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

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

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

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

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

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

[1] 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.

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

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.

i 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：${\tau_n}' \nearrow \infty \text{a.s.}$ 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，

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

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

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

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

よって，式（Equation 1）は

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

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：

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

これより，左辺の $E_x\Big[G\big(X_{t\wedge\tau_n}\big)\Big]$ 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，

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

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

ここで $t \mapsto \hat{L}G(X_t)$ 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 $\hat{L}$ の形の知識まで使った可能性がある．]

よって，あとは

$$t \mapsto E_x\left[1_{[0,\tau_n]}(t)\hat{L}G(X_t)\right]$$

が連続であることを示せば良い．

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.