Langevin Dynamics の多項式エルゴード性

司馬 博文

7/05/2024

- $n=1$ で $V(x)=\frac{x^2}{2}$ とした場合，

$$\mathrm{E}_x[G(X_t)]<\infty \quad\Leftrightarrow\quad t<-\frac{1}{2}\log\left(1-\frac{\beta}{\kappa}\right).$$

- 次の連続性は？

$$t\mapsto \mathrm{E}_x\left[1_{[0,\tau_n]}(t)\widehat{L}G(X_t)\right].$$

これさえ言えれば，$\frac{\partial}{\partial t}P_tG=P_t(\widehat{L}G)$ を得る．

0.1　$G=e^{\kappa V}$ の可積分性について

0.1.1　導入

Markov 過程 X に関するドリフト条件

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

からは $V:E\to\mathbb{R}_+$ の可積分性が出る．

証明

上のドリフト条件を，(Hairer, 2021) 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，

$$\mathrm{E}_x\left[V(X_t)+C\int_0^t\varphi\circ V(X_s)\,ds\right]\le V(x).$$

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

しかし，lower bound を得たい場合，

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

という情報のみから，

$$\mathrm{E}_x[G(X_t)]\le g(x,t)\ (<\infty)$$

という評価を得る必要が出てくる．この場合，$\mathrm{E}_x[G(X_t)]<\infty$ 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．

0.1.2　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 $X_t \sim \mathrm{N}\left(x_0 e^{-t}, \beta^{-1}(1-e^{-2t})\right)$.

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

$$\begin{aligned}
\mathrm{E}_x[G(X_t)] &= \int_{\mathbb{R}} G(y) \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta^{-1}(1-e^{-2t})}} \exp\left(-\frac{(y - xe^{-t})^2}{2\beta^{-1}(1-e^{-2t})}\right) dy \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta^{-1}(1-e^{-2t})}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left(\frac{\kappa\beta^{-1}(1-e^{-2t})y^2 - (y - xe^{-t})^2}{2\beta^{-1}(1-e^{-2t})}\right) dy.
\end{aligned}$$

Taking a closer look at the numerator inside exp,

$$\begin{aligned}
&\kappa\beta^{-1}(1-e^{-2t})y^2 - (y - xe^{-t})^2 \\
&= y^2\left(\kappa\beta^{-1}(1-e^{-2t}) - 1\right) - 2xe^{-t}y + x^2 e^{-2t}.
\end{aligned}$$

Therefore, we conclude

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

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

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

0.2 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

$G \in \mathcal{D}(\hat{L})$ 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. $\mathrm{E}_x[|G(X_t)|] < \infty$ $(x \in E, t \in \mathbb{R}_+)$．すなわち，$P_t G : E \to \mathbb{R}$ が定まる．
2. 同様に $\mathrm{E}_x[|\hat{L}(G)(X_t)|] < \infty$ $(x \in E, t \in \mathbb{R}_+)$．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：

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{E}_x[G(X_t)] = \mathrm{E}_x[\hat{L}G(X_t)].$$

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，

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

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

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

である．仮定 2 より $\mathrm{E}_x[\widehat{L}G(X_s)] < \infty$ であり，仮定 3 より $s \mapsto \mathrm{E}_x[\widehat{L}G(X_s)]$ は連続であることを用いた．
よって，式 (1) は

$$\mathrm{E}_x\left[G(X_{t\wedge\tau_n})\right] = G(x) + \mathrm{E}_x\left[\int_0^{t\wedge\tau_n} \widehat{L}G(X_s)ds\right]$$

とも表せる．ここで，両辺を t に関して微分するが，

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

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：

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

これより，左辺の $\mathrm{E}_x[G(X_{t\wedge\tau_n})]$ も $t \in (0,\infty)$ に関して微分可能だったことがわかる．
両辺の $n \to \infty$ に関する極限を取ると，右辺は $|\widehat{L}G(X_t)|$ が P_x-可積分であるから（仮定 2），Lebesgue の優収束定理より，

$$\lim_{n\to\infty} \frac{\partial}{\partial t}\mathrm{E}_x[G(X_{t\wedge\tau_n})] = \mathrm{E}_x\left[\lim_{n\to\infty} 1_{[0,\tau_n]}(t)\widehat{L}G(X_t)\right] = \mathrm{E}_x[\widehat{L}G(X_t)], \qquad x \in E, t \in (0,\infty).$$

この収束は，$t \in (0,\infty)$ に関して広義一様に起こっている．^[$\mathrm{E}_x\left[1_{[0,\tau_n]}(t)\widehat{L}G(X_t)\right] \to \mathrm{E}_x[\widehat{L}G(X_t)]$ の収束が広義一様に起こるためである．

$$\begin{aligned}
&\sup_{t\in[0,T]}\left|\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{E}_x[G(X_{t\wedge\tau_n})] - \mathrm{E}_x[\widehat{L}G(X_t)]\right| \\
=& \sup_{t\in[0,T]}\left|\mathrm{E}_x[1_{[0,\tau_n]}(t)\widehat{L}G(X_t)] - \mathrm{E}_x[\widehat{L}G(X_t)]\right| \\
=& \sup_{t\in[0,T]}\left|\mathrm{E}_x\left[(1_{[0,\tau_n]}(t) - 1)\widehat{L}G(X_t)\right]\right| \\
\leq& \mathrm{E}_x\left[\sup_{t\in[0,T]}\left(1_{[0,\tau_n]}(t) - 1\right)\widehat{L}G(X_t)\right] \xrightarrow{n\to\infty} 0.
\end{aligned}$$

ここで $t \mapsto \widehat{L}G(X_t)$ の連続性を使った可能性がある．すなわち，拡散過程と $G \in C^2(E)$ に対する拡張生成作用素 $\widehat{L}$ の形の知識まで使った可能性がある．]
よって，あとは

$$t \mapsto \mathrm{E}_x\left[1_{[0,\tau_n]}(t)\widehat{L}G(X_t)\right]$$

が連続であることを示せば良い．

Hairer, M. (2021). *Convergence of markov processes*.

[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．