

# Stein 方法及其在统计物理中的应用

## 毕业论文答辩

巩舒阳

2017 级统计班

2021 年 5 月 21 日

# 目录

- ① 基本知识和背景
  - 正态分布的刻画
  - Stein 方程
  - 一致界
- ② 指数非一致界（主要结果）
  - Zero bias 分布
  - Exchangeable pairs
  - Size bias
- ③ Stein 方法在统计物理中的应用
  - Combinatorial CLT on Conjugacy Classes
  - Anti-voter Model
  - Quadratic Forms
  - Lightbulb Process
  - Patterns in Graphs and Permutations
- ④ 创新和不足

## Section 1

# 基本知识和背景

# 正态分布的刻画

关于正态分布，我们有如下重要定理：

## 正态分布的刻画 (引理 1.1)

$W$  服从标准正态分布，当且仅当对于任意满足  $\mathbb{E}[|f'(W)|] < \infty$  的绝对连续函数  $f$ ，我们有

$$\mathbb{E}f'(W) = \mathbb{E}(Wf(W))$$

### Remark

我们将用  $|\mathbb{E}(f'(W) - Wf(W))|$  的大小来衡量近似程度，给出上界。

# Stein 方程

下面介绍证明非一致界的重要工具：

## Stein 方程的解 (引理 1.2)

Stein 方程

$$f'(x) - xf(x) = \mathbf{1}\{x \leq z\} - \mathbb{P}(Z \leq z)$$

的解可以写作如下形式

$$f_z(x) = \begin{cases} \sqrt{2\pi}e^{x^2/2}\Phi(x)(1-\Phi(z)), & x < z \\ \sqrt{2\pi}e^{x^2/2}\Phi(z)(1-\Phi(x)), & x \geq z \end{cases}$$

## Remark

Stein 方程解具有很好的衰减性和光滑性。

# 一致界

## Berry-Esseen 界 (Berry(1941)、Esseen(1942))

我们假设  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$  是一列 0 均值相互独立的随机变量, 满足  $\sum_{i=1}^n \text{Var}(\xi_i) = 1$ , 令  $W = \sum_{i=1}^n \xi_i$ ,  $F$  为  $W$  的分布,  $\Phi$  为标准正态分布, 有

$$\sup_{x \in \mathbb{R}} |F(x) - \Phi(x)| \leq C \sum_{i=1}^n E|\xi_i|^3$$

## Remark

一般地, 利用 Stein 方法我们能够获得  $O(\frac{1}{\sqrt{n}})$  的上界, 而且一致界与这里的  $x$  是无关的。本文中, 我们常用技巧有: exchangeable pairs, zero bias, size bias, 分别给出三个有关非一致界的定理。

# 目录

- ① 基本知识和背景
  - 正态分布的刻画
  - Stein 方程
  - 一致界
- ② 指数非一致界（主要结果）
  - Zero bias 分布
  - Exchangeable pairs
  - Size bias
- ③ Stein 方法在统计物理中的应用
  - Combinatorial CLT on Conjugacy Classes
  - Anti-voter Model
  - Quadratic Forms
  - Lightbulb Process
  - Patterns in Graphs and Permutations
- ④ 创新和不足

## Section 2

# 指数非一致界 (主要结果)



# 非一致界的提出

Chen and Shao(2001)

$X_i$  是一列独立但不一定同分布的随机变量, 令  $W = \sum_{i=1}^n X_i$ , 存在一个绝对常数  $C$ , 使得

$$|F(x) - \Phi(x)| \leq C \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{\mathbb{E} X_i^2 I(|X_i| > 1 + |x|)}{(1 + |x|)^2} + \frac{\mathbb{E} |X_i|^3 I(|X_i| \leq 1 + |x|)}{(1 + |x|)^3} \right\}$$

Remark

Louis H.Y. Chen 和 Q.M. Shao 主要利用了 Stein 方法和集中不等式方法, 获得了一个  $O(|x|^{-2})$  的非一致界。与之相比, 本文主要证明了指数型的非一致界。

## Zero bias 分布的非一致界

### 定理 3.1

令  $W$  为 0 均值方差为 1 的随机变量,  $|W|$  具有有限的矩母函数且  $\mathbb{E}e^{W^2} < \infty$ , 假设  $W'$  具有  $W$  的 zero bias 分布, 且有  $|W' - W| \leq \delta$ , 那么对于任意的常数  $M > 0$ , 存在常数  $C_i, i = 1, 2, 3$ , 使得

$$|\mathbb{P}(W \leq z) - \mathbb{P}(Z \leq z)| \leq \begin{cases} C_1 \delta e^{-\frac{(z+2\delta)^2}{2}}, & z \leq -M - 2\delta \\ C_2 \delta e^{-\frac{z^2}{2}}, & |z| \leq M + 2\delta \\ C_3 \delta e^{-\frac{(z-2\delta)^2}{2}}, & z \geq M + 2\delta \end{cases}$$

### Remark

上式可以以指数下降, 这里的常数  $C_i$  依赖于  $W$ , 不依赖于  $z$ 。

## 定理 3.1 的证明思路

### 证明思路

首先通过 zero bias 分布的定义 ( $\sigma^2 \mathbb{E}f'(W') = \mathbb{E}(Wf(W))$ ), 我们很容易将该问题转换为求  $|\mathbb{E}(Wf(W) - W'f(W'))|$  的上界, 显然根据 Stein 方程解的性质  $xf(x)$  在  $\mathbb{R}$  上是分段可导的, 所以分别考虑事件  $\{z \leq W\}$  和  $\{z > W\}$  上的积分, 在其中一个上使用 Lagrange 中值定理, 另一个使用 Chebyshev 不等式, 分 6 种情况考虑。

## exchangeable pairs 的非一致界

### 定理 3.2

若  $(W, W')$  为 0 均值方差为 1 的可交换对, 且满足

$$\mathbb{E}(W - W' | W) = \lambda(W - R), \text{ 其中 } \lambda \in (0, 1)$$

$|W|$  具有有限的矩母函数且  $\mathbb{E}e^{W^2} < \infty$ , 且有  $|W' - W| \leq \delta$ 。那么对于任意常数  $M > 0$ , 存在仅依赖于  $\delta, W, M$  但不依赖于  $z$  的常数  $C$ , 使得下式成立

$$|\mathbb{P}(W \leq z) - \mathbb{P}(Z \leq z)| \leq \begin{cases} C(B' + \frac{\delta^3}{2\lambda} + \frac{\delta^2}{2\lambda} + \|R\|_2)e^{-\frac{z^2}{2}}, & |z| \geq M \\ C(B' + 1.5\delta + \frac{0.41\delta^3}{\lambda} + \frac{\sqrt{2\pi}}{4}\|R\|_2)e^{-\frac{z^2}{2}}, & |z| < M \end{cases}$$

其中  $B' = \|\mathbb{E}(1 - \frac{(W - W')^2}{2\lambda} | W)\|_2$ 。

## 定理 3.2 的证明思路

### 证明思路

分为以下三个部分分别进行估计：

$$\left| \mathbb{E} \left( f'(W) \left( 1 - \frac{\Delta^2}{2\lambda} \right) \right) \right|$$

,

$$\left| \mathbb{E} \left( \frac{f'(W) (W' - W)^2 - (f(W') - f(W)) (W' - W)}{2\lambda} \right) \right|$$

,

$$\mathbb{E} (Rf(W))$$

与定理 3.1 相似，根据 Lagrange 中值定理和 Taylor 展开在两个事件上分类讨论。

## size bias 的非一致界

### 定理 3.3

若  $Y^s$  具有  $Y$ -size bias 分布, 且满足  $|Y^s - Y| \leq A$ ,  $|W|$  具有有限矩母函数且  $\mathbb{E}e^{W^2} < \infty$ , 那么对于任意的常数  $M > 0$ , 不依赖于  $z$  的常数  $C$ , 使得下式成立

$$|\mathbb{P}(W \leq z) - \mathbb{P}(Z \leq z)| \leq \begin{cases} C(D' + \frac{\mu A}{\sigma^2} + \frac{\mu A^2}{\sigma^3})e^{-\frac{z^2}{2}}, & |z| \geq M \\ C(2D + \frac{6\mu A^2}{\sigma^3})e^{-\frac{z^2}{2}}, & |z| < M \end{cases}$$

这里  $D' = \|\mathbb{E}(1 - \frac{\mu}{\sigma}(W^s - W)|W)\|_2$

## 定理 3.3 的证明思路

### 证明思路

分为以下两部分证明

$$E \left| f'(W) \left( 1 - \frac{\mu}{\sigma} (W^s - W) \right) \right|$$

,

$$\frac{\mu}{\sigma} E |(f(W^s) - f(W) - f'(W)(W^s - W))|$$

与之前类似, 根据 Lagrange 中值定理和 Taylor 展开在两个事件上分类讨论。

# 目录

- ① 基本知识和背景
  - 正态分布的刻画
  - Stein 方程
  - 一致界
- ② 指数非一致界（主要结果）
  - Zero bias 分布
  - Exchangeable pairs
  - Size bias
- ③ Stein 方法在统计物理中的应用
  - Combinatorial CLT on Conjugacy Classes
  - Anti-voter Model
  - Quadratic Forms
  - Lightbulb Process
  - Patterns in Graphs and Permutations
- ④ 创新和不足



## Section 3

# Stein 方法在统计物理中的应用

# Combinatorial CLT on Conjugacy Classes

## 定理 4.2

设  $n \geq 5$  且  $\{a_{ij}\}_{i,j=1}^n$  为一对称矩阵,  $\pi$  为一随机置换并在各 cycle type 上保持均匀分布, 而且没有固定点 (即  $\pi(k) \neq k$ ), 我们令  $W = \frac{Y - \mathbb{E}Y}{\sigma_Y}$ , 对任意常数  $M > 0$ , 我们有,

$$\begin{aligned} & |\mathbb{P}(W \leq z) - \mathbb{P}(Z_\rho \leq z)| \\ & \leq \begin{cases} C_1 40 \max_{i \neq j} |a_{ij} - 2a_{io} + a_{oo}| e^{-\frac{(z+2\delta)^2}{2}} \sum_{c \in \mathcal{N}_n} \frac{\rho_c}{\sigma_c}, & z \leq -M - 2\delta \\ C_2 40 \max_{i \neq j} |a_{ij} - 2a_{io} + a_{oo}| e^{-\frac{z^2}{2}} \sum_{c \in \mathcal{N}_n} \frac{\rho_c}{\sigma_c}, & |z| < M + 2\delta \\ C_3 40 \max_{i \neq j} |a_{ij} - 2a_{io} + a_{oo}| e^{-\frac{(z-2\delta)^2}{2}} \sum_{c \in \mathcal{N}_n} \frac{\rho_c}{\sigma_c}, & z \geq M + 2\delta \end{cases} \end{aligned}$$

# Anti-voter Model

## 定理 4.4

令  $\{X^{(t)} : t = 0, 1, \dots\}$  为一个图  $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$  上的具有平稳分布的马氏链。这个图满足如下性质: (1) 具有  $n$  个顶点; (2) 是  $r$ -regular 的; (3) 既不是  $n$ -cycle 也不是二分 (bipartite) 的。我们令  $U$  表示  $X$  上的符号和, 即  $U = \sum_{v \in \mathcal{V}} X_v$ 。

令  $W = U/\sigma$ ,  $\sigma^2 = \text{Var}(U)$ ,  $Q = \sum_{v \in \mathcal{V}} \sum_{w \in N_v} X_v X_w$ , 则对任意的常数  $M > 0$ , 存在不依赖于  $z$  的常数  $C$ , 使得下式成立

$$|\mathbb{P}(W \leq z) - \mathbb{P}(Z \leq z)| \leq \begin{cases} C \left( \frac{\sqrt{\text{Var}(Q)}}{2r\sigma^2} + \frac{2n}{\sigma^3} + \frac{n}{\sigma^2} \right) e^{-\frac{z^2}{2}}, & |z| \geq M \\ C \left( \frac{\sqrt{\text{Var}(Q)}}{2r\sigma^2} + \frac{3}{\sigma} + \frac{1.64n}{\sigma^3} \right) e^{-\frac{z^2}{2}}, & |z| < M \end{cases}$$

# Quadratic Forms

## 定理 4.5

令  $X_1, \dots, X_n$  为一列 0 均值, 方差为 1 的随机变量, 有界 ( $|X_i| \leq A, i = 1, 2, \dots, n$ ) 的独立同分布随机变量,  $A = \{a_{ij}\}_{i,j=1}^n$  为对角线为 0 对称矩阵, 令  $W_n = \sum_{1 \leq i \neq j \leq n} a_{ij} X_i X_j$ ,  $\sigma_n^2 = 2 \sum_{i,j=1}^n a_{ij}^2$ , 存在  $C, C_0$ , 使得

$$|P(W \leq z) - P(Z \leq z)| \leq \begin{cases} C \left( \frac{C_0 A^4}{\sigma_n^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n \left( \sum_{j=1}^n a_{ij}^2 \right)^2 + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left( \sum_{k=1}^n a_{ik} a_{jk} \right)^2} + \frac{16nA^6}{\sigma_n^3} \left( \max_{1 \leq i \leq n} \left( \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \right) \right)^3 + \frac{4nA^4}{\sigma_n^2} \left( \max_{1 \leq i \leq n} \left( \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \right) \right)^2 \right) e^{-\frac{z^2}{2}}, & |z| \geq M \\ C \left( \frac{C_0 A^4}{\sigma_n^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n \left( \sum_{j=1}^n a_{ij}^2 \right)^2 + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left( \sum_{k=1}^n a_{ik} a_{jk} \right)^2} + \frac{6A^2}{\sigma_n} \max_{1 \leq i \leq n} \left( \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \right) + \frac{13.12nA^6}{\sigma_n^3} \left( \max_{1 \leq i \leq n} \left( \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \right) \right)^3 \right) e^{-\frac{z^2}{2}}, & |z| < M \end{cases}$$

# Lightbulb Process

## 定理 4.7

令  $Y$  为时刻终止时刻  $n$  时亮着的灯泡数目,  $\mu$  和  $\sigma^2$  为它的期望和方差, 令  $W = \frac{Y - \mu}{\sigma}$ , 对于任意偶数  $n$ ,  $M > 0$ , 存在不依赖于  $z$  常数  $C$ , 我们有:

$$|\mathbb{P}(W \leq z) - \mathbb{P}(Z \leq z)| \leq \begin{cases} C\left(\frac{\mu}{\sigma^2}\Psi + \frac{2\mu}{\sigma^2} + \frac{4\mu}{\sigma^3}\right)e^{-\frac{z^2}{2}}, & |z| \geq M \\ C\left(\frac{24\mu}{\sigma^3} + \frac{2\mu}{\sigma^2}\Psi\right)e^{-\frac{z^2}{2}}, & |z| < M \end{cases}$$

这里,  $\Psi$  满足

$$\Psi \leq \frac{1}{2\sqrt{n}} + \frac{1}{2n} + e^{-\frac{n}{2}}$$

# Patterns in Graphs and Permutations

## 定义 (Dependency neighborhood)

考虑一类随机变量  $\mathbf{X} = \{X_\alpha, \alpha \in \mathcal{A}\}$ 。若  $\mathcal{B}_\alpha \subset \mathcal{A}$  满足:  $X_\alpha$  和  $\{X_\beta : \beta \notin \mathcal{B}_\alpha\}$  相互独立。那么称  $\mathcal{B}_\alpha$  为  $\alpha$  的相依邻域。

## 定理 4.9

令  $\mathbf{X} = X_\alpha, \alpha \in \mathcal{A}$  为一类在  $[0, M/2]$  取值的随机变量, 令  $Y = \sum_{\alpha \in \mathcal{A}} X_\alpha$ ,  $\mu = \sum_{\alpha \in \mathcal{A}} EX_\alpha$ ,  $\sigma^2 = \text{Var}(Y)$ ,  $p_\alpha = \frac{EX_\alpha}{\sum_{\beta \in \mathcal{A}} EX_\beta}$ ,  $\bar{p} = \max_{\alpha \in \mathcal{A}} p_\alpha$ ,  $b = \max_{\alpha \in \mathcal{A}} |\mathcal{B}_\alpha|$  令  $\mathbf{X}^\alpha$  具有  $\mathbf{X}$  的  $\alpha$ -size biased 分布, 若存在  $\mathcal{F} \supset \sigma(Y)$  和  $\mathcal{D} \subset \mathcal{A} \times \mathcal{A}$ , 使得: 若  $(\alpha_1, \alpha_2) \notin \mathcal{D}$ , 那么对于任意的  $(\beta_1, \beta_2) \in \mathcal{B}_{\alpha_1} \times \mathcal{B}_{\alpha_2}$ ,  $\text{cov}\left(E\left(X_{\beta_1}^{\alpha_1} - X_{\beta_1} \middle| \mathcal{F}\right), E\left(X_{\beta_2}^{\alpha_2} - X_{\beta_2} \middle| \mathcal{F}\right)\right) = 0$ 。令  $W = \frac{(Y - \mu)}{\sigma}$ , 对于

# Patterns in Graphs and Permutations

## 续定理 4.9

任意的  $M > 0$ , 我们有不依赖于  $z$  的  $C$ , 它满足

$$|\mathbb{P}(W \leq z) - \mathbb{P}(Z \leq z)| \leq \begin{cases} C\left(\frac{\mu \bar{p} b M \sqrt{|\mathcal{D}|}}{\sigma^2} + \frac{\mu b M}{\sigma^2} + \frac{\mu b^2 M^2}{\sigma^3}\right) e^{-\frac{z^2}{2}}, & |z| \geq M \\ C\left(\frac{6\mu b^2 M^2}{\sigma^3} + \frac{2\mu \bar{p} b M \sqrt{|\mathcal{D}|}}{\sigma^2}\right) e^{-\frac{z^2}{2}}, & |z| < M \end{cases}$$

# 目录

- ① 基本知识和背景
  - 正态分布的刻画
  - Stein 方程
  - 一致界
- ② 指数非一致界（主要结果）
  - Zero bias 分布
  - Exchangeable pairs
  - Size bias
- ③ Stein 方法在统计物理中的应用
  - Combinatorial CLT on Conjugacy Classes
  - Anti-voter Model
  - Quadratic Forms
  - Lightbulb Process
  - Patterns in Graphs and Permutations
- ④ 创新和不足



## Section 4

# 创新和不足

# 创新

## 创新

- 计算出非一致的 Berry-esseen 界

# 创新

## 创新

- 计算出非一致的 Berry-esseen 界
- 将非一致界应用到模型中，可应用型强

# 创新

## 创新

- 计算出非一致的 Berry-esseen 界
- 将非一致界应用到模型中，可应用型强
- 非一致收敛速度是可调的

# 创新

## 创新

- 计算出非一致的 Berry-esseen 界
- 将非一致界应用到模型中，可应用型强
- 非一致收敛速度是可调的
- 克服了特征函数法的缺陷

# 不足

## 不足

- 很多情况下，常数  $C$  和  $n$  有关

# 不足

## 不足

- 很多情况下，常数  $C$  和  $n$  有关
- 兼顾非一致和一致收敛速度

# 不足

## 不足

- 很多情况下，常数  $C$  和  $n$  有关
- 兼顾非一致和一致收敛速度
- 不知是否能构造出 zero bias, size bias, exchangeable pair