

Langevin Dynamics の多項式エルゴード性

Ergodic Lower Bounds

司馬博文

7/05/2024

Abstract

目標分布の裾が重ければ重いほど、Langevin 拡散過程の収束は遅くなる。本記事ではその様子を、平衡分布との全変動距離について、定量的に評価する。

\mathbb{R}^n 上の Langevin 拡散を考える：

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

ただし、

$$V(x) = O(|x|^{2k}) \quad (|x| \rightarrow \infty)$$

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、次の ergodic lower bound を示したい：

$$C_1 \exp\left(c_1 V(x) - c_2 t^{\frac{k}{1-k}}\right) \leq \|P_t(x, -) - \mu_*\|_{TV} \quad (2)$$

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

この lower bound から、 $k \in (0, 1/2)$ の場合、Langevin 過程 X が指数エルゴード的たり得ないことが従う。

式 (2) を示すためには、 $G(x) := e^{\kappa V(x)}$ ($\kappa \in \mathbb{R}$) に対して、

$$\mathbb{E}_x[G(X_t)] \leq g(x, t)$$

を満たす関数 g を見つける必要がある (Hairer, 2021, pp. 34–35).

これは次の 3 ステップを辿る

1. そもそも $\mathbb{E}_x[G(X_t)] < \infty$ であることの証明 (第 1 節).
2. G に関するドリフト条件 $P_t \hat{L} G \leq C \varphi \circ G$ から、 $\mathbb{E}_x[G(X_t)]$ の t に関する微分不等式を導く (第 2 節).
3. 微分不等式から、Gronwall の補題より、結論を得る (第 3 節).

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、

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

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

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

$k \in (0, 1/2)$ の場合、 ∇V が有界であることに注目すれば、Bessel 過程の場合と同様に

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

1.1 はじめに

Markov 過程 X に関するドリフト条件

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

からは $V : E \rightarrow \mathbb{R}_+$ の可積分性が出る：

$$\mathbb{E}_x[V(X_t)] < \infty \quad t \geq 0.$$

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,

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

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

しかし, lower bound を得たい場合,

$$\hat{L}V \leq C\varphi \circ G \quad \text{on } \mathbb{R}^n \quad (3)$$

という情報のみから,

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

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

1.2 OU 過程の場合

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

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

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

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

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

Taking a closer look at the numerator inside exp,

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

Therefore, we conclude

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

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

$V = a \log x$ とすると, $V'(x) = \frac{a}{x}$ 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,

$$q_t(x, y; 1 - a) = \left(\frac{y}{x}\right)^{1-2a} q_t(x, y; a)$$

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

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

加えて $a \geq \frac{1}{2}$ でもあるとき,

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

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

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 $q_t(x, y; a)$ に対してはどうしても可積分である.

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,

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

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

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

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

が成り立つことが使える.¹

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.

これによれば,

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

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

1.5 $k < 1/2$ の場合の G の可積分性

$k < 1/2$ の場合, 式 (1) のドリフト係数が有界になる. このことから, G の可積分性が, X_t の密度の考察に依らず次のように導ける.

$$M := \max_{x \in \mathbb{R}^n} \nabla V(x)$$

と定める. $V(x) = O(|x|^{2k})$ ($|x| \rightarrow \infty$) より, ある $C > 0$ が存在して,

$$V(x) \leq C|x|^{2k} \quad \text{on } \mathbb{R}^n.$$

$$\begin{aligned} |X_t| &\leq \int_0^t |\nabla V(X_s)| ds + \sqrt{2\beta^{-1}}|B_t| \\ &\leq Mt + \sqrt{2\beta^{-1}}|B_t| \end{aligned}$$

より,

$$\begin{aligned} E_x[|G(X_t)|] &\leq E_x \left[e^{\kappa V(|X_t|)} \right] \\ &\leq E_x \left[\exp \left(\kappa V(Mt + \sqrt{2\beta^{-1}}|B_t|) \right) \right] \\ &\leq e^{\kappa Mt^{2k}} E_x \left[e^{\kappa 2^k \beta^{-k} |B_t|^{2k}} \right] < \infty. \end{aligned}$$

2 微分と拡張生成作用素の関係

(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 2

$G \in \mathcal{D}(\hat{L})$ 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. $E_x[|G(X_t)|] < \infty$ ($x \in E, t \in \mathbb{R}_+$). すなわち, $P_t G : E \rightarrow \mathbb{R}$ が定まる.
2. 同様に $E_x[|\hat{L}G(X_t)|] < \infty$ ($x \in E, t \in \mathbb{R}_+$). すなわち, $\hat{L}P_t G : E \rightarrow \mathbb{R}$ も定まる.²
3. $t \mapsto P_t \hat{L}G(x)$ は局所有界.

このとき, $P_t G(x)$ は t で微分可能であり, 次が導ける:

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

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.

²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

仮定より, 停止時の列 $\tau_n \nearrow \infty$ a.s. が存在し, 任意の $n \in \mathbb{N}$ について, M^{τ_n} はマルチンゲールで,

$$\mathbb{E}_x \left[G(X_{t \wedge \tau_n}) - \int_0^{t \wedge \tau_n} \hat{L}G(X_s) ds \right] = G(x), \quad t \geq 0, x \in E. \quad (4)$$

仮定 1 より $\mathbb{E}_x[|G(X_{t \wedge \tau_n})|] < \infty$ であるから,

$$\mathbb{E}_x \left[\left| \int_0^{t \wedge \tau_n} \hat{L}G(X_s) ds \right| \right] < \infty.$$

でもある. 従って Fubini-Tonelli の定理から

$$\mathbb{E}_x \left[\left| \int_0^{t \wedge \tau_n} \hat{L}G(X_s) ds \right| \right] = \int_0^t \mathbb{E}_x \left[1_{[0, \tau_n]}(s) |\hat{L}G(X_s)| \right] ds$$

と書き換えられる.

よって, 式 (4) は

$$\mathbb{E}_x \left[G(X_{t \wedge \tau_n}) \right] = G(x) + \int_0^t \mathbb{E}_x \left[1_{[0, \tau_n]}(s) \hat{L}G(X_s) \right] ds$$

とも表せる. 右辺が t について微分可能であるから, 左辺も微分可能である:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbb{E}_x \left[G(X_{t \wedge \tau_n}) \right] = \mathbb{E}_x \left[1_{[0, \tau_n]}(t) \hat{L}G(X_t) \right].$$

両辺の $n \rightarrow \infty$ 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,

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

加えてこの収束は, $t \in (0, \infty)$ に関して広義一様に起こる. 実際, Hölder の不等式より,³

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

最後の不等式にて, 仮定 3 による局所有界性

$$\sup_{t \in [0, T]} \mathbb{E}_x [|\hat{L}G(X_t)|] < \infty$$

を用いた.

この導関数の一様収束と, Lebesgue の優収束定理による各点収束

$$\mathbb{E}_x [G(X_{t \wedge \tau_n})] \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}_x [G(X_t)]$$

を併せると, $\mathbb{E}_x [G(X_t)]$ も可微分で, その導関数は極限

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbb{E}_x [G(X_t)] = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial t} \mathbb{E}_x [G(X_{t \wedge \tau_n})] = \mathbb{E}_x [\hat{L}G(X_t)]$$

として得られることが結論づけられる.

[@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、この場合は f が C^1 -級になることを導いている。

$f_n : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ を可微分な関数列とし、ある関数 $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ 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、 $f_n \rightarrow f$ も一様収束し、加えて f も可微分で、

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f'_n(x) = f'(x)$$

が成り立つ。

3 下界の導出

元来の目的である下界の導出のためには、

$$\mathbb{E}_x[G(X_t)] \leq C G(x) \exp\left(ct^{\frac{k}{1-k}}\right)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbb{E}_x[G(X_t)] \leq \mathbb{E}_x[\hat{L}G(X_t)] \leq C \mathbb{E}_x[\varphi \circ G(X_t)]$$

があれば十分である。この導関数に関する不等式は、命題 2 とドリフト条件 (3)

$$\hat{L}G \leq C \varphi \circ G$$

を併せることで、

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbb{E}_x[G(X_t)] = \mathbb{E}_x[\hat{L}G(X_t)] \leq C \mathbb{E}_x[\varphi \circ G(X_t)]$$

より得る。

参考文献

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 besell process*.

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

³ $\sup_{t \in [0, T]} \hat{L}G(X_t)$ は可積分とは限らないため、 \sup を期待値の中に入れることはできない。Hölder の不等式により、これを迂回できる。