

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,

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

- 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, $\frac{\partial}{\partial t} P_t G = P_t(\hat{L}G)$ 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

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

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

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,

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

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,

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

という情報のみから,

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

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

Langevin 動力学の場合

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

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

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

Taking a closer look at the numerator inside exp,

Therefore, we conclude

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

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

$G \in \mathcal{D}(\hat{L})$ 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。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：

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

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, $\hat{L}G \leq CG$. 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。

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

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： $\tau_n' \nearrow \infty$ 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、

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

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

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

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

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

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：

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

これより、左辺の $E_x[G(X_{t \wedge \tau_n})]$ 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 $n \rightarrow \infty$ 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、

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

この収束は、 $t \in (0, \infty)$ に関して広義一様に起こっている. $^{\wedge}[E_x[1_{[0, \tau_n]}(t) \hat{L}G(X_t)] \rightarrow E_x[\hat{L}G(X_t)]$ 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.