\tau}_{n,\,\mathrm{cv}}$。

值得注意的是，用于估计标量 τ^* 的正则化参数 ρ_n 的最优选择，并不 等同于用于估计回归函数μ^*的最优选择。事实上，正如我们将在模拟结果中看到的，在我们的框架下，非参数估计中常见的交叉验证方法会导致次优的半参数性能，而欠平滑对于获得最优保证至关重要。

4.1 重尾协变量下的模拟结果

我们首先介绍 Khan 和 Tamer 提出的重尾协变量示例的模拟设置和结果 [KT10]。

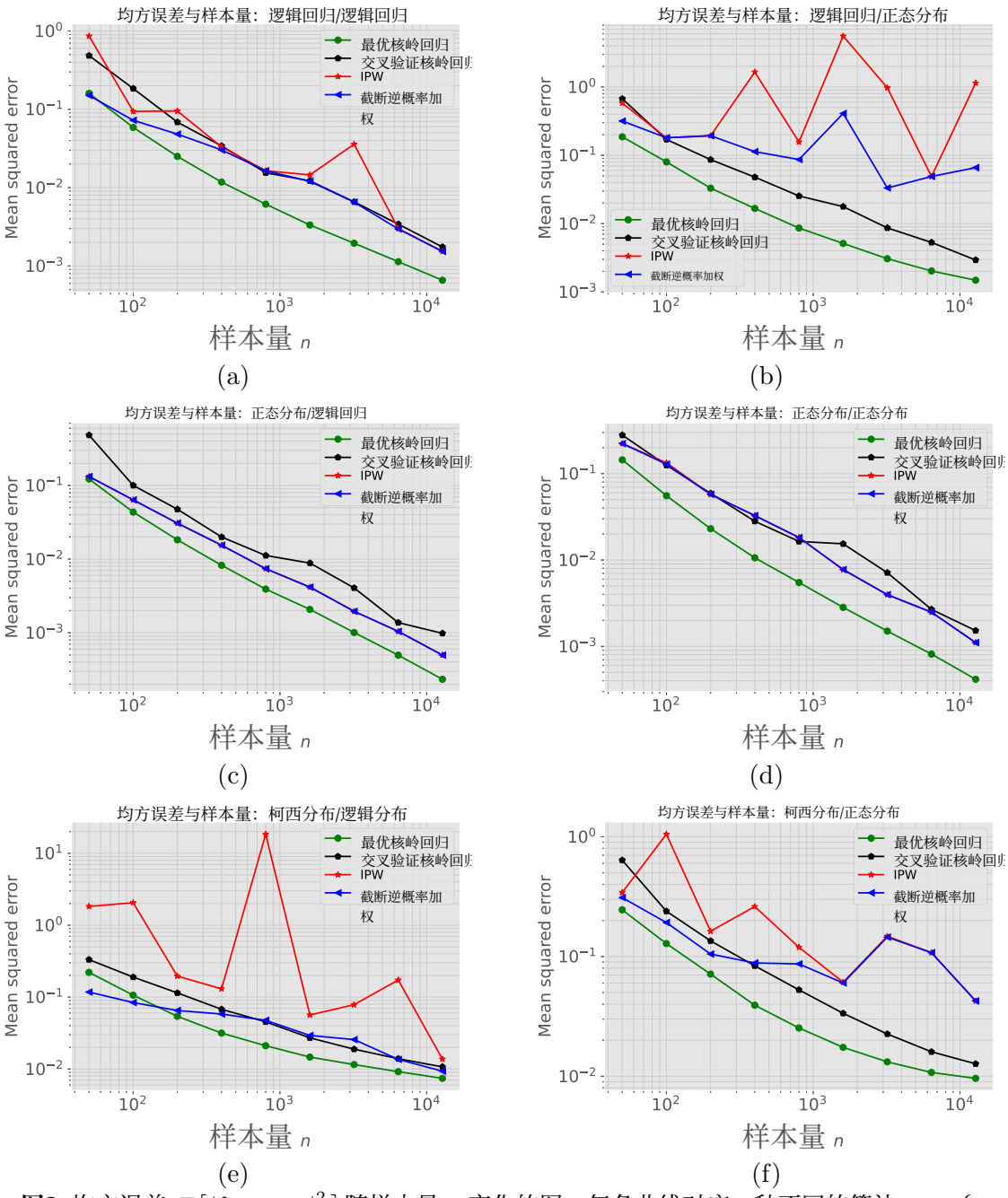


图2. 均方误差 $\mathbb{E}\big[|\widehat{\tau}_{n,\diamond} - \tau^*|^2\big]$ 随样本量 n变化的图。每条曲线对应一种不同的算法 $\diamond \in \{$ ipw，trunc，opt，cv$\}$。每个标记对应基于 2000 次独立运行的经验平均值计算的一个蒙特卡洛估计。对于交叉验证估计量 $\widehat{\tau}_{n,\,\mathrm{cv}}$，正则化参数的选择基于前 50 次运行的交叉验证结果的平均值。正如子图标题所示，每个面板对应一种问题设置（ξ，π）$\in \{\xi^{\mathrm{L}}, \xi^{\mathrm{N}}, \xi^{\mathrm{C}}\} \times \{\pi^{\mathrm{L}}, \pi^{\mathrm{N}}\}$。图中两个坐标轴均采用对数刻度。部分曲线可能彼此重叠。

模型设定： 我们考虑数据分布的以下几种选择 ξ^*：

$$\text{Standard normal:} \quad \xi^{\mathrm{N}}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\big(-x^2/2\big),$$

$$\text{Standard logistic:} \quad \xi^{\mathrm{L}}(x) = \big(e^{x/2} + e^{-x/2}\big)^{-2},$$

$$\text{Standard Cauchy:} \quad \xi^{\mathrm{C}}(x) = \frac{1}{\pi(1+x^2)}.$$

在这些选择中，正态分布的尾部最轻，而柯西分布的尾部最重。

我们使用以下回归函数开展模拟研究

$$\mu^*(x) = 1 + \cos(x) \quad \text{for } x \in \mathbb{R}.$$

这一具体选择并非本研究的关键；我们只是选择了一个有界且光滑的回归函数。请注意，我们考虑的许多估计量都涉及收缩、正则化或截断步骤，这些步骤会使输出向 0 收缩。为确保比较公平，我们加上偏移量 1，使回归函数非负，且目标泛函远离 0。

为实现基于核的方法，我们使用拉普拉斯核

$$\mathcal{K}(u, u') := \exp\big(-2|u - u'|\big), \quad \text{for } u, u' \in \mathbb{R}.$$

对于行为策略 π，我们分别使用逻辑斯蒂分布和正态分布的累积分布函数。

$$\pi^{\mathrm{N}}(x) = \int_x^\infty \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\big(-y^2/2\big) dy, \quad \text{and} \quad \pi^{\mathrm{L}}(x) = \frac{1}{1 + e^x}.$$

请注意，对于这两种选择，$\pi(x)$都会随着 x 增加而趋近于 0；在正态模型下，其衰减速率比在逻辑斯蒂模型下更快。

论文 [KT10] 考虑密度函数 $\xi = \xi^{\mathrm{L}}$以及倾向得分函数 $\pi \in \{\pi^{\mathrm{N}}, \pi^{\mathrm{L}}\}$。在这两种设定下，方程（37）中推导出的半参数效率界均为无穷大，但通过截断型估计量仍可达到一定的收敛速率（详情见 [KT10]的第4.1节）。Khan 和 Tamer 提议将 $\pi = \pi^{\mathrm{N}}$ 的截断阈值设为 $X_i \leq \sqrt{\log n}$，将 $\pi = \pi^{\mathrm{L}}$ 的截断阈值设为 $X_i \leq \log n$。事实上，在倾向得分分别为 π^{L} 和 π^{N} 时，这些阈值可确保截断后的逆倾向得分权重一致地被 n 的某个多项式所界定。在模拟研究中，我们考虑 $\xi \in \{\xi^{\mathrm{N}}, \xi^{\mathrm{L}}, \xi^{\mathrm{C}}\}$ 和 $\pi \in \{\pi^{\mathrm{N}}, \pi^{\mathrm{L}}\}$ 的所有可能组合。在逻辑回归倾向得分 π^{L} 下，我们选择 $\gamma_n = \pi(\log n)$；在正态分布倾向得分 π^{N} 下，我们选择 $\gamma_n = \pi(\sqrt{\log n})$。无论选择何种数据分布 ξ，这些选择都能得到近乎最优的截断水平。直观而言，分布 ξ 的尾部越重、倾向得分 π 的尾部越轻，基于重要性加权的估计量的行为就越不规则。

在我们的模拟设置中，唯一能得到有限 V_{semi} 的情形是 $(\pi = \pi^{\mathrm{L}}, \xi = \xi^{\mathrm{N}})$；近期的其他研究 [Su+23; Jia+22] 也研究了这一特定配置。对于其余五种设置，由于倾向得分的奇异行为，关于 $\sqrt{n}$-一致性和半参数效率的经典理论并不适用。

模拟结果：在图 2中，我们展示了上述设置下不同估计量的模拟结果。样本量的范围为 $n \in \{50, 100, 200, 400, 800, 1600, 3200, 6400, 12800\}$，均方误差则通过 2000 次独立运行的经验平均值进行估计。

从模拟结果可以看出，我们的估计量 $\widehat{\tau}_{n,\mathrm{opt}}$ 始终优于其他三种基线方法。然而，使用交叉验证调整正则化参数时，该估计量 $\widehat{\tau}_{n,\mathrm{cv}}$ 在所有模拟实例中的表现都明显较差。这表明，欠平滑对于结果回归估计量的性能至关重要

，而且函数估计与标量估计问题中的最优偏差-方差权衡截然不同。截断IPW估计量也表现得合理且稳健，但在大多数设置下，其收敛速率（以双对数图中曲线的斜率表示）不及 $\widehat{\tau}_{n,\mathrm{opt}}$。另一方面，朴素IPW估计量可能极不稳定，尤其是在重尾数据分布 ξ^{L} 和 ξ^{C}下。最后，我们指出，这两类估计量通常不可比较，因为它们使用的信息不同——基于IPW的估计量 $\widehat{\tau}_{n,\mathrm{ipw}}$ 和 $\widehat{\tau}_{n,\mathrm{trunc}}$ 利用了真实倾向得分 π的信息，而 $\widehat{\tau}_{n,\mathrm{opt}}$ 和 $\widehat{\tau}_{n,\mathrm{cv}}$并不需要该信息；另一方面，结果回归估计量 $\widehat{\tau}_{n,\mathrm{opt}}$ 和 $\widehat{\tau}_{n,\mathrm{cv}}$ 要求处理效应函数属于再生核希尔伯特空间，而截断IPW估计量 $\widehat{\tau}_{n,\mathrm{trunc}}$ 只要求该函数有界。

讨论不同设置下估计量性能的差异也很有用。在经典 $\sqrt{n}$-情形下，$\pi = \pi^{\mathrm{L}}$ 且 $\xi = \xi^{\mathrm{N}}$时，截断以很高的概率不会发生，因此朴素逆概率加权估计量与截断估计量具有相同的均方误差，如图2(c)所示。在其他五种情形中，$\widehat{\tau}_{n,\ \mathrm{ipw}}$ 的估计误差不稳定，且劣于相应的截断估计量。从图2的(a)–(d)面板中的双对数图可以看出，绿色曲线的斜率约为1，而(e)和(f)面板中的斜率则平缓得多。这一观察表明，在逻辑回归模型和正态模型下，最优收敛速率可能接近参数速率；而在柯西情形下，较慢的极小极大速率可能无法避免。

4.2 奇异重要性比率下的模拟结果

本节报告缺失数据问题在存在奇异重要性比率时的完整模拟结果，具体情况如第1.1节前文所述——特别参见方程（2）。我们运行上述四种估计量，并比较其性能。模拟设置基本与第4.1节相同，唯一的区别是样本量在 $n \in \{100, 200, 400, 800, 1600, 3200, 6400, 12800\}$.[9] 范围内变化。在定义基于截断的估计量$\widehat{\tau}_{n,\ \mathrm{trunc}}$时，我们采用截断水平 $\gamma_n = 1/\sqrt{n}$；这一选择使其在截断逆概率加权估计量中达到最优收敛速率。

在图 3 中，我们展示了模拟结果。问题实例是从具有指数 $\alpha \in \{0.5, 1, 2, 3\}$ 的奇异模型族 (2) 中生成的。可以看出，模拟结果与我们的理论预测吻合良好：在满足 $\alpha = 0.5$ 的经典区间内，四种估计量的速率相同，而 $\widehat{\tau}_{n,\ \mathrm{opt}}$ 的依赖实例的行为略好；在临界区间 $\alpha = 1$ 内，四种估计量开始呈现不同的行为；在 $\alpha \in \{2, 3\}$ 所对应的更困难区间内，最优估计量 $\widehat{\tau}_{n,\ \mathrm{opt}}$ 的斜率最陡，显著优于其他三种方法。

5 证明

本节汇集主要结果的证明，部分辅助结果则放在附录中。

5.1 定理 1 的证明

在本节中，我们采用简写 $\mathcal{M}_n(\mathcal{I}^*,\ \mathcal{F}) \equiv \mathcal{M}_n(\mathcal{F})$，因为 $\mathcal{I}^*$ 在全文中保持不变。

[9] 我们稍作修改，以避免未观察到任何结果这一罕见事件。

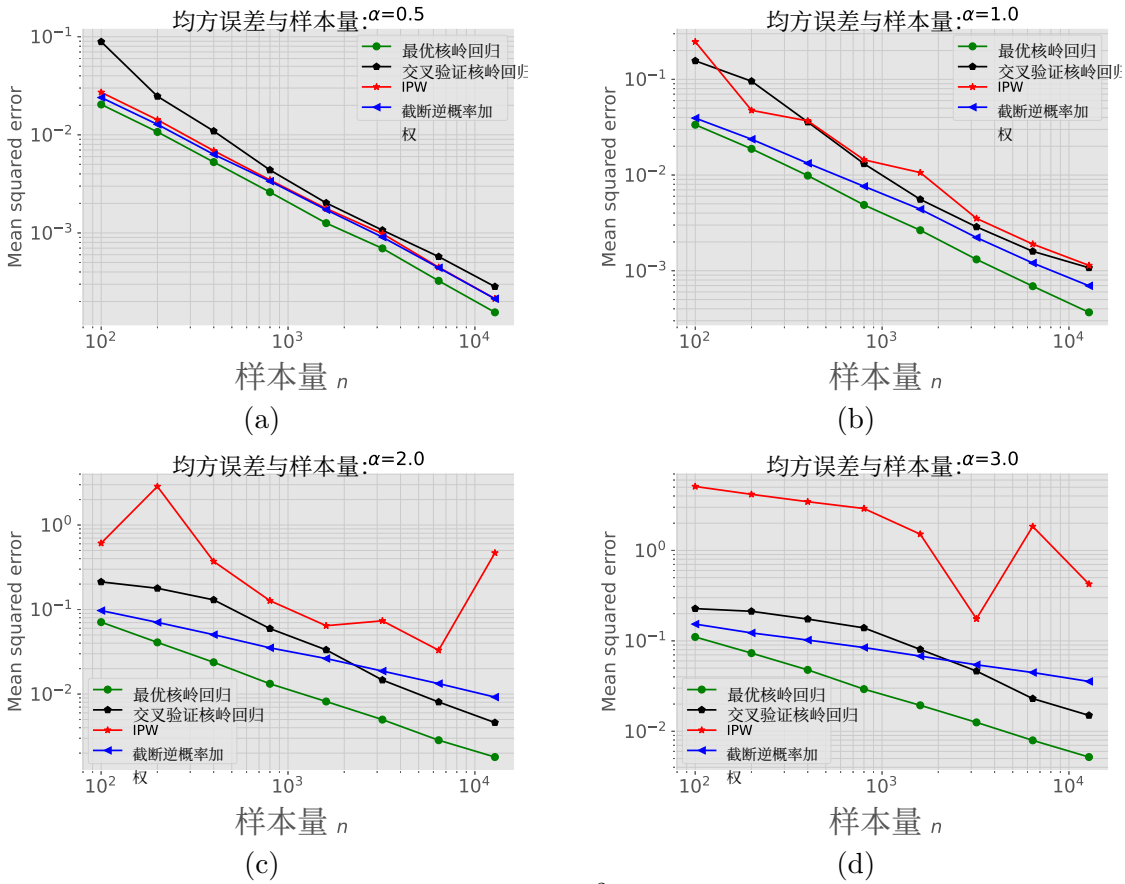


图3. 均方误差随样本量变化的曲线 $\mathbb{E}\big[\,|\widehat{\tau}_{n,\diamond}-\tau^*|^2\,\big]$ n 对应于 $\diamond\in${逆概率加权、截断、最优、交叉验证}。模拟参数与图2完全相同，唯一不同的是底层问题实例。正如子图标题所示，每个面板对应一个指数 $\alpha\in\{0.5,1,2,3\}$。我们已在第$\alpha=0.5$ 和 $\alpha=2$节中给出了部分结果（对应于1）。

5.1.1 定理1(a)的证明

本证明运用了我们先前论文中介绍的一些技巧 [MWB22]。回顾一下， c 是一个普适常数，因此只需证明以下两个断言：

$$\mathcal{M}_n(\mathcal{I}^*,\mathcal{F})\overset{(a)}{\geq}\frac{c}{n}V^2_{\xi^*}(\mu^*),\quad\text{and}\quad\mathcal{M}_n(\mathcal{I}^*,\mathcal{F})\overset{(b)}{\geq}\frac{c}{n}V^2_{\sigma,n}(\xi^*,\pi,\omega;\mathcal{F}).\tag{41}$$

从界（41）（a）出发，我们首先注意到，类$\mathcal{N}_n$（μ^*， ξ^*）上的极小极大风险下界为结果函数固定为 μ^* 且底层分布位于 ξ^*邻域内时的风险，即

$$\mathcal{M}_n(\mathcal{F})\geq\mathcal{M}_n(\{\mu^*\})=\inf_{\widehat{\tau}_n}\sup_{(\xi,\mu^*)\in\mathcal{N}_n(\mu^*,\xi^*)}\mathbb{E}\big[\,|\widehat{\tau}_n-\tau(\mu^*,\xi)|^2\,\big].$$

但是，根据我们之前论文中的定理 3， [MWB22], 该极小极大风险的下界为$\frac{c}{n}V^2_{\xi^*}(\mu^*)$，由此得证。

现在我们转而证明界（41）（b），为此我们采用勒卡姆两点下界的一种形式。更确切地说，对于固定的底层分布 ξ^*，我们构造一对

$(\mu_+,\ \mu_-)$ 个结果函数，它们位于邻域 $\{\mu$ 内: $\|\mu-\mu^*\|_{\mathbb{L}^2(\xi^*\cdot\pi)} \le \frac{\bar\sigma^2}{n}\} \cap \mathcal{F}$，使得若令 $\mathbb{P}_{\mu,\xi}$ 表示真实情况 $(\mu,\ \xi)$ 下观测值的分布，则存在

$$d_{\mathrm{TV}}\left(\mathbb{P}^{\otimes n}_{\mu_+,\xi^*}, \mathbb{P}^{\otimes n}_{\mu_-,\xi^*}\right) \overset{(a)}{\le} \frac{1}{2}, \quad \text{and} \quad \mathcal{L}_\omega(\mu_+,\xi^*) - \mathcal{L}_\omega(\mu_-,\xi^*) \overset{(b)}{\ge} \frac{c}{\sqrt{n}} V_{\sigma,n}(\xi^*,\pi,\omega;\mathcal{F}) \tag{42}$$

Le Cam 两点引理（例如参见 [Wai19], 第 15 章）随后可得

$$\mathcal{M}_n(\mathcal{F}) \ge \frac{1}{4}\left\{1 - d_{\mathrm{TV}}\left(\mathbb{P}^{\otimes n}_{\mu_+,\xi^*}, \mathbb{P}^{\otimes n}_{\mu_-,\xi^*}\right)\right\} \cdot \left\{\mathcal{L}_\omega(\mu_+,\xi^*) - \mathcal{L}_\omega(\mu_-,\xi^*)\right\}^2 \ge \frac{c^2}{8n} V^2_{\sigma,n}(\xi^*,\pi,\omega;\mathcal{F}),$$

从而完成方程（41）(b) 的证明

为了证明第（42）行中的两个界，我们首先需要明确问题实例。

问题实例的构造：我们考虑带噪观测模型

$$Y_i \mid X_i, A_i \sim \mathcal{N}\left(\mu^*(X_i,A_i), \sigma^2(X_i,A_i)\right) \qquad \text{for } i = 1,2,\ldots,n. \tag{43}$$

不失一般性，我们可以假设 $V_{\sigma,\ n}(\xi^*,\ \pi,\ \omega;\ \mathcal{F}) > 0$（否则下界显然成立）。根据定义方程（1）和（12），以及函数类 $\mathcal{F}$的对称性，存在一个函数 $q_0:\ \mathbb{X}\times\mathbb{A}\to\mathbb{R}$ 使得

$$\mathbb{E}_{\xi^*}\left[\int_{\mathbb{A}} q_0(X,a)\, d\omega(a \mid X)\right] \ge \tfrac{V_{\sigma,n}(\xi^*,\pi,\omega;\mathcal{F})}{2}, \quad \text{and}$$
$$\tfrac{q_0}{\sqrt{n}} \in \mathcal{F}, \quad \mathbb{E}_{\xi^*\cdot\pi}\left[\tfrac{q_0^2(X,A)}{\sigma^2(X,A)}\right] \le \tfrac{1}{4}.$$

利用这个函数，我们构造结果函数

$$\mu_+ := \mu^* + \tfrac{1}{2\sqrt{n}} q_0, \quad \text{and} \quad \mu_- := \mu^* - \tfrac{1}{2\sqrt{n}} q_0.$$

由于 $\mu^* \in \frac{1}{2}\mathcal{F}$和 $\frac{1}{2\sqrt{n}} q_0 \in \frac{1}{2}\mathcal{F}$，由凸性和对称性可得 $\mu_+,\ \mu_- \in \mathcal{F}$。另一方面，我们有如下距离界

$$\|\mu^* - \mu_+\|^2_{\mathbb{L}^2(\xi^*\cdot\pi)} = \frac{1}{4n}\mathbb{E}_{\xi^*\cdot\pi}\left[q_0^2(X,A)\right] \le \frac{\bar\sigma^2}{4n}\mathbb{E}_{\xi^*\cdot\pi}\left[\frac{q_0^2(X,A)}{\sigma^2(X,A)}\right] \le \frac{\bar\sigma^2}{16n}.$$

因此，我们有 $\mu_+ \in \mathcal{N}_n^{val}(\mu^*) \cap \mathcal{F}$。同理，我们也有 $\mu_- \in \mathcal{N}_n^{val}(\mu^*) \cap \mathcal{F}$。

方程 (42)(a) 的证明： 我们对乘积测度之间的 KL 散度进行界定。令 $\mathcal{L}(Y|X,A)$ 表示给定二元组 $(Y,\ X,\ A)$ 时 Y的条件分布，我们注意到

$$\begin{aligned} D_{\mathrm{KL}}\left(\mathbb{P}^{\otimes n}_{\mu_+,\xi^*} \,\|\, \mathbb{P}^{\otimes n}_{\mu_-,\xi^*}\right) &\overset{(i)}{=} n \cdot D_{\mathrm{KL}}\left(\mathbb{P}_{\mu_+,\xi^*} \,\|\, \mathbb{P}_{\mu_-,\xi^*}\right) \\ &\overset{(ii)}{\le} n \cdot \mathbb{E}\Big[D_{\mathrm{KL}}\left(\mathcal{L}(Y|X,A)\big|_{\mu_+} \,\|\, \mathcal{L}(Y|X,A)\big|_{\mu_-}\right)\Big] \\ &= n \cdot \frac{1}{4n} \cdot \mathbb{E}\Big[\frac{q_0^2(X,A)}{\sigma^2(X,A)}\Big] \le \frac{1}{4}, \end{aligned}$$

其中，步骤 (i) 使用 KL 散度的张量化，步骤 (ii) 使用 KL 散度的凸性。

应用 Pinsker 不等式可得

$$d_{\mathrm{TV}}\left(\mathbb{P}^{\otimes n}_{\mu_+,\xi^*}, \mathbb{P}^{\otimes n}_{\mu_-,\xi^*}\right) \le \sqrt{\frac{1}{2} D_{\mathrm{KL}}\left(\mathbb{P}^{\otimes n}_{\mu_+,\xi^*} \,\|\, \mathbb{P}^{\otimes n}_{\mu_-,\xi^*}\right)} \le \frac{1}{2\sqrt{2}},$$

这证明了方程（42）(a)。

方程的证明（42）(b)： 经过直接计算可得

$$\mathcal{L}_\omega(\mu_+,\xi^*)-\mathcal{L}_\omega(\mu_-,\xi^*)=\frac{1}{\sqrt{n}}\mathbb{E}_{\xi^*}\Big[\int_{\mathbb{A}} q_0(X,a)d\omega(a\mid X)\Big]\geq\frac{1}{2\sqrt{n}}V_{\sigma,n}(\xi^*,\pi,\omega;\mathcal{F}).$$

5.1.2 定理1(b) 的证明

与定理 1 的证明类似，我们使用 Le Cam 两点引理。根据方差泛函的定义（12）$V_{\sigma,\ n}(\delta_{x_0},\ \pi,\ \omega;\ \mathcal{F})$，存在一个函数 $q_0\colon \mathbb{X}\times\mathbb{A}\to\mathbb{R}$，使得

$$\int_{\mathbb{A}} q_0(x_0,a)d\omega(a\mid x_0)\geq\frac{V_{\sigma,n}(\delta_{x_0},\pi,\omega;\mathcal{F})}{2},\quad \frac{q_0}{\sqrt{n}}\in\mathcal{F},\quad\text{and}\quad \mathbb{E}_{\xi^*\cdot\pi}\Big[\frac{q_0^2(X,A)}{\sigma^2(X,A)}\Big]\leq\frac{1}{4}.$$

利用这个函数，我们构造结果函数

$$\mu_+:=\mu^*+\frac{1}{2\sqrt{n}}q_0,\quad\text{and}\quad \mu_-:=\mu^*-\frac{1}{2\sqrt{n}}q_0.$$

Un根据构造（43），按照方程（42)(a) 的推导，我们有

$$d_{\mathrm{TV}}\Big(\mathbb{P}^{\otimes n}_{\mu_+,\xi^*},\mathbb{P}^{\otimes n}_{\mu_-,\xi^*}\Big)\leq\frac{1}{2}.$$

另一方面，差距满足

$$\mathcal{L}_\omega(\mu_+,\delta_{x_0})-\mathcal{L}_\omega(\mu_-,\delta_{x_0})=\frac{1}{\sqrt{n}}\int_{\mathbb{A}} q_0(x_0,a)d\omega(a\mid x_0)\geq\frac{1}{2\sqrt{n}}V_{\sigma,n}(\delta_{x_0},\pi,\omega;\mathcal{F}).$$

应用 Le Cam 引理即可得到结论。

5.2 命题 1 和 2 的证明

本节中，我们证明两个用于刻画再生核希尔伯特空间情形下方差泛函的命题。

5.2.1 命题 1 的证明

该结论包含两个不等式，因此我们相应地分两部分进行证明。

不等式 (18)(b) 的证明： 根据定义，我们有

$$\begin{aligned}V_{\sigma,n}(\nu,\pi,\omega;\mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R))&=\sqrt{n}\sup_{f\in\mathcal{H}}\Big\{\Big|\mathbb{E}_\nu\Big[\int_{\mathbb{A}} f(X,a)d\omega(a\mid X)\Big]\Big|\ \mid\ \|f\|_{\mathbb{H}}\leq R\text{ and }\mathbb{E}_{\xi^*\cdot\pi}\Big[\tfrac{f^2(X,A)}{\sigma^2(X,A)}\Big]\leq\tfrac{1}{4n}\Big\}\\&\geq\sup_{q\in\mathcal{H}}\Big\{\mathbb{E}_\nu\Big[\int_{\mathbb{A}} q(X,a)d\omega(a\mid X)\Big]\ \mid\ \tfrac{\|q\|^2_{\mathbb{H}}}{R^2n}+4\mathbb{E}_{\xi^*\cdot\pi}\Big[\tfrac{q^2(X,A)}{\sigma^2(X,A)}\Big]\leq 1\Big\},\end{aligned}\tag{44}$$

其中我们进行了变量替换 $f=q/\sqrt{n}$。

任意函数 $q\in\mathbb{H}$ 均可表示为如下基展开形式 $q=\sum_{j=1}^{\infty}\theta_j\phi_j$，由此可得

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_\nu\Big[\int_{\mathbb{A}} q(X,a)d\omega(a\mid X)\Big]&=\langle\theta,\,\bar{u}\rangle_{\ell^2},\quad\text{where }\bar{u}\equiv\bar{u}(\nu),\text{ and}\\ \tfrac{1}{R^2n}\|q\|^2_{\mathbb{H}}+4\mathbb{E}_{\xi^*\cdot\pi}\Big[\tfrac{q^2(X,A)}{\sigma^2(X,A)}\Big]&=\theta^\top\Big\{(R^2n)^{-1}\mathbf{\Lambda}^{-1}+4\,\mathbf{\Gamma}_\sigma\Big\}\theta,\end{aligned}$$

其中我们使用特征值表示 $\|q\|_{\mathbb{H}}^2 = \theta^\top \mathbf{\Lambda}^{-1}\theta$。

我们作如下选择

$$\theta = \left\{(R^2 n)^{-1}\mathbf{\Lambda}^{-1} + 4\mathbf{\Gamma}_\sigma\right\}^{-1}\bar{u} / \left\|\left\{(R^2 n)^{-1}\mathbf{\Lambda}^{-1} + 4\mathbf{\Gamma}_\sigma\right\}^{-1/2}\bar{u}\right\|_{\ell^2}.$$

将此选择代入方程（44）可得

$$V_{\sigma,n}^2(\nu,\pi,\omega;\mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R)) \geq \bar{u}^\top\left\{(R^2 n)^{-1}\mathbf{\Lambda}^{-1} + 4\mathbf{\Gamma}_\sigma\right\}^{-1}\bar{u} \geq \frac{1}{4}\bar{u}^\top\left\{(R^2 n)^{-1}\mathbf{\Lambda}^{-1} + \mathbf{\Gamma}_\sigma\right\}^{-1}\bar{u},$$

由此得到不等式（b）。

不等式（18）（a）的证明：对于命题中的另一个不等式，进行相同的变量替换并随后作基展开，可得

$$\begin{aligned}
V_{\sigma,n}(\nu,\pi,\omega;\mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R)) &= \sup_{q\in\mathcal{H}}\left\{\left|\mathbb{E}_\nu\Big[\int_{\mathbb{A}} q(X,a)d\omega(a\mid X)\Big]\right| \;\middle|\; \tfrac{1}{R\sqrt{n}}\|q\|_{\mathbb{H}} \leq 1,\ \mathbb{E}_{\xi^*\cdot\pi}\Big[\tfrac{q^2(X,A)}{\sigma^2(X,A)}\Big] \leq \tfrac{1}{4}\right\} \\
&\leq \sup_{q\in\mathcal{H}}\left\{\mathbb{E}_\nu\Big[\int_{\mathbb{A}} q(X,a)d\omega(a\mid X)\Big] \;\middle|\; \tfrac{1}{R^2 n}\|q\|_{\mathbb{H}}^2 + \mathbb{E}_{\xi^*\cdot\pi}\Big[\tfrac{q^2(X,A)}{\sigma^2(X,A)}\Big] \leq \tfrac{5}{4}\right\} \\
&= \sup_{\theta\in\ell^2}\left\{\langle\theta,\,\bar{u}\rangle_{\ell^2} \;\middle|\; \theta^\top\Big((R^2 n)^{-1}\mathbf{\Lambda}^{-1} + \mathbf{\Gamma}_\sigma\Big)\theta \leq \tfrac{5}{4}\right\} \\
&\leq \tfrac{\sqrt{5}}{2}\cdot\sqrt{\bar{u}^\top\left\{(R^2 n)^{-1}\mathbf{\Lambda}^{-1} + \mathbf{\Gamma}_\sigma\right\}^{-1}\bar{u}},
\end{aligned}$$

由此完成了不等式（a）的证明。

5.2.2 命题2的证明

在整个证明过程中，我们用 $\|\cdot\|_2$ 作为 $\mathbb{L}^2(\xi^*\cdot\pi)$-范数的简写。变分形式 (12) 可以改写为

$$V_{\sigma,n}(\xi^*,\pi,\omega;\mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R)) = \sup\left\{\langle f,\,\tfrac{d\omega}{d\pi}\rangle \mid \mathbb{E}_{\xi^*\cdot\pi}\big[\tfrac{f^2(X,A)}{\sigma^2(X,A)}\big] \leq \tfrac{1}{4}, \|f\|_{\mathbb{H}} \leq R\sqrt{n}\right\}. \tag{45}$$

显然，函数 $n \mapsto V_{\sigma,\,n}(\xi^*,\ \pi,\ \omega;\ \mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R))$ 单调不减。又由于 $V_{semi}(\mu^*,\ \frac{d\omega}{d\pi}) < +\infty$，它有一致上界。因此，取 $n \to +\infty$ 后，极限存在。此外，我们有

$$\lim_{n\to\infty} V_{\sigma,n}(\xi^*,\pi,\omega;\mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R)) \leq \tfrac{1}{2}\sqrt{\mathbb{E}_{\xi^*\cdot\pi}\Big[\big(\tfrac{d\omega}{d\pi}(A\mid X)\big)^2\cdot\sigma^2(X,A)\Big]}.$$

现在，函数 $(x,\ a) \mapsto \sigma(x,\ a)\ \frac{d\omega}{d\pi}(a\mid x)$ 属于 $\mathbb{L}^2(\xi^*\cdot\pi)$。结合一致上界 $\sup_{x,\ a}\sigma^2(x,\ a) \leq \bar{\sigma}^2$，可知函数 $\sigma^2\ \frac{d\omega}{d\pi}$ 也属于 $\mathbb{L}^2(\xi^*\cdot\pi)$。由于希尔伯特空间 $\mathbb{H}$ 是通用的（因而在 $\mathbb{L}^2(\xi^*\cdot\pi)$ 中稠密），因此对于任意 $\varepsilon > 0$，我们都可以找到一个函数 $h_\varepsilon \in \mathbb{H}$，使得 $\|h_\varepsilon - \sigma^2\frac{d\omega}{d\pi}\|_2 \leq \varepsilon$。

现在定义重新缩放后的函数 $q_\varepsilon := h_\varepsilon/(2\|\sigma\frac{d\omega}{d\pi}\|_2)$。根据此定义，我们有

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}\Big[\tfrac{q_\varepsilon^2(X,A)}{\sigma^2(X,A)}\Big] &\leq \tfrac{1}{4}\|\sigma\tfrac{d\omega}{d\pi}\|_2^{-2}\mathbb{E}\Big[\Big\{\big|\sigma(X,A)\cdot\tfrac{d\omega}{d\pi}(A\mid X)\big| + \frac{\big|h_\varepsilon - \sigma^2\frac{d\omega}{d\pi}\big|}{\sigma}(X,A)\Big\}^2\Big] \\
&\leq \|\sigma\tfrac{d\omega}{d\pi}\|_2^{-2}\Big\{\tfrac{1+\varepsilon}{4}\mathbb{E}\big[\sigma^2(X,A)\cdot\big(\tfrac{d\omega}{d\pi}(A\mid X)\big)^2\big] + \tfrac{1}{\varepsilon}\mathbb{E}\big[\big(\tfrac{h_\varepsilon-\sigma^2\frac{d\omega}{d\pi}}{\sigma}\big)^2(X,A)\big]\Big\} \\
&\leq \frac{1+\varepsilon}{4} + \frac{\varepsilon}{\underline{\sigma}^2},
\end{aligned}$$

以及界 $\|q_\varepsilon\|_{\mathbb{H}} \le \|\sigma \frac{d\omega}{d\pi}\|_2^{-1} \, \|h_\varepsilon\|_{\mathbb{H}} < \infty$。

现在定义缩放后的函数 $q := \frac{1}{1+\varepsilon+\frac{4\varepsilon}{\underline{\sigma}^2}} q_\varepsilon$。给定样本量满足下界 $n \ge \|h_\varepsilon\|_{\mathbb{H}}^2 / (R^2 \|\sigma \frac{d\omega}{d\pi}\|_{\mathbb{L}^2(\xi^* \cdot \pi)}^2)$ 时，上述不等式意味着缩放后的函数 q 满足优化问题（45）中的约束。将这一选择代入目标函数，可得

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_{\xi^*}\Big[\int_{\mathbb{A}} q(X,a) d\omega(a \mid X)\Big] &\ge \frac{1-\varepsilon-4\varepsilon/\underline{\sigma}^2}{2\|\sigma \frac{d\omega}{d\pi}\|_2} \mathbb{E}_{\xi^*}\Big[\int_{\mathbb{A}} h_\varepsilon(X,a) d\omega(a \mid X)\Big] \\ &\ge \frac{1-\varepsilon-4\varepsilon/\underline{\sigma}^2}{2\|\sigma \frac{d\omega}{d\pi}\|_2} \Big\{ \|\tfrac{d\omega}{d\pi}\sigma\|_2^2 - \mathbb{E}\Big[\big(h_\varepsilon - \sigma^2 \tfrac{d\omega}{d\pi}\big) \cdot \tfrac{d\omega}{d\pi}(A \mid X)\Big]\Big\}.\end{aligned}$$

柯西–施瓦茨不等式意味着

$$\mathbb{E}\Big[\big(h_\varepsilon - \sigma^2 \tfrac{d\omega}{d\pi}\big) \cdot \frac{d\omega}{d\pi}(A \mid X)\Big] \le \|h_\varepsilon - \sigma^2 \frac{d\omega}{d\pi}\|_2 \cdot \frac{1}{\underline{\sigma}} \, \|\sigma \tfrac{d\omega}{d\pi}\|_2,$$

其中我们用到了这样的事实：对于所有的配对 (x, a)，$\sigma \ge \sigma$。

结合这两个界并取极限，我们得出

$$\begin{aligned}\lim_{n\to\infty} V_{\sigma,n}(\xi^*, \pi, \omega; \mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R)) &\ge \mathbb{E}_{\xi^*}\Big[\int_{\mathbb{A}} q(X,a) d\omega(a|X)\Big] \\ &\ge \tfrac{1-\varepsilon-\varepsilon/\underline{\sigma}^2}{2} \, \|\sigma \tfrac{d\omega}{d\pi}\|_2 - \tfrac{1-\varepsilon-\varepsilon/\underline{\sigma}^2}{2\underline{\sigma}} \varepsilon.\end{aligned}$$

由于 ε 的选择是任意的，这就完成了该命题的证明 .

5.3 定理2的证明及其变体

我们先介绍证明中用到的一些记号。证明涉及对角算子 $\mathbf{\Lambda}^{-1} := \mathrm{diag}\big(\{\lambda_k^{-1}\}_{k=1}^{\infty}\big)$，以及加权的 ℓ^2-范数

$$\|z\|_\lambda^2 := \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j z_j^2, \quad \text{and} \quad \|z\|_{\lambda^{-1}}^2 := \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j^{-1} z_j^2. \tag{46a}$$

5.3.1 辅助结果的设定

我们定义经验特征向量 $\widehat{u}_n := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \int_{\mathbb{A}} \phi(X_i^{(\mathrm{II})}, a) d\omega(a \mid X_i^{(\mathrm{II})})$。根据核有界性假设Kbou($\kappa$)，几乎处处有 $\|u\|_\lambda < \infty$ 和 $\|\widehat{u}_n\|_\lambda < \infty$。我们还定义了一个线性算子 Ψ，它从希尔伯特空间 $\mathbb{H}$ 映射到序列空间 ℓ^2，其分量为 $[\Psi(f)]_j = \langle f, \phi_j \rangle_{\mathbb{L}^2(\xi^* \cdot \pi)}$。由于 μ^* 和 $\widehat{\mu}_n$ 属于希尔伯特空间 $\mathbb{H}$，因此定义以下对象是有意义的

$$\beta_* := \Psi(\mu^*), \quad \text{and} \quad \widehat{\beta}_n := \Psi(\widehat{\mu}_n).$$

注意，对于任意函数 $f \in \mathbb{H}$，我们有

$$\|\Psi f\|_{\lambda^{-1}}^2 = \sum_{j=1}^{+\infty} \lambda_j^{-1} \langle f, \phi_j \rangle_{\mathbb{L}^2(\xi^* \cdot \pi)}^2 = \sum_{j=1}^{\infty} \langle f, \sqrt{\lambda_j} \phi_j \rangle_{\mathbb{H}}^2 = \|f\|_{\mathbb{H}}^2 < \infty.$$

因此，内积 $\langle u,\, \beta\rangle \le \|u\|_\lambda \cdot \|\beta\|_{\lambda^{-1}}$ 对于 $u \in \{u, \widehat{u}_n\}$ 和 $\backsim\beta \in \{\beta_*, \beta_n\}$均有良好定义。富比尼定理保证目标泛函 τ^* 和估计量 $\widehat{\tau}_n$ 可以写为

$$\tau^* = \sum_{k=0}^{\infty} \langle \mu^*,\, \phi_k\rangle_{\mathbb{L}^2(\xi^*\cdot\pi)} \cdot \mathbb{E}_{\xi^*}\left[\int_{\mathbb{A}} \phi_k(X,a) d\omega(a \mid X)\right] = \langle \bar{u},\, \beta_*\rangle, \quad \text{and}$$
$$\widehat{\tau}_n = n^{-1} \sum_{k=0}^{\infty} \langle \widehat{\mu}_n^{(1)},\, \phi_k\rangle_{\mathbb{L}^2(\xi^*\cdot\pi)} \sum_{i=1}^{n} \int_{\mathbb{A}} \phi_k(X_i^{(\mathrm{II})}, a) d\omega(a \mid X_i^{(\mathrm{II})}) \;=\; \langle \widehat{u}_n,\, \widehat{\beta}_n\rangle.$$

因此，我们得到以下误差分解：

$$\widehat{\tau}_n - \tau^* = \langle \widehat{u}_n - \bar{u},\, \beta_*\rangle + \langle \bar{u},\, \widehat{\beta}_n - \beta_*\rangle + \langle \widehat{u}_n - \bar{u},\, \widehat{\beta}_n - \beta_*\rangle. \tag{47}$$

本节其余部分将致力于为该分解中出现的各项推导界。具体而言，我们需要两个辅助结果。回顾简记$V_{\xi^*}^2(f) := \mathsf{var}_{X\sim\xi^*}\left(\int_{\mathbb{A}} f(X,a) d\omega(a \mid X)\right)$。

引理 1. 在假设 (Kbou(κ)) 和 (subG(γ))下，对于任意函数 $f \in \mathbb{H}$，我们有

$$|\langle \widehat{u}_n - \bar{u},\, \Psi f\rangle| \le 2V_{\xi^*}(f)\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}} + 6\kappa\|f\|_{\mathbb{H}}\frac{\log(1/\delta)}{n}. \tag{48a}$$

以至少 $1-\delta$ 的概率。此外，给定样本量 $n \ge \log(1/\delta)$ 和一个标量$\rho > 0$，我们有

$$\|(\mathbf{I} + \rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}(\widehat{u}_n - \bar{u})\|_{\ell^2} \le \sqrt{\frac{D(\rho)}{n}\log(1/\delta)} \tag{48b}$$

以 $1-\delta$ 的概率。

证明见第 5.3.3 节。

引理 2. 假设核上界 (Kbou(κ))和尾部条件 (subG(γ)) 成立。那么对于任意无限维向量 z和标量 $\delta \in (0,1)$，在正则化参数 $\rho_n = \frac{\bar{\sigma}^2}{R^2 n}$以及样本量条件 (21a)下，我们有

$$\left|\langle z,\, \widehat{\beta}_n - \beta_*\rangle\right| \le c\|\left(\mathbf{I} + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\right)^{-1/2} z\|_{\ell^2} \cdot \left\{\bar{\sigma}\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}} + \gamma\sqrt{D(\rho_n)} \cdot \frac{\log(1/\delta)\log n}{n}\right\}, \tag{49}$$

其成立的概率至少为 $1-\delta$。

证明见第 5.3.4 节。

5.3.2 主要论证

在接受这两个引理的前提下，我们现在通过界定分解结果（247）中的每一项来证明定理 。$\beta_* = \Psi\mu^*$，我们可以应用界（48a）得到

$$|\langle \widehat{u}_n - \bar{u},\, \beta_*\rangle| \le 2V_{\xi^*}(\mu^*)\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}} + 6\kappa R\frac{\log(1/\delta)}{n} \tag{50}$$

其概率至少为 $1-\delta/3$。其次，由于基函数有界，我们有$u \in \ell^\infty$，因此可以应用引理 2 得到

$$\begin{aligned}\left|\langle \bar{u},\, \widehat{\beta}_n - \beta_* \rangle\right| &\le c\|\big(\mathbf{I} + \rho_n \mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}\bar{u}\|_{\ell^2} \cdot \left\{\bar{\sigma}\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}} + \gamma\sqrt{D(\rho_n)} \cdot \frac{\log(1/\delta)\log n}{n}\right\} \\ &\le 2c\|\big(\mathbf{I} + \rho_n \mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}\bar{u}\|_{\ell^2}\bar{\sigma}\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}}, \end{aligned} \tag{51}$$

以概率 $1-\delta/3$，其中最后一步由样本量条件（21a）得出，因为该条件确保 $\gamma\sqrt{D(\rho_n)} \cdot \log(1/\delta)\log n / n \le \bar{\sigma}\sqrt{\log(1/\delta)/n}$。

接下来，我们结合引理 48b 中的方程（2），得到以下不等式，其成立的概率为 $1-\delta/3$

$$\begin{aligned}\left|\langle \widehat{u}_n - \bar{u},\, \widehat{\beta}_n - \beta_* \rangle\right| &\le c\|\big(\mathbf{I} + \rho_n \mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}\big(\widehat{u}_n - \bar{u}\big)\|_{\ell^2} \cdot \left\{\bar{\sigma}\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}} + \gamma\sqrt{D(\rho_n)} \cdot \frac{\log(1/\delta)\log n}{n}\right\} \\ &\le c\sqrt{\frac{D(\rho_n)}{n}\log(1/\delta)} \cdot \left\{\bar{\sigma}\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}} + \gamma\sqrt{D(\rho_n)} \cdot \frac{\log(1/\delta)\log n}{n}\right\} \\ &\overset{(i)}{\le} c\gamma\sqrt{D(\rho_n)}\frac{\log(1/\delta)\log n}{n}\left\{1 + \sqrt{\frac{D(\rho_n)\log(1/\delta)}{n}}\right\} \\ &\overset{(ii)}{\le} 2c\gamma\sqrt{D(\rho_n)}\frac{\log(1/\delta)\log n}{n}. \end{aligned} \tag{52}$$

其中步骤 (i) 由关系式 $\bar{\sigma} \le \gamma$ 得出，而最后一步由样本量条件（21a）得出，因为该条件确保 $D(\rho_n)\log(1/\delta)/n \le 1$。

结合不等式（50）、（51）和（52），定理的证明即告完成 □

5.3.3 引理 1 的证明

我们简化符号，省略上标 (II) 来表示记号，并用 (X_i, A_i, Y_i) 表示数据。

方向性界 (48a) 的证明：根据定义，我们有

$$\begin{aligned}\langle \widehat{u}_n,\, \Psi f\rangle &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \int_{\mathbb{A}} \langle \phi(X_i, a),\, \Psi f\rangle d\omega(a \mid X_i) \\ &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n Z_i \qquad \text{where } Z_i := \textstyle\int_{\mathbb{A}} f(X_i, a) d\omega(a \mid X_i). \end{aligned}$$

类似地，总体层面的向量 u 满足 $\langle u,\, \Psi f\rangle = \mathbb{E}_{\xi^*}[Z]$，因此我们的问题归结为界定样本均值 $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n Z_i$ 相对于其均值的波动。我们采用的方法是伯恩斯坦不等式，而应用该不等式需要控制 Z_i 的方差和绝对值。显然，我们有 $\mathsf{var}(Z_i) = V^2_{\xi^*}(f) = \mathsf{var}\big(\int_{\mathbb{A}} f(X, a) d\omega(a \mid X)\big)$，此外，我们声称

$$|Z_i| \le \kappa \cdot \|f\|_{\mathbb{H}}. \tag{53}$$

借助这 有了这两个界，应用伯恩斯坦不等式（例如参见 [Mas07]）可得

$$\mathbb{P}\left(|\langle \widehat{u}_n - \bar{u},\, \Psi f\rangle| \ge t\right) \le 2\exp\left(\frac{-nt^2}{2V^2_{\xi^*}(f) + 3\kappa\|f\|_{\mathbb{H}} t}\right),$$

将右侧设为 δ 并对 t求解，即完成方向性界（48a）的证明。

剩下的工作是证明该结论（53）。利用我们对 ω 的有界性条件（6），可得

$$
\begin{aligned}
|Z_i| = \left| \int_{\mathbb{A}} f(X_i, a) d\omega(a \mid X_i) \right| &\leq \sup_{(x,a)\in\mathbb{X}\times\mathbb{A}} |f(x,a)| \\
&\overset{(i)}{\leq} \sup_{(x,a)\in\mathbb{X}\times\mathbb{A}} \sum_{k\geq 1} \lambda_k \, |\phi_k(x,a)| \cdot |\langle f,\, \phi_k \rangle_{\mathbb{H}}| \\
&\overset{(ii)}{\leq} \sup_{(x,a)\in\mathbb{X}\times\mathbb{A}} \Big(\sum_{k\geq 1} \lambda_k \phi_k^2(x,a) \Big)^{1/2} \cdot \Big(\sum_{k\geq 1} \lambda_k \langle f,\, \phi_k \rangle_{\mathbb{H}}^2 \Big)^{1/2}
\end{aligned}
$$

其中，步骤 (i) 是通过将 f 展开为基表示 $f = \sum_{k=1}^{+\infty} \lambda_k \langle f,\, \phi_k \rangle_{\mathbb{H}} \phi_k$ 得到的；步骤 (ii) 则由柯西–施瓦茨不等式得到。根据 Mercer 定理，我们有如下关系

$$
\Big(\sum_{k\geq 1} \lambda_k \langle f,\, \phi_k \rangle_{\mathbb{H}}^2 \Big)^{1/2} = \|f\|_{\mathbb{H}},
$$

而有界性条件（Kbou(κ)）意味着 $\sum_{k\geq 1} \lambda_k \phi_k^2(x,a) \leq \mathcal{K}\big((x,a),(x,a)\big) \leq \kappa^2$，对任意 $(x,a) \in \mathbb{X}\times\mathbb{A}$ 均成立。综合各部分即可得到所要证明的界（53）。

预条件界（(48b)）的证明： 定义 $U_i := \int_{\mathbb{A}} \phi(X_i, a) d\omega(a \mid X_i)$，使得 $\widehat{u}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n U_i$，于是方程（48b）左侧的正态分布可等价地写成经验过程上确界

$$
\|(\mathbf{I} + \rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2} (\widehat{u}_n - \bar{u})\|_{\ell^2} = \sup_{z^\top (\mathbf{I}+\rho\mathbf{\Lambda}^{-1}) z \leq 1} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n z^\top (U_i - \bar{u}) =: H_n
$$

为了给期望上确界定界，我们只需使用柯西–施瓦茨不等式即可得到该界

$$
\mathbb{E}\big[H_n\big] \leq \Big\{ \mathbb{E}\Big[\|(\mathbf{I} + \rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2} \cdot \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (U_i - \bar{u}) \|_{\ell^2}^2 \Big] \Big\}^{1/2} \leq \sqrt{n^{-1} \mathbb{E}\big[\|(\mathbf{I} + \rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2} U_i \|_{\ell^2}^2 \big]},
$$

其中，第二个不等式源于 U_i 是相互独立同分布的事实

为了给这个量定界，我们使用 Talagrand集中不等式（参见 [Wai19],定理 3.8 及相关注释）。以概率 $1-\delta$，有

$$
\begin{aligned}
H_n \leq 2\mathbb{E}\big[H_n\big] + c \Big(\sup_{z^\top (\mathbf{I}+\rho\mathbf{\Lambda}^{-1}) z \leq 1} \mathbb{E}[(z^\top (U_i - \bar{u}))^2] \frac{\log(1/\delta)}{n} \Big)^{1/2} \\
+ c \sup_{(x,a)\in\mathbb{X}\times\mathbb{A}} \|(\mathbf{I} + \rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2} \phi(x,a)\|_{\ell^2} \cdot \frac{\log(1/\delta)}{n}. \quad (54)
\end{aligned}
$$

由于 Radon测度 ω 满足界（6），因此求和项 U_i 满足几乎必然上界

$$
\|(\mathbf{I} + \rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2} U_i\|_{\ell^2} \leq \sup_{(x,a)\in\mathbb{X}\times\mathbb{A}} \|(\mathbf{I} + \rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2} \phi(x,a)\|_{\ell^2} = \sqrt{D(\rho)}
$$

于是，界（54）变为

$$H_n \le c\sqrt{D(\rho)} \cdot \Big\{ \sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}} + \frac{\log(1/\delta)}{n} \Big\},$$

至此，方程（48b）的证明完成。

5.3.4 引理2的证明

为简化记号，我们省略（X_i， A_i， Y_i）中的上标(I) 。利用基展开$\mu = \sum_{k\ge 0} \beta(k)\phi_k$，可得以下等价关系

$$\begin{aligned}\widehat{\beta}_n &= \Psi \cdot \arg\min_{\mu\in\mathbb{H}} \Big\{ \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \big(Y_i - \mu(X_i, A_i)\big)^2 + \rho_n \|\mu\|_{\mathbb{H}}^2 \Big\} \\ &= \arg\min_{\beta\in\ell^2(\mathbb{N})} \Big\{ \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \big(Y_i - \langle \beta,\, \phi(X_i, A_i)\rangle\big)^2 + \rho_n \|\beta\|_{\lambda^{-1}}^2 \Big\}.\end{aligned}$$

定义噪声变量 $\varepsilon_i := Y_i - \mu^*(X_i,\ A_i)$以及经验协方差算子$\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \phi(X_i,\ A_i)\phi(X_i,\ A_i)^\top$。使用这一记号，可写为

$$\widehat{\beta}_n - \beta_* = \big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n + \rho_n \mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1} \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \Big\{ \varepsilon_i \phi(X_i, A_i) - \rho_n \mathbf{\Lambda}^{-1}\beta_* \Big\}.$$

我们通过两个步骤来控制该量在任意固定方向 z 上的投影：

- 首先，在给定状态-动作对（X_i， A_i）$_{i=1}^{n}$的条件下，我们给出关于结果随机性下误差的高概率上界 $z^\top\big(\widehat{\beta}_n - \beta_*\big)$ ，$\curlywedge Y_i$。该上界取决于特征向量的经验协方差算子 $\mathbf{\Gamma}_n$ 的性质；详情参见引理3 。

- 其次，我们将经验协方差算子 $\mathbf{\Gamma}_n$ 与其总体对应算子（即恒等算子$\mathbf{I}$，因为 $(\phi_j)_{j=1}^{\infty}$ 构成一个正交归一基）联系起来。无限维集中结果的形式恰好是第一步所需的形式。详情请参见引理 4。

下面给出证明中所需的两个辅助结果的精确表述：

引理 3。 给定状态-动作序列 $(X_i, A_i)_{i=1}^{n}$，对于任意 $z \in \ell^\infty(\mathbb{N})$，我们有

$$\begin{aligned}\Big| z^\top(\widehat{\beta}_n - \beta_*) \Big| &\le c\|\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2} z\|_{\ell^2} \\ &\times \Big\{ \sqrt{\rho_n}\|\mu^*\|_{\mathbb{H}} + \bar{\sigma}\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}} + \gamma \sup_{(x,a)} \|\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}\phi(x,a)\|_{\ell^2} \cdot \frac{\log(1/\delta)\log n}{n} \Big\}, \quad (55)\end{aligned}$$

其成立的概率至少为 $1-\delta$。

证明见附录 C.1 。

我们的下一个辅助结果将样本协方差算子 $\mathbf{\Gamma}_n$ 与总体协方差算子联系起来。此处我们陈述一个较为一般的结果，因为我们在这里以及后续定理 3 的证明中都会用到它。

考虑权重函数 $(x,a) \mapsto q(x,a) \in [\underline{q},\bar{q}]$，其中 $(\underline{q},\bar{q})$ 是一对正标量。定义经验算子

$$\widehat{\mathbf{\Gamma}}_{n,q} := n^{-1}\sum_{i=1}^{n} q(X_i,A_i)\phi(X_i,A_i)\phi(X_i,A_i)^\top,$$

以及其总体版本 $\mathbf{\Gamma}_{*,\,q} := \mathbb{E}\big[\widehat{\mathbf{\Gamma}}_{n,q}\big]$。对于当前证明，只需取 $q(x,\ a) = 1$。

引理 4. 对于标量 $\delta, s \in (0,1)$，考虑满足以下关系的正则化参数 ρ_n

$$(\bar{q}/\underline{q})\log\big(\tfrac{\kappa^2}{\rho_n\delta}\big)\cdot\tfrac{D\left(\rho_n/\underline{q}\right)}{n} \le \tfrac{s}{16}. \tag{56}$$

那么我们有

$$(1-s)\big(\mathbf{\Gamma}_{*,q}+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big) \preceq \widehat{\mathbf{\Gamma}}_{n,q}+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1} \preceq (1+s)\big(\mathbf{\Gamma}_{*,q}+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big) \tag{57}$$

其成立的概率至少为 $1-\delta$。

证明见附录 C.2 。

以这两个引理为前提，我们现在继续证明引理 2。我们定义事件

$$\mathcal{E} := \Big\{\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1} \succeq \tfrac{1}{2}(\mathbf{I}+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})\Big\}.$$

在给定的 选择 $\rho_n = \frac{\bar{\sigma}^2}{R^2 n}$，对于满足条件（ n 的样本量21a），我们有 e

$$\log\big(\frac{\kappa^2}{\rho_n\delta}\big)\frac{D(\rho_n)}{n} \le \frac{1}{32}.$$

应用引理4，取 $q(x,a) \equiv 1$，可保证 $\mathbb{P}(\mathcal{E}) \ge 1-\delta$。

C在事件 $\mathcal{E}$ 条件下，有效维数的定义保证

$$\sup_{(x,a)\in\mathbb{X}\times\mathbb{A}} \|\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}\phi(x,a)\|_{\ell^2} \le \sqrt{2}\sup_{(x,a)\in\mathbb{X}\times\mathbb{A}} \|\big(\mathbf{I}+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}\phi(x,a)\|_{\ell^2} \le \sqrt{2D(\rho_n)}.$$

因此，在事件 $\mathcal{E}$条件下，引理3保证

$$\begin{aligned}\Big|z^\top(\widehat{\beta}_n-\beta_*)\Big| &\le c\|\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}z\|_{\ell^2}\cdot\Big\{\sqrt{\rho_n}\|\mu^*\|_{\mathbb{H}}+\bar{\sigma}\sqrt{\tfrac{\log(1/\delta)}{n}}+\gamma\sqrt{2D(\rho_n)}\cdot\tfrac{\log(1/\delta)\log n}{n}\Big\}\\ &\le 2c\|\big(\mathbf{I}+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}z\|_{\ell^2}\cdot\Big\{\sqrt{\rho_n}\|\mu^*\|_{\mathbb{H}}+\bar{\sigma}\sqrt{\tfrac{\log(1/\delta)}{n}}+\gamma\sqrt{D(\rho_n)}\cdot\tfrac{\log(1/\delta)\log n}{n}\Big\},\end{aligned}$$

其成立概率至少为 $1-\delta$。

代入所选的 $\rho_n = \bar{\sigma}^2/(R^2 n)$，注意到 $\sqrt{\rho_n}\|\mu^*\|_{\mathbb{H}} \le \sqrt{\rho_n}R \le \bar{\sigma}/\sqrt{n}$，从而得到界

$$\Big|z^\top(\widehat{\beta}_n-\beta_*)\Big| \le 2c\|\big(\mathbf{I}+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}z\|_{\ell^2}\cdot\Big\{\bar{\sigma}\sqrt{\tfrac{\log(1/\delta)}{n}}+\gamma\sqrt{D(\rho_n)}\cdot\tfrac{\log(1/\delta)\log n}{n}\Big\}, \quad \text{w.p. } 1-\delta,$$

至此完成引理2的证明。

5.4 定理 3 及其推论的证明

证明分为三个部分：我们首先为辅助估计量$\widetilde{\mu}_n$ 和 $\widehat{\sigma}_n^2$建立保证，然后利用这些保证来界定两阶段估计量 $\widehat{\tau}_n$的误差。具体而言，我们依次证明以下断言。

- 对于任意固定的状态-动作对 $(x_0,\ a_0)$ 以及任意 $\delta \in (0,\ 1)$，第一阶段估计量 $\widetilde{\mu}_n$满足以下界

$$|\widetilde{\mu}_n(x_0,a_0) - \mu^*(x_0,a_0)| \le c\gamma\sqrt{\frac{D(\rho_n^{(\mathrm{I})})}{n}\log(1/\delta)}, \tag{58a}$$

  以概率 $1-\delta$。证明见第 5.4.1 节。
- 对于任意固定的状态-动作对 $(x_0,\ a_0)$，第二阶段估计量 $\widehat{\sigma}_n$ 满足以下界

$$\frac{1}{2}\sigma^2(x_0,a_0) \le \widehat{\sigma}_n^2(x_0,a_0) \le 2\sigma^2(x_0,a_0), \tag{58b}$$

  以概率 $1-\delta/n$。证明见第 5.4.2 节。
- 采用与定理 2证明中类似的方法，我们利用基函数表示目标泛函，并回顾误差分解

$$\widehat{\tau}_n - \tau^* = \langle \widehat{u}_n - \bar{u},\ \beta_*\rangle + \langle \bar{u},\ \widehat{\beta}_n - \beta_*\rangle + \langle \widehat{u}_n - \bar{u},\ \widehat{\beta}_n - \beta_*\rangle, \tag{58c}$$

  ^其中记 $\beta_* :=\Psi\mu^*$ 以及 $\beta_n :=\Psi\widehat{\mu}_n$。样本平均特征向量$\widehat{u}_n$ 中的误差可像定理 1 的证明中那样，利用引理 2加以控制；而要界定加权最小二乘估计量 ^的误差 β_n 则需要新的方法；见下文的引理 5。

引理 5。 在定理 3的条件下，以概率 $1-\delta$，对于任意无限维向量 z，有

$$\left|z^\top(\widehat{\beta}_n - \beta_*)\right| \le c\|\left(\mathbf{\Gamma}_\sigma + \rho_n^{(III)}\mathbf{\Lambda}^{-1}\right)^{-1/2} z\|_{\ell^2}\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}}, \tag{59}$$

其中 $c>0$ 是一个普适常数。

证明见第 5.4.3 节。

基本要素已准备就绪，现在可以证明定理 3的主要断言。我们对分解结果（58c）中的每一项分别进行界定，如下所示。

利用引理 48a中的界（1），取 $f=\mu^*$，以概率 $1-\delta$，有

$$|\langle \widehat{u}_n - \bar{u},\ \beta_*\rangle| \le 2V_{\xi^*}(\mu^*)\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}} + 6\kappa R\frac{\log(1/\delta)}{n}. \tag{60}$$

应用引理5 可得 $z=u$ 界

$$|\langle \bar{u},\ \widehat{\beta}_n - \beta_*\rangle| \le c\|\left(\mathbf{\Gamma}_\sigma + \rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\right)^{-1/2}\bar{u}\|_{\ell^2}\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}} \le 2cV_{\sigma,n}(\xi^*,\pi,\omega;\mathbb{B}_{\mathfrak{H}}(R))\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}}. \tag{61}$$

以概率 $1-\delta$ 成立。这里第二步由命题推出 1.

最后，应用引理 5，结合 $z = \widehat{u}_n - u$，[10] 以及引理 48b 中的方程（1），以概率 $1-\delta$，我们得到上界

$$\begin{aligned}\left|\langle \widehat{u}_n - \bar{u},\, \widehat{\beta}_n - \beta_* \rangle\right| &\le c\|\big(\mathbf{\Gamma}_\sigma + \rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}(\widehat{u}_n - \bar{u})\|_{\ell^2}\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}} \\ &\le c\bar{\sigma}\|\big(\mathbf{I} + \bar{\sigma}^2\rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}(\widehat{u}_n - \bar{u})\|_{\ell^2}\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}} \\ &\le c\bar{\sigma}\sqrt{D(\bar{\sigma}^2\rho_n^{(\mathrm{III})})}\frac{\log(1/\delta)}{n} \\ &= c\bar{\sigma}\sqrt{D(\rho_n^{(\mathrm{I})})}\frac{\log(1/\delta)}{n}. \end{aligned} \tag{62}$$

结合方程（60）、（61）和（62），定理3的证明即告完成 .

5.4.1 方程（58a）的证明

定义这些无限维向量

$$\widetilde{\beta}_n := \Psi\widetilde{\mu}, \quad \text{and} \quad \beta_* := \Psi\mu^*.$$

误差可表示为基函数表示的形式

$$\widetilde{\mu}_n(x_0, a_0) - \mu^*(x_0, a_0) = \langle \widetilde{\beta}_n - \beta_*,\, \phi(x_0, a_0)\rangle.$$

应用引理2 并令 $z = \phi(x_0, a_0)$，可得

$$\left|\langle \phi(x_0,a_0),\, \widehat{\beta}_n - \beta_*\rangle\right| \le c\|\big(\mathbf{I} + \rho_n^{(\mathrm{I})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}\phi(x_0,a_0)\|_{\ell^2} \cdot \left\{\bar{\sigma}\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}} + \gamma\phi_{\max}\sqrt{D(\rho_n^{(\mathrm{I})})}\cdot\frac{\log(1/\delta)\log n}{n}\right\},$$

该结论以概率 $1-\delta$ 成立。

回顾有效维数的定义（19），可得一致上界

$$\|\big(\mathbf{I} + \rho_n^{(\mathrm{I})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}\phi(x_0,a_0)\|_{\ell^2} \le \sup_{(x,a)}\|\big(\mathbf{I} + \rho_n^{(\mathrm{I})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}\phi(x,a)\|_{\ell^2} \le \sqrt{D(\rho_n^{(\mathrm{I})})}$$

代回并利用样本量条件（28a），即可完成方程（58a）的证明。

5.4.2 方程 (58b) 的证明

定义 σ-域 $\mathcal{B}_1 := \sigma\big(\{X_i^{(\mathrm{I})}, A_i^{(\mathrm{I})}, Y_{(\mathrm{I})\,i}\}_{i=1}^n\big)$。显然，第一阶段回归函数 $\widetilde{\mu}_n$在 $\mathcal{B}_1$ 上可测。由于第二阶段的每个数据点（$X_i^{(\mathrm{II})}$， $A_i^{(\mathrm{II})}$， $Y_{(\mathrm{II})\,i}$）都独立于 $\mathcal{B}_1$，方程（58a）保证

$$\mathbb{P}\left\{\left|\widetilde{\mu}_n(X_i^{(\mathrm{II})}, A_i^{(\mathrm{II})}) - \mu^*(X_i^{(\mathrm{II})}, A_i^{(\mathrm{II})})\right| \ge 2c\gamma\sqrt{\frac{D(\rho_n^{(\mathrm{I})})}{n}\log(n/\delta)}\right\} \le \frac{\delta}{2n^2}.$$

[10] N注意，向量 $\widehat{u}_n$ 与（$X_i^{(\mathrm{III})}$、$A_i^{(\mathrm{III})}$、$Y_{(\mathrm{III})\,i}$）$_{i=1}^n$相互独立，因此引理 5 适用 .

应用并集界和塔式性质可得

$$\mathbb{E}\left[\mathbb{P}\Big\{\max_{i\in[n]}\big|\widetilde{\mu}_n(X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})})-\mu^*(X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})})\big|\geq 2c\gamma\sqrt{\frac{D(\rho_n^{(\mathrm{I})})}{n}\log(n/\delta)}\Big\}\mid\mathcal{B}_1\right]$$
$$\leq\sum_{i=1}^{n}\mathbb{P}\left\{\big|\widetilde{\mu}_n(X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})})-\mu^*(X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})})\big|\geq 2c\gamma\sqrt{\frac{D(\rho_n^{(\mathrm{I})})}{n}\log(n/\delta)}\right\}\leq\frac{\delta}{2n}. \tag{63}$$

对于此步骤中构造的含噪观测，条件期望的形式为

$$\mathbb{E}\big[(Y_i^{(\mathrm{II})}-\widetilde{\mu}_n(X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})}))^2\mid X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})},\mathcal{B}_1\big]=\sigma^2(X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})})+\underbrace{(\widetilde{\mu}_n-\mu^*)^2(X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})})}_{=:b(X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})})}.$$

我们进一步注意到，对于任意 $p>0$，都有

$$\begin{aligned}&\mathbb{E}\Big[\Big|\big(Y_i^{(\mathrm{II})}-\widetilde{\mu}_n(X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})})\big)^2\Big|^p\mid X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})},\mathcal{B}_1\Big]\\&\leq 2^{2p}\mathbb{E}\Big[\Big|\big(Y_i^{(\mathrm{II})}-\mu^*(X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})})\big)^2\Big|^p\mid X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})},\mathcal{B}_1\Big]+2^{2p}\big|\widetilde{\mu}_n(X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})})-\mu^*(X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})})\big|^{2p}\\&\leq 4^{2p}p^p\gamma^{2p}+2^{2p}b^p(X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})}),\end{aligned}$$

这验证了在给定 $X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})}$ 和 $\mathcal{B}_1$ 的条件下，尾部假设 $\|Y_{(\mathrm{II})\,i}-\widetilde{\mu}_n(X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})})^2\|_{\psi_1}\leq 4(\gamma^2+b(X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})}))$。

验证了观测假设 (27) 后，我们便可以应用估计程序 $\mathcal{A}$ 所满足的稳健逐点风险性质。根据定义，给定样本量$n\geq m\big(\sigma^2/2,\delta/(2n)\big)$，对于任意 $\varepsilon>0$和 $\delta\in(0,1)$，都有

$$\mathbb{P}\Big\{\big|\widehat{\sigma}_n^2(x_0,a_0)-\sigma^2(x_0,a_0)\big|\leq\underline{\sigma}^2/2\mid\mathcal{B}_1\Big\}\geq\mathbb{P}\Big\{\max_{i\in[n]}|b(X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})})|\leq\bar{b}(\underline{\sigma}^2/2,\delta/(2n))\mid\mathcal{B}_1\Big\}-\frac{\delta}{2n}, \tag{64}$$

几乎处处。

给定满足方程 (28b) 中要求的样本量，我们有

$$\mathbb{P}\Big\{\max_{i\in[n]}|b(X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})})|\leq\bar{b}(\underline{\sigma}^2/2,\delta/(2n))\mid\mathcal{B}_1\Big\}$$
$$\geq\mathbb{P}\Big\{\max_{i\in[n]}\big|\widetilde{\mu}_n(X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})})-\mu^*(X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})})\big|\leq c\gamma\sqrt{\frac{D(\rho_n^{(\mathrm{I})})}{n}\log(n/\delta)}\mid\mathcal{B}_1\Big\}, \tag{65}$$

几乎处处。

结合方程（63）、（64）和（65），并对 $(X_i^{(\mathrm{I})},\ A_i^{(\mathrm{I})},\ Y_{(\mathrm{I})\,i})$ 取期望，我们得出

$$\mathbb{P}\Big\{\big|\widehat{\sigma}_n^2(x_0,a_0)-\sigma^2(x_0,a_0)\big|\leq\underline{\sigma}^2/2\Big\}=\mathbb{E}\Big[\mathbb{P}\Big\{\big|\widehat{\sigma}_n^2(x_0,a_0)-\sigma^2(x_0,a_0)\big|\leq\underline{\sigma}^2/2\mid\mathcal{B}_1\Big\}\Big]$$
$$\geq\mathbb{E}\left[\mathbb{P}\Big\{\max_{i\in[n]}\big|\widetilde{\mu}_n(X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})})-\mu^*(X_i^{(\mathrm{II})},A_i^{(\mathrm{II})})\big|\geq 2c\gamma\sqrt{\frac{D(\rho_n^{(\mathrm{I})})}{n}\log(n/\delta)}\Big\}\mid\mathcal{B}_1\right]-\frac{\delta}{2n}\geq 1-\frac{\delta}{n}.$$

在事件 $\big|\widehat{\sigma}_n^2(x_0,\ a_0)-\sigma^2(x_0,\ a_0)\big|\leq\sigma^2/2$ 上，我们有

$$\frac{1}{2}\sigma^2(x_0,a_0)\leq\sigma^2(x_0,a_0)-\underline{\sigma}^2/2\leq\widehat{\sigma}_n^2(x_0,a_0)\leq\sigma^2(x_0,a_0)+\underline{\sigma}^2/2\leq 2\sigma^2(x_0,a_0),$$

完成方程 (58b) 的证明。

5.4.3 引理5的证明

First，根据第二阶段的保证 (58b) 以及并集界，我们有

$$\mathbb{P}\Big\{\exists i \in [n],\ \frac{\widehat{\sigma}_n^2}{\sigma^2}(X_i^{(\mathrm{III})}, A_i^{(\mathrm{III})}) \notin \big(1,2\big)\Big\} \le \sum_{i=1}^{n} \mathbb{P}\Big\{\frac{\widehat{\sigma}_n^2}{\sigma^2}(X_i^{(\mathrm{III})}, A_i^{(\mathrm{III})}) \notin \big(1,2\big)\Big\} \le \delta. \tag{66}$$

定义事件

$$\mathcal{E}^{(\mathrm{III})} := \Big\{\frac{1}{2}\sigma^2(X_i^{(\mathrm{III})}, A_i^{(\mathrm{III})}) \le \widehat{\sigma}_n^2(X_i^{(\mathrm{III})}, A_i^{(\mathrm{III})}) \le 2\sigma^2(X_i^{(\mathrm{III})}, A_i^{(\mathrm{III})}), \quad \text{for any } i \in [n]\Big\},$$

关于状态-动作对 $(X_i^{(\mathrm{III})}, A_i^{(\mathrm{III})})_{i=1}^n$ 和函数 $\widehat{\sigma}_n^2$ 的随机性，我们有 $\mathbb{P}\big(\mathcal{E}^{(\mathrm{III})}\big) \ge 1-\delta$。

证明的其余部分与引理2的证明类似。为简化记号，我们省略 (X_i, A_i, Y_i) 中的上标 $^{(\mathrm{III})}$。在基函数表示下，我们有

$$\begin{aligned}\widehat{\beta}_n &= \Psi \cdot \arg\min_{\mu\in\mathbb{H}} \Big\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \widehat{\sigma}_n^{-2}(X_i, A_i)\big(Y_i - \mu(X_i, A_i)\big)^2 + \rho_n^{(\mathrm{III})}\|\mu\|_{\mathbb{H}}^2\Big\} \\ &= \arg\min_{\beta\in\ell^2(\mathbb{N})} \Big\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \widehat{\sigma}_n^{-2}(X_i, A_i)\big(Y_i - \langle\beta,\, \phi(X_i, A_i)\rangle\big)^2 + \rho_n^{(\mathrm{III})}\|\beta\|_{\lambda^{-1}}^2\Big\}.\end{aligned}$$

定义噪声 $\varepsilon_i := Y_i - \mu^*(X_i, A_i)$ 和经验协方差算子 or

$$\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^{\sigma} := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \widehat{\sigma}_n^{-2}(X_i, A_i)\phi(X_i, A_i)\phi(X_i, A_i)^{\top},$$

误差向量可表示为

$$\widehat{\beta}_n - \beta_* = \big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^{\sigma} + \rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\Big\{\widehat{\sigma}_n^{-2}\varepsilon_i\phi(X_i, A_i) - \rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\beta_*\Big\}$$

我们可以在给定状态-动作对 $(X_i, A_i)_{i=1}^n$ 和估计的条件协方差函数 $\widehat{\sigma}_n$的条件下，对此类误差进行界定，如下述引理所述。

引理 6。 在上述设定下，给定函数 $\widehat{\sigma}_n$ 和状态-动作对$(X_i, A_i)_{i=1}^n$，若事件 $\mathcal{E}^{(III)}$ 发生，则以概率 $1-\delta$，我们有如下上界

$$\begin{aligned}\Big|z^{\top}(\widehat{\beta}_n - \beta_*)\Big| &\le c\|\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^{\sigma} + \rho_{n,*}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}z\|_{\ell^2} \\ &\quad\times\Bigg\{2\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}} + \frac{\log n\log(1/\delta)\gamma}{n\underline{\sigma}^2}\sup_{(x,a)}\|\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^{\sigma} + \rho_{n,*}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}\phi(x,a)\|_{\ell^2}\Bigg\}\end{aligned} \tag{67a}$$

证明见附录C.4 。

以该引理为前提，我们继续证明引理 5。定义截断方差函数及相应的重加权算子。

$$\widetilde{\sigma}_n(x,a) := \begin{cases}\widehat{\sigma}_n^2(x,a) & \text{if } \frac{\widehat{\sigma}_n^2(x,a)}{\sigma^2(x,a)} \in (1/2, 2),\\ \sigma^2(x,a) & \text{otherwise}\end{cases} \quad \text{and}$$

$$\widetilde{\mathbf{\Gamma}}_n^{\sigma} := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{\widetilde{\sigma}_n^2(X_i, A_i)}\phi(X_i, A_i)\phi(X_i, A_i)^{\top}.$$

~ ^在事件 $\mathcal{E}^{(\mathrm{III})}$ 条件下，我们有 $\mathbf{\Gamma}_n^\sigma = \mathbf{\Gamma}_{n\circ}^\sigma$。另一方面，我们使用引理 4，其权重函数为 $q = \widetilde{\sigma}_n^{-2}$，且 $s = 1/2$。注意，条件（56）变为

$$(\bar{\sigma}^2/\underline{\sigma}^2)\log\big(\frac{\kappa^2}{\rho_n^{(\mathrm{III})}\delta}\big)\cdot\frac{D\big(\rho_n^{(\mathrm{III})}\bar{\sigma}^2\big)}{n} \le \frac{1}{32},$$

这在满足样本量要求（28a）并选择正则化参数（29）时成立。因此，在事件 $\mathcal{E}^{(\mathrm{III})}$上，以概率 $1-\delta$，有

$$\frac{1}{2}\big(\mathbf{\Gamma}_\sigma + \rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big) \preceq \widetilde{\mathbf{\Gamma}}_n^\sigma + \rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1} = \widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^\sigma + \rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1} \preceq 2\big(\mathbf{\Gamma}_\sigma + \rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big). \tag{68}$$

将方程（68）代入引理3给出的保证中，可得

$$\Big|\langle z,\, \widehat{\beta}_n - \beta_*\rangle\Big| \le 4c\|\big(\mathbf{\Gamma}_\sigma + \rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}z\|_{\ell^2}\cdot\Bigg\{\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}} + \frac{\log n\log(1/\delta)\gamma}{n\underline{\sigma}^2}\sup_{(x,a)}\|\big(\mathbf{\Gamma}_\sigma + \rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}\phi(x,a)\|_{\ell^2}\Bigg\}.$$

根据有效维数的定义（19），有

$$\sup_{(x,a)}\|\big(\mathbf{\Gamma}_\sigma + \rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}\phi(x,a)\|_{\ell^2} \le \bar{\sigma}\sup_{(x,a)}\|\big(\mathbf{I} + \bar{\sigma}^2\rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}\phi(x,a)\|_{\ell^2} = \bar{\sigma}\sqrt{D(\rho_n^{(\mathrm{I})})}.$$

此外，根据样本量条件（28a），可得

$$\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}} \ge \frac{\log n\log(1/\delta)\gamma^2}{n\underline{\sigma}^2}\sqrt{D(\rho_n^{(\mathrm{I})})} \ge \frac{\log n\log(1/\delta)\gamma}{n\underline{\sigma}^2}\sup_{(x,a)}\|\big(\mathbf{\Gamma}_\sigma + \rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}\phi(x,a)\|_{\ell^2}.$$

因此，我们得出

$$\Big|\langle z,\, \widehat{\beta}_n - \beta_*\rangle\Big| \le 8c\|\big(\mathbf{\Gamma}_\sigma + \rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}z\|_{\ell^2}\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}}$$

以概率 $1-\delta$，这就证明了引理5中的结论。

5.4.4 方程 (32) 的证明

回顾无限维向量 （17a）的定义 $u(\delta_{x_0})$ -

$$\bar{u}(\delta_{x_0}) = \int_{\mathbb{A}}\phi(x_0,a)d\omega(a\mid x_0).$$

Us根据此定义，估计误差可表示为基函数表示

$$\widehat{\tau}_n(x_0) - \tau^*(x_0) = \langle\widehat{\beta}_n - \beta_*,\, \widetilde{u}(x_0)\rangle,$$

^其中，向量 β_n 和 β_* 定义见第5.3.1节。

应用引理 5 并取 $z = \widetilde{u}(x_0)$ 可得

$$\Big|\langle\widetilde{u}(x_0),\, \widehat{\beta}_n - \beta_*\rangle\Big| \le c\|\big(\mathbf{\Gamma}_\sigma + \rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}\widetilde{u}(x_0)\|_{\ell^2}\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}}. \tag{69}$$

根据命题 1，有

$$\|\big(\mathbf{\Gamma}_\sigma + \rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}\widetilde{u}(x_0)\|_{\ell^2}^2 = \widetilde{u}^\top(x_0)\big(\mathbf{\Gamma}_\sigma + \tfrac{1}{R^2n}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}\widetilde{u} \le 4V_{\sigma,n}^2(\delta_{x_0},\pi,\omega;\mathcal{F}).$$

代回即可完成该结论的证明（32）。

6 讨论

本文研究了基于观测数据估计线性泛函的问题。我们主要关注重要性比率表现不佳这一颇具挑战性的情形。在这类情形下，基于假设收敛速率为 $\sqrt{n}$ 的经典半参数效率界可能为无穷大，因此无法刻画该问题。为弥补这一不足，本文的主要贡献是提出一种修正后的风险泛函，其定义为一个尊重函数类几何结构的变分问题的最优值。由此得到的极小极大风险介于具有 $\sqrt{n}$ 速率的经典半参数效率区间与泛函估计的非参数速率之间。针对再生核希尔伯特空间的情形，我们分析了一个基于结果的回归估计量，并证明它达到了依赖具体实例的下界（至多相差一个普适常数因子）。该估计量的优点是无需了解行为策略。尽管如此，即便具有这种无需先验知识的特性，它仍能达到适用于完全了解策略的预言机估计量的下界。将我们的结果应用于重要性比率存在奇点的各种离策略估计问题时，我们发现了一类新颖的极小极大速率，以及依实例而定的最优性；我们的估计量能够自适应地达到这种最优性。

本文初步探讨了半参数效率之外离策略估计的依实例而定的最优性，但仍有许多值得研究的方向。

- 我们的最优性结果对条件方差函数 σ^2提出了假设。为达到最坏情况方差界$V_\sigma^2(\frac{d\omega}{d\pi}$，我们要求其一致有界；若要根据条件方差结构实现最优自适应，则要求存在可实现一致估计的额外结构。尚不清楚这些要求是否必要。在经典的 $\sqrt{n}$半参数效率 σ^2范畴中，增广逆概率加权估计量无需了解 [Che+18]，便能适应条件方差结构；例如可参见论文。因此，一个重要的开放问题是：在本文所考虑的更具挑战性的情形下，能否在不对条件方差作额外假设的情况下实现这种自适应性？

- 本文仅针对再生核希尔伯特空间证明了下界的可达性。因此，一个重要的问题是，我们的结果在多大程度上可以推广到更一般的函数类。对于同方差模型这一特殊情形，我们推测，极小极大线性估计策略 [Don94；HW21] 对于任何满足 Donsker 性质的函数类 $\mathcal{F}$，都可能产生最优估计量，其含义与本文所述结果相同。对于非 Donsker 类，已有研究 [Rob+09] 表明，行为策略的已知信息会发挥作用。因此，未来研究的一个重要方向是确定估计的最优风险；它由处理效应函数的结构假设、行为策略函数以及重要性比率函数中的奇点共同决定。

- 我们的结果聚焦于经典的离策略上下文老虎机设定，其中数据（X_i、 A_i、 Y_i）$_{i=1}^n$ 是独立同分布的。然而，许多决策问题涉及以自适应方式收集数据（例如运行老虎机算法），或遵循马尔可夫链（例如在强化学习中）。此类设定可能导致重要性比率难以得到良好控制，进而带来实际挑战 [YW20；Kha+21]。我们的估计框架和风险泛函对重要性比率中的奇异性具有最优的无关性，因此很可能有助于解决这类问题。

致谢

作者感谢苏方舟提供了有益的讨论。我们衷心感谢美国国家科学基金会通过以下资助提供支持：授予 MJW 的美国国家科学基金会计算与通信基金项目（编号 1955450）和美国国家科学基金会数学科学部项目（编号 2015454），授予 MJW 和 PLB 的美国国家科学基金会信息与智能系统部项目（编号 1909365）和美国国家科学基金会项目（编号 DMS-2023505）；此外，还感谢美国海军研究办公室通过授予 PLB 的多学科大学研究计划项目（编号 N000142112431）提供支持。

参考文献

[Ada08] R. Adamczak. “适用于无界经验过程上确界及其在马尔可夫链中应用的尾部不等式”。载于：《电子概率期刊》13（2008年），第1000–1034页（引文见第51页）。[AK21] T. B. Armstrong 和 M. Koles´ar. “无混杂性条件下平均处理效应的有限样本最优估计与推断”。载于：《计量经济学》89.3（2021年），第1141–1177页（引文见第7页）。[BLZ97] L. D. Brown、M. G. Low 和 L. H. Zhao. “非参数函数估计中的超效率”。载于：《统计年鉴》25.6（1997年），第2607–2625页（引文见第5页）。[BTA11] A. Berlinet 和 C. Thomas-Agnan.《概率论与统计学中的再生核希尔伯特空间》。施普林格科学与商业媒体，2011年（引文见第21页）。[CDV07] A. Caponnetto 和 E. De Vito. “正则化最小二乘算法的最优速率”。载于：《计算数学基础》7.3（2007年），第331–368页（引文见第13页）。[Che+18] V. Chernozhukov、D. Chetverikov、M. Demirer、E. Duflo、C. Hansen、W. Newey 和 J. Robins. “针对处理效应和结构参数的双重／去偏机器学习：双重／去偏机器学习”。载于：《计量经济学杂志》21.1（2018年）（引文见第2、6、14、42页）。[CHT04] X. Chen、H. Hong 和 A. Tarozzi. “非经典测量误差、缺失数据和处理效应广义矩估计模型中的半参数效率”。载于：（2004年）（引文见第2、6页）。[D’A+21] A. D’Amour、P. Ding、A. Feller、L. Lei 和 J. Sekhon. “高维协变量观察性研究中的重叠”。载于：《计量经济学杂志》221.2（2021年），第644–654页（引文见第2、6页）。[Don94] D. L. Donoho. “统计估计与最优恢复”。载于：《统计年鉴》22.1（1994年），第238–270页（引文见第5、7、12、42页）。[DWW21] Y. Duan、M. Wang 和 M. J. Wainwright. “使用基于核的时序差分方法进行最优策略评估”。载于：arXiv 预印本 arXiv:2109.12002（2021年）（引文见第46页）。[Eva10] L. C. Evans.《偏微分方程》。第19卷。美国数学学会，2010年（引文见第68页）。[Fr¨o04] M. Fr¨olich. “倾向得分匹配与加权估计量的有限样本性质”。载于：《经济学与统计学评论》86.1（2004年），第77–90页（引文见第6页）。[GH20] Z. Gao 和 Y. Han. “异质性处理效应的极小极大最优非参数估计”。载于：《神经信息处理系统进展》33（2020年），第21751–21762页（引文见第7页）。[Hah98] J. Hahn. “倾向得分在平均处理效应有效半参数估计中的作用”。载于：《计量经济学》（1998年），第315–331页（引文见第2、5、9页）。[H´aj72] J. H´ajek. “估计中的局部渐近极小极大性与可容许性”。载于：《第六届伯克利数学统计与概率研讨会论文集》。第1卷。1972年，第175–194页（引文见第5页）。

[HIR03] K. Hirano、G. W. Imbens 和 G. Ridder. “使用估计的倾向得分有效估计平均处理效应”。载于：《计量经济学》71.4（2003年），第1161–1189页（引文见第2、6页）。[HLL20] H. Hong、M. P. Leung 和 J. Li. “有限重叠下有限总体处理效应的推断”。载于：《计量经济学杂志》23.1（2020年），第32–47页（引文见第6页）。[HMZ19] D. A. Hirshberg、A. Maleki 和 J. R. Zubizarreta. “重新定向均值的极小极大线性估计”。载于：arXiv 预印本 arXiv:1901.10296（2019年）（引文见第7页）。[HW21] D. A. Hirshberg 和 S. Wager. “增广极小极大线性估计”。载于：《统计年鉴》49.6（2021年），第3206–3227页（引文见第2、7、42页）。[HZ20] Q. Han 和 C.-H. Zhang. “多重保序回归中分块估计量的极限分布理论”。载于：《统计年鉴》48.6（2020年），第3251–3282页（引文见第5页）。[Jia+22] K. Jiang、R. Mukherjee、S. Sen 和 P. Sur. “增广逆概率加权估计量的新中心极限定理：方差膨胀、交叉拟合协方差及其他”。载于：arXiv 预印本 arXiv:2205.10198（2022年）（引文见第25页）。[Kal18] N. Kallus. “平衡策略评估与学习”。载于：《神经信息处理系统进展》31（2018年）（引文见第7页）。[Kal20] N. Kallus. “用于因果推断的广义最优匹配方法”。载于：《机器学习研究杂志》21（2020年），第62–1页（引文见第7页）。[Kal97] O. Kallenberg.《现代概率论基础》。第2卷。施普林格，1997年（引文见第23页）。[KBW22] E. H. Kennedy、S. Balakrishnan 和 L. Wasserman. “异质性因果效应估计的极小极大收敛率”。载于：arXiv 预印本 arXiv:2203.00837（2022年）（引文见第2、5、7、12页）。[Kha+21] K. Khamaru、Y. Deshpande、L. Mackey 和 M. J. Wainwright. “自适应线性回归中的近最优推断”。载于：arXiv 预印本 arXiv:2107.02266（2021年）（引文见第42页）。[KI86] R. Z. Khas’minskii 和 I. A. Ibragimov. “谱密度函数泛函的渐近有效非参数估计”。载于：《概率论及相关领域》73.3（1986年），第447–461页（引文见第5页）。[KS07] J. D. Y. Kang 和 J. L. Schafer. “揭开双重稳健性的面纱：从不完整数据估计总体均值的替代策略比较”。载于：《统计科学》22.4（2007年），第523–539页（引文见第6页）。[KT10] S. Khan 和 E. Tamer. “非正规识别、支撑条件与逆权重估计”。载于：《计量经济学》78.6（2010年），第2021–2042页（引文见第2、3、6、22、23、25页）。[KU20] N. Kallus 和 M. Uehara. “用于在马尔可夫决策过程中高效进行离策略评估的双重强化学习”。载于：《机器学习研究杂志》21.167（2020年）（引文见第6页）。[LC60] L. Le Cam. “局部渐近正态分布族”。载于：加州大学统计学出版物3（1960年），第37–98页（引文见第5页）。[LD04] J. K. Lunceford 和 M. Davidian. “通过倾向得分分层与加权估计因果处理效应：一项比较研究”。载于：《医学统计学》23.19（2004年），第2937–2960页（引文见第6页）。[Lev78] B. Y. Levit. “无限维信息下界”。载于：理论概率及其应用23（1978年），第388–394页（引文见第2、5页）。[Ma+22] C. Ma、B. Zhu、J. Jiao 和 M. J. Wainwright. “多臂老虎机的极小极大离策略评估”。载于：IEEE 信息论汇刊（2022年）（引文见第6页）。[Mas07] P. Massart.《集中不等式与模型选择》。第6卷。施普林格，2007年（引文见第33页）。

[Mer09] J Mercer。《正定与负定型函数及其与积分方程理论的联系》。载于：皇家学会哲学汇刊 209（1909年），第 4–415 页（引自第 13 页）。[Min17] S. Minsker。《自伴算子伯恩斯坦不等式的若干推广》。载于：《统计与概率快报》127（2017年），第 111–119 页（引自第 52 页）。[MN10] S. Mendelson 和 J. Neeman。《核学习中的正则化》。载于：《统计年鉴》38.1（2010年），第 526–565 页（引自第 46、47 页）。[MPW22] C. Ma、R. Pathak 和 M. J. Wainwright。《基于再生核希尔伯特空间的非参数回归中协变量偏移的最优处理》。载于：arXiv 预印本 arXiv:2205.02986（2022年）（引自第 51 页）。[MW20] X. Ma 和 J. Wang。《利用逆概率加权进行稳健推断》。载于：《美国统计学会会刊》115.532（2020年），第 1851–1860 页（引自第 2、6 页）。[MWB22] W. Mou、M. J. Wainwright 和 P. L. Bartlett。《线性泛函的离策略估计：半参数效率的非渐近理论》。载于：arXiv 预印本（2022年）（引自第 5、27 页）。[NW21] X. Nie 和 S. Wager。《异质性处理效应的准预言估计》。载于：《生物统计学》108.2（2021年），第 299–319 页（引自第 7、46 页）。[Pin80] M. S. Pinsker。《高斯噪声下平方可积信号的最优滤波》。载于：《信息传输问题》16.2（1980年），第 52–68 页（引自第 5 页）。[Rob+08] J. Robins、L. Li、E. Tchetgen 和 A. van der Vaart。《高阶影响函数与非线性泛函的极小极大估计》。载于：《概率与统计：纪念 David A. Freedman 文集》2（2008年），第 335–421 页（引自第 6 页）。[Rob+09] J. Robins、E. T. Tchetgen、L. Li 和 A. van der Vaart。《半参数极小极大速率》。载于：《电子统计学杂志》3（2009年），第 1305 页（引自第 2、5、6、12、42 页）。[Ros87] P. R. Rosenbaum。《基于模型的直接调整》。载于：《美国统计学会会刊》82.398（1987年），第 387–394 页（引自第 3 页）。[RR83] P. R. Rosenbaum 和 D. B. Rubin。《倾向得分在因果效应观察性研究中的核心作用》。载于：《生物统计学》70.1（1983年），第 41–55 页（引自第 6 页）。[RW17] J. P. Romano 和 M. Wolf。《重振加权最小二乘法》。载于：《计量经济学杂志》197.1（2017年），第 1–19 页（引自第 17 页）。[She+20] Y. Shen、C. Gao、D. Witten 和 F. Han。《随机设计下非参数回归中方差的最优估计》。载于：《统计年鉴》48.6（2020年），第 3589–3618 页（引自第 57 页）。[Sin20] R. Singh。《未观测混杂的核方法：负对照、代理变量与工具变量》。载于：arXiv 预印本 arXiv:2012.10315（2020年）（引自第 7 页）。[Spe79] P. Speckman。《希尔伯特空间中线性泛函的极小极大估计》。未发表手稿（1979年）（引自第 6、7、12、16 页）。[SS95] J. Stander 和 B. W. Silverman。《线性泛函的极小极大估计，尤其是非参数回归与正电子发射断层成像中的应用》。载于：《计算统计学》10（1995年），第 259–259 页（引自第 12、16 页）。[Su+23] F. Su、W. Mou、P. Ding 和 M. J. Wainwright。《何时估计倾向得分更好？高维分析与偏差校正》。载于：arXiv 预印本（2023年）（引自第 2、25 页）。[SXG20] R. Singh、L. Xu 和 A. Gretton。《因果函数的核方法：剂量、异质性与增量反应曲线》。载于：arXiv 预印本 arXiv:2010.04855（2020年）（引自第 7 页）。[Tsy08] A. B. Tsybakov。《非参数估计导论》。施普林格科学与商业媒体，2008年（引自第 21 页）。

[WAD17] Y.-X. Wang、A. Agarwal 和 M. Dudık。《上下文老虎机中的最优自适应离策略评估》。载于：国际机器学习会议。PMLR。2017年，第 3589–3597 页（引自第 6 页）。[Wai19] M. J. Wainwright。《高维统计学：非渐近视角》。第 48 卷。剑桥大学出版社，2019年（引自第 16、20、28、34 页）。[Wat22] G. N. Watson。《贝塞尔函数理论论述》。第 3 卷。大学出版社，1922年（引自第 66、67 页）。[Wid63] H. Widom。《某些积分方程特征值的渐近行为》。载于：美国数学学会会刊 109.2（1963年），第 278–295 页（引自第 61 页）。[WSS01] R. C. Williamson、A. J. Smola 和 B. Scholkopf。《通过紧算子的熵数分析正则化网络与支持向量机的泛化性能》。载于：IEEE 信息论汇刊 47.6（2001年），第 2516–2532 页（引自第 46 页）。[XJ21] T. Xie 和 N. Jiang。《仅具可实现性的批量价值函数逼近》。载于：国际机器学习会议。PMLR。2021年，第 11404–11413 页（引自第 6 页）。[YW20] M. Yin 和 Y.-X. Wang。《表格型强化学习的渐近有效离策略评估》。载于：人工智能与统计学会议。PMLR。2020年，第 3948–3958 页（引自第 6、42 页）。[Zha02] T. Zhang。《核学习的有效维数与泛化》。载于：《神经信息处理系统进展》15（2002年）（引自第 13 页）。[Zho02] D.-X. Zhou。《学习理论中的覆盖数》。载于：复杂性杂志 18.3（2002年），第 739–767 页（引自第 46、47 页）。[ZWB21] A. Zanette、M. J.Wainwright 和 E. Brunskill。《演员-评论家方法对离线强化学习的可证明益处》。载于：《神经信息处理系统进展》34（2021年），第 13626–13640 页（引自第 6 页）。

A 有效维数的性质

本节将讨论在特征值具有衰减速率的情况下，有效维数的各种界，以及特征函数的一些正则性条件。

A.1 特征函数的正则性条件

关于特征函数，最直接的假设是一致有界性条件

$$\|\phi_j\|_\infty = \sup_{(x,a)} |\phi_j(x,a)| < \infty \qquad \text{for all } j = 1, 2, \dots. \tag{70}$$

文献中经常出现这一条件 [WSS01；MN10；DWW21；NW21], 但如前所述，并非所有核函数都满足该条件。参见论文 [Zho02] 和附录E.1 中的一些自然反例。

在本文中，我们考虑以下放宽的增长条件：存在一个标量$\nu \in [0, 1/2)$，使得特征函数的上确界范数满足界

$$\phi_{\max} := \sup_{j \geq 1} \sup_{(x,a)} \lambda_j^\nu |\phi_j(x,a)| < \infty. \tag{Eig(ν)}$$

我们注意到，要求 $\nu \in [0, 1/2)$ 是自然的，因为核的一致有界性条件 (Kbou(κ)) 蕴含条件 (Eig(ν)) 以 $\nu = 1/2$ 和 $\phi_{\max} = \kappa$ 成立。严格小于 $1/2$ 的指数ν 保证了略强的正则性。取 $\nu = 0$ 时，增长条件 (Eig(ν)) 等价于一致有界性条件 (70)。然而，当 $\nu > 0$ 时，另一方面，该放宽的条件要弱得多。例如，Mendelson 和 Neeman [MN10] 证明，论文 [Zho02] 中的反例对任意 $\nu > 0$ 都满足方程 (Eig(ν))。

在假设（Eig(ν)）下，我们有上界

$$D(\rho) \le \sum_{j=1}^{\infty} \sup_{(x,a)} \frac{\lambda_j \phi_j^2(x,a)}{\lambda_j + \rho} \le \phi_{\max}^2 \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\lambda_j^{1-2\nu}}{\lambda_j + \rho}. \tag{71}$$

结合特征值序列 $\{\lambda_j\}_{j=1}^{\infty}$的衰减条件，我们可以从这个上界推导出有效维数的显式界。特征值衰减有两种自然的类别：多项式条件

$$\lambda_j \le \lambda_0 j^{-\alpha} \qquad \text{for some } \alpha > 1, \tag{72a}$$

和指数衰减

$$\lambda_j \le \lambda_0 \exp(-c_0 j) \qquad \text{for some } c_0 > 0. \tag{72b}$$

命题 3。 在假设（Kbou(κ)）和（Eig(ν)）下，我们有

（*a*）对于具有 α-多项式衰减（72a）的特征值，若 $\alpha > \frac{1}{1-2\nu}$，则有—

$$D(\rho) \le c\rho^{-\frac{1}{\alpha}-2\nu}. \tag{73a}$$

（*b*）对于具有指数衰减的特征值（72b），有

$$D(\rho) \le c \log\left(\tfrac{\lambda_0}{\rho}\right). \tag{73b}$$

在这些界中，常数 c 可以依赖于问题参数（λ_0、 α、 c_0、 ν），但与 ρ无关。证明见附录A.2 。

在我们的主要定理中，有效维数的界用于建立样本量要求（21a）和（28a）。为了使它们成立，除（n、 γ、 σ^{-1}、 R）的对数因子外，我们需要样本量

–

$$\begin{aligned} n &\gtrsim \left(\gamma/\underline{\sigma}\right)^{\frac{2\alpha}{\alpha-1-2\nu\alpha}} \cdot \left(R/\bar{\sigma}\right)^{\frac{1+2\alpha\nu}{\alpha-1-2\nu\alpha}}, \quad \text{under Proposition 3(a)}, \\ n &\gtrsim \left(\gamma/\underline{\sigma}\right)^{2}, \quad \text{under Proposition 3(b)}. \end{aligned}$$

换言之，样本量要求取决于两个重要因素：观测噪声 $W = Y - \mu^*(X,\ A)$ 的尾部条件，以其最大的 Orlicz范数与最小方差之比来衡量；以及核类的丰富程度，以特征值衰减率和再生核希尔伯特空间球的半径来衡量。

A.2 命题3的证明

由于特征值序列收敛于零，截断整数 $J := \sup\{j \geq 1 \mid \lambda_j > \rho\}$ 必定是有限的。根据有效维数的定义，我们有

$$D(\rho) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\lambda_j^{1-2\nu}}{\lambda_j + \rho} \leq \sum_{j \leq J} \lambda^{-2\nu} + \rho^{-1} \sum_{j>J} \lambda_j^{1-2\nu} \leq \rho^{-2\nu} J + \rho^{-1} \sum_{j>J} \lambda_j^{1-2\nu}.$$

我们分别证明两种情形下的结果。

对于多项式衰减特征值，我们有 $J \leq \left(\frac{\lambda_0}{\rho}\right)^{1/\alpha}$，并且

$$\sum_{j>J} \lambda_j^{1-2\nu} \leq \lambda_0 \sum_{j>J} j^{-\alpha(1-2\nu)} < \frac{1}{\alpha(1-2\nu)-1} J^{1-\alpha(1-2\nu)}.$$

合并这些界可得

$$D(\rho) \leq \lambda_0^{1/\alpha} \rho^{-2\nu-1/\alpha} + \frac{1}{\alpha(1-2\nu)-1} \lambda_0^{1/\alpha-1+2\nu} \rho^{-1/\alpha-2\nu} \leq c(\lambda_0, \nu, \alpha) \rho^{-1/\alpha-2\nu}.$$

对于指数衰减特征值，我们有 $J \leq c_0^{-1} \log\left(\frac{\lambda_0}{\rho}\right)$，并且

$$\sum_{j>J} \lambda_j^{1-2\nu} \leq \lambda_0 \sum_{j>J} \exp\big(-c_0(1-2\nu)j\big) \leq \frac{\lambda_0}{(1-2\nu)c_0} \exp(-c_0(1-2\nu)J) \leq \frac{\rho}{c_0},$$

由此得到有效维数界

$$D(\rho) \leq c(c_0, \lambda_0, \nu) \log\left(\frac{\lambda_0}{\rho}\right),$$

命题3的证明

B 放宽有效维数条件

回顾一下，定理 2要求有效维数满足某些增长条件。本节将讨论如何放宽这些条件，从而得到一个在对数因子范围内仍具实例最优性的界。

B.1 近乎最优速率

我们的结果涉及修正正则化参数

$$\rho_n = \frac{\bar{\sigma}^2}{R^2 n} \vee \frac{32\kappa^2 \log(n/\delta)}{n}, \tag{74}$$

以及修正高阶项 $\mathcal{H}'_n := \big(\gamma + \kappa R\big)^{\frac{\log(n/\delta)}{\sqrt{n}}}$。

推论 3. 假设 $Kbou(\kappa)$ 和 $subG(\gamma)$ 成立，并且我们使用正则化参数 (74)实施该方法。那么对于任意样本量 $n \geq 2$以及任意 $\delta \in (0,1)$，我们有

$$|\widehat{\tau}_n - \tau^*| \leq c v_\xi(\mu^*) \sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}} + \frac{c(\gamma + \kappa R)}{\bar{\sigma}} \bar{v}_\sigma\big(\mathbb{B}_{\mathbb{H}}(R); n\big) \frac{\log(n/\delta)}{\sqrt{n}} + c\mathcal{H}'_n \tag{75}$$

概率至少为 $1 - \delta$。

参见附录B.2 中的证明。

这里有几点值得说明。首先，推论 3 适用于任意样本量，且完全不依赖于有效维数条件 D。与定理2中的最优实例相关界相比，推论 3有两点不同：

- 方差泛函 $V_{\bar{\sigma},\, n}(\xi^*,\ \pi,\ \omega;\, \mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R))$ 乘以一个问题相关因子 $\frac{\gamma+\kappa R}{\bar{\sigma}}$，并带有关于比值 n/δ 的对数因子。
- 高阶项 $\mathcal{H}'_n$ 的阶为 $\Theta(n^{-1/2})$，另有对数因子。这样的收敛率比定理 2中给出的高阶项界 $\mathcal{H}_n$ 衰减得更慢；该界以速率 $o(n^{-1/2})$

由于这两项主要差异，推论 3 中的界未必总是实例最优的。不过，我们指出，近乎最优的收敛率（作为样本量 n的函数）仍得以保留。在高噪声区域中，当各量（γ，$\bar{\sigma}$，κR）阶数相同时，定理 2 与推论 3 中的主导项仅相差对数因子。项 $\mathcal{H}'$ 至多相差对数因子，仍由主导项控制。综合来看，在弱假设下，推论 3的结果可能仅因对数因子和问题相关常数而劣于定理 2 。请注意，除了经典的 $\sqrt{n}$-区域（具体示例见第 3.3节）之外，还可以建立多种收敛率。这些收敛率虽然取决于策略 π的复杂性质，却无需有效维数条件即可自动达到。

B.2 推论3的证明

我们沿用定理2证明中的相同记号（$\widehat{u}_n$，β_n，β_*）。回顾分解式（47）可知，$\widehat{\tau}_n - \tau^* = \langle \widehat{u}_n - u,\, \beta_* \rangle + \langle u,\, \beta_n - \beta_* \rangle + \langle \widehat{u}_n - u,\, \beta_n - \beta_* \rangle$。由于界（50）不依赖于有效维数，因此在当前假设下仍然成立——也就是说，我们有

$$|\langle \widehat{u}_n - \bar{u},\, \beta_* \rangle| \le 2V_{\xi^*}(\mu^*)\sqrt{\tfrac{\log(1/\delta)}{n}} + 6\kappa R\tfrac{\log(1/\delta)}{n}, \tag{76}$$

以概率 $1-\delta$。

本节其余部分将致力于控制分解中的另外两项。我们使用以下引理，它与引理2类似。

引理 7. 在推论 3的假设下，对于任意固定的 $z \in \ell^2$，我们有

$$\left|\langle z,\, \widehat{\beta}_n - \beta_* \rangle\right| \le c\|\big(\mathbf{I} + \rho_n \mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2} z\|_{\ell^2} \cdot (\gamma + \kappa R)\sqrt{\frac{\log(n/\delta)\log(1/\delta)}{n}}.$$

概率至少为 $1-\delta$。

证明见附录 C.3 。

在接受该引理的前提下，我们继续证明推论 3。应用引理7并结合 $z = u$，可得

$$\begin{aligned}
\left|\langle \bar{u},\, \widehat{\beta}_n - \beta_* \rangle\right| &\le c\|\big(\mathbf{I} + \rho_n \mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2} \bar{u}\|_{\ell^2} \cdot (\gamma + \kappa R)\frac{\log(n/\delta)}{\sqrt{n}} \\
&\le c\|\big(\mathbf{I} + \frac{\bar{\sigma}^2}{R^2 n}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2} z\|_{\ell^2} \cdot (\gamma + \kappa R)\sqrt{\frac{\log(n/\delta)\log(1/\delta)}{n}} \\
&\le 4c\bar{v}_\sigma\big(\mathbb{B}_{\mathbb{H}}(R); n\big) \cdot \frac{\gamma + \kappa R}{\bar{\sigma}} \cdot \frac{\log(n/\delta)}{\sqrt{n}},
\end{aligned} \tag{77}$$

其成立的概率至少为 $1-\delta$。

接下来，我们应用引理 48b 中的方程（1），以及条件（Kbou(κ)。由此可得

$$\|\big(\mathbf{I}+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}(\widehat{u}_n-\bar{u})\|_{\ell^2}\le c\sqrt{\frac{D(\rho_n)}{n}\log(1/\delta)}\le c\kappa\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{\rho_n n}}\le c,$$

以概率 $1-\delta$。

结合引理 7 可得

$$\begin{aligned}\Big|\langle\widehat{u}_n-\bar{u},\,\widehat{\beta}_n-\beta_*\rangle\Big|&\le c\|\big(\mathbf{I}+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}(\widehat{u}_n-\bar{u})\|_{\ell^2}\cdot(\gamma+\kappa R)\frac{\log(n/\delta)}{\sqrt{n}}\\&\le c'(\gamma+\kappa R)\frac{\log(n/\delta)}{\sqrt{n}}.\end{aligned}\tag{78}$$

结合方程（76）、（77）和（78），即可完成推论 3 的证明。

C 技术引理的证明

本节汇集了定理 2 证明中所用辅助引理的证明。

C.1 引理的证明3

我们从以下分解开始

$$z^\top\big(\widehat{\beta}_n-\beta_*\big)=\underbrace{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n W_i}_{\text{noise part}}-\underbrace{\rho_n z^\top\mathbf{\Lambda}^{-1}\beta_*}_{\text{bias part}},$$

其中 $W_i:=\varepsilon_i\,z^\top\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}\phi(X_i,A_i)$。

从偏差项开始，我们注意到

$$\begin{aligned}\Big|z^\top\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}\cdot\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\beta_*\Big|&=\rho_n\cdot\Big|\langle\mathbf{\Lambda}^{-1/2}\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}z,\,\mathbf{\Lambda}^{-1/2}\beta_*\rangle\Big|\\&\le\rho_n\|\mu^*\|_{\mathbb{H}}\cdot\|\mathbf{\Lambda}^{-1/2}\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}z\|_{\ell^2}\\&\le\sqrt{\rho_n}\|\mu^*\|_{\mathbb{H}}\cdot\|\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}z\|_{\ell^2}.\end{aligned}\tag{79}$$

这里，最后一步基于这样一个事实：对于任意一对满足 $\mathbf{A}\preceq\mathbf{B}$ 的算子（$\mathbf{A}$,$\mathbf{B}$），$\|\mathbf{A}x\|_{\ell^2}\le\|\mathbf{B}x\|_{\ell^2}$。

对于随机部分，我们注意到，在给定 $(X_i,A_i)_{i=1}^n$ 的条件下，噪声变量 $\{\varepsilon_i\}_{i=1}^n$ 相互独立。对于每个 $i\in[n]$，条件方差的形式为

$$\mathrm{var}\left(W_i\mid(X_i,A_i)_{i=1}^n\right)=\sigma^2(X_j,A_j)\cdot\Big|\phi(X_i,A_i)^\top\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}z\Big|^2.$$

对这些关系求和可得

$$\begin{aligned}\mathrm{var}\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n W_i\mid(X_i,A_i)_{i=1}^n\right)&=z^\top\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}\sum_{i=1}^n\sigma^2(X_j,A_j)\phi(X_i,A_i)\phi(X_i,A_i)^\top\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}z\\&\le\bar{\sigma}^2\|\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^{1/2}\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}z\|_2^2.\end{aligned}$$

引入简写 $\mathbf{M} = \widehat{\mathbf{\Gamma}}_n + \rho_n \mathbf{\Lambda}^{-1}$，根据噪声尾部假设（subG($\gamma$)）和 Adamczak 集中不等式 [Ada08]，在给定条件 $(X_i, A_i)_{i=1}^n$ 下，我们有

$$\left| z^\top \mathbf{M}^{-1} \cdot \tfrac{1}{n} \sum_{i=1}^n \{\varepsilon_i \phi(X_i, A_i)\} \right| \leq c\bar{\sigma} \|\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^{1/2} \mathbf{M}^{-1} z\|_{\ell^2} \sqrt{\tfrac{\log(1/\delta)}{n}} + \max_{i \in [n]} \left| z^\top \mathbf{M}^{-1} \phi(X_i, A_i) \right| \tfrac{\gamma \log n \log(1/\delta)}{n},$$

以概率 $1 - \delta$。

为了控制右侧的最大项，我们使用柯西–施瓦茨不等式，从而得到

$$\left| z^\top \mathbf{M}^{-1} \phi(X_i, A_i) \right| \leq \|\mathbf{M}^{-1/2} z\|_{\ell^2} \cdot \sup_{(x,a) \in \mathbb{X} \times \mathbb{A}} \|\mathbf{M}^{-1/2} \phi(x, a)\|_{\ell^2}.$$

结合上述两个界可得

$$\left| z^\top \mathbf{M}^{-1} \cdot \tfrac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left\{\varepsilon_i \phi(X_i, A_i)\right\} \right| \leq c\|\big(\mathbf{M}^{-1/2} z\|_{\ell^2} \left\{ \bar{\sigma} \sqrt{\tfrac{\log(1/\delta)}{n}} + \gamma \sup_{(x,a) \in \mathbb{X} \times \mathbb{A}} \|\mathbf{M}^{-1/2} \phi(x, a)\|_{\ell^2} \cdot \tfrac{\log(1/\delta) \log n}{n} \right\}, \quad (80)$$

以概率 $1 - \delta$。

结合方程 (79) 和 (80)，我们得出

$$\left| \langle z, \widehat{\beta}_n - \beta_* \rangle \right| \leq c\|\mathbf{M}^{-1/2} z\|_{\ell^2} \left\{ \sqrt{\rho_n} \|\mu^*\|_{\mathbb{H}} + \bar{\sigma} \sqrt{\tfrac{\log(1/\delta)}{n}} + \gamma \sup_{(x,a) \in \mathbb{X} \times \mathbb{A}} \|\mathbf{M}^{-1/2} \phi(x, a)\|_{\ell^2} \cdot \tfrac{\log(1/\delta) \log n}{n} \right\},$$

这就完成了引理 3的证明。

C.2 引理4的证明

在此证明中，我们注意到，总体协方差算子$\mathbf{\Gamma}_{*,\ q}$ 满足夹逼关系

$$\underline{q}\mathbf{I} \preceq \mathbf{\Gamma}_{*,q} \preceq \bar{q}\mathbf{I}. \quad (81)$$

我们的论证采用了论文 [MPW22], 中使用的方法，但涉及更精细的论证，从而获得更紧的界，使 ρ_n取较小值成为可能。将算子 $(\mathbf{\Gamma}_{*,\ q} + \rho_n \mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}$ 分别从方程（57）的左侧和右侧相乘后，我们发现，只需给出以下预条件误差算子的算子范数的界：

$$\widehat{\Delta}_n := (\mathbf{\Gamma}_{*,q} + \rho_n \mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2} \big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_{n,q} - \mathbf{\Gamma}_{*,q}\big) (\mathbf{\Gamma}_{*,q} + \rho_n \mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}.$$

注意，$\widehat{\Delta}_n$ 是独立同分布随机算子的和。为了界定其算子范数，我们采用希尔伯特空间中的一个已知伯恩斯坦不等式。该不等式适用于可分希尔伯特空间 $\mathbb{V}$ 上由自伴零均值算子构成的独立同分布序列 $\{X_i\}_{i=1}^n$。

命题 4 (Minsker [Min17])**.** 考虑一个满足以下条件的序列

$$\|\mathbb{E}[X_i^2]\|_{op} \le \sigma^2, \quad \operatorname{trace}(\mathbb{E}[X_i^2]) \le V < \infty, \quad \textit{and} \quad \|X_i\|_{op} \le U, \ \textit{almost surely.}$$

于是我们得到集中不等式

$$\mathbb{P}\Big(\|\sum_{j=1}^{n} X_i\|_{op} \ge t\Big) \le \frac{14V}{\sigma^2}\exp\left(-\frac{t^2/2}{n\sigma^2 + tU/3}\right), \quad \textit{for any } t > 0.$$

该结果的一种形式在论文中表述为定理 3.1： [Min17]; 另请参见同一论文的 §3.1，其中将其推广到了无限维情形。

利用这一辅助结果，现在我们来证明引理 4。为此，我们使用以下简记 $\phi^i := \phi(X_i, A_i)$ 和 $q^i := q(X_i, A_i)$，以及随机线性算子序列

$$\Delta_i := (\mathbf{\Gamma}_{*,q} + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}\big(q^i\phi^i(\phi^i)^\top - \mathbf{\Gamma}_{*,q}\big)(\mathbf{\Gamma}_{*,q} + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2} \qquad \text{for each } i \in [n].$$

我们需要界定应用命题 4所需的相关量。首先考虑方差，有

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\big[\Delta_i^2\big] &\preceq \mathbb{E}\Big[\Big\{(\mathbf{\Gamma}_{*,q} + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}\big(q^i\phi^i(\phi^i)^\top - \mathbf{\Gamma}_{*,q}\big)(\mathbf{\Gamma}_{*,q} + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}\Big\}^2\Big] \\ &= \mathbb{E}\Big[\Big\{q^i(\phi^i)^\top(\mathbf{\Gamma}_{*,q} + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1}\phi^i\Big\}\cdot\Big\{(\mathbf{\Gamma}_{*,q} + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}q^i\phi^i(\phi^i)^\top(\mathbf{\Gamma}_{*,q} + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}\Big\}\Big].\end{aligned} \tag{82}$$

定义量 $\Phi_{\max} := \sup_{(x,a)}\big|q(x,\ a)\phi(x,\ a)^\top(\mathbf{\Gamma}_{*,\ q} + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1}\phi(x,\ a)\big|$。我们可以利用这一一致界来控制关系式（82）右侧，并得到

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\big[\Delta_i^2\big] &\preceq \Phi_{\max}\cdot\mathbb{E}\Big[(\mathbf{\Gamma}_{*,q} + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}q^i\phi^i(\phi^i)^\top(\mathbf{\Gamma}_{*,q} + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}\Big] \\ &= \Phi_{\max}\cdot(\mathbf{\Gamma}_{*,q} + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}\mathbf{\Gamma}_{*,q}(\mathbf{\Gamma}_{*,q} + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}\end{aligned}$$

接下来，我们可以将 $\mathbb{E}[\Delta_i^2]$ 的算子范数和迹界定为

$$\|\mathbb{E}\big[\Delta_i^2\big]\|_{\mathrm{op}} \le \Phi_{\max}\cdot\|(\mathbf{\Gamma}_{*,q} + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}\mathbf{\Gamma}_{*,q}(\mathbf{\Gamma}_{*,q} + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}\|_{\mathrm{op}} \le \Phi_{\max}, \tag{83a}$$

根据方程（81），我们有

$$\operatorname{trace}\Big(\mathbb{E}\big[\Delta_i^2\big]\Big) \le \Phi_{\max}\cdot\operatorname{trace}\big((\mathbf{\Gamma}_{*,q} + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1}\mathbf{\Gamma}_{*,q}\big) \le \overline{q}\Phi_{\max}\cdot\operatorname{trace}\big(\underline{q}\mathbf{I} + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1}\big). \tag{83b}$$

最后，我们注意到

$$\begin{aligned}\|\Delta_i\|_{\mathrm{op}} &\le \operatorname{trace}\Big((\mathbf{\Gamma}_{*,q} + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}q^i\phi^i(\phi^i)^\top(\mathbf{\Gamma}_{*,q} + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}\Big) \\ &= q^i(\phi^i)^\top(\mathbf{\Gamma}_{*,q} + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1}\phi^i \le \Phi_{\max}\end{aligned} \tag{83c}$$

几乎处处成立。

结合方程（83）的不同部分与命题 4可得尾界

$$\mathbb{P}\left(\|\widehat{\Delta}_n\|_{\mathrm{op}} \le t\right) \le 14\overline{q}\operatorname{trace}\big((\underline{q}\mathbf{I} + \rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1}\big)\cdot\exp\left\{\frac{-nt^2/2}{(1 + t/3)\Phi_{\max}}\right\}, \qquad \text{valid for any } t > 0.$$

注意到迹 $\big((q\mathbf{I}+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1}\big)\le\rho_n^{-1}$迹$(\mathbf{\Lambda})\le\frac{\kappa^2}{\rho_n}$，对于定义为 $\mathcal{E}_\delta$

$$\mathcal{E}_\delta:=\left\{\|\widehat{\Delta}_n\|_{\mathrm{op}}\le\sqrt{\frac{2\Phi_{\max}}{n}\log\big(\frac{\kappa^2}{\rho_n\delta}\big)}+\frac{6\Phi_{\max}}{n}\log\big(\frac{\kappa^2}{\rho_n\delta}\big)\right\},$$

我们有 $\mathbb{P}(\mathcal{E}_\delta)\ge1-\delta$。

注意，量 $\Phi_{\max}$ 满足以下界

$$\Phi_{\max}\le\overline{q}\sup_{x\in\mathbb{X},a\in\mathbb{A}}\Big|\phi(x,a)^\top(\underline{q}\mathbf{I}+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1}\phi(x,a)\Big|\le\overline{q}/\underline{q}\cdot D\big(\rho_n/\underline{q}\big).$$

在事件 $\mathcal{E}_\delta$上，条件 (56) 表明 $\|\Delta_n\|_{\mathrm{op}}\le s$。因此，我们得出以下界以概率 $1-\delta$成立：

$$(1-s)\mathbf{I}\preceq(\mathbf{\Gamma}_{*,q}+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_{n,q}+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)(\mathbf{\Gamma}_{*,q}+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}\preceq(1+s)\mathbf{I},$$

这就完成了引理4的证明。

C.3 引理 7的证明

回顾引理 2证明中的误差分解：

$$\widehat{\beta}_n-\beta_*=\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}\cdot\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n\Big\{\varepsilon_i\phi(X_i,A_i)-\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\beta_*\Big\},$$

其中我们定义噪声函数 $\varepsilon_i:=Y_i-\mu^*(X_i,\ A_i)$。

由于引理 3 不依赖于有效维数上的条件（21a），在给定状态-动作对 $(X_i,\ A_i)_{i=1}^n$的条件下，以概率 $1-\delta$，有

$$\begin{aligned}&\Big|z^\top(\widehat{\beta}_n-\beta_*)\Big|\le c\|\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}z\|_{\ell^2}\\&\times\left\{\sqrt{\rho_n}\|\mu^*\|_{\mathbb{H}}+\bar{\sigma}\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}}+\gamma\sup_{x\in\mathbb{X},a\in\mathbb{A}}\|\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}\phi(x,a)\|_{\ell^2}\cdot\frac{\log(1/\delta)\log n}{n}\right\}.\quad(84)\end{aligned}$$

另一方面，注意到在假设（Kbou(κ)）下，根据正则化参数的选择（74），有

$$\log\Big(\frac{\kappa^2}{\rho_n\delta}\Big)\frac{D(\rho_n)}{n}\le\log\Big(\frac{\kappa^2}{\rho_n\delta}\Big)\frac{\kappa^2}{n\rho_n}\le\frac{1}{32},$$

这验证了条件（56），其中 $q=q=1$ 且 $s=1/2$。应用经验协方差集中引理 4 并取 $q\equiv1$ 可得

$$\frac{1}{2}(\mathbf{I}+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1})\preceq\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\preceq2(\mathbf{I}+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}),\quad\text{with probability }1-\delta.$$

因此，我们可以控制方程（84）中的相关项，从而以概率 $1-\delta$ 得到以下不等式。

$$\begin{aligned}&\|\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}z\|_{\ell^2}\le2\|\big(\mathbf{I}+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}z\|_{\ell^2},\quad\text{and,}\\&\sup_{(x,a)\in\mathbb{X}\times\mathbb{A}}\|\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}\phi(x,a)\|_{\ell^2}\le\rho_n^{-1/2}\cdot\sup_{(x,a)\in\mathbb{X}\times\mathbb{A}}\|\mathbf{\Lambda}^{1/2}\phi(x,a)\|_{\ell^2}\le\kappa/\sqrt{\rho_n},\end{aligned}$$

其中，最后一步由一致上界（Kbou(κ)）得出。

将这些结果代回方程（84），并根据方程（74）选取正则化参数，我们得出

$$\begin{aligned}\left|z^\top(\widehat{\beta}_n-\beta_*)\right| &\le 4c\|\big(\mathbf{I}+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}z\|_{\ell^2}\Big\{\sqrt{\rho_n}\|\mu^*\|_{\mathbb{H}}+\bar{\sigma}\sqrt{\tfrac{\log(1/\delta)}{n}}+\frac{\gamma\kappa\log(1/\delta)\log n}{n\sqrt{\rho_n}}\Big\}\\ &\le c'\|\big(\mathbf{I}+\rho_n\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}z\|_{\ell^2}\cdot(\gamma+\kappa R)\sqrt{\frac{\log(n/\delta)\log(1/\delta)}{n}},\end{aligned}$$

以概率 $1-\delta$，这就证明了引理 7。

C.4 引理 6 的证明

与.....一样 引理 3 的证明中，我们将误差分解为噪声项和偏差项，即

$$\langle z,\,\widehat{\beta}_n-\beta_*\rangle=\underbrace{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n W_i}_{\text{noise part}}-\underbrace{\rho_n^{(\mathrm{III})}z^\top\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^\sigma+\rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}\mathbf{\Lambda}^{-1}\beta_*}_{\text{bias part}},$$

其中 $W_i:=z^\top\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^\sigma+\rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}\varepsilon_i\widehat{\sigma}_n^{-2}\phi(X_i,\ A_i)$

对于偏差部分，应用柯西–施瓦茨不等式可得

$$\begin{aligned}\rho_n^{(\mathrm{III})}\left|z^\top\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^\sigma+\rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}\mathbf{\Lambda}^{-1}\beta_*\right| &\le \rho_n^{(\mathrm{III})}\|\mathbf{\Lambda}^{-1/2}\beta_*\|_{\ell^2}\cdot\|\mathbf{\Lambda}^{-1/2}\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^\sigma+\rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}z\|_{\ell^2}\\ &\overset{(i)}{\le}\sqrt{\rho_n^{(\mathrm{III})}}\|\mu^*\|_{\mathbb{H}}\cdot\|\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^\sigma+\rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}z\|_{\ell^2}\\ &\overset{(ii)}{\le}\frac{1}{\sqrt{n}}\|\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^\sigma+\rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}z\|_{\ell^2},\end{aligned}\tag{85}$$

其中，在步骤 (i) 中，我们利用事实 $\|\mathbf{\Lambda}^{-1/2}\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^\sigma+\rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}\|_{\mathrm{op}}\le(\rho_n^{(\mathrm{III})})^{-1/2}$；在步骤 (ii) 中，我们代入正则化参数的取值 $\rho_n^{(\mathrm{III})}=\frac{1}{Rn}$。

对于噪声部分，我们利用 Adamczak 集中不等式建立高概率界。首先写出条件方差的表达式

$$\mathbb{E}\Big[W_i^2\mid X_i,A_i,\widehat{\sigma}_n\Big]=\frac{\sigma^2(X_i,A_i)}{\widehat{\sigma}_n^4(X_i,A_i)}\Big(z^\top\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^\sigma+\rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}\phi(X_i,A_i)\Big)^2,$$

由此得到界

$$\begin{aligned}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n\mathbb{E}\big[W_i^2\mid X_i,A_i,\widehat{\sigma}_n\big] &\le \max_{i\in[n]}\frac{\sigma^4(X_i,A_i)}{\widehat{\sigma}_n^4(X_i,A_i)}\cdot z^\top\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^\sigma+\rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^\sigma\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^\sigma+\rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}z\\ &\le 4z^\top\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^\sigma+\rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}z.\end{aligned}\tag{86}$$

在最后一步中，我们利用事实 $\widehat{\sigma}_n^2(X_i,A_i)\ge\frac{1}{2}\sigma^2(X_i,A_i)$，该事实对任意 $i\in[n]$ 均成立。

另一方面，对于任意 $p>0$，我们有条件矩界

$$\begin{aligned}\Big\{\mathbb{E}\Big[|W_i|^p\mid X_i,A_i,\widehat{\sigma}_n\Big]\Big\}^{1/p} &\le\sqrt{p}\gamma\cdot\left|z^\top\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^\sigma+\rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}\widehat{\sigma}_n^{-2}\phi(X_i,A_i)\right|\\ &\le\frac{2\sqrt{p}\gamma}{\underline{\sigma}^2}\|\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^\sigma+\rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}z\|_{\ell^2}\cdot\sup_{(x,a)}\|\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^\sigma+\rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}\phi(x,a)\|_{\ell^2}.\end{aligned}\tag{87}$$

结合方程（86）和（87），并应用 Adamczak不等式，我们得出

$$|\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} W_i| \le c\|\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^{\sigma} + \rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2} z\|_{\ell^2}\Bigg\{2\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}} + \frac{\log n \log(1/\delta)\gamma}{n\underline{\sigma}^2}\sup_{(x,a)}\|\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^{\sigma} + \rho_n^{(\mathrm{III})}\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1/2}\phi(x,a)\|_{\ell^2}\Bigg\}. \quad (88)$$

最后，将方程（85）和（88）结合起来，即完成了该引理的证明。

D 条件方差估计与稳健风险性质

本节讨论条件方差函数 $(x,\ a) \mapsto \sigma^2(x,\ a)$ 的估计问题。

D.1 若干条件方差估计量

本节构造满足稳健逐点风险性质的条件方差 σ^2 的具体估计量。结合四阶段框架（25），这些结果可直接导出定理3中的实例最优结果。

核岭回归： 考虑一个正半定核函数 $\mathcal{K}_\sigma : (\mathbb{X}\times\mathbb{A})\times(\mathbb{X}\times\mathbb{A}) \to \mathbb{R}$，它定义了一个再生核希尔伯特空间 $\mathbb{H}_\sigma$，其 Mercer分解为

$$\mathcal{K}_\sigma\big((x_1,a_1),(x_2,a_2)\big) = \sum_{j=1}^{\infty}\lambda_j\phi_j(x_1,a_1)\phi_j(x_2,a_2). \quad (89)$$

我们假设再生核希尔伯特空间 $\mathbb{H}_\sigma$ 满足正则性假设（Kbou(κ)），并且真实的条件方差函数属于该再生核希尔伯特空间，即:

$$\|\sigma^2\|_{\mathbb{H}_\sigma} \le R^\sigma. \quad (90)$$

根据定义（19），对于任意 $\rho > 0$，我们将 $D_\sigma(\rho$定义为与正则化参数 $\rho > 0$ 对应的再生核希尔伯特空间 $\mathbb{H}_\sigma$的有效维数。

我们考虑惩罚最小二乘估计量

$$\widehat{\sigma}_n^2 := \arg\min_h \Big\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\big(Z_i - h(X_i,A_i)\big)^2 + \rho\|h\|_{\mathbb{H}_\sigma}^2\Big\}. \quad (91)$$

命题 5. 设 $\rho_0(\varepsilon)$ 是满足以下条件的 ρ 的最小取值：$\rho D_\sigma(\rho) \le \big(\varepsilon/R^\sigma\big)^2$，估计量 (91) 在参数选择 $\rho_n = \rho_0(\varepsilon)$ 下满足稳健逐点风险性质，其中

$$m(\varepsilon,\delta) := c\frac{\gamma^4\log(1/\delta)}{\varepsilon^2}D_\sigma(\rho_0(\varepsilon)) + c\frac{(R^\sigma)^2}{\gamma^4\rho_0(\varepsilon)}, \quad \textit{and} \quad \bar{b}(\varepsilon,\delta) := \frac{\varepsilon}{c\sqrt{D_\sigma(\rho_0(\varepsilon))}}. \quad (92)$$

证明见附录D.2.1 。

有几点需要说明。首先，命题 5 要求再生核希尔伯特空间的有效维数 $\mathbb{H}_\sigma$ 满足 $\rho D_\sigma(\rho) \to 0$，其中 $\rho \to 0^+$。此外，还对

用于估计处理效应函数的再生核希尔伯特空间 $\mathbb{H}$ 施加了类似条件，在特征函数满足某些条件时，可以验证该条件。（关于此类结果的陈述，请参见方程（71）和附录中的命题 3 。）特别地，假设有效维数满足衰减条件 $D(\rho)$， $\leq D_0\rho^{s-1}$ 其中某个标量 $s \in (0,1]$, 将标量（D_0、R^σ、γ）视为常数，取 $\rho_0(\varepsilon)$，则 $= \varepsilon^{\frac{2}{s}}$ 条件（92）变为

$$m(\varepsilon,\delta) \asymp \varepsilon^{-2/s}\log(1/\delta) \quad \text{and} \quad \bar{b}(\varepsilon,\delta) \asymp \varepsilon^{1/s},$$

对样本量的此类要求 m 以及偏差上界 b 未必总能使函数 σ^2的估计达到最优速率。然而，由于我们只需要估计误差小于某个常数 $\sigma^2/2$，如方程（28b）所要求的那样，因此精度水平 ε 的多项式依赖关系以及失效概率 δ 的多对数依赖关系就足以满足我们的目的。

局部平均估计量：设状态空间 $\mathbb{X}$ 是 $\mathbb{R}^d$ 的紧子集，且动作空间 $\mathbb{A}$ 是离散的。定义 L-Lipschitz 函数类如下：

$$\mathcal{F}_L = \Big\{ f : \mathbb{X} \to \mathbb{R}, |f(x) - f(y)| \leq L\|x-y\|_2 \text{ for any } x,y \in \mathbb{X} \Big\}$$

我们假设条件方差足够平滑。

$$\sigma^2(\cdot,a) \in \mathcal{F}_L, \quad \text{for each } a \in \mathbb{A}. \tag{93}$$

为了在随机设计下实现估计，我们需要对密度作出额外的正则性假设。

$$\inf_{x\in\mathbb{X},a\in\mathbb{A}} (\xi^* \cdot \pi)\Big(\mathbb{B}(x,r)\times\{a\}\Big) \geq p_0 r^{d_0}, \quad \text{for any } r \in (0,r_0). \tag{94}$$

给定一个调优参数 $r_n > 0$，我们考虑局部平均估计量

$$\widehat{\sigma}_n^2(x_0,a_0) := |\widehat{S}_{x_0,a_0}|^{-1} \sum_{i\in\widehat{S}_{x_0,a_0}} Z_i, \quad \text{where } \widehat{S}_{x_0,a_0} := \Big\{ i \in [n] : X_i \in \mathbb{B}(x_0,r_n), A_i = a_0 \Big\}. \tag{95}$$

命题 6. 对于任意 $\varepsilon > 0$ 和 $\delta \in (0,1)$，存在一个普适常数 $c > 0$，使得估计量 (95)满足稳健逐点风险性质，且

$$m(\varepsilon,\delta) = \frac{L^{2d_0}\log(1/\delta)}{p_0}\Big(\frac{c}{\varepsilon}\Big)^{d_0+2} + \frac{\log(1/\delta)}{\mathbb{L}^2 p_0 r_0^{d_0+1}} L^{d_0}\frac{\log(1/\delta)}{p_0}\log^{d_0+2}(1/\varepsilon), \quad \textit{and} \quad \bar{b}(\varepsilon,\delta) = \varepsilon/2.$$

参见附录D.2.2 中的证明。

下面作几点说明。与命题 5相比，局部平均估计量对目标函数 $\sigma^2(\cdot,a)$ 的要求仅为 Lipschitz 连续，对任意 $a \in \mathbb{A}$均如此。在维度大于 1 时，这通常比命题 5中的再生核希尔伯特空间情形所需的光滑性阶数更低，但对函数类结构的灵活性也较差。正则性条件（94）确保 $\mathbb{X}$ 中的任意小球以及任意动作 a 被抽样到的概率都足够大。例如，当概率分布 ξ 具有一致有界的密度函数，其上界为 $\xi_{\min} > 0$，且选择任意动作 a 的概率至少为 $\pi_{\min}$时，条件（94）在 $p_0 = c_d\xi_{\min}\pi_{\min}$ 和 $d_0 = d$取某个常数 $c_d > 0$

，该常数仅依赖于 d。更一般地，即使函数 $(x,a) \mapsto \xi^*(x)\pi(x,a)$ 在某些点处可以取到 0，只要在这些点附近满足适当的增长条件，条件（94）仍然成立。最后，尽管我们只研究了 Lipschitz 情形，文献中已针对条件方差的估计问题，在一般的 Hölder 类下建立了最优结果 [She+20]。结合他们的结果，我们还可以得到定理 3 中的最优依赖于实例的保证。

D.2 稳健逐点风险性质的证明

在本附录中，我们将证明附录 D 中讨论的各种估计量所具有的稳健逐点风险性质。

D.2.1 命题 5 的证明

证明与引理 2 的证明类似，但对确定性偏差部分作了专门处理。定义无限维向量

$$\beta_* := \Psi(\sigma^2) \quad \text{and} \quad \widehat{\beta}_n := \Psi(\widehat{\sigma}_n^2).$$

我们可以用基函数表示误差。

$$\sigma^2(x_0,a_0) - \widehat{\sigma}_n^2(x_0,a_0) = \langle \widehat{\beta}_n - \beta_*,\, \phi(x_0,a_0)\rangle.$$

定义噪声部分和偏差部分

$$\varepsilon_i := Z_i - \mathbb{E}[Z_i \mid X_i, A_i], \quad \text{and} \quad b(X_i,A_i) := \mathbb{E}[Z_i \mid X_i, A_i] - \sigma^2(X_i,A_i).$$

我们还定义经验协方差算子

$$\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \phi(X_i,A_i)\phi(X_i,A_i)^\top,$$

$\widehat{}$误差向量 $\beta_n - \beta_*$ 可表示为

$$\widehat{\beta}_n - \beta_* = \big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n + \rho\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \Big\{\varepsilon_i(X_i,A_i)\phi(X_i,A_i) + b(X_i,A_i)\phi(X_i,A_i) - \rho\mathbf{\Lambda}^{-1}\beta_*\Big\}. \quad (96)$$

定义事件

$$\mathcal{E}_{\varepsilon,\delta} := \Big\{ \max_{1\le i\le n} |b(X_i,A_i)| \le \bar{b}(\varepsilon,\delta)\Big\}.$$

显然，误差由三部分组成：由随机（无偏）噪声引起的部分 ε_i；涉及观测偏差的部分 $b(X_i, A_i)$；以及正则化引入的偏差ρ。我们声称，以概率 $1-\delta$ 在事件 $\mathcal{E}_{\varepsilon,\,\delta}$ 上，以下界成立。

$$\left|\phi(x_0,a_0)^\top\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n + \rho\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \varepsilon_i\phi(X_i,A_i)\right| \le c\big(\gamma^2 + \bar{b}(\varepsilon,\delta)\big)\sqrt{\frac{D_\sigma(\rho)\log(1/\delta)}{n}}. \quad (97a)$$

$$\left|\phi(x_0,a_0)^\top\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n + \rho\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n b(X_i,A_i)\phi(X_i,A_i)\right| \le c\bar{b}(\varepsilon,\delta)\sqrt{D_\sigma(\rho)}, \quad (97b)$$

$$\left|\phi(x_0,a_0)^\top\big(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n + \rho\mathbf{\Lambda}^{-1}\big)^{-1}\rho\mathbf{\Lambda}^{-1}\beta_*\right| \le cR^\sigma\sqrt{\rho D_\sigma(\rho)}. \quad (97c)$$

给定这三个界，对于任意 $\varepsilon > 0$ 和 $\delta \in (0,\ 1)$，我们将满足 $\rho D_\sigma(\rho) \le \left(\frac{\varepsilon}{R^\sigma}\right)^2$ 的 ρ 的最小值记为 $\rho_0(\varepsilon)$（若 $n \cdot D_\sigma(1/n) \to 0$，则可保证该值存在），此时稳健的逐点风险条件成立，且

$$m(\varepsilon,\delta) = c\frac{\gamma^4 \log(1/\delta)}{\varepsilon^2} D_\sigma(\rho_0(\varepsilon)) + c\frac{(R^\sigma)^2}{\gamma^4 \rho_0(\varepsilon)}, \quad \text{and} \quad \bar{b} = \frac{\varepsilon}{c\sqrt{D_\sigma(\rho_0(\varepsilon))}},$$

完成命题5的证明。

本节其余部分将用于证明方程（97a）–（97c）。

方程（97a）的证明： 根据定义，注意到噪声满足条件 ψ_1-正态分布界

$$\|\varepsilon_i \mid X_i, A_i\|_{\psi_1} \le 4(\gamma^2 + |b(X_i, A_i)|).$$

应用 Adamczak 集中不等式，在给定条件 $(X_i, A_i)_{i=1}^n$ 下，以概率$1-\delta$，我们有

$$\begin{aligned}
&\left|\phi(x_0,a_0)^\top (\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n + \rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1} \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \varepsilon_i(X_i,A_i)\phi(X_i,A_i)\right| \\
&\quad \le c\big(\gamma^2 + \max_{i\in[n]} |b(X_i,A_i)|\big) \times \Bigg\{ \|\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n^{1/2}(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n + \rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1}\phi(x_0,a_0)\|_{\ell^2} \sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n}} \\
&\qquad\qquad + \sup_{x',a'} \left|\phi(x',a')^\top (\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n + \rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1}\phi(x_0,a_0)\right| \frac{\log n \log(1/\delta)}{n} \Bigg\}.
\end{aligned}$$

在事件 $\mathcal{E}_{\varepsilon,\delta}$ 上，我们有 $\max_{i\in[n]} |b(X_i,A_i)| \le b(\varepsilon,\bar{\delta})$. 根据引理 4，以概率 $1-\delta$，我们有

$$\sup_{x,a} \|(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n + \rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}\phi(x,a)\|_{\ell^2} \le 2\sup_{x,a} \|(\mathbf{I} + \rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}\phi(x,a)\|_{\ell^2} \le c\sqrt{D_\sigma(\rho)}.$$

综合以上各部分，即完成方程（97a）的证明。

方程 (97b)的证明： 对有限求和应用柯西–施瓦茨不等式可得

$$\begin{aligned}
&\left|\phi(x_0,a_0)^\top (\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n + \rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1} \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n b(X_i,A_i)\phi(X_i,A_i)\right|^2 \\
&\le \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \left|\phi(x_0,a_0)^\top (\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n + \rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1} b(X_i,A_i)\phi(X_i,A_i)\right|^2 \\
&= \max_{i\in[n]} b^2(X_i,A_i) \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \phi(x_0,a_0)^\top (\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n + \rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1}\phi(X_i,A_i)\phi(X_i,A_i)^\top (\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n + \rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1}\phi(x_0,a_0) \\
&\le \max_{i\in[n]} b^2(X_i,A_i) \cdot \phi(x_0,a_0)^\top (\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n + \rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1}\phi(x_0,a_0)
\end{aligned}$$

另一方面，我们可以将引理 4 应用于再生核希尔伯特空间 $\mathbf{\Gamma}_n$ 中的经验协方差算子 $\mathbb{H}_\sigma$。给定正则化参数 $\rho \geq c\kappa^2 \frac{\log(n/\delta)}{n}$，以概率 $1-\delta$，有

$$\frac{1}{2}(\mathbf{I}+\rho\mathbf{\Lambda}^{-1}) \preceq \widehat{\mathbf{\Gamma}}_n + \rho\mathbf{\Lambda}^{-1} \preceq 2(\mathbf{I}+\rho\mathbf{\Lambda}^{-1}).$$

因此，在事件$\mathcal{E}_{\varepsilon,\delta}$上，我们有上界

$$\begin{aligned}\left|\phi(x_0,a_0)^\top(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n b(X_i,A_i)\phi(X_i,A_i)\right| &\leq c\bar{b}(\varepsilon,\delta)\cdot\sup_{x,a}\|(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}\phi(x,a)\|_{\ell^2}^2 \\ &\leq 2c\bar{b}(\varepsilon,\delta)\cdot\sup_{x,a}\|(\mathbf{I}+\rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}\phi(x,a)\|_{\ell^2}^2 = 2c\bar{b}(\varepsilon,\delta)D_\sigma(\rho).\end{aligned}$$

以概率 $1-\delta$。

方程 (97c)的证明： 由柯西–施瓦茨不等式可知

$$\begin{aligned}&\left|\phi(x_0,a_0)^\top(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1}\rho\mathbf{\Lambda}^{-1}\beta_*\right| \\ &\leq \sqrt{\rho}\cdot\|(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}\phi(x_0,a_0)\|_{\ell^2}\cdot\|\!|(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}(\rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{1/2}|\!\|_{\mathrm{op}}\cdot\|\mathbf{\Lambda}^{-1/2}\beta_*\|_{\ell^2} \\ &\leq 2\sqrt{\rho}R^\sigma\|(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}\phi(x_0,a_0)\|_{\ell^2}.\end{aligned}$$

根据引理 4，以概率 $1-\delta$，我们有

$$\|(\widehat{\mathbf{\Gamma}}_n+\rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}\phi(x_0,a_0)\|_{\ell^2} \leq 2\|(\mathbf{I}+\rho\mathbf{\Lambda}^{-1})^{-1/2}\phi(x_0,a_0)\|_{\ell^2} \leq 2\sqrt{D_\sigma(\rho)},$$

这就证明了方程（97c）。

D.2.2 命题6的证明

我们先对误差进行分解

$$\widehat{\sigma}_n^2(x_0,a_0)-\sigma^2(x_0,a_0) = \left|\widehat{S}_{x_0,a_0}\right|^{-1}\sum_{i\in\widehat{S}_{x_0,a_0}}\Big\{\varepsilon_i + b(X_i,A_i) + \big(\sigma^2(X_i,A_i)-\sigma^2(x_0,a_0)\big)\Big\}, \tag{98}$$

其中，噪声 ε_i 定义为 $\varepsilon_i := Z_i - \mathbb{E}[Z_i|X_i,A_i]$，对每个 $i\in[n]$均成立。

回顾集合的定义 $\widehat{S}_{x_0,a_0}$ 有 $A_i = a_0$ 和 $X_i \in \mathbb{B}(x_0, r_n)$。应用利普希茨条件 93 可得界

$$\left|\widehat{S}_{x_0,a_0}\right|^{-1}\sum_{i\in\widehat{S}_{x_0,a_0}}\left|\sigma^2(X_i,A_i)-\sigma^2(x_0,a_0)\right| \leq Lr_n. \tag{99}$$

定义事件

$$\mathcal{E}_{\varepsilon,\delta} := \Big\{\max_{i\in[n]}|b(X_i,A_i)| \leq \bar{b}(\varepsilon,\delta)\Big\},$$

在此事件下，我们可以控制观测值中的额外偏差

$$\left|\widehat{S}_{x_0,a_0}\right|^{-1}\sum_{i\in\widehat{S}_{x_0,a_0}}|b(X_i,A_i)| \leq \bar{b}(\varepsilon,\delta). \tag{100}$$

对于随机噪声，只要调优参数r_n 满足 $r_n \le r_0$ 且 $\frac{p_0 n r_n^{d_0}}{\log^2 n} \ge \log(1/\delta)$，以下界成立。

$$\Big| \sum_{i \in \widehat{S}_{x_0,a_0}} \varepsilon_i \Big| \le c \sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{n p_0 r_n^{d_0}}}, \quad \text{with probability } 1-\delta, \text{ on the event } \mathcal{E}_{\varepsilon,\delta} \tag{101}$$

我们将在本节末尾证明这个不等式。

结合方程（99）、（100）和（101），我们将局部半径选为

$$r_n := \Big\{ \frac{\log(1/\delta)}{\mathbb{L}^2 p_0 n} \Big\}^{\frac{1}{d_0+2}}.$$

每当样本量 n 满足

$$n \ge \frac{\log(1/\delta)}{\mathbb{L}^2 p_0 r_0^{d_0+1}}, \quad \text{and} \quad \frac{n}{\log^{d_0+2} n} \ge L^{d_0} \frac{\log(1/\delta)}{p_0},$$

在事件 $\mathcal{E}_{\varepsilon,\,\delta}$ 上，我们以概率 $1-\delta$ 得到上界，

$$\big|\widehat{\sigma}_n^2(x_0,a_0) - \sigma^2(x_0,a_0)\big| \le \bar{b}(\varepsilon,\delta) + c \cdot L^{\frac{2d_0}{d_0+2}} \Big\{ \frac{\log(1/\delta)}{p_0 n} \Big\}^{\frac{1}{d_0+2}}.$$

方程（101）的证明：我们首先给出 ^集合 $S_{x_0,\,a_0}$ 基数的一个下界。当平均半径 r_n 满足 $r_n \le r_0$时，根据密度条件（94），我们有

$$p_* := \mathbb{P}\Big(i \in \widehat{S}_{x_0,a_0}\Big) \ge p_0 r_n^{d_0}, \quad \text{for each } i \in [n].$$

对于每个 $i \in [n]$，示性函数 $\mathbf{1}_{i \in \widehat{S}_{x_0,\,a_0}}$ 相互独立。由熵形式的切尔诺夫界，我们有

$$\mathbb{P}\Big(|\widehat{S}_{x_0,a_0}| \le \frac{np_*}{2}\Big) \le \exp\Big\{ -nD_{\mathrm{KL}}\left(p_*/2 \,\|\, p_*\right) \Big\} \le \exp\left(-cp_* n\right),$$

其中 $c>0$ 为某个普适常数。

定义事件

$$\mathcal{E}' := \Big\{ |\widehat{S}_{x_0,a_0}| \ge \frac{np_*}{2} \Big\},$$

上述集中不等式表明，当 $np_* \ge c'\log(1/\delta)$ 时，$\mathbb{P}(\mathcal{E}') \ge 1-\delta$。

令我们对状态-动作对 $(X_i, A_i)_{i=1}^n$ 进行条件化，使得事件 $\mathcal{E}_{\varepsilon,\delta} \cap \mathcal{E}'$ 成立；对其求和应用 Adamczak 集中不等式，则在条件分布下，以概率 $1-\delta$，有

$$\Big| \sum_{i \in \widehat{S}_{x_0,a_0}} \varepsilon_i \Big| \le c\big(\gamma^2 + \bar{b}(\varepsilon,\delta)\big) \cdot \Big\{ \sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{|\widehat{S}_{x_0,a_0}|}} + \frac{\log(1/\delta)\log n}{|\widehat{S}_{x_0,a_0}|} \Big\},$$

对于某个普适常数 $c>0$。

考虑到随机设计点 $(X_i,\ A_i)_{i=1}^n$，只要样本量和半径满足

$$np_* \geq np_0 r_n^{d_0} \geq \log(1/\delta) \cdot \log^2 n,$$

以概率 $1-\delta$，我们有

$$\Big| \sum_{i \in \widehat{S}_{x_0,a_0}} \varepsilon_i \Big| \leq c\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{np_0 r_n^{d_0}}},$$

这证明了方程 (101)。

E 示例的证明

本节汇集了这些示例的证明。

E.1 推论 1 的证明

我们首先通过验证上确界范数增长界 (Eig(ν))，确立有效维数条件 (23)。这样可确保最优风险（在普适常数因子的意义下）由风险泛函 $V_{\xi^*}^2(\mu^*) + V_{\sigma,n}^2(\xi^*, \pi, \omega;\ \mathcal{F})$ 和 $V_{\sigma,n}^2(\delta_{x_0}, \pi, \omega;\ \mathcal{F})$ 决定。然后，我们分别利用定理 1 和定理 3 证明界 (34a) 和 (34b)。

E.1.1 建立有效维数条件

我们首先为上确界范数增长条件（Eig(ν)建立紧界，该条件包含一个非平凡（但可精确控制的）指数 ν。这一结果本身也颇具意义，说明对于密度具有奇点的数据，再生核希尔伯特空间中的特征函数增长是一种自然现象。

引理 8. 在上述设定下，存在一对正常数 c_1, c_2，它们仅依赖于 α，使得对于每个 $j \geq 1$，与特征值 λ_j 对应的特征函数 ϕ_j （按 $\|\phi_j\|_{\mathbb{L}^2(\xi)} = 1$归一化）满足

$$c_1 \lambda_j^{-\frac{\alpha}{4(\alpha+2)}} \leq \|\phi_j\|_\infty \leq c_2 \lambda_j^{-\frac{\alpha}{4(\alpha+2)}}.$$

该引理的证明见附录E.1.5 。

因此，条件（Eig(ν)满足指数 $\nu = \frac{\alpha}{4(\alpha+2)}$，且常数$\phi_{\max}$ 仅依赖于~~α~~。对于一阶索博列夫空间的特征值衰减 $\lambda_j \asymp j^{-2}$ （见 [Wid63]），命题 3 给出

$$D(\rho) \asymp \rho^{-\frac{\alpha+1}{\alpha+2}}, \quad \text{and} \quad D(\rho_n)/n \asymp n^{-\frac{1}{\alpha+2}}.$$

从而确保正则性条件（21a）对于样本量 n 大于仅取决于 α的阈值时成立。

E.1.2 方程 (34a) 的证明

注意　　对于任意函数 $f \in \mathbb{B}_{\mathbb{H}}(1)$ 和 $x \in [0,1]$，柯西–施瓦茨不等式给出　　s

$$|f(x)| = \left| \int_0^x f'(t)dt \right| \le \sqrt{x \cdot \int_0^x (f'(t))^2 dt} \le \sqrt{x}.$$

因此我们有 $\|\mu^*\|_\infty \le 1$，进而 $V_{\xi^*}(\mu^*) \le 1$。
根据定义（1），方差函数 $V_{\sigma,n}(\xi^*, \pi, \omega; \mathcal{F})$（除普适常数因子外）定义为以下变分问题的最优值:

$$\sup_q \left\{ \int_0^1 q(x)dx \right\}, \quad \text{such that} \tag{102a}$$

$$q(0) = 0, \quad \int_0^1 (q'(x))^2 dx \le n, \quad \text{and} \quad \int_0^1 (1-x)^\alpha q^2(x)dx \le 1. \tag{102b}$$

只需在不同情形下建立方差泛函 $V_{\sigma,n}(\xi^*, \pi, \omega; \mathcal{F})$ 的上界和下界。

O我们的证明依赖于一个关于约束 (102b) 的技术引理，表述如下

引理 9。 在约束 (102b)下，我们有

$$\sup_{x\in[0,1]} |q(x)| \le c_\alpha n^{\frac{1+\alpha}{2(2+\alpha)}}, \quad \textit{and} \quad \sup_{x\in[0,1-\varepsilon]} |q(x)| \le c_{\alpha,\varepsilon} n^{1/4},$$

其中常数 c_α 取决于 $\alpha > 0$，常数 $c_{\alpha,\,\varepsilon}$ 取决于 $\alpha > 0$ 和 $\varepsilon \in (0,1)$。

我们在附录 E.1.4 中证明该引理。

假设该引理成立，下面继续证明方程（34a）。只需在不同情形下建立方差泛函 $V_{\sigma,\ n}(\xi^*, \pi, \omega; \mathcal{F})$ 的上界和下界。

方差泛函的上界： 给定一个函数 q，它满足约束（102b），对于任意 $\varepsilon \in (0, 1)$，我们将积分 $\int_0^1 q(x)dx$ 分解为几部分 $\int_0^{1-\varepsilon}$ 和 $\int_{1-\varepsilon}^1$，并采用不同的方法对它们进行界定。

根据柯西–施瓦茨不等式，我们注意到

$$\Big(\int_0^{1-\varepsilon} q(x)dx \Big)^2 \le \int_0^{1-\varepsilon} (1-x)^\alpha q^2(x)dx \cdot \int_0^{1-\varepsilon} \frac{dx}{(1-x)^\alpha} \le \begin{cases} \frac{1}{1-\alpha} & \alpha < 1, \\ \log(1/\varepsilon) & \alpha = 1, \\ \frac{1}{\alpha-1}\varepsilon^{1-\alpha} & \alpha > 1. \end{cases} \tag{103}$$

对于第二部分，分部积分可得

$$\int_{1-\varepsilon}^1 q(x)dx = q(1) - (1-\varepsilon)q(1-\varepsilon) - \int_{1-\varepsilon}^1 xq'(x)dx = \varepsilon q(1-\varepsilon) + \int_{1-\varepsilon}^1 (1-x)q'(x)dx.$$

对于积分项，应用柯西–施瓦茨不等式可得

$$\Big| \int_{1-\varepsilon}^1 (1-x)q'(x)dx \Big| \le \|q\|_{\mathbb{H}} \cdot \sqrt{\int_{1-\varepsilon}^1 (1-x)^2 dx} \le \sqrt{\varepsilon^3 n}. \tag{104}$$

由引理 9，可得

$$|\varepsilon q(1-\varepsilon)| \le \varepsilon n^{\frac{1+\alpha}{2(2+\alpha)}}. \tag{105}$$

结合方程（103）、（104）、（105）可得

$$\left|\int_0^1 q(x)dx\right| \le \sqrt{\varepsilon^3 n} + c_\alpha \varepsilon n^{\frac{1+\alpha}{2(2+\alpha)}} + c'_\alpha \times \begin{cases} 1 & \alpha < 1, \\ \sqrt{\log(1/\varepsilon)} & \alpha = 1, \\ \varepsilon^{-(\alpha-1)/2} & \alpha > 1. \end{cases}$$

我们考虑三种情形：

- 当 $\alpha < 1$ 时，我们取 $\varepsilon = 0$，并得到 $V_{\sigma,n}(\xi^*, \pi, \omega; \mathcal{F}) \lesssim_\alpha 1$。
- 当 $\alpha = 1$ 时，我们取 $\varepsilon = n^{-1}$，并得到 $V_{\sigma,n}(\xi^*, \pi, \omega; \mathcal{F}) \lesssim \sqrt{\text{对数 } n}$。
- 当 $\alpha > 1$ 时，我们取 $\varepsilon = n^{\frac{-1}{\alpha+2}}$，并得到 $V_{\sigma,n}(\xi^*, \pi, \omega; \mathcal{F}) \lesssim_\alpha n^{2\frac{\alpha-1}{\alpha+2}()\circ}$

方差泛函的下界： 对于下界，给定正标量$\varepsilon \in (0,1)$ 和 $h > 0$，我们构造函数

$$q_{\varepsilon,h}(x) := \begin{cases} 0 & x \le 1-\varepsilon, \\ \frac{h}{\varepsilon}(x-1+\varepsilon) & x > 1-\varepsilon. \end{cases}$$

显然，我们有 $q_{\varepsilon,h}(0) = 0$，直接计算可得

$$\int_0^1 q_{\varepsilon,h}(x)dx = \frac{\varepsilon h}{2}, \quad \text{and} \quad \int_0^1 (q'_{\varepsilon,h}(x))^2 dx = \frac{h^2}{\varepsilon}, \quad \text{and} \quad \int_0^1 (1-x)^\alpha q^2_{\varepsilon,h}(x)dx \le \varepsilon^{\alpha+1}h^2.$$

对于 $\alpha > 1$，在参数取值为

$$\varepsilon = n^{\frac{-1}{2+\alpha}}, \quad \text{and} \quad h = n^{\frac{1+\alpha}{2(2+\alpha)}},$$

我们有 $\int_0^1 q_{\varepsilon,h}(x)dx \asymp n^{2\frac{\alpha-1}{2+\alpha}()\circ}$

对于 $\alpha < 1$，取 $\varepsilon = 1$ 和 $h = 1$，我们有 $\int_0^1 q_{\varepsilon,h}(x)dx \asymp 1$。

因此，对于 $\alpha \ne 1$，我们有下界

$$V_{\sigma,n}(\xi^*, \pi, \omega; \mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R)) \gtrsim_\alpha \begin{cases} n^{\frac{\alpha-1}{2(\alpha+2)}}, & \alpha > 1, \\ 1 & \alpha < 1. \end{cases} \tag{106}$$

对于 $\alpha = 1$ 的情况，我们采用不同的构造。定义函数

$$q_n(x) := \begin{cases} \frac{(\log n)^{-1/2}}{1-x}, & x \in [0, 1-n^{-1/3}], \\ n^{1/3}(\log n)^{-1/2}, & x \in [1-n^{-1/3}, 1]. \end{cases}$$

直接计算可得

$$\int_0^1 (q'_n(x))^2 dx = \frac{n}{12\log n} < n, \quad \text{and} \quad \int_0^1 q_n^2(x)(1-x)dx = \frac{1}{3} + \frac{1}{2\log n} < 1,$$

这验证了约束（102b）。

因此，我们可以用在 q_n 处的变分问题的取值，对量 $V_{\sigma,n}(\xi^*, \pi, \omega; \mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R))$ 给出下界，从而得到结果

$$V_{\sigma,n}(\xi^*, \pi, \omega; \mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R)) \ge \int_0^1 q_n(x)dx \ge \frac{1}{3}\sqrt{\log n}. \tag{107}$$

结合方程 ns（106）和（107）完成了对 $V_{\sigma,n}(\xi^*, \pi, \omega; \mathbb{B}_{\mathcal{H}}(R))$ 下界的证明 .

E.1.3 方程 (34b)的证明

根据定理 1 和断言（32），极小极大风险由方差泛函$V_{\sigma,n}(\delta_{x_0},\pi,\omega;\mathcal{F})$决定，该泛函定义为变分问题的最优值

$$\sup_q |q(x_0)|, \quad \text{such that } q(0)=0, \quad \int_0^1 (q'(x))^2 dx \le n, \quad \text{and} \quad \int_0^1 (1-x)^\alpha q^2(x) dx \le 1. \tag{108}$$

若 $x_0=0$，则有平凡解 $V_{\sigma,n}(\delta_{x_0},\pi,\omega;\mathcal{F})=0$。本节其余部分分别讨论 $x_0=1$ 和 $x_0\in(0,1)$ 的情形。

情形 I： $x_0=1$。由引理 9，可得 $|q(1)|\le c_\alpha n^{\frac{1+\alpha}{2(1+\alpha)}}$ 对于任意满足变分问题（108）中约束的函数 q。另一方面，考虑函数

$$q(x):=\begin{cases}0 & x\le 1-n^{\frac{-1}{2+\alpha}},\\ n^{\frac{3+\alpha}{2(2+\alpha)}}\left(x-1+n^{\frac{-1}{2+\alpha}}\right) & x>1-n^{\frac{-1}{2+\alpha}}.\end{cases}$$

直接计算可验证，函数 q 满足变分问题（108）中的约束，且 $q(1)=n^{\frac{1+\alpha}{2(2+\alpha)}}$。结合上界可得

$$V_{\sigma,n}(\delta_{x_0},\pi,\omega;\mathcal{F}) \asymp n^{\frac{1+\alpha}{2(2+\alpha)}}.$$

情形 II： $x_0\in(0,1)$。对于任意满足变分问题（108）中约束的函数 q，引理 9 给出

$$|q(x_0)|\le c_{\alpha,x_0} n^{-1/4}, \quad \text{for constant } c_{\alpha,x_0} \text{ depending on } \alpha \text{ and } x_0.$$

另一方面，给定 $n\ge \max\left(x_0^{-2},(1-x_0)^{-1}\right)$，我们构造函数

$$q(x)=\max\left\{\frac{n^{1/4}}{2}-\frac{n^{3/4}}{2}|x-x_0|,0\right\}.$$

直接计算可验证，函数 q 满足变分问题（108）中的约束，其中 $q(x_0)=n^{1/4}/2$。结合上界可得

$$V_{\sigma,n}(\delta_{x_0},\pi,\omega;\mathcal{F}) \asymp n^{1/4}.$$

综合两种情形下的结果，即完成了方程（34b）的证明。

E.1.4 引理9的证明

对于任意 $x\in[0,1]$ 和 $y\in[0,x]$，应用柯西–施瓦茨不等式可得

$$|q(y)|\ge |q(x)|-|q(y)-q(x)|\ge |q(x)|-\sqrt{(x-y)\int_y^x q'(t)^2dt}\ge |q(x)|-\sqrt{(x-y)n}.$$

代入方程（102b）中的第二个约束可得

$$
\begin{aligned}
1 &\geq \int_0^1 (1-y)^\alpha q^2(y)dy \geq \int_0^x (1-y)^\alpha \Big[|q(x)| - \sqrt{(x-y)n}\Big]_+^2 dy \\
&\geq \int_0^{\frac{q^2(x)}{n}} (z+1-x)^\alpha \big(|q(x)| - \sqrt{nz}\big)^2 dz \geq \int_0^{\frac{q^2(x)}{2n}} z^\alpha \big(|q(x)| - \sqrt{nz}\big)^2 dz \\
&\geq \frac{1}{4(1+\alpha)} \cdot \frac{|q(x)|^{4+2\alpha}}{n^{1+\alpha}}.
\end{aligned}
$$

由于 $x \in [0,1]$ 的选择是任意的，因此可得

$$
\sup_{x\in[0,1]} |q(x)| \leq c_\alpha n^{\frac{1+\alpha}{2(2+\alpha)}}. \tag{109}
$$

另一方面　　当 x 与 1 保持一定距离时，沿用相同的推导，我们有

$$
1 \geq \int_0^{\frac{q^2(x)}{n}} (z+1-x)^\alpha \big(|q(x)| - \sqrt{nz}\big)^2 dz \geq \int_0^{\frac{q^2(x)}{2n}} (1-x)^\alpha \big(|q(x)| - \sqrt{nz}\big)^2 dz \geq \frac{(1-x)^\alpha}{4n} q^4(x),
$$

这意味着

$$
\sup_{x\in[0,1-\varepsilon]} |q(x)| \leq c_{\alpha,\varepsilon} n^{1/4} \tag{110}
$$

综合以上各部分即可完成引理 9的证明。

E.1.5 引理8的证明

由于我们关注特征函数 ϕ_j 的 $\mathbb{L}^2$-正态分布与上确界范数之比，因此稍微滥用一下记号，用 ϕ_j 表示在 $\mathbb{L}^2$ 下与特征值 λ_j 对应的 $\mathcal{K}$ 的一个特征函数的常数倍。正交条件给出

$$
\lambda_j \phi_j(x) = \int_0^1 \mathcal{K}(x,y)\phi_j(y)\pi(y)dy. \tag{111}
$$

将核函数 $\mathcal{K}$ 代入积分方程 (111)，得到

$$
\lambda_j \phi_j(x) = \int_0^x y\phi_j(y)\pi(y)dy + x \cdot \int_x^1 \phi_j(y)\pi(y)dy.
$$

求两次导数可得常微分方程

$$
\lambda_j \phi_j''(x) + (1-x)^\alpha \phi_j(x) = 0 \quad \text{on } [0,1].
$$

[1]定义辅助函数 $\psi_j(z) := \phi_j\big(\lambda_j^{2+\alpha}(1-z)\big)$，该微分方程可以转化为标准形式

$$
\psi_j''(z) + z^\alpha \psi_j = 0, \quad \text{for } z \in \big(0, \lambda_j^{\frac{-1}{2+\alpha}}\big)
$$

使用 $J_\alpha:\ \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}$ 表示第一类贝塞尔函数（参见 [Wat22]），上述常微分方程有闭式解

$$\psi_j(z) = \sqrt{z}\left\{\gamma_1(j) J_{\frac{-1}{\alpha+2}}\left(\frac{2}{\alpha+2} z^{\alpha/2+1}\right) + \gamma_2(j) J_{\frac{1}{\alpha+2}}\left(\frac{2}{\alpha+2} z^{\alpha/2+1}\right)\right\}, \quad \text{for } z \in \left(0, \lambda_j^{\frac{-1}{2+\alpha}}\right). \tag{112}$$

对于一对常数 $\gamma_1(j)$ 和 $\gamma_2(j)$，它们可能依赖于 j。

由于我们关注 ψ_j 的 $\mathbb{L}^2$-正态分布与上确界范数之比，因此不失一般性，可假设 $\gamma_1^2(j) + \gamma_2^2(j) = 1$。令 ϕ_j 由此类函数 ψ_j 诱导。在此设定下，我们声称对任意 $j \geq 1$，以下关系成立

$$\underline{c} \leq \|\phi_j\|_\infty \leq \bar{c}, \tag{113a}$$

$$\underline{c}\lambda_j^{\frac{\alpha}{4\alpha+8}} \leq \|\phi_j\|_{\mathbb{L}^2(\pi)} \leq \bar{c}\lambda_j^{\frac{\alpha}{4\alpha+8}}, \tag{113b}$$

对于一对仅依赖于 α 的常数 $(c,\ c)$。

将特征函数 ϕ_j 重新归一化为量 $\phi_j/\|\phi_j\|_{\mathbb{L}^2(\xi)}$，我们得到

$$\underline{c}/\bar{c} \cdot \lambda_j^{-\frac{\alpha}{4(\alpha+2)}} \leq \left\|\frac{\phi_j}{\|\phi_j\|_{\mathbb{L}^2(\xi)}}\right\|_\infty \leq \bar{c}/\underline{c} \cdot \lambda_j^{-\frac{\alpha}{4(\alpha+2)}},$$

这就证明了引理 8。

本节余下部分将用于证明方程（113a）和（113b）。

方程 (113a)的证明： 对于 $\alpha > 0$ 固定的情形，根据定义，我们注意到

$$\begin{aligned}\inf_{j\geq 1}\|\phi_j\|_\infty &\geq \inf_{\gamma_1^2+\gamma_2^2=1} \sup_{z\in[1,2]} \left|\gamma_1 J_{\frac{-1}{\alpha+2}}\left(\frac{2}{\alpha+2} z^{\alpha/2+1}\right) + \gamma_2 J_{\frac{1}{\alpha+2}}\left(\frac{2}{\alpha+2} z^{\alpha/2+1}\right)\right| \\ &= \sup_{z\in[1,2]} \left|\gamma_1^* J_{\frac{-1}{\alpha+2}}\left(\frac{2}{\alpha+2} z^{\alpha/2+1}\right) + \gamma_2^* J_{\frac{1}{\alpha+2}}\left(\frac{2}{\alpha+2} z^{\alpha/2+1}\right)\right|,\end{aligned}$$

其中，常数 $(\gamma_1^*,\ \gamma_2^*)$ 使上述表达式达到极小值（该表达式关于 $(\gamma_1,\ \gamma_2,\ z)$ 一致连续，这意味着上确界关于 $(\gamma_1,\ \gamma_2)$ 连续，并保证其在紧域上存在极小值点）。由于贝塞尔函数 $\mathcal{J}_{\frac{-1}{1+\alpha}}$ 和 $\mathcal{J}_{\frac{1}{1+\alpha}}$ 在任意开区间 [Wat22], 上线性无关，存在常数 $c > 0$ 仅依赖于 α，使得

$$\inf_{j\geq 1}\|\phi_j\|_\infty \geq \underline{c}.$$

另一方面，利用贝塞尔函数的渐近公式，我们注意到

$$\left|J_{\frac{\pm 1}{\alpha+2}}\left(\frac{2}{\alpha+2} z^{\alpha/2+1}\right)\right| = \begin{cases} O\left(1/\sqrt{z}\right) & z \to 0, \\ O\left(z^{-\frac{\alpha}{4}-\frac{1}{2}}\right) & |z| \to \infty. \end{cases}$$

结合表达式（112）可知，函数类 $\{\phi_j\}_{j\geq 1}$ 具有一致上界 c，且该上界与 j无关。

方程 (113b) 的证明： 定义辅助函数

$$\widetilde{\psi}_j(z) = \mathbf{1}_{z>1}\sqrt{\frac{\alpha+2}{\pi}}z^{-\frac{\alpha}{4}}\left\{\gamma_1(j)\cos\left(\frac{2}{\alpha+2}z^{\alpha/2+1} - \frac{\alpha\pi}{4(\alpha+2)}\right) + \gamma_2(j)\cos\left(\frac{2}{\alpha+2}z^{\alpha/2+1} + \frac{\alpha\pi}{4(\alpha+2)}\right)\right\}.$$

根据贝塞尔函数的渐近逼近性质 [我们有22],可得

$$\left|\widetilde{\psi}_j(z) - \psi_j(z)\right| \le c'(1+z)^{-1-\frac{3}{4}\alpha}, \quad \text{for any } z \in \mathbb{R}.$$

其中常数 $c' > 0$ 仅依赖于 α。

令 $\widetilde{\phi}_j := \psi(\lambda_j^{2+\alpha}(1-x))$，我们有

$$\begin{aligned}
\|\phi_j - \widetilde{\phi}_j\|^2_{\mathbb{L}^2(\pi)} &\le \int_0^1 \left|\psi_j\big((1/\lambda_j)^{\frac{1}{2+\alpha}}(1-x)\big) - \widetilde{\psi}_j\big((1/\lambda_j)^{\frac{1}{2+\alpha}}(1-x)\big)\right|^2 \pi(x)dx \\
&\le c'\int_0^1 \frac{x^\alpha}{1+\big((1/\lambda_j)^{\frac{1}{2+\alpha}}x\big)^{2+\frac{3}{2}\alpha}}dx \\
&\le c_2(\alpha)\lambda_j^{\frac{\alpha+1}{\alpha+2}}, \qquad (114)
\end{aligned}$$

其中常数 $c_2(\alpha)$ 仅依赖于 α。

对于函数 $\widetilde{\phi}_j$，我们可以计算其 $\mathbb{L}^2(\pi)$-正态分布。

$$\begin{aligned}
\|\widetilde{\phi}_j\|^2_{\mathbb{L}^2(\pi)} &= \lambda_j^{\frac{1+\alpha}{2+\alpha}}\int_1^{(\frac{1}{\lambda_j})^{\frac{1}{2+\alpha}}} \widetilde{\psi}_j^2(z)z^\alpha dz \\
&= \frac{2}{\alpha+2}\cdot\lambda_j^{\frac{1+\alpha}{2+\alpha}}\int_1^{1/\sqrt{\lambda_j}} \widetilde{\psi}_j^2\big(\theta^{\frac{2}{2+\alpha}}\big)\theta^{\frac{\alpha}{\alpha+2}}d\theta \\
&= \frac{2}{\pi}\cdot\lambda_j^{\frac{1+\alpha}{2+\alpha}}\int_1^{1/\sqrt{\lambda_j}}\left\{\gamma_1(j)\cos\left(\frac{2\theta-\alpha\pi/4}{\alpha+2}\right) + \gamma_2(j)\cos\left(\frac{2\theta+\alpha\pi/4}{\alpha+2}\right)\right\}^2 d\theta. \qquad (115)
\end{aligned}$$

注意，该积分是关于周期函数的，因此我们有上界

$$\int_1^{1/\sqrt{\lambda_j}}\left\{\gamma_1(j)\cos\left(\frac{2\theta-\alpha\pi/4}{\alpha+2}\right) + \gamma_2(j)\cos\left(\frac{2\theta+\alpha\pi/4}{\alpha+2}\right)\right\}^2 d\theta \le c_3(\alpha)\cdot\lambda_j^{-\frac{1}{2}},$$

以及下界

$$\begin{aligned}
&\int_1^{1/\sqrt{\lambda_j}}\left\{\gamma_1(j)\cos\left(\frac{2\theta-\alpha\pi/4}{\alpha+2}\right) + \gamma_2(j)\cos\left(\frac{2\theta+\alpha\pi/4}{\alpha+2}\right)\right\}^2 d\theta \\
&\ge \left\{\frac{1}{\pi(\alpha+2)\sqrt{\lambda_j}} - 2\right\}\cdot\int_0^{\pi(\alpha+2)}\left\{\gamma_1(j)\cos\left(\frac{2\theta-\alpha\pi/4}{\alpha+2}\right) + \gamma_2(j)\cos\left(\frac{2\theta+\alpha\pi/4}{\alpha+2}\right)\right\}^2 d\theta
\end{aligned}$$

对于任意满足 $\gamma_1^2+\gamma_2^2 = 1$ 的一对 (γ_1,γ_2)，我们有

$$\begin{aligned}
&\int_0^{2\pi}\left\{\gamma_1\cos\left(\theta - \frac{\alpha\pi/4}{\alpha+2}\right) + \gamma_2\cos\left(\theta + \frac{\alpha\pi/4}{\alpha+2}\right)\right\}^2 d\theta \\
&= \pi - 2\gamma_1\gamma_2\int_0^{2\pi}\cos\left(\theta - \frac{\alpha\pi/4}{\alpha+2}\right)\cos\left(\theta + \frac{\alpha\pi/4}{\alpha+2}\right)d\theta \\
&= \pi - 2\pi\gamma_1\gamma_2\cos\left(\frac{\alpha\pi}{2\alpha+4}\right) \\
&\ge \pi\left\{1 - \cos\left(\frac{\alpha\pi}{2\alpha+4}\right)\right\},
\end{aligned}$$

它是一个仅依赖于 α、与 γ_1 和 γ 无关的正常数 $2\cdot$

将这些界代回方程 (115) 得到

$$c_4'(\alpha)\lambda_j^{\frac{\alpha}{4\alpha+8}} \le \|\widetilde{\phi}_j\|_{\mathbb{L}^2(\pi)} \le c_3'(\alpha)\lambda_j^{\frac{\alpha}{4\alpha+8}}$$

结合方程 (114，即可完成方程 (113b) 的证明。

E.2 推论 2 的证明

我们将在以下两个小节中，分别证明关于平均泛函 τ^* 和单点泛函 $\mathcal{L}_\omega(\mu^*, \delta_{x_0})$ 的断言。

E.2.1 平均泛函的极小极大风险界

根据定理 1 和3，我们有 $\mathcal{M}_n\big(\mathbb{B}_{\mathbb{H}}(1)\big) \asymp n^{-1}\big\{V_{\xi^*}^2(\mu^*) + V_{\sigma,\ n}^2(\xi^*,\ \pi,\ \omega;\ \mathcal{F})(\mathcal{F};\ n)\big\}$。对于任意 $x \in \mathbb{X}$，取测度 $\omega(\cdot \mid x) = \delta_x$，可得

$$V_{\xi^*}^2(\mu^*) = \mathrm{var}_{X\sim\xi}\Big(\mu^*(X, T(X))\Big).$$

根据广义 Morrey 嵌入定理（例如，参见 §Evans [Evans10]），对于任意光滑度指标 $s > (d_x + d_a)/2$，我们有

$$\sup_{(x,a)\in\mathbb{X}\times\mathbb{A}} |\mu^*(x,a)| \le c'\|\mu^*\|_{\mathbb{H}} \le c',$$

其中常数 c' 取决于三元组 $(d_x,\ d_a,\ s)$。因此，在最坏情况下，我们有 $V_{\xi^*}^2(\mu^*) \lesssim 1$。由于条件方差函数为常数，我们有

$$V_{\sigma,n}^2(\xi^*, \pi, \omega; \mathcal{F}) = \sum_{j,k\ge1} \frac{\bar{u}_{j,k}^2}{1 + \frac{1}{n}\frac{1}{\lambda_{j,k}}},$$

其中我们定义投影系数

$$\bar{u}_{j,k} = \int_{\mathbb{X}} \phi_j(x)\psi_k(T(x))dx = \langle \phi_j,\ \psi_k \circ T\rangle_{\mathbb{L}^2(\mathbb{X})}.$$

根据特征值衰减条件（35），我们有 $\lambda_{j,\ k}^{-1} \asymp j^{2s/d_x} + k^{2s/d_a}$，这意味着

$$n^{-1}V_{\sigma,n}^2(\xi^*, \pi, \omega; \mathcal{F})(\mathcal{F}; n) \asymp V_{\bar{\sigma},n}(\xi^*, \pi, \omega; \mathbb{B}_{\mathfrak{H}}(R)) = \sum_{j,k\ge1} \frac{|\langle \phi_j,\ \psi_k \circ T\rangle_{\mathbb{L}^2(\mathbb{X})}|^2}{n + j^{2s/d_x} + k^{2s/d_a}}, \tag{116}$$

这就证明了依赖于实例的界。

根据帕塞瓦尔恒等式，对于每个 $k \ge 1$，我们有

$$\sum_{j=1}^{\infty} \langle \phi_j,\ \psi_k \circ T\rangle_{\mathbb{L}^2(\mathbb{X})}^2 = \|\psi_k \circ T\|_{\mathbb{L}^2(\mathbb{X})}^2 \le \|\psi_k\|_\infty^2 = 1.$$

代入依赖于实例的界（116），我们得到最坏情况实例化

$$\begin{aligned}\frac{1}{n}V_{\sigma,n}^2(\xi^*, \pi, \omega; \mathcal{F})(\mathcal{F}; n) &\le \sum_{k=1}^{n^{\frac{d_a}{2s}}}\sum_{j=1}^{\infty} \frac{|\langle \phi_j,\ \psi_k \circ T\rangle_{\mathbb{L}^2(\mathbb{X})}|^2}{n} + \sum_{k=n^{\frac{d_a}{2s}}}^{\infty}\sum_{j=1}^{\infty} \frac{|\langle \phi_j,\ \psi_k \circ T\rangle_{\mathbb{L}^2(\mathbb{X})}|^2}{k^{2s/d_a}} \\ &\le \Big\{1 + \frac{2s}{2s - d_a}\Big\} n^{\frac{d_a}{2s}-1}.\end{aligned}$$

因此，我们得到最坏情况上界 $\sup_T \mathcal{M}_n\big(\mathbb{B}_{\mathbb{H}}(1)\big) \lesssim n^{\frac{d_a}{2s}-1}$。

另一方面，对于任意 $a_0 \in \mathbb{A}$，取目标泛函 $T_{a_0}(x) \equiv a_0$，对任意 $x \in \mathbb{X}$，我们有

$$n^{-1}V_{\sigma,n}^2(\xi^*, \pi, \omega; \mathcal{F}) = \sum_{j,k\geq 1} \frac{|\psi_k(a_0)|^2 |\langle \phi_j, \mathbf{1}\rangle_{\mathbb{L}^2(\mathbb{X})}|^2}{n + j^{2s/d_x} + k^{2s/d_a}} = \sum_{k\geq 1} \frac{|\psi_k(a_0)|^2}{n+1+k^{2s/d_a}}$$

对于傅　里叶基 ψ_k，对任意 $a_0 \in \mathbb{A}$，我们有 $|\psi_k(a_0)|$，由此得到下界

$$\sup_T \mathcal{M}_n\big(\mathbb{B}_{\mathbb{H}}(1)\big) \gtrsim \sum_{k\geq 1} \frac{1}{n+1+k^{2s/d_a}} \gtrsim n^{\frac{d_a}{2s}-1}.$$

E.2.2 单点泛函的极小极大界

对于任意 $x_0 \in \mathbb{X}$，定理 1(b) 和方程 (32) 表明 $\mathcal{M}_n\big(x_0; \mathcal{F}\big) \asymp n^{-1}V_{\sigma,n}^2(\delta_{x_0}, \pi, \omega; \mathcal{F})$。根据 $V_{\sigma,n}^2(\delta_{x_0}, \pi, \omega; \mathcal{F})$ 的变分表示，可以看出

$$V_{\sigma,n}^2(\delta_{x_0}, \pi, \omega; \mathcal{F}) \asymp \sum_{j,k\geq 1} \frac{|\phi_j(x_0)\psi_k(T(x_0))|^2}{1+n^{-1}\lambda_{j,k}} = \sum_{j,k\geq 1} \frac{1}{1+n^{-1}\lambda_{j,k}},$$

其中，最后一个方程由以下事实得出：复傅里叶基 ϕ_j 和 ψ_k 在单位圆上取值。

代入特征值衰减条件（35），可得

$$n^{-1}V_{\sigma,n}^2(\delta_{x_0}, \pi, \omega; \mathcal{F}) \asymp \sum_{j,k\geq 1} \frac{1}{n + j^{2s/d_x} + k^{2s/d_a}} =: S_n.$$

接下来需要研究求和 S_n。一方面，我们注意到

$$S_n \geq \sum_{j=1}^{n^{\frac{d_x}{2s}}} \sum_{k=1}^{n^{\frac{d_a}{2s}}} \frac{1}{n + j^{2s/d_x} + k^{2s/d_a}} \geq \frac{1}{3} n^{\frac{d_x+d_a}{2s}-1}.$$

另一方面，我们有上界

$$S_n \leq c_{d_x,s} \sum_{j=1}^{\infty} \big(n + j^{2s/d_x}\big)^{\frac{d_a}{2s}-1} \leq c_{d_x,d_a,s} n^{\frac{d_x+d_a}{2s}-1}.$$

因此，我们得出，对于任意 $x_0 \in \mathbb{X}$和确定性策略 T，有 $\mathcal{M}_n(x_0; \mathcal{F}) \asymp n^{\frac{d_x+d_a}{2s}-1}$。