数理解析研究所講究録
第1952巻 2015年 69-72



# Metastability of reversible random walks in potential fields

角田 謙吉

## 1 Introduction

本稿では、2014年12月16日から19日に行われた研究集会「確率論シンポジウム」における講演内容をもとに、著者が行った「Metastability of reversible random walks in potential fields」についての概要を述べる。定理などの証明は概略程度に留めるため、詳細については Landim、Misturini、Tsunoda[6] を参照されたい。

本稿ではポテンシャル下における対称なランダムウォークの準安定性について考える。準安定性の問題は古くから考えられており、その起源は少なくとも Kramers[5] まで戻る。ランダムな摂動付きの力学系に対する研究としては Fredlin と Wentzell による研究 [4] が有名であるが、より最近、Bovier、Eckhoff、Gayrard、Klein によりポテンシャル理論に基づく研究 [1, 2, 3] もされてきた。本講演ではポテンシャル場の極小点の近傍から出発するランダムウォークが、適切な時間スケール変換の下でポテンシャルより決まるあるグラフ上のマルコフ連鎖にある意味で収束することについて説明する。本稿の研究内容は IMPA の Claudio Landim 氏と Richardo Misturini 氏との共同研究に基づく。

## 2 Model and Result

初めにポテンシャルについて説明する。$\Xi$ を $\mathbb{R}^d$ の有界な開集合とし、$\partial\Xi$ をその境界とする。$\partial\Xi$ は滑らかな多様体である事を仮定する。$F:\Xi\cup\partial\Xi\to\mathbb{R}$ を有限個の臨界点をもつ二階連続微分可能な関数であって次の四つの条件を満たすものとする。

(H1) $F$ の二階偏導関数は全て Lipschitz 連続である。

(H2) $F$ の極小点における Hessian の固有値は全て正である。

(H3) $F$ の鞍点における Hessian の固有値は一つが負であり、残りは全て正である。1次元の場合は $F$ の極大点における二階微分が負である事を仮定する。$z$ における $F$ の唯一の負の固有値を $\mu(z)$ とかく。

(H4) $\boldsymbol{n}(\boldsymbol{x})$ を $\boldsymbol{x}$ の $\partial\Xi$ における単位法線ベクトルとし、$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}$ で $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^d$ のユークリッド内積を表すとする。この時全ての $\boldsymbol{x}\in\partial\Xi$ に対して、$(\nabla F)(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{n}(\boldsymbol{x})<0$ である。

Graduate School of Mathematical Sciences, The University of Tokyo, Komaba, Tokyo 153-8914, Japan.
e-mail: tsunoda@ms.u-tokyo.ac.jp

次に我々のモデルであるポテンシャル下におけるランダムウォークを導入しよう. $N \geq 1$ に対して $\Xi_N$ を $\Xi$ の離散化格子とする、つまり $\Xi_N := \Xi \cap (N^{-1}\mathbb{Z}^d)$ とする。ここで $N^{-1}\mathbb{Z}^d = \{\boldsymbol{k}/N : \boldsymbol{k} \in \mathbb{Z}^d\}$ である。$\Xi_N$ の元は $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ といった記号で表すことにする。

$\{X_N(t) : t \geq 0\}$ を以下で定義される生成作用素 $L_N$ を持つ $\Xi_N$ 上の連続時間マルコフ連鎖とする:

$$(L_N f)(\boldsymbol{x}) \;=\; \sum_{\substack{\boldsymbol{y} \in \Xi_N \\ \|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}\|=1/N}} e^{-(1/2)N[F(\boldsymbol{y})-F(\boldsymbol{x})]}\,[f(\boldsymbol{y}) - f(\boldsymbol{x})]\,,$$

ここで $\|\cdot\|$ は $\mathbb{R}^d$ のユークリッドノルムとする。更に $\Xi_N$ 上の確率測度 $\mu_N$ を次で定義する:

$$\mu_N(\boldsymbol{x}) \;=\; \frac{1}{Z_N} e^{-NF(\boldsymbol{x})}\,, \quad \boldsymbol{x} \in \Xi_N\,,$$

ここで $Z_N$ は正規化定数である、つまり $Z_N = \sum_{\boldsymbol{x}\in\Xi_N} \exp\{-NF(\boldsymbol{x})\}$ である。先に定義した生成作用素 $L_N$ により与えられる時間発展に対して、確率測度 $\mu_N$ は対称な不変測度になっている事に注意したい。

ポテンシャル下におけるランダムウォーク $\{X_N(t) : t \geq 0\}$ に対して対称な不変測度 $\mu_N$ は $N \to \infty$ の極限においてポテンシャル $F$ の極小点に集中している事が用意に示される。我々の興味はこのランダムウォークの動的な振る舞いであり、特に極小点から極小点への力学について調べる事である。このような問題は準安定性の問題として、様々なモデルにおいて古くから研究されている。標語的には我々は次のような結果を得た:

**Theorem 2.1.** ポテンシャル場の極小点の近傍から出発するランダムウォークは、時間に関する適切なスケール変換の下で、ポテンシャルより決まるあるグラフ上のマルコフ連鎖に収束する。

## 3 Sketch of the proof of Theorem 2.1

この節では Theorem 2.1 の証明の概略について述べる。説明の簡単の為、与えられたポテンシャルにより

$$\Xi = W_1 \cup \cdots \cup W_l$$

と well による分解が与えられており、更にポテンシャル $F$ の鞍点における値は全て等しいと仮定する。実際、我々の仮定 (H1) - (H4) の下ではこの場合に Theorem 2.1 を示す事に帰着される。詳しくは Landim、Misturini、Tsunoda[6] を参照されたい。

$H$ を $F$ の鞍点における値とし、各 $1 \leq a \leq l$ に対し、$\{\boldsymbol{m}_{a,1}, \cdots, \boldsymbol{m}_{a,q}\}$、$q = q_a$、を $F$ の $W_a$ における最小点全体の集合とする。つまり、

$$\{\boldsymbol{m}_{a,1}, \cdots, \boldsymbol{m}_{a,q}\} = \{\boldsymbol{y} \in W_a : F(\boldsymbol{y}) = \min\{F(\boldsymbol{y}') : \boldsymbol{y}' \in W_a\}\}$$

である。今、$S = \{1, \ldots, l\}$ とし、$S$ 上の関数 $\boldsymbol{\mu}$ を

$$\boldsymbol{\mu}(a) = \sum_{k=1}^{q_a} \frac{1}{\sqrt{det\ Hess\ F(\boldsymbol{m}_{a,k})}}$$

により定義する。ここで $Hess\ F(\boldsymbol{x})$ は $F$ の $\boldsymbol{x}$ におけるヘッセ行列を表すとし、$det\ Hess\ F(\boldsymbol{x})$ はその行列式を表すとする。この $\boldsymbol{\mu}$ を用いると各 $W_a$ の不変測度による値 $\mu_N(W_a)$ を表示する事が出来る。実際、後に述べる Lemma 3.3 と同様な計算により

$$\lim_{N\to\infty}\frac{e^{NF(\boldsymbol{m}_{a,1})}}{(2\pi N)^{d/2}}\mu_N(W_a)=\boldsymbol{\mu}(a)$$

となる事が確認される。

Theorem 2.1 を示す際鍵となる補題を述べる為に、capacity を導入する。$\Xi_N$ の部分集合 $A$ に対して、$H_A$ 及び $H_A^+$ をそれぞれ集合 $A$ への到達時刻と再到達時刻とする:

$$\begin{aligned}H_A&:=\inf\{t>0:X_N(t)\in A\},\\ H_A^+&:=\inf\{t>0:X_N(t)\in A, X_N(s)\neq X_N(0)\text{ for some }0<s<t\}.\end{aligned}$$

$\Xi_N$ の互いに交わらない部分集合 $A,B$ に対して、$cap_N(A,B)$ を

$$cap_N(A,B)=\sum_{\boldsymbol{x}}\mu_N(\boldsymbol{x})\lambda_N(\boldsymbol{x})\mathbf{P}_{\boldsymbol{x}}[H_B<H_A^+]$$

により定義する。ここで、

$$R_N(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\begin{cases}e^{-(1/2)[F(\boldsymbol{y})-F(\boldsymbol{x})]} & \boldsymbol{y}\in\Xi_N,\ \|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}\|=1/N\\ 0 & \text{otherwise}\end{cases}$$

$$\lambda_N(\boldsymbol{x})=\sum_{\substack{\boldsymbol{y}\in\Xi_N\\ \|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}\|=1/N}}R_N(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$$

である。また $S$ の部分集合 $A$ に対して、$\mathcal{E}_N(A):=\cup_{a\in A}W_a$ と定義する。

Theorem 2.1 の証明の為には次の二つの補題を示す事が本質的になる。

**Lemma 3.1.** $A$ を $S$ の真部分集合とし、このとき、

$$\lim_{N\to\infty}\frac{Z_N}{(2\pi N)^{d/2}}2\pi Ne^{NH}cap_N(\mathcal{E}_N(A),\mathcal{E}_N(A^c))=\sum_{\boldsymbol{z}\in\mathcal{S}(A)}\frac{\mu(\boldsymbol{z})}{\sqrt{-det\ Hess\ F(\boldsymbol{z})}}\tag{3.1}$$

が成立する。ここで $\mathcal{S}(A)$ は $\mathcal{E}_N(A)$ と $\mathcal{E}_N(A^c)$ を分離する鞍点全体の集合である。

**Lemma 3.2.** 各 $a\in S$ に対し

$$\lim_{N\to\infty}\sup_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{E}_N^a}\frac{cap_N(\mathcal{E}_N^a,\cup_{b\in S\setminus\{a\}}\mathcal{E}_N^b)}{cap_N(\{\boldsymbol{y}\},\{\boldsymbol{m}_{a,1}\})}=0$$

が成立する。

Lemma 3.1 と Lemma 3.2 を用いると、時間について適切にスケール変換されたたランダムウォークにより決まる跡過程に付随するマルチンゲールの収束を示す事が出来る。また極限のマルコフ過程の飛躍率は、次に述べる補題と (3.1) の右辺の式から決まる量により決定される。これらの事実により Theorem 2.1 は示される。

**Lemma 3.3.** $\{\boldsymbol{m}_1, \cdots, \boldsymbol{m}_r\}$ を $F$ の Ξ における最小点全体の集合とする。このとき、

$$\lim_{N\to\infty} \frac{e^{NF(\boldsymbol{m}_1)}}{(2\pi N)^{d/2}} Z_N = \sum_{k=1}^{r} \frac{1}{\sqrt{det\ Hess\ F(\boldsymbol{m}_k)}}$$

が成立する。

# 参考文献


[1] A. Bovier, M. Eckhoff, V. Gayrard, M. Klein: Metastability in stochastic dynamics of disordered mean field models. Probab. Theory Relat. Fields **119**, 99-161 (2001).

[2] A. Bovier, M. Eckhoff, V. Gayrard, M. Klein: Metastability and low-lying spectra in reversible Markov chains. Comm. Math. Phys. **228**, 219–255 (2002).

[3] A. Bovier, M. Eckhoff, V. Gayrard, M. Klein: Metastability in reversible diffusion processes. I. Sharp asymptotics for capacities and exit times. J. Eur. Math. Soc. **6**, 399–424 (2004).

[4] M. I. Freidlin, A. D. Wentzell: Random perturbations of dynamical systems. Translated from the 1979 Russian original by Joseph Szücs. Second edition. Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften [Fundamental Principles of Mathematical Sciences], 260. Springer-Verlag, New York, 1998.

[5] H. A. Kramers: Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions. Physica **7**, 284–304 (1940)

[6] C. Landim, R. Misturini, K. Tsunoda: Metastability of reversible random walks in potential fields. preprint, http://arxiv.org/abs/1408.6704.