



**Der Random-Walk-basierte
Metropolis-Hastings Algorithmus:
Konvergenzraten und eine Anwendung auf
das Traveling-Salesman Problem**

Diplomarbeit

Institut für Mathematische Statistik der
Westfälischen-Wilhelms-Universität
Münster

Professor Dr. G. Alsmeyer

vorgelegt von

Franz-Josef Strüber

Februar 2002

Inhaltsverzeichnis

I	Der Metropolis-Hastings Algorithmus und Konvergenzraten der RW-basierten Metropolis-Kette	3
1	Grundlagen	4
2	Der Metropolis-Hastings Algorithmus	9
2.1	Einführung des Metropolis-Hastings Algorithmus	9
2.2	Eigenschaften des Metropolis-Hastings Algorithmus	12
3	Geometrische Ergodizität	20
3.1	Geometrische Ergodizität und die geometrische Drift-Bedingung	20
3.2	Eine erste notwendige Bedingung für geometrische Ergodizität .	22
4	Geometrische Ergodizität bei super-exponentiellen Zieldichten	30
4.1	Super-exponentielle Zieldichten und die Konturmannigfaltigkeit $C_{\pi(x)}$	30
4.2	Der Satz 4.5 - Eine äquivalente Bedingung für geometrische Ergodizität	33
4.3	Eine weitere hinreichende Bedingung für geometrische Ergodizität	41
4.4	Geometrische Ergodizität für spezielle super-exponentielle Zieldichten	46
II	Eine Anwendung des Metropolis-Hastings Algorithmus auf das Traveling-Salesman Problem	57
5	Das Traveling-Salesman Problem	58
5.1	Formalismen	58

5.2	Der Metropolis-Hastings Algorithmus als Optimalverfahren . . .	63
5.3	Simulated Annealing	66
5.4	Das „Bundesliga-Problem“	70
III Anhang		72
A Ergänzungen		73
A.1	Ergänzungen zu Kapitel 3	73
A.1.1	Ergänzung zu Satz 3.6	73
A.2	Ergänzungen zu Kapitel 5	74
A.2.1	C++ - Code für die „Bundesliga-Aufgabe“	74
B Begriffe der Differentialgeometrie		79
B.1	Untermannigfaltigkeiten und Gramsche Determinante	79
B.2	Volumen von Untermannigfaltigkeiten	81
Literaturverzeichnis		83

Einleitung

„Insofern sich die Sätze der Mathematik auf die Wirklichkeit beziehen, sind sie nicht sicher, und insofern sie sicher sind, beziehen sie sich nicht auf die Wirklichkeit.“

Albert Einstein

Und dennoch: Auch bei wirklichen Problemen ist es nicht selten am Mathematiker, diese zu lösen. Vor allem ist die Mathematik dann gefragt, wenn das betrachtete Problem eine so große Komplexität besitzt, daß es mit einfachen Methoden nicht mehr zu bewältigen ist.

Ein Instrument, mit dem man u.a. solchen Problemen beizukommen versucht, sind die in jüngerer Zeit vielfach diskutierten *Monte-Carlo Methoden*. Laienhaft gesprochen geht es dabei um das wiederholte Simulieren einer Situation, um über Mittelung der Simulationsergebnisse das reale Ergebnis zu approximieren.

Was aber, wenn das Problem so strukturiert ist, daß man das Ergebnis zwar mit Monte-Carlo Methoden approximieren könnte, jedoch nicht mit erträglichem Aufwand? Was, wenn so viele Simulationen durchgeführt werden müßten, daß die aufgewendeten Ressourcen und zeitlichen Kapazitäten jedem Effizienzgedanken entgegenstünden?

Mit genau diesen Schwierigkeiten setzten sich die fünf Physiker Nicolas Metropolis, Arianna und Marschal Rosenbluth sowie Augusta und Edward Teller (bekannt als „Vater der Wasserstoffbombe“) im Jahre 1953 auseinander (s. [Met]). Das Resultat ihrer Überlegungen war ein Algorithmus, der 1970 von W. Hastings mathematisiert und verallgemeinert wurde (s. [Has]), was ihm den Namen *Metropolis-Hastings Algorithmus* eintrug.

Diesem Metropolis-Hastings Algorithmus werden wir uns in dieser Arbeit zuwenden. Nachdem wir im ersten Kapitel das notwendige Werkzeug für sei-

ne Untersuchung zur Verfügung gestellt haben, werden wir ihn in Kapitel 2 vorstellen und einige charakteristische Eigenschaften festhalten. Andere leicht verständliche Beschreibungen des Metropolis-Hastings Algorithmus findet man bei [C/G] und [H/H]. Des weiteren werden wir in diesem zweiten Kapitel erstmals auf die Frage nach seiner Güte eingehen. Generell kann die Qualität eines solchen Algorithmus an zwei Dingen festgemacht werden:

1. „Wie *genau* kann er das richtige Ergebnis approximieren?“

und

2. „Wie *schnell* kann er es approximieren?“

Bei der Entwicklung ihres Algorithmus betrachteten Metropolis und seine Mitarbeiter zunächst herkömmliche Monte-Carlo Methoden, analysierten sie und merzten ihre Schwächen aus. Daß die sehr befriedigende Antwort auf die erste Frage „*beliebig genau!*“ lauten wird, sollte daher nicht verwundern. Wesentlich interessanter ist die zweite Frage nach der Geschwindigkeit der Approximation, der in den letzten Jahren große Aufmerksamkeit geschenkt wurde (s. z.B. [Men], [R/T] oder [Tie]).

Die von uns vorgestellten Ergebnisse entstammen einer Veröffentlichung von Soren Fiig Jarner und Ernst Hansen aus dem Jahre 2000 (s. [J/H]). Wir werden feststellen, daß der Metropolis-Hastings Algorithmus unter gewissen Umständen exponentiell schnell arbeitet. Diese schnellstmögliche Approximation heißt *geometrische Ergodizität* und ist Gegenstand des dritten Kapitels.

Den Kern dieser Arbeit bildet Kapitel 4, insbesondere der *Satz 4.5*, der uns eine äquivalente Formulierung für die geometrische Ergodizität des Algorithmus liefern wird.

Letztlich verblaßt alle Theorie bekanntermaßen gegenüber der Realität. Deswegen und um Skeptikern wie Albert Einstein zu zeigen, daß der konkrete Bezug der Mathematik auf die Wirklichkeit doch einen Sinn haben kann, wollen wir im letzten Kapitel den Metropolis-Hastings Algorithmus in Aktion erleben, und zwar in Form einer Anwendung auf das vor allem in Wirtschaftswissenschaften diskutierte *Traveling-Salesman Problem* (hierzu [A/K], [B/D], [B/L]).

Teil I

Der Metropolis-Hastings Algorithmus und Konvergenzraten der RW-basierten Metropolis-Kette

Kapitel 1

Grundlagen

In diesem einführenden Kapitel wollen wir das notwendige Rüstzeug zur Verfügung stellen, das uns helfen wird, den Metropolis-Hastings Algorithmus unter die Lupe zu nehmen. Dabei werden wir uns lediglich auf die für uns relevanten Definitionen und Ergebnisse aus der Theorie der stochastischen Prozesse und Markov-Ketten beschränken. Für eine detaillierte Auseinandersetzung mit diesem Thema verweisen wir auf [Als2] sowie [M/T].

Im folgenden sei (S, \mathcal{S}) ein meßbarer Raum, genannt Zustandsraum. Als allererstes benötigen wir

Definition 1.1 Ein *Markov-Kern* P auf (S, \mathcal{S}) ist eine Abbildung $P : S \times \mathcal{S} \rightarrow [0, 1]$ mit folgenden Eigenschaften:

1. $P(x, \cdot) : \mathcal{S} \rightarrow [0, 1]$ ist ein W-Maß auf (S, \mathcal{S}) f.a. $x \in S$.
2. $P(\cdot, A) : S \rightarrow [0, 1]$ ist \mathcal{S} -meßbar f.a. $A \in \mathcal{S}$.

Die genaue Funktionsweise des Metropolis-Hastings Algorithmus werden wir im anschließenden Kapitel vorstellen. An dieser Stelle sei nur kurz und knapp erwähnt, daß jener ein Verfahren zur Konstruktion einer *zeitlich homogenen Markov-Kette* mit noch näher zu spezifizierenden Eigenschaften darstellt. Darum folgt nun die essentielle

Definition 1.2 Es sei $X = (X_n)_{n \geq 0}$ eine Folge von Zufallsgrößen auf einem Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega, \mathcal{A}, \Gamma)$ mit Werten in (S, \mathcal{S}) . X heißt *zeitlich homogene Markov-Kette mit Markov-Kern P und Startverteilung ν* , falls

$$\Gamma(X_0 \in A) = \nu(A)$$

und

$$\Gamma(X_{n+1} \in A \mid X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) = P(x_n, A)$$

f.a. $A \in \mathcal{S}$ und $n \geq 0$ gilt.

Diese Definition ist selbstverständlich nur dann sinnvoll, wenn die bedingten Verteilungen existieren (was z.B für den polnischen Raum $(\mathbb{R}^k, \mathcal{B}^k)$ der Fall ist, vgl. 53.4 in [Als1]). Eine Markov-Kette zeichnet sich also dadurch aus, daß der nächste Zustand der Kette ausschließlich von ihrem gegenwärtigen abhängt.

Ein weiterer zentraler Begriff ist der *n-Schritt-Übergangskern* P^n :

Definition 1.3 Es sei X eine zeitlich homogene Markov-Kette mit Markov-Kern P . Dann heißt

$$P^0(x, A) = \delta_x(A), \quad x \in S, A \in \mathcal{S},$$

für $n = 0$ bzw.

$$P^n(x, A) = \int_S P^{n-1}(y, A) P(x, dy), \quad x \in S, A \in \mathcal{S},$$

für $n \geq 1$ *n-Schritt-Übergangskern* P^n . Dabei bezeichnet δ_x das Dirac-Maß in x .

Zu beachten ist die Identität $P^1 = P$. Satz 1.3 in [Als2] liefert

$$\Gamma(X_{n+k} \in A \mid X_0, \dots, X_n) = \Gamma(X_{n+k} \in A \mid X_n) = P^k(X_n, A)$$

für $A \in \mathcal{S}, n \in \mathbb{N}_0$ und $k \in \mathbb{N}_0$. Mit anderen Worten: $P^k(x, \cdot)$ ist die Verteilung der Markov-Kette nach k Schritten, falls sie sich zum aktuellen Zeitpunkt im Zustand x befindet.

Nach dieser grundlegenden Definition von Markov-Ketten wollen wir eine Reihe von Eigenschaften vorstellen, die diese Ketten charakterisieren. In den anstehenden Definitionen werden diese Eigenschaften stets einem Markov-Kern zugesprochen. Nun ist aber eine zeitlich homogene Markov-Kette bereits durch ihre Anfangsverteilung und ihren Markov-Kern vollständig beschrieben, so daß es legitim ist, die Begriffe für Markov-Ketten und Markov-Kerne gleichermaßen zu verwenden.

Definition 1.4 Ein Markov Kern P auf (S, \mathcal{S}) heißt φ -irreduzibel, wenn f.a. $x \in S$ und $A \in \mathcal{S}$ mit $\varphi(A) > 0$ ein $n \in \mathbb{N}$ existiert, so daß

$$P^n(x, A) > 0$$

gilt. Dabei bezeichnet φ ein nicht-triviales Maß auf (S, \mathcal{S}) . Ist S diskret und φ das Zählmaß auf S , so heißt P auch einfach *irreduzibel*.

Es sei angemerkt, daß für einen φ -irreduziblen Markov-Kern P immer auch ein maximales Irreduzibilitätsmaß ψ konstruiert werden kann. Das bedeutet, P ist ψ -irreduzibel und alle weiteren Irreduzibilitätsmaße sind absolut ψ -stetig (vgl. 4.2.2 in [M/T]). Im weiteren bezeichne ψ stets dieses maximale Irreduzibilitätsmaß.

Definition 1.5 Ein Markov-Kern P heißt *rekurrent*, falls er ψ -irreduzibel ist und f.a. $A \in \mathcal{S}$ mit $\psi(A) > 0$ sowie f.a. $x \in S$

$$E_x \left(\sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{1}_{\{X_n \in A\}} \right) = \infty$$

gilt. Dabei bezeichnet E_x den Erwartungswert bezüglich $P(x, \cdot)$. P heißt *Harrisrekurrent*, falls P ψ -irreduzibel ist und f.a. $x \in S$ und $A \in \mathcal{S}$ mit $\psi(A) > 0$

$$P(x, \{X_n \in A \text{ u.o.}\}) = 1$$

gilt.

Harris-Rekurrenz impliziert insbesondere einfache Rekurrenz und wir notieren, daß im Fall eines diskreten Zustandsraumes hiervon auch die Umkehrung gilt.

Definition 1.6 Eine Menge $C \in \mathcal{S}$ heißt *klein*, falls ein $n \geq 1$, ein $\delta > 0$ sowie ein auf C konzentriertes Wahrscheinlichkeitsmaß ν existieren, so daß die Abschätzung

$$P^n(x, \cdot) \geq \delta \nu(\cdot) \quad \text{f.a. } x \in C \tag{1.1}$$

erfüllt ist.

Für die nächste Definition benötigen wir den Begriff des *d-Zyklus* (gegeben einen ψ -irreduziblen Markov-Kern P). Dieser ist ein System $\{D_0, \dots, D_{d-1}\}$ disjunkter Mengen in \mathcal{S} mit folgenden Eigenschaften:

- (i) $P(x, D_{i+1}) = 1, x \in D_i, i = 0, \dots, d - 1 \pmod{d},$
- (ii) $\psi \left(\left(\bigcup_{i=1}^d D_i \right)^c \right) = 0.$

Definition 1.7 Sei P ψ -irreduzibel. P heißt *d-periodisch*, falls

- (i) ein d -Zyklus existiert,
- (ii) kein \tilde{d} -Zyklus existiert mit $\tilde{d} > d.$

Falls $d = 1,$ heißt P *aperiodisch*.

Für uns werden nur aperiodische Kerne von Interesse sein. Darum ist es umso erfreulicher, daß es unter Hinweis auf 5.5.4 in [M/T] ein handliches Instrument zum Nachweis von Aperiodizität gibt.

Korollar 1.8 Gegeben einen ψ -irreduziblen Markov-Kern $P,$ ist dieser aperiodisch, falls es eine kleine Menge $C \in \mathcal{S}$ gibt mit $\psi(C) > 0$ und

$$ggT \{ n \geq 1 \mid (1.1) \text{ ist für } n \text{ erfüllt} \} = 1.$$

Wie sich noch zeigen wird, ist das wohl grundlegendste Charakteristikum der Metropolis-Kette, daß sie eine vorgegebene Verteilung π als *stationäre Verteilung* besitzt.

Definition 1.9 Ein σ -endliches Maß π auf einem Zustandsraum (S, \mathcal{S}) mit der Eigenschaft

$$\pi(A) = \int_S P(x, A) \pi(dx), \quad A \in \mathcal{S},$$

heißt *stationäres* oder *invariantes Maß* von $P.$ Hat π Gesamtmasse 1, so heißt π auch *stationäre* oder *invariante Verteilung* von $P.$

In diesem Zusammenhang werden wir auch auf den Begriff der *detaillierten Gleichgewichtsgleichung* stoßen.

Definition 1.10 Es sei f die Dichte eines σ -endlichen Maßes und p die Dichte eines Markov-Kerns P auf $(S, \mathcal{S}).$ Man sagt, f und p erfüllen die *detaillierte Gleichgewichtsgleichung,* wenn

$$f(x) p(x, y) = f(y) p(y, x)$$

f.a. $x, y \in S$ gilt.

Wir sind nun ausreichend präpariert, die Untersuchung des Metropolis-Hastings Algorithmus in Angriff zu nehmen. Bevor wir jedoch zur Tat schreiten, sollen die folgenden Begriffsbildungen diesen ersten Abschnitt beschließen:

Definition 1.11 Ist der Markov-Kern P ψ -irreduzibel und besitzt eine invariante Verteilung π , so nennt man P *positiv*.

Definition 1.12 Ist der Markov-Kern P Harris-rekurrent und positiv, so heißt P *positiv Harris*.

Kapitel 2

Der Metropolis-Hastings Algorithmus

2.1 Einführung des Metropolis-Hastings Algorithmus

Wie wir schon im ersten Kapitel berichtet haben, ist der Metropolis-Hastings Algorithmus ein Verfahren zur Konstruktion einer zeitlich homogenen Markov-Kette, genannt Metropolis-Kette. Ebendort haben wir auch erwähnt, daß diese Metropolis-Kette eine vorgegebene Verteilung als stationäre Verteilung besitzt. Nun stellt sich natürlich die Frage nach der Motivation für die Entwicklung einer solchen Kette. Die Antwort liegt im

Satz 2.1 (Ergodensatz) *Der Markov-Kern P sei positiv Harris, aperiodisch und besitze die stationäre Verteilung π . Dann gilt*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|P^n(x, \cdot) - \pi\| = 0 \quad (2.1)$$

für alle $x \in S$.

Beweis: s. 13.3.3 in [M/T]. □

Dabei bezeichnet „ $\|\cdot\|$ “ die Totalvariation für signierte Maße ξ , definiert durch

$$\|\xi\| = 2 \sup_{A \in \mathcal{S}} |\xi(A)|.$$

Bemerkung 2.2 Die Konvergenz in (2.1) bezeichnet man auch als *Ergodizität*.

In vielen Anwendungen ist eine Verteilung π gegeben, deren explizite Berechnung aufgrund ihrer Komplexität ein Effizienzproblem darstellt. Wenn es nun gelingt, eine Markov-Kette mit stationärer Verteilung π zu konstruieren, lehrt der Ergodensatz, daß die n -Schritt-Übergangskerne unter bestimmten Voraussetzungen an P die Verteilung π beliebig dicht (gleichmäßig) approximieren. Tatsächlich stellt sich gerade im Kontext von Simulationsmethoden häufig heraus, daß die Approximationen einfacher zu handhaben sind als π selbst. Für ein konkretes Beispiel verweisen wir auf das letzte Kapitel „*Das Traveling-Salesman Problem*“ dieser Arbeit.

Wir sprechen im weiteren von der *Zielverteilung* π und fordern für diese die Stetigkeit bezüglich eines σ -endlichen Maßes μ . Die μ -Dichte bezeichnen wir ebenfalls mit π , d.h.

$$\pi(dx) = \pi(x) \mu(dx),$$

und nennen sie *Zieldichte*. Außerdem sei ein Markov-Kern Q gegeben, der sogenannte *Kandidaten-Kern*, den wir genauso als μ -stetig voraussetzen mit Dichte q , also

$$Q(x, dy) = q(x, y) \mu(dy), \quad x \in S.$$

Wir haben damit alle Vorbereitungen getroffen, den Metropolis-Hastings Algorithmus vorstellen zu können:

1. Die Metropolis-Kette X werde in einem beliebigen Punkt verankert, also

$$X_0 = x_0 \quad \text{für ein } x_0 \in S.$$

2. Wir betrachten den stochastischen Prozeß $Y = (Y_n)_{n \geq 1}$ auf $(\Omega, \mathcal{A}, \Gamma)$ mit Werten in (S, \mathcal{S}) . Für $n \geq 0$ besitze Y_{n+1} bedingt unter X_n die Verteilung Q , d.h.

$$\Gamma(Y_{n+1} \in \cdot | X_n) = Q(X_n, \cdot).$$

Hinter dieser Festlegung steckt die folgende Anschauung: Abhängig vom gegenwärtigen Zustand der Metropolis-Kette X wählt Y den *Kandidaten* für den nächsten Zustand von X gemäß der Verteilung $Q(X_n, \cdot)$ aus.

3. Für $n \geq 0$ sei Z_{n+1} bedingt unter X_n und Y_{n+1} Bernoulli-verteilt mit

$$\Gamma(Z_{n+1} = 1 | X_n, Y_{n+1}) = \alpha(X_n, Y_{n+1}),$$

wobei α definiert sei durch

$$\alpha(x, y) = \begin{cases} \min \left\{ \frac{\pi(y) q(y, x)}{\pi(x) q(x, y)}, 1 \right\} & , \text{ falls } \pi(x) q(x, y) > 0 \\ 1 & , \text{ falls } \pi(x) q(x, y) = 0 \end{cases}.$$

Der Nachfolgezustand X_{n+1} von X_n ergibt sich nun zu

$$X_{n+1} = Z_{n+1} Y_{n+1} + (1 - Z_{n+1}) X_n.$$

Wir wollen nicht versäumen, der Anschauung auch hier genüge zu tun. Nachdem der Kandidat für den Nachfolgezustand von X_n durch Y_{n+1} vorgeschlagen worden ist, kann dieser Vorschlag vom Algorithmus akzeptiert oder verworfen werden. Man stelle sich etwa einen Münzwurf mit Erfolgswahrscheinlichkeit α vor. Ist der Münzwurf erfolgreich, wird der vorgeschlagene Zustand akzeptiert, und X springt in denselben. Anderenfalls verharrt X in seiner gegenwärtigen Position. α wird deswegen auch *Akzeptanzwahrscheinlichkeit* genannt.

Es mag überflüssig sein zu sagen, daß man die gesamte Metropolis-Kette durch iterative Wiederholung der Schritte 2. und 3. erhält.

Es könnte sich einem die Frage aufdrängen, weshalb α gerade so definiert wurde, wie oben geschehen. Dem weichen wir jedoch an dieser Stelle aus und verweisen auf die Ausführungen nach Satz 2.4. Auf eine beachtliche Konsequenz dieser Definition sei aber schon hier hingewiesen: Die Zielverteilung π muß nur bis auf einen Normierungsfaktor bekannt sein.

Bevor wir nun die ersten Resultate für die Metropolis-Kette erarbeiten, bestimmen wir noch ihren *Metropolis-Kern*. Mit

$$p(x, y) = \begin{cases} q(x, y) \alpha(x, y) & , \text{ falls } x \neq y \\ 0 & , \text{ falls } x = y \end{cases}$$

besitzt dieser offenbar die Gestalt

$$P(x, dy) = p(x, y) \mu(dy) + r(x) \delta_x(dy), \quad x \in S,$$

wobei $r(x)$ die Wahrscheinlichkeit ist, mit der die Kette in x verharrt. Für einen stetigen Zustandsraum wäre

$$r(x) = \int_S (1 - \alpha(x, y)) q(x, y) \mu(dy),$$

und entsprechend im diskreten Fall

$$r(x) = 1 - \sum_{\substack{y \in S \\ y \neq x}} \alpha(x, y) q(x, y).$$

2.2 Eigenschaften des Metropolis-Hastings Algorithmus

Das erste Ergebnis, dem wir uns widmen wollen, ist zugleich das zentrale und inzwischen schon des öfteren genannte: π ist die stationäre Verteilung der Metropolis-Kette. Dieses zu verifizieren gestaltet sich Dank des folgenden Lemmas als kein zu großes Problem.

Lemma 2.3 *Die Dichten π und p erfüllen die detaillierte Gleichgewichtsgleichung*

$$\pi(x) p(x, y) = \pi(y) p(y, x) \tag{2.2}$$

f.a. $x, y \in S$.

Beweis: Hier müssen mehrere Fälle unterschieden werden.

Ist $x \neq y$ und $\pi(x) q(x, y) = 0$ sowie $\pi(y) q(y, x) > 0$, so gilt $\pi(x) p(x, y) = 0$ und $\pi(y) p(y, x) = \pi(y) q(y, x) \min \left\{ \frac{\pi(x) q(x, y)}{\pi(y) q(y, x)}, 1 \right\} = 0$. Analog erhält man die Behauptung für $\pi(x) q(x, y) > 0$, $\pi(y) q(y, x) = 0$ und verschiedene x, y .

Seien schließlich $x \neq y$, $\pi(x) q(x, y) > 0$ und $\pi(y) q(y, x) > 0$. Dabei sei ohne Einschränkung $\pi(x) q(x, y) \geq \pi(y) q(y, x)$ angenommen. Dann erhält man

$$\begin{aligned} \pi(x) p(x, y) &= \pi(x) q(x, y) \min \left\{ \frac{\pi(y) q(y, x)}{\pi(x) q(x, y)}, 1 \right\} \\ &= \pi(y) q(y, x) \\ &= \pi(y) q(y, x) \min \left\{ \frac{\pi(x) q(x, y)}{\pi(y) q(y, x)}, 1 \right\} \\ &= \pi(y) p(y, x). \end{aligned}$$

□

Wir erhalten wie gewünscht:

Satz 2.4 *π ist die stationäre Verteilung des Metropolis-Kerns P .*

Beweis: Sei $A \in \mathcal{S}$. Dann gilt

$$\begin{aligned}
 & \int_S P(x, A) \pi(dx) \\
 &= \int_S \left(\int_A p(x, y) \mu(dy) + r(x) \delta_x(A) \right) \pi(x) \mu(dx) \\
 &= \int_S \int_A \pi(x) p(x, y) \mu(dy) \mu(dx) + \int_S r(x) \delta_x(A) \pi(x) \mu(dx) \\
 &= \int_A \int_S \pi(y) p(y, x) \mu(dx) \mu(dy) + \int_A r(x) \pi(x) \mu(dx) \\
 &= \int_A \left(\int_S p(y, x) \mu(dx) \right) \pi(dy) + \int_A r(x) \pi(dx) \\
 &= \int_A (1 - r(y)) \pi(dy) + \int_A r(y) \pi(dy) \\
 &= \pi(A),
 \end{aligned}$$

wobei in der vierten Zeile der Satz von Fubini sowie Lemma 2.3 angewendet wurden. □

Rückblickend wenden wir uns noch einmal der Definition der Akzeptanz-Wahrscheinlichkeit α zu. Wie soeben festgestellt, ist die Gültigkeit der detaillierten Gleichgewichtsgleichung für π und p der entscheidende Punkt im Beweis zu Satz 2.4. Diese detaillierte Gleichgewichtsgleichung ist i.a. für π und q nicht erfüllt. Wäre z.B. oBdA

$$\pi(x)q(x, y) > \pi(y)q(y, x),$$

erzwingt man Gleichheit durch einen Faktor α , so daß

$$\pi(x)q(x, y)\alpha(x, y) = \pi(y)q(y, x)\alpha(y, x)$$

gilt. Die Akzeptanzwahrscheinlichkeit ist also nichts anderes als die „Lösung“ für den Korrekturfaktor α .

Unsere weiteren Überlegungen unterwerfen wir ersten Einschränkungen. Wir ziehen uns auf den Zustandsraum $(\mathbb{R}^k, \mathcal{B}^k)$ zurück und legen für π und Q das Lebesgue-Maß \mathbb{L}^k auf $(\mathbb{R}^k, \mathcal{B}^k)$ zugrunde. Dabei schreiben wir auch einfach \mathbb{L} , wenn der Kontext dies zuläßt. Außerdem beschränken wir uns auf *Random-Walk-basierte Metropolis-Algorithmen* (kurz: RW-basierte Metropolis-Algorithmen). Diese Algorithmen arbeiten mit einem Kandidaten-Kern Q , der als Zuwachsverteilung eines Random-Walk interpretiert werden kann:

Gegeben sei eine Folge u.i.v. Zufallsgrößen $(I_n)_{n \geq 1}$, deren Verteilungen eine

\mathbb{A} -Dichte der Form $f \circ |\cdot|$ besitzen, d.h.

$$\Gamma^{I_1}(dx) = f(|x|) \mathbb{A}(dx)$$

mit der l_2 -Norm „ $|\cdot|$ “ auf \mathbb{R}^k . Der Random-Walk $S = (S_n)_{n \geq 0}$ mit Startpunkt $x \in \mathbb{R}^k$ wird beschrieben durch

$$S_0 = x \quad \text{und} \quad S_n = S_{n-1} + I_n,$$

für $n \geq 1$. Es sei

$$Q(x, dy) = \Gamma(S_1 \in dy | S_0 = x).$$

Wegen

$$Q(x, dy) = \Gamma(X_0 + I_1 \in dy | X_0 = x) = \Gamma^{I_1}(dy - x),$$

hat der Kandidaten-Kern Q in diesem Fall \mathbb{A} -Dichten der Gestalt

$$Q(x, dy) = q(x, y) \mathbb{A}(dy) = f(|y - x|) \mathbb{A}(dy), \quad x \in \mathbb{R}^k.$$

Des weiteren wird gefordert, daß q *abstandhaltend von 0* ist.

Definition 2.5 Eine Dichte f heißt *abstandhaltend von 0*, falls $\eta_f > 0$ und $\varepsilon_f > 0$ existieren, so daß die Abschätzung

$$f(x) \geq \varepsilon_f \quad \text{f.a. } x \in \overline{B(0, \eta_f)}$$

erfüllt ist.

In diesem Sinne bedeutet „ q abstandhaltend von 0“ die Existenz positiver η_q und ε_q derart, daß f.a. $x \in \mathbb{R}^k$

$$q(x, y) \geq \varepsilon_q \quad \text{f.a. } y \in \overline{B(x, \eta_q)}$$

gilt. Man beachte, daß η_q und ε_q unabhängig von der Wahl von x sind.

Die Reduktion auf Zieldichten π , die positiv und stetig sind, soll unsere Einschränkungen vorerst abschließen.

Aufgrund der Positivität von π und unter der Berücksichtigung der Symmetrie von q vereinfacht sich die Akzeptanzwahrscheinlichkeit zu

$$\alpha(x, y) = \min \left\{ \frac{\pi(y)}{\pi(x)}, 1 \right\}.$$

Diese Feststellung motiviert die Definition der *Akzeptanzregion*

$$A(x) = \{y \in \mathbb{R}^k \mid \pi(y) \geq \pi(x)\}$$

sowie der *Region der potentiellen Ablehnung*

$$R(x) = \{y \in \mathbb{R}^k \mid \pi(y) < \pi(x)\}.$$

Sowohl $A(x)$ als auch $R(x)$ werden später noch eine wichtige Rolle spielen.

In diesem nun schon recht umgrenzten Rahmen erhalten wir ein grundlegendes Resultat.

Satz 2.6 *Der RW-basierte Metropolis-Kern P mit q abstandhaltend von 0 ist \mathbb{K} -irreduzibel und aperiodisch. Außerdem ist jede nicht leere, beschränkte Menge $C \in \mathcal{B}^k$ klein.*

Beweis: Zunächst sei für $L > 0$ und $x \in \mathbb{R}^k$

$$\theta(x, L) = \frac{\inf \{ \pi(y) \mid y \in \overline{B(x, L)} \}}{\sup \{ \pi(y) \mid y \in \overline{B(x, L)} \}}.$$

Da π positiv und stetig ist, gilt $0 < \theta(x, L) \leq 1$ f.a. $L > 0$.

1. \mathbb{K} -Irreduzibilität: Seien $x \in \mathbb{R}^k, n \in \mathbb{N}$ und $A \in \mathcal{B}^k$ mit $\mathbb{K}(A) > 0$. Dann gilt

$$\begin{aligned} P^n(x, A) &= \int \dots \int P(y_{n-1}, A) P(y_{n-2}, dy_{n-1}) \dots P(y_1, dy_2) P(x, dy_1) \\ &\geq \int_A \int \dots \int p(x, y_1) \prod_{i=1}^{n-2} p(y_i, y_{i+1}) p(y_{n-1}, z) \mathbb{K}(dy_1) \dots \mathbb{K}(dy_{n-1}) \mathbb{K}(dz) \\ &= \int_A p^n(x, z) \mathbb{K}(dz), \end{aligned}$$

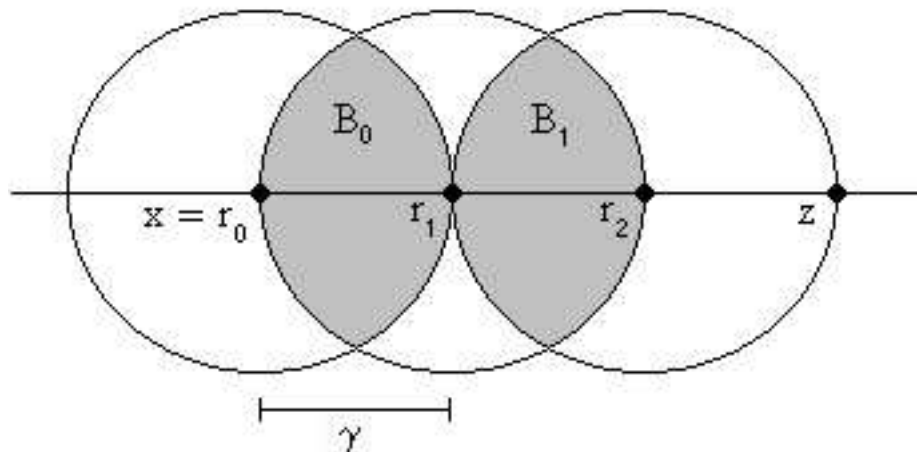
mit

$$p^n(x, z) = \int \dots \int p(x, y_1) \prod_{i=1}^{n-2} p(y_i, y_{i+1}) p(y_{n-1}, z) \mathbb{K}(dy_1) \dots \mathbb{K}(dy_{n-1}).$$

Offensichtlich genügt es

$$p^n(x, z) > 0, \quad z \in \overline{B(x, n\eta_q)},$$

für $\eta_q > 0$ und beliebiges $n \in \mathbb{N}$ zu zeigen, denn dann kann n so groß vorgegeben werden, daß $\mathbb{K}(A \cap \overline{B(x, n\eta_q)}) > 0$ ist. Da q abstandhaltend von 0 ist,


 Abbildung 2.1: Beispiel für $n = 3$

dürfen wir $\eta_q > 0$ und $\varepsilon_q > 0$ so wählen, daß $q(x, y) \geq \varepsilon_q$ f.a. $x, y \in \mathbb{R}^k$ mit $|y - x| \leq 2\eta_q$ erfüllt ist. Wir definieren

$$r_i = x + i \gamma \frac{z - x}{|z - x|}, \quad 0 \leq i \leq n - 1,$$

und

$$\alpha = \theta(x, n\eta_q)$$

mit $\gamma = \frac{|z-x|}{n}$. Beachte die Gültigkeit von $\gamma \leq \eta_q$, da $z \in \overline{B(x, n\eta_q)}$, und $\alpha(u, w) \geq \alpha > 0$ f.a. $u, w \in \overline{B(x, n\eta_q)}$. Ferner sei $B_j = \overline{B(r_j, \gamma)} \cap \overline{B(r_{j+1}, \gamma)}$ für $0 \leq j \leq n - 2$, s. Abbildung 2.1. Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} p^n(x, z) &\geq \int_{B_{n-2}} \dots \int_{B_0} p(x, y_1) \prod_{i=1}^{n-2} p(y_i, y_{i+1}) p(y_{n-1}, z) \mathbb{K}(dy_1) \dots \mathbb{K}(dy_{n-1}) \\ &\geq \alpha^n \varepsilon_q^n \left(\mathbb{K}(\overline{B(x, \gamma)} \cap \overline{B(r_1, \gamma)}) \right)^{n-1} > 0. \end{aligned}$$

2. *Aperiodizität:* Es seien $x \in \mathbb{R}^k$, $y \in B(x, \eta_q)$ mit η_q wie oben, und wir definieren als auf $B(x, \eta_q)$ konzentriertes Wahrscheinlichkeitsmaß

$$\nu(B) = \frac{\mathbb{K}(B \cap B(x, \eta_q))}{\mathbb{K}(B(x, \eta_q))}.$$

Dann gilt f.a. $A \in \mathcal{B}^k$:

$$\begin{aligned} P(y, A) &\geq \int_A p(y, z) \mathbb{K}(dz) \\ &\geq \int_{A \cap B(x, \eta_q)} \alpha(y, z) q(y, z) \mathbb{K}(dz) \\ &\geq \theta(x, \eta_q) \varepsilon_q \mathbb{K}(A \cap B(x, \eta_q)) \\ &= (\theta(x, \eta_q) \varepsilon_q \mathbb{K}(B(x, \eta_q))) \nu(A), \end{aligned}$$

wobei ε_q ebenfalls wie oben gewählt sei. Hieraus folgt zum einen, daß jede Kugel $B(x, \eta_q)$ klein, und zum anderen, daß die RW-basierte Metropolis-Kette aperiodisch ist.

3. *Jede beschränkte, nicht leere Menge ist klein:* Sei $C \in \mathcal{B}^k$ nicht leer und beschränkt. Dann existieren $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^k$ derart, daß

$$C \subseteq \bigcup_{i=1}^n B(x_i, \eta_q).$$

Setze $B_i = C \cap B(x_i, \eta_q)$ und es sei $I \subseteq \{1, \dots, n\}$ so, daß B_i nicht leer ist f.a. $i \in I$. Dann ist $C = \bigcup_{i \in I} B_i$ und die B_i sind klein f.a. $i \in I$, da $B(x_i, \eta_q)$ klein und jede Teilmenge einer kleinen Menge wieder klein ist. Nach 5.5.5,(ii) und 5.5.7 in [M/T] folgt dann aber schon, daß C klein ist. \square

Satz 2.6 liefert Erfreuliches im Hinblick auf unser Bestreben, die vorgegebene Zieldichte π mit Hilfe des Metropolis-Hastings Algorithmus zu approximieren. Weil nämlich Aperiodizität und \mathfrak{M} -Irreduzibilität die Harris-Positivität implizieren, verrät uns der Ergodensatz 2.1 die sehr befriedigende Antwort auf die in der Einleitung gestellte Frage, wie genau die Zielverteilung approximiert werden kann: Unter Verwendung des RW-basierten Metropolis-Algorithmus gelingt dies *beliebig genau*.

Nichtsdestotrotz werden wir noch einige Arbeit und Mühe in die Untersuchung der Konvergenzgeschwindigkeit in (2.1) investieren müssen, ehe wir dem Algorithmus eine ausgezeichnete Qualität bescheinigen können.

Bevor wir jedoch dazu kommen, lassen wir es uns nicht entgehen, noch einige weitere Eigenschaften des RW-basierten Metropolis-Kerns festzuhalten.

Definition 2.7 Sei P ein Markov-Kern auf $(\mathbb{R}^k, \mathcal{B}^k)$. P hat *gleichmäßig straffe Zuwachsverteilungen*, falls f.a. $\varepsilon > 0$ ein $K > 0$ existiert, so daß

$$P(x, B(x, K)) \geq 1 - \varepsilon$$

f.a. $x \in \mathbb{R}^k$ gilt.

Wir halten fest:

Satz 2.8 *Der RW-basierte Metropolis-Kern hat gleichmäßig straffe Zuwachsverteilungen.*

Beweis: Sei $x \in \mathbb{R}^k$ und $\varepsilon > 0$. Dann ist klar, daß ein $K_x > 0$ existiert mit

$$Q(x, B(x, K_x)) \geq 1 - \varepsilon.$$

Aufgrund der Struktur von q ist $Q(x, B(x, K_0)) = Q(0, B(0, K_0))$ f.a. $x \in \mathbb{R}^k$ und die Wahl von K_x somit unabhängig von x , d.h. es gibt ein $K > 0$, so daß f.a. $x \in \mathbb{R}^k$

$$Q(x, B(x, K)^c) < \varepsilon$$

gilt. Mit solchem K erhält man

$$\begin{aligned} P(x, B(x, K)^c) &= \int_{B(x, K)^c} \alpha(x, y) q(x, y) \lambda(dy) \\ &\leq Q(x, B(x, K)^c) \\ &< \varepsilon. \end{aligned}$$

f.a. $x \in \mathbb{R}^k$. □

Satz 2.6 lehrt, daß jede nicht leere, beschränkte Menge klein ist. Mit dem gerade erzielten Ergebnis erhalten wir auch die Umkehrung dieser Aussage.

Lemma 2.9 *Es sei P ein Markov-Kern auf $(\mathbb{R}^k, \mathcal{B}^k)$ mit gleichmäßig straffen Zuwachsverteilungen. Dann ist jede kleine Menge beschränkt.*

Beweis: Sei $C \in \mathcal{B}^k$ klein. Dann existieren $n \geq 1$, ein auf C konzentriertes Wahrscheinlichkeitsmaß ν und $\delta > 0$, so daß f.a. $x \in C$

$$P^n(x, \cdot) \geq \delta \nu(\cdot)$$

gilt. Damit folgt

$$\begin{aligned} \|P^n(x, \cdot) - P^n(y, \cdot)\| &= 2 \sup_{A \in \mathcal{B}^k} |(P^n(x, A) - \delta \nu(A)) - (P^n(y, A) - \delta \nu(A))| \\ &\leq 2 \sup_{A \in \mathcal{B}^k} \max \{P^n(x, A) - \delta \nu(A), P^n(y, A) - \delta \nu(A)\} \\ &\leq 2(1 - \delta) \end{aligned}$$

f.a. $x, y \in C$. Nehmen wir an, C wäre unbeschränkt. Da P gleichmäßig straffe Zuwachsverteilungen besitzt, gilt dies auch für P^n , $n \geq 1$, wie uns eine Induktion nach n bestätigen wird.

Wir wollen $P^n(x, B(x, nK)^c) < n\varepsilon$ f.a. $n \in \mathbb{N}$, $\varepsilon > 0$ und ein $K > 0$ zeigen. Für $n = 1$ ist dies klar wegen $P = P^1$ und weil P gleichmäßig straffe

Zuwachsverteilungen besitzt. Sei nun also die Richtigkeit der Behauptung für ein $n \geq 1$ und beliebiges $\varepsilon > 0$ angenommen. Es ist

$$\begin{aligned}
 P^{n+1}(x, B(x, (n+1)K)^c) &= \int_{\mathbb{R}^k} P(y, B(x, (n+1)K)^c) P^n(x, dy) \\
 &= \int_{B(x, nK)} P(y, B(x, (n+1)K)^c) P^n(x, dy) \\
 &\quad + \int_{B(x, nK)^c} P(y, B(x, (n+1)K)^c) P^n(x, dy) \\
 &< \varepsilon P^n(x, B(x, nK)) + P^n(x, B(x, nK)^c) \\
 &< \varepsilon + n\varepsilon = (n+1)\varepsilon.
 \end{aligned}$$

Die erste Zeile gilt dabei nach Satz 1.6 in [Als2]. In der vorletzten Ungleichung geht

$$P(y, B(x, (n+1)K)^c) \leq P(y, B(y, K)^c) < \varepsilon$$

wegen $B(y, K) \subseteq B(x, (n+1)K)$ f.a. $y \in B(x, nK)$ ein. Schließlich wird die Induktionsannahme in der letzten Zeile benutzt.

Es existiert also ein $K > 0$ derart, daß $P^n(x, B(x, K)) \geq 1 - \frac{\delta}{4}$ und $P^n(y, B(y, K)^c) < \frac{\delta}{4}$ für $x, y \in C$. Da C unbeschränkt ist, können x und y mit $|x - y| > 2K$ gewählt werden, und wir erkennen $B(x, K) \subseteq B(y, K)^c$. Dann erhält man aber

$$\begin{aligned}
 \|P^n(x, \cdot) - P^n(y, \cdot)\| &\geq 2|P^n(x, B(x, K)) - P^n(y, B(x, K))| \\
 &\geq 2\left(1 - \frac{\delta}{2}\right)
 \end{aligned}$$

im Widerspruch zu oben Gezeigtem. C muß demnach beschränkt sein. \square

Kapitel 3

Geometrische Ergodizität

3.1 Geometrische Ergodizität und die geometrische Drift-Bedingung

Nachdem wir uns nun ein wenig mit dem RW-basierten Metropolis-Hastings Algorithmus vertraut gemacht haben, ist es an der Zeit, seine gerade für Anwendungen interessanten Qualitäten zu analysieren. Die Ergodizität gegen die Zielverteilung haben wir schon festgestellt. Das wirklich Bemerkenswerte ist aber die Konvergenzrate, die sich in (2.1) unter bestimmten Voraussetzungen an π für die Metropolis-Kette erzielen läßt.

Definition 3.1 Ein φ -irreduzibler, aperiodischer Markov-Kern P mit stationärer Verteilung π heißt π -f.s. *geometrisch ergodisch*, falls eine π -f.s. endliche Funktion $V \geq 1$ sowie Konstanten $\rho < 1$ und $R < \infty$ existieren, so daß die Abschätzung

$$\|P^n(x, \cdot) - \pi\|_V \leq RV(x)\rho^n \quad \text{f.a. } n \geq 1 \quad (3.1)$$

erfüllt ist. P heißt *geometrisch ergodisch*, wenn V endlich ist.

Wir definieren hierbei die V -Norm für signierte Maße μ durch

$$\|\mu\|_V = \sup_{f:|f|\leq V} |\mu(f)|$$

mit

$$\mu(f) = \int f(x)\mu(dx).$$

In diesem Abschnitt beschäftigen wir uns mit notwendigen Bedingungen, die die Zieldichte erfüllen muß, damit wir überhaupt auf geometrische Ergodizität

hoffen dürfen. Der Begriff der *geometrischen Drift-Bedingung* wird sich dabei als sehr hilfreich erweisen.

Wir vereinbaren für einen Markov-Kern P und eine nicht negative Funktion V die Bezeichnungen

$$PV(x) = \int V(y) P(x, dy)$$

sowie

$$\Delta V(x) = PV(x) - V(x) = \int V(y) P(x, dy) - V(x).$$

Definition 3.2 (Geometrische Drift-Bedingung) Es seien P ein Markov-Kern und C eine Menge in \mathcal{B}^k . Man sagt, P hat *geometrische Drift nach C* , wenn es Konstanten $\lambda < 1$, $b < \infty$ und eine Funktion $V \geq 1$ mit $V(x_0) < \infty$ für ein $x_0 \in \mathbb{R}^k$ gibt, so daß

$$PV(x) \leq \lambda V(x) + b \mathbf{1}_C(x) \tag{3.2}$$

f.a. $x \in \mathbb{R}^k$ erfüllt ist.

Die geometrische Drift-Bedingung ist üblicherweise auf allgemeinen Zustandsräumen (S, \mathcal{S}) formuliert. Die Einschränkung auf $(\mathbb{R}^k, \mathcal{B}^k)$ liefert hier keine neuen Erkenntnisse, sondern ist einfach in dem von uns festgelegten Rahmen zu verstehen. Dasselbe gilt für den nächsten Satz.

Satz 3.3 *Es sei P ein φ -irreduzibler, aperiodischer Markov-Kern auf $(\mathbb{R}^k, \mathcal{B}^k)$ mit stationärer Verteilung π . Dann gilt:*

- (i) *Falls P geometrische Drift nach einer kleinen Menge $C \in \mathcal{B}^k$ mit Drift-Funktion V hat, so daß (3.2) erfüllt ist, ist V π -f.s. endlich und P ist π -f.s. geometrisch ergodisch.*
- (ii) *Ist umgekehrt P π -f.s. geometrisch ergodisch, so hat P geometrische Drift nach einer kleinen Menge $C \in \mathcal{B}^k$.*

Beweis: (i) Es sei die Gültigkeit von (3.2) vorausgesetzt. Wir definieren

$$\tilde{V}(x) = \frac{V(x)}{1-\lambda} \quad \text{und} \quad \tilde{b} = \frac{b}{1-\lambda}.$$

Dann ist \tilde{V} nicht negativ, $\tilde{V}(x_0) < \infty$, $\tilde{b} < \infty$ und

$$\Delta \tilde{V}(x) = \frac{1}{1-\lambda} \Delta V(x) \leq -V(x) + \tilde{b} \mathbf{1}_C(x), \quad x \in \mathbb{R}^k.$$

Damit folgt $\pi(V) < \infty$ aus dem „*f-Norm Ergodic Theorem*“ (14.0.1, (iii) \Rightarrow (i), in [M/T]). Also ist V π -f.s. endlich. Die π -fast sichere geometrische Ergodizität von P erhalten wir sofort aus dem „*Geometric Ergodic Theorem*“ (15.0.1 in [M/T]).

(ii) Ist P π -f.s. geometrisch ergodisch, gibt es eine π -f.s. endliche Funktion $V \geq 1$, mit der (3.1) erfüllt ist. Aus 15.4.2, 15.3.3 und 10.4.9 in [M/T] folgt die Existenz einer Funktion \tilde{V} , so daß für π -fast alle $x \in \mathbb{R}^k$ $\tilde{V}(x) \geq V(x)$, $\tilde{V}(x) < \infty$ und (3.2) für \tilde{V} und eine kleine Menge $C \in \mathcal{B}^k$ erfüllt sind. \square

Bemerkung 3.4 (a) Falls (3.2) für eine kleine Menge C und eine *endliche* Funktion $V \geq 1$ erfüllt ist, liefert Satz 3.3,(ii) die geometrische Ergodizität von P .

(b) Es sei (S, \mathcal{S}) ein Zustandsraum. Eine Menge $C \in \mathcal{S}$ heißt *petite*, wenn

$$\sum_{n=0}^{\infty} P^n(x, B) a(n) \geq \zeta(B)$$

f.a. $x \in C$ und $B \in \mathcal{S}$ gilt, wobei a eine Verteilung auf \mathbb{N} und ζ ein nicht-triviales Maß auf \mathcal{S} seien. Offensichtlich ist jede kleine Menge auch *petite*. Ist P φ -irreduzibel und aperiodisch gilt hiervon auch die Umkehrung (s. 5.5.7 in [M/T]). Diese Tatsache verdient deswegen Erwähnung, weil die von uns zitierten Ergebnisse in [M/T] für *petite* Mengen formuliert sind.

3.2 Eine erste notwendige Bedingung für geometrische Ergodizität

Wir werden nun zeigen, daß geometrische Ergodizität notwendig *exponentiell leichte Tails* von π voraussetzt, d.h. $\pi(x)$ verschwindet exponentiell schnell für $|x| \rightarrow \infty$. Dieses Resultat erhalten wir in Korollar 3.7. Der Weg dorthin führt über zwei Ergebnisse eher technischer Natur.

Für eine beliebige Menge $A \in \mathcal{B}^k$ sei die erste Rückkehrzeit von X nach A durch

$$\tau_A = \min\{n \geq 1 \mid X_n \in A\}$$

definiert. Des weiteren sei E_x wieder der Erwartungswert bezüglich $P(x, \cdot)$ für $x \in \mathbb{R}^k$.

Lemma 3.5 *P sei ein Markov-Kern auf $(\mathbb{R}^k, \mathcal{B}^k)$ mit gleichmäßig straffen Zuwachsv Verteilungen, der die geometrische Drift-Bedingung (3.2) für eine kleine Menge $C \in \mathcal{B}^k$ erfüllt. Dann existieren $\rho > 0$ und $R < \infty$, so daß*

$$V(x) \geq \exp\left(\rho E_x \tau_{B(0,R)}\right) \quad \text{f.a. } x \in \mathbb{R}^k \text{ mit } |x| \geq R$$

gilt.

Beweis: Im Falle $x \notin C$ gilt aufgrund der Jensenschen Ungleichung und (3.2) die Abschätzung

$$(P \log V)(x) \leq \log PV(x) \leq \log(\lambda V(x)) = \log \lambda + \log V(x).$$

Aus denselben Gründen folgt für $x \in C$

$$\begin{aligned} (P \log V)(x) &\leq \log(\lambda V(x) + b) \\ &= \log(\lambda V(x)) + \log(\lambda V(x) + b) - \log(\lambda V(x)) \\ &= \log(\lambda V(x)) + \int_{\lambda V(x)}^{\lambda V(x)+b} \frac{1}{y} dy \\ &\leq \log \lambda + \log V(x) + \frac{b}{\lambda}, \end{aligned}$$

und wir erhalten

$$\Delta \log V(x) = (P \log V)(x) - \log V(x) \leq \log \lambda + \frac{b}{\lambda} \mathbf{1}_C(x).$$

Setzt man nun

$$\tilde{V}(x) = \frac{\log V(x)}{\rho} \quad \text{mit } \rho = -\log \lambda,$$

gilt folglich

$$\Delta \tilde{V}(x) \leq -1 + \frac{b}{\lambda \rho} \mathbf{1}_C(x)$$

und damit

$$E_x \tau_C \leq \tilde{V}(x) + \frac{b}{\lambda \rho} \mathbf{1}_C(x) \tag{3.3}$$

unter Verwendung von 11.3.4 in [M/T]. Da C klein ist und P gleichmäßig straffe Zuwachsv Verteilungen besitzt, folgt aus Lemma 2.9 die Beschränktheit von C . Also gibt es ein $R < \infty$ derart, daß C in $B(0, R)$ enthalten ist. Zusammen mit (3.3) liefert das die gewünschte Ungleichung

$$\frac{\log V(x)}{\rho} = \tilde{V}(x) \geq E_x \tau_C \geq E_x \tau_{B(0,R)}$$

f.a. $x \in \mathbb{R}^k$ mit $|x| \geq R$ □

Für $y \in \mathbb{R}^k$ sei

$$n(y) = \begin{cases} \frac{y}{|y|} & , y \neq 0 \\ e_k & , y = 0 \end{cases}$$

der auf die Länge 1 normierte Vektor in Richtung y , wobei $e_k = (0, \dots, 0, 1)$ den k -ten Basisvektor der kanonischen Basis des \mathbb{R}^k bezeichnet, und „ \cdot “ sei das Standardskalarprodukt auf \mathbb{R}^k . Außerdem erinnern wir daran, daß die Zuwächse des Kandidaten RW die Dichte $f \circ |\cdot|$ besitzen.

Satz 3.6 *Es sei P der RW-basierte Metropolis-Kern und es gelte*

$$\int_{\mathbb{R}^k} |x| f(|x|) \mathbb{X}(dx) < \infty.$$

Falls P geometrische Drift nach einer kleinen Menge $C \in \mathcal{B}^k$ hat, so existieren $s > 0$ und $c > 0$ mit

$$V(x) \geq c \exp(s|x|), \quad x \in \mathbb{R}^k.$$

Beweis: Satz 2.8 lehrt, daß P gleichmäßig straffe Zuwachsverteilungen besitzt. In Verbindung mit Lemma 3.5 erhalten wir hieraus die Existenz von $\rho > 0$ und $R < \infty$ derart, daß

$$V(x) \geq \exp\left(\rho E_x \tau_{B(0,R)}\right) \tag{3.4}$$

f.a. $x \in \mathbb{R}^k$ mit $|x| \geq R$ gilt, denn P erfüllt die geometrische Drift-Bedingung für eine kleine Menge $C \in \mathcal{B}^k$ lt. Voraussetzung. Sei nun $x \in \mathbb{R}^k$ so gewählt, daß $V(x)$ endlich ist, da sonst nichts zu zeigen wäre. Für $|x| < R$ brauchen wir uns ebenfalls nicht weiter zu bemühen, denn dann wähle $s_0 = \frac{1}{R}$ und $c_0 = \frac{1}{e}$ und erhalte

$$c_0 \exp(s_0|x|) < 1 \leq V(x).$$

Wir setzen also $|x| > R$ voraus. Es sei nun $(X_i)_{i \geq 0}$ die Metropolis-Kette mit Startpunkt $X_0 = x$, und wir bezeichnen die Folge der u.i.v. Zuwächse des Kandidaten-RW mit $(I_i)_{i \geq 1}$.

An dieser Stelle mag uns eine kurze Zusammenfassung des restlichen Beweises helfen, im folgenden den Überblick zu wahren. Wir werden einen einseitigen RW $W = (W_i)_{i \geq 0}$ mit Zuwächsen $(J_i)_{i \geq 1}$ auf \mathbb{R} konstruieren, wobei sich J_i als

unabhängig von X_{i-1} für $i \geq 1$ erweist. Wir werden weiter nachweisen, daß der „negierte“ RW $-W$ eine positive, endliche Drift besitzt. Mit diesen Ergebnissen wird schließlich unter Verwendung der *1. Waldschen Gleichung* eine Abschätzung für $E_x \tau_{B(0,R)}$ gelingen, die unter Einsatz von (3.4) die Aussage des Satzes verifiziert.

Wir setzen

$$J_i = n(X_{i-1}) \cdot I_i \mathbb{1}_{\{n(X_{i-1}) \cdot I_i < 0\}}, \quad i \geq 1.$$

Für $v \in \mathbb{R}$ und $i \geq 1$ gilt

$$\Gamma(J_i \leq v \mid X_{i-1} = y) = \Gamma(n(y) \cdot I_i \mathbb{1}_{\{n(y) \cdot I_i < 0\}} \leq v) \quad (3.5)$$

$$= \begin{cases} \Gamma(n(y) \cdot I_i \leq v) & , \text{ falls } v < 0 \\ 1 & , \text{ falls } v \geq 0 \end{cases} . \quad (3.6)$$

Nun ist die Verteilung von $n(y) \cdot I_i$ unter Γ unabhängig von der Wahl von $y \in \mathbb{R}^k$. Sind nämlich $y, z \in \mathbb{R}^k$ mit $n(y) \neq n(z)$ und φ eine Drehung im \mathbb{R}^k mit $\varphi(n(y)) = n(z)$, gilt offensichtlich $\Gamma^{I_i} = \Gamma^{\varphi \circ I_i}$ unter Berücksichtigung der symmetrischen Gestalt der Dichte $f(|\cdot|)$ von I_i und der Längeninvarianz der Drehung φ . Aufgrund der Tatsache, daß die Adjungierte einer orthogonalen Abbildung gerade ihre Inverse ist, folgern wir

$$\Gamma^{n(z) \cdot I_i} = \Gamma^{n(z) \cdot \varphi \circ I_i} = \Gamma^{\varphi^{-1}(n(z)) \cdot I_i} = \Gamma^{n(y) \cdot I_i}.$$

Mit Blick auf (3.5) und (3.6) erkennen wir sofort die stochastische Unabhängigkeit von J_i und X_{i-1} für $i \geq 1$, und erhalten durch Wahl von $n(y) = e_k$

$$\Gamma(J_i \leq v) = \begin{cases} \int_{(-\infty, v]} \int_{\mathbb{R}^{k-1}} f(|x|) \mathbb{K}^{k-1}(dx_1, \dots, dx_{k-1}) \mathbb{K}^1(dx_k) & , v < 0 \\ 1 & , v \geq 0 \end{cases} .$$

J_i besitzt also für $i \geq 1$ die \mathbb{K}^1 -Dichte

$$\Gamma^{J_i}(dy) = g(y) \mathbb{1}_{(-\infty, 0)}(y) \mathbb{K}^1(dy) \quad (3.7)$$

mit

$$g(y) = \int_{\mathbb{R}^{k-1}} f(|(x_1, \dots, x_{k-1}, y)|) \mathbb{K}^{k-1}(dx_1, \dots, dx_{k-1}).$$

Mit diesem Wissen definieren wir den einseitigen RW $(W_i)_{i \geq 0}$ auf \mathbb{R} wie folgt:

$$W_0 = |X_0| = |x| \quad \text{und} \quad W_i = W_{i-1} + J_i, \quad i \geq 1.$$

Als entscheidend wird sich die Gültigkeit von $W_i \leq |X_i|$ f.a. $i \geq 0$ herausstellen. Dies ergibt sich induktiv: Für $i = 0$ ist nichts zu zeigen. Sei also $i > 0$ und die Behauptung gelte für $i - 1$. Im Falle der Ablehnung der vorgeschlagenen Bewegung durch den Algorithmus, also $X_i = X_{i-1}$, gilt lt. Definition von W_i und der Induktionsvoraussetzung

$$W_i \leq W_{i-1} \leq |X_{i-1}| = |X_i|.$$

Wird die vorgeschlagene Bewegung akzeptiert, also $X_i = X_{i-1} + I_i$, so gilt

$$\begin{aligned} |X_i| &= |X_{i-1} + I_i| \\ &= |(X_{i-1} + n(X_{i-1})(n(X_{i-1}) \cdot I_i)) + (I_i - n(X_{i-1})(n(X_{i-1}) \cdot I_i))| \\ &\geq |X_{i-1} + n(X_{i-1})(n(X_{i-1}) \cdot I_i)| \\ &= |n(X_{i-1})(|X_{i-1}| + n(X_{i-1}) \cdot I_i)| \\ &= ||X_{i-1}| + n(X_{i-1}) \cdot I_i| \\ &\geq |X_{i-1}| + n(X_{i-1}) \cdot I_i \\ &\geq |X_{i-1}| + J_i \\ &\geq W_{i-1} + J_i = W_i, \end{aligned}$$

wobei in der dritten Zeile der Satz von Pythagoras (s.a. im Anhang A.1.1) und in der letzten die Induktionsvoraussetzung eingehen.

Setze

$$\hat{\tau}_R = \min\{i \geq 1 \mid W_i \leq R\}.$$

Dann ist

$$\tau_{B(0,R)} \geq \hat{\tau}_R$$

wegen $W_i \leq |X_i|$, und darum gilt

$$E_x \tau_{B(0,R)} \geq E_x \hat{\tau}_R. \tag{3.8}$$

Für $x \in \mathbb{R}^k$ und $\gamma = E_x(-J_1)$ erhält man f.a. $i \geq 1$

$$\begin{aligned} 0 < \gamma &= - \int_{\mathbb{R}} y \Gamma^{J_1|X_0=x}(dy) \\ &= - \int_{\mathbb{R}} y \Gamma^{J_1}(dy) \\ &= - \int_{(-\infty,0)} \int_{\mathbb{R}^{k-1}} y f(|(z_1, \dots, z_{k-1}, y)|) \mathbb{X}^{k-1}(dz_1, \dots, dz_{k-1}) \mathbb{X}^1(dy) \\ &\leq \int_{\mathbb{R}^k} |z| f(|z|) \mathbb{X}^k(dz) \\ &< \infty, \end{aligned}$$

wobei wir in der zweiten Zeile die stochastische Unabhängigkeit von J_1 und X_0 , in der dritten Gleichung (3.7) und in der letzten Zeile die Voraussetzung des Satzes benutzt haben. Sei nun $\widetilde{W}_n = |x| - W_n$ für $n \geq 0$, also

$$\widetilde{W}_0 = 0 \quad \text{und} \quad \widetilde{W}_n = - \sum_{i=1}^n J_i, \quad n \geq 1,$$

und $\mathcal{F}_n = \sigma(\widetilde{W}_0, \dots, \widetilde{W}_n)$. \mathcal{F}_n und $(J_i)_{i>n}$ sind stochastisch unabhängig, und $\hat{\tau}_R$ ist eine $(\mathcal{F}_n)_{n \geq 0}$ -Zeit (denn trivialerweise ist $\hat{\tau}_R$ eine Stopzeit bezüglich der Filtration $(\sigma(W_0, \dots, W_n))_{n \geq 0}$), für die außerdem $E_x \hat{\tau}_R$ wegen (3.8) und (3.4) endlich ist. Die 1. Waldsche Gleichung liefert

$$E_x \widetilde{W}_{\hat{\tau}_R} = \gamma E_x \hat{\tau}_R.$$

Daher gilt mit Blick auf (3.8) und wegen $W_{\hat{\tau}_R} \leq R$ lt. Definition von $\hat{\tau}_R$

$$E_x \tau_{B(0,R)} \geq E_x \hat{\tau}_R = \frac{|x| - E_x W_{\hat{\tau}_R}}{\gamma} \geq \frac{|x| - R}{\gamma}. \quad (3.9)$$

Wir setzen nun

$$s_1 = \frac{\rho}{\gamma} > 0 \quad \text{und} \quad c_1 = \exp\left(-\frac{\rho R}{\gamma}\right) > 0$$

und erhalten mit (3.4) sowie (3.9) die gewünschte Ungleichung

$$V(x) \geq \exp\left(\frac{\rho}{\gamma}(|x| - R)\right) = c_1 \exp(s_1 |x|).$$

□

Die angekündigte notwendige Bedingung, die exponentiell leichten Tails von π , ergibt sich unter diesen Vorbereitungen sehr leicht.

Korollar 3.7 *Es sei P der RW-basierte Metropolis-Kern auf $(\mathbb{R}^k, \mathcal{B}^k)$ mit Zieldichte π , und es gelte*

$$\int_{\mathbb{R}^k} |x| f(|x|) \mathbb{X}(dx) < \infty.$$

Falls P geometrisch ergodisch ist, existiert ein $s > 0$ derart, daß

$$\int_{\mathbb{R}^k} e^{s|x|} \pi(x) \mathbb{X}(dx) < \infty.$$

Beweis: Nach Satz 3.3 hat P geometrische Drift nach einer kleinen Menge $C \in \mathcal{B}^k$ mit einer π -f.s. endlichen Drift-Funktion $V \geq 1$. Die Existenz von $s > 0$ und $c > 0$ mit

$$V(x) \geq c \exp(s|x|)$$

erhalten wir nun vermöge Satz 3.6. Daher schließen wir:

$$\int_{\mathbb{R}^k} e^{s|x|} \pi(x) \mathbb{A}(dx) \leq \frac{1}{c} \pi(V) < \infty.$$

□

Vielleicht wirkt es auf den einen oder anderen ernüchternd, daß Korollar 3.7 die Klasse der Zieldichten, die überhaupt für geometrische Ergodizität in Frage kommen, so stark einschränkt. Trotzdem oder gerade deswegen wenden wir uns im nächsten Kapitel der Suche nach hinreichenden oder sogar äquivalenten Bedingungen für geometrische Ergodizität zu. Diese Suche wird uns einige Mühe abverlangen. Als Lohn für unsere Arbeit dürfen wir aber ein sehr schönes und anschauliches Ergebnis erwarten.

Beschließen wollen wir diesen Abschnitt mit einer äquivalenten Formulierung der geometrischen Drift-Bedingung, die uns später noch gute Dienste erweisen wird.

Lemma 3.8 *Es sei P der RW-basierte Metropolis-Kern auf $(\mathbb{R}^k, \mathcal{B}^k)$ mit q abstandhaltend von 0. Die Zieldichte π sei stetig und streng positiv. Dann gilt: Existiert eine stetige Funktion $V \geq 1$ mit*

$$\limsup_{|x| \rightarrow \infty} \frac{PV(x)}{V(x)} < 1 \tag{3.10}$$

und

$$\sup_{x \in \mathbb{R}^k} \frac{PV(x)}{V(x)} < \infty, \tag{3.11}$$

so ist die geometrische Drift-Bedingung (3.2) für eine kleine Menge $C \in \mathcal{B}^k$ erfüllt, und P ist geometrisch ergodisch.

Gilt umgekehrt die geometrische Drift-Bedingung für eine kleine Menge $C \in \mathcal{B}^k$ und eine endliche Funktion $V \geq 1$, so genügt V (3.10) und (3.11).

Beweis: Sei zunächst $V \geq 1$ stetig und genüge (3.10) und (3.11). Bedenken wir, daß lt. Satz 2.6 $B(0, R)$ klein ist, genügt es, die Existenz von $\lambda < 1$,

$b < \infty$ und $R < \infty$ mit

$$PV(x) \leq \lambda V(x) + b \mathbb{1}_{B(0,R)}(x) \quad (3.12)$$

zu zeigen.

Wir setzen $\xi = \limsup_{|x| \rightarrow \infty} \frac{PV(x)}{V(x)}$. Wegen $V \geq 1$ ist $PV(x) \geq 0$ f.a. $x \in \mathbb{R}^k$, und daher gilt $\xi \in [0, 1)$ unter Hinweis auf (3.10). Mit

$$\lambda = 1 - \frac{1 - \xi}{2}$$

folgt $\frac{1}{2} \leq \lambda < 1$ und zusammen mit (3.10) die Existenz eines $R \in (0, \infty)$ derart, daß

$$PV(x) \leq \lambda V(x) \quad \text{f.a. } x \in \mathbb{R}^k \text{ mit } |x| \geq R.$$

Also gilt (3.12) f.a. $x \notin B(0, R)$. Setze nun

$$b = \left(\sup_{x \in B(0,R)} V(x) \right) \sup_{x \in \mathbb{R}^k} \frac{PV(x)}{V(x)}.$$

Da $B(0, R)$ beschränkt und V stetig ist, folgt in Verbindung mit (3.11) $b < \infty$ und somit

$$PV(x) \leq b \leq \lambda V(x) + b \mathbb{1}_{B(0,R)}(x)$$

f.a. $x \in B(0, R)$, da $\lambda \geq 0$ und $V \geq 0$. Also gilt (3.12) f.a. $x \in \mathbb{R}^k$.

Für die umgekehrte Richtung sei nun $V \geq 1$ endlich, und es gelte

$$PV(x) \leq \lambda V(x) + b \mathbb{1}_C(x)$$

mit $\lambda < 1$, $b < \infty$ und $C \in \mathcal{B}^k$ klein. Da P gleichmäßig straffe Zuwachsverteilungen besitzt (s. Satz 2.8), folgt aus Lemma 2.9 die Beschränktheit von C . Daher existiert ein $R > 0$ mit $C \subseteq B(0, R)$, und f.a. $x \in \mathbb{R}^k$ mit $|x| \geq R$ gilt

$$PV(x) \leq \lambda V(x) < V(x).$$

Vermöge dieser Abschätzung sehen wir sofort die Gültigkeit von (3.10) ein, und (3.11) folgern wir schließlich mit

$$\frac{PV(x)}{V(x)} \leq \lambda + \frac{b \mathbb{1}_C(x)}{V(x)} \leq \lambda + b \quad \text{f.a. } x \in \mathbb{R}^k.$$

□

Kapitel 4

Geometrische Ergodizität bei super-exponentiellen Zieldichten

4.1 Super-exponentielle Zieldichten und die Kon- turmannigfaltigkeit $C_{\pi(x)}$

Fassen wir noch einmal kurz zusammen: Mit Hilfe der RW-basierten Metropolis-Kette gelingt uns eine beliebig genaue Approximation der Zielverteilung. Wir haben darüberhinaus festgestellt, daß wir auf eine geometrisch schnelle Konvergenz hoffen dürfen, wenn die Zieldichte der Klasse der Dichten mit exponentiell leichten Tails entstammt.

Wann aber haben wir Gewißheit darüber, ob geometrische Ergodizität vorliegt oder nicht? Dieser Frage gilt es im folgenden nachzugehen, und die Kernaussage dieser Arbeit, der Satz 4.5, wird uns die Antwort präsentieren.

Wir ziehen die Grenzen, innerhalb derer wir uns bewegen, erneut ein wenig enger und betrachten von nun an nur noch *super-exponentielle* Zieldichten.

Definition 4.1 Eine Zieldichte π auf \mathbb{R}^k heißt *super-exponentiell*, falls sie überall positiv und stetig partiell differenzierbar ist und die Grenzwertbedingung

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} n(x) \cdot \nabla \log \pi(x) = -\infty \quad (4.1)$$

erfüllt.

Wir erinnern dabei an die in Kapitel 3 gegebene Definition für $n(x)$ als den auf die Länge 1 normierten Vektor in Richtung x .

Erfreulicherweise haben super-exponentielle Zieldichten a priori exponentiell leichte Tails wie Satz 4.2 lehrt.

Satz 4.2 *Es sei π eine super-exponentielle Dichte auf \mathbb{R}^k . Dann existiert für beliebige $H > 0$ und $a \geq 0$ ein $R > 0$, so daß*

$$\frac{\pi(x + an(x))}{\pi(x)} \leq \exp(-aH) \quad (4.2)$$

f.a. $x \in \mathbb{R}^k$ mit $|x| \geq R$ gilt. Insbesondere folgt

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \pi(x) = 0.$$

Beweis: Sei $H > 0$. Für $a = 0$ ist die Aussage klar. Für $a > 0$ liefert eine Taylor-Entwicklung (s. [For2], S. 58, Bemerkung b))

$$\log \pi(x + an(x)) - \log \pi(x) = an(x) \cdot \nabla \log \pi(x) + o(|an(x)|). \quad (4.3)$$

Läßt man nun $|x| \rightarrow \infty$ laufen, strebt die rechte Seite vermöge (4.1) gegen $-\infty$, denn der Landau-Term $o(|an(x)|)$ variiert nicht in der Länge von x . Für beliebiges $H > 0$ folgern wir

$$an(x) \cdot \nabla \log \pi(x) + o(|an(x)|) \leq -aH, \quad (4.4)$$

falls $|x| > R$ für ein hinreichend großes $R > 0$. Wenden wir die Exponentialfunktion auf die linke Seite von (4.3) und die rechte Seite von (4.4) an, ergibt sich (4.2). Damit erhält man offensichtlich sofort die letzte Behauptung, wenn man zu beliebigem $\varepsilon > 0$ ein $H_\varepsilon > 0$ so groß wählt, daß die Ungleichungskette

$$0 \leq \lim_{|x| \rightarrow \infty} \pi(x) = \lim_{|x| \rightarrow \infty} \pi(x + n(x)) \leq \exp(-H_\varepsilon) \leq \varepsilon$$

gilt. □

Dreh- und Angelpunkt der weiteren Überlegungen werden die *Konturmannigfaltigkeit* $C_{\pi(x)}$ für super-exponentielles π ,

$$C_{\pi(x)} = \{y \in \mathbb{R}^k \mid \pi(y) = \pi(x)\},$$

sowie die schon in Kapitel 2 definierte Akzeptanzregion $A(x)$ und die Region der potentiellen Ablehnung $R(x)$ sein.

Für hinreichend großes $|x|$ läßt sich mit Hilfe von (4.2) zeigen, daß $C_{\pi(x)}$ durch die Einheitssphäre $S^{k-1} = \{y \in \mathbb{R}^k \mid |y| = 1\}$ parametrisiert werden kann, d.h.

$$C_{\pi(x)} = \{r(\xi)\xi \mid \xi \in S^{k-1}\}$$

mit einer positiven, stetigen Funktion r auf S^{k-1} . Sei nämlich R so groß, wie für (4.2) gefordert. Dann ist $\mu = \inf\{\pi(y) \mid y \in \overline{B(0, R)}\}$ aufgrund der Positivität und Stetigkeit von π positiv. Sei nun $|x|$ so groß, daß $\pi(x) < \mu$ gilt (insbesondere muß dann $|x| > R$ sein). Angenommen, es gäbe ein $z \in \mathbb{R}^k$ und $a, b \in (0, \infty)$, $a < b$, so daß

$$an(z), bn(z) \in C_{\pi(x)}. \tag{4.5}$$

Wegen $bn(z) = an(z) + (b-a)n(z)$ liefert (4.2)

$$\pi(bn(z)) \leq \frac{\pi(an(z))}{e^{(b-a)H}},$$

also $\pi(bn(z)) < \pi(an(z))$ im Widerspruch zu (4.5).

Was die Konturmännigfaltigkeit $C_{\pi(x)}$ für die Anschauung bedeutsam macht, ist ihre Eigenschaft als „Trennwand“ von $A(x)$ und $R(x)$. Die Akzeptanzregion ist nämlich für hinreichend großes $|x|$ gerade die von $C_{\pi(x)}$ eingeschlossene Menge. Für die Begründung werden wir das Innere von $C_{\pi(x)}$ (inklusive des Randes $\partial C_{\pi(x)}$) mit $\text{Int } C_{\pi(x)}$ und das Äußere mit $\text{Ext } C_{\pi(x)}$ bezeichnen und folgende Fallunterscheidung durchführen:

(i) Ist $z \in \text{Ext } C_{\pi(x)}$, so existieren $y \in C_{\pi(x)}$ und $a > 0$ mit $z = y + an(y)$. Es gilt $\pi(y) = \pi(x) < \mu$, also insbesondere $|y| > R$ (R wie oben), und damit $\pi(z) \leq \exp(-aH)\pi(y)$ wegen (4.2). D.h. $z \in R(x)$, also $\text{Ext } C_{\pi(x)} \subseteq R(x)$, und dies impliziert $A(x) \subseteq \text{Int } C_{\pi(x)}$.

(ii) Ist $z \in \text{Int } C_{\pi(x)} \cap \overline{B(0, R)}$, gilt $\pi(x) < \mu \leq \pi(z)$. z ist also in $A(x)$ enthalten, und wir schließen $\text{Int } C_{\pi(x)} \cap \overline{B(0, R)} \subseteq A(x)$.

(iii) Im Falle $z \in \text{Int } C_{\pi(x)} \cap \overline{B(0, R)}^c$ ist $|z| > R$, und es gibt ein $a \geq 0$ mit $z + an(z) \in C_{\pi(x)}$. Eine erneute Anwendung von (4.2) liefert

$$\pi(x) = \pi(z + an(z)) \leq \exp(-aH)\pi(z).$$

Es folgt $z \in A(x)$, also $\text{Int } C_{\pi(x)} \cap \overline{B(0, R)}^c \subseteq A(x)$.

(ii) und (iii) liefern $\text{Int } C_{\pi(x)} \subseteq A(x)$, und dies zeigt $A(x) = \text{Int } C_{\pi(x)}$ mit Blick auf (i) für hinreichend großes $|x|$.

4.2 Der Satz 4.5 - Eine äquivalente Bedingung für geometrische Ergodizität

Der weitere Weg zu Satz 4.5 führt über zwei Lemmata. Das erste besagt, daß die Metropolis-Kette auf kleinen Mengen nicht f.s. in einem Zustand verharret.

Lemma 4.3 *Es sei P ein φ -irreduzibler Markov-Kern mit stationärer Verteilung π . Dann gilt*

$$\sup_{x \in C} P(x, \{x\}) < 1$$

f.a. kleinen Mengen $C \in \mathcal{B}^k$.

Beweis: Als erstes halten wir fest, daß $P(x, \{x\}) < 1$ f.a. $x \in \mathbb{R}^k$ gilt. Gäbe es nämlich einen absorbierenden Zustand $x \in \mathbb{R}^k$ mit $P(x, \{x\}) = 1$, so wäre die Irreduzibilität von P verletzt. Wir führen einen Widerspruchsbeweis und nehmen $\sup_{x \in C} P(x, \{x\}) = 1$ für eine kleine Menge $C \in \mathcal{B}^k$ an. Wegen $P(x, \{x\}) < 1$ f.a. $x \in \mathbb{R}^k$ muß C dann mindestens abzählbar unendlich sein. Wir wählen zwei verschiedene Punkte $x_1, x_2 \in C$ mit

$$P(x_i, \{x_i\}) > \left(1 - \frac{\varepsilon}{2}\right)^{1/n}, \quad i = 1, 2,$$

für beliebiges $\varepsilon > 0$ und erhalten

$$P^n(x_1, \{x_1\}) > 1 - \frac{\varepsilon}{2} \quad \text{und} \quad P^n(x_2, \{x_1\}) < \frac{\varepsilon}{2}.$$

Dies liefert

$$\|P^n(x_1, \cdot) - P^n(x_2, \cdot)\| \geq 2|P^n(x_1, \{x_1\}) - P^n(x_2, \{x_1\})| > 2(1 - \varepsilon). \quad (4.6)$$

Andererseits existieren $\delta > 0$, $n \geq 1$ und ein auf C konzentriertes W-Maß ν mit

$$P^n(x, \cdot) \geq \delta \nu(\cdot), \quad x \in C,$$

da C klein ist. Wir folgern für je zwei verschiedene Punkte $x_1, x_2 \in C$:

$$\begin{aligned} \|P^n(x_1, \cdot) - P^n(x_2, \cdot)\| &= 2 \sup_{A \in \mathcal{B}^k} |(P^n(x_1, A) - \delta \nu(A)) - (P^n(x_2, A) - \delta \nu(A))| \\ &\leq 2 \sup_{A \in \mathcal{B}^k} \max \{P^n(x_1, A) - \delta \nu(A), P^n(x_2, A) - \delta \nu(A)\} \\ &\leq 2(1 - \delta). \end{aligned}$$

Hiermit erhält man den gewünschten Widerspruch, wenn man in (4.6) $\varepsilon = \delta$ setzt. □

Das zweite vorbereitende Ergebnis zeigt, daß die Aussage von Lemma 4.3 im Falle geometrischer Ergodizität von P nicht nur auf kleinen Mengen, sondern sogar π -fast überall gilt.

Lemma 4.4 *Es sei P ein φ -irreduzibler Markov-Kern mit stationärer Verteilung π . Falls P geometrisch ergodisch ist, gilt*

$$\text{ess sup } P(x, \{x\}) < 1,$$

wobei ess sup bezüglich π gebildet wird.

Beweis: Aufgrund der geometrischen Ergodizität existieren lt. Satz 3.3 eine π -f.s. endliche Funktion $V \geq 1$, eine kleine Menge $C \in \mathcal{B}^k$ sowie Konstanten $\lambda < 1$ und $b < \infty$, so daß die geometrische Drift-Bedingung

$$PV(x) \leq \lambda V(x) + b\mathbf{1}_C(x)$$

erfüllt ist. Lemma 4.3 liefert $\sup_{x \in C} P(x, \{x\}) < 1$, und für $x \in C^c$ mit $V(x) < \infty$ gilt

$$\begin{aligned} P(x, \{x\}) &\leq P(x, \{x\}) + \int_{S-\{x\}} \frac{V(y)}{V(x)} P(x, dy) \\ &= \frac{PV(x)}{V(x)} \\ &\leq \lambda. \end{aligned}$$

Da V π -f.s. endlich ist, folgt die Behauptung. □

Wir werden nun das Ergebnis erhalten, auf das wir die ganze Zeit hingearbeitet haben, nämlich eine äquivalente Bedingung für geometrische Ergodizität der RW-basierten Metropolis-Kette. Die Aussage von Satz 4.5 ist dabei weniger von praktischer Relevanz. Vielmehr begründet sich ihre Bedeutung in ihrer anschaulichen Gestalt. Sie besagt im wesentlichen, daß die Kette genau dann geometrisch ergodisch ist, wenn die Wahrscheinlichkeit, mit der sie von jedem noch so weit vom Ursprung entfernten Punkt in die Akzeptanzregion zurückspringt, nach unten durch eine positive Zahl beschränkt ist. Inwiefern dabei

Bedingung (4.7) der Anschauung dienlich sein kann, werden wir im Anschluß von Beispiel 4.15 sehen.

Zuvor noch eine Bezeichnung: Es sei

$$\mathcal{U}(x, \mathbb{K}) = \{U \subseteq \mathbb{K} \mid U \text{ ist Umgebung von } x\}.$$

Satz 4.5 *Für eine super-exponentielle Zieldichte π ist der RW-basierte Metropolis-Kern P auf $(\mathbb{R}^k, \mathcal{B}^k)$ mit q abstandhaltend von 0 genau dann geometrisch ergodisch, wenn*

$$\liminf_{|x| \rightarrow \infty} Q(x, A(x)) > 0 \tag{4.7}$$

gilt. Ferner ist dann die geometrische Drift-Bedingung (3.2) mit der Drift-Funktion

$$V(x) = c\pi(x)^{-1/2}$$

für ein $c > 0$ erfüllt.

Beweis: Für $x \in \mathbb{R}^k$ und $\delta > 0$ bezeichne $C_{\pi(x)}(\delta)$ den δ -Schlauch um $C_{\pi(x)}$, d.h.

$$C_{\pi(x)}(\delta) = \{y + sn(y) \mid y \in C_{\pi(x)}, -\delta \leq s \leq \delta\}.$$

Der erste Schritt des Beweises wird darin bestehen zu zeigen, daß das Volumen des Schnittes von $C_{\pi(x)}(\delta)$ und $B(x, K)$ für beliebiges $K > 0$ in Abhängigkeit von δ für hinreichend großes $|x|$ beschränkt ist. Jene Beschränktheit wird genutzt werden, um mit Hilfe von Lemma 4.4 nachzuweisen, daß unter Annahme der Verletzung von (4.7) P nicht geometrisch ergodisch sein kann.

Vol_{k-1} bezeichne das $(k-1)$ -dimensionale Volumen von Hyperflächen im \mathbb{R}^k (s. hierzu im Anhang Definition B.8). Mit Mitteln der Differentialgeometrie erhalten wir

$$\mathbb{X}^k(C_{\pi(x)}(\delta)) \leq 2\delta \text{Vol}_{k-1}(C_{\pi(x)}). \tag{4.8}$$

Unser Ziel wird folglich der Nachweis der Beschränktheit von $\text{Vol}_{k-1}(C_{\pi(x)})$ sein. Ist dies gelungen, erhalten wir für $\mathbb{X}^k(C_{\pi(x)}(\delta) \cap B(x, K))$ vermöge (4.8) sofort eine obere Schranke in Abhängigkeit von δ für jedes $K > 0$.

Da π super-exponentiell ist, existiert ein $R > 0$ derart, daß

$$n(y) \cdot \nabla \log \pi(y) < 0, \quad |y| > R. \tag{4.9}$$

Weil π außerdem überall positiv und stetig ist, folgt

$$\mu = \min \left\{ \pi(y) \mid y \in \overline{B(0, R)} \right\} > 0.$$

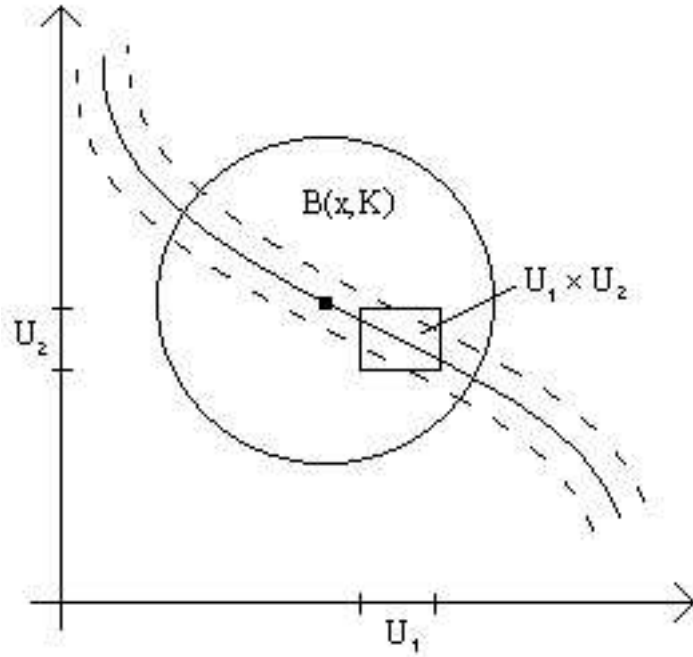


Abbildung 4.1: $C_{\pi(x)}$ die durchgezogene, $C_{\pi(x)}(\delta)$ die gestrichelte Linie

Geben wir uns nun $|x|$ so groß vor, daß $\pi(x) < \mu$ ist (solches $|x|$ existiert lt. Satz 4.2), erhalten wir

$$\sup_{y \in C_{\pi(x)}} n(y) \cdot \nabla \log \pi(y) < 0.$$

F.a. $y \in \overline{B(0, R)}$ gilt nämlich $\pi(y) \geq \mu > \pi(x)$, und wir schließen $y \notin C_{\pi(x)}$. $y \in C_{\pi(x)}$ impliziert also $|y| > R$, und so gelingt obige Abschätzung mit Blick auf (4.9).

Für $y \in C_{\pi(x)}$ muß dann insbesondere $\nabla \pi(y) \neq 0$ gelten, d.h. es gibt ein $i \in \{1, \dots, k\}$ derart, daß $D_i \pi(y) \neq 0$ ist, wobei D_i die partielle Ableitung nach der i -ten Komponente bezeichne (dabei hängt i natürlich von y ab).

Für festes aber beliebiges $y \in C_{\pi(x)}$ wählen wir nun ein festes $j \in \{1, \dots, k\}$ mit $D_j \pi(y) \neq 0$. Des weiteren schreiben wir $\tilde{z} = (z_1, \dots, z_{j-1}, z_{j+1}, \dots, z_k) \in \mathbb{R}^{k-1}$ für den Vektor, den wir durch Streichen der j -ten Komponente von $z \in \mathbb{R}^k$ erhalten, und definieren die Funktion

$$F : \mathbb{R}^{k-1} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, F(\tilde{z}, \zeta) = \pi(z_1, \dots, z_{j-1}, \zeta, z_{j+1}, \dots, z_k) - \pi(x).$$

Offensichtlich ist F_j stetig differenzierbar.

Durch Anwendung dieser Funktion auf unser oben gewähltes y erhalten wir

$$F(\tilde{y}, y_j) = 0 \quad \text{und} \quad D_2 F(\tilde{y}, y_j) = D_j \pi(y) \neq 0.$$

Der Satz über implizite Funktionen liefert nun die Existenz von Umgebungen $U_1 \in \mathcal{U}(\tilde{y}, \mathbb{R}^{k-1})$, $U_2 \in \mathcal{U}(y_j, \mathbb{R})$ sowie einer stetig differenzierbaren Funktion $\varphi : U_1 \rightarrow U_2$ mit

$$F(\tilde{w}, \varphi(\tilde{w})) = 0 \quad \text{und} \quad \varphi(\tilde{w}) = w_j \quad \text{f.a. } w \in U_1 \times U_2,$$

d.h.

$$\pi(w_1, \dots, w_{j-1}, \varphi(\tilde{w}), w_{j+1}, \dots, w_k) = \pi(x) \quad \text{f.a. } w \in C_{\pi(x)} \cap (U_1 \times U_2)$$

(vgl. Satz 2 und Bem. 1, S. 71 in [For2]). Außerdem gilt über die Differenzierbarkeit von φ hinaus sogar die stetig partielle Differenzierbarkeit. Mit $w = (w_1, \dots, w_{j-1}, w_{j+1}, \dots, w_k) \in U_1$ und $\hat{w} = (w_1, \dots, w_{j-1}, \varphi(\tilde{w}), w_{j+1}, \dots, w_k)$ ergibt sich die Ableitung von φ nämlich zu

$$\nabla \varphi(w) = -(D_j \pi(\hat{w}))^{-1} (D_1 \pi(\hat{w}), \dots, D_{j-1} \pi(\hat{w}), D_{j+1} \pi(\hat{w}), \dots, D_k \pi(\hat{w}))$$

(s. hierzu ebenfalls die zuvor zitierte Referenz).

Betrachte nun die Abbildung

$$\Phi : U_1 \rightarrow U_1 \times U_2, \quad \Phi(\tilde{t}) = (t_1, \dots, t_{j-1}, \varphi(\tilde{t}), t_{j+1}, \dots, t_k).$$

Φ ist stetig differenzierbar, Bild $\Phi = C_{\pi(x)} \cap (U_1 \times U_2)$ und die Funktionalmatrix $D\Phi$ hat die Gestalt

$$D\Phi = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ \frac{\partial \varphi}{\partial t_1} & \dots & \frac{\partial \varphi}{\partial t_{j-1}} & \frac{\partial \varphi}{\partial t_{j+1}} & \dots & \frac{\partial \varphi}{\partial t_k} \\ & & & 1 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 \end{pmatrix},$$

wobei $\nabla \varphi$ die j -te Zeile bildet. Es gilt $D\Phi \in M(k \times (k-1), \mathbb{R})$ und $\text{Rang } D\Phi = k-1$. Φ ist demnach eine Immersion (d.h. eine stetig differenzierbare Abbildung, deren Funktionalmatrix vollen Rang besitzt, s. im Anhang Definition B.3), die zudem U_1 homöomorph auf $C_{\pi(x)} \cap (U_1 \times U_2)$ abbildet. Also ist Φ eine Karte.

Für $1 \leq l \leq k$ sei $D\Phi_l$ die $(k-1) \times (k-1)$ -Matrix, die durch Streichen der l -ten Zeile aus $D\Phi$ entsteht. Für die Gramsche Determinante g bzgl. Φ gilt lt. Satz B.6 im Anhang

$$g = \sum_{l=1}^k (\det D\Phi_l)^2. \quad (4.10)$$

Im Falle $l = j$ folgt $\det D\Phi_l \in \{0, 1\}$, und für $l \neq j$ entwickle man die Determinante von $D\Phi_l$ nach der Zeile, die durch $\nabla\varphi$ gebildet wird. Dies liefert in Verbindung mit der stetig partiellen Differenzierbarkeit von φ zusammen mit (4.10) die Stetigkeit von g auf U_1 . Darum kann oBdA angenommen werden, daß g auf U_1 beschränkt ist (ansonsten könnte man anstatt U_1 eine etwas kleinere Umgebung $U_1^* \subseteq U_1$ von \tilde{y} wählen, so daß die Inklusionskette $U_1^* \subseteq \bar{U} \subseteq U_1$ für ein Kompaktum \bar{U} gilt, auf dem dann g beschränkt wäre). Dann gilt für das $(k-1)$ -dimensionale Volumen von $C_{\pi(x)} \cap (U_1 \times U_2)$ unter Berücksichtigung von $\mathbf{1}_{C_{\pi(x)} \cap (U_1 \times U_2)}(\Phi(\tilde{t})) = 1$ auf U_1 :

$$\begin{aligned} \text{Vol}_{k-1} \left(C_{\pi(x)} \cap (U_1 \times U_2) \right) &= \int_{U_1} \sqrt{g(\tilde{t})} \mathbb{K}^{k-1}(d\tilde{t}) \\ &\leq M^0 \mathbb{K}^{k-1}(U_1) \\ &< \infty, \end{aligned}$$

wobei $M^0 = \sup_{\tilde{t} \in U_1} \sqrt{g(\tilde{t})}$ sei. Rufen wir uns jetzt in Erinnerung, daß $C_{\pi(x)}$ für hinreichend große $|x|$ die *stetige* Parametrisierung der (kompakten) Einheitssphäre ist, leuchtet uns sofort die Kompaktheit von $C_{\pi(x)}$ ein. Deswegen und weil obiges Verfahren auf alle $y \in C_{\pi(x)}$ angewendet werden kann, findet man $y^{(\iota)} \in C_{\pi(x)}$, $U_1^{(\iota)} \in \mathcal{U}(\tilde{y}^{(\iota)}, \mathbb{R}^{k-1})$, $U_2^{(\iota)} \in \mathcal{U}(y_{j_i}^{(\iota)}, \mathbb{R})$, stetig partiell differenzierbare Funktionen $\varphi^{(\iota)} : U_1^{(\iota)} \rightarrow U_2^{(\iota)}$, Abbildungen $\Phi^{(\iota)} : U_1^{(\iota)} \rightarrow U_1^{(\iota)} \times U_2^{(\iota)}$ sowie zugehörige Gramsche Determinanten $g^{(\iota)}$ mit $1 \leq \iota \leq m$ für ein $m \in \mathbb{N}$, so daß

$$C_{\pi(x)} \subseteq \bigcup_{\iota=1}^m \left(C_{\pi(x)} \cap \left(U_1^{(\iota)} \times U_2^{(\iota)} \right) \right)$$

und damit

$$\begin{aligned} \text{Vol}_{k-1} \left(C_{\pi(x)} \right) &\leq \text{Vol}_{k-1} \left(\bigcup_{\iota=1}^m \left(C_{\pi(x)} \cap \left(U_1^{(\iota)} \times U_2^{(\iota)} \right) \right) \right) \\ &\leq \sum_{\iota=1}^m \text{Vol}_{k-1} \left(C_{\pi(x)} \cap \left(U_1^{(\iota)} \times U_2^{(\iota)} \right) \right) \\ &\leq \sum_{\iota=1}^m M^{(\iota)} \mathbb{K}^{k-1} \left(U_1^{(\iota)} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\leq m M \mathbb{X}^{k-1}(U) \\ &< \infty \end{aligned}$$

gelten. Dabei seien $M^{(\iota)} = \sup_{\tilde{t} \in U_1^{(\iota)}} \sqrt{g^{(\iota)}(\tilde{t})}$, $M = \max_{1 \leq \iota \leq m} M^{(\iota)}$ und $U \in \{U_1^{(1)}, \dots, U_1^{(m)}\}$ derart, daß $\mathbb{X}^{k-1}(U) \geq \mathbb{X}^{k-1}(U_1^{(\iota)})$ f.a. $\iota \in \{1, \dots, m\}$.

Dank (4.8) erreichen wir somit unser erstes Teilziel, nämlich

$$\mathbb{X}^k \left(C_{\pi(x)}(\delta) \cap B(x, K) \right) \leq 2\delta m M \mathbb{X}^{k-1}(U)$$

für beliebiges $K > 0$. Unter Berücksichtigung der \mathbb{X}^k -Stetigkeit von Q folgt f.a. $K > 0$ und $\varepsilon > 0$ die Existenz eines $\delta > 0$ mit

$$\limsup_{|x| \rightarrow \infty} Q \left(x, C_{\pi(x)}(\delta) \cap B(x, K) \right) \leq \varepsilon. \quad (4.11)$$

Nehmen wir an, die Gültigkeit von (4.7) wäre verletzt, d.h.

$$\limsup_{|x| \rightarrow \infty} Q(x, A(x)) = \limsup_{|x| \rightarrow \infty} Q(x, R(x)^c) = 0. \quad (4.12)$$

Wir zeigen $\limsup_{|x| \rightarrow \infty} P(x, \{x\}) = 1$, was wegen Lemma 4.4 im Widerspruch zur geometrischen Ergodizität von P steht.

Sei $\varepsilon > 0$ beliebig. Da Q gleichmäßig straffe Zuwachsvverteilungen besitzt (vgl. den Beweis zu Satz 2.8), existiert ein $K > 0$ derart, daß

$$Q(x, B(x, K)^c) \leq \varepsilon \quad \text{f.a. } x \in \mathbb{R}^k. \quad (4.13)$$

Wähle nun $\delta > 0$ so, daß (4.11) erfüllt ist. Für $y \in R(x) \cap \left(C_{\pi(x)}(\delta) \right)^c$ folgt wegen (4.2)

$$\frac{\pi(y)}{\pi(x)} \leq \varepsilon, \quad (4.14)$$

falls $|x|$ hinreichend groß ist. Mit diesen Vorbereitungen ergibt sich

$$\begin{aligned} &\limsup_{|x| \rightarrow \infty} P(x, \{x\}) \\ &= \limsup_{|x| \rightarrow \infty} r(x) \delta_x(\{x\}) \\ &= \limsup_{|x| \rightarrow \infty} \int_{R(x)} \left(1 - \frac{\pi(y)}{\pi(x)} \right) q(x, y) \mathbb{X}(dy) \\ &\geq \limsup_{|x| \rightarrow \infty} \int_{R(x) \cap B(x, K) \cap \left(C_{\pi(x)}(\delta) \right)^c} \left(1 - \frac{\pi(y)}{\pi(x)} \right) q(x, y) \mathbb{X}(dy) \\ &\geq (1 - \varepsilon) \limsup_{|x| \rightarrow \infty} Q \left(x, R(x) \cap B(x, K) \cap \left(C_{\pi(x)}(\delta) \right)^c \right) \\ &= (1 - \varepsilon) \left(1 - \liminf_{|x| \rightarrow \infty} Q \left(x, R(x)^c \cup B(x, K)^c \cup \left(C_{\pi(x)}(\delta) \cap B(x, K) \right) \right) \right) \\ &\geq (1 - \varepsilon)(1 - 2\varepsilon), \end{aligned}$$

wobei (4.14) in der fünften Zeile eingeht, und in der letzten Zeile die Subadditivität von Q sowie (4.11), (4.12) und (4.13) benutzt werden. Weil wir ε beliebig vorgegeben haben, folgt das Gewünschte.

Da q abstandhaltend von 0 und π positiv und stetig ist, genügt es für die umgekehrte Richtung wegen Lemma 3.8, die Bedingungen (3.10) und (3.11) für die im Satz angegebene Drift-Funktion V nachzuweisen. Setze in der Drift-Funktion $c = \sup_{x \in \mathbb{R}^k} \sqrt{\pi(x)}$. Dann ist $c > 0$, $V \geq 1$ und unter Berücksichtigung von

$$\alpha(x, y) = \begin{cases} 1 & , \text{ falls } y \in A(x) \\ \frac{\pi(y)}{\pi(x)} & , \text{ falls } y \in R(x) \end{cases}$$

gilt f.a. $x \in \mathbb{R}^k$

$$\begin{aligned} \frac{PV(x)}{V(x)} &= \int_{A(x)} \frac{V(y)}{V(x)} q(x, y) \mathbb{L}(dy) + \int_{R(x)} \frac{V(y)}{V(x)} \frac{\pi(y)}{\pi(x)} q(x, y) \mathbb{L}(dy) \\ &\quad + \int_{R(x)} \left(1 - \frac{\pi(y)}{\pi(x)}\right) q(x, y) \mathbb{L}(dy) \\ &= \int_{A(x)} \frac{\pi(x)^{1/2}}{\pi(y)^{1/2}} q(x, y) \mathbb{L}(dy) \\ &\quad + \int_{R(x)} \left(1 - \frac{\pi(y)}{\pi(x)} + \frac{\pi(y)^{1/2}}{\pi(x)^{1/2}}\right) q(x, y) \mathbb{L}(dy) \\ &\leq Q(x, A(x)) + 2Q(x, R(x)), \end{aligned}$$

da $\frac{\pi(x)}{\pi(y)} \leq 1$ für $y \in A(x)$ und $\frac{\pi(y)}{\pi(x)} \leq 1$ für $y \in R(x)$. Wir folgern

$$\sup_{x \in \mathbb{R}^k} \frac{PV(x)}{V(x)} < \infty.$$

Noch einmal mit (4.2) erhält man wie in (4.14), daß $\frac{\pi(y)}{\pi(x)}$ beliebig klein wird, falls $y \in R(x)$ und $|x|$ hinreichend groß ist. Dann folgt

$$\begin{aligned} \limsup_{|x| \rightarrow \infty} \frac{PV(x)}{V(x)} &\leq \limsup_{|x| \rightarrow \infty} \int_{A(x)} \frac{\pi(x)^{1/2}}{\pi(y)^{1/2}} q(x, y) \mathbb{L}(dy) \\ &\quad + \limsup_{|x| \rightarrow \infty} \int_{R(x)} \left(1 - \frac{\pi(y)}{\pi(x)} + \frac{\pi(y)^{1/2}}{\pi(x)^{1/2}}\right) q(x, y) \mathbb{L}(dy) \\ &= \limsup_{|x| \rightarrow \infty} Q(x, R(x)) \\ &= 1 - \liminf_{|x| \rightarrow \infty} Q(x, A(x)), \end{aligned}$$

da $\pi(x)$ in den Tails verschwindet und $\pi(y) \geq \pi(x)$ für $y \in A(x)$ gilt. Vermöge (4.7) erhalten wir wie gewünscht $\limsup_{|x| \rightarrow \infty} \frac{PV(x)}{V(x)} < 1$. \square

4.3 Eine weitere hinreichende Bedingung für geometrische Ergodizität

Mit Satz 4.5 besitzen wir ein Kriterium, mit dessen Hilfe geometrische Ergodizität für den Fall super-exponentieller Zieldichten leicht veranschaulicht werden kann. Nichtsdestotrotz dürfte die Bedingung (4.7) i.a. nicht einfach nachzuweisen sein. Von praktisch größerer Relevanz wird sich Satz 4.7 erweisen, für dessen Beweis wir das anschließende Lemma benötigen. Zuvor vereinbaren wir noch, daß

$$\sigma_{x,z} = \{x + \lambda(z - x) \mid \lambda \in [0, 1]\}$$

die Strecke zwischen zwei verschiedenen Punkten $x, z \in \mathbb{R}^k$ bezeichnen soll. Außerdem definieren wir

$$m(y) = \frac{\nabla\pi(y)}{|\nabla\pi(y)|}$$

und bemerken, daß Df stets die Funktionalmatrix einer Funktion f sei.

Lemma 4.6 *Gegeben $x, z \in \mathbb{R}^k$, $x \neq z$, sei $\xi = \frac{x-z}{|x-z|}$ und*

$$\xi \cdot m(y) \neq 0 \quad \text{f.a. } y \in \sigma_{x,z}.$$

Dann ist $z \notin C_{\pi(x)}$.

Beweis: Nehmen wir an, z wäre doch in $C_{\pi(x)}$ enthalten. Wir betrachten die Funktion

$$f : [0, |x - z|] \rightarrow \mathbb{R}, \quad f(t) = \pi(x - t\xi).$$

Eine Anwendung der Kettenregel liefert

$$f'(t) = D\pi(h(t)) Dh(t) = -\xi \cdot \nabla\pi(x - t\xi),$$

mit $h : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^k$, $h(t) = x - t\xi$. Wegen $f(0) = \pi(x) = \pi(z) = f(|x - z|)$ folgt aus dem Satz von Rolle die Existenz eines $s \in (0, |x - z|)$ mit $f'(s) = 0$, d.h. $\xi \cdot \nabla\pi(x - s\xi) = 0$, und wegen $\frac{s}{|x-z|} \in (0, 1)$ erhalten wir

$$x - s\xi = x + \frac{s}{|x - z|} (z - x) \in \sigma_{x,z}.$$

Dies liefert aber den gewünschten Widerspruch zur Voraussetzung. □

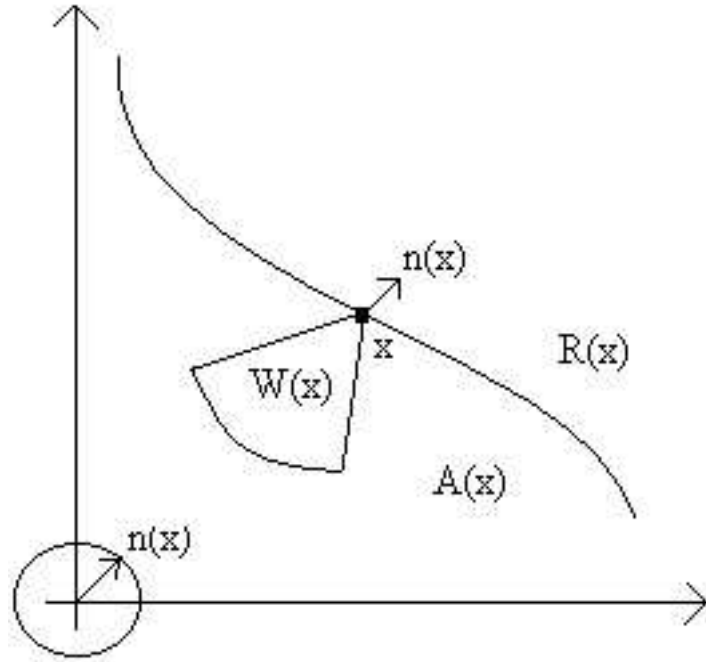


Abbildung 4.2: Der Kegel „ $W(x)$ “

Satz 4.7 Sei π eine super-exponentielle Zieldichte und es gelte

$$\limsup_{|x| \rightarrow \infty} n(x) \cdot m(x) < 0. \quad (4.15)$$

Dann ist der RW-basierte Metropolis-Kern P mit q abstandhaltend von 0 geometrisch ergodisch.

Beweis: Wenn $|x|$ hinreichend groß ist, existiert wegen (4.15) ein $\varepsilon > 0$ mit

$$n(x) \cdot m(x) < -\varepsilon.$$

Für dieses ε und beliebiges, aber festes $K > 0$ definieren wir den Kegel $W(x)$ mit Spitze x durch

$$W(x) = \left\{ x - a\xi \mid 0 < a < K, \xi \in S^{k-1}, |\xi - n(x)| \leq \frac{\varepsilon}{2} \right\},$$

s. Abbildung 4.2. Zuerst zeigen wir die Inklusion

$$W(x) \subseteq A(x) \quad (4.16)$$

für hinreichend großes $|x|$. Sei R_1 so groß, daß $C_{\pi(x)}$ für $x \in \mathbb{R}^k$ mit $|x| > R_1$ die Regionen $A(x)$ und $R(x)$ voneinander trennt. Dann genügt es offensichtlich,

$$W(x) \cap C_{\pi(x)} = \emptyset$$

nachzuweisen, um (4.16) zu verifizieren. Sei ferner R_2 so groß, daß f.a. $y \in W(x)$ mit $|x| > R_2$ die Ungleichungen

$$n(y) \cdot m(y) < -\varepsilon \quad \text{und} \quad |n(x) - n(y)| < \frac{\varepsilon}{2}$$

erfüllt sind. Im folgenden sei $|x| > R = \max\{R_1, R_2\}$. Wir wählen $z \in W(x)$ (insbesondere ist dann $z \neq x$) und setzen $\xi = \frac{x-z}{|x-z|}$ sowie $y = x - a\xi$ für $a \in [0, |x-z|]$. Dann ist $y \in \sigma_{x,z}$, und weil für $a = |x-z|$ die Gleichheit von y und z gilt, ist $y \in W(x)$. Es folgt

$$|\xi - n(x)| \leq \frac{\varepsilon}{2}$$

aufgrund der Definition von $W(x)$. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \xi \cdot m(y) &= (\xi - n(x)) \cdot m(y) + (n(x) - n(y)) \cdot m(y) + n(y) \cdot m(y) \\ &\leq |\xi - n(x)| |m(y)| + |n(x) - n(y)| |m(y)| + n(y) \cdot m(y) \\ &< \frac{\varepsilon}{2} + \frac{\varepsilon}{2} - \varepsilon \\ &= 0, \end{aligned}$$

wobei in der zweiten Zeile die Cauchy-Schwarz Ungleichung benutzt wurde. Es gilt also

$$\xi \cdot m(y) < 0 \quad \text{f.a. } y \in \sigma_{x,z}.$$

It. Lemma 4.6 ist dann $z \notin C_{\pi(x)}$ und (4.16) somit bewiesen.

Nun zeigen wir, daß (4.7) erfüllt ist. Wegen $Q(x, W(x)) = Q(0, W(0))$ f.a. $x \in \mathbb{R}^k$ aufgrund der Struktur von q , ist $Q(x, W(x))$ unabhängig von der Wahl von x , d.h. $Q(x, W(x)) \equiv c$ für ein $c \in [0, 1]$ und alle $x \in \mathbb{R}^k$. Es gilt sogar $c > 0$. Weil nämlich q abstandhaltend von 0 ist, existieren $\varepsilon_q > 0$ und $\eta_q > 0$ mit $q(x, z) \geq \varepsilon_q$ f.a. $z \in B(x, \eta_q)$. Deswegen gilt

$$\begin{aligned} c &= \int_{W(x)} q(x, z) \mathbb{A}(dz) \\ &\geq \int_{W(x) \cap B(x, \eta_q)} q(x, z) \mathbb{A}(dz) \\ &\geq \varepsilon_q \mathbb{A}(W(x) \cap B(x, \eta_q)). \end{aligned}$$

Wegen (4.16) folgt nun schließlich

$$\liminf_{|x| \rightarrow \infty} Q(x, A(x)) \geq \liminf_{|x| \rightarrow \infty} Q(x, W(x)) = c > 0,$$

und damit die Behauptung lt. Satz 4.5. □

Wie kraftvoll Satz 4.7 ist, zeigt das wohl bekannteste aller Beispiele:

Beispiel 4.8 Sei $\pi = N_k(0, E_k)$ die k -dimensionale Normalverteilung eines Zufallsvektors mit unabhängig standardnormalverteilten Komponenten, d.h.

$$\pi(dx) = \frac{1}{(2\pi)^{k/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^k x_i^2\right) \mathbb{1}(dx).$$

$\nabla \pi(x)$ ergibt sich zu $-\pi(x) x$ und π ist positiv und stetig partiell differenzierbar mit

$$n(x) \cdot \nabla \log \pi(x) = n(x) \cdot \frac{\nabla \pi(x)}{\pi(x)} = -|x| (n(x) \cdot n(x)) = -|x|,$$

also ist π super-exponentiell. Wegen

$$n(x) \cdot m(x) = n(x) \cdot \frac{\nabla \pi(x)}{|\nabla \pi(x)|} = -n(x) \cdot n(x) = -1$$

folgt mit Satz 4.7 die geometrische Ergodizität des RW-basierten Metropolis-Kerns. □

Daß (4.15) in Satz 4.7 tatsächlich nur ein hinreichendes Kriterium für geometrische Ergodizität liefert, lehrt das folgende

Beispiel 4.9 Gegenstand unserer Betrachtung ist die Zieldichte π auf \mathbb{R}^2 mit

$$\pi(x, y) \sim h(x, y) e^{-p(x, y)},$$

wobei die Polynome h und p durch $h(x, y) = 1 + x^2 + y^2 + x^8 y^2$ und $p(x, y) = x^2 + y^2$ definiert seien. π ist super-exponentiell, wie man wie folgt einsieht:

Es gilt

$$\nabla \log \pi(x, y) \sim \nabla \log h(x, y) - \nabla p(x, y). \tag{4.17}$$

Mit

$$\nabla \log h(x, y) = \frac{1}{1 + x^2 + y^2 + x^8 y^2} (2x + 8x^7 y^2, 2y + 2x^8 y)$$

folgt

$$\begin{aligned} n(x, y) \cdot \nabla \log h(x, y) &= \frac{2x^2 + 10x^8 y^2 + 2y^2}{\sqrt{x^2 + y^2}(1 + x^2 + y^2 + x^8 y^2)} \\ &= 2 \frac{(\sqrt{x^2 + y^2})^2 + 5x^8 y^2}{(\sqrt{x^2 + y^2})^3 + \sqrt{x^2 + y^2} x^8 y^2 + \sqrt{x^2 + y^2}} \\ &\leq \frac{2}{|(x, y)|} + \frac{10}{|(x, y)|} \\ &\rightarrow 0, \end{aligned}$$

falls $|(x, y)| \rightarrow \infty$. Ferner ist $\nabla p(x, y) = 2(x, y)$, also

$$n(x, y) \cdot \nabla p(x, y) = \frac{2}{\sqrt{x^2 + y^2}} (x^2 + y^2) = 2\sqrt{x^2 + y^2} \rightarrow \infty,$$

falls $|(x, y)| \rightarrow \infty$, und so erhalten wir

$$\lim_{|(x,y)| \rightarrow \infty} n(x, y) \cdot \nabla \log \pi(x, y) = -\infty$$

mit (4.17). Positivität und stetig partielle Differenzierbarkeit von π sind offensichtlich.

Wir betrachten nun die Folge $((x_i, y_i))_{i \geq 1}$ im \mathbb{R}^2 mit $x_i = i$ und $y_i = i^{-4}$. Dann gilt

$$\limsup_{i \rightarrow \infty} n(x_i, y_i) = \limsup_{i \rightarrow \infty} \frac{(i, i^{-4})}{\sqrt{i^2 + i^{-8}}} = (1, 0).$$

Des weiteren berechnet man

$$\nabla \pi(i, i^{-4}) \sim 2 e^{-(i^2 + i^{-8})} \left(-i^3 - i + \frac{4}{i} - \frac{1}{i^7}, i^4 - \frac{1}{i^2} - \frac{1}{i^4} - \frac{1}{i^{12}} \right),$$

und damit

$$|\nabla \pi(i, i^{-4})| \sim 2 e^{-(i^2 + i^{-8})} \sqrt{\left(-i^3 - i + \frac{4}{i} - \frac{1}{i^7} \right)^2 + \left(i^4 - \frac{1}{i^2} \left(1 + \frac{1}{i^2} + \frac{1}{i^6} \right) \right)^2}.$$

Wir folgern

$$\limsup_{i \rightarrow \infty} \frac{\nabla \pi(i, i^{-4})}{|\nabla \pi(i, i^{-4})|} = \limsup_{i \rightarrow \infty} \frac{(-i^3, i^4)}{\sqrt{i^8}} = (0, 1)$$

und schließen

$$\limsup_{i \rightarrow \infty} n(x_i, y_i) \cdot m(x_i, y_i) = (1, 0) \cdot (0, 1) = 0.$$

(4.15) ist demnach für unsere Zieldichte nicht erfüllt. Unser Ziel ist zu zeigen, daß der RW-basierte Metropolis-Algorithmus mit q abstandhaltend von 0 dennoch geometrisch ergodisch ist. Dazu wählen wir zunächst zwei Punkte $z_1, z_2 \in \mathbb{R}^2$, $z_1 = (x_1, y_1)$, $z_2 = (x_2, y_2)$ und betrachten

$$\frac{\pi(z_2)}{\pi(z_1)} = \frac{e^{x_1^2 + y_1^2}}{1 + x_1^2 + y_1^2 + x_1^8 y_1^2} \frac{1 + x_2^2 + y_2^2 + x_2^8 y_2^2}{e^{x_2^2 + y_2^2}}.$$

Sei oBdA $z_1 \in \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x > 0, y > 0\}$. Setze

$$A = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x < x_1, y < y_1\} \cap B(z_1, \eta_q),$$

wobei $\eta_q > 0$ gemäß Definition 2.5 gewählt werden soll. (Ist z_1 nicht aus dem ersten Quadranten, so definiere A jeweils als das dem Nullpunkt zugewandte

Kreisviertel von $B(z_1, \eta_q)$.) Es sei darauf hingewiesen, daß $\mathbb{K}^2(A) = \frac{\pi \eta_q^2}{4}$ aufgrund der Translationsinvarianz von \mathbb{K}^2 unabhängig von der Wahl von z_1 ist. Für $z_2 \in A$ gilt $|z_2| < |z_1|$. Mit Verweis auf das exponentielle Wachstum des Zählers bzw. das polynomiale Wachstum des Nenners der folgenden Quotienten in $|z_i|$, $i = 1, 2$, erkennt man sofort die Gültigkeit von

$$\frac{e^{x_2^2+y_2^2}}{1+x_2^2+y_2^2+x_2^8y_2^2} < \frac{e^{x_1^2+y_1^2}}{1+x_1^2+y_1^2+x_1^8y_1^2},$$

falls $|z_1|$ hinreichend groß ist. Also folgt

$$\frac{\pi(z_2)}{\pi(z_1)} \geq 1 \quad \text{f.a. } z_2 \in A,$$

d.h. $A \subseteq A(z_1)$. Schließlich halten wir fest, daß für $z \in A$ und mit $\varepsilon_q > 0$, das wir ebenfalls gemäß Definition 2.5 wählen,

$$q(z_1, z) \geq \varepsilon_q$$

gilt, da $A \subseteq \overline{B(z_1, \eta_q)}$. Wir erhalten

$$\begin{aligned} Q(z_1, A(z_1)) &= \int_{A(z_1)} q(z_1, z) \mathbb{K}^2(dz) \\ &\geq \int_A q(z_1, z) \mathbb{K}^2(dz) \\ &\geq \varepsilon_q \frac{\pi \eta_q}{4}, \end{aligned}$$

f.a. $z_1 \in \mathbb{R}^2$ mit $|z_1|$ hinreichend groß. (4.7) in Satz 4.5 liefert nun wie gewünscht die geometrische Ergodizität. \square

4.4 Geometrische Ergodizität für spezielle super-exponentielle Zieldichten

Satz 4.10 *Es seien π_1 und π_2 super-exponentielle Zieldichten, die die Bedingung (4.15) erfüllen. Dann sind die folgenden Dichten ebenfalls super-exponentiell und erfüllen (4.15):*

- (i) $\pi \sim \pi_1 \pi_2$,
- (ii) $\pi \sim a_1 \pi_1 + a_2 \pi_2$ mit $a_1, a_2 > 0$,
- (iii) π Translation von π_1 , d.h. $\pi(x) = \pi_1(x + b)$ für ein $b \in \mathbb{R}^k$.

Beweis: Offenbar sind alle Dichten unter (i) - (iii) positiv und stetig partiell differenzierbar. Da sich (4.1) und (4.15) durch einfaches Nachrechnen ergeben, soll hier exemplarisch nur (ii) gezeigt werden.

Es gilt

$$\begin{aligned}
 n(x) \cdot \nabla \log(\pi(x)) &\sim n(x) \cdot \nabla \log(a_1 \pi_1(x) + a_2 \pi_2(x)) \\
 &= n(x) \cdot \frac{a_1 \nabla \pi_1(x)}{a_1 \pi_1(x) + a_2 \pi_2(x)} + n(x) \cdot \frac{a_2 \nabla \pi_2(x)}{a_1 \pi_1(x) + a_2 \pi_2(x)} \\
 &< n(x) \cdot \frac{\nabla \pi_1(x)}{\pi_1(x)} + n(x) \cdot \frac{\nabla \pi_2(x)}{\pi_2(x)} \\
 &= n(x) \cdot \nabla \log \pi_1(x) + n(x) \cdot \nabla \log \pi_2(x),
 \end{aligned}$$

also folgt (4.1). Wir erhalten weiter

$$\begin{aligned}
 n(x) \cdot \frac{\nabla \pi(x)}{|\nabla \pi(x)|} &\sim n(x) \cdot \frac{a_1 \nabla \pi_1(x)}{|a_1 \nabla \pi_1(x) + a_2 \nabla \pi_2(x)|} \\
 &\quad + n(x) \cdot \frac{a_2 \nabla \pi_2(x)}{|a_1 \nabla \pi_1(x) + a_2 \nabla \pi_2(x)|} \\
 &= \gamma_1(x) \left(n(x) \cdot \frac{\nabla \pi_1(x)}{|\nabla \pi_1(x)|} \right) + \gamma_2(x) \left(n(x) \cdot \frac{\nabla \pi_2(x)}{|\nabla \pi_2(x)|} \right)
 \end{aligned}$$

mit

$$\gamma_j(x) = \frac{a_j |\nabla \pi_j(x)|}{|a_1 \nabla \pi_1(x) + a_2 \nabla \pi_2(x)|}, \quad j = 1, 2,$$

und gehen in dieser Rechnung zum \limsup über. Wegen $\inf_{x \in \mathbb{R}^k} \gamma_j(x) \geq 0$ für $j = 1, 2$ folgt wie gewünscht (4.15). \square

Wie einfach mit Hilfe von Satz 4.7 geometrische Ergodizität überprüft werden kann, haben wir in Beispiel 4.8 demonstriert. Wir werden Dank dieses Kriteriums aber noch mehr gewinnen. Eine Anwendung dieses Satzes wird in Satz 4.14 ein Resultat liefern, das zusammen mit dem gerade erzielten Ergebnis die geometrische Ergodizität für eine große Klasse von Zieldichten sicherstellt. Dazu treffen wir hier die entsprechenden Vorbereitungen.

Definition 4.11 Eine Funktion $f : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$ heißt *homogen vom Grade d* , $d \geq 1$, falls

$$f(rx) = r^d f(x)$$

f.a. $r > 0$ und $x \in \mathbb{R}^k$ gilt.

Im folgenden wird in erster Linie diese äquivalente Darstellung homogener Funktionen genutzt werden:

$$f(x) = |x|^d f \circ n(x), \quad x \in \mathbb{R}^k. \quad (4.18)$$

Lemma 4.12 *Es sei f eine stetig differenzierbare, homogene Funktion vom Grade d , $d \geq 1$. Dann existieren Konstanten $c \geq 0$ und $C \geq 0$, so daß*

$$c|x|^{d-1} \leq |\nabla f(x)| \leq C|x|^{d-1}, \quad x \in \mathbb{R}^k,$$

gilt. Falls $f(x) \neq 0$ f.a. $x \neq 0$, gilt sogar $c > 0$.

Beweis: Eine Anwendung der Produkt- und Kettenregel auf (4.18) liefert für $x \neq 0$

$$\begin{aligned} \nabla f(x) &= \nabla (|x|^d f \circ n(x)) \\ &= \left(D(|x|^d) \right) f \circ n(x) + |x|^d (Df \circ n(x)) \\ &= d|x|^{d-1} n(x) f \circ n(x) + |x|^d \nabla f(n(x)) Dn(x). \end{aligned}$$

Dabei ist

$$Dn(x) = \left(\frac{\partial n_i}{\partial x_j}(x) \right)_{\substack{1 \leq i \leq k \\ 1 \leq j \leq k}} \quad \text{mit} \quad \frac{\partial n_i}{\partial x_j}(x) = \frac{1}{|x|} \left(\delta_{ij} - \frac{x_i x_j}{|x|^2} \right).$$

Für $y \in \mathbb{R}^k$ ergibt sich somit

$$\nabla f(n(x)) Dn(x) \cdot y = \frac{\nabla f(n(x))}{|x|} \cdot (y - n(x)(y \cdot n(x))),$$

also mit obiger Rechnung

$$\frac{\nabla f(x) \cdot y}{|x|^{d-1}} = d f \circ n(x) n(x) \cdot y + \nabla f(n(x)) \cdot (y - n(x)(y \cdot n(x))) \quad (4.19)$$

f.a. $x, y \in \mathbb{R}^k, x \neq 0$. Es gilt

$$\begin{aligned} |\nabla f(x)| &= |\nabla f(x)| \left| \frac{\nabla f(x)}{|\nabla f(x)|} \right| \\ &= \left| \nabla f(x) \cdot \frac{\nabla f(x)}{|\nabla f(x)|} \right| \\ &\leq \sup_{|y|=1} |\nabla f(x) \cdot y| \end{aligned}$$

unter Beachtung der linearen Abhängigkeit von $\nabla f(x)$ und $\frac{\nabla f(x)}{|\nabla f(x)|}$ bei Anwendung der Cauchy-Schwarz Ungleichung in der zweiten Zeile. Unter Verwendung der Dreiecks- und Cauchy-Schwarz Ungleichung in Verbindung mit (4.19) schließen wir f.a. y mit $|y| = 1$

$$\begin{aligned} \frac{|\nabla f(x) \cdot y|}{|x|^{d-1}} &\leq d |f \circ n(x) (n(x) \cdot y)| + |\nabla f(n(x)) \cdot (y - n(x)(y \cdot n(x)))| \\ &\leq d |f \circ n(x)| + |\nabla f(n(x))| |y - n(x)(y \cdot n(x))|. \end{aligned}$$

Nun sind $y - n(x)(y \cdot n(x))$ und $n(x)(y \cdot n(x))$ orthogonal (vgl. hierzu die Ausführungen in A.1.1). Der Satz von Pythagoras liefert deshalb

$$|y|^2 = 1 = |y - n(x)(y \cdot n(x))|^2 + |n(x)(y \cdot n(x))|^2,$$

also

$$\sup_{|y|=1} |y - n(x)(y \cdot n(x))| \leq 1.$$

Fassen wir diese Ergebnisse zusammen, erhalten wir

$$\frac{|\nabla f(x)|}{|x|^{d-1}} \leq \sup_{|y|=1} \frac{|\nabla f(x) \cdot y|}{|x|^{d-1}} \leq d |f \circ n(x)| + |\nabla f(n(x))|$$

und somit die obere Schranke

$$C = \sup_{|z|=1} d |f(z)| + \sup_{|z|=1} |\nabla f(z)|.$$

Wählt man in (4.19) $y = x$, verschwindet der zweite Term auf der rechten Seite. Es folgt

$$\frac{\nabla f(x) \cdot x}{|x|^{d-1}} = \frac{|x| \nabla f(x) \cdot x}{|x|^d} = d f \circ n(x) \frac{x}{|x|} \cdot x$$

und damit wegen $\frac{x \cdot x}{|x|^2} = 1$

$$\nabla f(x) \cdot x = d |x|^d f \circ n(x). \tag{4.20}$$

Dieses Ergebnis beschert uns unter erneutem Rückgriff auf die Cauchy-Schwarz Ungleichung die untere Schranke

$$c = d \inf_{|z|=1} |f(z)|$$

vermöge der Abschätzung

$$|\nabla f(x)| |x| \geq |\nabla f(x) \cdot x| = d |x|^d |f \circ n(x)|.$$

Ist ferner $f(x) \neq 0$ f.a. $x \neq 0$, so folgt

$$c = d \min_{|z|=1} |f(z)| > 0$$

aus der Stetigkeit von f . □

Es sei $\mathbb{P}_d(\mathbb{R}^k)$ die Menge der Polynome vom Grade d auf \mathbb{R}^k . p_i bezeichne die Terme vom Grade i in $p \in \mathbb{P}_d(\mathbb{R}^k)$, $i \in \{0, \dots, d\}$. Dann erhält man eine Zerlegung

$$p(x) = \sum_{i=0}^d p_i(x),$$

wobei die p_i offensichtlich homogen vom Grade i sind.

Des weiteren sei \mathcal{P}_d die Menge aller Polynome vom Grade d auf \mathbb{R}^k für ein $d \in 2\mathbb{N}$ mit der Grenzwerteigenschaft

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} p_d(x) = \infty.$$

\mathcal{P}_d^+ enthalte diejenigen Polynome aus \mathcal{P}_d , die überall positiv sind und schließlich sei in Anlehnung an die untere Schranke im Beweis von Lemma 4.12

$$\gamma_d = d \min_{|z|=1} p_d(z).$$

Lemma 4.13 *Für $d \in 2\mathbb{N}$ gilt*

$$\mathcal{P}_d = \left\{ p \in \mathbb{P}_d(\mathbb{R}^k) \mid \gamma_d > 0 \right\}.$$

Beweis: Wir geben zunächst $\gamma_d > 0$ vor. Wegen $p_d(x) = |x|^d p_d \circ n(x)$ und $d \in 2\mathbb{N}$ folgt dann $p_d(x) \rightarrow \infty$, falls $|x| \rightarrow \infty$.

Gelte umgekehrt $\lim_{|x| \rightarrow \infty} p_d(x) = \infty$, und wir nehmen $\gamma_d \leq 0$ an. Dann existiert ein $z \in \mathbb{R}^k$, $|z| = 1$, mit $p_d(z) = p_d \circ n(z) \leq 0$. Setze $x_s = sz$ für $s > 0$. Dann gilt

$$p_d(x_s) = |x_s|^d p_d \circ n(x_s) = s^d p \circ n(z) \leq 0 \quad \text{f.a. } s > 0,$$

und damit $\limsup_{s \rightarrow \infty} p_d(x_s) \leq 0$ im Widerspruch zur Voraussetzung. □

Satz 4.14 *Es seien $d, m \in 2\mathbb{N}$, $p \in \mathcal{P}_d$ und $h \in \mathcal{P}_m^+$. Für jede Zieldichte π auf \mathbb{R}^k mit einer Gestalt der Form*

$$(i) \quad \pi(x) \sim e^{-p(x)},$$

$$(ii) \quad \pi(x) \sim h(x)e^{-p(x)},$$

$$(iii) \quad \pi(x) \sim h(x)^{-p(x)},$$

ist der RW-basierte Metropolis-Kern mit von q abstandhaltend von 0 geometrisch ergodisch.

Beweis: Als erstes notieren wir die Positivität und stetig partielle Differenzierbarkeit aller Dichten. Wegen $p \in \mathcal{P}_d$ erhält man mittels Lemma 4.12 sowie der Definition der unteren Schranke in dessen Beweis

$$|\nabla p(x)| \geq |\nabla p_d(x)| - \sum_{i=1}^{d-1} |\nabla p_i(x)| \geq \gamma_d |x|^{d-1} - \sum_{i=1}^{d-1} C_i |x|^{i-1}$$

für geeignete C_1, \dots, C_{d-1} . Dies impliziert wegen $\gamma_d > 0$ insbesondere

$$|\nabla p(x)| \rightarrow \infty, \quad \text{falls } |x| \rightarrow \infty. \quad (4.21)$$

Des weiteren gilt

$$\begin{aligned} \frac{\nabla p(x)}{|\nabla p(x)|} \cdot n(x) &= \frac{\sum_{i=1}^d \nabla p_i(x) \cdot x}{|\nabla p(x)| |x|} \\ &\geq \frac{\nabla p_d(x) \cdot x - \sum_{i=1}^{d-1} |\nabla p_i(x)| |x|}{|\nabla p(x)| |x|} \\ &\geq \frac{d |x|^d p_d \circ n(x) - \sum_{i=1}^{d-1} C_i |x|^i}{\sum_{i=1}^d C_i |x|^i} \\ &\geq \frac{\gamma_d |x|^d - \sum_{i=1}^{d-1} C_i |x|^i}{C_d |x|^d + \sum_{i=1}^{d-1} C_i |x|^i}, \end{aligned}$$

wobei wir in der dritten Zeile (4.20) und Lemma 4.12 benutzt haben. Hieraus folgt

$$\liminf_{|x| \rightarrow \infty} \frac{\nabla p(x)}{|\nabla p(x)|} \cdot n(x) \geq \frac{\gamma_d}{C_d} > 0,$$

und wir erkennen mit Blick auf (4.21)

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \nabla p(x) \cdot n(x) = \infty. \quad (4.22)$$

Ist nun $\pi(x) \sim e^{-p(x)}$, folgt

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} n(x) \cdot \nabla \log \pi(x) = - \lim_{|x| \rightarrow \infty} (\nabla p(x) \cdot n(x)) = -\infty,$$

d.h. π ist super-exponentiell. Schließlich ist auch (4.15) erfüllt, denn es gilt

$$\begin{aligned} \limsup_{|x| \rightarrow \infty} m(x) \cdot n(x) &= \limsup_{|x| \rightarrow \infty} \frac{\nabla e^{-p(x)}}{|\nabla e^{-p(x)}|} \cdot n(x) \\ &= \limsup_{|x| \rightarrow \infty} -\frac{\nabla p(x)}{|\nabla p(x)|} \cdot n(x) \\ &= -\liminf_{|x| \rightarrow \infty} \frac{\nabla p(x)}{|\nabla p(x)|} \cdot n(x) < 0. \end{aligned}$$

Somit folgt die Behauptung aus Satz 4.7.

Daß $\pi(x) \sim h(x) e^{-p(x)}$ super-exponentiell ist, folgt aus (4.22) und

$$\begin{aligned} \lim_{|x| \rightarrow \infty} n(x) \cdot \nabla \log h(x) &= \lim_{|x| \rightarrow \infty} \frac{x}{|x|} \frac{\nabla h(x)}{h(x)} \\ &= \lim_{|x| \rightarrow \infty} \frac{1}{|x|} \frac{\sum_{i=1}^m \nabla h_i(x) \cdot x}{\sum_{i=0}^m h_i(x)} \\ &= \lim_{|x| \rightarrow \infty} \frac{1}{|x|} \frac{\sum_{i=1}^m i |x|^i h_i \circ n(x)}{\sum_{i=0}^m |x|^i h_i \circ n(x)} \\ &= 0, \end{aligned}$$

unter Verwendung von (4.18) und (4.20) in der letzten Zeile, denn

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} n(x) \cdot \nabla \log \pi(x) = \lim_{|x| \rightarrow \infty} n(x) \cdot \nabla \log h(x) - \lim_{|x| \rightarrow \infty} n(x) \cdot \nabla p(x).$$

Ferner ist

$$\begin{aligned} \limsup_{|x| \rightarrow \infty} m(x) \cdot n(x) &= n(x) \cdot \limsup_{|x| \rightarrow \infty} \frac{\nabla(\log h(x) - p(x))}{|\nabla(\log h(x) - p(x))|} \\ &\leq \limsup_{|x| \rightarrow \infty} n(x) \cdot \frac{\nabla \log h(x)}{|\nabla \log h(x) - \nabla p(x)|} \\ &\quad - \liminf_{|x| \rightarrow \infty} n(x) \cdot \frac{\nabla p(x)}{|\nabla \log h(x)| + |\nabla p(x)|}. \end{aligned}$$

Wegen (4.21), $\lim_{|x| \rightarrow \infty} n(x) \cdot \nabla \log h(x) = 0$ und

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \nabla \log h(x) = \lim_{|x| \rightarrow \infty} \frac{\sum_{i=1}^m \nabla h_i(x)}{\sum_{i=0}^m h_i(x)} = 0$$

verschwindet dabei in der vorletzten Zeile der \limsup -Term und aus

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \frac{|\nabla \log h(x)|}{|\nabla p(x)|} = \lim_{|x| \rightarrow \infty} \frac{|\nabla h(x)|}{|h(x)| |\nabla p(x)|} = 0$$

folgt

$$\begin{aligned}
 & - \liminf_{|x| \rightarrow \infty} n(x) \cdot \frac{\nabla p(x)}{|\nabla \log h(x)| + |\nabla p(x)|} \\
 &= - \liminf_{|x| \rightarrow \infty} n(x) \cdot \left(\frac{\nabla p(x)}{|\nabla \log h(x)| + |\nabla p(x)|} \left(1 + \frac{|\nabla \log h(x)|}{|\nabla p(x)|} \right) \right) \\
 &= - \liminf_{|x| \rightarrow \infty} n(x) \cdot \frac{\nabla p(x)}{|\nabla p(x)|} < 0
 \end{aligned}$$

wie oben gesehen. Nun kommt wiederum Satz 4.7 zur Anwendung.

Für $\pi(x) \sim h(x)^{-p(x)}$ folgt schließlich mit $\lim_{|x| \rightarrow \infty} n(x) \cdot \nabla \log h(x) = 0$, $h \in \mathcal{P}_m^+$, $p \in \mathcal{P}_d$ und (4.22)

$$\begin{aligned}
 \lim_{|x| \rightarrow \infty} n(x) \cdot \nabla \log \pi(x) &= - \lim_{|x| \rightarrow \infty} n(x) \cdot \nabla(p(x) \log h(x)) \\
 &= - \lim_{|x| \rightarrow \infty} (n(x) \cdot \nabla p(x)) \log h(x) \\
 &\quad - \lim_{|x| \rightarrow \infty} (n(x) \cdot \nabla \log h(x)) p(x) \\
 &= - \lim_{|x| \rightarrow \infty} (n(x) \cdot \nabla p(x)) \log \left(h_m(x) + \sum_{i=0}^{m-1} h_i(x) \right) \\
 &\quad - \lim_{|x| \rightarrow \infty} (n(x) \cdot \nabla \log h(x)) \left(p_d(x) + \sum_{i=0}^{d-1} p_i(x) \right) \\
 &= -\infty,
 \end{aligned}$$

d.h. π ist super-exponentiell. Mit ähnlichen Überlegungen wie oben erhält man ebenfalls erneut die Gültigkeit von (4.15). Es gilt nämlich

$$\begin{aligned}
 & \frac{\nabla(p(x) \log h(x)) \cdot x}{|\nabla(p(x) \log h(x))| |x|} \\
 & \geq \frac{(\log h(x) \nabla p(x)) \cdot x + (p(x) \nabla \log h(x)) \cdot x}{|\log h(x)| |\nabla p(x)| |x| + |p(x)| |\nabla \log h(x)| |x|} \\
 &= \frac{\log h(x) \nabla p(x) \cdot x + \frac{p(x)}{h(x)} \nabla \log h(x) \cdot x}{\log h(x) |\nabla p(x)| |x| + \frac{|p(x)|}{|h(x)|} |\nabla h(x)| |x|} \\
 &= \frac{\log h(x) \sum_{i=1}^d \nabla p_i(x) \cdot x + \frac{p(x)}{h(x)} \sum_{i=1}^m \nabla h_i(x) \cdot x}{\log h(x) |\sum_{i=1}^d \nabla p_i(x)| |x| + \frac{|p(x)|}{|h(x)|} |\sum_{i=1}^m \nabla h_i(x)| |x|} \\
 & \geq \frac{\log h(x) \nabla p_d(x) \cdot x + \frac{p(x)}{h(x)} \nabla h_m(x) \cdot x - \log h(x) s_1 - \frac{p(x)}{h(x)} s_2}{\log h(x) \sum_{i=1}^d |\nabla p_i(x)| |x| + \frac{|p(x)|}{|h(x)|} \sum_{i=1}^m |\nabla h_i(x)| |x|} \\
 &= \frac{\log h(x) d |x|^d p_d \circ n(x) + \frac{p(x)}{h(x)} m |x|^m h_m \circ n(x) - \log h(x) s_1 - \frac{p(x)}{h(x)} s_2}{\log h(x) \sum_{i=1}^d |\nabla p_i(x)| |x| + \frac{|p(x)|}{|h(x)|} \sum_{i=1}^m |\nabla h_i(x)| |x|} \\
 & \geq \frac{\log h(x) \gamma_d |x|^d + \frac{p(x)}{h(x)} \gamma_m |x|^m - \log h(x) \sum_{i=1}^{d-1} C_i |x|^i - \frac{p(x)}{h(x)} \sum_{i=1}^{m-1} D_i |x|^i}{\log h(x) C_d |x|^d + \frac{|p(x)|}{|h(x)|} D_m |x|^m + \log h(x) \sum_{i=1}^{d-1} C_i |x|^i + \frac{|p(x)|}{|h(x)|} \sum_{i=1}^{m-1} D_i |x|^i}
 \end{aligned}$$

mit $s_1 = \sum_{i=1}^{d-1} |\nabla p_i(x)| |x|$ und $s_2 = \sum_{i=1}^{m-1} |\nabla h_i(x)| |x|$ sowie passenden C_1, \dots, C_d und D_1, \dots, D_m gemäß Lemma 4.12. Damit erhält man

$$\liminf_{|x| \rightarrow \infty} m(x) \cdot n(x) \geq \frac{\gamma_d + \gamma_m}{C_d + C_m} > 0,$$

also erneut

$$\begin{aligned} \limsup_{|x| \rightarrow \infty} \frac{\nabla \pi(x)}{|\nabla \pi(x)|} \cdot n(x) &= \limsup_{|x| \rightarrow \infty} - \frac{\nabla(p(x) \log h(x))}{|\nabla(p(x) \log h(x))|} \cdot n(x) \\ &= - \liminf_{|x| \rightarrow \infty} \frac{\nabla(p(x) \log h(x))}{|\nabla(p(x) \log h(x))|} \cdot n(x) < 0. \end{aligned}$$

□

Es sei angemerkt, daß u.a. die Normalverteilungen in die Klasse der Zielverteilungen in Satz 4.14 fallen. Wir erhalten also ohne weitere Anstrengungen die geometrische Ergodizität, die wir bereits in Beispiel 4.8 nachgewiesen hatten.

Zum Abschluß dieses Kapitels eine unerfreuliche Nachricht: Das folgende Beispiel zeigt, daß der RW-basierte Metropolis-Hastings Algorithmus selbst bei super-exponentiellen Zieldichten keine „Allzweckwaffe“ hinsichtlich geometrischer Ergodizität ist.

Beispiel 4.15 Die Zieldichte π auf \mathbb{R}^2 sei gegeben durch

$$\pi(x, y) \sim e^{-p(x, y)},$$

mit $p(x, y) = x^2 + x^2 y^2 + y^2$. π ist wegen

$$n(x, y) \cdot \nabla \log \pi(x, y) = -2 \frac{x^2 + 2x^2 y^2 + y^2}{\sqrt{x^2 + y^2}} = -2|(x, y)| - \frac{4x^2 y^2}{|(x, y)|}$$

super-exponentiell und hat eine Form wie in Satz 4.14,(i). Allerdings ist $p \notin \mathcal{P}_4$, denn für $p_4(x, y) = x^2 y^2$ gilt z.B. für die Folge $(\xi_k)_{k \geq 1}$ mit $\xi_k = (0, k)$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} p_4(\xi_k) = 0.$$

Wir werden zeigen, daß entlang der Folge $(\xi_k)_{k \geq 1}$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} Q(\xi_k, R(\xi_k)) = 1$$

gilt, und somit (4.7) in Satz 4.5 verletzt ist. Die RW-basierte Metropolis-Kette kann demnach nicht geometrisch ergodisch sein.

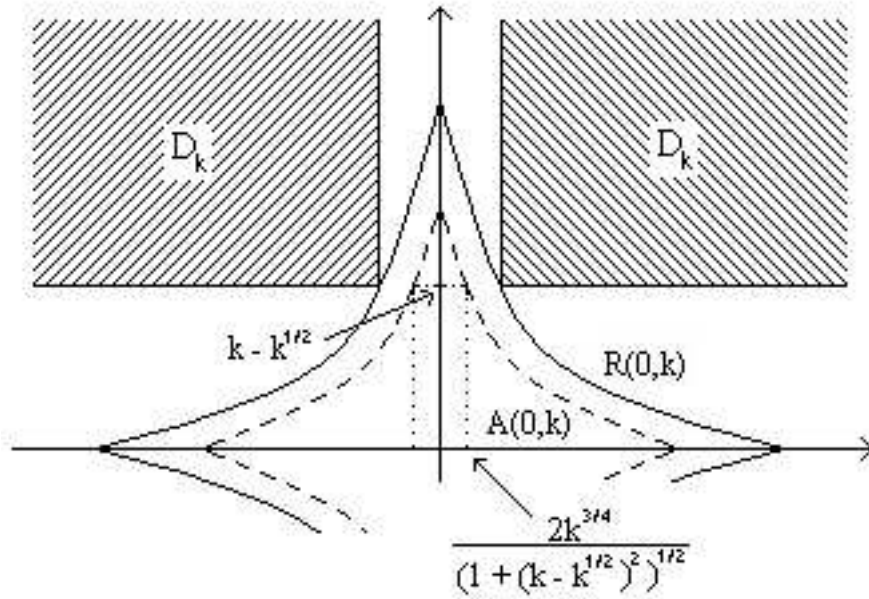


Abbildung 4.3: $C_{\pi(0,k)}$ die gestrichelte Linie, $C_{\pi(0,k+\sqrt{k})}$ die durchgezogene Linie

Wir betrachten dazu zunächst die Punkte $(x_s, y_s) \in C_{\pi(0,s)}$ für $s > 0$, also alle $(x_s, y_s) \in \mathbb{R}^2$ mit $p(x_s, y_s) = s^2$. Diese Punkte erfüllen die Gleichung

$$y_s^2 = \frac{s^2 - x_s^2}{1 + x_s^2} \quad \text{für } |x_s| \leq s. \quad (4.23)$$

Wir betrachten $C_{\pi(0,s)}$ für $s = k + \sqrt{k}$. Für $y_{k+\sqrt{k}} = k - \sqrt{k}$ liefert dann

$$x_{k+\sqrt{k}} = \pm \frac{2k^{3/4}}{\sqrt{1 + (k - \sqrt{k})^2}}$$

zwei Lösungen von (4.23). Sei nun k mindestens so groß, daß $A(\xi_k)$ und $R(\xi_k)$ durch $C_{\pi(\xi_k)}$ voneinander getrennt werden, und wir definieren

$$D_k = \left\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 : |x| \geq \frac{2k^{3/4}}{\sqrt{1 + (k - \sqrt{k})^2}}, y \geq k - \sqrt{k} \right\},$$

s. Abbildung 4.3.

Man erkennt sofort $|y_k| < |y_{k+\sqrt{k}}|$ für $x_k = x_{k+\sqrt{k}}$, oder anders ausgedrückt, $C_{\pi(0,k)}$ verläuft in der oberen Halbebene unterhalb von $C_{\pi(0,k+\sqrt{k})}$. Darum ist $D_k \subseteq R(\xi_k)$, wenn wir berücksichtigen, daß y_s aufgefaßt als Kurve in x_s monoton fallend im ersten Quadranten und symmetrisch bezüglich der y -Achse ist.

Mit $D_k - (0, k) = \{(x, y) - (0, k) : (x, y) \in D_k\}$ erhalten wir

$$\begin{aligned}
 Q(\xi_k, R(\xi_k)) &\geq Q(\xi_k, D_k) \\
 &= \int_{D_k} f(|(x, y) - (0, k)|) \mathbb{X}^2(dx, dy) \\
 &= \int_{D_k - (0, k)} f(|(x, y)|) \mathbb{X}^2(dx, dy) \\
 &= \int \mathbb{1}_{\left\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 : |x| \geq \frac{2k^{3/4}}{\sqrt{1+(k-\sqrt{k})^2}}, y \geq -\sqrt{k} \right\}} \Gamma^{I_1}(dx, dy).
 \end{aligned}$$

Mit majorisierter Konvergenz und

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{2k^{3/4}}{\sqrt{1+(k-\sqrt{k})^2}} = \lim_{k \rightarrow \infty} k^{-1/4} = 0$$

folgt schließlich

$$1 \geq \lim_{k \rightarrow \infty} Q(\xi_k, R(\xi_k)) \geq \Gamma^{I_1}(\mathbb{R}^2) = 1$$

und damit wie angestrebt die Verletzung von (4.7). □

Ehe wir den Teil über Konvergenzraten des Metropolis-Hastings Algorithmus abschließen, möchten wir anhand dieses Beispiels unter Beweis stellen, welche heuristische Kraft Satz 4.5 entfalten kann. Abbildung 4.3 läßt schon erahnen, daß die Konturmännigfaltigkeit $C_{\pi(x)}$ für größer werdendes $|x|$ immer mehr in die Koordinatenachsen degeneriert, und ausführlichere Rechnungen bestätigen dies. Können wir aufgrund dessen schon vermuten, daß wir für diese Zieldichte keine geometrische Ergodizität erreichen werden? Die Antwort lautet ja, und zwar vermöge (4.7) und der Tatsache, daß der RW-basierte Metropolis-Kern gleichmäßig straffe Zuwachsverteilungen besitzt, s. Satz 2.8. Diese Eigenschaft läßt sich nämlich wie folgt interpretieren: Die maximale Sprungreichweite der RW-basierten Metropolis-Kette ist durch ein $K > 0$ beschränkt. Läßt man nun $|x|$ z.B. entlang der Winkelhalbierenden des 1. Quadranten groß werden, entfernt man sich immer weiter von den Koordinatenachsen. Es ist dann plausibel, daß die Kette in Anbetracht ihrer begrenzten Sprungfähigkeit die Akzeptanzregion nicht mehr mit positiver Wahrscheinlichkeit erreichen kann.

In Beispiel 4.15 haben wir zwar $|x|$ entlang der Folge $((0, k))_{k \geq 1}$ betrachtet und nicht entlang der Folge $((k, k))_{k \geq 1}$, der Anschauung sollte das aber keinen Abbruch tun.

Teil II

Eine Anwendung des Metropolis-Hastings Algorithmus auf das Traveling-Salesman Problem

Kapitel 5

Das Traveling-Salesman Problem

Gegenstand des Traveling-Salesman Problem (TSP) ist, die kürzeste Rundreise durch eine gegebene Anzahl von Städten zu bestimmen, wobei die jeweiligen Entfernungen zwischen den Orten als bekannt vorausgesetzt werden. Die Anfänge des wissenschaftlichen Interesses am TSP finden sich im Jahre 1937, als es die günstigste Route für Schulbusse zu ermitteln galt. Heute anerkennt die Bedeutung des TSP z.B. in der Logistik i.a., im Transportwesen im besonderen, aber auch in der Produktionsablaufplanung von Unternehmen bei Reihenfertigung oder bei der Herstellung elektronischer Geräte, wenn z.B. der günstigste Weg zu bestimmen ist, den ein Puls laser bei der Bohrung tausender kleinster Löcher in eine Leiterplatte zurücklegen muß (s. [B/D], S. 386f.).

5.1 Formalismen

Um das Problem mathematisch handhaben zu können, bedarf es zunächst einiger formaler Vereinbarungen.

Definition 5.1 Ein *Optimierungsproblem* ist gegeben durch ein Paar (L, f) , bestehend aus dem Raum L aller Lösungen des Problems und einer *Kostenfunktion* $f : L \rightarrow \mathbb{R}$.

Für den Fall eines *Minimierungsproblems* ist $x_{opt} \in L$ eine *global-optimale Lösung* des Problems, falls

$$f(x_{opt}) \leq f(x) \quad \text{f.a. } x \in L,$$

und im Falle eines *Maximierungsproblems* ist $x_{opt} \in L$ eine *global-optimale Lösung*, falls

$$f(x_{opt}) \geq f(x) \quad \text{f.a. } x \in L$$

gilt. $f_{opt} = f(x_{opt})$ bezeichnet die *optimalen Kosten*, und L_{opt} ist die Menge der global-optimale Lösungen.

Wir betrachten im folgenden ein TSP, in dem es $n \geq 3$ Städte durch eine Rundreise zu verbinden gilt. Die als bekannt vorausgesetzten Entfernungen zwischen den einzelnen Städten werden in der sogenannten Entfernungsmatrix

$$D = (d_{ij})_{\substack{1 \leq i \leq n \\ 1 \leq j \leq n}}$$

festgehalten, mit

$$d_{ij} \hat{=} \text{Länge der Strecke von Stadt } i \text{ zu Stadt } j$$

für $i, j \in \{1, \dots, n\}$. Es sei darauf hingewiesen, daß D symmetrisch ist, falls der Hinweg von einer Stadt i zu einer Stadt j genauso lang ist wie der Rückweg.

Für $m \in \mathbb{N}$ bezeichne $Perm_{zykl}(m)$ die Menge aller *zyklischen Permutationen* auf $\{1, \dots, m\}$, also die Menge der Permutationen $p = (p(1), \dots, p(m))$ auf $\{1, \dots, m\}$, für die

$$p^l(k) \neq k, \quad l \in \{1, \dots, m-1\}, \quad \text{und} \quad p^m(k) = k$$

f.a. $k \in \{1, \dots, m\}$ gilt, wobei $p^l(k)$ für $l > 0$ den l -ten Nachfolger und für $l < 0$ den l -ten Vorgänger von k bezeichnet. Außerdem sei $p^0(k) = k$ und $p(k) = p^1(k)$.

Nun kann das TSP wie folgt beschrieben werden:

Definition 5.2 (*n*-Städte Traveling-Salesman Problem) Das *n*-Städte *Traveling-Salesman Problem* mit Entfernungsmatrix D ist ein Minimierungsproblem mit einem Paar (L, f) , wobei der Lösungsraum L durch

$$L = Perm_{zykl}(n)$$

und die Kostenfunktion f durch

$$f : L \rightarrow \mathbb{R}, \quad f(p) = \sum_{i=1}^n d_{i,p(i)}$$

gegeben sind.

Die Kosten einer Tour p bestehen also aus ihrer Gesamtlänge. Für den Lösungsraum gilt $|L| = (n - 1)!$, denn n Städte lassen sich auf $n!$ Arten permutieren. Aufgrund der Zyklizität liefern aber je n Permutationen dieselbe zyklische Permutation, so daß $\frac{n!}{n} = (n - 1)!$ verschiedene zyklische Permutationen existieren.

Bemerkung 5.3 Man beachte, daß bei dieser Definition des TSP die Touren *gerichtet* sind. Ist D symmetrisch, gilt dann insbesondere $|L_{opt}| \geq 2$.

Als nächstes benötigen wir einen „mathematischen Mechanismus“, der beschreibt, wie aus einer gegebenen Tour weitere generiert werden.

Definition 5.4 Sei ein Optimierungsproblem gegeben durch (L, f) mit einem endlichen Lösungsraum L . Eine Nachbarschaftsstruktur \mathcal{N} ist eine Abbildung

$$\mathcal{N} : L \rightarrow \mathcal{P}(L),$$

wobei \mathcal{P} die Potenzmenge bezeichne. Für $i \in L$ heißt

$$L_i = \mathcal{N}(i) \subseteq L$$

Nachbarschaft der Lösung i unter \mathcal{N} .

Beispiel 5.5 (2-Wechsel) Wir betrachten das Paar (L, f) für das TSP. Der 2-Wechsel \mathcal{N}_2 generiert für eine gegebene Lösung $p_i \in L$ eine Nachbarschaft, indem er je zwei verschiedene Kanten (=Strecken) nach einem bestimmten Schema vertauscht. Das Vorgehen beschreibt der folgende Algorithmus (s.a. Abbildung 5.1):

- gegeben eine Tour $p_i \in L$, wähle in dieser Tour zwei Städte $a, b \in \{1, \dots, n\}$ so, daß b nicht der direkte Nachfolger von a ist
- die erste Kante setzt an a an, die zweite Kante endet in b
- neuer Nachfolger von a wird der ursprüngliche Vorgänger von b , d.h. die erste Kante wird so verlegt, daß sie von a nach $p_i^{-1}(b)$ verläuft
- neuer Vorgänger von b wird der ursprüngliche Nachfolger von a , d.h. die zweite Kante wird so verlegt, daß sie von $p_i(a)$ nach b verläuft

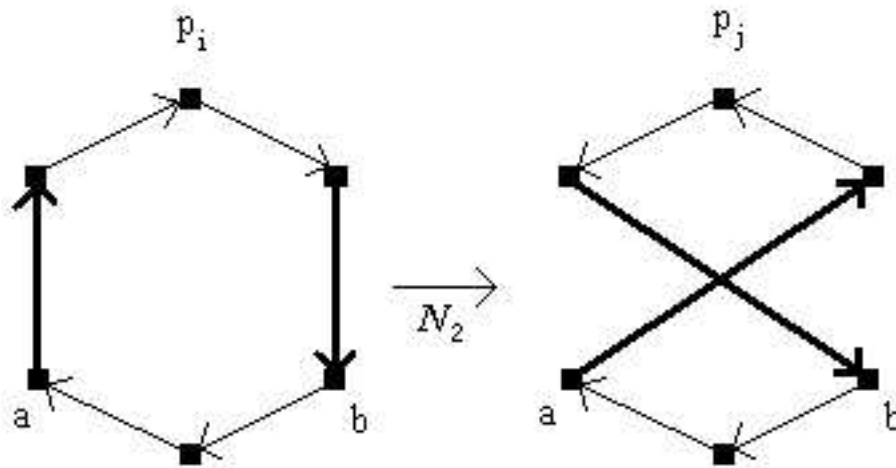


Abbildung 5.1: Der 2-Wechsel \mathcal{N}_2

- in der so erhaltenen neuen Tour p_j kehrt sich die Tourrichtung zwischen $p_j(a)$ und $p_j^{-1}(b)$ um, ansonsten bleibt sie erhalten

Seien $p_i \in L$, $a, b \in \{1, \dots, n\}$ mit $p_i(a) \neq b$ und $m(a, b) \in \{2, \dots, n-1\}$ derart, daß

$$p_i^{m(a,b)}(a) = b$$

erfüllt ist. Dann gilt für die Nachbarschaft L_i von p_i unter \mathcal{N}_2 :

$$L_i = \{p_j \in L \mid p_j \text{ erfüllt (1) - (4)}\},$$

mit

- (1) $p_j(a) = p_i^{-1}(b) = p_i^{m(a,b)-1}(a)$,
- (2) $p_j(p_i(a)) = b = p_i^{m(a,b)}(a)$,
- (3) $p_j(p_i^r(a)) = p_i^{r-1}(a)$ für $r \in \{2, \dots, m(a,b)-1\}$,
- (4) $p_j^r(a) = p_i^r(a)$ für $r \in \{m(a,b), \dots, n\}$.

Uns interessiert die Größe der Nachbarschaft L_i . L_i enthält alle Touren, die sich durch Vertauschen von *zwei verschiedenen* Kanten ergeben. $(n-1)$ Kanten verbinden n Städte zu einer Rundreise. Einfache Kombinatorik liefert dann $(n-1)(n-2)$ Möglichkeiten, diese zwei verschiedenen Kanten zu wählen. Also gilt

$$|L_i| = (n-1)(n-2) \quad \text{f.a. } p_i \in L.$$

Des Weiteren wird sich für spätere Irreduzibilitätsüberlegungen die Tatsache als wichtig erweisen, daß jede beliebige Tour $p_j \in L$ aus einer gegebenen Route $p_i \in L$ mit höchstens $n - 2$ 2-Wechseln generiert werden kann. Um das zu erreichen, geht man folgendermaßen vor:

Setze als erstes

$$a = \min\{\eta \in \{1, \dots, n - 2\} \mid p_i(\eta) \neq p_j(\eta)\},$$

d.h. in einem ersten Schritt betrachtet man die erste Kante, die in den Touren p_i und p_j verschieden ist. Man verlegt in der Tour p_i diese Kante nun so, daß sie mit der entsprechenden Kante in p_j übereinstimmt. Damit ist aber auch schon b determiniert, denn angenommen, die zu verlegende Kante verläuft in p_j von a nach c , so ist lt. Definition des 2-Wechsels $b = p_i(c)$. Mit a und b ist der 2-Wechsel festgelegt und überführt p_i in eine Tour p_{l_1} . In diesem ersten Schritt werden durch den 2-Wechsel also zwei Kanten so vertauscht, daß die erste Kante in Richtung der „Zieltour“ p_j verlegt wird.

Dieses Verfahren wird nun iterativ zunächst mit p_{l_1} statt p_i , dann mit p_{l_2} statt p_{l_1} usw. so lange fortgesetzt, bis p_i schließlich in p_j überführt worden ist.

Im ungünstigsten Fall müssen wir $n - 2$ Iterationen durchlaufen, denn dann haben wir $n - 1$ Kanten in die „richtige Richtung“ verlegt. Da eine Rundreise durch $n - 1$ Kanten determiniert ist, sind wir also nach spätestens $n - 2$ Schritten am Ziel.

Zusammenfassend läßt sich festhalten:

Es gibt ein $k \in \{0, \dots, n - 2\}$ und eine Folge $p_{l_0}, \dots, p_{l_k}, p_{l_\nu} \neq p_{l_{\nu+1}}$ für $\nu \in \{0, \dots, k - 1\}$, mit

$$p_{l_0} = p_i \quad \text{und} \quad p_{l_k} = p_j.$$

Dabei erhält man $p_{l_{\nu+1}}$ aus p_{l_ν} vermöge eines 2-Wechsels angewendet auf $a, b \in \{1, \dots, n\}$, wobei a und b gegeben sind durch

$$a = M(\nu) \quad \text{und} \quad b = p_{l_\nu}(p_{l_{\nu+1}}(M(\nu)))$$

mit

$$M(\nu) = \min\{\eta \in \{1, \dots, n - 2\} \mid p_{l_\nu}(\eta) \neq p_{l_{\nu+1}}(\eta)\}.$$

Bemerkung 5.6 Eine weitere Eigenschaft des 2-Wechsels ist die Symmetrie in der Nachbarschaft zweier verschiedener Touren, d.h

$$p_j \in L_i \Leftrightarrow p_i \in L_j. \tag{5.1}$$

5.2 Der Metropolis-Hastings Algorithmus als Optimalverfahren

Nun ist es an der Zeit, den Metropolis-Hastings Algorithmus ins Spiel zu bringen. Wieder sei das TSP durch (L, f) beschrieben, und wie gewohnt bezeichne $\pi_c : L \rightarrow [0, 1]$ die Zieldichte, hier definiert durch

$$\pi_c(p_i) = \frac{\exp\left(-\frac{f(p_i)}{c}\right)}{\sum_{p_j \in L} \exp\left(-\frac{f(p_j)}{c}\right)}, \quad (5.2)$$

wobei die Konstante $c > 0$ *Kontrollvariable* genannt wird.

Für eine Lösung $p_i \in L$ sei der Kandidaten-Kern $Q(p_i, \cdot)$ die Gleichverteilung auf der Nachbarschaft von p_i unter \mathcal{N}_2 , d.h.

$$q(p_i, p_j) = \frac{1}{(n-1)(n-2)} \mathbb{1}_{L_i}(p_j), \quad p_j \in L.$$

Die Akzeptanz-Wahrscheinlichkeit α_c ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \alpha_c(p_i, p_j) &= \min\left\{\frac{\pi_c(p_j)}{\pi_c(p_i)}, 1\right\} \\ &= \begin{cases} 1 & , \text{ falls } f(p_j) \leq f(p_i) \\ e^{\frac{1}{c}(f(p_i)-f(p_j))} & , \text{ falls } f(p_j) > f(p_i) \end{cases} \end{aligned}$$

für $p_i, p_j \in L$. Wir weisen darauf hin, daß sowohl π_c als auch α_c von der Kontrollvariablen c abhängen, Q aber unabhängig davon ist.

Lt. Kapitel 2 besitzt der Metropolis-Kern $P_c(p_i, \cdot)$ die Gestalt

$$P_c(p_i, \{p_j\}) = \frac{\alpha_c(p_i, p_j)}{(n-1)(n-2)} \mathbb{1}_{L_i - \{p_i\}}(p_j) + \left(1 - \sum_{\substack{p_j \in L \\ p_j \neq p_i}} \alpha_c(p_i, p_j) q(p_i, p_j)\right).$$

Gemäß Lemma 2.3 und Satz 2.4 ist π_c die stationäre Verteilung von P_c .

Außerdem dürfen wir die Aperiodizität von P_c voraussetzen. Ist nämlich $p_i \in L$, gilt

$$\begin{aligned} P_c(p_i, \{p_i\}) &= 1 - \sum_{\substack{p_j \in L \\ p_j \neq p_i}} \alpha_c(p_i, p_j) q(p_i, p_j) \\ &\geq 1 - \sum_{p_j \in L} \alpha_c(p_i, p_j) q(p_i, p_j) \\ &= \sum_{p_j \in L} (1 - \alpha_c(p_i, p_j)) q(p_i, p_j) \\ &= \sum_{\substack{p_j \in L_i \\ f(p_j) > f(p_i)}} \frac{1 - e^{\frac{1}{c}(f(p_i)-f(p_j))}}{(n-1)(n-2)}, \end{aligned}$$

also

$$P_c(p_i, \{p_i\}) = 0 \Rightarrow f(p_j) \leq f(p_i) \quad \text{f.a. } p_j \in L_i.$$

Angenommen, es gäbe ein $p_{j_0} \in L_i$ mit $f(p_{j_0}) < f(p_i)$, so wäre wegen $p_i \in L_{j_0}$ lt. (5.1)

$$\begin{aligned} P(p_{j_0}, \{p_{j_0}\}) &\geq \sum_{\substack{p_k \in L_{j_0} \\ f(p_k) > f(p_{j_0})}} \frac{1 - e^{\frac{1}{c}(f(p_{j_0}) - f(p_k))}}{(n-1)(n-2)} \\ &\geq \frac{1 - e^{\frac{1}{c}(f(p_{j_0}) - f(p_i))}}{(n-1)(n-2)} > 0, \end{aligned}$$

also P_c aperiodisch. Das bedeutet, P_c kann nur dann nicht aperiodisch sein, wenn f.a. $p_i \in L$ die Touren p_j in den jeweiligen Nachbarschaften L_i dieselben Kosten verursachen wie p_i selbst. Ruft man sich nun das oben vorgestellte Verfahren in Erinnerung, mittels dessen man aus einer gegebenen Tour jede andere Tour durch 2-Wechsel generieren kann, sieht man sofort ein, daß P_c nur dann nicht aperiodisch sein kann, falls *alle* Touren dieselben Kosten verursachen. Dieser Trivialfall soll im folgenden ausgeschlossen werden.

Wir werden nun zeigen, daß P_c positiv rekurrent ist. Da L endlich ist, genügt es, die Irreduzibilität von P_c nachzuweisen (s. Satz 10.7 in [Als2]). Dazu seien zunächst $p_i, p_j \in L$ mit $p_i \neq p_j$. Es gibt ein $k \in \{1, \dots, n-2\}$ und eine Folge $p_{l_0}, \dots, p_{l_k} \in L$ mit $p_{l_0} = p_i$, $p_{l_k} = p_j$ und $p_{l_\nu} \neq p_{l_{\nu+1}}$, $0 \leq \nu \leq k-1$, wobei man $p_{l_{\nu+1}}$ aus p_{l_ν} vermöge \mathcal{N}_2 gemäß dem oben vorgestellten Verfahren erhält. Dann ist

$$\begin{aligned} P_c^k(p_i, \{p_j\}) &\geq \prod_{\nu=0}^{k-1} P_c(p_{l_\nu}, \{p_{l_{\nu+1}}\}) \\ &\geq \frac{1}{(n-1)(n-2)} \prod_{\nu=0}^{k-1} \alpha_c(p_{l_\nu}, p_{l_{\nu+1}}) > 0. \end{aligned}$$

Für den Fall $p_i = p_j$ beachten wir, daß jede Nachbarschaft aus mindestens zwei verschiedenen Elementen besteht (da $n \geq 3$). Mit $p_k \in L_i$, $p_k \neq p_i$, und unter Beachtung von $p_i \in L_k$ lt. (5.1) erhält man

$$\begin{aligned} P_c^2(p_i, \{p_i\}) &\geq P_c(p_i, \{p_k\})P_c(p_k, \{p_i\}) \\ &\geq \frac{1}{(n-1)^2(n-2)^2} \min\{\alpha_c(p_i, p_j), \alpha_c(p_k, p_i)\} > 0. \end{aligned}$$

Also ist P_c irreduzibel und damit positiv rekurrent. Der Ergodensatz für aperiodische, positiv rekurrente Markov-Ketten (Satz 11.1 in [Als2]) liefert nun

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|P_c^k(p_i, \cdot) - \pi_c\| = 0, \quad p_i \in L. \quad (5.3)$$

Zusammen mit dieser Ergodizität liefert der folgende einfache, in der Aussage aber sehr bedeutende Satz, daß die Anwendung des Metropolis-Hastings Algorithmus auf dieses Problem „im Prinzip“ nicht nur eine Simulation, sondern asymptotisch sogar ein Optimalverfahren ist (im Gegensatz zu einem Optimalverfahren *garantiert* eine Simulation *nicht* das Auffinden einer optimalen Lösung, vgl. [B/D], Tab. 5.1, S. 111).

Satz 5.7 *Gegeben seien ein Optimierungsproblem durch das Paar (L, f) mit endlichem Lösungsraum $|L|$ und eine Nachbarschaftsstruktur \mathcal{N} . Ferner sei π_c definiert wie in (5.2). Dann gilt*

$$\lim_{c \downarrow 0} \pi_c(x) = \frac{1}{|L_{opt}|} \mathbb{1}_{L_{opt}}(x)$$

f.a. $x \in L$.

Beweis: Wir führen den Beweis oBdA für ein Minimierungsproblem. Wegen

$$\lim_{c \downarrow 0} \exp\left(\frac{a}{c}\right) = \begin{cases} 1, & a = 0 \\ 0, & a < 0 \end{cases}$$

folgt

$$\begin{aligned} \lim_{c \downarrow 0} \pi_c(x) &= \lim_{c \downarrow 0} \frac{\exp\left(-\frac{f(x)}{c}\right)}{\sum_{y \in L} \exp\left(-\frac{f(y)}{c}\right)} \\ &= \lim_{c \downarrow 0} \frac{\exp\left(\frac{f_{opt} - f(x)}{c}\right)}{\sum_{y \in L} \exp\left(\frac{f_{opt} - f(y)}{c}\right)} \\ &= \lim_{c \downarrow 0} \frac{1}{\sum_{y \in L} \exp\left(\frac{f_{opt} - f(y)}{c}\right)} \mathbb{1}_{L_{opt}}(x) \\ &\quad + \lim_{c \downarrow 0} \frac{\exp\left(\frac{f_{opt} - f(x)}{c}\right)}{\sum_{y \in L} \exp\left(\frac{f_{opt} - f(y)}{c}\right)} \mathbb{1}_{L - L_{opt}}(x) \\ &= \frac{1}{|L_{opt}|} \mathbb{1}_{L_{opt}}(x). \end{aligned}$$

□

In Verbindung mit (5.3) liefert dieses Ergebnis

$$\lim_{c \downarrow 0} \lim_{k \rightarrow \infty} P_c^k(x, L_{opt}) = \lim_{c \downarrow 0} \pi_c(L_{opt}) = 1, \quad x \in L.$$

Dies bedeutet nichts anderes, als daß die Metropolis-Kette nach „unendlich vielen“ Schritten mit Wahrscheinlichkeit 1 in der Menge der global-optimalen Lösungen landet.

Selbstverständlich macht es aus praktischer Sicht keinen Sinn, eine „unendlich lange“ Kette zu konstruieren. Einen Ausweg bietet das Prinzip des *Quasi-Gleichgewichts*. Dieses läßt eine geringe Abweichung der k -Schritt-Übergangskerne von der Zielverteilung π_c zu, d.h. wir geben uns ein $\varepsilon > 0$ vor und suchen nach einem $k \in \mathbb{N}$ mit

$$\|P_c^k(x, \cdot) - \pi_c\| < \varepsilon. \quad (5.4)$$

Wir haben nun zwar einen endlichen Zustandsraum zugrunde liegen und nicht den \mathbb{R}^k , aber die spezielle Gestalt von π_c in Verbindung mit den Ergebnissen über Konvergenzraten in Teil I dieser Arbeit lassen dennoch hoffen, daß dieses k verhältnismäßig klein und die Metropolis-Kette dementsprechend kurz ist.

Diese Hoffnung wird allerdings enttäuscht. Aarts und Korst haben gezeigt, daß dieses Verfahren i.a. wesentlich aufwendiger ist als die explizite Enumeration des gesamten Lösungsraumes L (genauer: $k = \mathcal{O}(n^{n^{2n-1}})$, wohingegen ja $|L| = (n-1)!$, s. [A/K], S. 52ff.). Als Optimalverfahren erweist sich der Metropolis-Hastings Algorithmus somit als völlig ungeeignet.

Demgegenüber läßt er sich für Zwecke der Simulation hervorragend einsetzen, wie wir am Beispiel des *Simulated Annealing* sehen werden.

5.3 Simulated Annealing

Die Aufgabe besteht darin, das TSP praktisch handhabbar zu machen, d.h. eine Simulation basierend auf dem Metropolis-Hastings Algorithmus zu entwickeln, die ein Ergebnis möglichst dicht an einer optimalen Lösung liefert. Das hier vorgestellte Verfahren wird als *Simulated Annealing* bezeichnet. Die Idee dabei ist, mit einer völlig willkürlich gewählten Tour zu beginnen und diese sukzessive nach einem noch genauer zu erläuternden Schema zu verkürzen. Die Simulation soll schließlich abbrechen, wenn bei diesem sukzessiven Vorschreiten nach einer bestimmten Anzahl mehrerer aufeinanderfolgender Schritte keine kostengünstigere Tour gefunden wird.

Das oben angesprochene „Schema“ ist ein sogenannter *Kühlplan*:

Ein Kühlplan spezifiziert

1. eine endliche, streng monoton fallende Folge $(c_j)_{0 \leq j \leq R}$ von Kontrollparametern, d.h.

- (a) einen Startwert c_0 des Kontrollparameters,
 - (b) eine streng monoton fallende Abbildung h , die die Antitonia der Folge (c_j) beschreibt, also jeweils den Wert $c_{j+1} = h(c_j)$ liefert,
 - (c) einen Endwert c_R des Kontrollparameters, wobei R durch ein Stopkriterium festgelegt wird,
2. eine endliche Anzahl k_j von Iterationen des Metropolis-Hastings Algorithmus für jeden Wert c_j , $0 \leq j \leq R$, des Kontrollparameters.

Ausgangspunkt für die Entwicklung eines Kühlplans für das TSP ist das Quasigleichgewicht (5.4) bei gegebenem $\varepsilon > 0$. Für möglichst jeden Wert c_j soll eine Metropolis-Kette der Länge k_j derart generiert werden, daß (5.4) erfüllt ist. Der Gedanke hinter der monoton fallenden Folge (c_j) ist, daß für einen sehr kleinen Endwert c_R der Wert X_{k_R} , den die zugehörige Metropolis-Kette nach der k_R -ten Iteration des Metropolis-Hastings Algorithmus annimmt, lt. Satz 5.7 mit „hoher“ Wahrscheinlichkeit in der Menge der global-optimalen Lösungen liegt, wenn die Kette lang genug ist. Das sukzessive Voranschreiten der Simulation wird durch Übergabe des Endwertes X_{k_j} der j -ten generierten Metropolis-Kette als Startwert an die $(j + 1)$ -te Kette erreicht. Bei der Wahl des Startwertes c_0 ist darauf zu achten, daß alle Touren am Ende der „0-ten“ Metropolis-Kette mit möglichst gleicher Wahrscheinlichkeit aufgesucht werden, um nicht schon von vornherein die Simulation in eine gewisse Richtung zu treiben. Dazu muß c_0 sehr groß gewählt werden. Die Begründung dafür liefern wir weiter unten.

Die Entwicklung geeigneter Kühlpläne für das TSP ist Gegenstand zahlreicher Arbeiten (vgl. hierzu [L/A], S. 59ff.). Um den Rahmen des Ganzen nicht zu sprengen, wird im folgenden ein sehr einfacher, auf Plausibilitätsargumenten beruhender Kühlplan vorgestellt, der in vielen Anwendungen seinen festen Platz gefunden hat (s. hierzu und für theoretischere Beispiele ebenfalls [L/A], S. 59ff. oder [A/K], S. 57ff.).

Kühlplan für das TSP

1. Die Folge der Kontrollparameter $(c_j)_{0 \leq j \leq R}$

(a) Der Startwert c_0

Nachdem eine „Starttour“ völlig willkürlich bestimmt worden ist, sollte c_0 so

gewählt werden, daß im ersten Schritt der Simulation in der Nachbarschaft der Starttour jede Tour mit gleicher Wahrscheinlichkeit aufgesucht wird, damit nicht schon zu Beginn bestimmte Lösungen diskriminiert werden. Es gilt

$$\lim_{c \rightarrow \infty} \pi_c(p_i) = \frac{1}{|L|} \mathbb{1}_L(p_i), \quad p_i \in L.$$

Mit anderen Worten: Für sehr große c bewertet π_c alle Touren mit der gleichen Wahrscheinlichkeit, also unabhängig von ihren Kosten. Wähle c_0 daher so groß, daß auch für die Akzeptanz-Wahrscheinlichkeit α_{c_0} die Kosten nahezu irrelevant sind, d.h. so, daß der Akzeptanz-Quotient $\chi_{c_0}(p_i)$, definiert durch

$$\chi_{c_0}(p_i) = \frac{\text{Anzahl akzeptierter Bewegungen}}{\text{Anzahl vorgeschlagener Bewegungen}} \Big|_{c_0},$$

für (fast) alle p_i nahe bei 1 liegt. Es soll z.B. $\chi_{c_0}(p_i) \geq 0,8$ gelten. In der Praxis wird u.a. vorgeschlagen, folgendermaßen vorzugehen: Man gibt sich einen bestimmten Wert für c_0 vor, etwa $c_0 = 100$, und generiert l -mal zwei Touren p_a und p_b , wobei l beispielsweise den Wert n habe. Danach wird überprüft, ob für dieses c_0 die vorgeschlagenen Bewegungen von p_a nach p_b hinreichend oft angenommen werden, also ob etwa

$$\frac{\text{Anzahl akzeptierter Bewegungen von } p_a \text{ nach } p_b}{l} \geq 0,8$$

gilt. Ist dies nicht der Fall, wird der Wert von c_0 verdoppelt und die Prozedur wiederholt.

(b) Die streng monoton fallende Funktion h

Bei Festlegung der Funktion h sieht man sich einem Zwiespalt gegenüber: Man weiß lt. Satz 5.7, daß die Metropolis-Kette mit umso höherer Wahrscheinlichkeit eine global-optimale Lösung liefert, je kleiner c_j ist. Also liegt es nahe, h so zu wählen, daß die Folge (c_j) schnell klein wird, um möglichst wenige Ketten generieren zu müssen. Andererseits wissen wir: Je größer der Abstand zwischen c_j und c_{j+1} ist, desto größer ist der Abstand zwischen π_{c_j} und $\pi_{c_{j+1}}$. Es ist plausibel, daß dann die $(j+1)$ -te Kette länger werden muß, um Quasi-Gleichgewicht herzustellen. Da die Kette eine bestimmte Länge nicht überschreiten soll (s. unter 2.), könnte es daher passieren, daß kein Gleichgewicht hergestellt würde und das Ergebnis der Simulation schließlich eine Lösung wäre, die weit von einer global-optimalen entfernt ist. Dieser Umstand spricht dafür, (c_j) langsam

klein werden zu lassen. Mit Verweis auf obige Quellen entscheidet man sich üblicherweise für diese Alternative. Wir definieren h durch

$$h(c_j) = c_{j+1} = \beta c_j$$

für ein festes $\beta \in [0.8, 0.99]$.

(c) *Der Endwert c_R*

Ein charakteristisches Merkmal einer Simulation ist, daß sie irgendwann anhält (im Gegensatz zu einigen Optimalverfahren, vgl. die Ausführungen oben zum Metropolis-Algorithmus als Optimalverfahren für das TSP). Also muß die Folge (c_j) und damit die Generierung von Metropolis-Ketten irgendwann abgebrochen werden. Wir legen fest, daß die Simulation abgebrochen werden soll, wenn sich der Wert der Kostenfunktion für die Tour, die das letzte Glied der entsprechenden Metropolis-Kette liefert, m -mal hintereinander nicht ändert. D.h. wir wählen R so, daß zum ersten Mal

$$f(p_{R-m+1}) = f(p_{R-m+2}) = \dots = f(p_R)$$

gilt, wobei p_ν die Tour ist, die X_{k_ν} liefert. Für den Endwert c_R gilt dann

$$c_R = \beta^R c_0.$$

2. Die Länge der Metropolis-Kette

Das einfachste wäre, eine feste Länge k_{fix} für alle zu erzeugenden Metropolis-Ketten festzulegen, also unabhängig vom jeweiligen Durchlauf. Ein anderer Ansatzpunkt ist das intuitive Argument, daß nach einer Mehrzahl akzeptierter Bewegungen das Quasi-Gleichgewicht (5.4) angenommen werden muß. Also soll die Kette abgebrochen werden, wenn mindestens η Bewegungen für ein $\eta \in \mathbb{N}$ akzeptiert wurden. Wegen

$$\lim_{c_j \downarrow 0} \alpha_{c_j}(p_i, p_k) = 0$$

für $p_i, p_k \in L$, $p_i \neq p_k$, würde die Kettenlänge k_j bei diesem Vorgehen irgendwann viel zu groß werden. Darum müssen wir für jede Generierung k_j durch eine Konstante K beschränken. Als Vorschläge für den Wert von K werden u.a. die Städteanzahl n genannt, oder auch ein Vielfaches der Größe der Nachbarschaften, also $K = \mu(n-1)(n-2)$ für ein $\mu \in \mathbb{N}$ (s. [L/A], S. 61).

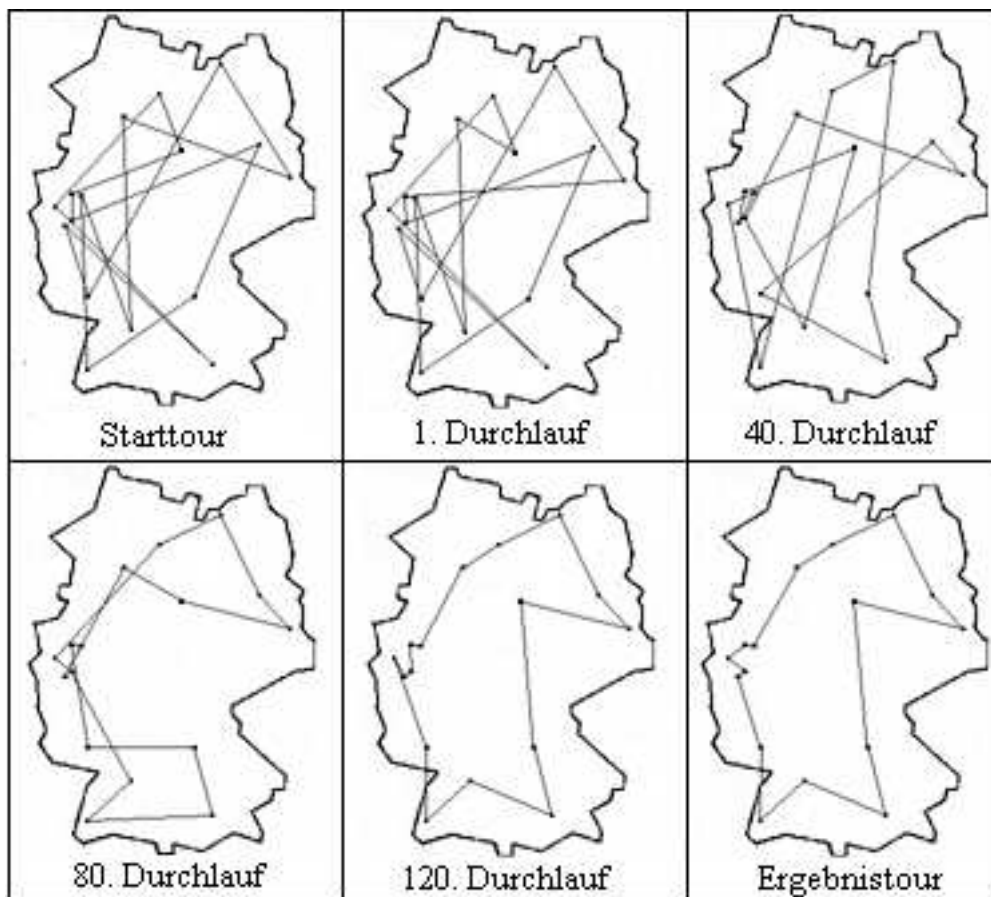


Abbildung 5.2: Simulation des „Bundesliga-Problems“

5.4 Das „Bundesliga-Problem“

Ein Beispiel soll die Funktionsweise einer solchen Simulation für das TSP veranschaulichen. Die Aufgabe besteht darin, die 16 Städte der Fußball-Bundesligaverein der Saison 2001/02, Stuttgart, Gelsenkirchen, Leverkusen, Bremen, Wolfsburg, München, Köln, Rostock, Hamburg, Mönchengladbach, Berlin, Freiburg, Dortmund, Nürnberg, Cottbus und Kaiserslautern, durch eine Rundreise zu verbinden. Die jeweiligen Entfernungen zwischen den Städten wurden der Internet-Seite „Falk.de“ entnommen.

Ein in *C++* verfaßter Programmcode, der gemäß obigem Kühlplan entwickelt wurde, findet sich im Anhang. Für β wurde der Wert 0,95, für η der Wert 3 gewählt, K wurde auf $(n - 1)(n - 2)$ festgelegt, und die Simulation bricht ab, wenn sich der Wert der Kostenfunktion in $2n$ aufeinanderfolgenden Durchläufen nicht mehr verändert.

Das Ergebnis der Anwendung dieses Programms auf die „Bundesliga-Aufgabe“ zeigt Abbildung 5.2: Die willkürlich gewählte Starttour ist ein Wirrwarr aus Verbindungen mit einer Gesamtlänge von 7050 km. Nach dem ersten Durchlauf erhält man eine mit 7051 km sogar noch längere Tour. Nach 40 bzw. 80 Durchläufen wird eine „Entwerrung“ immer deutlicher. Die Länge dieser Touren beträgt 5736 km bzw. 3784 km. Nach dem 120. Durchlauf ergibt sich eine Rundreise, die sich mit 3001 km von der Ergebnistour mit 2973 km kaum noch unterscheidet, die schließlich nach 165 Durchläufen errechnet worden ist. Mehrere Wiederholungen der Simulation bestätigen diese endgültige Streckenlänge. Zum Vergleich: Um mit Sicherheit eine optimale Lösung zu erhalten, hätten bei vollständiger Enumeration des gesamten Lösungsraumes $1,308 \cdot 10^{12}$ Lösungen miteinander verglichen werden müssen.

Teil III

Anhang

Anhang A

Ergänzungen

A.1 Ergänzungen zu Kapitel 3

A.1.1 Ergänzung zu Satz 3.6

Auf den ersten Blick mag es nicht offensichtlich sein, weshalb in der Induktion im Beweis zu Satz 3.6 der Satz des Pythagoras zum Tragen kommt, wenn man die Orthogonalität von

$$X_{i-1} + n(X_{i-1})(n(X_{i-1}) \cdot I_i) \text{ und } I_i - n(X_{i-1})(n(X_{i-1}) \cdot I_i)$$

nicht erkennt. Diese erhält man wie folgt:

Für ein $a > 0$ und $z \in \mathbb{R}^k$ soll

$$a n(X_{i-1}) + z = I_i \tag{A.1}$$

gelten, und $n(X_{i-1})$ und z seien orthogonal, d.h. $n(X_{i-1}) \cdot z = 0$. Nach skalarer Multiplikation mit $n(X_{i-1})$ auf beiden Seiten von (A.1) erhält man

$$a = n(X_{i-1}) \cdot I_i$$

und damit, daß $z = I_i - n(X_{i-1})(n(X_{i-1}) \cdot I_i)$ und $n(X_{i-1})$, also auch

$$X_{i-1} + n(X_{i-1})(n(X_{i-1}) \cdot I_i) \text{ und } I_i - n(X_{i-1})(n(X_{i-1}) \cdot I_i)$$

orthogonal sind.

A.2 Ergänzungen zu Kapitel 5

A.2.1 C++ - Code für die „Bundesliga-Aufgabe“

Es folgt der Programm-Code für das Traveling-Salesman Problem:

```
#include<stdio.h>
#include<stdlib.h>
#include<time.h>
#include<math.h>

#define n 16

int Kosten(int D[n][n], int pi[n]);
double calculate_c0(int D[n][n]);

void main(void)
{
    const int K=(n-1)*(n-2);
    const double Beta=0.95;
    double c, diff, zufall;
    int D[n][n]={0},pi[n]={0},pj[n]={0},dummy[n]={0};
    int a, b, i=0, j=0, k=0, l=0, test=0;
    int akzept, chainlen, zahler=0, counter=0, m;
    char f;

    randomize();

    /*****
    *
    * Erstellen der Entfernungsmatrix *
    *
    *****/

    for (i=0; i<n; i++) D[i][i]=0;
    printf("Simuliere TSP für %d Städte.\n\n",n);
    printf("Ist das TSP in diesem Fall ein ? \n");
    printf("symmetrisches Problem (j/n) ? ");
    scanf("%1s",&f);
    printf("\nBitte geben Sie die Entfernung ein von ... \n");
    if (c == 'f')
    {
        for(i=0; i<n; i++)
        {
            for (j=0; j<n; j++)
            {
                if (i != j)
                {
```

```
        printf("... Stadt %d nach Stadt %d: ",i,j);
        scanf("%d",&D[i][j]);
    }
}
printf("\n");
}
else
{ for (i=0; i<n-1; i++)
  {
    for (j=i+1; j<n; j++)
    {
      printf("... Stadt %d nach Stadt %d: ",i,j);
      scanf("%d",&D[i][j]);
      D[j][i]=D[i][j];
    }
    printf("\n");
  }
}

for (i=0; i<n; i++)
{
  for (j=0; j<n; j++) printf("%5d",D[i][j]);
  printf("\n");
}
printf("\n");

/*****
*
* Generiere c_0 *
*
*****/

c=calculate_c0(D);

/*****
*
* Generiere Startlösung *
*
*****/

randomize();
pi[0]=random(n);
for (i=1; i<n; i++)
{
  do
  {
    l=random(n);
```

```
        test=1;
        for (j=0; j<i; j++) if (pi[j] == 1) test=0;
    }
    while (test == 0);
    pi[i]=1;
}

printf("\nKosten der Startlösung: %7d\n",Kosten(D,pi));

/*****
*
* Der Simulated-Annealing Algorithmus *
*
*****/

do
{
    akzept=0; chainlen=0;
    do
    {
        /*****
        *
        * Generiere Kanten *
        *
        *****/

        test=0; chainlen++;
        do
        {
            test=1;
            a=random(n); b=random(n);
            if (b-a == 1 || a-b == n-1) test=0;
        }
        while (test == 0);

        /*****
        *
        * N2-Wechsel *
        *
        *****/

        if (a <= b-2)
        {
            for (k=0; k<=a; k++) pj[k]=pi[k];
            for (k=b; k<=n-1; k++) pj[k]=pi[k];
            pj[a+1]=pi[b-1]; pj[b-1]=pi[a+1];
            if (a < b-2) for (k=1; k<=b-a-3; k++) pj[a+1+k]=pi[b-1-k];
        }
    }
}
```

```
if (b <= a)
{
  for (k=0; k<=n-a+b-2; k++)
    if (k > b-1) pj[(a+1+k)%n]=pi[n+b-1-k];
    else pj[(a+1+k)%n]=pi[b-1-k];
  for (k=b; k<=a; k++) pj[k]=pi[k];
}

/*****
*
* Der Metropolis-Algorithmus *
*
*****/

diff=Kosten(D,pi)-Kosten(D,pj);
zufall=random(10000)/10000.0;
if (diff > 0)
{
  ++akzept;
  for (k=0; k<n; k++) dummy[k]=pj[k];
}
else if (exp(diff/c)>zufall)
{
  ++akzept;
  for (k=0; k<n; k++) dummy[k]=pj[k];
}
}
while (akzept <= 3 && chainlen <= K);

if (Kosten(D,dummy)==Kosten(D,pi)) ++counter;
else counter=0;
if (zahler % 40 == 0)
{
  printf("%3d. Durchlauf:",zahler);
  for (k=0; k<n; k++)
  {
    printf("%3d",dummy[k]);
    printf("Costs:%5d\n",Kosten(D,dummy));
  }
}
for (k=0; k<n; k++) pi[k]=dummy[k];
c=Beta*c;
zahler++;
}
while (counter < 2*n);
printf("Kosten der Ergebnistour: %6d\n",Kosten(D,pi));
printf("In %d Schritten.\n\n",zahler);
```



```
}

double calculate_c0 (int D[n][n])
{
    int pa[n]={0},pb[n]={0};
    int test=0,k,l,h=0,i,j,v;
    double c=100.0,costdiff=0,alph=0,x=0, z=0;

    randomize();
    do
    {
        z=0; x=0; c*=2;
        for (h=1; h<=n; h++)
        {
            pa[0]=random(n);
            pb[0]=random(n);
            for (i=1; i<n; i++)
            {
                do
                {
                    l=random(n);
                    k=random(n);
                    test=1;
                    for (j=0; j<i; j++) if (pa[j]==l || pb[j]==k) test=0;
                }
                while (test == 0);
                pa[i]=l; pb[i]=k;
            }
            alph=random(10000)/10000.0;
            costdiff=Kosten(D,pa) - Kosten(D,pb);
            if (costdiff >= 0) ++z;
            else if (exp(costdiff/c) > alph) ++z;
            x=z/n;
        }
    }
    while (x < 0.8);
    return c;
}

int Kosten (int D[n][n],int pi[n])
{
    int sum=0,i=0;

    for (i=0; i<n-1; i++) sum+=D[pi[i]][pi[i+1]];
    sum+=D[pi[n-1]][pi[0]];
    return sum;
}
```

Anhang B

Begriffe der Differentialgeometrie

B.1 Untermannigfaltigkeiten und Gramsche Determinante

Definition B.1 Eine Teilmenge $M \subseteq \mathbb{R}^k$ heißt *m-dimensionale Untermannigfaltigkeit der Klasse \mathcal{C}^α* , $\alpha \geq 1$, wenn es zu jedem Punkt $a \in M$ eine offene Umgebung $W \subseteq \mathbb{R}^k$ und α -mal stetig differenzierbare Funktionen

$$f_1, \dots, f_{k-m} : W \rightarrow \mathbb{R}$$

gibt, so daß

- (i) $M \cap W = \{x \in W \mid f_1(x) = \dots = f_{k-m}(x) = 0\}$,
- (ii) $\text{Rang } \frac{\partial(f_1, \dots, f_{k-m})}{\partial(x_1, \dots, x_k)}(a) = k - m$.

Dabei bezeichnet

$$\frac{\partial(f_1, \dots, f_{k-m})}{\partial(x_1, \dots, x_k)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_k} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_{k-m}}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_{k-m}}{\partial x_k} \end{pmatrix}.$$

Bedingung (ii) läßt sich auch so formulieren:

Die Gradienten $\nabla f_1, \dots, \nabla f_{k-m}$ sind im Punkt a linear unabhängig.

Untermannigfaltigkeiten der Klasse \mathcal{C}^1 nennt man auch einfach *Untermannigfaltigkeiten*.

Beispiel B.2 (Hyperflächen) Die $(k-1)$ -dimensionalen Untermannigfaltigkeiten des \mathbb{R}^k bezeichnet man als *Hyperflächen*. Sie werden lokal definiert als Nullstellengebilde einer Funktion mit nicht verschwindendem Gradienten. Ein Beispiel ist die Konturmannigfaltigkeit $C_{\pi(x)}$, falls $|x|$ hinreichend groß ist. Mit $f(y) = \pi(y) - \pi(x)$ gilt nämlich

$$C_{\pi(x)} = \{y \in \mathbb{R}^k \mid f(y) = 0\},$$

und $\nabla f(y) = \nabla \pi(y) \neq 0$ f.a. $y \in C_{\pi(x)}$ wie im Beweis zu Satz 4.5 gesehen.

Definition B.3 Sei $U \subseteq \mathbb{R}^m$ offen. Eine stetig differenzierbare Abbildung $\Phi : U \rightarrow \mathbb{R}^k$ heißt *Immersion*, falls

$$\text{Rang } D\Phi(t) = m \quad \text{f.a. } t \in U.$$

Definition B.4 Sei $M \subseteq \mathbb{R}^k$ eine m -dimensionale Untermannigfaltigkeit der Klasse \mathcal{C}^α . Ferner sei $V \subseteq M$ relativ M offen und $U \subseteq \mathbb{R}^m$ sei offen. Eine Immersion $\Phi : U \rightarrow \mathbb{R}^k$ heißt *Karte von M* , falls sie U homöomorph auf V abbildet.

Definition B.5 (Gramsche Determinante) Sei $M \subseteq \mathbb{R}^k$ eine m -dimensionale Untermannigfaltigkeit und

$$\Phi : U \rightarrow V \quad (U \subseteq \mathbb{R}^m, V \subseteq M \text{ offene Teilmengen})$$

eine Karte von M . Die Matrix

$$G = (g_{ij})_{\substack{1 \leq i \leq m \\ 1 \leq j \leq m}}$$

mit $g_{ij} : U \rightarrow \mathbb{R}$,

$$g_{ij}(t) = \frac{\partial \Phi(t)}{\partial t_i} \cdot \frac{\partial \Phi(t)}{\partial t_j} = \sum_{\nu=1}^k \frac{\partial \Phi_\nu(t)}{\partial t_i} \frac{\partial \Phi_\nu(t)}{\partial t_j},$$

$1 \leq i, j \leq m$, heißt *Maßtensor*. Die Determinante

$$g = \det G$$

heißt *Gramsche Determinante* von M bezüglich der Karte $\Phi : U \rightarrow V$.

Satz B.6 Sei $\Phi : U \rightarrow V \subseteq M$ eine Karte für die m -dimensionale Untermannigfaltigkeit $M \subseteq \mathbb{R}^k$ und g die zugehörige Gramsche Determinante. Dann gilt:

$$g = \sum_{i_1 < \dots < i_m} \left(\det \frac{\partial(\Phi_{i_1}, \dots, \Phi_{i_m})}{\partial(t_1, \dots, t_m)} \right)^2.$$

Insbesondere ist g stets positiv.

Beweis: Zum Beweis s. [For3], Korollar 2, S. 137. □

B.2 Volumen von Untermannigfaltigkeiten

Um das Volumen einer Teilmenge einer Untermannigfaltigkeit zu berechnen, bedarf es zunächst der Definition des Integrals über Untermannigfaltigkeiten. Dazu sei M wieder eine m -dimensionale Untermannigfaltigkeit und $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ eine Funktion. Aus Gründen der Zweckmäßigkeit wollen wir das Integral nicht in seiner allgemeinsten Form definieren, sondern voraussetzen, daß es eine Karte

$$\Phi : U \rightarrow V \subseteq M \quad (U \subseteq \mathbb{R}^m \text{ offen})$$

von M gibt, so daß $f|_{M-V} = 0$ gilt (für eine ausführlichere Auseinandersetzung mit der Definition des Integrals s. [For3], S. 138ff.).

Definition B.7 Es sei g die Gramsche Determinante bezüglich Φ . Dann heißt f *integrierbar über M* , falls die Funktion

$$t \rightarrow f(\Phi(t)) \sqrt{g(t)}$$

über U integrierbar ist, und man setzt

$$\int_M f(x) S(dx) = \int_U f(\Phi(t)) \sqrt{g(t)} \mathfrak{K}^m(dt).$$

Man nennt $S(dx)$ das *m -dimensionale Flächenelement*.

Man kann zeigen, daß diese Definition von der Wahl der Karte unabhängig ist (s. hierzu ebenfalls [For3], S. 138).

Nun steht der Definition des Volumens von Untermannigfaltigkeiten nichts mehr im Wege:

Definition B.8 Gegeben eine Teilmenge $A \subseteq M$, heißt A *integrierbare Teilmenge von M* , falls $\mathbb{1}_A$ über M integrierbar ist, und man setzt

$$\text{Vol}_m(A) = \int_M \mathbb{1}_A(x) S(dx).$$

$\text{Vol}_m(A)$ heißt *m -dimensionales Volumen* oder *m -dimensionaler Flächeninhalt* von A . Eine Funktion $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ heißt *über A integrierbar*, falls $f\mathbb{1}_A$ über M integrierbar ist, und man definiert

$$\int_A f(x) S(dx) = \int_M f(x)\mathbb{1}_A(x) S(dx).$$

Damit läßt sich also auch schreiben:

$$\text{Vol}_m(A) = \int_A dS.$$

Literaturverzeichnis

- [A/K] Aarts, E., Korst, J., 1989. Simulated Annealing and Boltzman Machines. *Wiley*.
- [Als1] Alsmeyer, G., 1998. Wahrscheinlichkeitstheorie. *Skripten zur Math. Statistik 30, Universität Münster*.
- [Als2] Alsmeyer, G., 2000. Stochastische Prozesse, Teil 1. *Skripten zur Math. Statistik 33, Universität Münster*.
- [B/D] Berens, W., Delfmann, W., 1995. Quantitative Planung (2. Auflage). *Schäfer-Poeschel, Stuttgart*.
- [B/L] Bonomi, E., Lutton, J.-L., 1984. The N-City Traveling Salesman Problem: Statistical Mechanics and the Metropolis algorithm. *SIAM Review* 26, 551-568.
- [C/G] Chip, S., Greenberg, E., 1995. Understanding the Metropolis-Hastings algorithm. *The American Statistician* 49, 327-335.
- [For2] Forster, O., 1984. Analysis 2: Differentialrechnung im \mathbb{R}^n , Gewöhnliche Differentialgleichungen (5. Auflage). *Vieweg*.
- [For3] Forster, O., 1984. Analysis 3: Integralrechnung im \mathbb{R}^n mit Anwendungen (3. Auflage). *Vieweg*.
- [H/H] Hammersley, J., Handscomb, D., 1964. Monte Carlo Methods. *Methuen., London*.
- [Has] Hastings, W., 1970. Monte Carlo Sampling methods using Markov chains and their applications. *Biometrika* 57, 97-109.

- [J/H] Jarner, S., Hansen, E., 2000. Geometric ergodicity of Metropolis algorithms. *Stochastic Processes and their Applications* 85, 341-361.
- [L/A] Laarhoven, P. van, Aarts, E., 1987. Simulated Annealing: Theory and Applications. *Kluwer Academic Publishers*.
- [Lin] Lin, S., 1965. Computer solutions of the traveling salesman problem. *Bell System Technical Journal* 44, 2245-2269.
- [M/T] Meyn, S., Tweedie, R., 1993. Markov Chains and Stochastic Stability. *Springer, London*.
- [Men] Mengersen, K., Tweedie, R., 1996. Rates of convergence of the Hastings and Metropolis algorithms. *Annals of Statist.* 24, 101-121.
- [Met] Metropolis et al., 1953. Equation of state calculations by fast computing machines. *Journal of Chem. Phys.* 21, 1087-1091.
- [R/T] Roberts, G., Tweedie, R., 1996. Geometric convergence and central limit theorems for multidimensional Hastings and Metropolis algorithms. *Biometrika* 83, 95-110.
- [Tie] Tierney, L., 1994. Markov chains for exploring posterior distributions. *Annals of Statist.* 22, 1701-1762.

Hiermit versichere ich, daß ich die vorliegende Diplomarbeit selbständig verfaßt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe. Alle Stellen der Arbeit, die anderen Werken dem Wortlaut oder Sinn nach entnommen wurden, habe ich in jedem Fall unter Angabe der Quelle als Entlehnung kenntlich gemacht.

Ort, Datum

Unterschrift