

マルコフ連鎖入門 第8回

永幡幸生
新潟大学

nagahata@eng.niigata-u.ac.jp

2021 第 1 学期

自然に f の平均、分散を

$$E[f] = E_\mu[f] = \sum_x f(x)\mu_x, \quad V[f] = V_\mu[f] = E_\mu[(f - E_\mu[f])^2]$$

と定義する。さらに μ に対称な L に対して Dirichlet 形式 D を 2 次形式として

$$D[f] = D_\mu[f] = E_\mu[f(-L)f]$$

と定義する。

問題

$Lf(x) = \sum_y C_{x,y}(f(y) - f(x))$ で与えられる L が μ に関して対称であるときに

$$D[f] = \frac{1}{2} \sum_{x,y} E_\mu[C_{x,y}(f(y) - f(x))^2]$$

と書けることを示せ。

Markov 連鎖

これらを行列の言葉で書くには重み付き内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle_\mu$ を使い、関数 f から自然にベクトル $f = {}^t(f_1, \dots, f_n)$ を $f_1 = f(x_1)$ で書けば

$$E[f] = \langle 1, f \rangle_\mu = \langle f, 1 \rangle_\mu, \quad V[f] = \langle f, f \rangle_\mu, \quad D[f] = \langle f, (-L)f \rangle_\mu$$

と書ける。ただし $1 = {}^t(1, \dots, 1)$ であり L も表現行列を通して行列になっているものとしている。

命題 (スペクトルギャップの変分表現)

L のスペクトルギャップ λ は

$$\lambda = \inf \left\{ \frac{D[f]}{V[f]} \mid E[f] = 0 \right\}$$

で与えられる。

証明

行列表現を用いると、

$$E[f] = \langle 1, f \rangle_{\mu} = \mu f$$

と書ける。ベクトル μ は P の最大固有値 1 の左固有ベクトルであり $-L$ の最小固有値 0 に対する左固有ベクトルでもある。すなわち $\mu f = E[f] = 0$ を満たすということは f は $-L$ の最小固有値に対する固有ベクトルの直交補空間に属していることを意味する。従ってこの $\inf$ を使って書き表される λ は第 2 固有値を表している。□

スペクトルギャップに関していろいろと書いてきたが、実際に L が与えられた時にスペクトルギャップを正確に求めることは非常に困難である。

確率過程のスケール極限を考える上では (状態空間も変化するが) 推移確率行列の族 $\{P_n\}_n$ が与えられている、もしくは線形作用素の族 $\{L_n\}_n$ が与えられている時にこれらのスペクトルギャップのオーダーの評価が必要になる。

本講義ではこの路線に沿った方向の解析を行なう。

命題 (ポアンカレの不等式)

$B(r)$ を $\mathbb{R}^d$ の半径 r の球とする。このとき次元 d だけに依存する定数 $C = C_d$ が存在して任意の $u \in C^1(B(r))$ に対して

$$\int_{B(r)} \left| u(x) - \frac{1}{|B(r)|} \int_{B(r)} u(y) dy \right|^2 dx \leq Cr^2 \int_{B(r)} |Du(x)|^2 dx$$

が成立する。

問題

この命題を証明せよ。($d = 1$ だけでもよい)

簡単のため $d = 1$ とし、 $B(r) = [-r, r]$ とする。この命題 (ポアンカレの不等式) において $u \in C^2$ とすると部分積分を用いることで

$$\int_{-r}^r |u'(x)|^2 dx = [u(x)u'(x)]_{x=-r}^r - \int_{-r}^r u(x)u''(x) dx$$

と書けるので端点 $r, -r$ で $u(x)$ もしくは $u'(x)$ が無視できる状況 (ディリクレ、ノイマン境界条件) の下ではポアンカレの不等式は

$$\int_{B(r)} \left| u(x) - \frac{1}{|B(r)|} \int_{B(r)} u(y) dy \right|^2 dx \leq Cr^2 \int_{B(r)} u(x)(-\Delta u)(x) dx$$

と書いても構わない。

確率論では $(B(r)$ 上の) ブラウン運動は重要であるが、元の Markov 過程の話と対応させると定常分布が $B(r)$ 上の一様分布、 $L = \Delta$ (もしくは $L = \frac{1}{2}\Delta$) を生成作用素とすることが知られている。

先のページの最後に与えた不等式を両辺 $|B(r)|$ で割ると左辺側が $V[u]$ 、右辺側が $Cr^2 D[u]$ に対応しているすなわち

$$V[u] \leq Cr^2 D[u]$$

をいつでも満たしていることが分かる。これをスペクトルギャップの変分表現に代入することで

$$\lambda = \inf \left\{ \frac{D[f]}{V[f]} \mid E[f] = 0 \right\} \geq \frac{1}{Cr^2}$$

すなわちスペクトルギャップの下からの評価を与えたことになる。

一方再び変分表現で $f(x) = x^3$ を代入することで

$$\lambda \leq \frac{D[x^3]}{V[x^3]} \leq \frac{\frac{12}{5}r^5}{\frac{2}{7}r^7} \leq \frac{C'}{r^2}$$

と同じ $1/r^2$ のオーダーで与えられることが分かる。
またブラウン運動のスケーリング法則として

命題 (ブラウン運動のスケーリング)

$B = (B_t)_{t \geq 0}$ を $B_0 = 0$ とするブラウン運動とすると、有限次元分布の意味で

$$(B_t)_t = (\alpha B_{\alpha^2 t})_t$$

が良く知られているがこの時間と空間のスケーリング (α^2, α) はスペクトルギャップのオーダーから決まっていると思える。(他の確率過程を時間と空間のスケーリングをした時にブラウン運動へ収束することが多いが、このスケーリングの関係がスペクトルギャップのオーダーから決まっていると思える。)

命題 (スペクトルギャップの変分表現) があるので、スペクトルギャップの上からの評価は比較的容易にできる。(多くの場合は f の候補がすぐにあがる。)

下からの評価は一般的には難しいが、ポアンカレの不等式の形で

$$V[f] \leq CD[f]$$

と書いた時に全ての f に対してこの不等式を満たす最小の C がスペクトルギャップになり、 $-\Delta$ に対するポアンカレの不等式の証明のように Cauchy Schwarz の不等式と Dirichlet 形式の比較をうまく利用することで (定数はうまく出ないが) 証明できることが多い。

問題

X, Y を独立同分布の確率変数とする。このとき

$$V[f] = V[f(X)] = \frac{1}{2}E[(f(X) - f(Y))^2]$$

を示せ。

Markov 連鎖

完全グラフ上のランダムウォーク

$S = \{1, 2, \dots, n\}$ として推移確率行列 P を

$$P_{i,j} = \frac{1}{n}, \quad \forall i, j$$

とおくと $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_n)$ を $\mu_i = 1/n, \forall i$ としたものが定常分布になり明らかに P は μ 対称である。なおこの推移確率行列で与えられる Markov 連鎖は完全グラフ上のランダムウォークと考えられる。

命題 (完全グラフ上の RW のスペクトルギャップ)

上で与えた P のスペクトルギャップは 1 である。

証明

先の問題を使えば

$$\begin{aligned} V[f] &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (f(i) - f(j))^2 \frac{1}{n^2} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{1}{n} (f(i) - f(j))^2 \frac{1}{n} = D[f] \end{aligned}$$

よりスペクトルギャップは 1 になる。



注意：もっと単純に P の固有値は 1 と 0 で 0 が $(n-1)$ 重根になっていることがすぐに分かる。

ランダムウォーク

S を変えずに推移確率行列を

$$P_{i,j} = \begin{cases} \frac{1}{2} & |i-j| = 1, i=j=1 \text{ または } i=j=n \\ 0 & \text{その他} \end{cases}$$

とおくと先ほどと同様に $\mu_i = 1/n, \forall i$ としたものが定常分布になり明らかに P は μ 対称である。なおこの推移確率行列は (通常の) 1次元ランダムウォークと考えられる。

命題 (完全グラフ上の RW のスペクトルギャップ)

上で与えた P のスペクトルギャップは $O(1/n^2)$ である。

注意: 実際は第2固有関数は三角関数 $\cos(\frac{\pi}{n-1}(x-1))$ と分かっているので定数まで込めて計算可能

証明

上からの評価

$f(x) = x$ とすれば

$$E[f] = \frac{n+1}{2}, \quad E[f^2] = \frac{(n+1)(2n+1)}{6},$$

$$D[f] = \sum_{i,j} P_{i,j} (f(j) - f(i))^2 \mu_i = \sum_{i=2}^n 1^2 \frac{1}{n} = \frac{n-1}{n}$$

従って

$$\lambda \leq \frac{D[f]}{V[f]} = \frac{12}{n^2} + O(1/n^3)$$

下からの評価

完全グラフの時と同じ式からはじめる。すなわち (少し和の書き方を変えてあるが)

$$\begin{aligned} V[f] &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (f(i) - f(j))^2 \frac{1}{n^2} \\ &= \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{1}{n} (f(j) - f(i))^2 \frac{1}{n} \end{aligned}$$

であるが $j \geq i$ なので

$$f(j) - f(i) = \sum_{k=i+1}^j f(k) - f(k-1)$$

と書ける。

さらにこれに Cauchy Schwarz の不等式を適用することで

$$\{f(j) - f(i)\}^2 \leq (j - i) \sum_{k=i+1}^j \{f(k) - f(k-1)\}^2$$

を代入し、和の順序交換をすることで

$$\begin{aligned} V[f] &\leq \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{1}{n} (j - i) \sum_{k=i+1}^j \{f(k) - f(k-1)\}^2 \frac{1}{n} \\ &= \sum_{k=2}^n \{f(k) - f(k-1)\}^2 \sum_{i=1}^k \sum_{j=k+1}^n (j - i) \frac{1}{n} \frac{1}{n} \\ &\leq \sum_{k=2}^n \{f(k) - f(k-1)\}^2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (n) \frac{1}{n} \frac{1}{n} = n^2 D[f] \end{aligned}$$

全ての関数に対して成り立っているので

$$\lambda \geq \frac{1}{n^2}$$

が分かる。



下からの評価に関して

下からの評価に関しては、分散 $V[f]$ をうまく式変形して行き Dirichlet 形式 $D[f]$ で評価したと見えるが、次のように 2 つの部分に分けて考える。

- (1) 完全グラフのスペクトルギャップの (下からの) 評価
- (2) 完全グラフのランダムウォークに対応する Dirichlet 形式 $D_m[f]$ と本来考えているランダムウォークに対応する Dirichlet 形式 $D[f]$ の比較、評価

このように考えると (ある程度) 見通しはよい。一方で今回の場合は (1) が等号で示せたのでよかったが、多くの場合 (1) (2) 共に Cauchy Schwarz の不等式を (本質的に) 適用していることになり、等号成立条件の関数が (1) (2) で異なってしまい、結果的にオーダーの意味でもよい評価が出せないことはあり得る。