Wissenswertes über den Metropolis-Algorithmus

vorgetragen von: Stefanie Schmutte

Wichtige Definitionen und Sätze

Satz 1

Für eine Markov-Kette $X = (X_0, X_1, ...)$ mit Zustandsraum $S = \{1, ..., k\}$, Anfangsverteilung $\mu^{(0)}$ und Übergangsmatrix $\mathbf{P}$ gilt für alle $n \in \mathbb{N}_{>0}$

$$\mu^{(n)} = \mu^{(0)} \cdot \mathbf{P}^n.$$

Dabei bezeichnet $\mu^{(n)}$ die Verteilung auf S zum Zeitpunkt n.

Definition 2 (Irreduzibilität)

Eine Markov-Kette ist irreduzibel, wenn es für alle i, $j \in S$ ein n gibt, sodass gilt:

$$\mathbb{P}(X_n = j \mid X_0 = i) > 0.$$

Definition 3 (Aperiodizität)

Eine Markov-Kette X ist aperiodisch, wenn für alle $s \in S$ folgende Gleichung gültig ist:

$$ggT\{n \geq 1 \mid \mathbb{P}(X_n = s \mid X_0 = s) > 0\} = 1.$$

Definition 4 (stationäre Verteilung)

Eine Wahrscheinlichkeitsverteilung π auf S heißt stationär bezüglich einer Markov-Kette mit Übergangsmatrix $\mathbf{P}$, wenn

$$\pi \cdot \mathbf{P} = \pi$$

gilt.

Definition 5 (Reversibilität)

Eine Wahrscheinlichkeitsverteilung π auf dem Zustandsraum $S = \{1, ..., k\}$ ist reversibel bezüglich einer Markov-Kette X auf S, wenn für alle $i, j \in S$

$$\pi(i) \cdot \mathbf{P}_{i,j} = \pi(s_j) \cdot \mathbf{P}_{j,i}$$

gilt. Insbesondere folgt aus der Reversibilität die Stationarität.

Definition 6 (Totalvariations-Abstand)

Seien $\nu^{(1)}$ und $\nu^{(2)}$ Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf $S = \{1, ..., k\}$, dann ist der Totalvariations-Abstand der beiden Verteilungen wie folgt definiert:

$$d_{TV}(\nu^{(1)}, \nu^{(2)}) = \max_{A \subseteq S} \left| \nu^{(1)}(A) - \nu^{(2)}(A) \right|.$$

Satz 7 (Ergodensatz)

Sei X eine irreduzible und aperiodische Markov-Kette mit Zustandsraum $S = \{1, ..., k\}$, stationärer Verteilung π und einer beliebigen Anfangsverteilung $\mu^{(0)}$. Dann gilt

$$\mu^{(n)} \xrightarrow[\text{TV}]{n \to \infty} \pi.$$

Metropolis-Algorithmus

1. Konstruiere eine (beliebige) irreduzible und aperiodische Markov-Kette mit den Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{K}(x,y)$ auf S mit der Eigenschaft:

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

2. Definiere Akzeptanzwahrscheinlichkeiten

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

3. Definiere die Metropolis-Kette M. Dabei soll M folgenden Übergangswahrscheinlichkeiten genügen:

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

Wahrscheinlichkeitsmaß im Ising-Modell

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

$\langle i,j\rangle$ steht für alle benachbarte Paare in $\mathbb{Z}^2$, wobei mindestens eines der Elemente in Λ liegt.

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

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