

定常分布の存在と収束の証明（別証）

本文では $P(x)$ で定常分布を表わしているのので、以下で任意の分布を意味するときはフォントを変えて \mathcal{P}, \mathcal{Q} 等とする。

分布間の距離を $d(\mathcal{P}, \mathcal{Q}) = \sum_{\mathbf{x}} |\mathcal{P}(\mathbf{x}) - \mathcal{Q}(\mathbf{x})|$ で定義して、任意の分布 $\mathcal{P}_0, \mathcal{Q}_0$ ($\mathcal{P}_0 \neq \mathcal{Q}_0$) について、1 ステップ遷移したあとの分布を $\mathcal{P}_1, \mathcal{Q}_1$

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_1(\mathbf{x}') &= \sum_{\mathbf{x}} \mathcal{P}_0(\mathbf{x}) \pi(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') \\ \mathcal{Q}_1(\mathbf{x}') &= \sum_{\mathbf{x}} \mathcal{Q}_0(\mathbf{x}) \pi(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}')\end{aligned}\quad (1)$$

としたとき、本文の条件 B*のもとで、

$$d(\mathcal{P}_1, \mathcal{Q}_1) < d(\mathcal{P}_0, \mathcal{Q}_0) \quad (2)$$

となることを示すことである。これがわかれば、「区間縮小法」から、遷移を繰り返したときの確率分布が初期分布によらずあるひとつの分布に収束することがわかる。 $P(x)$ が定常分布であれば、収束する先は当然 $P(x)$ になり、逆もまた真である。

分布間の距離を

$$d(\mathcal{P}, \mathcal{Q}) = \sum_{\mathbf{x}} |\mathcal{P}(\mathbf{x}) - \mathcal{Q}(\mathbf{x})| \quad (3)$$

で定義すると、条件 B*を満たす遷移によって、これが縮小すること (2) を証明する¹。議論をきちんと式で書こうとすると、場合分けが面倒である。きれいに書くには、

$$\Theta(a) = \begin{cases} 1 & (a > 0) \\ 0 & (a \leq 0) \end{cases}$$

¹このタイプの証明はあちこちの本にあるが、直接には、Ya. G シナイ『確率論入門コース』（森真訳、シュプリンガー・フェアラーク東京、1995）を参照した。記号や説明は変えた。

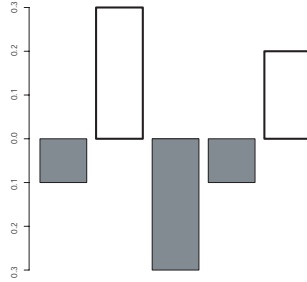


図 1: x が 5 点からなるとして, x を横軸に, $P(x) - Q(x)$ を縦軸にプロットしてある. (4) より灰色の面積と白の面積は等しい. 式 (3) は灰色の面積と白の面積 (ともに絶対値) の和, 式 (5) は白の部分だけの面積である.

と定義すると,

$$\sum_{\mathbf{x}} P(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{x}} Q(\mathbf{x}) = 1 \quad (4)$$

から, 距離 (3) が

$$\frac{1}{2}d(P, Q) = \sum_{\mathbf{x}} \left\{ (P(\mathbf{x}) - Q(\mathbf{x})) \times \Theta(P(\mathbf{x}) - Q(\mathbf{x})) \right\} \quad (5)$$

と書きなおせることを使うとよい. これは式だけでもすぐわかるが, 図 1 を見るとより直観的に理解できる.

それでは, 条件 B^* と $P \neq Q$ を仮定して, 不等式 (2) を示そう. 以下では, 遷移確率 $\pi(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}')$ という記号は場所を取るなので, $\pi_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'}$ と略記する. まず, 式 (5) に式 (1) を代入すると,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}d(P', Q') &= \sum_{\mathbf{x}'} \left\{ (P'(\mathbf{x}') - Q'(\mathbf{x}')) \times \Theta(P'(\mathbf{x}') - Q'(\mathbf{x}')) \right\} \\ &= \sum_{\mathbf{x}'} \left\{ \left(\sum_{\mathbf{x}} (P(\mathbf{x}) - Q(\mathbf{x})) \pi_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'} \right) \times \Theta(P'(\mathbf{x}') - Q'(\mathbf{x}')) \right\} \\ &= \sum_{\mathbf{x}} \left[(P(\mathbf{x}) - Q(\mathbf{x})) \times \left\{ \sum_{\mathbf{x}'} \pi_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'} \Theta(P'(\mathbf{x}') - Q'(\mathbf{x}')) \right\} \right] \end{aligned}$$

となる .

ここで、遷移確率 $\pi_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'}$ は定義から負にならないから、 \times のあとの $\{ \}$ の中も任意の \mathbf{x} について非負である . そこで、 \times の前に $\Theta(\mathcal{P}(\mathbf{x}) - \mathcal{Q}(\mathbf{x}))$ を突っ込むと

$$\frac{1}{2}d(\mathcal{P}', \mathcal{Q}') \leq \sum_{\mathbf{x}} \left[(\mathcal{P}(\mathbf{x}) - \mathcal{Q}(\mathbf{x})) \Theta(\mathcal{P}(\mathbf{x}) - \mathcal{Q}(\mathbf{x})) \times \left\{ \sum_{\mathbf{x}'} \pi_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'} \Theta(\mathcal{P}'(\mathbf{x}') - \mathcal{Q}'(\mathbf{x}')) \right\} \right] \quad (6)$$

が成り立つ . こんどは、右辺の \times の前の因子 $(\mathcal{P}(\mathbf{x}) - \mathcal{Q}(\mathbf{x})) \Theta(\mathcal{P}(\mathbf{x}) - \mathcal{Q}(\mathbf{x}))$ が非負になるので、2 つの $\Theta(\dots)$ のうち後のほうを落としても、右辺全体の値は大きくなる .

$$\frac{1}{2}d(\mathcal{P}', \mathcal{Q}') \leq \left\{ \sum_{\mathbf{x}} (\mathcal{P}(\mathbf{x}) - \mathcal{Q}(\mathbf{x})) \Theta(\mathcal{P}(\mathbf{x}) - \mathcal{Q}(\mathbf{x})) \right\} \times \sum_{\mathbf{x}'} \pi_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'} \quad (7)$$

次が山場である . (7) で、等号ありの \leq でなく、等号なしの $<$ としてよいことを示す . まず、以下の 3 つがなりたつことを確認しよう .

1. $\mathcal{P} \neq \mathcal{Q}$ と仮定したので、どれかひとつの $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ について、 $\mathcal{P}(\mathbf{x}^*) - \mathcal{Q}(\mathbf{x}^*) > 0$ となる . これが成り立たないと、確率の和が一定であること $\sum_{\mathbf{x}'} \mathcal{P}'(\mathbf{x}') = \sum_{\mathbf{x}'} \mathcal{Q}'(\mathbf{x}')$ に矛盾する .
2. 同様に、 $\mathcal{P}'(\mathbf{x}') - \mathcal{Q}'(\mathbf{x}') \leq 0$ となる $\mathbf{x}' = \mathbf{x}^{**}$ が少なくとも 1 個ある .
3. はじめの仮定 (条件 B*) より、これらの $\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^{**}$ について $\pi_{\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^{**}} > 0$ となる .

式 (6) に戻って、右辺をばらすと、

$$((\mathcal{P}(\mathbf{x}) - \mathcal{Q}(\mathbf{x})) \Theta(\mathcal{P}(\mathbf{x}) - \mathcal{Q}(\mathbf{x})) \times \pi_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'} \Theta(\mathcal{P}'(\mathbf{x}') - \mathcal{Q}'(\mathbf{x}'))$$

という形の正かゼロの項の和になるが、上の 1. から 3. を満たす $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*, \mathbf{x}' = \mathbf{x}^{**}$ については、2. から 自体はゼロになる .

$$((\mathcal{P}(\mathbf{x}^*) - \mathcal{Q}(\mathbf{x}^*)) \Theta(\mathcal{P}(\mathbf{x}^*) - \mathcal{Q}(\mathbf{x}^*)) \times \pi_{\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^{**}} \Theta(\mathcal{P}'(\mathbf{x}^{**}) - \mathcal{Q}'(\mathbf{x}^{**}))) = 0$$

一方，因子 $\Theta(\mathcal{P}'(\mathbf{x}^{**}) - \mathcal{Q}'(\mathbf{x}^{**}))$ を外したものは 1. と 3. から正になる．

$$((\mathcal{P}(\mathbf{x}^*) - \mathcal{Q}(\mathbf{x}^*))\Theta(\mathcal{P}(\mathbf{x}^*) - \mathcal{Q}(\mathbf{x}^*)) \times \pi_{\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^{**}} > 0$$

もともとすべての項が非負であり，ゼロから正に変わる項が最低ひとつあって，その逆はないので，等号なしの $<$ が成り立つことがわかる．

あとは簡単である．遷移確率の定義より $\sum_{\mathbf{x}'} \pi_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'} = 1$ であるから，式 (6) で \leq を $<$ で置き換えたものは，

$$\frac{1}{2}d(\mathcal{P}', \mathcal{Q}') < \sum_{\mathbf{x}} (\mathcal{P}(\mathbf{x}) - \mathcal{Q}(\mathbf{x}))\Theta(\mathcal{P}(\mathbf{x}) - \mathcal{Q}(\mathbf{x})) = \frac{1}{2}d(\mathcal{P}, \mathcal{Q})$$

となり，求める不等式 (2) が示された．