Langevin Dynamics の多項式エルゴード性

司馬 博文

7/05/2024

$\mathbb{R}^n$ 上の Langevin 拡散を考える：

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

ただし，

$$V(x) = O(|x|^{2k}) \qquad (|x| \to \infty)$$

の仮定をおく．$k \geq 1/2$ の場合，指数エルゴード的であるが，$k < 1/2$ の場合はそうではない．

$k \in (0, 1/2)$ の設定で，次が示したい：

$$C_1 \exp\left(c_1 V(x) - c_2 t^{\frac{k}{1-k}}\right) \leq \|P_t(x,-) - \mu_*\|_{\mathrm{TV}}$$

$$\mu_*(dx) \propto e^{-\beta V(x)} dx$$

1 $G = e^{\kappa V}$ の可積分性について

次元 $n = 1$ で考えてみる．
$V(x) = \frac{x^2}{2}$ とした場合，X は OU 過程になり，

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

$V(x) = \log x$ とした場合，X は Bessel 過程になり，

$$\mathrm{E}_x[G(X_t)] < \infty \qquad (\forall_{t>0}).$$

1.1 導入

Markov 過程 X に関するドリフト条件

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

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，

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

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，

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

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．

1.2 OU 過程の場合

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

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

Taking a closer look at the numerator inside exp,

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

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

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

1.3 Bessel 過程の場合

$V = a\log x$ ととると，$V'(x) = \frac{a}{x}$ であるから，これに関する Langevin 動力学は，$\beta = 1$ のとき，

$$dX_t = -\frac{a}{X_t}\,dt + dB_t$$

と，母数 a を持つ Bessel 過程になる．ただし，0 への到着時刻 T_0 で止めたもの X^{T_0} を考える．

> [@Lawler2019 p.10 命題 2.5]
>
> 母数 a を持つ Bessel 過程 X^{T_0} の密度を $q_t(x,y;a)$ で表す．このとき，
>
> $$q_t(x,y;1-a) = \left(\frac{y}{x}\right)^{1-2a} q_t(x,y;a)$$

$$q_t(x,y;a) = q_t(y,x;a)\left(\frac{y}{x}\right)^{2a}$$

$$q_{r^2t}(rx,ry;a) = \frac{1}{r}q_t(x,y;a)$$

加えて $a \geq \frac{1}{2}$ でもあるとき，

$$q_1(x,y;a) = y^{2a}\exp\left(-\frac{x^2+y^2}{2}\right)h_a(xy),$$

$$h_a(x) \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi}}x^{-a}e^x \qquad (|x| \to \infty)$$

この結果は (Lawler, 2019, p. 59) をみる限り，修正 Bessel 関数と，Bessel 過程の Fokker-Planck 方程式との考察によって証明されている．

$$G(y) = e^{\kappa V(y)} = e^{a\kappa \log(y)} = y^{a\kappa}$$

であるから，密度 $q_t(x,y;a)$ に対してはどうやっても可積分である．

1.4 $k < 1/2$ の場合の尾部確率

$k < 1/2$ で最も大きく変わる点は，

$$\nabla V(x) = O(|x|^{2k-1}) \qquad (|x| \to \infty)$$

であるために，∇V が $\mathbb{R}^n$ 上で有界になることである．

このため，一般に SDE

$$dZ_t = b(Z_t)\,dt + \sigma(X_t)\,dB_t$$

の密度が，任意の $T > 0$ に対して，ある $A_T, a_T > a$ と $y \in \mathbb{R}$ が存在して

$$\frac{1}{A_T\sqrt{2\pi t}}e^{-\frac{a_T|y-x|^2}{2t}} \leq p_t(x,y) \leq \frac{A_T}{\sqrt{2\pi t}}e^{-\frac{|y-x|^2}{2a_Tt}}$$

$$t \in (0,T]$$

が成り立つことが使える．[1]

これによれば，

$$G(x) = e^{\kappa V(x)} = O(e^{\kappa|x|^{2k}}) \quad (|x| \to \infty)$$

に対して p_t の尾部が勝つため，$P_tG(x) < \infty$ である．

2 微分と拡張生成作用素の関係

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．

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

[1](Kohatsu-Higa et al., 2022) で最初に知った．特に (Kohatsu-Higa, 2003) は詳しく扱っており，上からの評価は Malliavin 解析から得られる (Taniguchi, 1985). 同様にして熱方程式の基本解としても捉えられるが.

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，$P_tG:E\to\mathbb{R}$ 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，$\hat{L}P_tG:E\to\mathbb{R}$ も定まる．[2]
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，$P_tG(x)$ 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

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

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．

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，

$$\tau_n:=\inf\{t\ge0\mid|G(X_t)|\ge n\}\wedge\tau'_n$$

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，

$$\mathrm{E}_x\left[G(X_{t\wedge\tau_n})-\int_0^{t\wedge\tau_n}\hat{L}G(X_s)ds\right]=G(x),\qquad t\ge0,x\in E. \tag{1}$$

いま，$|G(X_{t\wedge\tau_n})|\le n$ であるから，[3] $\mathrm{E}_x[|G(X_{t\wedge\tau_n})|]<\infty$ かつ

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

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

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

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：

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

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 $|\hat{L}G(X_t)|$ が P_x-可積分であるから（仮定 2），Lebesgue の優収束定理より，

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

[2] 元々はある正の定数 $C>0$ が存在して，$\hat{L}G\le CG$．ある凹関数 φ について $\hat{L}G\le\varphi\circ G$ 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．

この収束は，$t \in (0,\infty)$ に関して広義一様に起こっている．[4]
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．

3　下界の導出

元来の目的である下界の導出のためには，

$$\mathrm{E}_x[G(X_t)] \le CG(x)\exp\left(ct^{\frac{k}{1-k}}\right)$$

という評価を得る必要がある．Gronwall の不等式を用いれば，導関数に関する不等式

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{E}_x[G(X_t)] \le \mathrm{E}_x[\widehat{L}G(X_t)] \le C\,\mathrm{E}_x[\varphi\circ G(X_t)]$$

があれば十分である．

しかし，これを得るためにも，前節で考えたような議論，特に

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{E}_x[G(X_{t\wedge\tau_n})] \xrightarrow{n\to\infty} \frac{\partial}{\partial t}\mathrm{E}_x[G(X_t)]$$

の広義一様収束が必要になる．

[@Rudin-Principles p.152 定理 7.17][a]

[a] [@杉浦光夫 1980 p.311] 定理 13.7 系では，f_n に C^1-級の仮定を置いている．

$f_n:[a,b]\to\mathbb{R}$ を可微分な関数列とし，ある関数 $f:[a,b]\to\mathbb{R}$ に各点収束するものとする．
仮に，導関数列 $\{f_n'\}$ が一様位相に関して Cauchy 列ならば，$f_n\to f$ も一様収束し，加えて f も可微分で，

$$\lim_{n\to\infty} f_n'(x) = f'(x)$$

が成り立つ．

いま，$\mathrm{E}_x[G(X_t)]<\infty$ の仮定から，Lebesgue の優収束定理より，

$$\mathrm{E}_x[G(X_{t\wedge\tau_n})] \to \mathrm{E}_x[G(X_t)]$$

である．加えて，導関数もある関数に一様収束する：

$$\lim_{n\to\infty}\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{E}_x[G(X_{t\wedge\tau_n})] = \mathrm{E}_x[\widehat{L}G(X_t)].$$

これより，$\mathrm{E}_x[G(X_t)]$ も可微分で，

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

が成り立つ．

---

[4] 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．

[4] $\mathrm{E}_x\left[1_{[0,\tau_n]}(t)\widehat{L}G(X_t)\right] \to \mathrm{E}_x[\widehat{L}G(X_t)]$ の収束が広義一様に起こるためである．

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

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．

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

Kohatsu-Higa, A. (2003). Lower bounds for densities of uniformly elliptic non-homogeneous diffusions. In E. Giné, C. Houdré, and D. Nualart, editors, *Stochastic inequalities and applications*, pages 323–338. Basel: Birkhäuser Basel.

Kohatsu-Higa, A., Nualart, E., and Tran, N. K. (2022). Density estimates for jump diffusion processes. *Applied Mathematics and Computation*, *420*, 126814.

Lawler, G. F. (2019). *Notes on the bessel process*.

Taniguchi, S. (1985). Applications of Malliavin's calculus to time-dependent systems of heat equations. *Osaka Journal of Mathematics*, *22*(2), 307–320.