6/3 第10回
KL-divergence とSanovのthm

<u>Motivation</u> KL-divergenceの自然さを知りたい

$\boxed{\text{one}}$

sanovのthmで自然に表れる

Sanovのthmの Settingを述べる(今回は多項分布の場合)

$\mathcal{P} := \{ q = (q_1, \cdots, q_r) \mid \sum q_i = 1, q_i \geq 0 \}$

$q = (q_1, \cdots, q_r) \in \mathcal{P}$ を fixし

$X_1, \cdots, X_n$ を$\{1, \cdots, r\}$ に値をとる確率分布q の独立な確率変数とする。(母集団分布という)

このとき $\#\{X_k = i\} = k_i \quad (1 \leq {}^\forall i \leq r)$ となる確率は $(\sum k_i = n)$

$\frac{n!}{k_1! \cdots k_r!} q_1^{k_1} \cdots q_r^{k_r}$ となる. $=: P(p_n = (\frac{k_1}{n}, \cdots, \frac{k_r}{n}))$

n回の試行で iがk_i回出たので

$p_n = (\frac{k_1}{n}, \cdots, \frac{k_r}{n})$ を経験分布という.

$\mathcal{P}_n := \{ (\frac{k_1}{n}, \cdots, \frac{k_r}{n}) \in \mathcal{P} \mid k_i \in \mathbb{Z}_{\geq 0} \}$

$D(p_n \| q) = \sum p_i \log \frac{p_i}{q_i}$ とする

($p_i = 0$ のときは0 $p_i \neq 0, q_i = 0$ のときは$-\infty$ とする

$P(p_n \in A) := \sum_{p \in \mathcal{P}_n \cap A} P(p_n = p)$ とする

真の分布qと経験分布pが近いことを示す。

Thm (Sanov)

(i) $A \subset \mathcal{P}$ が open なら
$$\liminf_{n\to\infty} \frac{1}{n}\log P(P_n \in A) \geq -\inf_{p\in A} D(p\|q)$$

(ii) $A \subset \mathcal{P}$ に対し
$$\limsup_{n\to\infty} \frac{1}{n}\log P(P_n \in A) \leq -\inf_{p\in A} D(p\|q)$$

(iii) $A \subset \mathcal{P}$ が $A^{\circ c} \supset A$ となる時
$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n}\log P(P_n \in A) = -\inf_{p\in A} D(p\|q)$$

解釈 ある程度よいAをとり, $q \in A$となれば
確率分布がpで近似できる
(左辺がnでboundされているため)
また指数関数的に(p, q)は近づく

lemma $\forall p \in \mathcal{P}_n$ に対し. $\frac{1}{(n+1)^r} e^{-nD(p\|q)} \leq P(P_n = p) \leq e^{-nD(p\|q)}$

$\Leftrightarrow \frac{1}{(n+1)^r} \leq \frac{n!}{k_1!\cdots k_r!} p_1^{k_1}\cdots p_r^{k_r} \leq 1$ を示せばよい (自明)

$1 = \sum_{l_1+\cdots+l_r=n} \frac{n!}{l_1!\cdots l_r!} p_1^{l_1}\cdots p_r^{l_r} \leq (n+1)^r \frac{n!}{k_1!\cdots k_r!} p_1^{k_1}\cdots p_r^{k_r}$

$\left(\frac{l_1!}{k_1!}\cdots\frac{l_r!}{k_r!} k_1^{k_1-l_1}\cdots k_r^{k_r-l_r} \geq 1 \text{ と } p_i = \frac{k_i}{n} \text{ より}\right)$ よってOK

proof of Sanov (i) Aがopenより、
$\forall x \in A, \forall r>0$ に対し $\exists N$, s.t. $\forall n \geq N$ $B(x,r) \cap \mathcal{P}_n \cap A \neq \phi$

よって $D(p\|q)$ は contより、
$\exists p_n \in \mathcal{P}_n \cap A$ で $\lim_{n\to\infty} D(p_n\|q) = \inf_{p\in A} D(p\|q)$ となる

(ii) $P(P_n \in A) = \sum_{p\in \mathcal{P}_n \cap A} P(P_n = p) \leq \sum_{p\in \mathcal{P}_n\cap A} e^{-nD(p\|q)} \leq (n+1)^r e^{-n\inf_{p\in A} D(p\|q)}$

よって $\frac{1}{n}\log P(P_n\in A) \leq -\inf D(p\|q) + \frac{r}{n}\log(n+1)$

より、$\limsup_{n\to\infty} \frac{1}{n}\log P(P_n\in A) \leq -\inf_{p\in A} D(p\|q)$

(iii) (i), (ii) から trivial

Sanovのthmの応用(カノニカル分布の導出)

$E = (E_1, \cdots, E_r) \in \mathbb{R}^r$

$E_1 = \cdots E_\alpha < E_{\alpha+1} \leq \cdots \leq E_{r-b} < E_{r-b+1} = \cdots = E_r$

E_i は状態 i のエネルギー

$Z(\beta) = \sum_{i=1}^{r} e^{-\beta E_i} q_i$ (分配関数)

$p(\beta) = \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta E_i} q_i$ (カノニカル分布)

$U(\beta) = \sum_{i=1}^{r} E_i\, p_i(\beta) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\log Z(\beta)$ (エネルギー期待値)

$$\frac{d}{d\beta^2}\log Z(\beta)=\frac{Z''(\beta)Z(\beta)-Z'(\beta)^2}{Z(\beta)^2}$$

$a_i := e^{\beta E_i}g_i$ とする. $a_1,\cdots,a_r \geq 0$ かつ $E_1 < E_r$ より

$Z''(\beta)Z(\beta)-Z'(\beta)^2=\frac{1}{2}\sum_{ij}(E_i-E_j)^2 a_i a_j > 0$ となる

よって$U(\beta)$は狭義単調減少になる

$P(0)=g$より, $U(0)=\sum_{i=1}^{r}E_i g_i$, $U(\infty)=E_1$, $U(-\infty)=E_r$ となる

p_nが $P(\beta)$に近づくことを示す!!

Setting

$$A=\begin{cases}\{p\in\mathcal{P} \mid U(\beta)-\alpha \leq \sum_{i=1}^{r}E_i p_i \leq U(\beta)\} & (\beta\geq 0)\\ \{p\in\mathcal{P} \mid U(\beta) \leq \sum_{i=1}^{r}E_i p_i \leq U(\beta)+\alpha\} & (\beta\leq 0)\end{cases}$$

$B=\{p\in\mathcal{P} \mid \|p-P(\beta)\|<\varepsilon\}$

Thm $\lim_{n\to\infty}P(P_n\in B \mid P_n\in A)\to 1$

$D(C\|g) := \inf_{p\in C}D(p\|g)$ とする

$P(P_n\in A)=\exp(-nD(A\|g)+o(n))$ (Sanovより)

$B' := B\setminus A$とする $P(P_n\in B' \mid P_n\in A)=\frac{P(P_n\in B')}{P(P_n\in A)}=\exp(-n(D(B'\|g)-D(A\|g))+o(n))$

これが$n\to\infty$で0に収束すればよい

とくに$D(B'\|g)-D(A\|g)>0$ といえればよい.

$D(p\|g)$が$P(\beta)$で唯一の最小の点をとることがいえればよい

$D(P(\beta)\|g)=-\beta U(\beta)-\log Z(\beta)$ …※となることを使う

$p\in A$より,

$$D(p\|g)=\sum_{i=1}^{r}p_i\log\left(\frac{p_i}{P_i(\beta)}\cdot\frac{P_i(\beta)}{g_i}\right)$$
$$=D(p\|P(\beta))+\sum_{i=1}^{r}p_i\log\frac{e^{-\beta E_i}}{Z(\beta)}$$
$$=D(p\|P(\beta))+\sum p_i(-\beta E_i-\log Z(\beta))$$

$= D(p \| p^{(B)}) + D(p^{(B)} \| q)$ (※より)

$\geq D(p^{(B)} \| q)$ となるので $p = p^{(B)}$ が最小となりいえた..