Langevin Dynamics の多項式エルゴード性

司馬 博文

7/05/2024

> ! Important
>
> - $n=1$ で $V(x)=\frac{x^2}{2}$ とした場合，
>
> $$E_x[G(X_t)]<\infty \quad\Leftrightarrow\quad t<-\frac{1}{2}\log\left(1-\frac{\beta}{\kappa}\right).$$
>
> - 次の連続性は？
>
> $$t\mapsto E_x\left[1_{[0,\tau_n]}(t)\hat{L}G(X_t)\right].$$
>
> これさえ言えれば，$\frac{\partial}{\partial t}P_tG=P_t\left(\hat{L}G\right)$ を得る．

$G=e^{\kappa V}$ の可積分性について

導入

Markov 過程 X に関するドリフト条件

$$\hat{L}V\le -C\varphi\circ V\qquad \mathrm{on}\mathbb{R}^n\setminus K$$

からは $V:E\to\mathbb{R}_+$ の可積分性が出る．

i 証明

上のドリフト条件を，[1] の最も弱い意味で解釈すると

$$M_t := V(X_t) + C\int_0^t \varphi \circ V(X_s)\,ds$$

が任意の $x \in E$ に関して P_x-局所優マルチンゲールである，ということになる．

これだけの仮定でも，V が下に有界であるために M_t も下に有界であり，下に有界な局所優マルチンゲールは（真の）優マルチンゲールであることから，

$$E_x\left[V(X_t) + C\int_0^t \varphi \circ V(X_s)\,ds\right] \le V(x).$$

加えて左辺が下に有界であることから，$E_x[V(X_t)] < \infty$ でないと矛盾が起こる．

しかし，lower bound を得たい場合，

$$\hat{L}V \le C\varphi \circ G \qquad \mathrm{on} \mathbb{R}^n$$

という情報のみから，

$$E_x[G(X_t)] \le g(x,t)(< \infty)$$

という評価を得る必要が出てくる．この場合,$E_x[G(X_t)] < \infty$ は非自明で，ケースバイケースの議論がであるようである．

Langevin 動力学の場合

An overdamped Langevin dynamics on $\mathbb{R}$ is defined as the solution to the following SDE:

$$dX_t = -\nabla V(X_t)\,dt + \sqrt{2\beta^{-1}}\,dB_t, \qquad X_0 = x_0.$$

If $V(x) = \frac{x^2}{2}$, X becomes an Ornstein-Uhlenbeck process. Transforming via $f(t,x) = xe^t$ and using Itô's formula, we get

$$X_t = x_0 e^{-t} + \sqrt{2\beta^{-1}} \int_0^t e^{-(t-s)}\, dB_s.$$

Hence, X is a Gaussian process with $X_t \sim \mathrm{N}\big(x_0 e^{-t}, \beta^{-1}(1 - e^{-2t})\big)$.

In this case, expectation with respect to $G(y) = e^{\kappa V(y)} = e^{\frac{\kappa y^2}{2}} (\kappa \in \mathbb{R})$ is given by

Taking a closer look at the numerator inside exp,

Therefore, we conclude

$$E_x[G(X_t)] < \infty \quad \Leftrightarrow \quad \kappa\beta^{-1}\big(1 - e^{-2t}\big) < 1.$$

In other words, $P_t G(x)$ is finite as long as

$$t < -\frac{1}{2} \log\left(1 - \frac{\beta}{\kappa}\right).$$

微分と拡張生成作用素の関係

まず極めて一般的な仮定で，次のことが言えそうである.

(X_t) を $E = \mathbb{R}^n$ 上の Feller-Dynkin 過程,(P_t) をその遷移半群,$\hat{L}$ をその拡張生成作用素とする.

> **命題**
>
> $G \in \mathcal{D}\left(\hat{L}\right)$ とする．すなわち，
>
> $$t \mapsto M_t := G(X_t) - \int_0^t \hat{L}G(X_s)ds$$
>
> は任意の $x \in E$ について P_x-局所マルチンゲールである．
>
> このとき，さらに G について次の条件を仮定する:
>
> 1. $E_x[\mid G(X_t) \mid] < \infty (x \in E, t \in \mathbb{R}_+)$．すなわち，$P_t G : E \to \mathbb{R}$ が定まる．
> 2. 同様に $E_x\left[\mid \hat{L}(G)(X_t) \mid\right] < \infty (x \in E, t \in \mathbb{R}_+)$．すなわち，$\hat{L} P_t G : E \to \mathbb{R}$ も定まる．[1]
> 3. 任意の $x \in E$ について，$t \mapsto P_t \hat{L} G(x)$ は連続．
>
> このとき，$P_t G(x)$ は t で連続微分可能であり，次が導ける:
>
> $$\frac{\partial}{\partial t} E_x[G(X_t)] = E_x\left[\hat{L}G(X_t)\right].$$

これは，通常の意味での生成作用素 L の性質

$$\frac{\partial}{\partial t} P_t G = P_t(LG)$$

が，可積分性の条件の下で，拡張生成作用素 $\hat{L}$ にも引き継がれると理解できる．

[1]元々はある正の定数 $C > 0$ が存在して，$\hat{L}G \leq CG$．ある凹関数 φ について $\hat{L}G \leq \varphi \circ G$ が成り立つならばこの仮定は満たされることに注意，としていた．

証明

局所マルチンゲール性の仮定から，還元する停止時の列 $\{{\tau_n}'\}$ が存在する：${\tau_n}' \nearrow \infty$a.s. かつ $M^{{\tau_n}'}$ はマルチンゲール．

これに対して，

$$\tau_n := \inf\{t \geq 0 \mid | G(X_t) | \geq n\} \wedge {\tau_n}'$$

と定めると，これもやはり還元する停止時の列である．特に，任意の $n \in \mathbb{N}$ について，M^{τ_n} はマルチンゲールで，

$$E_x\left[G\left(X_{t\wedge\tau_n}\right) - \int_0^{t\wedge\tau_n} \hat{L}G(X_s)ds\right] = G(x), \qquad t \geq 0, x \in E. \quad (1)$$

いま，$\left| G\left(X_{t\wedge\tau_n}\right) \right| \leq n$ であるから，[2] $E_x\left[\left| G\left(X_{t\wedge\tau_n}\right) \right|\right] < \infty$ かつ

$$E_x\left[\left|\int_0^{t\wedge\tau_n} \hat{L}G(X_s)ds\right|\right] \leq \int_0^t E_x\left[\left| \hat{L}G(X_s) \right|\right]ds \leq t \max_{s\in[0,t]} E_x\left[\left| \hat{L}G(X_s) \right|\right] < \infty.$$

である．仮定 2より $E_x\left[\hat{L}G(X_s)\right] < \infty$ であり，仮定 3より $s \mapsto E_x\left[\hat{L}G(X_s)\right]$ は連続であることを用いた．

よって，式 (Equation 1) は

$$E_x\left[G\left(X_{t\wedge\tau_n}\right)\right] = G(x) + E_x\left[\int_0^{t\wedge\tau_n} \hat{L}G(X_s)ds\right]$$

とも表せる．ここで，両辺を t に関して微分するが，

$$\Omega \times (0,\infty) \ni (\omega, t) \mapsto \int_0^{t\wedge\tau_n} \hat{L}G(X_s)ds$$

が任意の $t \in (0,\infty)$ について

1. P_x について可積分で，
2. 変数 t に関する偏微分係数も P_x について可積分

であるから，右辺は t で微分可能であり，さらに E_x と $\frac{\partial}{\partial t}$ とが交換できる：

$$G\left(X_{t\wedge\tau_n}\right)\right] = E_x\left[\frac{\partial}{\partial t}\int_0^{t\wedge\tau_n} \hat{L}G(X_s)ds\right] = E_x\left[1_{[0,\tau_n]}(t)\hat{L}G(X_t)\right], \qquad n \in \mathbb{N}, x \in E, t \in$$

Bibliography

[1] M. Hairer, “Convergence of Markov Processes”, 2021. [Online]. Available: https://www.hairer.org/notes/Convergence.pdf

[2] ここで，Markov 過程 (X_t) の見本道が càdlàg であることを使っている．