



# WISSENSWERTES ÜBER DEN METROPOLIS-ALGORITHMUS

SEMINAVORTRAG  
von Stefanie Schmutte

Westfälische Wilhelms-Universität Münster  
Fachbereich Mathematik und Informatik  
Institut für mathematische Statistik

# Inhaltsverzeichnis

<b>0</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>1</b>	<b>Der Metropolis-Algorithmus</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Das Ising-Modell</b>	<b>4</b>
<b>3</b>	<b>Poincaré-Ungleichungen</b>	<b>7</b>
3.1	Anwendung einer Poincaré-Ungleichung . . . . .	8
<b>4</b>	<b>Resümee</b>	<b>9</b>
<b>5</b>	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>10</b>

## 0 Einleitung

Der Metropolis-Algorithmus ist eine weit verbreitete Methode, um Zufallsobjekte gemäß einer bestimmten Verteilung aus einem großen aber endlichen Wahrscheinlichkeitsraum zu ziehen. In diesem Vortrag werden wir uns zu Beginn mit der Funktionsweise des Algorithmus vertraut machen. Dabei werden wir auf die sehr wichtige Frage nach der Konvergenzgeschwindigkeit stoßen. Danach lernen wir das aus der statistischen Physik stammende Ising-Modell kennen, um hierfür im Speziellen einen Metropolis-Algorithmus herzuleiten. Zum Schluss wollen wir uns noch mit der Poincaré-Ungleichung befassen, die beim Beweis von Konvergenzsätzen zur Hilfe gezogen werden kann. Insgesamt werden wir einen groben Überblick über die Leistungen des besagten Algorithmus gewinnen.

## 1 Der Metropolis-Algorithmus

Der Metropolis-Algorithmus gehört zu den Markov-Ketten-Monte-Carlo-Methoden. Diese Methoden helfen bei Simulationsproblemen folgender Art:

Man möchte gemäß einer Verteilung  $\pi$  auf  $S$  ein Zufallsobjekt  $s \in S$  ziehen, wobei der Wahrscheinlichkeitsraum  $S$  endlich ist.

Dies kann aus verschiedenen Gründen auf dem „normalen Weg“ nicht funktionieren. Dabei wollen wir unter dem „normalen Weg“ folgende Vorgehensweise verstehen: Man unterteilt das Einheitsintervall in  $|S|$  Intervalle. Dabei soll jedes Intervall einem  $s \in S$  zugeordnet werden und die Länge  $\pi(s)$  haben. Durch generieren einer auf  $[0, 1]$  gleichverteilten Zufallszahl erhält man ein  $\pi$ -verteiltes Zufallsobjekt, indem man überprüft, in welchem Intervall die Zufallszahl liegt.

Ist diese Methode nicht anwendbar, beispielsweise da die Menge  $S$  so viele Elemente enthält, dass man diese nur mit großem Aufwand zählen kann, geht man gemäß Markov-Ketten-Monte-Carlo-Methode wie folgt vor:

Man konstruiert eine irreduzible und aperiodische Markov-Kette  $M$  auf  $S$ , deren stationäre Verteilung der Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\pi$  entspricht.

Gelingt dies, so sagt uns der Ergodensatz, dass  $\mathbb{P}_x(M_n = \cdot) := \mu^{(n)}$  gegen  $\pi$  konvergiert. Für ein genügend großes  $n$  liefert  $M_n$  also ein näherungsweise  $\pi$ -verteiltes Zufallsobjekt.

Jetzt wollen wir uns anschauen, wie der Metropolis-Algorithmus dieses Vorhaben konkret umsetzt: Dazu sei  $S$  wieder eine endliche Menge und  $\pi$  ein Wahrscheinlichkeitsmaß auf  $S$  mit  $\pi(s) > 0$  für alle  $s \in S$ . Unser Ziel ist es also,  $\pi$ -verteilte Zufallsobjekte zu generieren.

Dazu gehen wir gemäß den folgenden drei Schritten vor:

1. Wir konstruieren eine möglichst einfach zu realisierende, irreduzible und aperiodische Markov-Kette mit den Übergangswahrscheinlichkeiten  $\mathbf{K}(x, y)$  auf  $S$  mit folgender Eigenschaft:

$$\mathbf{K}(x, y) > 0 \iff \mathbf{K}(y, x) > 0 \quad \forall x, y \in S.$$

Dies sei unsere **Vorschlagskette**. Wir stellen fest, dass diese Kette keinesfalls eindeutig ist.

---

<sup>1</sup>Diese Notation bedeutet, dass die Startverteilung das Dirac-Maß auf  $x$  ist.

2. Wir definieren Akzeptanzwahrscheinlichkeiten für  $x, y \in S$ :

$$A(x, y) = \begin{cases} \min \left\{ \frac{\pi(y) \cdot \mathbf{K}(y, x)}{\pi(x) \cdot \mathbf{K}(x, y)}, 1 \right\}, & \text{wenn } \mathbf{K}(x, y) > 0 \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

3. Jetzt definieren wir mit Hilfe der Akzeptanzwahrscheinlichkeiten die Metropolis-Kette  $M$  als Modifikation von der im erste Schritt konstruierten Kette. Dabei soll  $M$  folgenden Übergangswahrscheinlichkeiten genügen:

$$\mathbf{P}(x, y) = \begin{cases} \mathbf{K}(x, y) \cdot A(x, y), & \text{wenn } x \neq y \\ \mathbf{K}(x, y) + \sum_{z \in S} \mathbf{K}(x, z) \cdot (1 - A(x, z)), & \text{wenn } x = y. \end{cases}$$

Der Übergangsmechanismus der soeben definierten Metropolis-Kette lässt sich wie folgt verstehen: Befindet sich die Kette  $M$  im Zustand  $x \in S$ , so wird zunächst ein neuer Zustand  $y \in S$  gemäß der Verteilung  $\mathbf{K}(x, \cdot)$  ermittelt. Es wird also  $y$  als möglicher neuer Zustand vorgeschlagen. Jetzt wird eine Münze geworfen, die mit der Akzeptanzwahrscheinlichkeit  $A(x, y)$  Kopf zeigt. Fällt tatsächlich Kopf, so geht die Metropolis-Kette über in den Zustand  $y$ , ansonsten verweilt sie in  $x$ .

### Satz 1.1

$M$  ist eine irreduzible und aperiodische Markov-Kette, bezüglich der  $\pi$  eine reversible also auch stationäre Verteilung ist. Insbesondere gilt  $P_x^{M_n} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \pi$  und damit ist der Metropolis-Algorithmus eine Markov-Ketten-Monte-Carlo-Methode.

### Beweis

Die Aperiodizität und Irreduzibilität von  $M$  folgen unmittelbar aus der Tatsache, dass die Vorschlagskette diese Eigenschaften bereits erfüllt. Die Modifikation in Schritt 3 lässt nämlich echt positiven Übergangswahrscheinlichkeiten echt positiv. Das ist gerade das Kriterium, das für Irreduzibilität sowie Aperiodizität wichtig ist.

Es bleibt also zu zeigen, dass  $\pi$  die reversible Verteilung bezüglich  $M$  ist:

Wir beweisen:

$$\pi(x) \cdot \mathbf{P}(x, y) = \pi(y) \cdot \mathbf{P}(y, x) \text{ für alle } x, y \in S.$$

Für  $x = y$  ist die Gleichung trivialerweise erfüllt. Also gelte im Folgenden  $x \neq y$ . Außerdem nehmen wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit  $A(x, y) = 1$  an<sup>2</sup>. Daraus folgt  $A(y, x) \leq 1$  sowie

$$\pi(x) \cdot \mathbf{P}(x, y) = \pi(x) \cdot \mathbf{K}(x, y) = \pi(y) \cdot \mathbf{K}(y, x) \cdot \frac{\pi(x) \cdot \mathbf{K}(x, y)}{\pi(y) \cdot \mathbf{K}(y, x)} = \pi(y) \cdot \mathbf{P}(y, x)$$

und somit die Behauptung. □

### Anmerkungen

- Oft ist ein Wahrscheinlichkeitsmaß  $\pi$  auf  $S$  nur durch  $\pi(x) \propto e^{-H(x)}$  gegeben. Gewöhnlich ist die Konstante nicht oder nur schwer berechenbar. Ein Vorteil des Metropolis-Algorithmus liegt darin, dass sich diese Konstante in der Akzeptanzwahrscheinlichkeit  $A$  wegekürzt und somit nicht benötigt wird.

---

<sup>2</sup>Ansonsten wäre  $A(y, x) = 1$  und wir vertauschen die Bezeichnung von  $x$  und  $y$ .

- Der Satz 1.1 liefert zwar eine hilfreiche Aussage, aber zufriedenstellend ist dieses Ergebnis nicht. Uns fehlen jegliche Angaben zur Konvergenzgeschwindigkeit. Das bedeutet, wir benötigen Angaben, wie lange wir den Algorithmus laufen lassen müssen, um genügend nah bei  $\pi$  zu sein. An dieser Problemstellung wird zur Zeit noch geforscht, da unter anderem viele bereits bewiesene Abschätzungen vermutlich noch verbessert werden können.

Im Folgenden sehen wir, wie der Metropolis-Algorithmus auf ein einfaches Beispiel übertragen wird und wie eine Abschätzung zur Konvergenzgeschwindigkeit aussehen kann.

## 2 Das Ising-Modell

Ein bekanntes Modell der statistischen Physik ist das Ising-Modell. Es beschreibt in stark vereinfachter Form, wie man sich einen Ferromagneten vorstellen kann. Ferromagneten sind Materialien, die entweder von selbst oder durch äußere Einwirkung ein Magnetfeld ausbilden. Die drei bei Raumtemperatur ferromagnetischen Elemente sind Eisen, Nickel und Kobalt.

Wir wollen uns einen Ferromagneten als zweidimensionales Gitter vorstellen. Der Ferromagnet  $\Lambda$  sei eine zusammenhängende und endliche Teilmenge des  $\mathbb{Z}^2$ . Nummerieren wir  $\Lambda$  durch, so erhalten wir  $\Lambda = \{1, \dots, N\}$ . Jeden Knoten in  $\Lambda$  interpretieren wir als Elementarmagneten, der sich entweder nach oben (+1) oder nach unten (-1) ausrichten kann. Die Abbildung 1 zeigt uns, wie so etwas aussehen kann.

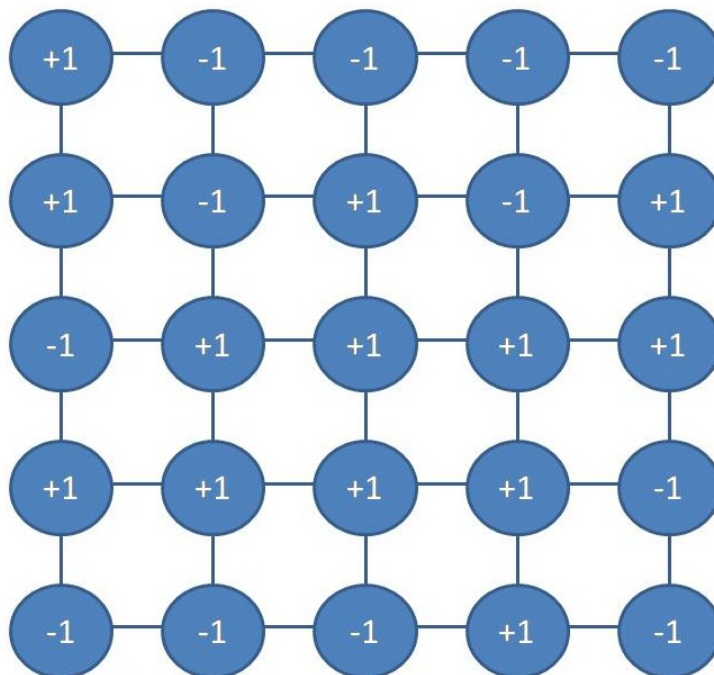


Abbildung 1: Beispielkonfiguration auf dem Modell eines Ferromagneten

Wir folgern, dass  $S = \{x : \Lambda \rightarrow \{-1, +1\}\}$  die Menge aller denkbaren Zustände ist. Im Weiteren sei  $x(i) = x_i$  die Ausrichtung des  $i$ -ten Elementarmagneten. Außerdem führen wir eine Randbedingung  $s$  der folgenden Form ein:

$$s : \Lambda' \rightarrow \{-1, +1\} \text{ mit } \Lambda' = \{z \in \mathbb{Z}^2 / \Lambda : z \text{ hat von } \Lambda \text{ den Abstand } 1\} = \{N + 1, \dots, m\}.$$

Wir setzen  $s(i) = x_i$ . Nun wollen wir eine Familie von Wahrscheinlichkeitsmaßen  $\pi$  auf  $S$  definieren:

$$\pi(x) \propto \exp\left\{\beta \cdot \left(\sum_{\langle i,j \rangle} x_i \cdot x_j + h \cdot \sum_{i \in \Lambda} x_i\right)\right\}$$

$\langle i, j \rangle$  steht für alle benachbarte Paare in  $\mathbb{Z}^2$ , wobei

mindestens eines der Elemente in  $\Lambda$  liegt.

$\beta = \frac{1}{T}$ : inverse Temperatur

$h \in \mathbb{R}$ : Stärke des externen Feldes.

Durch genaues Hinsehen erkennt man, dass das Verhalten der Ferromagneten stark von der gegebenen Temperatur abhängt. Und zwar konvergiert  $\pi$  für  $T \rightarrow \infty$  gegen die Gleichverteilung. Das liegt daran, dass für  $T \rightarrow \infty$   $\beta$  gegen 0 konvergiert und für  $\beta = 0$  hat gerade jede Konfiguration auf  $\Lambda$  die gleiche Wahrscheinlichkeit.

Andererseits gilt für  $T \rightarrow 0$ , dass der Ferromagnet seine komplette Magnetisierung erfährt. Das bedeutet, dass sich die Elementarmagneten entweder alle nach oben oder nach unten ausrichten, je nachdem welches Vorzeichen  $h$ , die Stärke des externen Feldes, hat. Der Grund ist, dass für größer werdendes  $\beta$  Konfigurationen mit besonders vielen gleichgerichteten Elementarmagneten bevorzugt auftreten. Denn für diese Konfigurationen ist der Exponent

$$\beta \cdot \left( \sum_{\langle i,j \rangle} x_i \cdot x_j + h \cdot \sum_{i \in \Lambda} x_i \right)$$

besonders groß.

Beim Simulationsversuch eines  $\pi$ -verteilten Zufallsobjekt trifft man auf das Problem der nicht oder nur schwer berechenbaren Konstante. Somit liefert die Herleitung eines Metropolis-Algorithmus eine annähernde Lösung unseres Problems.

Deshalb wollen wir nun den im letzten Kapitel beschriebenen drei Schritten folgen, um eine Metropolis-Kette für das Ising-Modell zu erhalten. Die Vorschlagskette soll wie folgt charakterisiert sein:

Wähle  $i \in \Lambda$  gemäß Laplace-Verteilung und ändere  $x_i$  in  $-x_i$  um. Daraus folgern wir:

1. Vorschlagskette:

$$\mathbf{K}(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{N}, & \exists l \in \Lambda : x_l = -y_l, x_l = y_l \forall j \neq l \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

2. Akzeptanzwahrscheinlichkeiten für  $x, y \in S$  mit  $\mathbf{K}(x, y) > 0$ ,  $l$  sei definiert wie in Schritt 1:

$$\begin{aligned} A(x, y) &= \min \left\{ \frac{\pi(y)}{\pi(x)}, 1 \right\} \\ &= \min \left\{ \exp \left\{ \beta \cdot \left( \sum_{\langle i,j \rangle} y_i \cdot y_j + h \cdot \sum_{i \in \Lambda} y_i - \sum_{\langle i,j \rangle} x_i \cdot x_j - h \cdot \sum_{i \in \Lambda} x_i \right) \right\}, 1 \right\} \\ &= \min \left\{ \exp \left\{ -2 \cdot x_l \cdot \beta \cdot \left( h + \sum_{j \in \Lambda, j \neq l} x_j \right) \right\}, 1 \right\} \end{aligned}$$

Bei der ersten Gleichung haben wir ausgenutzt, dass  $\mathbf{K}$  symmetrisch ist.

3. Übergangswahrscheinlichkeiten der Metropolis-Kette:

$$\mathbf{P}(x, y) = \begin{cases} \mathbf{K}(x, y) \cdot A(x, y), & \text{wenn } x \neq y \\ \mathbf{K}(x, y) + \sum_{z \in S} \mathbf{K}(x, z) \cdot (1 - A(x, z)), & \text{wenn } x = y. \end{cases}$$

Dieser Algorithmus wurde eingehend bezüglich des Konvergenzverhaltens untersucht. Dabei wurden Fallunterscheidungen vorgenommen und folgende interessante Resultate erzielt:

1.  $h = 0, \beta > \beta_C$

In diesem Bereich tritt der sogenannte Phasenübergang ein. Die Konvergenzordnung beträgt hier  $O(e^{|\Lambda|})$ . Somit ist man weit entfernt von schneller Konvergenz.

2. Es gelte nicht ( $h = 0$  und  $\beta \geq \beta_C$ ).

$O(|\Lambda| \cdot \log |\Lambda|)$  Schritte genügen. Es liegt schnelle Konvergenz vor.

3.  $h = 0, \beta = \beta_C$

Für diesen Fall haben Mathematiker die Hoffnung, dass  $O(|\Lambda|^p)$  mit  $p > 2$  Schritte ausreichen. Hierzu gibt es jedoch bislang keinen Beweis.

Zum Ende des Kapitels wollen wir noch einen konkreten Konvergenzsatz angeben. Dazu sei  $\hat{M}$  eine Modifikation unserer Metropolis-Kette  $M$  mit den Übergangswahrscheinlichkeiten:

$$\hat{\mathbf{P}}(x, y) = \frac{1}{2}(I + \mathbf{P}(x, y)).$$

Auch dies ist wieder eine geeignete Metropolis-Kette.

### Satz 2.1 (Martinelli-Olivieri-Schonmann)

Sei  $\Lambda \subset \mathbb{Z}^2$  quadratisch mit  $|\Lambda| = N$ . Für  $\beta, h$ , für die nicht ( $h = 0$  und  $\beta \geq \beta_C$ ) gilt (2. Fall), erfüllt  $\hat{\mathbf{P}}$  folgende Ungleichung:

$$\left\| \hat{\mathbf{P}}^n(x, \cdot) - \pi(\cdot) \right\|_{TV} \leq A \cdot e^{-B \cdot \frac{n}{N \cdot \log(N)}}.$$

Dabei sind  $A, B$  Funktionen, die nur von  $\beta$  und  $h$  abhängen (nicht von  $x, s$ )

### Anmerkungen

- Dieses Ergebnis verdeutlicht, dass die im 2. Fall behauptete Konvergenzgeschwindigkeit  $N \cdot \log(N)$  zutreffend ist.
- Der Beweis basiert unter anderem auf einer  $\log$ -Sobolev-Ungleichung, die bestimmte Eigenwerte der Übergangsmatrix abschätzt. Im nächsten Kapitel werden wir eine ähnliche Ungleichung kennenlernen und zwar die Poincaré-Ungleichung. Sie schätzt ebenfalls Eigenwerte und kann ebenfalls zum Beweis von Konvergenzsätzen herangezogen werden.



### 3 Poincaré-Ungleichungen

Wie zuletzt angemerkt, schätzen Poincaré-Ungleichungen Eigenwerte von Übergangsmatrizen ab. Diese Abschätzungen sollen im Weiteren hilfreich für den Beweis von Konvergenzsätzen sein. Wir stellen uns daher die Frage:

Was haben die Eigenwerte eines Metropolis-Algorithmus, präziser ausgedrückt die Eigenwerte der Übergangsmatrix, mit der Konvergenzgeschwindigkeit zu tun?

Um diese Frage zu beantworten, ziehen wir folgenden Satz zur Hilfe:

**Satz 3.1**

Für eine Metropolis-Kette  $M$  mit der stationären Verteilung  $\pi$  und den Eigenwerten  $\lambda_0 \leq \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_{k-1}$  gilt:

$$2 \cdot \|\mathbf{P}^n(x, \cdot) - \pi\|_{TV} \leq \frac{1}{\sqrt{\pi(x)}} \cdot \tilde{\lambda}^n$$

mit  $\tilde{\lambda} = \max(\lambda_1, |\lambda_{k-1}|)$ .

Dieser Satz veranschaulicht, warum Eigenwertabschätzungen zum Beweis von Konvergenzsätzen sinnvoll sein können. Damit ist unsere Ausgangsfrage beantwortet und wir können uns damit beschäftigen, wie eine Poincaré-Ungleichung aussieht:

Dazu sei eine Metropolis-Kette mit Übergangsmatrix  $\mathbf{P}$ , stationärer Verteilung  $\pi$  und (endlichem) Zustandsraum  $S$  gegeben. Üblicherweise hat eine Poincaré-Ungleichung die Form

$$\text{Var}(f) \leq \kappa \cdot \mathcal{E}(f).$$

Dieser Ausdruck muss für alle reellen Funktionen  $f$  gelten, wobei wir

$$\mathcal{E}(f) = \frac{1}{2} \cdot \sum_{x,y} (f(x) - f(y))^2 \cdot \pi(x) \cdot \mathbf{P}(x, y)$$

setzen.

Hat man ein solches  $\kappa$  gefunden, so kann man nachstehende Eigenwertabschätzung folgern:

$$\lambda_1 \leq 1 - \frac{1}{\kappa}.$$

Wir werden nun eine Möglichkeit kennenlernen, solch ein  $\kappa$  zu berechnen. Dazu definieren wir

$$Q(x, y) := \pi(x) \cdot \mathbf{P}(x, y) = \pi(y) \cdot \mathbf{P}(y, x).$$

Die zweite Gleichung folgt aus der Reversibilität von Metropolis-Ketten.

Nun visualisieren wir den Zustandsraum  $S$  mit Hilfe eines Graphen  $G = (S, E)$ . Dabei entspricht jeder Knoten des Graphen einem Zustand. Für die Kantenmenge  $E$  gilt, dass eine Kante genau dann zwischen  $x$  und  $y$  existiert, wenn  $Q(x, y) > 0$  erfüllt ist. Das ist äquivalent zu  $\mathbf{P}(x, y) > 0$ .

Für je zwei verschiedene  $x, y \in S$  wählen wir einen konkreten Weg  $\gamma_{x,y}$  gemäß dem Graphen, wobei jede Kante maximal einmal überschritten werden darf. Diese Wege existieren aufgrund der vorliegenden Irreduzibilität. Man beachte jedoch, dass die Wege nicht eindeutig sein müssen.

$\Gamma$  sei die Menge all dieser Wege. Jetzt können wir für  $\gamma_{x,y} \in \Gamma$  die Länge definieren durch

$$|\gamma_{x,y}| = |\{e \in E \mid e \in \gamma_{x,y}\}|$$

und

$$\kappa(\Gamma) = \max_{e: \text{gerichtete Kante}} Q(e)^{-1} \sum_{\gamma_{x,y} \ni e} |\gamma_{x,y}| \cdot \pi(x) \cdot \pi(y).$$

Mit diesen Definitionen lässt sich ein hilfreicher Satz formulieren:

**Satz 3.2**

Es sei eine Metropolis-Kette gegeben mit  $\kappa(\Gamma)$ . Dann gilt für den zweitgrößten Eigenwert der Übergangsmatrix

$$\lambda_1 \leq 1 - \frac{1}{\kappa(\Gamma)}.$$

Auf diesen Satz werden wir im nächsten Abschnitt zurückgreifen.

### 3.1 Anwendung einer Poincaré-Ungleichung

In diesem Kapitel soll es um Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf  $S = \{1, \dots, N\}$  gehen. Die einzige Information, die wir über das zu simulierende Maß  $\mu$  auf  $S$  haben, ist, dass es ein einziges lokales Maximum besitzt. Das bedeutet, liegt die meiste Masse von  $\mu$  auf  $k \in S$ , so nehmen die Wahrscheinlichkeiten sowohl nach 1 als auch nach  $N$  ab. Um einen geeigneten Metropolis-Algorithmus zu finden, soll als Vorschlagskette der „nearest neighbor random walk“ gewählt werden. Dieser erfüllt die folgenden Übergangswahrscheinlichkeiten:

$$\mathbf{K}(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{2}, & \text{wenn } y = (x + 1) \wedge N \text{ oder } y = (x - 1) \vee 0 \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Um die konkrete Metropolis-Kette zu erhalten, müsste man jetzt noch den Schritten 2 und 3 (siehe Kapitel 1) folgen. Für die daraus resultierende Familie von Metropolis-Algorithmen formulieren wir den folgenden Satz.

**Satz 3.3**

Sei  $\mu$  ein Wahrscheinlichkeitsmaß auf  $S = \{1, \dots, N\}$  mit nur einem lokalen Maximum in  $k$ . Des Weiteren sei  $M$  die Metropolis-Kette für  $\mu$  basierend auf dem „nearest neighbor random walk“. Dann gilt für den zweitgrößten Eigenwert

$$\lambda_1(M) \leq 1 - \frac{1}{2 \cdot N^2}.$$

**Beweis**

Wir wollen eine Poincaré-Ungleichung herleiten. Dafür wählen wir die Wege  $\gamma_{x,y}$  folgendermaßen: Für  $x, y \in S$  mit  $x < y$  sei  $\gamma_{x,y} = (x, x + 1, \dots, y - 1, y)$  und  $\gamma_{y,x}$  sei entsprechend der umgekehrte Weg. Wenden wir Satz 3.3 an, so erhalten wir die Abschätzung  $\beta_1(M) \leq 1 - \frac{1}{\kappa(\Gamma)}$  mit

$$\kappa(\Gamma) = \max_{e: \text{gerichtete Kante}} Q(e)^{-1} \sum_{\gamma_{x,y} \ni e} |\gamma_{x,y}| \cdot \pi(x) \cdot \pi(y).$$

Wir wollen nun eine obere Schranke für  $\kappa(\Gamma)$  finden. Dazu betrachten wir den Knoten  $e = (i, i + 1)$ . Wir nehmen an, dass  $i + 1 \leq k$  gilt und folgern

$$\begin{aligned} Q(e) &= \pi(i) \cdot \mathbf{P}(i, i + 1) \\ &= \pi(i) \cdot \frac{1}{2} \cdot \min \left\{ \frac{\pi(i + 1)}{\pi(i)}, 1 \right\} \\ &= \frac{1}{2} \cdot \pi(i). \end{aligned}$$

Des Weiteren können wir aufgrund unserer Wahl von  $\Gamma$  die Abschätzung  $|\gamma_{x,y}| \leq N$  vornehmen, sodass wir

$$\begin{aligned} & \frac{1}{Q(i, i+1)} \sum_{\gamma_{x,y} \ni (i,i+1)} |\gamma_{x,y}| \cdot \pi(x) \cdot \pi(y) \\ & \leq 2 \cdot N \cdot \underbrace{\left( \sum_{x \leq i} \frac{\pi(x)}{\pi(i)} \right)}_* \cdot \underbrace{\left( \sum_{y \geq i+1} \pi(y) \right)}_{**} \end{aligned}$$

erhalten. Es gilt für jeden Summanden in  $*$   $\frac{\pi(x)}{\pi(i)} \leq 1$ , da wir  $x \leq i < k$  angenommen haben. Somit lässt sich der gesamte Term über  $*$  durch  $N$  als obere Schranke abschätzen. Für  $**$  wählen wir 1 als obere Grenze.

Zum gleichen Resultat kommt man im Fall  $k \leq i$ , sodass wir eine obere Schranke von  $\kappa(\Gamma)$  gefunden haben, und zwar

$$\kappa(\Gamma) \leq 2 \cdot N^2.$$

Dieses Ergebnis liefert uns die Behauptung

$$\beta_1(M) \leq 1 - \frac{1}{\kappa(\Gamma)} \leq 1 - \frac{1}{2 \cdot N^2}.$$

□

## 4 Resümee

Durch diesen Vortrag haben wir einen groben Überblick über den Metropolis-Algorithmus bekommen. Wir haben die Funktionsweise kennengelernt sowie ein Hilfsmittel zur Bestimmung von Konvergenzgeschwindigkeiten. Außerdem ist uns klar geworden, dass dieses Teilgebiet der Wahrscheinlichkeitstheorie nicht endgültig erforscht ist und wir deshalb in Zukunft mit weiteren Erkenntnissen rechnen können.

## 5 Literaturverzeichnis

1. Diaconis, P.; Saloff-Coste, L: WHAT DO WE KNOW ABOUT THE METROPOLIS ALGORITHM? In: *Journal of Computer and System Sciences*, Nr.57, 1998, S. 20-36
2. Häggström, Olle: *Finite Markov Chains and Algorithmic Applications*, Cambridge: Cambridge University Press, 2003
3. *Konvergenzraten von irreduziblen Markovketten* [online]. Berlin, 2012. Internet: <http://www3.math.tu-berlin.de/Vorlesungen/WS12/StoMo/konv.pdf>  
[Zugriff: 2013-01-17, 17:08 Uhr MESZ]
4. Diaconis, P.; Saloff-Coste, L: Geometric bounds for eigenvalues for Markov chains. In: *The Annals of Applied Probability*, Nr.1, S. 36-61, 1991
5. Sinclair, Alistair; Jerrum, Mark: Approximate Counting, Uniform Generation and Rapidly Mixing Markov Chains. In: *Information and Computation*, Nr. 82, S.93-133, 1989