シミュレーテッドアニーリングと
スペクトルギャップを用いた収束の評価

東北大学大学院 理学研究科 数学専攻
小山田　亮太

平成 20 年 1 月 30 日

目 次

第1章　序文

本論文では, ある空間上の複雑な関数に対し, その最小値を取る点を, 時間非一様なマルコフ過程を構成することにより確率的に探し出す手法, **シミューレーテッドアニーリング**について述べる. 最小値を与える点の集合を**大域的最適解**という. 現時点での状態よりも小さい値をとる近傍の点に推移する決定論的なアルゴリズムを考えると, 極小値をとる点に滞在し続けてしまう可能性がある. シミュレーテッドアニーリングは, ランダム性を持たせるためにより大きい値をとる状態への推移もある確率で許すが, その確率を時間に関する単調増加関数で制御することにより, 大域的な情報の詮索を可能にしている. 単調増加関数が早く増大するほど, 極小値に陥る可能性が高くなってしまう. このことに注意しながら, できるだけ早くマルコフ過程が大域的最適解に収束するような単調増加関数をみつけることが求められる.

$\mathbf{E}$ を有限集合, U を $\mathbf{E}$ 上の実数値関数とする. 各点で正の値をとる $\mathbf{E}$ 上の確率測度 μ_0 と, μ_0 を可逆分布に持つ既約なマルコフ核を $q_0(x,y)$ とする. 可逆とは任意の $x,y \in \mathbf{E}$ に対して, $q_0(x,y)\mu_0(x) = q_0(y,x)\mu_0(y)$ が成り立つことをいう. ここで μ_0, q_0 の取り方は U に依存しないものとする. 任意の $\beta \geq 0$ に対して,

$$\mu_\beta(x) := \frac{e^{-\beta U(x)}}{Z_\beta}\mu_0(x) \tag{1.1}$$

とおく. Z_β は μ_β の全測度を 1 とするような規格化定数である. また任意の $\beta \geq 0, x, y \in \mathbf{E}$ に対して,

$$q_\beta(x,y) = \begin{cases} \exp\{-\beta(U(y)-U(x))^+\}q_0(x,y) & (\ y \neq x) \\ 1 - \sum_{z\neq x} q_\beta(x,z) & (\ y = x) \end{cases}$$

でマルコフ核を定義する. ここで, $(x)^+ := \max\{x, 0\}$ である. このとき $q_\beta(x,y)$ は μ_β を可逆分布に持つ. $\mathbf{E}$ 上の実数値関数 ϕ に対して, 作用素 $\mathbf{L}_\beta$ を

$$\mathbf{L}_\beta\phi(x) = \sum_{y\in\mathbf{E}}(\phi(y)-\phi(x))q_\beta(x,y)$$

で定義する. $\beta(0) = 0, \lim_{t\to\infty}\beta(t) = \infty$ を満たす滑らかな単調増加関数 $\beta(t)$ に対し, $\mathbf{L}_{\beta(t)}$ を生成作用素とする時間非一様なマルコフ過程 $\{X_t\}_{t\geq 0}$ を**シミュレーテッドアニーリング過程**という.

そもそも**アニーリング**とは融解状態まで熱した金属を徐々に冷却することにより, 内部のひずみを取り除き, しなやかな金属を精製する手法のことである. 金属を徐々に冷却することにより, 分子の配列エネルギーが低い状態で安定させることができる. 一方, 融解状態にある金属を急速に冷却した場合, 金属分子の配列エネルギーが高い状態のまま安定してしまう. ある空間上の関数の最小値を探し出すことを最適化問題といい, シミュレーテッドアニーリングは, アニーリングという物理現象をヒントにして作られた最適化問題を解く確率的アルゴリズムである. 冷却する早さを表現する関数 $\beta(t)$ を**クーリングスケジュール**という. アニーリングにおいて $\beta(t)$ は時刻 $t \geq 0$ における温度の逆数, U はエネルギーに対応しており, 式 (1.1) で与えられる測度は**ギブス測度**と呼ばれる. 関数 $\beta(t)$ は少なくとも,

(i) $\beta(0) = 0$ (時刻 0 では融解状態)

(ii) $\lim_{t\to\infty} \beta(t) = \infty$ (配列が変わらなくなるまで冷却)

(iii) 単調増加 (再加熱することはない)

(iv) 滑らか (急激に冷却することはない)

を満たすようなものとする. 集合 $\mathbf{E}_0 = \{x \in \mathbf{E} : U(x) = \inf U\}$ で大域的最適解の集合を記す. また $x \in \mathbf{E}$ の近傍を $N_x = \{y \in \mathbf{E} : q_0(x, y) > 0\} \cup \{x\}$ とするとき, 集合 $\{x \in \mathbf{E} : U(x) = \inf_{y \in N_x} U(y)\} \cap \mathbf{E}_0^c$ の元を局所最適解という. すなわち, 極小値を与える点であって, 大域的最適解でない点の集合である. 上で述べたような決定論的なアルゴリズムの多くが局所最適解に陥る可能性を持つという欠点を持っている. 一方, シミュレーテッドアニーリングはクーリングスケジュール $\beta(t)$ を適切に取れば, 大域的最適解を得ることができる.

シミュレーテッドアニーリング過程 $\{X_t\}_{t\geq 0}$ は以下のようなアルゴリズムで推移している.

1. (クーリング)
   推移の待ち時間は平均 1 の指数分布に従っており, それに従って生成処理を行う時刻 t を決定する. その時のクーリングスケジュールは $\beta(t)$ である.

2. (生成処理)
   状態 x にいた時に次の行き先 y を分布 $q_0(x, \cdot)$ に従って選択する.

3. (受理判定)
   もし $U(y) \leq U(x)$(改善方向への推移) ならば確率 1 で y に推移する.
   逆に $U(y) > U(x)$(改悪方向への推移) ならば確率 $\exp(-\beta(t)(U(y) - U(x)))$ で y に推移する. それ以外は x にとどまるとする. 受理判定後クーリングに戻る.

受理判定により, 時間が経過するにつれ悪い方向 (エネルギーの高い状態) へ推移しにくくなるが, その確率が 0 ではないことが, 局所最適解へ陥ることを防ぐ要因となっている.

シミュレーテッドアニーリング過程 $\{X_t\}_{t\geq 0}$ の大域的最適解への収束をいかに保証するかを述べる. X_t の分布の $\mu_{\beta(t)}$ に関するラドン・ニコディム密度を f_t とおく. ただし X_t の初期分布は任意にとって固定する. ある $q>1$ が存在して $f_t \in L^q(\mu_{\beta(t)})$ ならば,

$$\mathbf{P}(X_t \in \mathbf{E}_0^c) \leq \|f_t\|_{L^q(\mu_{\beta(t)})} \cdot \mu_{\beta(t)}(\mathbf{E}_0^c)^{1-\frac{1}{q}}$$

が成り立つ. 式 (1.1) より $\lim_{t\to\infty} \mu_{\beta(t)}(\mathbf{E}_0^c) = 0$ がわかるので, ある定数 $C_q, T_q > 0$ が存在して, 任意の $t \geq T_q$ に対して, $\|f_t\|_{L^q(\mu_{\beta(t)})} < C_q$ を満たすように $\beta(t)$ を構成することができれば, 十分大きな時刻 t に対して X_t は大域的最適解に十分大きな確率でいることになる. また $\beta(t)$ が早く増大するほど, q が大きいほど $\mu_{\beta(t)}(\mathbf{E}_0^c)^{1-\frac{1}{q}}$ は早く 0 に収束するので, 良い評価を得ることになる. 以下 $\|f_t\|_{L^q(\mu_{\beta(t)})}$ を評価する方法と結果について述べる.

$\mathbf{L}_\beta$ の生成する**ディリクレ形式** $\mathcal{E}_\beta$ と**スペクトルギャップ** $\gamma(\beta)$ を,

$$\mathcal{E}_\beta(\phi,\psi) = -\int \phi \mathbf{L}_\beta \psi d\mu_\beta, \quad \gamma(\beta) = \inf\left\{\frac{\mathcal{E}_\beta(\phi,\phi)}{\mathrm{Var}_\beta(\phi)} : \mathrm{Var}_\beta(\phi) \neq 0\right\}.$$

で定義する. ここで $\mathrm{Var}_\beta(\phi) = \int (\phi - \langle\phi\rangle_{\mu_\beta})^2 d\mu_\beta, \langle\phi\rangle_{\mu_\beta} = \int \phi d\mu_\beta$ であり, それぞれ ϕ の確率測度 μ_β に関する分散と平均を表している. スペクトルギャップについて評価できているとき, 以下の結果が知られている.

定理 1.1 (Holley-Stroock)**.** スペクトルギャップ $\gamma(\beta)$ が $ce^{-\beta m} \leq \gamma(\beta), \beta \geq 0$ を満たしているとする. このとき, 任意の正の実数 ε に対して, $\beta(t) = (m+\varepsilon)^{-1}\log(1+t)$ とおくと, $K_\varepsilon > 0$ が存在し,

$$\|f_t\|_{L^\infty(\mu_{\beta(t)})} \leq K_\varepsilon, \quad t \geq e^{2/\varepsilon} \tag{1.2}$$

が成り立つ.

$q=\infty$ で $\|f_t\|_{L^\infty(\mu_{\beta(t)})} \leq K_\varepsilon$ を満たすような早く増大するクーリングスケジュールが取れたので, 確率 $\mathbf{P}(X_t \in \mathbf{E}_0^c)$ の良い評価を与えている事がわかる.

$\mathbf{E}$ が可算集合の場合にもシミュレーテッドアニーリングを考えることができる. そのときは, 大域的最適解 $\mathbf{E}_0$ ではなく, 正の実数 δ に対して δ **近似解**と呼ばれる,

$$\mathbf{E}_\delta := \{x \in \mathbf{E} : U(x) < \min_{x\in\mathbf{E}} U(x) + \delta\}$$

に収束するシミュレーテッドアニーリング過程を構成する. $q(0)=2, \lim_{t\to\infty} q(t) = \infty$ を満たす滑らかな単調増加関数 $q(t)$ に対して, $\|f_t\|_{L^{q(t)}(\mu_{\beta(t)})}$ を評価する際には**対数ソボレフ不等式**と呼ばれる,

$$\int \phi^2 \log\left(\frac{\phi}{\|\phi\|_{L^2(\mu_\beta)}}\right)^2 d\mu_\beta \leq \alpha(\beta)\mathcal{E}_\beta(\phi,\phi)$$

を用いる．$\alpha(\beta)$ を**対数ソボレフ定数**といい，もしある自然数 k が存在して $\alpha(\beta) \leq A(1+\beta)^k e^{\beta m}$ が任意の $\beta \geq 0$ で成り立っていたとき，以下の結果が知られている．

定理 1.2 (Holley-Stroock)**.** 対数ソボレフ定数 $\alpha(\beta)$ が，$\alpha(\beta) \leq A(1+\beta)^k e^{\beta m}, \beta \geq 0$ を満たしているとする．このとき，$B(\beta) = A\int_0^\beta (1+\xi)^{k+3} e^{\xi m} d\xi$ とし $\beta(t) = B^{-1}(t)$ とすると，

$$\mathbf{P}(X_t \in \mathbf{E}_\delta^c) \leq \|f_0\|_{L^2(\mu_0)} \cdot e^{2M^2} (\mu_{\beta(t)}(\mathbf{E}_\delta^c))^{\frac{\beta(t)-1}{\beta(t)+1}}$$

が任意の $t \geq 0$ で成り立つ．ここで $M := \sup_{x\in\mathbf{E}} U(x) - \inf_{x\in\mathbf{E}} U(x)$ である．

以上の結果から，クーリングスケジュールを構成するうえで，スペクトルギャップ，対数ソボレフ定数の評価が重要になる．本修士論文では，これらの評価法とクーリングスケジュールの構成方法を参考文献 [1] に従って整理した．

最後に本論文の構成を述べる．2 章では可算集合上の時間一様なマルコフ連鎖について基本的な事実をまとめた．3 章では可算集合 $\mathbf{E}$ 上のシミュレーテッドアニーリングを構成し，スペクトルギャップの評価から $\|f_t\|_{L^q(\mu_{\beta(t)})}$ を評価する方法を述べている．また式 (1.2) を満たすのに必要な仮定を述べている．4 章では $\mathbf{E}$ を有限集合とし，スペクトルギャップの良い評価と定理 1.1 の証明を述べている．5 章では定理 1.2 の証明と $\alpha(\beta)$ を評価するふたつの方法を述べている．

謝辞

本修士論文を執筆するにあたり，指導教官の竹田 雅好先生には４年セミナーや院セミナー等で熱心なご指導を頂きました．また，東北確率論セミナーを通じ服部 哲弥先生，針谷 祐先生には貴重な御意見を頂きました．この場を借りて厚く御礼申し上げます．先輩の土田 兼治さん，田原 喜宏さんには有益な助言を多数頂くと共に，公私にわたりお世話になりました．たいへん有り難う御座いました．同輩の甲斐 崇君には，セミナーを含め議論に多数お付き合い頂きました．深く感謝申し上げます．

最後に，本人の希望を受け入れ，勉強する環境を与えていただいた，父，母に心からの感謝申し上げます．

第2章　時間一様なマルコフ連鎖

本稿における議論にあたり, 必要な基礎概念について述べる.

2.1　連続時間マルコフ連鎖の構成

$\mathbf{E}$ を可算集合とする.

定義 2.1. $K : \mathbf{E} \times \mathbf{E} \to \mathbf{R}$ が,

(i) $K(x,y) \geq 0 \qquad x, y \in \mathbf{E}.$

(ii) $\displaystyle\sum_{y \in \mathbf{E}} K(x,y) = 1 \qquad x \in \mathbf{E}.$

を満たすとき, K を $\mathbf{E}$ 上の**マルコフ核**という.

$\mathbf{E}$ 上の実数値関数 ϕ に対して, $K\phi(x) = \sum_{y \in \mathbf{E}} \phi(y)K(x,y)$ とする. また, I を恒等作用素とする.

定理 2.2 ([8, Theorem 2.8.3])**.** K を $\mathbf{E}$ 上のマルコフ核とする. このとき, **後退方程式**

$$P_t' = (K - I)P_t, \quad P_0 = I \tag{2.1}$$

の最小非負解 $\{P_t\}_{t \geq 0}$ が存在する. この解は半群性を満たす.

半群性とは, 任意の $t, s \geq 0$ に対して $P_s P_t = P_{s+t}$ が成り立つことをいう. $\{P_t\}_{t \geq 0}$ を**マルコフ半群**という.

定理 2.3 ([8, Theorem 2.8.6])**.** K を $\mathbf{E}$ 上のマルコフ核とする. 式 (2.1) で与えられる後退方程式の最小非負解 $\{P_t\}_{t \geq 0}$ は**前進方程式**

$$P_t' = P_t(K - I), \quad P_0 = I$$

の最小非負解でもある.

$P_t = \{p_t(x,y)\}_{x,y\in\mathbf{E}}$ とする．マルコフ核 K から作られる $\mathbf{E}$ 上の時間一様マルコフ連鎖 $\{X_t\}_{t\geq 0}$ は, 任意の時間列 $0 \leq t_0 \leq t_1 \leq \cdots \leq t_n$ と任意の点列 $x_0, x_1, \ldots, x_n$ に対して,

$$\mathbf{P}(X_{t_n} = x_n | X_{t_0} = x_0, \ldots X_{t_{n-1}} = x_{n-1}) = p_{t_n - t_{n-1}}(x_{n-1}, x_n)$$

が成り立つ.

もし $\mathbf{E}$ が有限集合ならば P_t を決定することができる.

定理 2.4 ([8, Theorem 2.1.1])**.** $\mathbf{E}$ を有限集合, K を $\mathbf{E}$ 上のマルコフ核とする．このとき,

$$P_t = e^{t(K-I)} := e^{-t}\sum_{k=i}^{\infty}\frac{t^i K^i}{i!}$$

とすると P_t は以下の性質を満たす.

(i) $P_{s+t} = P_s P_t$.

(ii) P_t は以下で表される前進方程式の一意解である.

$$\frac{d}{dt}P_t = P_t(K-I), \quad P_0 = I.$$

(iii) P_t は以下で表される後退方程式の一意解である.

$$\frac{d}{dt}P_t = (K-I)P_t, \quad P_0 = I.$$

定義 2.5. K を $\mathbf{E}$ 上のマルコフ核とする．任意の $x, y \in \mathbf{E}$ に対して $K^i(x,y) > 0$ を満たすある自然数 i が存在するとき, K は**既約**であるという.

ここで K^i は $K^i(x,y) := \sum_{z\in\mathbf{E}} K^{i-1}(z,y)K(x,z)$ によって帰納的に定義される.

2.2 定常分布

定義 2.6. K を $\mathbf{E}$ 上のマルコフ核とする．$\mathbf{E}$ 上の確率測度 π が任意の $y \in E$ に対して,

$$\sum_{x\in E}\pi(x)K(x,y) = \pi(y)$$

を満たすとき, π を K の**定常分布**という.

定義 2.7. K を $\mathbf{E}$ 上のマルコフ核とする．E 上の確率測度 π が任意の $x, y \in \mathbf{E}$ に対して,

$$\pi(x)K(x,y) = \pi(y)K(y,x)$$

を満たすとき, π を K の**可逆分布**という.

命題 2.8. K を $\mathbf{E}$ 上のマルコフ核, π を $\mathbf{E}$ 上の確率測度とする．π が K の可逆分布ならば, 定常分布となる.

2.3 ディリクレ形式

各点で正の値をとる $\mathbf{E}$ 上の確率測度を π とし, π を可逆分布に持つ既約なマルコフ核を K とする. $\mathbf{E}$ 上の実数値関数 ϕ に対して, π に関する平均 $\langle\phi\rangle_\pi$ と分散 $\mathrm{Var}_\pi(\phi)$ を,

$$\langle\phi\rangle_\pi = \sum_{x\in\mathbf{E}} \phi(x)\pi(x), \quad \mathrm{Var}_\pi(\phi) = \sum_{x\in\mathbf{E}} (\phi(x) - \langle\phi\rangle_\pi)^2\pi(x)$$

と定義する. また $p \geq 1$ としたとき, π に関して p 乗可積分な関数空間を $L^p(\pi)$ とし, その上のノルムを

$$\|\phi\|_{L^p(\pi)} = \left(\sum_{x\in\mathbf{E}} |\phi(x)|^p\pi(x)\right)^{1/p}$$

と記し, $L^2(\pi)$ 内積 $(\cdot,\cdot)_\pi$ を $(\phi,\psi)_\pi = \sum_{x\in\mathbf{E}} \phi(x)\psi(x)\pi(x)$ とする.

定義 2.9. $\mathcal{D}(\mathcal{E}_\pi) := \{\phi \in L^2(\pi) : \lim_{t\to 0} \frac{1}{t}(\phi - P_t\phi, \phi)_\pi < \infty\}$ としたとき, $\phi, \psi \in \mathcal{D}(\mathcal{E}_\pi)$ に対して二次形式

$$\mathcal{E}_\pi(\phi,\psi) = \lim_{t\to 0} \frac{1}{t}(\phi - P_t\phi, \psi)_\pi$$

を定義する. このとき $(\mathcal{E}_\pi, \mathcal{D}(\mathcal{E}_\pi))$ を (K,π) に対応した**ディリクレ形式 (Dirichlet form)** という.

ディリクレ形式は次の補題を満たす.

補題 2.10. ディリクレ形式 $\mathcal{E}_\pi$ は $\phi,\psi \in \mathcal{D}(\mathcal{E}_\pi)$ に対して次を満たす.

(i) $\mathcal{E}_\pi(\phi,\psi) = \dfrac{1}{2}\displaystyle\sum_{x,y\in\mathbf{E}} (\phi(x)-\phi(y))(\psi(x)-\psi(y))K(x,y)\pi(x)$

(ii) $\dfrac{\partial}{\partial t}\|P_t\phi\|^2_{L^2(\pi)} = -2\mathcal{E}_\pi(P_t\phi, P_t\phi)$

2.4 スペクトルギャップと収束の評価

この節ではスペクトルギャップと呼ばれる解析的な量が可逆なマルコフ半群の収束の速さを与えていることについて述べる.

定義 2.11. $\mathcal{E}_\pi$ をディリクレ形式とする. このとき

$$\gamma_\pi := \inf\left\{\frac{\mathcal{E}_\pi(\phi,\phi)}{\mathrm{Var}_\pi(\phi)} : \mathrm{Var}_\pi(\phi) \neq 0\right\}$$

を**スペクトルギャップ (spectral gap)** という.

補題 2.12 ([6, Lemma 2.1.4])**.** γ_π をスペクトルギャップ, P_t をマルコフ半群とする**.** このとき任意の $t \geq 0, \phi \in L^2(\pi)$ に対して,

$$\|P_t\phi - \langle\phi\rangle_\pi\|^2_{L^2(\pi)} \leq e^{-2\gamma_\pi t}\mathrm{Var}_\pi(\phi)$$

が成り立つ.

証明 . $\mathrm{Var}_\pi(P_t\phi)$ を t の関数とみて, $u(t)$ とおくと,

$$u(t) = \|P_t\phi - \langle P_t\phi\rangle_\pi\|^2_{L^2(\pi)} = \|P_t(\phi - \langle\phi\rangle_\pi)\|^2_{L^2(\pi)}$$

が成り立つ. 補題 2.10 の (ii) より,

$$u'(t) = -2\mathcal{E}_\pi(P_t(\phi - \langle\phi\rangle_\pi), P_t(\phi - \langle\phi\rangle_\pi)) \leq -2\gamma_\pi u(t)$$

がわかる. 以上より $u(t) \leq e^{-2\gamma_\pi t}u(0)$ を満たし，また $u(0) = \mathrm{Var}_\pi(\phi)$ であるから補題が示される. □

系 2.13 ([6, Corollary 2.1.5])**.** γ_π をスペクトルギャップ, P_t をマルコフ半群とする**.** このとき任意の $t \geq 0, x, y \in \mathbf{E}$ に対して,

$$|P_t(x,y) - \pi(y)| \leq \sqrt{\frac{\pi(y)}{\pi(x)}}e^{-\gamma_\pi t}$$

が成り立つ.

証明 . $x \in E$ に対して,

$$\delta_x(y) = \begin{cases} \pi(x)^{-1} & (\ y = x) \\ 0 & (\ y \neq x) \end{cases}$$

とおく. P_t は π に関して可逆であるから, 任意の $x, y \in \mathbf{E}$ に対して,

$$\frac{P_t(x,y)}{\pi(y)} = \frac{P_t(y,x)}{\pi(x)} = P_t\delta_x(y)$$

が成り立つ. $\pi(\delta_x) = 1$ に注意すると, 補題 2.12 より,

$$\|P_t\delta_x - 1\|^2_{L^2(\pi)} \leq e^{-2\gamma_\pi t}\mathrm{Var}_\pi(\delta_x)$$

が成り立つ. また $\mathrm{Var}_\pi(\delta_x) = \dfrac{1-\pi(x)}{\pi(x)}$ であるから，シュワルツの不等式より,

$$\begin{aligned}
\left|\frac{P_t(x,y)}{\pi(y)} - 1\right| &\leq \left|\sum_{z\in\mathbf{E}}\left(\frac{P_{\frac{t}{2}}(x,z)}{\pi(z)} - 1\right)\left(\frac{P_{\frac{t}{2}}(z,y)}{\pi(y)} - 1\right)\pi(z)\right| \\
&\leq \|P_{\frac{t}{2}}\delta_x - 1\|^2_{L^2(\pi)}\|P_{\frac{t}{2}}\delta_y - 1\|^2_{L^2(\pi)} \\
&\leq \frac{1}{\sqrt{\pi(x)\pi(y)}}e^{-\gamma_\pi t}
\end{aligned}$$

が成り立つ．両辺に $\pi(y)$ をかけることで題意が示される. □

第3章　シミュレーテッドアニーリング

3.1　シミュレーテッドアニーリング過程の構成

$\mathbf{E}$ を可算集合, U を $\mathbf{E}$ 上の実数値関数とする. μ_0 を任意の $x \in \mathbf{E}$ に対して $\mu_0(x) > 0$ を満たす E 上の確率測度とし, $q_0(x, y)$ を μ_0 を可逆分布に持つ既約なマルコフ核とする. 各 $\beta \geq 0$ に対して,

$$\mu_\beta(x) := \frac{e^{-\beta U(x)}}{Z_\beta}\mu_0(x)$$

とする. ここで $Z_\beta := \int e^{-\beta U} d\mu_0$ であり, μ_β の全測度を 1 とするような規格化定数である. 測度 μ_β は β の逆数を温度とした**ギブス測度 (Gibbs measure)** に対応している. 各 $\beta \geq 0$ に対してマルコフ核 $q_\beta(x, y)$ を,

$$q_\beta(x, y) := \begin{cases} \exp(-\beta(U(y) - U(x))^+)q_0(x, y) & (\ y \neq x) \\ 1 - \sum\limits_{z \neq x} q_\beta(x, z) & (\ y = x) \end{cases}$$

とする. ここで, $(x)^+ := \max\{x, 0\}$ である. $\alpha(x, y) := q_0(x, y)\mu_0(x)$ とすると,

$$q_\beta(x, y)\mu_\beta(x) = \frac{1}{Z_\beta}e^{-\beta(U(x) \vee U(y))}\alpha(x, y) \tag{3.1}$$

であるから q_β は μ_β を可逆分布に持つ. ここで $x \vee y := \max\{x, y\}$ である. $\mathbf{E}$ 上の実数値関数 ϕ に対して作用素 Q_β を $Q_\beta\phi(x) := \sum_{y \in \mathbf{E}} \phi(y)q_\beta(x, y)$ とする. このとき, 作用素 $\mathbf{L}_\beta$ を $\mathbf{L}_\beta = -(I - Q_\beta)$ で定義する. ここで I は恒等作用素である. つまり作用素 $\mathbf{L}_\beta$ は $\mathbf{E}$ 上の実数値関数 ϕ に対して,

$$\mathbf{L}_\beta\phi(x) = \sum_{y \in \mathbf{E}} (\phi(y) - \phi(x))q_\beta(x, y)$$

を満たす. $\beta(0) = 0, \lim\limits_{t \to \infty} \beta(t) = \infty$ を満たす滑らかな $\beta(t)$ に対し, $\mathbf{L}_{\beta(t)}$ から生成されるマルコフ過程 $\{X_t\}_{t \geq 0}$ を**シミュレーテッドアニーリング過程 (Simulated Annealing Process)** という. シミュレーテッドアニーリング過程の推移確率 $P_{s,t}(x, y)$ は以下の偏微分方程式の解で与えられている.

$$\frac{\partial}{\partial t}P_{s,t}(x, y) = [\mathbf{L}^*_{\beta(t)}P_{s,t}(x, \cdot)](x), \quad t \geq s. \tag{3.2}$$

$$P_{s,s} = I.$$

式 (3.2) の意味は $\mathbf{E}$ 上の実数値関数 ϕ を用いると,

$$\frac{\partial}{\partial t}[P_{s,t}\phi](x) = [P_{s,t}\mathbf{L}_{\beta(t)}\phi](x), \quad t \geq s \tag{3.3}$$

と表現することができる. ここで $[P_{s,t}\phi](x) := \sum_{y\in\mathbf{E}} \phi(y)P_{s,t}(x,y)$ である. この偏微分方程式は**前進方程式 (forward equation)** と呼ばれ, 解の存在と一意性は保証されている. 有限集合上の時間一様な推移確率の場合は定理 2.4 によって具体的に解を与えることが出来るが, 時間非一様な場合は解を具体的に構成することは難しい. また式 (3.3) の解 $P_{s,t}(x,y)$ は**チャップマン・コルモゴロフ (Chapman-Kolmogorov) の等式**

$$P_{r,t}(x,y) = \sum_{z\in\mathbf{E}} P_{r,s}(x,z)P_{s,t}(z,y), \quad 0 \leq r \leq s \leq t,$$

を満たす. また

$$\frac{\partial}{\partial s}[P_{s,t}\phi](x) = [\mathbf{L}_{\beta(t)}P_{s,t}\phi](x), \quad 0 \leq s \leq t.$$

で表される**後退方程式 (backward equation)** の一意解でもある. 最後に, 推移確率 $P_{s,t}(x,y)$ で $\{X_t\}_{t\geq 0}$ の分布は初期分布 ν を与えると表すことができることに注意する. つまり $0 = t_0 \leq \cdots \leq t_n, \Gamma_0, \ldots, \Gamma_n \subset \mathbf{E}$ に対して,

$$\mathbf{P}(X(t_0) \in \Gamma_0, \ldots, X(t_n) \in \Gamma_n) = \sum_{y_n\in\Gamma_n}\cdots\sum_{y_0\in\Gamma_0} \nu(y_0)P_{t_0,t_1}(y_0,t_1)\cdots P_{t_{n-1},t_n}(y_{n-1},t_n)$$

が成り立つ.

3.2 推移確率密度

この節ではシミュレーテッドアニーリング過程が最適解に収束するための十分条件を与える. 正の実数 δ に対して,

$$\mathbf{E}_\delta := \{x \in \mathbf{E} : U(x) < \inf_{x\in\mathbf{E}} U(x) + \delta\}$$

とおき, これを δ **近似解**という. 測度 μ_β は β を大きくしていくと集合 $\mathbf{E}_\delta$ に集中していく. つまり次の補題が成り立つ.

補題 3.1. 任意の $\delta > 0$ に対して, $\lim_{\beta\to\infty} \mu_\beta(\mathbf{E}_\delta) = 1$ が成り立つ.

証明 .

$$\mu_\beta(\mathbf{E}_\delta^c) \leq \frac{\sum_{x\in\mathbf{E}_\delta^c} e^{-\beta U(x)}\mu_0(x)}{\sum_{x\in\mathbf{E}_{\frac{\delta}{2}}} e^{-\beta U(x)}\mu_0(x)} \leq \frac{\sum_{x\in\mathbf{E}_\delta^c} e^{-\beta(U(x)-\inf U-\frac{\delta}{2})}\mu_0(x)}{\sum_{x\in\mathbf{E}_{\frac{\delta}{2}}} \mu_0(x)} \leq e^{-\frac{\delta}{2}\beta}\frac{\mu_0(\mathbf{E}_\delta^c)}{\mu_0(\mathbf{E}_{\frac{\delta}{2}})}$$

となることから示すことができる. □

$\mathbf{P}(X_t \in \mathbf{E}_\delta) \to 1$ となる条件を述べる．X_0 の分布, つまり初期分布を ν_0 とおく．このとき $\nu_t(x) := \nu_0 P_{0,t}(x)(= \sum_{y\in\mathbf{E}} \nu_0(y) P_{0,t}(y,x))$ は X_t の分布を表している．X_t の分布の $\mu_{\beta(t)}$ に関する**ラドン・ニコディム密度 (Radon-Nikodym derivative)** を f_t とおく．つまり,

$$f_t := \frac{d\nu_t}{d\mu_{\beta(t)}} \tag{3.4}$$

とする．f_t の q 乗ノルムのが t に依らず上から評価されることが分かれば X_t の大域的最適解への収束を保証することができる．すなわち, 以下の補題が成り立つ．

補題 3.2. ある $q > 1$ と $T_q, C_q > 0$ が存在して $\|f_t\|_{L^q(\mu_{\beta(t)})} < C_q$ が任意の $t \geq T_q$ に対して成り立っているとする．このとき任意の $A \subset \mathbf{E}$ に対して,

$$\mathbf{P}(X_t \in A) \leq C_q \mu_{\beta(t)}(A)^{1-\frac{1}{q}} \tag{3.5}$$

が成り立つ．

証明 ．I_A を集合 A の定義関数とする．$t \geq T_q$ に対して, ヘルダーの不等式を用いると,

$$\mathbf{P}(X_t \in A) = \int I_A d\nu_t = \int I_A f_t d\mu_{\beta(t)} \leq \|f_t\|_{L^q(\mu_{\beta(t)})} \cdot \mu_{\beta(t)}(A)^{1-\frac{1}{q}}$$

であるから示される． □

$\lim_{t\to\infty} \beta(t) = \infty$ と補題 3.1 よりある $q > 1$ と $T_q, C_q > 0$ が存在して, 任意の $t \geq T_q$ に対して $\|f_t\|_{L^q(\mu_{\beta(t)})} \leq C_q$ を満たせば X_t の δ 近似解への収束を保証できる．式 (3.5) から q が大きいほど収束が速くなるように考えられるが, そのときはクーリングスケジュールの発散が遅くなってしまうのではないかと考えられる．以下

$$\mu_t = \mu_{\beta(t)}, \langle\cdot\rangle_t = \langle\cdot\rangle_{\mu_{\beta(t)}}, \|\cdot\|_{q,t} = \|\cdot\|_{L^q(\mu_{\beta(t)})}, \mathbf{L}_t = \mathbf{L}_{\beta(t)}$$

と略記する．また

$$\|f\|_{\infty,t} = \|f\|_{L^\infty(\mu_{\beta(t)})} := \sup_{x\in\mathbf{E}} |f(x)|$$

である．[3] では f_t' を用いずに $\|f_t\|_{2,t}$ 等の評価を得ているが, 今後 f_t について考察するにあたり必要となるので以下の補題を示す．

補題 3.3 ([1, Lemma 1.6])**.** f_t を式 (3.4) で定義した密度とする．このとき,

$$\frac{d}{dt} f_t = \mathbf{L}_t f_t + \beta'(t)(U - \langle U\rangle_t) f_t$$

が成り立つ．

証明 . $g_t := \dfrac{d\mu_t}{d\mu_0}$ とおくと $\mathbf{E}$ 上の実数値関数 ϕ に対して以下が成り立つ.

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\int \phi f_t g_t d\mu_0 &= \frac{d}{dt}\int \phi(x) f_t(x)\mu_t(dx) = \frac{d}{dt}\iint \phi(x) P_{0,t}(y,dx)\nu_0(dy)\\ &= \frac{d}{dt}\int P_{0,t}\phi(y)\nu_0(dy) = \int P_{0,t}\mathbf{L}_t\phi(y)\nu_0(dy)\\ &= \iint \mathbf{L}_t\phi(x)P_{0,t}(y,dx)\nu_0(dy) = \int \mathbf{L}_t\phi(x) f_t(x)\mu_t(dx)\\ &= \int \phi \mathbf{L}_t f_t g_t d\mu_t.\end{aligned}$$

故に $(f_t g_t)' = (\mathbf{L}_t f_t) g_t$ が分かる. ところで $g_t'/g_t = -\beta'(t)(U - \langle U\rangle_t)$ となることから,

$$f_t' = \left(\frac{f_t g_t}{g_t}\right)' = \frac{(\mathbf{L}_t f_t) g_t^2 - f_t g_t g_t'}{g_t^2} = \mathbf{L}_t f_t + \beta'(t)(U - \langle U\rangle_t) f_t$$

となるので補題が示される. □

3.3 スペクトルギャップを用いた簡単な評価

$\mathbf{L}_{\beta(t)}$ に関するディリクレ形式とスペクトルギャップを考える. 任意の $\beta \geq 0$ に対して, (q_β, μ_β) に対応するディリクレ形式を $\mathcal{E}_\beta$ とする. $\mathcal{E}_\beta$ は補題 2.10(i) と式 (3.1) から以下を満たす.

$$\mathcal{E}_\beta(\phi,\psi) = \frac{1}{2Z_\beta}\sum_{x,y\in\mathbf{E}} e^{-\beta(U(x)\vee U(y))}(\phi(x)-\phi(y))(\psi(x)-\psi(y))\alpha(x,y).$$

このとき, $\|f_t\|_{q,t}$ を評価する際に用いる以下の補題を示す.

補題 3.4 ([5, Lemma 2.6])**.** 任意の $q \geq 2, \beta \geq 0, f \in L^q(\mu_\beta)$ に対して,

$$\mathcal{E}_\beta(f, f^{q-1}) \geq \frac{4(q-1)}{q^2}\mathcal{E}_\beta(f^{\frac{q}{2}}, f^{\frac{q}{2}})$$

が成り立つ.

証明 . 任意の $q > 2, a > b \geq 0$ に対して,

$$\begin{aligned}\left(\frac{a^{q/2}-b^{q/2}}{a-b}\right)^2 &= \left(\frac{q}{2(a-b)}\int_b^a x^{q/2-1}dx\right)^2\\ &\leq \frac{q^2}{4(a-b)}\int_b^a x^{q-2}dx\\ &= \frac{q^2}{4(q-1)}\frac{a^{q-1}-b^{q-1}}{a-b}\end{aligned}$$

が成り立つので,

$$(a-b)(a^{q-1}-b^{q-1}) \geq \frac{4(q-1)}{q^2}(a^{\frac{q}{2}}-b^{\frac{q}{2}})^2$$

が成り立つ. よってディリクレ形式の定義から導くことができる. □

任意の $\beta \geq 0$ に対して, $\mathcal{E}_\beta$ に関する**スペクトルギャップ**を $\gamma(\beta)$ とする. 以下 $\mathcal{E}_t = \mathcal{E}_{\beta(t)}$ の意味で表記していく. スペクトルギャップに関して以下の補題を与えることができる.

補題 3.5. $\gamma(0) > 0$ が成り立つならば, 任意の $\beta > 0$ に対して,

$$\gamma(0)e^{-\beta M} \leq \gamma(\beta) \tag{3.6}$$

が成り立つ. ここで $M := \sup_{x\in\mathbf{E}} U(x) - \inf_{x\in\mathbf{E}} U(x)$ である.

証明 . ディリクレ形式の定義から,

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_\beta(\phi,\phi) &= \frac{1}{2}\sum_{x,y\in\mathbf{E}} \frac{1}{Z_\beta} e^{-\beta(U(x)\vee U(y))}(\phi(x)-\phi(y))^2\alpha(x,y) \\ &\geq \frac{1}{Z_\beta} e^{-\beta \sup U}\mathcal{E}_0(\phi,\phi)\end{aligned}$$

が成り立つ. また $\mathrm{Var}_\beta(\phi)$ を計算すると,

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}_\beta(\phi) &= \sum_{x\in\mathbf{E}}(\phi(x)-\langle\phi\rangle_\beta)^2\mu_\beta(x) \\ &= \inf_{y\in\mathbf{R}}\left\{\sum_{x\in\mathbf{E}}(\phi(x)-y)^2\mu_\beta(x)\right\} \\ &\leq \sum_{x\in\mathbf{E}}(\phi(x)-\langle\phi\rangle_0)^2\mu_\beta(x) \\ &\leq \frac{1}{Z_\beta}e^{-\beta\inf U}\mathrm{Var}_0(\phi)\end{aligned}$$

が成り立つ. 以上のことから,

$$\frac{\mathcal{E}_\beta(\phi,\phi)}{\mathrm{Var}_\beta(\phi)} \geq \frac{\frac{1}{Z_\beta}e^{-\beta\sup U}\mathcal{E}_0(\phi,\phi)}{\frac{1}{Z_\beta}e^{-\beta\inf U}\mathrm{Var}_0(\phi)} \geq \gamma(0)e^{-\beta M}$$

が任意の $\phi \in L^2(\mu_\beta)$ に対して成り立つので示すことができる. □

補題 3.5 よりスペクトルギャップは少なくとも $M := \sup_{x\in\mathbf{E}} U(x) - \inf_{x\in\mathbf{E}} U(x)$ と $\gamma(0)$ を用いて評価できることが示された. 次にスペクトルギャップの評価から $\|f_t\|_{q,t}$ を評価する次の命題を示していく.

命題 3.6. ある定数 $c,m>0$ が存在して, 任意の β に対して $ce^{-\beta m} \le \gamma(\beta)$ を満たしているとする. また $M := \sup U - \inf U$ とする. このとき任意の $q \ge 2$ に対して $\beta(t) = 1/m \log(1+3mct/qM)$ とすれば, 任意の $t \ge 0$ に対して,

$$\|f_t\|_{q,t} \le \|f_0\|_{q,0} \vee 4^{(q-1)/q}$$

が成り立つ.

証明 . $q' = q/(q-1)$ とおき補題 3.3 と補題 3.4 を用いることにより以下が成り立つ.

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\|f_t\|_{q,t}^q &= -q\mathcal{E}_t(f_t, f_t^{q-1}) + (q-1)\beta'(t)\int f_t^q(U - \langle U\rangle_t)d\mu_t \\ &\le -\frac{4}{q'}\mathcal{E}_\beta(f_t^{\frac{q}{2}}, f_t^{\frac{q}{2}}) + (q-1)M\beta'(t)\|f_t\|_{q,t}^q \\ &\le -\frac{1}{q'}(4\gamma(\beta(t)) - qM\beta'(t))\|f_t\|_{q,t}^q + \frac{4\gamma(\beta(t))}{q'}\langle f_t^{\frac{q}{2}}\rangle_t^2.\end{aligned}$$

また $4\gamma(\beta(t)) - qM\beta'(t) \ge \gamma(\beta(t))$, $\langle f_t^{\frac{q}{2}}\rangle_t^2 = \langle f_t^{\frac{q}{2}-1}\rangle_{\nu_t}^2 \le \langle f_t^{q-1}\rangle_{\nu_t}^{\frac{q-2}{q-1}} = \langle f_t^q\rangle_t^{\frac{q-2}{q-1}}$ であることを用いると,

$$\frac{d}{dt}\|f_t\|_{q,t}^q \le \frac{\gamma(\beta(t))}{q'}\|f_t\|_{q,t}^q + \frac{4\gamma(\beta(t))}{q'}\left(\|f_t\|_{q,t}^q\right)^{1-\frac{q'}{q}}$$

が成り立つ. $\Lambda(t) = \int_0^t \gamma(\beta(s))ds$ とおいて, 両辺に $e^{\frac{\Lambda(t)}{q}}$ をかけると,

$$\frac{d}{dt}e^{\frac{\Lambda(t)}{q}}\|f_t\|_{q,t}^{q'} \le 4\frac{d}{dt}e^{\frac{\Lambda(t)}{q}}$$

積分することにより,

$$\|f_t\|_{q,t}^{q'} \le 4(1-e^{-\frac{\Lambda(t)}{q}}) + \|f_0\|_{q,0}^{q'}e^{-\frac{\Lambda(t)}{q}} \le 4 \vee \|f_0\|_{q,0}^{q'}$$

がわかるので示すことができる. □

命題 3.6 において q が大きければ, 補題 3.2 より $\mu_t(E_\delta^c)$ の指数は大きくなるが, $\beta(t)$ の発散する速さは遅くなっていることがわかる. 実際に, 補題 3.1, 補題 3.2 と命題 3.6 を用いると, $\beta(t) = 1/m\log(1+3mct/qM)$ とすれば,

$$\begin{aligned}\mathbf{P}(X_t \in \mathbf{E}_\delta^c) &\le C_q\mu_t(\mathbf{E}_\delta^c)^{1-\frac{1}{q}} \\ &\le C_q\exp\left\{-\frac{\delta}{2}\beta(t)\left(1-\frac{1}{q}\right)\right\} \\ &\le C_q\left(1+\frac{3mct}{qM}\right)^{-\frac{\delta(q-1)}{2mq}} \qquad (3.7)\end{aligned}$$

となる. ここで, $C_q = (\|f_0\|_{q,0} \vee 4^{(q-1)/q}) \cdot (\mu_0(\mathbf{E}_\delta^c)/\mu_0(\mathbf{E}_{\delta/2}))^{(q-1)/q}$ である.

3.4 推移確率密度の L^∞ 評価を得るために

補題 3.5 より少なくとも $\gamma(0)e^{-\beta M} \leq \gamma(\beta)$ は成り立ち, 補題 3.6 より任意の $q \geq 2$ に対して $\|f_t\|_{q,t}$ を評価することができた. この節では $\|f_t\|_{\infty,t}$ を評価していく方法を述べていく. 以下を仮定する.

仮定 3.7. エネルギーは有界である. 即ち $M := \sup U - \inf U < \infty$

仮定 3.8. ある定数 $0 < B < \infty$ が存在して, $\beta'(t) \leq B/(1+t)$ が成り立つ.

仮定 3.9. ある定数 $0 < A < \infty$, $2 < p < \infty$ が存在して, 任意の $t > 0$ に対して

$$\|f - \langle f \rangle_t\|_{p,t}^2 \leq A(1+t)\mathcal{E}_t(f,f) \tag{3.8}$$

が成り立つ.

まず $\|f_t\|_{\infty,t}$ を評価するのに必要ないくつかの補題を述べていく.

補題 3.10 ([1, Lemma 1.1(i)])**.** 正の実数 a, ε と非負の実数 b, c が存在して, 任意の $t > 0$ に対して $u \in C^1([0,\infty);[0,\infty))$ が,

$$u'(t) \leq \frac{-a}{1+t}u(t)^{1+\varepsilon} + \frac{bu(t)}{1+t} + \frac{cu(t)^{1/2}}{1+t},$$

を満たすとき, 任意の $t > 0$ に対して,

$$u(t) \leq \left[\frac{4\lambda}{a}\left(\frac{1}{1-(1+t)^{-\varepsilon\lambda}}\right)\right]^{1/\varepsilon}$$

が成り立つ. ここで $\lambda = b \vee (a+c)$ である.

証明 . 仮定から以下が成り立つ.

$$\begin{aligned}
2(u(t)^{1/2})' &\leq \frac{-a}{1+t}(u(t)^{1/2})^{1+2\varepsilon} + \frac{b}{1+t}u(t)^{1/2} + \frac{c}{1+t} \\
&= \frac{-a}{1+t}(1 + (u(t)^{1/2})^{1+2\varepsilon}) + \frac{bu(t)^{1/2} + a + c}{1+t} \\
&\leq \frac{-a}{4^\varepsilon(1+t)}(1 + u(t)^{1/2})^{1+2\varepsilon} + \frac{\lambda}{1+t}(1 + u(t)^{1/2}).
\end{aligned}$$

ここで $\omega(t) = (1+t)^{-\lambda/2}(1+u(t)^{1/2})$ とおくと,

$$\begin{aligned}
\omega'(t) &= (1+t)^{-\frac{\lambda}{2}}\left[(u(t)^{1/2})' - \frac{\lambda}{2(1+t)}(1+u(t)^{1/2})\right] \\
&\leq -\frac{a}{8(1+t)^{1+\lambda/2}}(1+u(t)^{1/2})^{1+2\varepsilon} \\
&= -\frac{a}{8}(1+t)^{\varepsilon\lambda-1}\omega(t)^{1+2\varepsilon}.
\end{aligned}$$

また

$$(\omega(t)^{-2\varepsilon})' = -2\varepsilon\frac{\omega(t)'}{\omega(t)^{1+2\varepsilon}} \geq \frac{a\varepsilon}{4}(1+t)^{\varepsilon\lambda-1}$$

であるから, 両辺を $(0,t]$ で積分する事により以下が導かれる.

$$\begin{aligned}\omega(t)^{-2\varepsilon} &\geq \frac{a}{4\lambda}((1+t)^{\varepsilon\lambda}-1)\\ (1+t)^{\varepsilon\lambda}u(t)^{-\varepsilon} &\geq \frac{a}{4\lambda}((1+t)^{\varepsilon\lambda}-1)\end{aligned}$$

であるから,

$$u(t) \leq \left[\frac{4\lambda}{a}\left(\frac{1}{1-(1+t)^{-\varepsilon\lambda}}\right)\right]^{1/\varepsilon}$$

が示される. $\square$

補題 3.11 ([1, Lemma 1.1(ii)])**.** 正の実数 a, ε と非負の実数 b, T, s が存在して, 任意の $t \in [s,T)$ に対して $u \in C^1([s,T);[0,\infty))$ が,

$$u'(t) \geq \frac{a}{1+t}u(t)^{1+\varepsilon} - \frac{bu(t)}{1+t}$$

を満たすとき,

$$u(s) \leq \left[\frac{b}{a\left(1-\left(\frac{1+s}{1+T}\right)^{\varepsilon b}\right)}\right]^{1/\varepsilon}$$

が成り立つ.

証明 .

$$\begin{aligned}((1+t)^b u(t))' &= (1+t)^b\left(u'(t)+\frac{b}{1+t}u(t)\right)\\ &\geq a(1+t)^{b-1}u(t)^{1+\varepsilon}\\ &= a(1+t)^{-\varepsilon b-1}\left((1+t)^b u(t)\right)^{1+\varepsilon}.\end{aligned}$$

故に以下が分かる.

$$\frac{d}{dt}\left[(1+t)^b u(t)\right]^{-\varepsilon} = -\varepsilon\frac{((1+t)^b u(t))'}{((1+t)^b u(t))^{1+\varepsilon}} = -a\varepsilon(1+t)^{-\varepsilon b-1}.$$

両辺を $[s,T)$ で積分すると,

$$-(1+s)^{-\varepsilon b}u(s)^{-\varepsilon} \leq \int_s^T(-a\varepsilon(1+t)^{-\varepsilon b-1})dt = \frac{a}{b}\left((1+T)^{-\varepsilon b}-(1+s)^{-\varepsilon b}\right)$$

まとめると,

$$u(s)^{-\varepsilon} \geq \frac{a}{b}\left(1-\left(\frac{1+s}{1+T}\right)^{\varepsilon b}\right)$$

となるので,

$$u(s) \leq \left[\frac{b}{a\left(1-\left(\frac{1+s}{1+T}\right)^{\varepsilon b}\right)}\right]^{1/\varepsilon}$$

が示される. □

補題 3.12 ([1, Lemma 1.5])**.** 仮定3.9が成り立っているとする. そのとき $\varepsilon=(p-2)/p$ として, 任意の $f \in L^2(\mu_{\beta(t)})$ に対して,

$$\|f-\langle f\rangle_t\|_{2,t}^{2+2\varepsilon} \leq A(1+t)\mathcal{E}_t(f,f)\|f-\langle f\rangle_t\|_{1,t}^{2\varepsilon}$$

が成り立つ.

証明 . $\theta=1/(1+\varepsilon)$ としたときに, $1/2=\theta/p+(1-\theta)$ であるから, ヘルダーの不等式より,

$$\begin{aligned}\|f-\langle f\rangle_t\|_{2,t} &\leq \|f-\langle f\rangle_t\|_{p,t}^{\theta}\|f-\langle f\rangle_t\|_{1,t}^{1-\theta}\\ &\leq [A(1+t)\mathcal{E}_t(f,f)]^{1/2(1+\varepsilon)}\|f-\langle f\rangle_t\|_{1,t}^{\varepsilon/(1+\varepsilon)}\end{aligned}$$

となるので両辺 $2(1+\varepsilon)$ 乗すれば示される. □

$\|f_t\|_{\infty,t}$ は二段階に分けて評価する.

補題 3.13 ([1, Lemma 1.7])**.** 仮定 3.7–3.9 を満たすとする.
$K_1=4(1+4ABM)/(1-e^{-(\frac{1}{2}A+2BM)})$ としたとき, 任意の $t \geq e^{1/\varepsilon}$ に対して,

$$\|f_t\|_{2,t} \leq 1+K_1^{\frac{1}{2\varepsilon}}$$

が成り立つ.

証明 . $u(t)=\|f_t-1\|_{2,t}^2$ とおくと, 補題 3.12 より,

$$u(t)^{1+\varepsilon} \leq A(1+t)\mathcal{E}_t(f,f)\|f_t-1\|_{1,t}^{2\varepsilon} \leq A(1+t)\mathcal{E}_t(f,f)2^{2\varepsilon}$$

が成り立つ. また,

$$\begin{aligned}&u'(t)\\ &=2\int f_t\mathbf{L}_t f_t d\mu_t+\beta'(t)\int(U-\langle U\rangle_t)f_t^2 d\mu_t\\ &=-2\mathcal{E}_t(f_t,f_t)+\beta'(t)\int(U-\langle U\rangle_t)(f_t-1)^2 d\mu_t+2\beta'(t)\int(U-\langle U\rangle_t)(f_t-1)d\mu_t\\ &\leq-\frac{2}{4^{\varepsilon}A(1+t)}u(t)^{1+\varepsilon}+\frac{BM}{1+t}u(t)+\frac{2BM}{1+t}u(t)^{1/2}\end{aligned}$$

を満たし, 補題 3.10 を用いると, $u(t) \leq K_1^{\frac{1}{2\varepsilon}}$ となるから示すことができる. □

補題 3.14 ([1, Lemma 1.9])**.** 仮定 3.7–3.9 を満たすとする．$K_2 = 2ABMe^{2BM}/(1-e^{-BM})$ としたとき, 任意の $T > e^{1/\varepsilon}$ と $\phi \in L^2(\mu_T)$ に対して, $t = (1+T)e^{-1/\varepsilon} - 1$ とおくと,

$$\|P_{t,T}\phi\|_{2,t} \le (K_2^{1/\varepsilon} + e^{2BM/\varepsilon})^{1/2}\|\phi\|_{1,T}$$

が成り立つ.

証明 . 任意の $T > e^{1/\varepsilon}$ に対して, $\phi \ge 0, \langle\phi\rangle_T = 1$ であると仮定する．$s \le T$ に対して $\phi_s = P_{s,T}\phi$ とおくと, 以下が成り立つ.

$$\frac{d}{ds}\langle\phi_s\rangle_s = -\int \mathbf{L}_s\phi_s d\mu_s - \beta'(s)\int (U - \langle U\rangle_s)\phi_s d\mu_s \ge -\frac{BM}{1+s}\langle\phi_s\rangle_s.$$

$T \ge t \ge e^{-1/\varepsilon}(1+T) - 1$ に対して両辺を $[t, T)$ で積分して

$$\langle\phi_t\rangle_t \le \left(\frac{1+T}{1+t}\right)^{BM} \le e^{BM/\varepsilon}$$

がわかる．次に $s \le T$ に対して,

$$u(s) := \|\phi_s - \langle\phi_s\rangle_s\|_{2,s}^2 = \|\phi_s\|_{2,s}^2 - \langle\phi_s\rangle_s^2$$

とすると,

$$\begin{aligned}\frac{d}{ds}u(s) &= 2\mathcal{E}_s(\phi_s,\phi_s) - \beta'_s\int (U - \langle U\rangle_s)(\phi_s - \langle\phi_s\rangle_s)^2 d\mu_s \\ &\ge 2\mathcal{E}_s(\phi_s,\phi_s) - \frac{BM}{1+t}u(s)\end{aligned}$$

を満たす. 補題 3.12 より $T \ge t \ge e^{-1/\varepsilon}(1+T) - 1$ に対して,

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_t(\phi_t,\phi_t) &\ge \frac{\|\phi_t - \langle\phi_t\rangle_t\|_{2,t}^{2+2\varepsilon}}{A(1+t)\|\phi_t - \langle\phi_t\rangle_t\|_{1,t}^{2\varepsilon}} \\ &\ge \frac{u(t)^{1+\varepsilon}}{A(1+t)(2\langle\phi_t\rangle_t)^{2\varepsilon}} \\ &\ge \frac{e^{-2BM}}{4^\varepsilon A(1+t)}u(t)^{1+\varepsilon}\end{aligned}$$

であるから代入して,

$$\frac{d}{dt}u(t) \ge \frac{2e^{-2BM}}{4^\varepsilon A(1+t)}u(t)^{1+\varepsilon} - \frac{BM}{1+t}u(s)$$

が成り立つ．補題 3.11 を用いると, $t = e^{-1/\varepsilon}(1+T) - 1$ に対して, $u(t) \le K_2^{1/\varepsilon}$ が成り立つ．最後に任意の $\phi \in L^2(\mu_T)$ に対して $\phi' = \phi/\|\phi\|_{1,T}$ で適用して,

$$\begin{aligned}\|P_{t,T}\phi\|_{2,t} &= \|P_{t,T}\phi'\|_{2,t}\|\phi\|_{1,T} \\ &= (u(t) + \langle\phi_t\rangle_t^2)^{\frac{1}{2}}\|\phi\|_{1,T} \\ &\le (K_2^{1/\varepsilon} + e^{2BM/\varepsilon})^{1/2}\|\phi\|_{1,T}\end{aligned}$$

が成り立つので示される． □

定理 3.15 ([1, Theorem 1.10])**.** 仮定3.7-3.9を満たすとする. 補題3.13, 3.14の K_1, K_2 を用いて,

$$K_\varepsilon = \left(1 + K_1^{1/2\varepsilon}\right)\left(K_2^{1/\varepsilon} + e^{2BM/\varepsilon}\right)^{1/2}$$

とおくと, 任意の $T \geq e^{2/\varepsilon}$ に対して,

$$\|f_T\|_{\infty,T} \leq K_\varepsilon$$

が成り立つ.

証明 . E 上の有界関数 ϕ と, 任意の $T \geq e^{2/\varepsilon}$ に対して

$$\left|\int \phi f_T d\mu_T\right| = \left|\int (P_{t,T}\phi) f_t d\mu_t\right| \leq \|P_{t,T}\phi\|_{2,t}\|f_t\|_{2,t} \leq K_\varepsilon \|\phi\|_{1,T}$$

がわかるので, 示される. □

第4章　有限状態空間上のシミュレーテッドアニーリング

この章では $\mathbf{E}$ の元の個数が有限であるような空間を考える．有限集合の場合はスペクトルギャップについて式 (3.6) よりもいい評価を与えることができる．また, その評価から $\beta(t)$ を仮定 3.8, 仮定 3.9 を満たすように構成する方法を述べる．$\mathbf{E}_0 = \{x \in \mathbf{E} : U(x) = \min_{x\in\mathbf{E}} U(x)\}$ とおき, この章では, $\min_{x\in\mathbf{E}} U(x) = 0$ と仮定する．このように仮定していいのは, 改めて $U' = U - \min_{x\in\mathbf{E}} U$ を考えれば同様の議論ができるからである.

4.1　スペクトルギャップの評価

この節では $m \leq M$ を構成し, m を用いて式 (3.6) より良いスペクトルギャップの評価を与える．任意の $x, y \in \mathbf{E}$ に対して, 列 $p = \{p_i\}_{i=0}^n$ が, $x = p_0, p_1, \cdots, p_n = y$ で $q_0(p_{i-1}, p_i) > 0$ を満たすとき, p を x から y への道であるという．x から y への道全体の集合を $\mathrm{P}_{x,y}$ とおく．$p \in \mathrm{P}_{x,y}$ に対して p の最も高いエネルギー (高度）を

$$\mathrm{Elev}(p) := \max\{U(p_i) : p_i \in p\}$$

とおく．また,

$$H(x, y) := \min\{\mathrm{Elev}(p) : p \in \mathrm{P}_{x,y}\}$$

とする．これは $\mathrm{P}_{x,y}$ の最も低い高度を意味している．つまり $H(x, y)$ よりも大きくならない x から y への道があるということである．一般に $x, y, z \in E$ に対して $H(x, y) = H(y, x)$, $H(x, y) \leq H(x, z) \vee H(z, y)$ が成り立つ．最後に,

$$m := \max_{x,y\in\mathbf{E}}\{H(x, y) - U(x) - U(y)\} \tag{4.1}$$

とする．これは U と q_0 にのみよって構成され, $m \leq M$ を満たす．式 (4.1) の等号を満たすような $x, y \in \mathbf{E}$ に対して, $x, y \notin \mathbf{E}_0$ であると仮定する．$z \in E_0$ に対して, $H(x, y) \leq H(x, z) \vee H(y, z) = H(x, z)$ とすると, $U(y) > U(z)$ であるから, $m = H(x, y) - U(x) - U(y) < H(x, z) - U(x) - U(z)$ となるので矛盾する．よって式 (4.1) の等号を満たす $x, y \in \mathbf{E}$ の少なくとも一方は $\mathbf{E}_0$ に属していることがわかる．式 (4.1) で定義した m を用いてスペクトルギャップを評価することができることを示す.

定理 4.1 ([1, Theorem2.1])**.** ある定数 $0 < c \le C < \infty$ が存在して, 任意の $\beta \ge 0$ に対して以下が成り立つ.

$$ce^{-\beta m} \le \gamma(\beta) \le Ce^{-\beta m}$$

証明 . 最初に上からの評価を示す.
$m > 0$ の場合を示す. $m = H(x_0, y_0) - U(x_0) - U(y_0)$ を満たすような $x_0, y_0 \in \mathbf{E}$ を固定する. $\mathbf{E}$ の部分集合 A として以下のようなものを考える,

$$A = \{z \in \mathbf{E} : H(y_0, z) < H(y_0, x_0)\}$$

このとき $x_0 \notin A, y_0 \in A$ がわかる. また $x \in A, y \notin A, q_0(x, y) > 0$ とすると,

$$H(y_0, x) < H(y_0, x_0) \le H(y_0, y) \le H(y_0, x) \vee U(y) = U(y)$$

がなりたつから, $H(y_0, x_0) \le U(y) \vee U(x)$ がわかる. $F(x) = I_A(x)$ とすると

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}_\beta(F, F) &= \frac{1}{2}\sum_{x\in\mathbf{E}}\sum_{y\in\mathbf{E}}(F(x) - F(y))^2 q_\beta(x, y)\mu_\beta(x) \\
&= \frac{1}{Z_\beta}\sum_{x\in A}\sum_{y\in A^c} e^{-\beta(U(x)\vee U(y))} q_0(x, y)\mu_0(x) \\
&\le \frac{1}{Z_\beta} e^{-\beta H(x_0,y_0)} \sum_{x\in A}\sum_{y\in A^c} q_0(x, y)\mu_0(x)
\end{aligned}$$

一方で,

$$\mathrm{Var}_\beta(F) = \mu_\beta(A)\mu_\beta(A^c) \ge \frac{1}{{Z_\beta}^2} e^{-\beta(U(x_0)+U(y_0))}\mu_0(x_0)\mu_0(y_0)$$

が成り立つ. 以上よりスペクトルギャップの定義から β に依存しない定数を C とおけば

$$\gamma(\beta) \le \frac{\mathcal{E}_\beta(F, F)}{\mathrm{Var}_\beta(F)} \le Z_\beta C e^{-\beta m}$$

$Z_\beta \le 1$ であるから $m > 0$ の場合は示される. 最後に $m = 0$ の場合は F として $\{x \in \mathbf{E} : U(x) = \max_{y\in\mathbf{E}} U(y)\}$ の定義関数をとり同様の議論をすれば示せる.

次に下からの評価を示す.
各 $x, y \in \mathbf{E}$ に対して $p^{x,y} \in \mathrm{P}_{x,y}$ を $H(x, y) = \mathrm{Elev}(p^{x,y})$ を満たすように選んでくる. $p^{x,y}$ の長さを $n(x, y)$ とするとき,

$$N := \max_{x,y\in\mathbf{E}} n(x, y)$$

とおく. また $z, w \in \mathbf{E}$ に対して次を定義する.

$$\chi_{z,w}(x, y) = \begin{cases} 1 & (p_i^{x,y} = z, p_{i+1}^{x,y} = w \text{ となるような } i < n(x, y) \text{ が存在するとき}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

$\alpha(z,w)=0$ ならば任意の $x,y\in\mathbf{E}$ に対して $\chi_{z,w}(x,y)=0$ である．よって $\alpha(z,w)=0$ ならば $\frac{\chi_{z,w}(x,y)}{\alpha(z,w)}=0$ としてよい．任意の $f\in L^2(\mu_\beta)$ に対して，

$$
\begin{aligned}
2\mathrm{Var}_\beta(f) &= \sum_{x,y\in\mathbf{E}}(f(x)-f(y))^2\mu_\beta(x)\mu_\beta(y)\\
&= \sum_{x,y\in\mathbf{E}}\{\sum_{i=1}^{n(x,y)}(f(p_i^{x,y})-f(p_{i-1}^{x,y}))\}^2\mu_\beta(x)\mu_\beta(y)\\
&\le \sum_{x,y\in\mathbf{E}} n(x,y)\sum_{i=1}^{n(x,y)}(f(p_i^{x,y})-f(p_{i-1}^{x,y}))^2\mu_\beta(x)\mu_\beta(y)\\
&\le N\sum_{x,y\in\mathbf{E}}\sum_{z,w\in\mathbf{E}}(f(z)-f(w))^2 e^{-\beta U(z)\vee U(w)}\alpha(z,w)\frac{\chi_{z,w}(x,y)}{\alpha(z,w)}\frac{\mu_\beta(x)\mu_\beta(y)}{e^{-\beta U(z)\vee U(w)}}\\
&\le 2N\left[\max_{z,w\in\mathbf{E}}\sum_{x,y\in\mathbf{E}}\frac{\chi_{z,w}(x,y)}{\alpha(z,w)}\frac{\mu_\beta(x)\mu_\beta(y)Z_\beta}{e^{-\beta U(z)\vee U(w)}}\right]\mathcal{E}_\beta(f,f)
\end{aligned}
$$

がわかる. ここで

$$
\begin{aligned}
\frac{\chi_{z,w}(x,y)}{\alpha(z,w)}\frac{\mu_\beta(x)\mu_\beta(y)Z_\beta}{e^{-\beta U(z)\vee U(w)}} &= \frac{\chi_{z,w}(x,y)}{\alpha(z,w)}\frac{\mu_0(x)\mu_0(y)}{Z_\beta}e^{\beta(U(z)\vee U(w)-U(x)-U(y))}\\
&\le e^{\beta m}\frac{\chi_{z,w}(x,y)}{\alpha(z,w)}\frac{\mu_0(x)\mu_0(y)}{\sum_{v\in\mathbf{E}_0}\mu_0(v)}
\end{aligned}
$$

よって, β に依存しない定数を c とおくと $0<c<\infty$ を満たし任意の $f\in L^2(\mu_\beta)$ に対して $ce^{-\beta m}\mathrm{Var}_\beta(f)\le\mathcal{E}_\beta(f,f)$ が成り立つので, $ce^{-\beta m}\le\gamma(\beta)$ が示された. □

4.2 推移確率密度の L^∞ 評価

また $\mathbf{E}$ が有限なら仮定 3.8, 仮定 3.9 を満たすようにクーリングスケジュールを構成することができる.

定理 4.2 ([1, Theorem 2.11])**.** 任意の正の実数 $\varepsilon>0$ に対して, $\beta(t)=(m+\varepsilon)^{-1}\log(1+t)$, $p=2M/(M-\varepsilon)$ とおくと, ある正の定数 $A>0$ が存在して式 (3.8) が成り立つ.

証明 . $t\ge 0$ を固定する.

$$
\begin{aligned}
\int|f-\langle f\rangle_t|^p d\mu_t &= \int(f-\langle f\rangle_t)^2|f-\langle f\rangle_t|^{p-2}d\mu_t\\
&\le\int(f-\langle f\rangle_t)^2 d\mu_t\|f-\langle f\rangle_t\|_{\infty,t}^{p-2}\\
&\le\frac{1}{c}e^{\beta(t)m}\mathcal{E}_t(f,f)\|f-\langle f\rangle_t\|_{\infty,t}^{p-2}
\end{aligned}
$$

が成り立つ. また,

$$\|f-\langle f\rangle_t\|_{\infty,t}^p \ e^{-\beta(t)M}\min_{x\in\mathbf{E}}\mu_0(x)\le\|f-\langle f\rangle_t\|_{\infty,t}^p \ \min_{x\in\mathbf{E}}\mu_t(x)\le\|f-\langle f\rangle_t\|_{p,t}^p$$

が成り立つので,

$$\|f-\langle f\rangle_t\|_{p,t}^p\le\frac{1}{c}e^{\beta(t)m}\mathcal{E}_t(f,f)e^{\beta(t)M\frac{p-2}{p}}\frac{\|f-\langle f\rangle_t\|_{p,t}^{p-2}}{(\min_{x\in\mathbf{E}}\mu_0(x))^{(p-2)/p}}.$$

を満たす. t に依存しない定数を A とおくと,

$$\|f-\langle f\rangle_t\|_{p,t}^2\le Ae^{\beta(t)(m+M\frac{p-2}{p})}\mathcal{E}_t(f,f)$$

となる. 最後に $\beta(t)=(m+\varepsilon)^{-1}\log(1+t)$, $p=2M/(M-\varepsilon)$ とおけば式 (3.8) を満たす. □

U の次に小さい値を $\delta:=\min_{x\in\mathbf{E}_0^c}U(x)$ とし $\delta>0$ であるとすると,

$$\mu_\beta(\mathbf{E}_0^c)\le\frac{\sum_{x\in\mathbf{E}_0^c}e^{-\beta U(x)}\mu_0(x)}{\sum_{x\in\mathbf{E}_0}\mu_0(x)}\le\frac{\mu_0(\mathbf{E}_0^c)}{\mu_0(\mathbf{E}_0)}e^{-\delta\beta} \tag{4.2}$$

を満たす. 定理 4.2 から $\beta(t)=(m+\varepsilon)^{-1}\log(1+t)$, $p=2M/(M-\varepsilon)$ とおくと, 式 (3.8) を満たすことがわかる. 仮定 3.7–3.9 を満たすことから定理 3.15 を用いることができ, 補題 3.2, 式 (4.2) から,

$$\mathbf{P}(X_t\in\mathbf{E}_0^c)\le C_\varepsilon\exp\{-\delta\beta(t)\}\le C_\varepsilon(1+t)^{-\delta/(m+\varepsilon)}$$

が $t>e^{2/\varepsilon}$ に対して成り立つ. ここで $C_\varepsilon=K_\varepsilon\mu_0(\mathbf{E}_0^c)/\mu_0(\mathbf{E}_0)$ である. 式 (3.7) と比較してもわかるように, 有限集合の場合は大域的最適解に早く集中しているのがわかる.

第5章　対数ソボレフ定数

$q(0)=0, \lim_{t\to\infty} q(t)=\infty$ を満たす単調増加で滑らかな時刻 t の関数 $q(t)$ とクーリングスケジュール $\beta(t)$ に対し, $\|f_t\|_{q(t),t} \le C$ が成り立っているならば, 補題3.2より,

$$\mathbf{P}(X_t \in \mathbf{E}_\delta^c) \le C\mu_t(\mathbf{E}_\delta^c)^{1-\frac{1}{q(t)}}$$

がわかる. そこで, $\frac{d}{dt}\|f_t\|_{q(t),t}$ を評価するのに,

$$\int \phi^2 \log\left(\frac{\phi}{\|\phi\|_{2,\beta}}\right)^2 d\mu_\beta \le \alpha(\beta)\mathcal{E}_\beta(\phi,\phi) \tag{5.1}$$

で表される**対数ソボレフ不等式 (logarithmic Sobolev inequality)** を用いる. 右辺の $\alpha(\beta)$ を**対数ソボレフ定数**と呼ぶ. この章では対数ソボレフ定数を用いて, $q(t), \beta(t)$ を構成し $\|f_t\|_{q(t),t}$ を評価していく.

5.1　対数ソボレフ定数を用いた評価

$\beta : [0,\infty) \to [0,\infty)$ と $q : [0,\infty) \to [2,\infty)$ を $\beta(0)=0, q(0)=2, \lim_{t\to\infty} q(t) = \infty, \lim_{t\to\infty}\beta(t)=\infty$ を満たし, 滑らかな単調増加関数とする. このとき補題3.4より,

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\|f_t\|_{q(t),t} \le \frac{\|f_t\|_{q(t),t}^{1-q(t)}}{q(t)^2}&\left[q'(t)\int f_t^{q(t)} \log\left(\frac{f_t}{\|f_t\|_{q(t),t}}\right)^{q(t)} d\mu_t - 2q(t)\mathcal{E}_t(f_t^{q(t)/2}, f_t^{q(t)/2})\right]\\ &+ \beta'(t)\left(1-\frac{1}{q(t)}\right)\|f_t\|_{q(t),t}\int\left(\frac{f_t}{\|f_t\|_{q(t),t}}\right)^{q(t)}(U-\langle U\rangle_t)d\mu_t\end{aligned} \tag{5.2}$$

が成り立つ. 式(5.2)の微分不等式を簡単にするため以下の補題を用いる.

補題 5.1 ([1, Lemma 3.3]). μ を確率測度とし, $\theta \in L^1(\mu)$ が $\langle\theta\rangle_\mu = 1, \theta > 0$ を満たしているとする. このとき任意の $\langle\psi\rangle_\mu = 0$ を満たす $\psi \in L^\infty(\mu)$ に対して,

$$\left|\int \psi\theta d\mu\right| \le 8^{1/2}\|\psi\|_{L^\infty(\mu)}\left(\int \theta\log\theta d\mu\right)^{1/2}$$

が成り立つ.

証明．各 $\theta \in L^1(\mu)$, $\langle \theta \rangle_\mu = 1, \theta > 0$ に対して, [2] の (3.38)Lemma より

$$\int \theta(x)\log(\theta(x))\mu(dx) = \sup_{\phi \in L^\infty(\mu)} \left\{ \int \phi\theta d\mu - \log\left(\int e^\phi d\mu\right) \right\}$$

が成り立つ．特に $\phi(x) = a\psi(x), a \in \mathbf{R}$ で制限すれば,

$$\int \theta(x)\log(\theta(x))\mu(dx) \geq \sup_{a \in \mathbf{R}} \left\{ \int a\psi\theta d\mu - \log\left(\int e^{a\psi} d\mu\right) \right\}$$

が成り立つ．イェンセンの不等式より $\int e^{a\psi} d\mu \geq \exp\{\int a\psi d\mu\} = 1$ であるから, 任意の $a \in \mathbf{R}$ に対して $\log \int e^{a\psi} d\mu \geq 0$ が成り立つ．もし $\int \psi\theta d\mu \geq \varepsilon \geq 0$ ならば,

$$\int \theta(x)\log(\theta(x))\mu(dx) \geq \sup_{a \geq 0} \left\{ a\varepsilon - \log\left(\int e^{a\psi} d\mu\right) \right\}$$

が成り立つ．$\varepsilon = \int \psi\theta d\mu$ とおき, もし $\varepsilon < 0$ ならば ψ を $-\psi$ で置き換え $\varepsilon \geq 0$ となるようにとる．

$$F(a) := \log\left(\int e^{a\psi} d\mu\right)$$

$$K(\varepsilon) := \sup_{a \geq 0} \{a\varepsilon - F(a)\}$$

とすると, $F(a) \geq 0, F(0) = 0, F'(0) = 0$ を満たす．$F''(a) \leq 4\|\psi\|_\infty^2$ がいえるので, $F(a) \leq 2a^2\|\psi\|_\infty^2$ が成り立つ．また $K(0) = 0$ より $K(\varepsilon) \geq 0$ がわかるので,

$$K(\varepsilon) = \sup_{a \geq 0} \{a\varepsilon - F(a)\} \geq \sup_{a \geq 0} \{a\varepsilon - 2a^2\|\psi\|_\infty^2\} = \frac{\varepsilon^2}{8\|\psi\|_\infty^2}$$

が成り立つ．以上より,

$$\int \theta(x)\log(\theta(x))\mu(dx) \geq K(\varepsilon) \geq \frac{\varepsilon^2}{8\|\psi\|_\infty^2}$$

が成り立つ．よって任意の $\psi \in L^\infty(\mu)$ に対してが成り立つので題意が示される．□

補題 5.1 を $\mu = \mu_t$, $\theta = (f_t/\|f_t\|_{q(t),t})^{q(t)}$, $\psi = U - \langle U \rangle_t$ として適用し，また $\rho : [0, \infty) \to [0, \infty)$ を用いると,

$$\begin{aligned} \left| \int \left(\frac{f_t}{\|f_t\|_{q(t),t}}\right)^{q(t)} (U - \langle U \rangle_t) d\mu_t \right| &\leq 8^{1/2} M \left(\int \left(\frac{f_t}{\|f_t\|_{q(t),t}}\right)^{q(t)} \log\left(\frac{f_t}{\|f_t\|_{q(t),t}}\right)^{q(t)} d\mu_t \right)^{1/2} \\ &\leq \frac{2M^2}{\rho(\beta(t))} + \frac{\alpha(\beta(t))\rho(\beta(t))}{\|f_t\|_{q(t),t}^{q(t)}} \mathcal{E}_t(f_t^{q(t)/2}, f_t^{q(t)/2}) \end{aligned}$$

となるので, 式 (5.2) に代入することにより,

$$\frac{d}{dt}\|f_t\|_{q(t),t} \le \frac{\|f_t\|_{q(t),t}^{1-q(t)}}{q(t)^2}[(q'(t)+\rho(\beta(t))\beta'(t)q(t)^2)\alpha(\beta(t))-2q(t)]\cdot\mathcal{E}_t(f_t^{q(t)/2},f_t^{q(t)/2}) + \frac{2M^2\beta'(t)}{\rho(\beta(t))}\|f_t\|_{q(t),t}$$

を得る. もし,

$$(q'(t)+\rho(\beta(t))\beta'(t)q(t)^2)\alpha(\beta(t))-2q(t)=0 \tag{5.3}$$

を満たすとすると,

$$\sup_{t\ge 0}\|f_t\|_{q(t),t} \le \|f_0\|_{2,0}\exp\left(2M^2\int_0^\infty \frac{1}{\rho(\beta)}d\beta\right) \tag{5.4}$$

が成り立つ. 故に, 式 (5.3) を満たし $\int_0^\infty 1/\rho(\beta)d\beta<\infty$ となるように $\beta(t), q(t), \rho$ を構成すればよい. 滑らかで単調非増加な $\sigma:[0,\infty)\to(0,\infty)$ に対して $\beta(t)$ を,

$$\beta'(t)=\frac{\sigma}{\rho\alpha}(\beta(t)),\quad \beta(0)=0$$

で定義する. つまり,

$$\beta(t)=B^{-1}(t),\quad B(\beta):=\int_0^\beta \frac{\rho\alpha}{\sigma}(\xi)d\xi. \tag{5.5}$$

また $q(t)$ を

$$\frac{1}{q(t)}=\frac{1}{Q(\beta(t))} \tag{5.6}$$

で定義する. ここで,

$$\frac{1}{Q(\beta)}:=e^{-2\Gamma(\beta)}\left[\frac{1}{2}+\int_0^{\Gamma(\beta)}\sigma(\Gamma^{-1}(\gamma))e^{2\gamma}d\gamma\right],\quad \Gamma(\beta):=\int_0^\beta\frac{\rho}{\sigma}(\gamma)d\gamma$$

である. このようにして構成された, $\beta(t)$, $q(t)$ は式 (5.3) を満たす. よって次の定理が示される.

定理 5.2 ([1, Theorem3.9]). 式 (5.1) が単調非減少で滑らかな $\alpha:[0,\infty)\to(0,\infty)$ に対して成り立っているとする. 滑らかで単調非増加な $\sigma:[0,\infty)\to(0,\infty)$ と $R:=\int_0^\infty(1/\rho(\beta))d\beta<\infty$ を満たす滑らかで単調非減少な $\rho:[0,\infty)\to(0,\infty)$ に対して式 (5.5), (5.6) によって $\beta(t)$, $q(t)$ を定義する. このとき任意の $t\ge 0$ に対して

$$\|f_t\|_{q(t),t}\le\|f_0\|_{2,0}\exp(2M^2R)$$

が成り立つ.

証明．$\beta(t)$, $q(t)$ は式 (5.3) を満たすことを示す．

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{q(t)}\right) &= \beta'(t)\left(-2\frac{\rho(\beta(t))}{\sigma(\beta(t))q(t)} + \rho(\beta(t))\right)\\ &= -\frac{2}{\alpha(\beta(t))q(t)} + \beta'(t)\rho(\beta(t))\end{aligned}$$

となり, $\dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{1}{q(t)}\right) = -\dfrac{q'(t)}{q(t)^2}$ である．以上より,

$$-q'(t) = -2\frac{q(t)}{\alpha(\beta(t))} + \rho(\beta(t))\beta'(t)q(t)^2$$

が成り立つので $\beta(t)$, $q(t)$ は式 (5.3) を満たす． □

5.2 対数ソボレフ定数の評価

定理 5.2 の大事な仮定は式 (5.1) が $\alpha(\beta)$ を用いて成り立っていることである．$\alpha(\beta)$ がある関数 $\bar{\alpha}(\beta)$ で上から評価されたときに, 式 (5.3) の $\alpha(\beta)$ を $\bar{\alpha}(\beta)$ に, 等式を不等式に置き換えた,

$$(q'(t) + \rho(\beta(t))\beta'(t)q(t)^2)\bar{\alpha}(\beta(t)) - 2q(t) \le 0 \tag{5.7}$$

を満たすように $\beta(t), q(t), \rho$ を構成したときも, 同様の議論により式 (5.4) を満たすことがわかる．また $\beta(t)$ の定義式 (5.5) の α を $\bar{\alpha}$ で置き換えたとしても定理 5.2 と同様の議論をすることで式 (5.7) が成り立つことがわかる．この節では, $\alpha(\beta)$ を上から評価する方法について述べる．

最初に,

$$\int \phi^2 \log\left(\frac{\phi}{\|\phi\|_{2,0}}\right)^2 d\mu_0 \le A\mathcal{E}_0(\phi,\phi) \tag{5.8}$$

が成り立っている場合を考える．つまり, 時刻 0 での対数ソボレフ定数が, ある定数 $A > 0$ によって $\alpha(0) \le A$ と評価できているということである．時刻 0 でのスペクトルギャップが存在したとき, 補題 3.5 により $\gamma(0)$ を用いてスペクトルギャップを評価できた．同様に時刻 0 での対数ソボレフ定数が存在したときに, $\alpha(0)$ を用いて対数ソボレフ定数を評価することができる．それが以下の補題である．

補題 5.3 ([1, Lemma 3.13])**.** ある定数 $A > 0$ が存在して, $\alpha(0) \le A$ が成り立つならば, 任意の $\beta > 0$ に対して $\alpha(\beta) \le Ae^{\beta M}$ が成り立つ. ここで $M = \sup U - \inf U$ である．

証明 . ディリクレ形式の定義より,

$$\mathcal{E}_0(\phi,\phi) \le Z_\beta e^{\beta \sup_E U} \mathcal{E}_\beta(\phi,\phi)$$

が成り立つ. また E 上の任意の確率測度 m と任意の $f : E \to \mathbf{R}$ に対して,

$$\int f^2(\xi) \log\left(\frac{f^2(\xi)}{\|f\|_{L^2(m)}^2}\right) m(d\xi) = \inf_{x>0} \int \left(f^2(\xi)\log\left(\frac{f^2(\xi)}{x}\right) - f^2(\xi) + x\right) m(d\xi)$$

が成り立つ. 右辺の下限は $x = \|f\|_{L^2(m)}^2$ のときに満たす. $f = \phi, m = \mu_\beta$ とし $x = \|\phi\|_{2,0}^2$ を代入すると,

$$\begin{aligned}\int \phi^2 \log\left(\left(\frac{\phi}{\|\phi\|_{2,\beta}}\right)^2\right) d\mu_\beta &\le \int \left(\phi^2 \log\left(\frac{\phi^2}{\|\phi\|_{2,0}^2}\right) - \phi^2 + \|\phi\|_{2,0}^2\right) d\mu_\beta \\ &\le \frac{1}{Z_\beta} e^{-\beta \inf_E U} \int \phi^2 \log\left(\left(\frac{\phi}{\|\phi\|_{2,0}}\right)^2\right) d\mu_0\end{aligned}$$

が成り立つ. 以上より,

$$\begin{aligned}\int \phi^2 \log\left(\left(\frac{\phi}{\|\phi\|_{2,\beta}}\right)^2\right) d\mu_\beta &\le \frac{1}{Z_\beta} e^{-\beta \inf_E U} \int \phi^2 \log\left(\left(\frac{\phi}{\|\phi\|_{2,0}}\right)^2\right) d\mu_0 \\ &\le \frac{1}{Z_\beta} A e^{-\beta \inf_E U} \mathcal{E}_0(\phi,\phi) \\ &\le \frac{1}{Z_\beta} A e^{-\beta \inf_E U} Z_\beta e^{\beta \sup_E U} \mathcal{E}_\beta(\phi,\phi) \\ &\le A e^{\beta M} \mathcal{E}_\beta(\phi,\phi)\end{aligned}$$

が任意の $\phi \in L^2(\mu_\beta)$ に対して成り立つので示される. □

$0 < m \le M$ とある定数 $B > 0$ が存在して, 任意の $\beta \ge 0$ に対してスペクトルギャップが,

$$\|\phi - \langle \phi \rangle_\beta\|_{2,\beta}^2 \le B e^{\beta m} \mathcal{E}_\beta(\phi,\phi) \tag{5.9}$$

で評価されているとする. また, ある $p > 2$ と, ある定数 $C > 0$ が存在して, 任意の $\beta \ge 0$ に対して,

$$\|\phi - \langle \phi \rangle_0\|_{p,0}^2 \le C \mathcal{E}_0(\phi,\phi) \tag{5.10}$$

で表されるポワンカレの不等式を満たしているとする. このとき $\alpha(\beta)$ は補題 5.3 よりもよい評価を与えることができる. その準備として以下の補題を示す.

補題 5.4 ([1, Lemma 3.17])**.** 任意の確率測度 μ と任意の $\phi \in L^2(\mu)$ に対して,

$$\int \phi^2 \log\left(\frac{\phi}{\|\phi\|_{2,\mu}}\right)^2 d\mu \le \int (\phi - \langle \phi \rangle_\mu)^2 \log\left(\frac{\phi - \langle \phi \rangle_\mu}{\|\phi - \langle \phi \rangle_\mu\|_{2,\mu}}\right)^2 d\mu + 2\|\phi - \langle \phi \rangle_\mu\|_{2,\mu}^2$$

が成り立つ.

証明．まず $\langle\psi\rangle_\mu = 0, \|\psi\|_{2,\mu} = 1$ を満たす $\psi \in L^2(\mu)$ に対して, $\int \psi^2 \log \psi^2 d\mu < \infty$ ならば,

$$F(\alpha, \psi, \beta) := \int (\psi + \alpha)^2 \log \left(\frac{(\psi + \alpha)^2}{1 + \alpha^2} \right) d\mu - \int \psi^2 \log \psi^2 d\mu \leq 2 \tag{5.11}$$

が成り立つことを示す.

$$\Psi(\mu) := \left\{ \psi \in L^2(\mu) : \langle\psi\rangle_\mu = 0, \|\psi\|_{2,\mu} = 1, \text{ある}\varepsilon\text{が存在して}\varepsilon \leq |\psi| \leq \frac{1}{\varepsilon}\text{を満たす} \right\}$$

とすると, $\psi \in \Psi(\mu)$ ならば,

$$\langle 1/\psi \rangle_{\psi^2\mu} = \int \frac{1}{\psi} \psi^2 d\mu = 0,$$

$$\|1/\psi\|^2_{2,\psi^2\mu} = \int \frac{1}{\psi^2} \psi^2 d\mu = 1$$

を満たすので $1/\psi \in \Psi(\psi^2\mu)$ である．また

$$F(\alpha, \psi, \mu) = \alpha^2 F\left(\frac{1}{\alpha}, \frac{1}{\psi}, \psi^2 \mu \right) + 2\alpha \int \psi \log \psi^2 d\mu \tag{5.12}$$

が成り立つ．次に確率測度 ν と $\zeta \in \Psi(\nu)$ に対して,

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\beta} F(\beta, \zeta, \nu) &= 2 \int (\zeta + \beta) \log \frac{(\zeta + \beta)^2}{1 + \beta^2} d\nu \\ \frac{d^2}{d\beta^2} F(\beta, \zeta, \nu) &= 2 \int \log \frac{(\zeta + \beta)^2}{1 + \beta^2} d\nu + \frac{4}{1 + \beta^2} \leq 4 \end{aligned}$$

であるから, 積分することにより,

$$F(\beta, \zeta, \nu) \leq 2\beta \int \zeta \log \zeta^2 d\nu + 2\beta^2 \tag{5.13}$$

がわかる．よって $\nu = \psi^2\mu, \zeta = 1/\psi, \beta = 1/\alpha$ を式 (5.13) に代入し, 式 (5.12) を使えば式 (5.11) が成り立つ．任意の $\phi \in L^2(\mu)$ に対して,

$$\psi = \frac{\phi - \langle\phi\rangle_\mu}{\|\phi - \langle\phi\rangle_\mu\|_{2,\mu}}, \quad \alpha = \frac{\langle\phi\rangle_\mu}{\|\phi - \langle\phi\rangle_\mu\|_{2,\mu}}$$

を式 (5.11) に適用すると題意が成り立つ． □

式 (5.9) と式 (5.10) が成り立っていたとするとき補題 5.4 を用いて $\alpha(\beta)$ を評価する次の定理が成り立つ.

定理 5.5 ([1, Theorem 3.21])**.** ある定数 $B, C \in (0,\infty), p \in (2,\infty), m \in (0, M]$ が存在して, 式 (5.9), (5.10) が成り立っているならば, ある定数 $A = A(p, B, C, M) < \infty$ が存在して, 任意の $\beta \geq 0$ に対して $\alpha(\beta) \leq A(1+\beta)e^{\beta m}$ が成り立つ.

証明 . 式 (5.10) から, $\psi = \phi - \langle\phi\rangle_0$ とすると,

$$\begin{aligned}
\|\phi - \langle\phi\rangle_\beta\|_{p,\beta}^2 &= \|\phi - \langle\phi\rangle_0 - \langle\phi - \langle\phi\rangle_0\rangle_\beta\|_{p,\beta}^2 \\
&\leq \left(\|\phi - \langle\phi\rangle_0\|_{p,\beta} + \|\langle\phi - \langle\phi\rangle_0\rangle_\beta\|_{p,\beta}\right)^2 \\
&\leq 4\|\phi - \langle\phi\rangle_0\|_{p,\beta}^2 \\
&\leq 4Ce^{\beta M}\mathcal{E}_\beta(\phi,\phi) \qquad (5.14)
\end{aligned}$$

が任意の $\beta \geq 0$ に対して成り立つ. またイェンセンの不等式から,

$$\begin{aligned}
\int \left(\frac{\psi}{\|\psi\|_{2,\beta}}\right)^2 \log\left(\frac{\psi}{\|\psi\|_{2,\beta}}\right)^2 d\mu_\beta &= \frac{2}{p-2}\int \left(\frac{\psi}{\|\psi\|_{2,\beta}}\right)^2 \log\left(\frac{\psi}{\|\psi\|_{2,\beta}}\right)^{p-2} d\mu_\beta \\
&\leq \frac{2}{p-2}\log\left(\frac{\|\psi\|_{p,\beta}}{\|\psi\|_{2,\beta}}\right)^p = \frac{p}{p-2}\log\left(\frac{\|\psi\|_{p,\beta}}{\|\psi\|_{2,\beta}}\right)^2
\end{aligned}$$

が任意の $\beta \geq 0$ に対して成り立つ. 任意の $x > 0, \delta > 0$ に対して, $\log x \leq \delta x + \log(1/\delta)$ が成り立つことから,

$$\int \psi^2 \log\left(\frac{\psi}{\|\psi\|_{2,\beta}}\right)^2 d\mu_\beta \leq \frac{p}{p-2}\left(\delta\|\psi\|_{p,\beta}^2 + (\log 1/\delta)\|\psi\|_{2,\beta}^2\right)$$

がわかる. $\psi = \phi - \langle\phi\rangle_\beta$, $\delta = e^{-\beta M}$ として, 式 (5.9) と式 (5.14) から,

$$\begin{aligned}
\int (\phi - \langle\phi\rangle_\beta)^2 \log\left(\frac{\phi - \langle\phi\rangle_\beta}{\|\phi - \langle\phi\rangle_\beta\|_{2,\beta}}\right)^2 d\mu_\beta &\leq \frac{p}{p-2}(4C + \beta MBe^{\beta m})\mathcal{E}_\beta(\phi,\phi) \\
&\leq \frac{p}{p-2}(4C + \beta MB)e^{\beta m}\mathcal{E}_\beta(\phi,\phi) \qquad (5.15)
\end{aligned}$$

を得る. 最後に補題 5.4 と式 (5.15) を用いると,

$$\begin{aligned}
\int \phi^2 \log\left(\frac{\phi}{\|\phi\|_{2,\beta}}\right)^2 d\mu_\beta &\leq \frac{p}{p-2}(4C + \beta MB)e^{\beta m}\mathcal{E}_\beta(\phi,\phi) + 2Be^{\beta m}\mathcal{E}_\beta(\phi,\phi) \\
&\leq A(1+\beta)e^{\beta m}\mathcal{E}_\beta(\phi,\phi)
\end{aligned}$$

を満たすので, 補題を示すことができる. □

ここで, 実際に

$$A = \max\left\{\frac{4Cp}{p-2} + 2B, \frac{MBp}{p-2}\right\}$$

で成り立つ. 定理 5.3 と定理 5.5 より, 対数ソボレフ定数を $\alpha(\beta) \leq A(1+\beta)^k e^{\beta m}$ という形で評価することができた. このとき定理 5.2 から次の定理を得ることができる.

定理 5.6 ([1, Theorem 3.23])**.** ある非負の整数 k が存在して, $\alpha(\beta) \leq A(1+t)^k e^{\beta m}$ が任意の $\beta \geq 0$ で成り立っているとする. $B(\beta) = A\int_0^\beta (1+\xi)^{k+3} e^{\xi m} d\xi$ とおき, クーリングスケジュールを $\beta(t) = B^{-1}(t)$ と定義したとき,

$$\mathbf{P}(X_t \in \mathbf{E}_\delta^c) \leq \|f_0\|_{2,0} e^{2M^2} (\mu_{\beta(t)}(\mathbf{E}_\delta^c))^{\frac{\beta(t)-1}{\beta(t)+1}} \tag{5.16}$$

が成り立つ.

証明 . 定理 5.2 において $\rho(\beta) = (1+\beta)^2, \sigma(\beta) = (1+\beta)^{-1}$ とする. このとき $\Gamma(\beta) = \int_0^\beta (1+\gamma)^3 d\gamma$ となり, $\beta \geq 0$ に対して

$$\Lambda(\beta) := 2e^{2\Gamma(\beta)} - \frac{1}{2}(1+\beta) - (1+\beta)\int_0^{\Gamma(\beta)} \frac{e^{2\gamma}}{1+\Gamma^{-1}(\gamma)} d\gamma$$

とおく. このとき,

$$\begin{aligned}\Lambda'(\beta) &= 3e^{2\Gamma(\beta)}(1+\beta)^3 - \frac{1}{2} - \int_0^\beta (1+\gamma)^2 e^{2\Gamma(\gamma)} d\gamma \\ &\geq 2e^{2\Gamma(\beta)}(1+\beta)^3 - \frac{1}{2} \geq 0\end{aligned}$$

となり, $\Lambda(0) \geq 0$ であるから, $\Lambda(\beta) \geq 0$ がわかる. 以上より $q(t)$ の定義式 (5.6) から任意の $t \geq 0$ に対して,

$$q(t) \geq \frac{1+\beta(t)}{2} \tag{5.17}$$

を満たすことがわかる. 最後に定理 5.2 において $R = \int_0^\infty (1/\rho(\beta)) d\beta = 1$ であるから,

$$\begin{aligned}\mathbf{P}(X_t \in \mathbf{E}_\delta^c) &\leq \|f_0\|_{2,0} e^{2M^2 R} (\mu_{\beta(t)}(\mathbf{E}_\delta^c))^{1-\frac{1}{q(t)}} \\ &\leq \|f_0\|_{2,0} e^{2M^2} (\mu_{\beta(t)}(\mathbf{E}_\delta^c))^{\frac{\beta(t)-1}{\beta(t)+1}}\end{aligned}$$

が成り立つので示される. □

実際には, 式 (5.8) が成り立って, 式 (5.10) が成り立ってない場合は定理 5.3 を用いて, $B(\beta) = A\int_0^\beta (1+\xi)^3 e^{\xi M} d\xi$ とおき, 式 (5.9) と式 (5.10) が成り立っている場合は定理 5.5 を用いて, $B(\beta) = A\int_0^\beta (1+\xi)^4 e^{\xi m} d\xi$ とおいて, クーリングスケジュール $\beta(t) = B^{-1}(t)$ とすれば, 定理 5.6 より式 (5.16) が成り立つ. このときクーリングスケジュールは以下の評価を与えることができる.

補題 5.7. $B(\beta) = A\int_0^\beta (1+\xi)^{k+3} e^{\xi m} d\xi$ とおいて, $\beta(t) = B^{-1}(t)$ とすると,

$$\frac{1}{m}\log\left(1+\frac{mt}{A}\right) > \beta(t) \geq \frac{1}{m}\log\left[1+\frac{mt}{A\left(1+\frac{1}{m}\log\left(1+\frac{mt}{A}\right)\right)^{k+3}}\right]$$

が成り立つ.

証明 . 最初に上からの評価を与える.

$$t = B(\beta(t)) > \int_0^{\beta(t)} Ae^{m\xi} d\xi = \frac{A}{m}(e^{m\beta(t)} - 1)$$

が任意の $t \geq 0$ で成り立つから,

$$\beta(t) < \frac{1}{m} \log \left(1 + \frac{mt}{A} \right) \tag{5.18}$$

次に下からの評価を与える. 式 (5.18) より,

$$\begin{aligned} t = B(\beta(t)) &\leq A(1 + \beta(t))^{k+3} \int_0^{\beta(t)} e^{m\xi} d\xi \\ &\leq \frac{A}{m} \left[1 + \frac{1}{m} \log \left(1 + \frac{mt}{A} \right) \right]^{k+3} (e^{m\beta(t)} - 1) \end{aligned}$$

であるから,

$$\beta(t) \geq \frac{1}{m} \log \left[1 + \frac{mt}{A \left(1 + \frac{1}{m} \log \left(1 + \frac{mt}{A} \right) \right)^{k+3}} \right]$$

が成り立つ. □

$B(\beta) = A \int_0^\beta (1+\xi)^{k+3} e^{\xi m} d\xi$ とおいて, $\beta(t) = B^{-1}(t)$ とすると, 補題 5.7 から,

$$\frac{mt}{A \left(1 + \frac{1}{m} \log \left(1 + \frac{mt}{A} \right) \right)^{k+3}} \leq \lambda(t) \leq \frac{mt}{A}$$

を満たす $\lambda(t)$ を用いて, $\beta(t) = (1/m) \log(1 + \lambda(t))$ とすることができる. ここで $\lambda(t)$ は, 任意の $\varepsilon < 1$ に対して $\lim_{t\to\infty} t^\varepsilon / \lambda(t) = 0$ を満たしている. 式 (5.17) から $q(t)$ は $\beta(t)$ と同程度で増大していくことがわかる. 最後に, 式 (5.16) は指数が時刻が経過するにつれ大きくなっているので, 定理 5.6 は良い評価を与えていることがわかる.

参考文献

[1] R. Holley and D. Stroock, *Simulated annealing via Sobolev inequalities,* Comm. Math. Phys. **115** (1988), 553–569.

[2] D. Stroock, *An Introduction to the Theory of Large Deviations*, Springer, 1984.

[3] D. Stroock, *An Introduction to Markov Processes*, Springer-Berlin. 2005.

[4] B. Hajek, *Cooling schedules for optimal annealing*, Math. Oper. Res. **13** (1988), 311–329.

[5] P. Diaconis and L. Saloff-Coste, *Logarithmic Sobolev inequalities for finite Markov chains*, Ann. Appl. Probab. **6** (1996) 695–750.

[6] Salloff-Coste, *Lectures on finite Markov chains*, Lecture Notes on Probability Theory and Statistics, Lecture Notes in Math, **1665** (1996) 301–413. Springer-Berlin.

[7] L. Saloff-Coste, *Aspects of Sobolev-type inequalities*, London Math. Soc. Lecture Note Ser. vol. 289, Cambridge Univ. Press, Cambridge. 2002

[8] J. Norris, *Markov Chains*, Cambridge University Press, 1997