DAY 3

> 大偏差定理、续

对闭集 $F \in \mathcal{B}$, $\limsup\limits_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log \mu_n(F) \le -\inf\limits_{x\in F} I(x)$.

对开集 $G \in \mathcal{B}$, $\liminf\limits_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log \mu_n(G) \ge -\inf\limits_{x\in G} I(x)$.

对于满足条件, $\inf\limits_{x\in \Gamma^\circ} I(x) = \inf\limits_{x\in \bar{\Gamma}} I(x)$ 时. $\mu_n(\Gamma) \sim \exp(-n \cdot \inf\limits_{x\in\Gamma} I(x))$.

Γ 取成无穷小会是什么呢? 猜一下是 $\mu_n([x, x+dx]) = p(x)\,dx \sim \exp(-n I(x))\,dx$

为什么这是对的呢? 由 Laplace 渐近. $F(n) = \int_B p(x)\,dx = \int_B \exp(-n I(x))\,dx$

$\Rightarrow \lim\limits_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log F(n) = \sup\limits_{x\in B} -I(x) = -\inf\limits_{x\in B} I(x)$. 这恰好和大偏差定理对上了.

> (续上节) 速率函数的直观解释

核心：我们要算一个被构造出来的积分/期望、

考虑 $\lim \frac{1}{n} \log \mathbb{E}_{x\sim p(x)}(\exp(n\cdot\phi(x)))$、 $\phi(x)$ 是某一函数： $\mu(x)$ 是均值的分布

$$= \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log \int \exp(n\phi(x))\, d\mu(x)$$

$$= \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log \int \exp(n\cdot\phi(x)) \cdot \exp(-n\cdot I(x))\,dx.$$

$$= \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log \int \exp(n(\phi(x) - I(x)))\,dx$$

$$\sim (\text{Laplace}) \quad \sup_x \{\phi(x) - I(x)\}$$

取定 $\phi(x) = \lambda x \Rightarrow \mathbb{E}(\exp(n\cdot\lambda x))$

$= \mathbb{E}(\exp(n\lambda \sum_i x_i))$

$= \mathbb{E}(\exp(\lambda x_i)^n)$

$= [\mathbb{E}(\exp(\lambda x_i))]^n$

$= M(\lambda)^n$

$\frac{1}{n} \log (M(\lambda))^n = \Lambda(\lambda)$.

$\Rightarrow \Lambda(\lambda)$ 与 $I(x)$ 互为勒让德变换.

> 大偏差定理的克拉默格证明.

1)、上界估计：直接考虑 $\mu_n(J_x)$.　$J_x = [x, +\infty)$.　　考虑 J_x、两次放缩、

开始算积分：$\mu_n(J_x) = \int_x^{+\infty} \mu_n(dy)$

$$= \int_x^{+\infty} \exp(-n\lambda y)\cdot \exp(n\lambda y)\, \mu_n(dy).$$

$$\le \exp(-n\lambda x)\cdot \int_x^{+\infty} \exp(n\lambda y)\cdot \mu_n(dy).$$

$$\le \exp(-n\lambda x)\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(n\lambda y)\cdot \mu_n(dy).$$

$$= \exp(-n\lambda x)\cdot \mathbb{E}(\exp(n\lambda x)) \longrightarrow \mathbb{E}(\exp(\lambda \textstyle\sum x_j)) = [M(\lambda)]^n$$

$\Rightarrow \mu_n(J_x) \le \exp(-n\lambda x)\cdot [M(\lambda)]^n$　把它变成大偏差的形式.

$\Rightarrow \frac{1}{n}\cdot \log \mu_n(J_x) \le -(\lambda x - \Lambda(\lambda))$.　　for all λ.

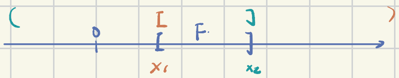
$$\le -\sup_{\lambda} (\lambda x - \Lambda(\lambda)).\quad = -I(x).$$

从而我们可以得：对于 $J_x \in [x, +\infty)$.　$\frac{1}{n}\log \mu_n(J_x) \le -I(x)$.

同样、对于 $\tilde{J}_x \in (-\infty, x]$.　$\frac{1}{n}\log \mu_n(\tilde{J}_x) \le -I(x)$.

我们考虑对任意闭集 $F\in\mathcal{B}$. 若 $0\in F$ 则由 $I(x)$ 的性质及单调性、$\inf_{x\in F} I(x) = 0$. 上界估计是自然成立的.

举例.



$\Rightarrow F \subset J_{x_1} \cup \tilde{J}_{x_2}$.　$\Rightarrow \limsup_{n\to+\infty} \frac{1}{n}\log \mu_n(F) \le \max(\limsup \frac{1}{n}\log \mu_n(J_{x_1}),\ \limsup \frac{1}{n}\log \mu_n(\tilde{J}_{x_2}))$.

$\le -\min(I(x_1), I(x_2))$.

$= -\inf_{x\in F} I(x)$.

2) 下界估计. 只考虑 $\sup\{\lambda x-\Lambda(\lambda)\}$ 的极值在 $\lambda=\lambda_0$ 处取到的情形. $\Rightarrow I(x)=\lambda_0 x-\Lambda(\lambda_0)$.

$x=\Lambda'(\lambda)|_{\lambda=\lambda_0}=\frac{M'(\lambda_0)}{M(\lambda_0)}$.

关键：构造 tilt distribution.
并只考虑 $[x-\delta, x+\delta]$ 小区域内的测度.

定义所谓倾斜分布 (tilt dist.) $\tilde{\mu}(dy)=\frac{1}{M(\lambda_0)}\exp(\lambda_0 y)\mu(dy)$. x 为均值的分布.

首先我们看它确实是个测度.

$$\int\tilde{\mu}(dy)=\frac{1}{M(\lambda_0)}\int\exp(\lambda_0 y)\mu(dy)=\frac{1}{M(\lambda_0)}\mathbb{E}(\exp(\lambda_0 y))=1.$$

其次看它的期望

$$\int y\,\tilde{\mu}(dy)=\frac{1}{M(\lambda_0)}\int y\cdot\exp(\lambda_0 y)\mu(dy)=\frac{1}{M(\lambda_0)}M'(\lambda)\Big|_{\lambda=\lambda_0}=x.$$

我们要估计 $\mu_n(G)$ 的下界. 我们试图将 G 与 $(x-\delta, x+\delta)$ 上的测度作比较.

$$\begin{aligned}
\mu_n(G) &\ge \mu_n([x-\delta, x+\delta]) \\
&= \int_{\{|\frac{1}{n}\sum y_i-x|<\delta\}}\mu(dy_1)\cdots\mu(dy_n) \\
&= \int_{\{\quad\}}\exp(-\lambda_0 y_1)\exp(\lambda_0 y_1)\exp(-\lambda_0 y_2)\exp(\lambda_0 y_2)\cdots \\
&\ge \exp(-n\lambda_0(x+\delta))\int_{\{\quad\}}\exp(\lambda_0 y_1)\exp(\lambda_0 y_2)\cdots\mu(dy_1)\cdots\mu(dy_n) \\
&= \exp(-n\lambda_0(x+\delta))\int_{\{\quad\}}\tilde{\mu}(dy_1)\tilde{\mu}(dy_2)\cdots\tilde{\mu}(dy_n).
\end{aligned}$$

而由于 $\mathbb{E}_{\tilde{\mu}}[X]=x$. $\Rightarrow$ 由(弱)大数定律. $\int_{\{\quad\}}\tilde{\mu}(dy_1)\cdots\tilde{\mu}(dy_n)\to 1$.

$\Rightarrow \liminf\limits_{n\to\infty}\frac{1}{n}\log\mu(G)\ge-\lambda_0(x+\delta)+\Lambda(\lambda_0)=-I(x)-\lambda_0\delta$

首先利用 δ 的任意性. $\liminf\limits_{n\to\infty}\frac{1}{n}\log\mu(G)\ge-I(x)$. $(\delta\to 0)$.

其次再利用 x 的任意性. $\liminf\limits_{n\to\infty}\frac{1}{n}\log\mu_n(G)\ge\sup\limits_{x\in G}(-I(x))=-\inf\limits_{x\in G}I(x)$.

下面正式开始随机过程. → 随机过程是什么? 一列随机变量. $(\Omega, \mathcal{F}) \to \mathbb{R}$ 的函数.

离散时间 Markov链.

例子: Ehrenfest 的气体扩散模型. 考虑一个箱子内共有 N 个气体分子. 其左右两侧用隔板隔开.

每经过 δt 时间, 就会在所有粒子中随机选择一个. 使之从右侧"瞬移"到左侧. 或从左侧"瞬移"到右侧.

设系统的状态代表左侧有多少粒子 ⇒ "转移矩阵".

$$
\begin{array}{c|c}
 & t+\delta t\text{状态} \\
t\text{状态} & \begin{array}{ccccc} 0 & 1 & 2 & \cdots & N \end{array} \\
\begin{array}{c} 0 \\ 1 \\ 2 \\ \vdots \\ \\ N \end{array} &
\begin{bmatrix}
0 & 1 & 0 & \cdots & & & 0 \\
\frac{1}{N} & 0 & \frac{N-1}{N} & & & & \\
 & \frac{2}{N} & 0 & \frac{N-2}{N} & \cdots & & \\
 & & & & & & \\
 & & & & \frac{N-1}{N} & 0 & \frac{1}{N} \\
\cdots & & & & & 1 & 0
\end{bmatrix}
\end{array}
$$

当我们想要研究一个随机过程. 我们最想知道的一定是它的联合分布

$$P(X_n=i_n,\ X_{n-1}=i_{n-1},\ \ldots,\ X_1=i_1,\ X_0=i_0).$$

$$= P(X_0=i_0)\, P(X_1=i_1 \mid X_0=i_0)\, P(X_2=i_2 \mid X_1=i_1, X_0=i_0) \cdots P(X_n=i_n \mid X_{n-1}=i_{n-1}, \ldots, X_1=i_1, X_0=i_0).$$

如果一个随机过程可以"忘却往事", 使得上式被写成:

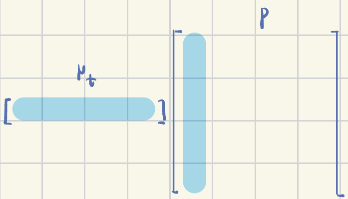
$$= P(X_0=i_0)\, P(X_1=i_1 \mid X_0=i_0)\, P(X_2=i_2 \mid X_1=i_1) \cdots P(X_n=i_n \mid X_{n-1}=i_{n-1}).$$

则这样的随机过程被称为 离散时间马尔可夫链. (我们要求状态空间离散且有限).

自然地, 我们可以写出.

$$P(X_n=j \mid X_0=i) = \underbrace{\sum_{k_1}\sum_{k_2}\cdots\sum_{k_{n-1}}}_{\text{对所有可能的路径求和. 如同费曼路径积分!}} P(X_1=k_1 \mid X_0=i)\, P(X_2=k_2 \mid X_1=k_1)\, P(X_3=k_3 \mid X_2=k_2) \cdots P(X_n=j \mid X_{n-1}=k_{n-1}).$$

上式可被写成更紧凑的形式。将t时刻马尔科夫链位于状态的概率写成一个行向量 $\mu_t^T = \begin{bmatrix} \mathbb{P}(X_t=0) \\ \vdots \\ \mathbb{P}(X_t=|S|) \end{bmatrix}$ 并引入转移矩阵P，其矩阵元 $(P)_{ij} = \mathbb{P}(X_{n+1}=j \mid X_n=i)$。



$= [\ \bullet\ \ ]$

$(\mu_t)_0 (P)_{00} + (\mu_t)_1 (P)_{01} + \cdots$

$= \mathbb{P}(X_{t+1}=0 \mid X_t=0)$

⇒ 从而，马尔科夫链在各个时间的概率分布可以被简单地写为 $\mu_t = \mu_0 P^t$

这里引出我们提出新的问题：如果有一个分布 π 满足 $\pi P = \pi$（所谓的稳态分布）这样的分布一定存在吗？唯一吗？

为了解答这个问题，我们需要在马尔科夫链上定义一些其他概念。

- 给定 i, j，若存在 $k_1, k_2 \cdots k_s$，使得 $p_{ik_1}\ p_{k_1k_2} \cdots p_{k_sj} > 0$。则称状态 j 是从状态 i 可达的。
- 若 i 从 j 可达，j 从 i 可达，则称 i, j 是连通的。连通是马尔科夫链上的一种等价关系，可以通过这种等价关系在马尔科夫链上聚类。

在整个链上，我们可以定义两个性质

- 我们称一个马尔科夫链是不可约的，若马尔科夫链上任意两节点 i, j 是连通的。
- 我们称一个马尔科夫链是本原的(primitive)，若 $\exists s$，$\forall i, j$，转移矩阵的矩阵元 $(P^s)_{ij} > 0$。

★ 马尔科夫链的不变分布的存在性与唯一性。

1). 若一个马尔科夫链是不可约的，则它存在唯一不变分布 π。（这是一个高等代数问题，这里暂不给出证明）

2). 若一个马尔科夫链是本原的，则从任意初始分布开始，都有 $\mu_n = \mu_0 P^n \to \pi$。

我们现在来证明第2)点，给定两个分布 μ_0，$\tilde{\mu}_0$，定义它们之间的距离为 $d(\mu_0, \tilde{\mu}_0) = \frac{1}{2}\sum_i |\mu_{0,i} - \tilde{\mu}_{0,i}|$

使用记号 $a^+ = \max(a, 0)$，$a^- = \max(-a, 0)$。

考虑 $\mu_s = \mu_0 P^s$，$\tilde{\mu}_s = \tilde{\mu}_0 P^s$，则 $\mu_{s,i} = \sum_j \mu_{0,j} (P^s)_{ji}$，$\tilde{\mu}_{s,i} = \sum_j \tilde{\mu}_{0,j} (P^s)_{ji}$

按我们之前定义：$d(\mu_s, \tilde{\mu}_s) = \frac{1}{2}\sum_{i\in S}\left|\sum_{j\in S}\left(\mu_{0,j}(P^s)_{ji} - \tilde{\mu}_{0,j}(P^s)_{ji}\right)\right|$

由于有性质：$0 = \sum_i (\mu_{0,i} - \tilde{\mu}_{0,i}) = \sum_i (\mu_{0,i} - \tilde{\mu}_{0,i})^+ - \sum_i (\mu_{0,i} - \tilde{\mu}_{0,i})^-$

⇒ 把上面的距离重写为:

$$d(\mu_s, \tilde{\mu}_s) = \sum_{i \in S} \left(\sum_{j \in S} (\mu_{0,j} - \tilde{\mu}_{0,j})(P^S)_{ji} \right)^+$$

$$\le \sum_{i \in B^+} (P^S)_{ji} \sum_{j} (\mu_{0,j} - \tilde{\mu}_{0,j})^+$$

B^+ 是下标 i 满足 $\sum_{j \in S} (\mu_{0,j} - \tilde{\mu}_{0,j})(P^S)_{ji} > 0$ 的集合.

注: B^+ 中不可能包含全部下标. 若 B^+ 中包含所有下标, 则会有对于每一个下标 i, 都有 $(\mu_0 P^S)_i > (\tilde{\mu}_0 P^S)_i$, 而这显然不可能.

从而我们立刻得到: $d(\mu_s, \tilde{\mu}_s) \le d(\mu_0, \tilde{\mu}_0)(1-\alpha)$. (*).

由于 $d(\cdot,\cdot) \le 1$. 从而

$d(\mu_n, \mu_{n+m}) \le d(\mu_{n-sk}, \mu_{n+m-sk})(1-\alpha)^k \le (1-\alpha)^k \Rightarrow \mu_n$ 是柯西列

又由(*)式中的压缩映射特性. 收敛点是唯一的.

Example: Markov Decision Process.

MDP 的转移概率不是 $S \times S \to \mathbb{R}$ 的映射. 而是 $S \times A \times S \to \mathbb{R}$ 的映射. $p(s_{t+1} | s_t, a_t)$. 此外. 引入 $\pi: S \to [0,1]^A$. $\pi(s_t) = [p(a_0)\ p(a_1) \cdots]$

引入 $R: S \times A \to \mathbb{R}$. $r(s_t, a_t) = r_t$.

一个 MDP 问题被表述为: 给定时不变的转移概率 $p(s_{t+1}|s_t, a_t)$. $r(s_t, a_t) = r_t$. 和固定的折扣系数 γ.

求 $\pi(a|s)$. 最大化 $R = \sum_{t=0} \gamma^t \cdot r(a_t, s_t)$ (折扣奖励).

这里只介绍一种方法: Policy Gradient. 也就是如何给奖励求梯度. 用 τ 表示一条轨迹. $\tau = \{s_1, a_1, r_1, s_2, a_2, r_2, \cdots\}$.

$$\mathbb{E}_{\tau \sim p_\theta(\tau)}(R(\tau)) = \sum_\tau R(\tau) \cdot p_\theta(\tau)$$

$$\Rightarrow \nabla \mathbb{E}_{\tau \sim p_\theta(\tau)}(R(\tau)) = \sum_\tau R(\tau) \cdot \nabla p_\theta(\tau) = \sum_\tau R(\tau) \cdot p_\theta(\tau) \cdot \frac{\nabla p_\theta(\tau)}{p_\theta(\tau)} = \sum_\tau R(\tau) \cdot p_\theta(\tau) \cdot \nabla \log p_\theta(\tau) = \mathbb{E}_{\tau \sim p_\theta(\tau)} [R(\tau) \cdot \nabla \log p_\theta(\tau)].$$

在实际使用的时候应该怎么办? 直接采样轨迹. 积分梯度.

$$\text{Gradient} = \sum_\tau R(\tau) \cdot \nabla \log p_\theta(\tau)$$

$$= \sum_\tau \left(r(s_1, a_1) + \gamma \cdot r(s_2, a_2) + \gamma^2 r(s_3, a_3) + \cdots \right) \cdot \nabla \left(\sum_i \log p(s_{i+1} | s_i, a_i) \cdot \pi(a_i | s_i) \right)$$