初稿公開日: 2021 年 7 月 12 日
最終更新日: 2021 年 7 月 12 日
日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター 久保勝規

重点サンプリング

サンプルの生成手続き

状態の集合 $\{x_i\}$ $(i = 1, 2, \cdots)$ を作るとき、$x_i = x$ となる i の個数が分布 $P(x)$ に比例するようにしたい。そのためには次のようにすれば良いことが知られている。

1. ある状態 x のときに、次に遷移する候補 y を確率 $S(x \to y)$ で選ぶ。S は以下を満たすとする。
   - $\sum_y S(x \to y) = 1.$
   - $S(x \to y) = S(y \to x).$
   - 全ての状態はゼロでない S によって繋がっている（直接繋がっている必要はない)。
2. 次に遷移する候補として、y が選ばれたとき、
   y に更新する確率を $w(x \to y)$ とする。このとき、

   $$P(x)w(x \to y) = P(y)w(y \to x),$$

   を要請する。これを詳細釣り合いの条件という。

これを満たすには、例えば、

$$w(x \to y) = \begin{cases} P(y)/P(x) & \text{if } P(y) < P(x) \\ 1 & \text{otherwise} \end{cases},$$

とすれば良い（メトロポリス法)。

サンプルの分布が $P(x)$ に収束することの証明

たくさんの系を用意する。そのうち状態 x である系が N_x 個あったとする。
次のステップで x である系の数の変化は、詳細釣り合いの条件を課すと

$$\begin{aligned}
&\sum_{y \neq x} N_y S(y \to x) w(y \to x) - \sum_{y \neq x} N_x S(x \to y) w(x \to y) \\
&= \sum_{y \neq x} \left[N_y S(x \to y) \frac{P(x)}{P(y)} w(x \to y) - N_x S(x \to y) w(x \to y) \right] \\
&= \sum_{y \neq x} N_y S(x \to y) w(x \to y) \left[\frac{P(x)}{P(y)} - \frac{N_x}{N_y} \right].
\end{aligned}$$

よって $P(x)/P(y) > N_x/N_y$ のときは状態 y からの寄与は N_x を増やし、$P(x)/P(y) < N_x/N_y$ のときは状態 y からの寄与は N_x を減らす。これを繰り返していくと、$S(x \to y) = S(y \to x)$ がゼロでない全ての状態 y について $N_y/N_x = P(y)/P(x)$ となる。
全ての状態 x が分布 $P(x)$ に従うためには、全ての状態がゼロでない S によって繋がっていればよい。
たくさんの系を考えるのも、一つの系でたくさんの状態を作るのも最終的には同じことなので、証明終わり。

参考文献

[1] K. Binder and D. W. Heermann “Monte Carlo Simulation in Statistical Physics” 5th ed. (Springer, 2010) p. 17.