MSRDJ 路径积分 李宇豪

考虑如下形式的随机微分方程

$$\partial_t x = f(x) + \xi(t) \tag{1}$$

其中,f(x) 是动力学过程中的非线性函数, $\xi(t)$ 是噪声。采用 Ito 约定,将方程离散化为

$$\psi(x_t) = x_t - \left[x_{t-1} + f(x_{t-1})\Delta t + \xi_t \Delta t + x_0 \delta_{t0} \right] = 0$$
 (2)

我们的目标是得到 x 的动力学路径的概率分布 P[x(t)],其离散化形式可以写为

$$p(x_1, \dots, x_N) = \prod_{t=1}^{N} \int d\xi_t \ \rho(\xi_t) \, \delta(x_t - x_t^*(x_{t-1}, \xi_t))$$
 (3)

其中 $x_t^{\star}(x_{t-1}, \xi_t)$ 是方程 (2) 的解,也就是函数 $\psi(x_t) = 0$ 的零点,并且是唯一的。利用狄拉克 δ 函数的复合性质以及其傅里叶积分表示,可以得到

$$\delta(x_t - x_t^{\star}(x_{t-1}, \xi_t)) = |\psi'(x_t)| \, \delta(\psi(x_t)) = \delta(\psi(x_t)) = \int \frac{\mathrm{d}\tilde{x}_t}{2\pi i} \, e^{\tilde{x}_t \psi(x_t)} \tag{4}$$

因此可以将式(3)改写为

$$p(x_1, \dots, x_N) = \prod_{t} \int d\xi_t \, \rho(\xi_t) \int \frac{d\tilde{x}_t}{2\pi i} \, e^{\tilde{x}_t \psi(x_t)}$$
(5a)

$$= \prod_{t} \int \frac{\mathrm{d}\tilde{x}_{t}}{2\pi i} \left[\int \mathrm{d}\xi_{t} \, e^{-\tilde{x}_{t}\xi_{t}\Delta t} \rho(\xi_{t}) \right] \exp\left[\tilde{x}_{t} \left(x_{t} - x_{t-1} - f(x_{t-1})\Delta t - x_{0}\delta_{t0}\right) \right] \tag{5b}$$

$$= \int \left[\prod_{t} \frac{\mathrm{d}\tilde{x}_{t}}{2\pi i} \right] \left[\prod_{t} \int \mathrm{d}\xi_{t} \, e^{-\tilde{x}_{t}\xi_{t}\Delta t} \rho(\xi_{t}) \right] \exp \left[\sum_{t} \tilde{x}_{t} \left(\frac{x_{t} - x_{t-1}}{\Delta t} - f(x_{t-1}) - x_{0} \frac{\delta_{t0}}{\Delta t} \right) \Delta t \right] \tag{5c}$$

在 $N \to \infty$, $\Delta t \to 0$ 的极限下,利用 $\frac{x_t - x_{t-1}}{\Delta t} \to \partial_t x$, $\frac{\delta_{t0}}{\Delta t} \to \delta(t)$ 和 $\sum_{t=1}^N \Delta t \to \int \mathrm{d}t$,并且定义噪声过程的矩生成泛函

$$Z_{\xi}[-\tilde{x}(t)] = \lim_{N \to \infty} \prod_{t} \int d\xi_{t} \, e^{-\tilde{x}_{t}\xi_{t}\Delta t} \rho(\xi_{t}) \tag{6}$$

可以将 $p(x_1, \dots, x_N)$ 重新写回连续形式

$$p[x(t)] = \int D\tilde{x} Z_{\xi}[-\tilde{x}(t)] \exp \left[\int dt \, \tilde{x} \Big(\partial_t x - f(x) - x_0 \delta(t) \Big) \right]$$
 (7)

为了得到概率分布 p[x(t)] 中的统计量,我们可以定义所谓的矩生成泛函

$$Z[j(t)] \equiv \int Dx \ e^{\int j(t)x(t) \, \mathrm{d}t} \ p[x(t)] \tag{8a}$$

$$= \int Dx \int D\tilde{x} Z_{\xi}[-\tilde{x}(t)] \exp \left\{ \int dt \left[\tilde{x} \left(\partial_t x - f(x) - x_0 \delta(t) \right) + jx \right] \right\}$$
 (8b)

其中 j(t) 被称为源场。更一般地,我们可以给系统 (1) 施加一个扰动场 $\tilde{i}(t)$,动力学方程改写为

$$\partial_t x = f(x) - \tilde{j}(t) + \xi(t) \tag{9}$$

通过替换 $f(x) \rightarrow f(x) - \tilde{j}(t)$,可以得到包含扰动场的矩生成泛函

$$Z[j,\tilde{j}] = \int Dx \int D\tilde{x} \ Z_{\xi}[-\tilde{x}] \exp\left\{\int dt \left[\tilde{x}(\partial_{t}x - f(x) - x_{0}\delta(t)) + jx + \tilde{j}\tilde{x}\right]\right\}$$
(10)

将与动力学方程本身有关的项定义为作用量

$$S[x,\tilde{x}] = \int dt \ \tilde{x} \Big(\partial_t x - f(x) - x_0 \delta(t) \Big) \tag{11}$$

将噪声的矩生成泛函用其累积生成泛函表示

$$W_{\xi}[-\tilde{x}(t)] = \ln Z_{\xi}[-\tilde{x}(t)] = \lim_{N \to \infty} \ln \prod_{t} \int d\xi_{t} \, e^{-\tilde{x}_{t}\xi_{t}\Delta t} \rho(\xi_{t})$$
(12)

这样,生成泛函写为

$$Z[j,\tilde{j}] = \int D[x,\tilde{x}] \exp\left(S[x,\tilde{x}] + W_{\xi}[-\tilde{x}] + j^{\top}x + \tilde{j}^{\top}\tilde{x}\right)$$
(13)

对于常见的高斯白噪声,我们一般写为如下形式

$$\langle \xi(t) \rangle = 0 \qquad \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = g^2 \delta(t - t')$$
 (14)

采用 $\delta(t-t') \to \frac{1}{\Delta t}$ 的离散化方案, ξ_t 的方差为 $g^2/\Delta t$,概率密度写为

$$\rho(\xi_t) = \frac{\sqrt{\Delta t}}{\sqrt{2\pi}g} \exp\left(-\frac{\xi_t^2 \Delta t}{2g^2}\right)$$
 (15)

因此噪声的矩生成泛函为

$$Z_{\xi}[-\tilde{x}] = \lim_{N \to \infty} \prod_{t} \int \frac{\sqrt{\Delta t}}{\sqrt{2\pi}g} d\xi_{t} e^{-\tilde{x}_{t}\xi_{t}\Delta t} \exp\left(-\frac{\xi_{t}^{2}\Delta t}{2g^{2}}\right)$$
(16a)

$$= \lim_{N \to \infty} \prod_{t} \int \frac{1}{\sqrt{2\pi} g} d(\xi_t \sqrt{\Delta t}) e^{-\tilde{x}_t \xi_t \Delta t} \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{1}{g^2} (\xi_t \sqrt{\Delta t})^2 - \tilde{x}_t \sqrt{\Delta t} (\xi_t \sqrt{\Delta t}) \right]$$
(16b)

$$= \lim_{N \to \infty} \prod_{t} \exp\left(\frac{1}{2}g^2 \tilde{x}_t^2 \Delta t\right) \tag{16c}$$

$$= \exp\left(\frac{1}{2}g^2 \int \tilde{x}^2(t) \, \mathrm{d}t\right) \tag{16d}$$

噪声累积生成泛函为

$$W_{\xi}[-\tilde{x}] = \frac{1}{2}g^2 \int \tilde{x}^2(t) dt$$
 (17)

考虑一个具有如下形式动力学方程的随机循环神经网络

$$\frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t} = -x_i + \sum_{j=1}^N J_{ij}\phi(x_j) + \xi_i \tag{1}$$

其中非线性函数 $\phi(x) = \tanh(x)$, J_{ij} 是神经元之间的耦合强度, ξ_i 是高斯白噪声,满足

$$J_{ii} = 0$$
 $\langle J_{ij} \rangle = 0$ $\langle J_{ij}^2 \rangle = (1 - \delta_{ij}) \frac{J^2}{N}$ (2)

$$\langle \xi_i(t) \rangle = 0 \qquad \langle \xi_i(t)\xi_i(t') \rangle = g^2 \delta_{ij}\delta(t - t')$$
 (3)

给定一个耦合矩阵」,可以写出矩生成泛函

$$Z[\mathbf{j}, \mathbf{j}](\mathbf{J}) = \int \mathcal{D}[\mathbf{x}, \mathbf{x}] \exp \left\{ \mathbf{S} + \mathbf{j}^{\mathsf{T}} \mathbf{x} + \mathbf{j}^{\mathsf{T}} \mathbf{x} - \sum_{i} \int dt \ \tilde{x}_{i}(t) \sum_{j} J_{ij} \phi(x_{j}(t)) \right\}$$
(4)

其中定义了

$$\mathbf{S} = \sum_{i} \int dt \left[\tilde{x}_i (\partial_t + 1) x_i + \frac{1}{2} g^2 \tilde{x}_i^2 \right]$$
 (5)

将矩生成泛函做关于了的无序平均,可以得到

$$\overline{Z[\mathbf{j},\mathbf{j}]} \equiv \langle Z[\mathbf{j},\mathbf{j}](\mathbf{J})\rangle_{\mathbf{J}} = \int \prod_{i,j} dJ_{ij} P(J_{ij}) Z[\mathbf{j},\mathbf{j}](\mathbf{J})$$
(6a)

$$= \int \mathcal{D}[\mathbf{x}, \mathbf{x}] \exp \left(\mathbf{S} + \mathbf{j}^{\top} \mathbf{x} + \mathbf{j}^{\top} \mathbf{x}\right) \underbrace{\int \prod_{i,j} dJ_{ij} e^{-\sum_{i,j} J_{ij} \int dt \, \tilde{x}_i \phi(x_j)} P(J_{ij})}_{\equiv Z_0}$$
(6b)

其中

$$Z_0 = \prod_{i \neq j} \int dJ_{ij} \exp \left\{ -\frac{J_{ij}^2}{2J^2/N} - J_{ij} \int dt \, \tilde{x}_i \phi(x_j) \right\}$$
 (7a)

$$= \exp\left\{\frac{J^2}{2N} \sum_{i \neq j} \left(\int dt \, \tilde{x}_i \phi(x_j) \right)^2 \right\} \tag{7b}$$

$$= \exp\left\{\frac{J^2}{2N} \sum_{i \neq j} \iint dt dt' \, \tilde{x}_i^t \, \phi_j^t \, \tilde{x}_i^{t'} \phi_j^{t'}\right\}$$
 (7c)

$$= \exp\left\{\frac{1}{2}\iint dt dt' \left[\left(\sum_{i} \tilde{x}_{i}^{t} \tilde{x}_{i}^{t'}\right) \left(\frac{J^{2}}{N} \sum_{i} \phi_{i}^{t} \phi_{i}^{t'}\right) \right] \right\}$$
 (7d)

式 (7c) 中的被积函数可以利用 $\sum_{i\neq j} x_i y_j = \sum_{i,j} x_i y_j - \sum_i x_i y_i = \sum_i x_i \sum_j y_j - \sum_i x_i y_i$ 拆分为两项,第二项相比第一项是一个 O(1/N) 的小量,可以略去。因此

$$\overline{Z[\mathbf{j},\mathbf{j}]} = \int \mathcal{D}[\mathbf{x},\mathbf{x}] \exp \left\{ \mathbf{S} + \mathbf{j}^{\mathsf{T}}\mathbf{x} + \mathbf{j}^{\mathsf{T}}\mathbf{x} + \frac{1}{2} \iint dt dt' \left[\left(\sum_{i} \tilde{x}_{i}^{t} \tilde{x}_{i}^{t'} \right) \left(\frac{J^{2}}{N} \sum_{j} \phi_{i}^{t} \phi_{i}^{t'} \right) \right] \right\}$$
(8)

引入序参量

$$Q(t,t') = \frac{J^2}{N} \sum_{i} \phi_i^t \phi_i^{t'}$$
(9)

可以得到

 $\overline{Z[j,j]}$

$$= \int \mathcal{D}Q \,\delta\left(-\frac{N}{J^2}Q(t,t') + \sum_{j} \phi_i^t \,\phi_i^{t'}\right) \int \mathcal{D}[\mathbf{x},\mathbf{x}] \,\exp\left(\mathbf{S} + \mathbf{j}^\top \mathbf{x} + \mathbf{j}^\top \mathbf{x}\right)$$

$$\times \exp\left\{\frac{1}{2}\iint \mathrm{d}t \,\mathrm{d}t' \left[\left(\sum_{i} \tilde{x}_i^t \tilde{x}_i^{t'}\right) \left(\frac{J^2}{N} \sum_{j} \phi_i^t \phi_i^{t'}\right)\right]\right\}$$

$$(10a)$$

$$= \int \mathcal{D}[Q,\widehat{Q}] \exp \left\{ \iint \mathrm{d}t \mathrm{d}t' \, \widehat{Q}(t,t') \left[-\frac{N}{J^2} Q(t,t') + \sum_j \, \phi_i^t \, \phi_i^{t'} \right] \right\}$$

$$\times \int \mathcal{D}[\mathbf{x}, \mathbf{x}] \exp \left\{ \mathbf{S} + \mathbf{j}^{\mathsf{T}} \mathbf{x} + \mathbf{j}^{\mathsf{T}} \mathbf{x} + \frac{1}{2} \iint dt dt' \, Q(t, t') \sum_{i} \tilde{x}_{i}^{t} \, \tilde{x}_{i}^{t'} \right\}$$
(10b)

$$= \int \mathcal{D}[Q, \widehat{Q}] \exp\left(-\frac{N}{J^2} Q^{\top} \widehat{Q}\right) \int \mathcal{D}[\mathbf{x}, \mathbf{x}] \exp\left(\mathbf{S} + \mathbf{j}^{\top} \mathbf{x} + \mathbf{j}^{\top} \mathbf{x} + \frac{1}{2} (\mathbf{x}^t)^{\top} Q \mathbf{x}_{t'} + (\phi^t)^{\top} \widehat{Q} \phi^{t'}\right)$$
(10c)

注意到式 (10c) 的第二项积分中已经将不同神经元解耦,可以将其写为

$$N \ln Z[j, \tilde{j}; Q, \widehat{Q}] = \sum_{i} \ln \int \mathcal{D}[\tilde{x}_i, x_i] \exp \left(S_i + j_i^{\mathsf{T}} x_i + \tilde{j}_i^{\mathsf{T}} \tilde{x}_i + \frac{1}{2} (\tilde{x}_i^t)^{\mathsf{T}} Q \, \tilde{x}_i^{t'} + (\phi_i^t)^{\mathsf{T}} \widehat{Q} \, \phi_i^{t'} \right) \quad (11)$$

因此有

$$\overline{Z[j,\tilde{j}]} = \int \mathcal{D}[Q,\widehat{Q}] e^{N\mathcal{L}[j,\tilde{j};Q,\widehat{Q}]}$$
(12)

其中

$$\mathcal{L}[j,\tilde{j};Q,\widehat{Q}] = -\frac{N}{l^2} Q^{\top} \widehat{Q} + \ln Z[j,\tilde{j};Q,\widehat{Q}]$$
(13)

在 $N \to \infty$ 的极限下,利用 Laplace 方法可以求解式 (12) 中的积分

$$\overline{Z[j,\tilde{j}]} = e^{N\mathcal{L}[j,\tilde{j};Q^{\star},\widehat{Q}^{\star}]}$$
(14)

其中 Q* 和 Q* 满足鞍点方程

$$\frac{\delta \mathcal{L}}{\delta Q}\Big|_{\widehat{Q} = \widehat{Q}^{\star}} = -\frac{1}{I^2} \iint dt dt' \, \widehat{Q}^{\star} + \frac{1}{2} \iint dt dt' \Big\langle \widetilde{x}(t)\widetilde{x}(t') \Big\rangle_{\mathcal{L}} = 0$$
 (15a)

$$\frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \widehat{Q}} \Big|_{Q = Q^{\star}} = -\frac{1}{J^{2}} \iint dt dt' Q^{\star} + \iint dt dt' \Big\langle \phi \big(x(t) \big) \phi \big(x(t') \big) \Big\rangle_{\mathcal{L}} = 0$$
 (15b)

即

$$Q^{\star}(t,t') = J^2 \left\langle \phi(x(t))\phi(x(t')) \right\rangle_{\mathcal{L}} = J^2 C(t,t')$$
 (16a)

$$\widehat{Q}^{\star}(t,t') = \frac{J^2}{2} \left\langle \widetilde{x}(t)\widetilde{x}(t') \right\rangle_{\Gamma} = 0 \tag{16b}$$

其中 $\langle \bullet \rangle_{\mathcal{L}}$ 是对 \mathcal{L} 的最小值决定的 x 和 \hat{x} 的所有轨迹做平均:

$$\langle \bullet \rangle_{\mathcal{L}} = \frac{1}{Z[j, \tilde{j}; Q, \widehat{Q}]} \int \mathcal{D}[\mathbf{x}, \mathbf{x}] \bullet e^{\mathbf{S} + \mathbf{j}^{\mathsf{T}} \mathbf{x} + \frac{1}{2} (\mathbf{x}^{t})^{\mathsf{T}} Q \, \mathbf{x}_{t'} + (\phi^{t})^{\mathsf{T}} \widehat{Q} \, \phi^{t'}}$$
(17)

因此积分的结果为

$$\overline{Z[j,\tilde{j}]}$$

$$= \int \mathcal{D}[\mathbf{x}, \mathbf{x}] \exp\left\{\frac{1}{2} \sum_{i} \iint dt dt' \, Q^{\star} \tilde{x}_{i}^{t} \, \tilde{x}_{i}^{t'} + \sum_{i} \int dt \left[\tilde{x}_{i} (\partial_{t} + 1) x_{i} + \frac{g}{2} \tilde{x}_{i}^{2} + j_{i} x_{i} + \tilde{j}_{i} \tilde{x}_{i}\right]\right\}$$
(18a)
$$= \int \mathcal{D}[\mathbf{x}, \mathbf{x}] \exp\left\{\sum_{i} \int dt \left[\tilde{x}_{i} (\partial_{t} + 1) x_{i} + j_{i} x_{i} + \tilde{j}_{i} \tilde{x}_{i}\right] + \frac{1}{2} \sum_{i} \iint dt dt' \left(J^{2}C(t, t') + g\delta(t - t')\right) \tilde{x}_{i}^{t} \tilde{x}_{i}^{t'}\right\}$$
(18b)

式 (18b) 中的第一项对应动力学方程 $\partial_t x = -x$,第二项对应噪声项。因此 $\overline{Z[j,\tilde{j}]}$ 是动力学方程

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = -x + \xi(t) + \eta(t) \tag{19}$$

的生成泛函,其中 $\xi(t)$ 是高斯白噪声,另一个噪声项 η 满足

$$\langle \eta(t)\eta(t')\rangle = J^2C(t,t')$$
 (20)