

# Wang-Landau Algorithmus

Benjamin Cabrera

Geboren am 09. April 1991 in Dreieich

22. Juli 2016

Bachelorarbeit Mathematik

Betreuer: Prof. Andreas Eberle

INSTITUTE FOR APPLIED MATHEMATICS

MATHEMATISCH-NATURWISSENSCHAFTLICHE FAKULTÄT DER  
RHEINISCHEN FRIEDRICH-WILHELMS-UNIVERSITÄT BONN



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einführung und Motivation</b>	<b>3</b>
1.1	Aufbau der Arbeit . . . . .	3
1.2	Problemstellung . . . . .	3
1.3	MCMC Verfahren . . . . .	4
1.3.1	Metropolis-Hastings-Algorithmus . . . . .	5
1.3.2	Probleme mit Hastings . . . . .	6
1.4	Importance Sampling und Adaptive Verfahren . . . . .	7
1.4.1	Importance Sampling bezüglich der Zustandsdichte . . . . .	7
1.4.2	Adaptive Verfahren . . . . .	7
<b>2</b>	<b>Der Wang-Landau Algorithmus</b>	<b>9</b>
2.1	Notation und gewünschtes Verhalten . . . . .	9
2.2	Idee und deterministische Variante des Algorithmus . . . . .	10
2.3	Variante mit Flat-Histogramm Kriterium . . . . .	10
2.4	Wahl der Updatefunktion . . . . .	11
<b>3</b>	<b>Erkenntnisse über den Wang-Landau Algorithmus</b>	<b>12</b>
3.1	Aussagen von Interesse . . . . .	12
3.2	Ergodizität für den WL-Algorithmus ohne (FH)-Kriterium . . . . .	13
3.2.1	Annahmen . . . . .	13
3.2.2	Zu beweisende Aussagen . . . . .	14
3.2.3	Fast sichere Konvergenz der Gewichte (Beweis von Theorem 3.2.1) . . . . .	15
3.2.4	Existenz einer Lyapunov-Funktion . . . . .	21
3.2.5	Beweis von Theorem 3.2.2 . . . . .	25
3.3	Das „Flat-Histogramm“-Kriterium wird in endlicher Zeit erreicht . . . . .	29
3.3.1	Vorbereitung und Annahmen . . . . .	30
3.3.2	Konvergenz der Häufigkeiten für $d=2$ . . . . .	31
3.3.3	Verallgemeinerung für $d$ größer als 2 . . . . .	37
<b>4</b>	<b>Anwendung auf Optimierungsprobleme und Ausblick</b>	<b>40</b>
4.1	Optimierungsprobleme und gleichmäßiges Generieren von Stichproben . . . . .	40
4.2	Weiterführende Ideen und FPRAS . . . . .	41
4.3	Anwendung auf das Rucksackproblem . . . . .	42
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>45</b>



# 1 Einführung und Motivation

## 1.1 Aufbau der Arbeit

Diese Arbeit beschäftigt sich mit dem Wang-Landau Algorithmus, einem adaptiven *Markov chain Monte Carlo (MCMC)-Verfahren* zum Generieren von Stichproben multimodaler Verteilungen. Im ersten Teil der Arbeit führen wir in die Problemstellung und die Notation ein. Im zweiten Teil definieren wir dann formal den Wang-Landau Algorithmus in zwei verschiedenen Varianten. Im dritten Teil der Arbeit beweisen wir Konvergenzeigenschaften des Algorithmus und im letzten Teil geben wir noch Anregungen, wie sich der Algorithmus neben physikalischen Problemen auch auf (diskrete) Optimierungsprobleme anwenden lässt und welche Erkenntnisse sich daraus schließen lassen.

## 1.2 Problemstellung

In vielen praktischen Anwendungen der Wahrscheinlichkeitstheorie müssen früher oder später Wahrscheinlichkeiten oder Erwartungswerte über komplexen Verteilungen bestimmt werden. Besonders bei hochdimensionalen Verteilungen stößt man schnell an die Grenzen analytischer Berechenbarkeit.

**Beispiel 1.2.1** (Einfaches Ising-Modell). *Sei*

$$(\Omega, \mathcal{P}(\Omega), \mathbb{P}_\beta)$$

ein Wahrscheinlichkeitsraum mit  $\Omega = \{0, 1\}^N$  für ein  $N \in \mathbb{N}$ . Ein  $x \in \Omega$  heiße "Konfiguration" des Modells. Sei zudem eine Energiefunktion  $H : \Omega \rightarrow [\Gamma_{\min}, \Gamma_{\max}]$  gegeben und sei

$$p_\beta(x) = \frac{1}{C_\beta} e^{-\beta H(x)}, x \in \Omega$$

die Massenfunktion von  $\mathbb{P}_\beta$  mit dem Normierungsfaktor  $C_\beta = \sum_{x \in \Omega} e^{-\beta H(x)}$ .<sup>1</sup> Sei nun  $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  eine Größe, die von der Konfiguration abhängt. Interessant sein könnten z.B. der Zustand eines einzelnen Spins  $x_i$

$$f(x) = f((x_1, \dots, x_N)) := x_i$$

oder schlicht die Energie der Konfiguration

$$f(x) = f((x_1, \dots, x_N)) := H(x)$$

Um nun den Erwartungswert

$$\mathbb{E}(f) = \int_{\Omega} f(x) d\mathbb{P}_\beta(x) = \int_{\Omega} f(x) p(x) dx$$

zu bestimmen, muss man offensichtlich in  $N$  Dimensionen integrieren. Für große  $N$  wird dies analytisch geradezu unmöglich.

---

<sup>1</sup> $\beta$  ist hierbei meist die inverse Temperatur des Systems multipliziert mit der Boltzmann-Konstante.

Stattdessen haben sich, so genannte *Monte-Carlo-Verfahren* als praktikable Möglichkeit erwiesen. Dabei generiert man unabhängige Stichproben der Verteilung, wertet die zu ermittelnde Größe für diese aus und bestimmt dann durch Bildung des Mittelwerts einen Approximationwert. Nach dem starken Gesetz der großen Zahlen sollte sich dieser, bei genügend vielen Iterationen, fast sicher dem wahren Wert annähern.

**Definition 1.2.2.** Sei  $\mu : \mathcal{A} \rightarrow [0, 1]$  ein Wahrscheinlichkeitsmaß auf  $(\Omega, \mathcal{A})$  und sei eine Folge  $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$  von unabhängig, identisch verteilten Stichproben gegeben, so dass für alle  $i \in \mathbb{N}$  gilt  $X_i \sim \mu$ . Sei  $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  eine messbare, integrierbare Funktion. Dann nennen wir

$$\langle f \rangle_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i)$$

einen **Monte-Carlo-Schätzer** für  $\mathbb{E}_\mu[f(x)]$ .

Die Kunst liegt nun im „geschickten“ Generieren der Stichproben.

### 1.3 MCMC Verfahren

Wir führen zunächst einige Begriffe und Notationen für Markov-Ketten ein.

**Definition 1.3.1.** Sei  $(S, \mathcal{S})$  ein Messraum. Eine Abbildung  $P : S \times \mathcal{S} \rightarrow [0, 1]$  heißt **stochastischer Kern**, oder im Folgenden **Übergangskern**, falls gilt:

1. Für jedes  $x \in S$  ist  $P(x, \cdot)$  ein Wahrscheinlichkeitsmaß
2. Für jedes  $A \in \mathcal{S}$  ist  $P(\cdot, A)$   $\mathcal{S}$ -messbar

Mit einem kleinen „Missbrauch“ der Notation schreiben wir auch  $P(x, y)$  für  $P(x, \{y\})$  bzw.  $P(x, dy)$  für den Fall, dass das Maß  $P(x, \cdot)$  absolut stetig bezüglich einem Referenzmaß ist.

**Definition 1.3.2.** Sei  $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$  ein Wahrscheinlichkeitsraum und  $(S, \mathcal{S})$  ein Messraum. Eine zeitdiskrete Folge von Zufallsvariable  $(X_i : \Omega \rightarrow S)_{i \in \mathbb{N}}$  heißt (**zeitlich-**)**homogene Markov-Kette (MK)** wenn sie für alle  $i \in \mathbb{N}$  die **Markov-Eigenschaft**

$$\forall A \in \mathcal{S} : \mathbb{P}[X_{i+1} \in A | X_i, X_{i-1}, \dots, X_1] = P(X_i, A)$$

erfüllt. Dabei ist  $P$  ein stochastischer Kern auf  $(S, \mathcal{S})$ .

Eine Markov-Kette ist also ein Prozess, bei dem der Folgezustand jeweils nur vom direkten Vorgänger abhängt und nicht von den anderen vorherigen.

**Definition 1.3.3.** Sei  $(X_i)_{i \in \mathbb{N}}$  eine Markov-Kette auf  $(S, \mathcal{S})$  mit Übergangskern  $P$ . Dann ist ein **Gleichgewicht** bzw. eine **stationäre Verteilung** ein Wahrscheinlichkeitsmaß  $Q$  auf  $(S, \mathcal{S})$  mit

$$\forall A \in \mathcal{S} : \int_S P(x, A) Q(dx) = Q(A)$$

Ein gutes Kriterium für die Existenz einer stationären Verteilung ist die Detailed-Balance-Bedingung.

**Satz 1.3.4** (ohne Beweis). Sei  $P$  der Übergangskern einer Markov-Kette. Falls  $\pi : S \rightarrow [0, 1]$  die **Detailed-Balance-Bedingung**

$$\pi(x)p(x, y) = \pi(y)p(y, x) \quad \text{für alle } x, y \in S$$

erfüllt, ist  $\pi$  die Dichte/Massenfunktion einer stationären Verteilung der Markov-Kette.

**Bemerkung:** Die Eindeutigkeit der stationären Verteilung wird durch die Detailed-Balance-Bedingung nicht gewährleistet.

**Bemerkung:** In den Folgenden Kapitel werden wir nur noch von Dichten sprechen, auch wenn es sich eigentlich um Massenfunktionen auf einem diskreten Zustandsraum handelt. Die Beweise verlaufen dann analog.

Eine Möglichkeit die Stichproben zu generieren ist nun die Konstruktion einer Markov-Kette, welche die gewünschte Verteilung  $\pi$  als stationäre Verteilung hat. Iterieren wir die konstruierte Markov-Kette dann einige Schritte (die so genannte *burn-in-time*) können wir danach davon ausgehen, dass die Stichproben der zukünftigen Iterationen unabhängig vom Startwert und nach  $\pi$  verteilt sind. Die Konstruktion einer solche Kette ist verhältnismäßig leicht.

### 1.3.1 Metropolis-Hastings-Algorithmus

Eines der bekanntesten MCMC-Verfahren ist der Metropolis-Hastings-Algorithmus. Hierbei generieren wir jeweils einen Vorschlag für den Folgezustand bezüglich eines *Vorschlagskerns*  $Q$  und akzeptieren diesen dann mit einer Wahrscheinlichkeit  $A$ , so dass sich gerade  $\pi$  als stationäre Verteilung ergibt.

---

#### Algorithm 1 Metropolis-Hastings-Algorithmus

---

- 1: Wähle Startzustand  $X_0 \in \mathcal{X}$
  - 2: **while** Abbruchkriterium nicht erreicht **do**
  - 3:     Wähle Folgezustand  $Y$  bzgl.  $Q(X_t, \cdot)$
  - 4:     Akzeptiere  $X_{t+1} = Y$  mit Wahrscheinlichkeit  $A(X_t, Y)$ , ansonsten setze  $X_{t+1} = X_t$
  - 5: **end while**
- 

Als Abbruchkriterium wird üblicherweise eine Anzahl von Stichproben gewählt. Zudem verwendet man, wie oben schon erwähnt, meist nur die  $(X_i)$  nach der *burn-in-time*, also mit  $i > b$  für ein festes  $b$ . Eine geeignete Wahl von  $A$  lässt sich aus der Detailed-Balance-Bedingung herleiten. Wir zerlegen den Übergangskern in Vorschlags- und Akzeptierungsschritt

$$P(x, y) = Q(x, y)A(x, y).$$

Dann ergibt sich aus der Detailed-Balance-Bedingung mit der Dichte der gewünschten stationären Verteilung  $\pi$

$$\begin{aligned} \pi(x)P(x, y) = \pi(y)P(y, x) &\Leftrightarrow \frac{P(x, y)}{P(y, x)} = \frac{\pi(y)}{\pi(x)} \Leftrightarrow \frac{Q(x, y)A(x, y)}{Q(y, x)A(y, x)} = \frac{\pi(y)}{\pi(x)} \\ &\Leftrightarrow \frac{A(x, y)}{A(y, x)} = \frac{\pi(y)Q(y, x)}{\pi(x)Q(x, y)}. \end{aligned}$$

Somit bietet sich  $A(x, y) := \min \left\{ 1, \frac{\pi(y)Q(y, x)}{\pi(x)Q(x, y)} \right\}$  als Wahl an. Es ergibt sich folgende

**Definition 1.3.5** (Metropolis-Hastings-Kern). Sei  $(\Omega, \mathcal{P}(\Omega), \mathbb{P}_\beta)$  ein Wahrscheinlichkeitsraum und  $\pi$  die Dichte einer Zielverteilung, so dass deren Wert an jeder Stelle berechnet werden kann. Sei außerdem  $Q$  ein Vorschlagskern, dann ist der **Metropolis-Hastings-Kern (MH)**  $P$  definiert durch

$$\forall x, y \in \Omega \quad P(x, y) := Q(x, y)A(x, y) + \delta_x(y)(1 - r(x)),$$

wobei  $A := \min \left\{ 1, \frac{\pi(y)Q(y, x)}{\pi(x)Q(x, y)} \right\}$ ,  $\delta$  das Dirac-Delta ist, und der normierende Summand  $r(x)$  definiert ist durch:

$$r(x) := \int_{\Omega} A(x, y)Q(x, y)dy.$$

### 1.3.2 Probleme mit Hastings

Obwohl sich mit dem Metropolis-Hastings-Algorithmus prinzipiell die meisten Verteilungen (insbesondere auch auf stetigen Zustandsräumen) simulieren lassen, eignet er sich in vielen Fällen nicht besonders gut um die Stichproben für ein Monte-Carlo-Verfahren zu generieren. Betrachtet man das Ising-Modell aus Beispiel 1.2.1, fällt auf, dass die Verteilungsfunktion für niedrige Temperaturen im Wesentlichen *bimodal* ist. Es gibt zwei (meta-)stabile Phasen.

**Definition 1.3.6.** *Eine Verteilung*

- heißt **unimodal**, wenn ihre Dichte/Massenfunktion nur ein Maximum hat
- heißt **bimodal**, wenn ihre Dichte/Massenfunktion zwei Maxima hat
- heißt **multimodal**, wenn ihre Dichte/Massenfunktion mehr als zwei, bzw. viele Maxima hat

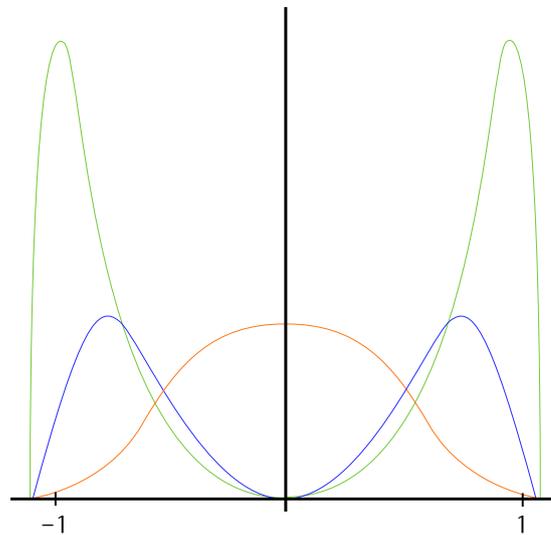


Abbildung 1.1: Skizze. Bimodale Verteilungen beim Ising-Modell. Die Verläufe mit zwei sehr deutlichen Extrema entsprechen niedrigen Temperaturen im Modell. Mit Steigerung der Temperatur wird das System eher chaotisch/zufällig und es gibt nur noch ein Extremum.

Für die Markov-Kette mit (MH)-Übergangskern bedeutet das, dass die Folge  $(X_n)_n$  sich nach einiger Zeit wahrscheinlich in einem der Zustände mit maximaler Wahrscheinlichkeit befindet und nur mit sehr geringer Wahrscheinlichkeit noch einmal das andere Maximum erreicht. Damit ein Monte-Carlo-Schätzer eine gute Approximation liefert, sollten aber möglichst alle relevanten Zustände einmal besucht werden. Kann das Generieren der Stichproben dies nicht garantieren, z.B. weil die (MH)-Markov-Kette in einzelnen Zuständen „hängen bleibt“, hat der Schätzer eine hohe Varianz und es müssen sehr viele Iterationen erzeugt werden, damit man ein brauchbares Ergebnis erhält.

Beim Simulieren des Ising-Modells wird dieses Problems besonders deutlich. Da die Wahrscheinlichkeit einer Konfiguration exponentiell von ihrer Energie abhängt, wird es somit auch exponentiell unwahrscheinlicher, von einer stabilen Konfiguration (also einer mit hoher Wahrscheinlichkeit) in eine andere zu wechseln (Phasenübergang).

## 1.4 Importance Sampling und Adaptive Verfahren

### 1.4.1 Importance Sampling bezüglich der Zustandsdichte

Eine Möglichkeit die Probleme zu lösen ist das *Multicanonical Sampling*. Wir wollen das Verfahren anhand des Beispiels 1.2.1 demonstrieren.

Die Idee ist hierbei eine Art *Importance Sampling* durchzuführen, so dass die Wahrscheinlichkeit einen Zustand zu generieren gerade dem Inversen seiner Wahrscheinlichkeit im Bildmaß entsprechen. Das bedeutet für unser Beispiel, dass die Stichproben bezüglich der Dichte/Massenfunktion

$$p(x) = \frac{1}{\rho(H(x))}$$

verteilt sein sollen. Dabei ist die *Zustandsdichte*  $\rho$  gegeben durch  $\rho(\gamma) := \mathbb{P} \circ H^{-1}(\gamma)$ . Dann wird offensichtlich jedes Energieniveau mit gleicher Wahrscheinlichkeit besucht.

Theoretisch scheint es also leicht, gleichmäßig zu simulieren, falls wir die Zustandsdichte, also die Masse auf den einzelnen Energieniveaus kennen. Allerdings setzt gerade das ein hohes Verständnis für das zugrundeliegende Problem voraus. Die Zustandsdichte enthält nämlich eigentlich schon sehr viele Informationen für das zugrundeliegende Problem und soll in einigen Anwendungen gerade bestimmt werden. Im Ising-Modell beispielsweise hängt die Zustandsdichte offensichtlich von der gewählten Temperaturkonstante  $\beta$  ab. Somit müsste für jedes  $\beta$  eine neue Schätzung für die Zustandsdichte gemacht werden. Zwar kann man für einige Anwendungen die Zustandsdichte durch Erfahrungen und Experimente ungefähr schätzen, dies unterliegt aber großen Schwankungen und ist auf Dauer eine unbefriedigende Lösung. Stattdessen hätten wir gerne ein Verfahren das sich von selber anpasst.

### 1.4.2 Adaptive Verfahren

Um genannte Probleme zu lösen geht man zu sogenannten *adaptiven (MCMC-)Verfahren* über. Dabei passt man den Übergangskern in jedem Schritt ein wenig an, so dass der Zustandsraum gleichmäßiger durchlaufen wird. Dabei „lernt“ die MK im Laufe der Zeit bessere Parameter und verbessert somit ihre Eigenschaften. Andererseits ist der entstehende Prozess  $(X_n)_n$  dann meist keine Markov-Kette mehr, weil die Parameteranpassungen indirekt vom gesamten vorherigen Verlauf abhängen. Neben dem Wang-Landau-Algorithmus, den wir im nächsten Kapitel kennen lernen werden, gibt es eine Vielzahl von adaptiven Verfahren. Einige werden im Folgenden angerissen.

#### Parallel Tempering

Beim *Parallel Tempering* startet man mehrere Markov-Ketten mit unterschiedlichen Temperaturen  $T_1 < \dots < T_M$ . Die Ketten bei hohen Temperaturen überspringen viel wahrscheinlicher größere Energie-Hindernisse (laufen eher den ganzen Zustandsraum ab), wohingegen die Ketten mit niedriger Temperatur eher in lokalen Energieminima „hängen“ bleiben. Beim Parallel Tempering lässt man die Ketten deshalb mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit untereinander Konfigurationen austauschen, so dass z.B. auch Ketten mit niedriger Temperatur von Zeit zu Zeit zu ganz anderen Zuständen gelangen. Für eine genauere Beschreibung siehe [7, Kapitel 1].

#### Equi-Energy-Sampler

Beim Generieren von Stichproben mittels des *Equi-Energy-Samplers* wird der Energieraum in einzelne Levels  $H_0 < \dots < H_{K+1} = \infty$  aufgeteilt. Mit jedem Level wird ebenfalls

eine zugehörige Temperatur assoziiert:  $1 = T_0 < \dots < T_K$ . Dann setzen wir  $h_i(x) = \frac{1}{T_i}(H(x) \vee H_i)$  und erzeugen dann für jedes Level eine eigene Markov-Kette bezüglich der stationären Verteilung  $\pi_i(x) \propto e^{-h_i(x)}$ . Unter bestimmten Voraussetzungen lassen wir dann, wie beim Parallel Tempering, Sprünge zwischen benachbarten Ketten zu und erreichen somit ein gleichmäßigeres Durchlaufen des Zustandsraums. Der Algorithmus wird in [15, Kapitel 3] vorgestellt.

### **Simulated Annealing**

Beim *Simulated Annealing* startet man zuerst mit einer Markov-Kette mit hoher Temperatur und kühlt diese dann im Laufe der Zeit ab. So kann man zunächst noch sehr große Energiehürden überspringen und mit der Zeit immer weniger, bis sich der Prozess stabilisiert. Das Verfahren gilt als Grundlage für sehr viele andere adaptive Verfahren, bei denen eine „Temperatur“ im Laufe der Zeit abgesenkt wird, damit ein Algorithmus konvergiert.

## 2 Der Wang-Landau Algorithmus

Einen neuen Lösungsansatz für die oben genannten Probleme stellten Fugao Wang und David P. Landau 2001 in [18] vor. Das Verfahren ist seither als *Wang-Landau-Algorithmus* bekannt und wird in vielen praktischen Anwendungen, zumeist in der statistischen Physik erfolgreich eingesetzt. Allerdings basieren viele Erkenntnisse noch auf praktischen Erfahrungen und wurden noch nicht in der Theorie bewiesen.

### 2.1 Notation und gewünschtes Verhalten

Wir übernehmen im Wesentlichen die Notation aus [12]. Sei im Folgenden  $(\mathcal{X}, \mathcal{A}, \mu)$  immer ein Wahrscheinlichkeitsraum und  $\pi$  die Wahrscheinlichkeitsdichte, bezogen auf ein Referenzmaß  $\lambda$ , bezüglich derer wir die Stichproben generieren möchten. Aufgrund der Definition des Metropolis-Hastings-Kerns muss uns diese nur bis auf einen konstanten Faktor in jedem  $x \in \mathcal{X}$  bekannt sein. Zudem sei  $K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow [0, 1]$  eben jener Metropolis-Hastings-Kern mit stationärer Verteilung  $\pi$ . Außerdem sei eine disjunkte Zerlegung von  $\mathcal{X}$  in mehrere *Bereiche* (engl. *bins*)  $\mathcal{X}_1, \dots, \mathcal{X}_d$  gegeben, also

$$\mathcal{X} = \bigcup_{i=1}^d \mathcal{X}_i, \text{ disjunkt.}$$

Unser Ziel wird nun sein, unabhängige Stichproben bezüglich  $\pi$  zu generieren, so dass folgende Forderungen erfüllt sind:

1. Die Stichproben in jedem Bereich sind bezüglich der Einschränkung von  $\pi$  auf diesen Bereich verteilt

$$X_k \sim \pi|_{\mathcal{X}_i}, \quad \text{für alle } k \in \{j \mid X_j \in \mathcal{X}_i\} \quad (2.1)$$

2. Jeder Bereich  $\mathcal{X}_i$  wird auf lange Sicht mit einer vorher festgelegten *Trefferwahrscheinlichkeit*  $\Phi(i)$  besucht

$$\frac{1}{t} \sum_{n=1}^t \mathbf{1}_{\mathcal{X}_i}(X_n) \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{\mathbb{P}} \Phi(i) \quad , i = 1, \dots, d \quad (2.2)$$

**Bemerkung:** *Theoretisch können die gewünschten Trefferwahrscheinlichkeiten*

$$\Phi = (\Phi(1), \dots, \Phi(d))$$

*zwar beliebig aus  $(0, 1)^d$  gewählt werden, in der Praxis will man aber meist schlicht alle Bereiche gleich oft besuchen ( $\Phi(i) = \frac{1}{d} \forall i$ ).*

**Definition 2.1.1.** *Als **Zustandsdichte (DOS)**  $\Psi = (\Psi(1), \dots, \Psi(d))$  bezeichnen wir die tatsächliche Masse auf den einzelnen Bereichen, also*

$$\Psi(i) := \int_{\mathcal{X}_i} \pi(x) \lambda(dx)$$

**Bemerkung:** *Ist die Zustandsdichte bekannt, kann man das einfachere Multicanonical Sampling anwenden. Da die (DOS) aber bereits viele Informationen über das Problem enthält, ist sie meist unbekannt, oder soll sogar bestimmt werden.*

## 2.2 Idee und deterministische Variante des Algorithmus

Der Wang-Landau-Algorithmus basiert auf dem Verfahren des Multicanonical Sampling und der Idee, die einzelnen Bereiche abhängig von  $\Psi$  und  $\Phi$  unterschiedlich zu gewichten. Statt aber, wie beim Multicanonical Sampling, die Zustandsdichte schon als im voraus bekannt vorauszusetzen, führen wir einen *Gewichtsvektor*  $\theta_t = (\theta_t(1), \dots, \theta_t(d))$  ein, der in jedem Schritt aktualisiert wird. Er nähert sich dem Verhältnis  $(\Psi(1)/\Phi(1), \dots, \Psi(d)/\Phi(d))$  (bis auf eine multiplikative Konstante) und quantifiziert somit, wie stark die einzelnen Bereiche „bestraft“ bzw. „begünstigt“ werden sollen, damit auf lange Sicht jeder Bereich gemäß den gewünschten Trefferwahrscheinlichkeiten besucht wird. Für die *modifizierte Dichte*  $\pi_\theta$  gilt dann

$$\pi_\theta \propto \frac{\pi(x)}{\theta(I(x))},$$

wobei  $I : \mathcal{X} \rightarrow \{1, \dots, d\}$  eine Funktion ist, die einem  $x \in \mathcal{X}$  den Index des beinhaltenden Bereichs zuordnet:

$$I(x) = i \Leftrightarrow x \in \mathcal{X}_i.$$

Mit  $P_\theta$  bezeichnen wir den Metropolis-Hastings-Kern mit stationärer Verteilung  $\pi_\theta$ . Zuletzt benötigen wir noch eine fallende Folge  $(\gamma_t)_{t \in \mathbb{N}}$ . Die Folge entspricht einer, im Laufe der Zeit abnehmenden, *Temperatur* unseres Systems. Das „Abkühlen“ des Systems soll die Konvergenz des Algorithmus garantieren (den Beweis dafür führen wir im Kapitel 3.2). Eine übliche Wahl ist z.B.  $\gamma_t := t^{-\alpha}$  mit  $\alpha \in (0.5, 1)$ .

Nun betrachten wir die erste Variante des Algorithmus.

---

### Algorithm 2 Wang-Landau-Algorithmus mit deterministischer Temperaturabnahme

---

- 1: Initialisiere Gewichte  $\theta_0(i) \leftarrow \frac{1}{d}$ ,  $i = 1, \dots, d$
  - 2: Wähle beliebigen Startzustand  $X_0 \in \mathcal{X}$
  - 3: **for** t=1 to T **do**
  - 4: Wähle  $X_t \sim P_{\theta_{t-1}}(X_{t-1}, \cdot)$
  - 5:  $\theta_t(i) \leftarrow \text{Update}(\theta_{t-1}(i), X_t, \gamma_t)$ ,  $i \in [1 : d]$
  - 6: **end for**
- 

Der Algorithmus generiert als erstes, wie beim Metropolis-Hastings-Algorithmus, einen Folgezustand (durch Vorschlags- und Akzeptierungsschritt). Dies tut er allerdings bezüglich der modifizierten Dichte und berücksichtigt somit schon, wie oft die einzelnen Bereich bereits besucht wurden. Den zweiten Schritt bezeichnen wir als *Update* der Gewichte. Je nachdem welcher Bereich getroffen wurde, werden die Gewichte angepasst, z.B. so dass dieser Bereich in Zukunft weniger wahrscheinlich besucht wird. Auf die genaue Wahl des Updates gehen wir im Kapitel 2.4 ein.

## 2.3 Variante mit Flat-Histogramm Kriterium

In ihrem Paper [18] stellten Wang und Landau den Algorithmus allerdings in einer anderen Version vor, der Variante mit Flat-Histogramm Kriterium. Ihr liegt die Idee zugrunde, dass sich die Temperatur nur dann verringern soll, wenn wir uns bereits in guter Näherung zum gewünschten Verhalten befinden.

**Definition 2.3.1.** Sei  $N_t(i)$  die Anzahl der Treffer im Bereich  $\mathcal{X}_i$  zum Zeitpunkt  $t$ , also

$$N_t(i) := \sum_{k=1}^t \mathbf{1}_{\mathcal{X}_i}(X_k)$$

Für eine Schranke  $c$  ist dann das **Flat-Histogramm-Kriterium (FH)** erfüllt, falls

$$\max_{i \in \{1, \dots, d\}} \left| \frac{N_t(i)}{t} - \Phi(i) \right| < c$$

Anschaulich ist das (FH) erfüllt, wenn sich die tatsächlichen relativen Häufigkeiten, mit denen die Bereiche besucht werden, nur wenig von den gewünschten Trefferwahrscheinlichkeiten unterscheiden. Der Name folgt aus der Tatsache, dass häufig  $\Phi = \frac{1}{d}$  gewählt wird und das Histogramm von  $N_t$  dann hinreichend flach sein muss um das (FH)-Kriterium zu erfüllen. Der Algorithmus verändert sich dann folgendermaßen:

---

**Algorithm 3** Wang-Landau-Algorithmus mit Flat-Histogramm Kriterium

---

- 1: Initialisiere Gewichte  $\theta_0(i) \leftarrow \frac{1}{d}$ ,  $i = 1, \dots, d$
  - 2: Wähle beliebigen Startzustand  $X_0 \in \mathcal{X}$
  - 3: Initialisiere  $\kappa$ , die Anzahl, wie oft das (FH)-Kriterium schon erreicht wurden
  - 4: Initialisiere  $N_0(i) = 0$ ,  $i = 1, \dots, d$
  - 5: **for**  $t=1$  to  $T$  **do**
  - 6: Wähle  $X_t \sim P_{\theta_{t-1}}(X_{t-1}, \cdot)$
  - 7: Aktualisiere Zähler:  $N_t(i) \leftarrow N_{t-1}(i) + \mathbf{1}_{\mathcal{X}_i}(X_t)$ ,  $i = 1, \dots, d$
  - 8: **if** (FH) erfüllt **then**
  - 9:  $\kappa \leftarrow \kappa + 1$
  - 10: Zurücksetzen des Zählers:  $N_t(i) \leftarrow 0$ ,  $i = 1, \dots, d$
  - 11: **end if**
  - 12:  $\theta_t(i) \leftarrow \text{Update}(\theta_{t-1}(i), X_t, \gamma_\kappa)$ ,  $i = 1, \dots, d$
  - 13: **end for**
- 

Es soll noch einmal betont werden, dass die Temperaturabnahme, in dieser Variante des Algorithmus, davon abhängt, ob und wie oft das (FH)-Kriterium erreicht wird. Die Konvergenz des Algorithmus folgt deshalb nicht direkt aus der Konvergenz der deterministischen Version und wird separat in Kapitel 3.3 bewiesen.

## 2.4 Wahl der Updatefunktion

Obwohl die Grundidee des Algorithmus immer die gleiche bleibt, gibt es für die Wahl der Updatefunktion zahlreiche Ansätze. Dabei ist es für die Eigenschaften des Algorithmus nicht unerheblich welches Update gewählt wird. Wir werden daher in den Beweisen der nächsten Kapitel jeweils zunächst festlegen, welche Art von Updates wir benutzen.

**Bemerkung:** In manchen Varianten des Algorithmus werden statt  $\theta_n$  die logarithmierten Gewichte  $\log \theta_n$  gespeichert.<sup>1</sup>

---

<sup>1</sup>siehe z.B. Beschreibung des WL-Algorithmus in [12]

# 3 Erkenntnisse über den Wang-Landau Algorithmus

## 3.1 Aussagen von Interesse

Wie im vorherigen Kapitel bereits erwähnt, wurde der Wang-Landau Algorithmus für die Simulation von Ising-Modellen in der statistischen Physik erfunden. In der Praxis erweist sich der Algorithmus als sehr robust und auch anschaulich scheinen - zum Beispiel durch die abnehmende Adaptionsrate - viele Eigenschaften des Algorithmus gesichert. Es ist daher nicht verwunderlich, dass bisher nur wenige theoretische Erkenntnisse über den Algorithmus gewonnen wurden. Das breite Anwendungsspektrum, auch in anderen Gebieten der Mathematik (siehe Kapitel 4), motiviert allerdings auch die genauere theoretische Betrachtung des Algorithmus. Im folgenden Kapitel werden wir zunächst einige wichtige Fragestellungen vorschlagen und die Beweise zu zwei von ihnen präsentieren.

Folgende Fragestellungen erscheinen als wichtig.

1. Unter welchen Voraussetzungen konvergiert bzw. terminiert der Algorithmus?

- a) Wird das (FH)-Kriterium immer in endlicher Zeit erreicht?
- b) Ist  $(X_k)$  ergodisch und gilt ein Gesetz großer Zahlen?

$$\lim_n \mathbb{E}[f(X_n)] \stackrel{!}{=} \int f(x)\pi^*(x)\lambda(dx),$$
$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(X_k) \stackrel{!}{\xrightarrow{f.s.}} \int f(x)\pi^*(x)\lambda(dx).$$

- c) Erfüllt die tatsächlich erreichte Grenzverteilung die gestellten Anforderungen (2.1), (2.2)?
- d) Was sind die schwächsten Voraussetzungen unter denen der Algorithmus noch konvergiert?

2. Wie effizient ist der Algorithmus?

- a) Wie schnell nähert sich das Verhalten von  $(X_t)$  der stationären Verteilung  $\pi^*$  (*engl. mixing time*)?
- b) Eignet sich der Algorithmus tatsächlich besser um den gesamten Zustandsraum zu explorieren, oder bleibt er eher in lokalen Extrema hängen?

Zum Zeitpunkt der Abgabe der Arbeit sind dem Autor keine Arbeiten bekannt, die sich in einem allgemeinen Kontext mit den Aussagen unter 2. beschäftigen. Offensichtlich sind allerdings gerade diese Aussagen von Interesse, da in ihnen die verbesserten Eigenschaften des Algorithmus gegenüber anderen Verfahren formuliert sind. Z.b. in [9] wird aber für ein sehr einfaches Beispiel die Effizienz bewiesen.

In dieser Arbeit beschäftigen wir uns mit den Punkten unter 1. In Teil 3.2 des Kapitels geben wir im Wesentlichen den Beweis aus [9] für die Ergodizität von  $(X_k)$  wieder. Dabei benutzen wir aber auch Aussagen aus [5], [16] und [13]. In Teil 3.3 widmen wir uns dann der Konvergenz der Variante mit Flat-Histogram-Kriterium, indem wir den Beweis aus [12] nachvollziehen.

## 3.2 Ergodizität für den WL-Algorithmus ohne (FH)-Kriterium

In diesem Kapitel beweisen wir die fundamentale Eigenschaft, dass die vom Algorithmus generierte Folge  $(X_n)_{n \geq 0}$  ergodisch ist und das für sie ein Gesetz großer Zahlen gilt. Es ist wichtig anzumerken, dass gerade diese Eigenschaften erst die theoretische Grundlage für die Nutzung des Algorithmus als Importance Sampler schafft. Der folgende Beweis stammt im Wesentlichen aus [9, Kapitel 3]. Die Notation wurde der von [12] angepasst. Die zentralen Aussagen dieses Kapitels sind Theorem 3.2.2 und Korollar 3.2.3.

### 3.2.1 Annahmen

Wie bereits in Kapitel 2.4 erwähnt, gibt es viele Wahlmöglichkeiten für die Update-Funktion. Dieser Beweis bezieht sich auf Versionen des Algorithmus, bei der die Update-Funktion die Form

$$\theta_{n+1} = \theta_n + \gamma_{n+1} H(X_{n+1}, \theta_n)$$

hat, wobei  $H : \mathcal{X} \times \Theta \rightarrow [-1, 1]^d$  komponentenweise definiert ist durch

$$H_i(x, \theta) = \theta(i)(\mathbf{1}_{\mathcal{X}_i}(x) - \theta(I(x))). \quad (3.1)$$

Dass diese Wahl der Update-Funktion sinnvoll ist, wird deutlich, wenn man die zwei möglichen Fälle betrachtet. Für  $X_t \in \mathcal{X}_i$  ist die Indikatorfunktion Eins und sofern dann  $\theta(I(x)) < 1$  wird das Gewicht des getroffenen Bereichs erhöht. Falls  $X_t$  nicht in  $\mathcal{X}_i$  liegt, ist die Indikatorfunktion Null und das Gewicht des entsprechenden Bereichs wird verringert.

**Bemerkung:** Die Summe der Gewichte  $\theta_n$  ergibt immer 1, da induktiv gilt

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^d \theta_{n+1}(i) &= \sum_{i=1}^d \underbrace{\theta_n(i)}_{=1} + \gamma_n \sum_{i=1}^d H_i(X_{n+1}, \theta_n) = 1 + \gamma_n \sum_{i=1}^d H_i(x, \theta) \\ &= 1 + \gamma_n \left( \sum_{i=1, i \neq I(X_{n+1})}^d \theta(i)(\mathbf{1}_{\mathcal{X}_i}(x) - \theta(I(x))) + \theta(I(x))(\mathbf{1}_{\mathcal{X}_i}(x) - \theta(I(x))) \right) \\ &= 1 + \gamma_n \left( -\theta(I(X_{n+1})) \sum_{i=1, i \neq I(X_{n+1})}^d \theta(i) + \theta(I(X_{n+1}))(1 - \theta(X_{n+1})) \right) \\ &\stackrel{IV}{=} 1 + \gamma_n (-\theta(I(X_{n+1}))(1 - \theta(X_{n+1})) + \theta(I(X_{n+1}))(1 - \theta(X_{n+1}))) = 1 \end{aligned}$$

Die Gewichte sind außerdem positiv, weil nie mehr von einem Gewicht abgezogen wird als der aktuelle Wert. Somit gilt zu jedem Zeitpunkt  $\theta \in (0, 1)^d$ .

Für diese Updatefunktion gilt also

$$\forall n \in \mathbb{N} : \theta_n \in \Theta := \left\{ (\theta(1), \dots, \theta(d)) \mid 0 < \theta(i) < 1, i = 1, \dots, d \text{ und } \sum_{i=1}^d \theta(i) = 1 \right\} \quad (3.2)$$

Da die Gewichte normiert sind, lässt sich für diese Update-Funktion auch das Verhältnis von  $\pi$  zu  $\pi_\theta$  genau angeben. Es gilt

$$\pi_\theta = \left( \sum_{i=1}^d \frac{\Psi(i)}{\theta(i)} \right)^{-1} \sum_{i=1}^d \frac{\pi(x)}{\theta(i)} \mathbf{1}_{\mathcal{X}_i}(x) \quad (3.3)$$

Zudem werden wir für diesen Beweis der Einfachheit halber annehmen, dass es keine besondere Gewichtung der Bereiche geben soll, sondern das schlicht alle Bereich gleich oft besucht werden sollen. Setze also  $\Phi(i) = \frac{1}{d}$  für alle  $i \in [1 : d]$ . Außerdem werden wir noch folgende Annahmen treffen, auf die in den einzelnen Beweisschritten Bezug genommen wird.

**(A1\*)** Für die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\pi$  gilt

$$0 < \inf_{\mathcal{X}} \pi \leq \sup_{\mathcal{X}} \pi < \infty,$$

und alle Bereiche haben positives Maß:  $\inf_{i \in [1:d]} \Psi(i) > 0$ .

**(A2\*)** Der Vorschlagskern  $Q$  des MH-Kerns  $P_\theta$  ist symmetrisch und  $\inf_{\mathcal{X}^2} Q > 0$ .

**(A3\*)** Für  $\{\gamma_n, n \geq 1\}$  gilt

- a)  $\{\gamma_n, n \geq 1\}$  ist nicht wachsend und  $\lim_n \gamma_n = 0$
- b)  $\sum_n \gamma_n = \infty$
- c)  $\sum_n \gamma_n^2 < \infty$

**Bemerkung:** Die Bedingung (A3) wird zum Beispiel von  $\gamma_n = \frac{\gamma_n^*}{n^\alpha}$  erfüllt, mit  $1/2 < \alpha < 1$ .

### 3.2.2 Zu beweisende Aussagen

Der größte Teil des Kapitels wird sich mit dem Beweis der fast sicheren Konvergenz der Gewichte beschäftigen. Folgendes Theorem ist also zu beweisen.

**Theorem 3.2.1.** *Unter Voraussetzung der Annahmen (A1\*), (A2\*), (A3\*) gilt*

$$\mathbb{P} \left[ \lim_{n \rightarrow +\infty} \theta_n = \Psi(i) \right] = 1$$

Hieraus lassen sich schließlich die Ergodizität und somit ein Gesetz der großen Zahlen von  $(X_n)$  ableiten.

**Theorem 3.2.2.** *Unter den Voraussetzungen (A1\*), (A2\*), (A3\*) gilt für jede beschränkte messbare Funktion  $f$ ,*

$$\lim_n \mathbb{E}[f(X_n)] = \int f(x) \pi_\Psi(x) \lambda(dx), \quad (3.4)$$

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(X_k) \xrightarrow{f.s.} \int f(x) \pi_\Psi(x) \lambda(dx). \quad (3.5)$$

**Bemerkung:** Nach Definition von  $\pi_\theta$  (siehe (3.3)) gilt

$$\pi_\Psi = \left( \sum_{i=1}^d \frac{\Psi(i)}{\Psi(i)} \right)^{-1} \sum_{i=1}^d \frac{\pi(x)}{\Psi(i)} \mathbf{1}_{\mathcal{X}_i}(x) = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \frac{\pi(x)}{\Psi(i)} \mathbf{1}_{\mathcal{X}_i}(x).$$

Wie gewünscht entspricht  $\pi_\Psi$  also gerade der Verteilung bei der die einzelnen Bereiche mit dem Inversen ihrer Masse umgewichtet werden und somit alle Bereiche genau gleich oft besucht werden.

**Korollar 3.2.3.** *Unter den Annahmen (A1\*), (A2\*), (A3\*) gilt für jede beschränkte messbare Funktion  $f$ ,*

$$\lim_n d \cdot \mathbb{E} \left[ \sum_{i=1}^d \theta_n(i) f(X_n) \mathbf{1}_{\mathcal{X}}(X_n) \right] = \int_{\mathcal{X}} f(x) \pi(x) \lambda(dx) \quad (3.6)$$

$$\mathcal{I}_n(f) = d \sum_{i=1}^d \theta_n(i) \left( \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(X_k) \mathbf{1}_{\mathcal{X}_i}(X_k) \right) \xrightarrow{f.s.} \int_{\mathcal{X}} f(x) \pi(x) \lambda(dx) \quad (3.7)$$

**Bemerkung:** (3.7) stellt einen Monte-Carlo-Schätzer mit „Importance Sampling“ dar. Er hat eine verbesserte Varianz gegenüber dem einfachen Monte-Carlo-Schätzer aus Kapitel 1.

*Beweis von Korollar 3.2.3.* Wir beweisen zunächst (3.6). Wir zerlegen die linke Seite in zwei Summanden

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[ \sum_{i=1}^d \theta_n(i) f(X_n) \mathbf{1}_{\mathcal{X}_i}(X_n) \right] &= \mathbb{E} \left[ \sum_{i=1}^d (\theta_n(i) - \Psi(i)) f(X_n) \mathbf{1}_{\mathcal{X}_i}(X_n) \right] \\ &\quad + \sum_{i=1}^d \Psi(i) \mathbb{E} [f(X_n) \mathbf{1}_{\mathcal{X}_i}(X_n)]. \end{aligned}$$

Aus der fast sicheren Konvergenz der Gewichte (Theorem 3.2.1) und dominierter Konvergenz folgt, dass der erste Summand gegen Null konvergiert. Nach Theorem 3.2.2 gilt

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^d \Psi(i) \mathbb{E} [f(X_n) \mathbf{1}_{\mathcal{X}_i}(X_n)] &= \sum_{i=1}^d \Psi(i) \int_{\mathcal{X}_i} f \pi_{\Psi} d\lambda = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \Psi(i) \int_{\mathcal{X}_i} f \frac{\pi}{\Psi(i)} d\lambda \\ &= \frac{1}{d} \int_{\mathcal{X}} f \pi d\lambda. \end{aligned}$$

Nun beweisen wir (3.7). Ebenfalls zerlegen wir

$$\frac{n}{d} \mathcal{I}_n(f) = \sum_{i=1}^d (\theta_n(i) - \Psi(i)) \sum_{k=1}^n f(X_k) \mathbf{1}_{\mathcal{X}_i}(X_k) + \sum_{i=1}^d \Psi(i) \sum_{k=1}^n f(X_k) \mathbf{1}_{\mathcal{X}_i}(X_k).$$

Es gilt

$$\frac{1}{n} \left| \sum_{i=1}^d (\theta_n(i) - \Psi(i)) \sum_{k=1}^n f(X_k) \mathbf{1}_{\mathcal{X}_i}(X_k) \right| \leq \sup_{\mathcal{X}} |f| \sum_{i=1}^d |\theta_n(i) - \Psi(i)|,$$

und die rechte Seite konvergiert fast sicher gegen Null nach Theorem 3.2.1. Nach Theorem 3.2.2 gilt außerdem

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(X_k) \mathbf{1}_{\mathcal{X}_i}(X_k) \xrightarrow{f.s.} \int_{\mathcal{X}_i} f \pi_{\Psi} d\lambda = \frac{1}{d\Psi(i)} \int_{\mathcal{X}_i} f \pi d\lambda$$

Das beendet den Beweis. □

### 3.2.3 Fast sichere Konvergenz der Gewichte (Beweis von Theorem 3.2.1)

Wir beweisen zunächst folgendes Hilfslemma.

**Lemma 3.2.4.** *Es seien die Annahmen (A1\*) und (A2\*) erfüllt. Dann existiert ein  $\rho \in (0, 1)$ , so dass für alle  $\theta \in \Theta$ , für alle  $x \in \mathcal{X}$  und für alle  $A \in \mathcal{A}$  gilt:*

$$P_\theta(x, A) \geq \rho \int_A \pi_\theta(x) \lambda(dx) \quad (3.8)$$

und

$$\sup_{\theta \in \Theta} \sup_{x \in \mathcal{X}} \|P_\theta^n(x, \cdot) - \pi_\theta\|_{TV} \leq 2(1 - \rho)^n \quad (3.9)$$

**Bemerkung:** *Diese untere Abschätzung der Übergangswahrscheinlichkeit garantiert am Ende die Irreduzibilität der Markov-Kette.*

*Beweis.* Da  $Q$  symmetrisch ist, folgt:

$$\begin{aligned} P_\theta(x, A) &\geq \int_A Q(x, y) \left(1 \wedge \frac{\pi_\theta(y)Q(y, x)}{\pi_\theta(x)Q(x, y)}\right) \lambda(dy) = \int_A Q(x, y) \left(1 \wedge \frac{\pi_\theta(y)}{\pi_\theta(x)}\right) \lambda(dy) \\ &\geq \frac{\inf_{\mathcal{X}^2} Q}{\sup_{\mathcal{X}} \pi_\theta} \int_A \pi_\theta(y) \lambda(dy) \end{aligned}$$

Benutzen wir, dass  $\theta(i) > 0$  und  $\Psi(i) > 0$  gilt, so können wir  $\sup_{\mathcal{X}} \pi_\theta$  abschätzen

$$\sup_{\mathcal{X}} \pi_\theta = \left(\sum_{k=1}^d \frac{\Psi_k}{\theta(k)}\right)^{-1} \sup_{\mathcal{X}} \left(\sum_{i=1}^d \frac{\pi}{\theta(i)} \mathbf{1}_{\mathcal{X}_i}\right) \leq \sup_{\mathcal{X}} \sum_{i=1}^d \frac{\frac{\pi}{\theta(i)} \mathbf{1}_{\mathcal{X}_i}}{\frac{\Psi(i)}{\theta(i)}} \leq \frac{\sup_{\mathcal{X}} \pi}{\min_{i \in [1:d]} \Psi(i)}.$$

Zusammen mit  $\inf_{\mathcal{X}^2} Q > 0$  aus (A2\*) gilt somit (3.8), wobei

$$\rho := \frac{\inf_{\mathcal{X}^2} Q \times \min_{i \in [1:d]} \Psi(i)}{\sup_{\mathcal{X}} \pi}.$$

(3.9) folgt unter Anwendung von [16, Theorem 16.2.4]. □

Der Beweis von Theorem 3.2.1 basiert nun auf der Umformulierung des Updates zu einer *Stochastischen Approximation mit Markov'scher Dynamik* (engl. *stochastic approximation with markovian dynamics*) im Sinne von [5]. In [5] betrachten die Autoren Approximationen vom Typ

$$\theta_{n+1} = \theta_n + \gamma_{n+1} [h(\theta_n) + \xi_{n+1}],$$

wobei  $\xi_n$  ein stochastischer Störterm ist, und der Rest nicht vom Zufall abhängt. Formulieren wir analog die Update-Funktion um, erhalten wir

$$\theta_{n+1} = \theta_n + \gamma_{n+1} h(\theta_n) + \gamma_{n+1} \underbrace{(H(X_{n+1}, \theta_n) - h(\theta_n))}_{\xi_n},$$

wobei

$$h(\theta) = \int_{\mathcal{X}} H(x, \theta) \pi_\theta(x) \lambda(dx) \quad (3.10)$$

das nach  $\pi_\theta$  gemittelte Inkrement ist und somit nicht von  $(X_t)$  abhängt. Wir möchten nun das folgende Theorem anwenden, das in [5, Theorem 2.3] bewiesen wird. Dazu müssen wir allerdings zunächst die Existenz einer Lypunov-Funktion voraussetzen.

**(L\*)**  $\Theta$  ist eine offene Teilmenge von  $\mathbb{R}^d$ ,  $h : \Theta \rightarrow \mathbb{R}^d$  ist stetig und es existiert eine stetig differenzierbare Funktion  $V : \Theta \rightarrow [0, \infty)$ , so dass

a) Es existiert ein  $M_0 > 0$ , so dass

$$\mathcal{L} := \{\theta \in \Theta \mid \langle \nabla V(\theta), h(\theta) \rangle = 0\} \subset \{\theta \in \Theta \mid V(\theta) < M_0\}$$

- b) Es existiert ein  $M_1 \in (M_0, \infty]$ , so dass  $\{\theta \in \Theta \mid V(\theta) \leq M\}$  kompakt ist  
 c) Für alle  $\theta \in \Theta \setminus \mathcal{L}$  gilt, dass

$$\langle \nabla V(\theta), h(\theta) \rangle < 0 \quad (3.11)$$

- d) Das Innere vom Abschluss  $\overline{V(\mathcal{L})}$  ist die leere Menge (d.h. es gibt keine inneren Punkte)

**Theorem 3.2.5** (Theorem 2.3 aus [5]). *Angenommen es gelten die Voraussetzungen aus (L\*). Sei  $\mathcal{K}$  eine kompakte Teilmenge von  $\Theta$ , so dass  $\mathcal{L} \cap \mathcal{K} \neq \emptyset$ . Sei  $(\gamma_k)_{k \geq 1}$  eine monoton nicht steigende Folge positiver Zahlen, so dass  $\gamma_0 < \lambda_0$  ( $\lambda_0$  kommt aus einem vorherigen Theorem 2.2 aus [5], für uns bedeutet das einfach „klein genug“) und*

$$\sum_{k=1}^{\infty} \gamma_k = \infty \text{ und } \lim_{k \rightarrow \infty} \gamma_k = 0.$$

Sei  $(\xi_n)_{n \geq 1}$  eine Folge in  $\mathbb{R}^d$ , so dass

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} \sup_{l \geq k} \left| \sum_{i=k}^l \gamma_i \xi_i \right| = 0. \quad (3.12)$$

Außerdem sei  $\{\theta_k\} \subset \mathcal{K}$ . Dann gilt

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} d(\theta_k, \mathcal{L} \cap \mathcal{K}) = 0.$$

*Beweisidee.* Der Beweis basiert auf den Eigenschaften von Lyapunov-Funktionen und der Bedingung, dass der stochastische Störterm  $\xi_n$  mit der Zeit verschwindet (siehe (3.12)).

Lyapunov-Funktionen beschreiben das Feld  $\Theta$ , indem sie jedem Element eine Art „Potential“ zuordnen. Dabei hat der Wert nichts mit der tatsächlichen Energie eines Systems oder ähnlichem zu tun, vielmehr benutzen wir die Funktion nur als Hilfsmittel. Kann man nämlich zeigen, dass der Winkel des Inkrements  $h(\theta)$  zum Gradienten der Lyapunov-Funktion  $V(\theta)$  immer größer als 90 Grad ist, also in „nach innen ins Feld“ läuft (siehe (3.11)), folgt im Gegenzug, dass sich die Folge  $(\theta_n)_{n \geq 1}$  im Laufe der Zeit dem Attraktor  $\mathcal{L}$  der Lyapunov-Funktion nähert. Dazu muss allerdings auch gewährleistet sein, dass dieser im Inneren der kompakten Menge liegt ( $\mathcal{L} \cap \mathcal{K} \neq \emptyset$ ). Die obige Abbildung veranschaulicht den Zusammenhang.

Zusammen mit den Voraussetzungen an die Konvergenz des Störterms (siehe (3.12)) kann man die Konvergenz von  $(\theta_n)$  garantieren.  $\square$

Es gilt nun also die folgenden Voraussetzungen zu überprüfen:

1. Existenz einer kompakten Teilmenge  $\mathcal{K} \subset \Theta$  in der sich  $\theta_n$  (fast sicher) befindet
2. Existenz einer Lyapunov-Funktion (wie in (L\*))
3. Ist die Voraussetzung (3.12) erfüllt?

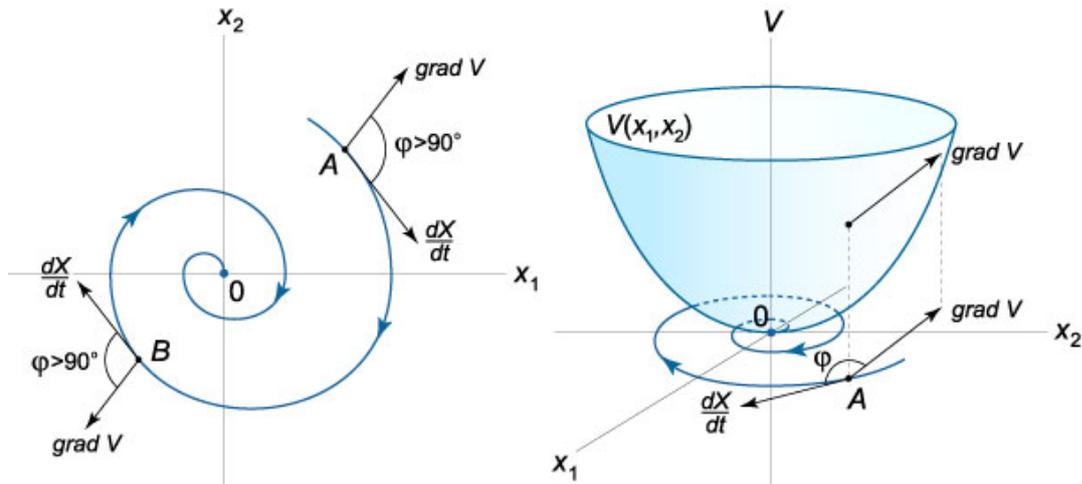


Abbildung 3.1: Veranschaulichung der Konvergenz mittels Lyapunov-Funktion (Quelle: [4]). In unserem Fall entspricht  $h(\theta)$  dem Inkrement, also dem  $\frac{dX}{dt}$  aus dem Bild.

**Existenz einer kompakten Teilmenge  $\theta_n \in \mathcal{K} \subset \Theta$**

In den Voraussetzungen von Theorem 3.2.5 wird die Existenz einer kompakten Teilmenge von  $\mathcal{K} \subset \Theta$  gefordert, so dass  $(\theta_n)_{n \geq 1} \in \mathcal{K}$ . Für die fast sichere Konvergenz von  $\theta_n$  reicht allerdings schon die etwas schwächere Bedingung, dass die Folge nur fast sicher in  $\mathcal{K}$  liegt (diese Bedingung wird in [9] stillschweigend angenommen). Die Existenz einer solchen Teilmenge ergibt sich aus folgendem

**Satz 3.2.6.** *Es seien die Voraussetzungen (A1\*), (A2\*) und (A3\*a) erfüllt. Dann gilt*

$$\mathbb{P} \left[ \limsup_{n \rightarrow \infty} \underline{\theta}_n > 0 \right] = 1.$$

wobei

$$\underline{\theta}_n := \min_{j \in [1:d]} \theta(j).$$

Wir können ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen, dass  $(\gamma_n)$  für alle  $n$  fallend ist, ansonsten beginne erst bei späterem  $n$ . Der Beweis basiert nun auf folgenden Überlegungen. Ein Gewicht  $\theta_n(i)$  kann nur gegen Null konvergieren, falls der zugehörige Bereich „unendlich viel weniger“ besucht wird, als die anderen. Wir versuchen deshalb im Folgenden zu zeigen, dass dieser Bereich mit kleinsten Gewicht oft genug besucht wird. Wir definieren dazu den Bereich bzw. Index des kleinsten Gewichts

$$\underline{I}_n := \min \{i | \theta_n(i) = \underline{\theta}_n\}.$$

Außerdem definieren wir Stoppzeiten  $T_k$  als Rückkehrzeiten zum Bereich mit kleinstem Gewicht.

$$T_0 = 0$$

$$T_k = \inf \{n > T_{k-1} | X_n \in \mathcal{X}_{\underline{I}_n}\}$$

Satz 3.2.6 folgt dann aus folgendem Lemma

**Lemma 3.2.7.** *Unter Annahmen (A1\*), (A2\*), (A3\*a) gilt*

$$\mathbb{P}[\forall k \in \mathbb{N}, T_k < +\infty] = 1 \quad (3.13)$$

$$\mathbb{P}\left[\limsup_{k \rightarrow \infty} \underline{\theta}_{T_k-1} > 0\right] = 1 \quad (3.14)$$

*Beweis.* Wir führen zunächst den Beweis für (3.13) per Induktion über  $k$ . Für  $k = 0$  gilt nach Definition  $\mathbb{P}[T_k < +\infty] = 1$ . Wir werden nun eine bestimmte Folge von Stichproben beschreiben, die für eine Erhöhung des Gewichts  $\theta_n(\underline{I}_{T_k})$  sorgt. Dann zeigen wir, dass die Folge mit positiver Wahrscheinlichkeit eintritt (siehe Lemma 3.2.8).

Betrachte  $(\theta_n)$  zu den Zeitpunkten  $n = T_k + md$ . Definiere zunächst eine Umordnung der Bereiche  $(\cdot)_m : [1 : d] \rightarrow [1 : d]$  so dass die Bereiche aufsteigend nach ihrem Gewicht geordnet sind:

$$\theta_{T_k+md}((1)_m) \leq \theta_{T_k+md}((2)_m) \leq \dots \leq \theta_{T_k+md}((d)_m)$$

Es gilt also insbesondere  $\theta_{T_k+md}((1)_m) = \underline{\theta}_{T_k+md}$ . Wir möchten jetzt nur die Bereiche  $(1)_m, \dots, (i_m)_m$  betrachten, deren Gewicht nah genug am kleinsten Gewicht aller Bereiche liegt. Genauer definieren wir

$$i_m := \max \left\{ i \in [1 : d] : \theta_{T_k+md}((i)_m) < \underline{\theta}_{T_k+md} \frac{1 + \gamma_1}{1 - \gamma_1} \right\}.$$

Betrachte nun genau die Folge von Stichproben, welche die Bereiche  $(i)_m$ ,  $i \leq i_m$  in absteigender Reihenfolge besucht.

$$A_m := \{X_{T_k+md+1} \in \mathcal{X}_{(i_m)_m}, X_{T_k+md+2} \in \mathcal{X}_{(i_m-1)_m}, \dots, X_{T_k+md+i_m} \in \mathcal{X}_{(1)_m}\}$$

Die folgenden Aussagen setzen voraus, dass  $A_m$  eintritt. Nach [9, S.21] werden alle Bereiche mit großem Gewicht  $j \geq i_m + 1$  nicht getroffen und somit auch nicht aktualisiert. Tatsächlich werden die Gewichte dieser Bereiche aber natürlich auch aktualisiert, nur werden die Bereiche  $(1)_m$  und  $(j)_m$  immer mit dem selben Faktor skaliert und somit bleibt das Verhältnis gleich. Deshalb gilt

$$\begin{aligned} \frac{\theta_{T_k+md+i_m-1}((j)_m)}{\theta_{T_k+md+i_m-1}((1)_m)} &= \frac{\theta_{T_k+md}((j)_m)}{\theta_{T_k+md}((1)_m)} \geq \frac{1 + \gamma_1}{1 - \gamma_1} \\ &> \frac{1 + \gamma_{T_k+md+i_m}(1 - \theta_{T_k+md+i_m-1}((1)_m))}{1 - \gamma_{T_k+md+i_m} \theta_{T_k+md+i_m-1}((1)_m)}, \end{aligned}$$

wobei wir die Definition von  $i_m$  und die Tatsache benutzt haben, dass  $(\gamma_n)$  nach (A3\*a) monoton fallend ist. Unter der Voraussetzung, dass  $A_m$  eintritt, gilt für  $j \in [2 : i_m]$ , weil alle Bereiche  $j \in [2 : i_m]$  genau einmal besucht wurden, dass

$$\frac{\theta_{T_k+md+i_m}((j)_m)}{\theta_{T_k+md+i_m}((1)_m)} = \frac{\theta_{T_k+md}((j)_m)}{\theta_{T_k+md}((1)_m)} \times \frac{1 + \frac{\gamma_{T_k+md+i_m+1-j}}{1 - \gamma_{T_k+md+i_m+1-j} \theta_{T_k+md+i_m-j}((j)_m)}}{1 + \frac{\gamma_{T_k+md+i_m}}{1 - \gamma_{T_k+md+i_m} \theta_{T_k+md+i_m-1}((1)_m)}},$$

Falls  $A_m$  eintritt ist der zweite Faktor auf der rechten Seite größer als 1, weil  $\gamma_{T_k+md+i_m} \leq \gamma_{T_k+md+i_m+1-j}$ , weil  $(\gamma_n)$  nach (A3\*a) fallend ist. Außerdem wird der Bereich  $\mathcal{X}_{(1)_m}$  bis zum letzten Schritt nicht besucht und somit gilt

$$\begin{aligned} \theta_{T_k+md+i_m-1}((1)_m) &< \theta_{T_k+md+i_m-j}((1)_m) = \theta_{T_k+md+i_m-j}((j)_m) \times \frac{\theta_{T_k+md}((1)_m)}{\theta_{T_k+md}((j)_m)} \\ &\leq \theta_{T_k+md+i_m-j}((j)_m). \end{aligned}$$

Folglich hat der  $(1)_m$ -te Bereich bei Schritt  $T_k + md + i_m$  immer noch das kleinste Gewicht. Es gilt also  $I_{T_k + md + i_m} = (1)_m$  falls  $A_m$  eintritt und insbesondere

$$T_{k+1} \leq T_k + md + i_m \leq T_k + (m + 1)d.$$

Um nun die fast sichere Endlichkeit von  $T_k + 1$  zu folgern benutzen wir folgendes technisches Lemma, welches wir hier nicht beweisen werden. Es besagt im Wesentlichen, dass die  $A_m$  tatsächliche positive Wahrscheinlichkeit haben und sich diese sogar von unten abschätzen lässt. Den Beweis findet man unter [9, Kapitel 5.2.3].

**Lemma 3.2.8** (ohne Beweis, Lemma 5.2 aus [9]). *Unter den Voraussetzungen (A1) und (A2) existiert eine Konstante  $p \in (0, 1]$ , die nicht von  $k$  abhängt, so dass fast sicher gilt*

$$\forall m \in \mathbb{N}, \quad \mathbb{P}[A_m | \mathcal{F}_{T_k + md}] \geq p$$

Aus Lemma 3.2.8 folgt, dass für  $m \in \mathbb{N}$

$$\begin{aligned} \mathbb{P}[T_{k+1} > T_k + (m + 1)d] &\leq \mathbb{P}[A_0^c \cap A_1^c \cap \dots \cap A_m^c] \\ &= \mathbb{E} \left[ \mathbf{1}_{\{A_0^c \cap A_1^c \cap \dots \cap A_{m-1}^c\}} (1 - \mathbb{P}[A_m | \mathcal{F}_{T_k + md}]) \right] \\ &\leq (1 - p) \mathbb{P}[A_0^c \cap A_1^c \cap \dots \cap A_{m-1}^c], \end{aligned}$$

was induktiv zu  $\mathbb{P}[T_{k+1} > T_k + (m + 1)d] \leq (1 - p)^{m+1}$  führt. Betrachtet man dann den Limes  $m \rightarrow \infty$  in der letzten Ungleichung beendet das den Beweis für (3.13).

Widmen wir uns nun (3.14). Setze für  $k \geq 1$

$$\mathcal{G}_k := \mathcal{F}_{T_k}, \quad Y_k := \theta_{T_{k-1}}.$$

Für den Beweis beziehen wir uns ebenfalls auf ein technisches Lemma welches in [9, Kapitel 5.2.3] bewiesen wird.

**Lemma 3.2.9** (ohne Beweis, Lemma 5.3 aus [9]). *Sei  $v : (0, 1] \ni t \mapsto -\log(t) \in \mathbb{R}_+$ . Unter Voraussetzungen (A1\*), (A2\*) und (A3\*a) existiert ein  $\underline{k} \in \mathbb{N}$  und  $\bar{y} \in (0, 1)$ , so dass fast sicher*

$$\forall k \geq \underline{k}, \quad Y_k \leq \bar{y} \Rightarrow \mathbb{E}[v(Y_{k+1}) | \mathcal{G}_k] \leq v(Y_k)$$

*gilt.*

Wir definieren Stoppzeiten  $\sigma_m$  und  $\tau_m$  durch  $\sigma_0 := 0$  und für  $m \geq 1$  durch

$$\tau_m := \inf \{k > \sigma_{m-1} : Y_k \leq \bar{y}\}, \quad \sigma_m := \inf \{k > \tau_m : Y_k > \bar{y}\}.$$

Wir zerlegen den Wahrscheinlichkeitsraum in

$$\{\exists m \geq 0 : \sigma_m < +\infty = \tau_{m+1}\} \cup \{\forall m \geq 1, \sigma_m < +\infty\} \cup \{\exists m \geq 1 : \tau_m < +\infty = \sigma_m\}.$$

In der ersten und zweiten Menge ist unendlich oft  $Y_k > \bar{y}$ , so dass  $\limsup_{k \rightarrow \infty} Y_k \geq \bar{y}$ . Für die letzte Menge gilt nach Lemma 3.2.9, dass für  $m \geq 1$  der Prozess  $(v(Y_{k \wedge \sigma_m}) - v(Y_{k \wedge \tau_m}))_{k \geq k}$  ein  $G_k$ -Supermartingal ist. Außerdem ist er nicht kleiner als  $-v(Y_{\tau_m}) \geq -v(\bar{y}(1 - \gamma_1))$ , weil  $v$  positiv und monoton ist und wegen der Definition von  $\tau_m$ . Der Prozess konvergiert für  $k \rightarrow \infty$  also fast sicher gegen einen Grenzwert  $V_m$ . Deshalb konvergiert  $(Y_k)_k$  auf der Menge  $\{\exists m \geq 1 : \tau_m < +\infty = \sigma_m\}$  gegen  $\sum_{m \geq 1} \mathbf{1}_{\{\tau_m < +\infty = \sigma_m\}} Y_{\tau_m} e^{-V_m}$ . Somit gilt also  $\mathbb{P}[\limsup_{k \rightarrow \infty} Y_k > 0] = 1$ .  $\square$

### 3.2.4 Existenz einer Lyapunov-Funktion

Als zweite Voraussetzung um das Theorem aus [5] anwenden zu können benötigen wir eine Lyapunov-Funktion. Wir schlagen folgende Funktion  $V : \Theta \rightarrow \mathbb{R}_+$  als Kandidat für die Lyapunov-Funktion vor.

$$V(\theta) := \sum_{i=1}^d \Psi(i) \log \left( \frac{\Psi(i)}{\theta(i)} \right).$$

Im folgenden Lemma zeigen wir nun, dass  $V$  eine Lyapunov-Funktion bezüglich  $h$  ist.

**Lemma 3.2.10.** *Unter Voraussetzung (A1) gilt,*

- (a)  $V$  ist nicht-negativ und stetig differenzierbar auf  $\Theta$ .
- (b)  $h$  ist stetig auf  $\Theta$  und gegeben durch

$$h(\theta) = \left( \sum_{i=1}^d \frac{\Psi(i)}{\theta(i)} \right)^{-1} (\Psi - \theta)$$

- (c) für alle  $M > 0$  ist  $\{\theta \in \Theta, V(\theta) \leq M\}$  eine kompakte Teilmenge von  $\Theta$
- (d) für alle  $\theta \in \Theta$  gilt  $\langle \nabla V(\theta), h(\theta) \rangle \leq 0$ . Insbesondere gilt

$$\{\theta, \langle \nabla V(\theta), h(\theta) \rangle = 0\} = \{\Psi\}$$

*Beweis.* (a) Weil  $\sum_{i=1}^d \Psi(i) = 1$ , gilt mit der Jensen'schen Ungleichung

$$V(\theta) = - \sum_{i=1}^d \Psi(i) \log \left( \frac{\theta(i)}{\Psi(i)} \right) \stackrel{\text{Jensen}}{\geq} - \log \left( \sum_{i=1}^d \theta(i) \right) = 0$$

Da  $V$  offensichtlich auch stetig differenzierbar ist, gilt somit (a).

(b) Für alle  $i \in [1 : d]$  gilt mit den Definitionen von  $H$  (siehe (3.1)) und  $h$  (siehe (3.10))

$$h_i(\theta) = \int_{\mathcal{X}} H_i(x, \theta) \pi_\theta(x) \lambda(dx) = \theta(i) \int_{\mathcal{X}_i} \pi_\theta(x) \lambda(dx) - \theta(i) \sum_{k=1}^d \theta(k) \int_{\mathcal{X}_k} \pi_\theta(x) \lambda(dx).$$

Eigenschaft (b) folgt mit der Definition von  $\pi_\theta$  (siehe (3.3))

$$\int_{\mathcal{X}_k} \pi_\theta(x) \lambda(dx) = \left( \sum_{i=1}^d \frac{\Psi(i)}{\theta(i)} \right)^{-1} \frac{\Psi_k}{\theta(k)}$$

(c) Sei  $M' := M - \sum_{i=1}^d \Psi(i) \log \Psi(i)$ . Nach (A1\*) ist  $\pi$  beschränkt und es folgt  $M' > M > 0$ . Mit der Definition von  $V$  gilt dann

$$\{V \leq M\} = \left\{ \theta \in \Theta \mid - \sum_{i=1}^d \Psi(i) \log \theta(i) \leq M' \right\} \subseteq \bigcap_{j=1}^d \{ \theta \in \Theta \mid \theta(j) \leq m \}$$

wobei  $m := \exp \left( - \frac{M'}{\inf_k \Psi_k} \right)$ . Folglich existiert für alle  $M > 0$  ein  $m > 0$ , so dass

$$\{V \leq M\} \subset \left\{ \theta \in \Theta \mid m \leq \inf_i \theta(i) \leq \sup_i \theta(i) \leq 1 \right\}$$

Mit der Stetigkeit von  $V$  folgt somit die Kompaktheit von  $\{V \leq M\}$ .

(d) Mit den Definitionen von  $h$  und  $V$  rechnen wir nach, dass

$$\begin{aligned} \langle \nabla V(\theta), h(\theta) \rangle &= - \left( \sum_{i=1}^d \frac{\Psi(i)}{\theta(i)} \right)^{-1} \sum_{i=1}^d \frac{\Psi(i)}{\theta(i)} (Psi_i - \theta(i)) \\ &= - \left( \sum_{i=1}^d \frac{\Psi(i)}{\theta(i)} \right)^{-1} \sum_{i=1}^d \frac{(\Psi(i) - \theta(i))^2}{\theta(i)} \leq 0, \end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt  $\sum_{i=1}^d (\Psi(i) - \theta(i)) = \sum_{i=1}^d \Psi(i) - \sum_{i=1}^d \theta(i) = 0$  benutzt wurde. Insbesondere folgt, dass das Skalarprodukt nur für  $\theta = \Psi$  Null ist.  $\square$

In  $(L^*)$  wird zudem gefordert, dass  $\Theta$  offen ist. Dies wird in [9] nicht explizit überprüft, gilt aber offensichtlich nach der Definition von  $\Theta$  (siehe (3.2)).

### Ist die Voraussetzung (3.12) erfüllt?

**Lemma 3.2.11.** *Für beliebige  $\theta, \theta' \in \Theta$  gilt*

$$\|\pi_\theta d\lambda - \pi_{\theta'} d\lambda\|_{TV} \leq 2(d-1) \sum_{i=1}^d \left| 1 - \frac{\theta'(i)}{\theta(i)} \right|$$

*Beweis.* Nach Definition von  $\pi_\theta$  gilt

$$\pi_\theta(x) = \sum_{i=1}^d \frac{\frac{\Psi(i)}{\theta(i)}}{\sum_{j=1}^d \frac{\Psi(j)}{\theta(j)}} \frac{\pi(x)}{\Psi(i)} \mathbf{1}_{\mathcal{X}_i}(x)$$

Somit errechnen wir:

$$\begin{aligned} \|\pi_\theta d\lambda - \pi_{\theta'} d\lambda\|_{TV} &\leq \frac{\sum_{j=1}^d \sum_{i=1}^d \Psi(i)\Psi(j) \left| \frac{1}{\theta(i)\theta'(j)} - \frac{1}{\theta'(i)\theta(j)} \right|}{\sum_{k=1}^d \frac{\Psi_k}{\theta(k)} \sum_{l=1}^d \frac{\Psi_l}{\theta'(l)}} \\ &=: \frac{Z(\theta, \theta')}{N(\theta, \theta')} \end{aligned}$$

Wir schätzen zunächst den Zähler ab

$$\begin{aligned} Z(\theta, \theta') &= \sum_{j=1}^d \sum_{i=1}^d \Psi(i)\Psi(j) \left| \frac{1}{\theta(i)\theta'(i)} - \frac{1}{\theta(i)\theta'(j)} \right| \\ &= \sum_{j=1}^d \sum_{i \neq j} \Psi(i)\Psi(j) \frac{|\theta'(i)\theta(j) - \theta(i)\theta'(j)|}{\theta(i)\theta'(i)\theta(j)\theta'(j)} \\ &\leq \sum_{j=1}^d \sum_{i \neq j} \Psi(i)\Psi(j) \left| \frac{\theta(j) - \theta'(j)}{\theta(i)\theta(j)\theta'(j)} \right| + \sum_{j=1}^d \sum_{i \neq j} \Psi(i)\Psi(j) \left| \frac{\theta(i) - \theta'(i)}{\theta(i)\theta'(i)\theta'(j)} \right| \end{aligned}$$

Für den Nenner gilt

$$\forall i, j \in [1 : d] \quad N(\theta, \theta') = \sum_{k=1}^d \frac{\Psi_k}{\theta(k)} \sum_{l=1}^d \frac{\Psi_l}{\theta'(l)} \geq \frac{\Psi(i)\Psi(j)}{\theta(i)\theta'(j)}$$

Zusammengesetzt folgt

$$\|\pi_\theta d\lambda - \pi_{\theta'} d\lambda\|_{TV} \leq 2 \sum_{j=1}^d \sum_{i \neq j} \left| \frac{\theta(j) - \theta'(j)}{\theta(j)} \right| \leq 2(d-1) \sum_{j=1}^d \frac{|\theta(j) - \theta'(j)|}{\theta(j)}$$

und somit gilt die Behauptung.  $\square$

**Lemma 3.2.12.** Für alle  $\theta, \theta' \in \Theta$  und alle  $x \in \mathcal{X}$  mit  $\pi_\theta(x) \leq \pi_{\theta'}(x)$  gilt

$$\|P_\theta(x, \cdot) - P_{\theta'}(x, \cdot)\|_{TV} \leq 2 \left( 2 \sup_{i \in [1:d]} \left| 1 - \frac{\theta(i)}{\theta'(i)} \right| + \sup_{i \in [1:d]} \left| 1 - \frac{\theta'(i)}{\theta(i)} \right| \right)$$

*Beweis.* Für alle  $x \in \mathcal{X}_j$  und  $y \in \mathcal{X}_k$  gilt nach Definition von  $\pi_\theta$

$$\frac{\pi_\theta(x)\pi_{\theta'}(y)}{\pi_\theta(y)\pi_{\theta'}(x)} = \frac{\theta(k)\theta'(j)}{\theta(j)\theta'(k)}, \quad \frac{\pi_\theta(x)}{\pi_{\theta'}(x)} = \frac{\theta'(j)}{\theta(j)} \quad (3.15)$$

Da  $P_\theta$  ein MH-Kern ist, gilt für alle messbaren, beschränkten Funktionen  $f$ ,

$$\begin{aligned} |P_\theta f(x) - P_{\theta'} f(x)| &= \left| \int Q(x, y)(A_\theta(x, y) - A_{\theta'}(x, y))(f(y) - f(x))\lambda(dy) \right| \\ &\leq 2 \sup_{\mathcal{X}} |f| \sup_{\mathcal{X}^2} |A_\theta - A_{\theta'}| \end{aligned}$$

wobei wegen Symmetrie von  $Q$  gilt  $A_\theta(x, y) = \left(1 \wedge \frac{\pi_\theta(y)}{\pi_\theta(x)}\right)$ . Im Folgenden betrachten wir nun alle möglichen Fälle:

1. *Fall:*  $\pi_\theta(y) \leq \pi_\theta(x)$  und  $\pi_{\theta'}(y) \leq \pi_{\theta'}(x)$ . Dann gilt

$$\begin{aligned} |A_\theta(x, y) - A_{\theta'}(x, y)| &= \left| \frac{\pi_\theta(y)}{\pi_\theta(x)} - \frac{\pi_{\theta'}(y)}{\pi_{\theta'}(x)} \right| \leq \frac{|\pi_\theta(y) - \pi_{\theta'}(y)|}{\pi_\theta(x)} + \frac{|\pi_\theta(x) - \pi_{\theta'}(x)|}{\pi_\theta(x)} \\ &\leq \frac{|\pi_\theta(y) - \pi_{\theta'}(y)|}{\pi_\theta(y)} + \frac{|\pi_\theta(x) - \pi_{\theta'}(x)|}{\pi_\theta(x)} \\ &\leq 2 \sup_{\mathcal{X}} \left| 1 - \frac{\pi_{\theta'}}{\pi_\theta} \right| = 2 \sup_{i \in [1:d]} \left| 1 - \frac{\theta(i)}{\theta'(i)} \right|, \end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt (3.15) benutzt wurde.

2. *Fall:*  $\pi_\theta(y) \leq \pi_\theta(x)$  und  $\pi_{\theta'}(x) \leq \pi_{\theta'}(y)$ . Da  $\pi_\theta(x) \leq \pi_{\theta'}(x) \leq \pi_{\theta'}(y)$ , gilt

$$|A_\theta(x, y) - A_{\theta'}(x, y)| = 1 - \frac{\pi_\theta(y)}{\pi_\theta(x)} \leq 1 - \frac{\pi_\theta(y)}{\pi_{\theta'}(y)} \leq \sup_{\mathcal{X}} \left| 1 - \frac{\pi_{\theta'}}{\pi_\theta} \right| = 2 \sup_{i \in [1:d]} \left| 1 - \frac{\theta(i)}{\theta'(i)} \right|$$

3. *Fall:*  $\pi_\theta(x) \leq \pi_\theta(y)$  und  $\pi_{\theta'}(x) \leq \pi_{\theta'}(y)$ . Dann gilt  $|A_\theta(x, y) - A_{\theta'}(x, y)| = 0$ .

4. *Fall:*  $\pi_\theta(x) \leq \pi_\theta(y)$  und  $\pi_{\theta'}(y) \leq \pi_{\theta'}(x)$ . Erneut mit (3.15) gilt

$$\begin{aligned} |A_\theta(x, y) - A_{\theta'}(x, y)| &= 1 - \frac{\pi_{\theta'}(y)}{\pi_{\theta'}(x)} \leq 1 - \frac{\pi_{\theta'}(y)\pi_\theta(x)}{\pi_{\theta'}(x)\pi_\theta(y)} \\ &= \frac{\pi_{\theta'}(x) - \pi_\theta(x)}{\pi_{\theta'}(x)} + \frac{\pi_\theta(x)\pi_\theta(y) - \pi_{\theta'}(y)}{\pi_{\theta'}(x)\pi_\theta(y)} \\ &\leq \sup_{i \in [1:d]} \left| 1 - \frac{\theta'(i)}{\theta(i)} \right| + \sup_{i \in [1:d]} \left| 1 - \frac{\theta(i)}{\theta'(i)} \right|. \end{aligned}$$

Folglich gilt die Behauptung.  $\square$

Aus Lemma 3.2.11 und Lemma 3.2.12 folgt das

**Korollar 3.2.13.** *Unter (A3a\*) und (A3c\*), existiert eine Konstante  $C$  und  $N \in \mathbb{N}$ , so dass für alle  $n \geq 0$ ,*

$$\|\pi_{\theta_n} d\lambda - \pi_{\theta_{n+1}} d\lambda\|_{TV} \leq 2d(d-1)\gamma_{n+1} \quad (3.16)$$

und für alle  $n \geq N$ ,

$$\sup_{\mathcal{X}} \|P_{\theta_n}(x, \cdot) - P_{\theta_{n+1}}(x, \cdot)\|_{TV} \leq C\gamma_{n+1}$$

*Beweis.* (3.16) folgt aus Lemma 3.2.11, (53) und der oberen Schranke  $|Y_{n+1}(i)| \leq 1$ . Mit Lemma 3.2.12 gilt

$$\begin{aligned} \|P_{\theta_n}(x, \cdot) - P_{\theta_{n+1}}(x, \cdot)\|_{TV} &\leq 4 \left( \sup_i \left| 1 - \frac{\theta_{n+1}(i)}{\theta_n(i)} \right| + \sup_i \left| 1 - \frac{\theta_n(i)}{\theta_{n+1}(i)} \right| \right) \\ &\leq 4\gamma_{n+1} \left( \sup_i |Y_{n+1}(i)| + \sup_i \frac{|Y_{n+1}(i)|}{|1 + \gamma_{n+1} Y_{n+1}(i)|} \right). \end{aligned}$$

Die Behauptung folgt dann aus  $|Y_{n+1}(i)| \leq 1$  und zum Beispiel  $1 - \gamma_{n+1} \geq \frac{1}{2}$  groß genug.  $\square$

**Lemma 3.2.14.** *Seien die Annahmen (A1\*) und (A2\*) erfüllt. Dann existiert für alle  $\theta \in \Theta$  eine Funktion  $\bar{H}_\theta$ , welche die Poisson-Gleichung*

$$\bar{H}_\theta - P_\theta \bar{H}_\theta = H(\cdot, \theta) - \pi_\theta(H(\cdot, \theta)) = H(\cdot, \theta) - h(\theta)$$

erfüllt. Zudem gilt

$$\sup_{\theta \in \Theta, x \in \mathcal{X}} |\bar{H}_\theta(x)| < \infty,$$

und es existiert eine Konstante  $C$ , so dass für alle  $\theta, \theta' \in \Theta$

$$\sup_{\mathcal{X}} \{ |\bar{H}_\theta - \bar{H}_{\theta'}| + |P_\theta \bar{H}_\theta - P_{\theta'} \bar{H}_{\theta'}| \} \leq C \frac{|\theta - \theta'|}{\inf_{i \in [1:d]} \{\theta(i) \wedge \theta'(i)\}}$$

gilt.

**Bemerkung:** Mit „Poisson-Gleichungen“ sind Gleichungen im Sinne von [16, (17.37)] gemeint.  $\bar{H}_\theta$  wird uns später helfen, die Abweichung des aktuellen Inkrements vom gemittelten Inkrement  $h(\theta)$  zu kontrollieren. Genauer gesagt, nutzen wir im nächsten Lemma die Eigenschaft, dass sich  $\bar{H}_\theta - P_\theta \bar{H}_\theta$  in einen Martingalterm und verschwindende Restterme zerlegen lässt (siehe auch [16, Theorem 17.4.3]).

*Beweis.* Da  $\sup_{\theta \in \Theta} \sup_{x \in \mathcal{X}} |H(x, \theta)| \leq 1$  folgt mit Lemma 3.2.4 die Existenz von  $\bar{H}_\theta$  für alle  $\theta \in \Theta$ . Zudem gilt nach [16, Kapitel 17.4.1]

$$\sup_{\theta \in \Theta} \sup_{x \in \mathcal{X}} |\bar{H}_\theta(x)| \leq \sup_{\theta \in \Theta} \sup_{x \in \mathcal{X}} \sum_{n \geq 0} |P_\theta^n H(\cdot, \theta)(x) - \pi_\theta(H(\cdot, \theta))| \leq \frac{2}{\rho} \quad (3.17)$$

Aus Lemma 3.2.4 folgt außerdem mit [8, Lemma 4.2], dass eine Konstante  $C$  existiert, so dass für alle  $\theta, \theta' \in \Theta$

$$\begin{aligned} &\sup_{\mathcal{X}} |P_\theta \bar{H}_\theta - P_{\theta'} \bar{H}_{\theta'}| + \sup_{\mathcal{X}} |\bar{H}_\theta - \bar{H}_{\theta'}| \\ &\leq C \left( \sup_{\mathcal{X}} |H(\cdot, \theta) - H(\cdot, \theta')| + \sup_{x \in \mathcal{X}} \|P_\theta(x, \cdot) - P_{\theta'}(x, \cdot)\|_{TV} + \|\pi_\theta d\lambda - \pi_{\theta'} d\lambda\|_{TV} \right) \end{aligned}$$

gilt. Nach Definition von  $H$  existiert dann eine Konstante  $C'$ , so dass für alle  $\theta, \theta' \in \Theta$  gilt:

$$\sup_{\mathcal{X}} |H(\cdot, \theta) - H(\cdot, \theta')| \leq C' |\theta - \theta'|$$

Mit Lemma 3.2.11 und Lemma 3.2.12 folgt dann die Behauptung.  $\square$

**Satz 3.2.15.** *Unter den Voraussetzungen (A1\*), (A2\*) und (A3\*), gilt*

$$\limsup_{k \rightarrow +\infty} \sup_{l \geq k} \left| \sum_{n=k}^l \gamma_{n+1} (H(X_{n+1}, \theta_n) - h(\theta_n)) \right| = 0 \quad \text{fast sicher}$$

*Beweis.* Wir zerlegen das Inkrement in einen Martingalterm und zwei Restterme

$$H(X_{n+1}, \theta_n) - h(\theta_n) = \bar{H}_{\theta_n}(X_{n+1}) - P_{\theta_n} \bar{H}_{\theta_n}(X_{n+1}) =: M_{n+1} + R_{n+1}^{(1)} + R_{n+1}^{(2)},$$

wobei

$$\begin{aligned} M_{n+1} &= \bar{H}_{\theta_n}(X_{n+1}) - P_{\theta_n} \bar{H}_{\theta_n}(X_n) \\ R_{n+1}^{(1)} &= P_{\theta_n} \bar{H}_{\theta_n}(X_n) - P_{\theta_{n+1}} \bar{H}_{\theta_{n+1}}(X_{n+1}) \\ R_{n+1}^{(2)} &= P_{\theta_{n+1}} \bar{H}_{\theta_{n+1}}(X_{n+1}) - P_{\theta_n} \bar{H}_{\theta_n}(X_{n+1}) \end{aligned}$$

Da nun  $(M_{n+1})_{n \geq 1}$  ein Martingal ist, gilt mit (A3\*c) und (3.17), dass  $\sum_n \gamma_n^2 \mathbb{E}[|M_n|^2] < \infty$ . Somit gilt nach [10, Korollar 2.2] fast sicher  $\limsup_k \sup_{l \geq k} \left| \sum_{n=k}^l \gamma_{n+1} M_{n+1} \right| = 0$ .

Betrachten wir nun  $\sum_{n=k}^l \gamma_n R_{n+1}^{(1)}$ . Ohne das  $\gamma_n$  wäre der Term eine Teleskopsumme und mit „Abelscher partieller Summation“ (siehe [2]) erhält man dann

$$\sum_{n=k}^l \gamma_n R_{n+1}^{(1)} = \gamma_k P_{\theta_k} \bar{H}_{\theta_k}(X_k) - \gamma_l P_{\theta_{l+1}} \bar{H}_{\theta_{l+1}}(X_{l+1}) + \sum_{n=k+1}^l (\gamma_n - \gamma_{n-1}) P_{\theta_n} \bar{H}_{\theta_n}(X_n)$$

Mit (3.17) und (A3\*a) existiert eine Konstante  $C$ , so dass für alle  $l \geq k$

$$\left| \sum_{j=k}^l \gamma_j R_{j+1}^{(1)} \right| \leq C \left( \sup_{j \geq k} \gamma_j + \sum_{j=k+1}^l |\gamma_j - \gamma_{j-1}| \right) \leq 2C \gamma_k$$

gilt. Aus (A3\*a) folgt dann  $\limsup_k \sup_{l \geq k} \left| \sum_{n=k}^l \gamma_{n+1} R_{n+1}^{(1)} \right| = 0$  fast sicher. Betrachten wir nun  $\sum_{n=k}^l \gamma_n R_{n+1}^{(2)}$ . Lemma 3.2.14, zusammen mit (A2\*) impliziert mit den Manipulationen aus Korollar 3.2.13, das eine Konstante  $C''$  existiert, so dass für alle  $j \geq 0$ ,

$$\sup_{\mathcal{X}} |P_{\theta_{j+1}} \bar{H}_{\theta_{j+1}} - P_{\theta_j} \bar{H}_{\theta_j}| \leq C'' \gamma_{j+1}.$$

Mit (A3\*c) existiert  $\sum_n \gamma_n \left| R_n^{(2)} \right|$  fast sicher und es folgt:

$$\mathbb{P} \left[ \limsup_k \sup_{l \geq k} \left| \sum_{n=k}^l \gamma_{n+1} R_{n+1}^{(2)} \right| = 0 \right] = 1$$

Also gilt die Behauptung.  $\square$

### 3.2.5 Beweis von Theorem 3.2.2

Wir beweisen zunächst (3.4).

**Beweis von (3.4)**

Der Beweis beruht auf [8, Theorem 2.1]. Wir zitieren das

**Theorem** (ohne Beweis, Theorem 2.1 aus [8]). *Es seien folgende Voraussetzungen erfüllt:*

(A1') Für alle  $\theta \in \Theta$  existiert eine Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\pi_\theta$ , so dass  $\pi_\theta P_\theta = \pi_\theta$

(A2') a) Für alle  $\varepsilon > 0$  existiert eine nicht-wachsende Folge  $\{r_\varepsilon(n), n \geq 0\}$  in  $\mathbb{N} \setminus \{0\}$ , so dass

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E} \left[ \left\| P_{\theta_{n-r_\varepsilon(n)}}^{r_\varepsilon(n)}(X_{n-r_\varepsilon(n)}, \cdot) - \pi_{\theta_{n-r_\varepsilon(n)}} \right\|_{TV} \right] \leq \varepsilon$$

b) Für beliebiges  $\varepsilon > 0$ ,  $\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^{r_\varepsilon(n)-1} \mathbb{E} [D_V(\theta_{n-r_\varepsilon(n)+j}, \theta_{n-r_\varepsilon(n)})] = 0$ , wobei

$$D_V(\theta, \theta') := \sup_{x \in \mathcal{X}} \frac{\|P_\theta(x, \cdot) - P_{\theta'}(x, \cdot)\|}{V(x)} \quad (3.18)$$

und für  $V \equiv 1$  schreiben wir  $D(\theta, \theta')$ .

Dann gilt für jede beschränkte Funktion  $f$  mit  $\lim_n \pi_{\theta_n}(f) = \alpha$  f.s. für eine Konstante  $\alpha$ , dass

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E} [f(X_n)] = \alpha$$

(A1') aus dem Theorem gilt, weil nach (A2)  $\pi_\theta P_\theta = \pi_\theta$  gilt. Widmen wir uns nun (A2'). Nach Lemma 3.2.4 können wir  $r_\varepsilon > \frac{\log(\varepsilon/2)}{\log(1-\rho)}$  wählen und erhalten

$$\mathbb{E} \left[ \left\| P_{\theta_{n-r_\varepsilon}}^{r_\varepsilon}(X_{n-r_\varepsilon}) - \pi_{\theta_{n-r_\varepsilon}} d\lambda \right\|_{TV} \right] \leq \varepsilon.$$

Für  $n \rightarrow \infty$  ist die Folge  $r_\varepsilon(n) = r_\varepsilon$  nicht wachsend und somit gilt für  $\frac{r_\varepsilon(n)}{n} \rightarrow 0$ . Nach Korollar 3.2.13 existiert außerdem eine Konstante  $C$  (also unabhängig von  $\varepsilon$ ), so dass

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{r_\varepsilon-1} \mathbb{E} \left[ \sup_{x \in \mathcal{X}} \|P_{\theta_{n-r_\varepsilon+j}}(x, \cdot) - P_{\theta_{n-r_\varepsilon}}(x, \cdot)\|_{TV} \right] \\ & \leq \sum_{j=1}^{r_\varepsilon-1} \sum_{l=0}^{j-1} \mathbb{E} \left[ \sup_{x \in \mathcal{X}} \|P_{\theta_{n-r_\varepsilon+l+1}}(x, \cdot) - P_{\theta_{n-r_\varepsilon+l}}(x, \cdot)\|_{TV} \right] \\ & \leq C \sum_{j=1}^{r_\varepsilon-1} \sum_{l=0}^{j-1} \gamma_{n-r_\varepsilon+l+1} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0 \end{aligned}$$

gilt. Im letzten Schritt haben wir benutzt, dass wir eine endliche Summe haben, in der jeder Summand gegen Null konvergiert (siehe (A3\*a)). Damit sind (A1') und (A2') erfüllt. Aus der fast sicheren Konvergenz der Gewichte aus Theorem 3.2.1 und mit Lemma 3.2.11 folgt dann, dass

$$\lim_n \int f(x) \pi_{\theta_n} \lambda(dx) = \int f(x) \pi_\Psi(x) \lambda(dx).$$

Als nächstes beweisen wir (3.5).

**Beweis von (3.5)**

Dazu benutzen wir folgendes Theorem, wobei wir  $V \equiv 1$  benutzen.

**Theorem** (ohne Beweis, Theorem 2.7 aus [8]). *Es seien folgende Voraussetzungen erfüllt:*

(A3')  $P_\theta$  ist für alle  $\theta \in \Theta$   $\pi$ -irreduzibel, aperiodisch und es existiert eine Funktion  $V : \mathcal{X} \rightarrow [1, \infty)$ , so dass für alle  $\theta \in \Theta$  Konstanten  $b_\theta < \infty$ ,  $\delta_\theta \in (0, 1)$ ,  $\lambda_\theta \in (0, 1)$  und ein Wahrscheinlichkeitsmaß  $\nu_\theta$  auf  $\mathcal{X}$  existieren, so dass

$$P_\theta V \leq \lambda_\theta V + b_\theta$$

$$P_\theta(x, \cdot) \geq \delta_\theta \nu_\theta(\cdot) \mathbf{1}_{\{V \leq c_\theta\}}(x), \quad c_\theta := 2b_\theta(1 - \lambda_\theta)^{-1} - 1$$

(A4')  $\sum_{k=1}^{\infty} k^{-1} \max\{L_{\theta_k}, L_{\theta_{k-1}}\} D_V(\theta_k, \theta_{k-1}) V(X_k) < \infty$  wobei  $D_V$  wie (3.18) definiert ist und  $L_\theta := C_\theta \vee (1 - \rho_\theta)^{-1}$ , so dass für die Konstanten  $C_\theta, \rho_\theta$  gilt, dass  $\|P_\theta^n(x, \cdot) - \pi_\theta\|_V \leq C_\theta \rho_\theta^n V(x)$ .

(A5') a)  $\limsup_n \pi_{\theta_n}(V) < \infty$  f.s.

b) Für ein  $\alpha > 1$  gilt  $\sum_{k=0}^{\infty} (k+1)^{-\alpha} L_{\theta_k}^{2\alpha} P_{\theta_k} V^\alpha(X_k) < \infty$  f.s.

Sei  $F : \mathcal{X} \times \Theta \rightarrow \mathbb{R}$  eine messbare Funktion, so dass

1.  $\sup_\theta \|F(\cdot, \theta)\|_V < \infty$
2.  $\sum_{k=1}^{\infty} k^{-1} L_{\theta_{k-1}}^2 \|F(\cdot, \theta_k) - F(\cdot, \theta_{k-1})\|_V V(X_k) < \infty$  f.s.
3.  $\lim_n \int \pi_{\theta_n}(dx) F(x, \theta_n)$  existiert fast sicher

Dann gilt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} F(X_k, \theta_k) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \pi_{\theta_n}(dx) F(x, \theta_n), \quad \text{f.s.}$$

**Definition 3.2.16** (aus [13]). *Eine Markov-Kette  $(X_n)_n$  mit Übergangskern  $P$  ist **geometrisch ergodisch** bezüglich einer stationären Verteilung  $\pi$ , falls eine Funktion  $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$  und eine Konstante  $t \in (0, 1)$  existiert, so dass*

$$\|P^n(x, \cdot) - \pi(\cdot)\|_{TV} \leq M(x)t^n \quad \text{für alle } x \in \mathcal{X}$$

Falls  $M$  beschränkt ist, nennen wir die Markov-Kette **gleichmäßig ergodisch**.

**Bemerkung:** Die Bedingung (A3') besteht aus mehreren Teilen. Irreduzibilität und Aperiodizität garantieren die (geometrische) Ergodizität der Folge. (A3') kontrolliert den „Drift“ der Kette und die letzte Ungleichung garantiert, dass die Menge  $\{V \leq c_\theta\}$  **klein** ist bezüglich der Markov-Kette (engl. small set oder petite set [16]). Genauer dazu findet man in [16, Kapitel 15]. Die Bedingungen (A4') und (A5') kontrollieren die Konvergenzgeschwindigkeit.

Wir überprüfen also ob die Voraussetzungen erfüllt sind. Für  $V$  wählen wir schlicht  $V = 1$  und mit Lemma 3.2.4 gilt dann  $P_\theta V(x) = 1 = c + (1 - c)$  für alle  $c \in (0, 1)$ . Somit gilt die „Drift-Eigenschaft“ aus (A3'). Mit Lemma 3.2.4 gilt außerdem  $P_\theta(x, A) \geq \rho \int_A \pi_\theta(x) \lambda(dx)$  für alle  $x \in \mathcal{X}$ ,  $A \in \mathcal{A}$ . Daraus folgt

1. die Minorisierungsbedingung des Kerns  $P_\theta$  (zweite Gleichung von (A3'), siehe auch [14, Definition 1.1])

2.  $\pi_\theta d\lambda$  ist ein irreduzibles Maß und somit ist  $P_\theta$  wegen der Abschätzung irreduzibel
3. und  $P_\theta$  ist aperiodisch da  $\mathcal{X}$  eine *kleine Menge* ist bezüglich  $P_\theta$  (siehe [16, Kapitel 5.4.3]).

Außerdem gilt nach Korollar 3.2.13 und wegen (A3\*c), dass eine Konstante  $C$  existiert, so dass

$$\sum_{k \geq 1} \frac{1}{k} \sup_{x \in \mathcal{X}} \|P_{\theta_k}(x, \cdot) - P_{\theta_{k-1}}(x, \cdot)\|_{\text{TV}} \leq C \sum_{k \geq 1} \frac{\gamma_k}{k} \leq C \sum_{k \geq 1} \left( \gamma_k^2 + \frac{1}{k^2} \right) < \infty$$

Somit ergibt sich die Bedingung (A4'). (A5') ist ebenfalls trivialerweise erfüllt, da  $V = 1$ . Das beendet den Beweis.

### 3.3 Das „Flat-Histogramm“-Kriterium wird in endlicher Zeit erreicht

Die Probleme im Beweis der Terminiertheit des WL-Algorithmus mit (FH)-Kriterium liegen in zwei Tatsachen:

1. Der Algorithmus ist ein adaptives MCMC Verfahren. Insbesondere ist  $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$  keine Markov-Kette, weil der Übergangskern  $P_\theta$  theoretisch von allen vorherigen Stichproben abhängt. Deshalb können keine gewöhnlichen Sätze für die Konvergenz von MK angewendet werden.
2. Es ist nicht offensichtlich, dass die Temperatur im Laufe der Zeit abnimmt. Dafür muss nämlich immer nach endlicher Zeit das „Flat-Histogramm“-Kriterium erfüllt werden.

Nachdem wir uns im vorherigen Kapitel 3.2 mit dem ersten Problem beschäftigt haben, werden wir nun zeigen, dass das (FH)-Kriterium unter bestimmten Bedingungen in endlicher Zeit erreicht wird. Zusammen ergibt sich dann die Terminiertheit des ganzen Algorithmus. Der Beweis, dass das Flat-Histogramm Kriterium für bestimmte Updates tatsächlich in endlicher Zeit erreicht wird, wurde 2011 von Jacob und Ryder geführt [12] und soll hier im Folgenden wiedergegeben werden. Die Reihenfolge und die Aufteilung auf die Lemmas wurden allerdings verändert um die Lesbarkeit zu erhöhen.

Da sich die Temperatur im WL-Algorithmus mit „Flat-Histogramm“-Kriterium erst jeweils nach dem Erreichen des (FH) verringert, betrachten wir für den Beweis stets eine konstante Temperatur  $\gamma < 1$ . Wir teilen den Beweis in folgendes Theorem und Korollar auf.

**Theorem 3.3.1.** *Benutzt man den Wang-Landau-Algorithmus mit (FH)-Kriterium mit folgendem Update*

$$\log \theta_t(i) \leftarrow \theta_{t-1}(i) + f(\mathbf{1}_{X_t}(X_t), \Phi_i, \gamma_t) \text{ mit } f(\mathbf{1}, \Phi, \gamma) = \gamma(\mathbf{1} - \Phi),$$

*dann konvergieren die relativen- gegen die gewünschten Trefferhäufigkeiten in  $L^1$*

$$\frac{N_t(i)}{t} \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{L^1} \Phi_i$$

**Bemerkung:** *In Paper [12] wird zusätzlich noch gezeigt, dass der Algorithmus mit einem anderen Update, nämlich mit  $f(\mathbf{1}, \Phi, \gamma) = \log[1 + \gamma(\mathbf{1} - \Phi_i)]$  nicht konvergiert. Die relativen Häufigkeiten konvergieren dann zwar, aber nicht gegen  $(\Phi_i)$  (siehe [12, S.7 unten]).*

Aus der Konvergenz in  $L^1$  folgt die Konvergenz in Wahrscheinlichkeit. Und es ergibt sich folgendes

**Korollar 3.3.2.** *Falls die Trefferhäufigkeiten in Wahrscheinlichkeit konvergieren*

$$\frac{N_t(i)}{t} \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{\mathbb{P}} \Phi_i,$$

*wird das „Flat-Histogramm“-Kriterium in endlicher Zeit erreicht.*

*Beweis von Korollar 3.3.2.* Das zu betrachtende Ereignis  $FH_t$  definieren wir durch:

$$FH_t = \left\{ \forall i \in [1 : d] : \left| \frac{N_t(i)}{t} - \Phi(i) \right| < c \right\}$$

Wir benutzen nun die Konvergenz von

$$\frac{N_t(i)}{t} \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{\mathbb{P}} \Phi(i)$$

Es folgt:

$$\forall \varepsilon > 0 \exists N \in \mathbb{N} \forall t \geq N : \mathbb{P}(FH_t) \geq 1 - \varepsilon$$

Definieren wir

$$T^{FH} = \inf_{t \geq 0} \{FH_t\}$$

dann gibt es demnach ein  $\varepsilon > 0$ , so dass

$$\exists N \in \mathbb{N} \forall n \geq N : \mathbb{P}(T^{FH} \leq N + n) \geq \varepsilon$$

Mit [19, Lemma 10.11] folgt dann die Behauptung.  $\square$

Wir führen nun zuerst etwas Notation und die zu gewährleistenden Voraussetzungen ein. In Kapitel 3.3.2 beweisen wir dann das Theorem 3.3.1 für den Spezialfall, dass wir genau zwei Bereiche benutzen ( $d=2$ ). In Kapitel 3.3.3 verallgemeinern wir den Beweis dann für  $d > 2$ .

### 3.3.1 Vorbereitung und Annahmen

Betrachten wir die Definition des Akzeptierungskerns vom MH-Kern  $P_\theta$ , fällt auf, dass die Stärke mit der ein einzelner Bereich bevorzugt bzw. benachteiligt wird ausschließlich vom Verhältnis der Gewichte des Bereichs zu den Gewichten der anderen Bereiche abhängt:

$$\begin{aligned} A_{\theta_t}(x, y) &= \min \left\{ 1, \frac{\pi_{\theta_t}(y)Q(y, x)}{\pi_{\theta_t}(x)Q(x, y)} \right\} = \min \left\{ 1, \frac{\frac{\pi(y)}{\theta_t(I(y))}Q(y, x)}{\frac{\pi(x)}{\theta_t(I(x))}Q(x, y)} \right\} \\ &= \min \left\{ 1, \frac{\pi(y)Q(y, x) \theta_t(I(x))}{\pi(x)Q(x, y) \theta_t(I(y))} \right\} = \min \left\{ 1, \frac{\pi(y)Q(y, x)}{\pi(x)Q(x, y)} e^{Z_t^{(I(x), I(y))}} \right\} \end{aligned}$$

wobei wir die Verhältnisse mit  $Z_t^{(i,j)}$  benennen

$$Z_t^{(i,j)} := \log \frac{\theta_t(i)}{\theta_t(j)}, \quad i, j \in [1 : d] \text{ mit } i \neq j$$

Der Beweis des Theorems hängt deshalb im Wesentlichen davon ab, dass wir die Verhältnisse  $Z_t^{(i,j)}$  kontrollieren können, in dem Sinne, dass kein Bereich unendlich viel „öfter“ besucht wird als die anderen. Präziser formuliert werden wir zeigen, dass  $Z_t^{(i,j)}/t \rightarrow 0$  und das daraus auch folgt, dass  $N_t/t \rightarrow 0$ .

Für den gesamten Beweis werden wir von folgenden Annahmen ausgehen:

**(A1)** Alle Bereiche besitzen unter  $\pi$  und  $\mathbb{P}$  positive Wahrscheinlichkeit

$$\mathbb{P}(\mathcal{X}_i) > 0, \quad \pi(\mathcal{X}_i) > 0, \quad \text{für alle } i \in \{1, 2\}$$

**(A2)** Der Zustandsraum  $\mathcal{X}$  ist kompakt

**(A3)** Für den Vorschlagskern  $Q(x, y)$  ist jeder Zustand von jedem direkt erreichbar und die Übergangswahrscheinlichkeiten sind von unten beschränkt, also

$$\exists q_{min} > 0 \forall x, y \in \mathcal{X} : Q(x, y) > q_{min}$$

(A4) Die MH Akzeptanzwahrscheinlichkeit  $A(x, y)$  ist von beiden Seiten beschränkt

$$\exists m, M > 0 \forall x, y \in \mathcal{X} : m < \frac{\pi(y)Q(x, y)}{\pi(x)Q(y, x)} < M$$

(A1) und (A2) sind keine großen Einschränkungen in der Praxis, weil leere Bereiche einfach weggelassen werden könnten und nicht kompakte Zustandsräume allein schon wegen der Speichergrenzen nicht vorkommen. (A3) und (A4) wiederum lassen sich allerdings nicht immer erfüllen und es wäre ein Ziel für die Zukunft diese abzuschwächen.

**Bemerkung:** Ein Gauss'scher Random Walk, also ein Random Walk bei dem die einzelnen Schritte normalverteilt sind, erfüllt alle Bedingungen (A1) bis (A4) und ist somit eine mögliche Wahl für den Vorschlagskern.

Im ersten Teil werden wir obiges Theorem nur für den Fall  $d = 2$  beweisen, falls es also nur genau zwei Bereiche gibt. Danach erklären wir, wie man diesen Fall auf  $d > 2$  verallgemeinern kann.

### 3.3.2 Konvergenz der Häufigkeiten für $d=2$

Sei also  $\mathcal{X} = \mathcal{X}_1 \cup \mathcal{X}_2$ . Es gibt also nur  $Z_t^{(1,2)}$  und  $Z_t^{(2,1)}$ . Der Einfachheit halber, definieren wir

$$Z_t := Z_t^{(1,2)} = \log \theta_t(1) - \log \theta_t(2)$$

Für unseren Spezialfall  $d = 2$  möchten wir nun den folgenden Satz beweisen.

**Satz 3.3.3.** Sei  $Z_t$  wie oben definiert, dann gilt

$$\frac{Z_t}{t} \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{L_1} 0$$

Wir definieren zunächst die Inkremente von  $(Z_t)$  als  $(U_t)_{t \in \mathbb{N}}$ , so dass

$$\begin{aligned} Z_{t+1} &= \log \theta_{t+1}(1) - \log \theta_{t+1}(2) \\ &= [\log \theta_t + f(\mathbf{1}_{\mathcal{X}_1}(X_t), \Phi(1), \gamma)] - [\log \theta_t + f(\mathbf{1}_{\mathcal{X}_2}(X_t), \Phi(2), \gamma)] \\ &= Z_t + f(\mathbf{1}_{\mathcal{X}_1}(X_t), \Phi(1), \gamma) - f(\mathbf{1}_{\mathcal{X}_2}(X_t), \Phi(2), \gamma) \\ &= Z_t + U_t \end{aligned}$$

wobei  $\gamma$  die aktuelle Temperatur ist, die konstant bleibt, solange das (FH) noch nicht erreicht wurde. Für unser spezielles Update gilt, dass  $U_t$  positiv ist, falls der erste Bereich getroffen wird, und sonst negativ. Genauer gilt, dass  $U_t \in \{+a, -b\}$  mit  $a, b > 0$ .

Die Kontrolle von  $Z_t$  erreichen wir mit folgendem Lemma. Darin beweisen wir, dass es ein kompaktes Intervall  $[\bar{Z}^{low}, \bar{Z}^{high}]$  gibt, in dem sich  $Z_t$  meistens befindet, oder zu dem es zumindest mit sehr großer Wahrscheinlichkeit schnell wieder zurückkehrt.

**Lemma 3.3.4.** Seien  $Z_t$  und  $U_t$  wie oben definiert. Dann existiert ein  $\varepsilon > 0$ , mit dem für alle  $\eta > 0$  jeweils ein Intervall  $\bar{\mathcal{Z}} = [\bar{Z}^{low}, \bar{Z}^{high}] \subset \mathbb{R}$  existiert, für das gilt:

1. Falls  $Z_t \geq \bar{Z}^{high}$ , gilt:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}[U_{t+1} = -b | U_t = +a, Z_t] &> \varepsilon \\ \mathbb{P}[U_{t+1} = -b | U_t = -b, Z_t] &> 1 - \eta \end{aligned}$$

2. Falls  $Z_t \leq \bar{Z}^{low}$ , gilt:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}[U_{t+1} = +a | U_t = -b, Z_t] &> \varepsilon \\ \mathbb{P}[U_{t+1} = +a | U_t = +a, Z_t] &> 1 - \eta \end{aligned}$$

*Beweis.* Wir beweisen das Lemma zunächst nur für den Fall  $Z_t \geq \bar{Z}^{high}$ , indem wir uns mit der Definition des MH-Kerns eine obere Schranke  $\bar{Z}^{high}$  konstruieren.

Sei  $q_{min}$  wie in (A3). Das Ereignis  $\{U_t = +a\}$  entspricht dem Ereignis  $\{X_t \in \mathcal{X}_1\}$ . Falls also  $X_t \in \mathcal{X}_1$  und  $\pi(X_t) > 0$ , dann gilt mit der Definition von  $Z_t$ :

$$\begin{aligned} P_{\theta_t}(X_t, \mathcal{X}_2) &= \int_{\mathcal{X}_2} P_{\theta_t}(X_t, y) dy \\ &= \int_{\mathcal{X}_2} Q(X_t, y) A_{\theta_t}(X_t, y) dy \\ &= \int_{\mathcal{X}_2} Q(X_t, y) \left( 1 \wedge \frac{\pi(y)}{\pi(X_t)} \frac{Q(y, X_t)}{Q(X_t, y)} \frac{\theta_t(I(X_t))}{\theta_t(I(y))} \right) dy \\ &= \int_{\mathcal{X}_2} Q(X_t, y) \left( 1 \wedge \frac{\pi(y)}{\pi(X_t)} \frac{Q(y, X_t)}{Q(X_t, y)} e^{Z_t} \right) dy \end{aligned}$$

Nach (A4) ist  $\frac{\pi(y)}{\pi(x)} \frac{Q(y, x)}{Q(x, y)}$  von unten beschränkt. Somit existiert ein  $K_1$ , so dass für alle  $k \geq K_1$

$$\forall x, y \in \mathcal{X} : \frac{\pi(y)}{\pi(x)} \frac{Q(y, x)}{Q(x, y)} e^k \geq 1$$

Für  $Z_t \geq K_1$  ist somit das Minimum gleich eins und mit  $X_t \in \mathcal{X}_1$  gilt

$$P_{\theta_t}(X_t, \mathcal{X}_2) = \int_{\mathcal{X}_2} Q(X_t, y) dy > q_{min} \mu(\mathcal{X}_2).$$

Falls  $Z_t \geq P_1$  gilt demnach die erste Ungleichung:

$$\mathbb{P}[U_{t+1} = -b | U_t = +a, Z_t] = \mathbb{P}[X_{t+1} \in \mathcal{X}_2 | X_t \in \mathcal{X}_1, Z_t] > q_{min} \mu(\mathcal{X}_2)$$

Wir zeigen nun die zweite Ungleichung. Sei  $\eta > 0$  beliebig aber fest. Es gilt

$$\mathbb{P}[U_{t+1} = -b | U_t = -b, Z_t] = \mathbb{P}[X_{t+1} \in \mathcal{X}_2 | X_t \in \mathcal{X}_2, Z_t]$$

Wie eben betrachten wir den MH-Kern:

$$\begin{aligned} P_{\theta_t}(X_t, \mathcal{X}_2) &= 1 - P_{\theta_t}(X_t, \mathcal{X}_1) \\ &= 1 - \left[ \int_{\mathcal{X}_1} Q(X_t, y) A_{\theta_t}(X_t, y) dy \right] \\ &= 1 - \left[ \int_{\mathcal{X}_1} Q(X_t, y) \left( 1 \wedge \frac{\pi(y)}{\pi(X_t)} \frac{Q(y, X_t)}{Q(X_t, y)} e^{-Z_t} \right) dy \right] \end{aligned}$$

Weil nach (A4)  $\frac{\pi(y)}{\pi(x)} \frac{Q(y, x)}{Q(x, y)} < M$  folgt wiederum die Existenz eines  $K_2$ , so dass für alle  $k \geq K_2$  gilt:

$$\forall x, y \in \mathcal{X} : \frac{\pi(y)}{\pi(x)} \frac{Q(y, x)}{Q(x, y)} e^k \leq 1$$

und deshalb für den Fall, dass  $Z_t > K_2$

$$\begin{aligned} P_{\theta_t}(X_t, \mathcal{X}_2) &= 1 - e^{-Z_t} \int_{\mathcal{X}_1} Q(X_t, y) \frac{\pi(y)}{\pi(X_t)} \frac{Q(y, X_t)}{Q(X_t, y)} dy \\ &> 1 - e^{-Z_t} M \underbrace{\int_{\mathcal{X}_1} Q(X_t, y) dy}_{< 1} \\ &> 1 - M e^{-Z_t} \end{aligned}$$

Somit existiert für jedes  $\eta > 0$  ein  $K_3 > K_2$ , so dass für alle  $Z_t \geq K_3$ :

$$P_{\theta_t}(X_t, \mathcal{X}_2) > 1 - \eta$$

Daraus folgt schließlich die zweite Ungleichung

$$\mathbb{P}[U_{t+1} = -b | U_t = -b, Z_t] > 1 - \eta$$

Setze also  $\varepsilon = q_{\min} \mu(\mathcal{X}_2)$ . Mit  $\bar{Z}^{high} > \max\{K_1, K_3\}$  gelten dann beide Ungleichungen. Für den Fall  $Z_t < \bar{Z}^{low}$  lässt sich der Beweis analog führen, indem man die MH-Kerne betrachtet und (A3) und (A4) benutzt.  $\square$

Das Verhalten von  $Z_t$  außerhalb des Intervalls  $[\bar{Z}^{low}, \bar{Z}^{high}]$  deutet also bereits darauf hin, dass  $Z_t$  immer wieder in das Intervall zurückkehrt, also dass die Wiedereintrittsdauern endlich sind. Wir führen zunächst einige neue Notationen ein.

**Definition 3.3.5.** Seien  $\varepsilon, \eta > 0$  beliebig aber fest gewählt. Sei dementsprechend  $\bar{Z}$  das zugehörige Intervall aus Lemma 3.3.4. Dann definieren wir die **Austrittszeiten**  $(s_i)_{i \in \mathbb{N}}$  durch:

$$\begin{aligned} s_1 &:= \inf \{t \in \mathbb{N} | Z_{t-1} \in \bar{Z} \wedge Z_t \notin \bar{Z}\} \\ s_{i+1} &:= \inf \{t > s_i | Z_{t-1} \in \bar{Z} \wedge Z_t \notin \bar{Z}\} \end{aligned}$$

Außerdem definieren wir die **Wiedereintrittsdauern**  $(T_i)_{i \in \mathbb{N}}$ :

$$T_i := \inf \{t \in \mathbb{N} | Z_{s_i+t} \in \bar{Z}\}$$

Wir möchten nun zeigen, dass die erwarteten Wiedereintrittsdauern endlich sind:

$$\mathbb{E}[T_i] < \infty, \quad \text{für alle } i \in \mathbb{N}$$

Das Problem ist dabei die Tatsache, dass die Inkremente  $U_t$  noch stark mit  $Z_t$  korrelieren. Wir werden deshalb neue Inkremente  $\tilde{U}_t$  einführen, die  $U_t$  beschränken und gleichzeitig eine Markov-Kette sind, also nur vom vorherigen  $\tilde{U}_{t-1}$  abhängen. Trotzdem wird  $\tilde{U}_t$  jedes Mal in endlicher Zeit zu  $\bar{Z}$  zurückkehren. Das folgende Lemma zeigt die Existenz solcher  $\tilde{U}_t$ , für den Fall dass  $Z_t$  nach oben aus dem Intervall  $\bar{Z}$  läuft. Der andere Fall verläuft analog.

**Lemma 3.3.6.** Sei  $U_t \in \{+a, -b\}$  wie oben die Folge der Inkremente von  $Z_t$ , seien  $\varepsilon < \frac{1}{2}$ ,  $\eta < \min\{\frac{1}{2}, \frac{\varepsilon b}{a}\}$  und  $\bar{Z}$  das zugehörige Intervall aus Lemma 3.3.4. Sei zudem  $s_i$  eine beliebige Austrittszeit, bei der  $Z_{s_i} > \bar{Z}^{high}$ . Dann existiert eine Markov-Kette

$$(\tilde{U}_t)_{t \in \{s_i, s_i+1, \dots\}} \in \{\alpha_1 = +a, \alpha_2 = -b\}$$

(unabhängig von  $Z_t$  und  $U_t$ ) mit Übergangsmatrix

$$\begin{pmatrix} 1 - \varepsilon & \varepsilon \\ \eta & 1 - \eta \end{pmatrix}$$

welche  $U_t$  beschränkt, in dem Sinne dass gilt

$$U_t \leq \tilde{U}_t, \quad \text{für alle } t \in \mathbb{N}$$

und so dass

$$\begin{aligned} \tilde{Z}_{s_i} &= Z_{s_i} \\ \tilde{Z}_{t+1} &= \tilde{Z}_t + \tilde{U}_t, \quad \forall t > s_i \end{aligned}$$

in endlicher Zeit zu  $\bar{Z}$  zurückkehrt (siehe Lemma 3.3.7).

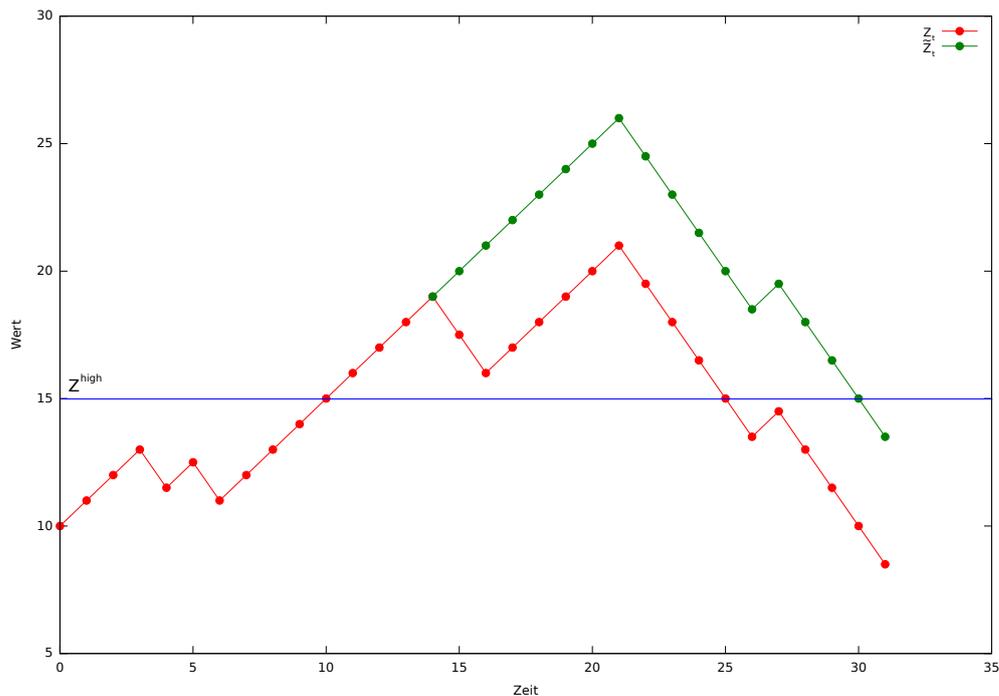


Abbildung 3.2: Steigt  $Z_t$ , so steigt  $\tilde{Z}_t$  ebenfalls. Fällt  $Z_t$ , so fällt  $\tilde{Z}_t$  allerdings nur mit einer gewissen W-Keit und steigt sonst. Folglich ist  $\tilde{Z}_t \geq Z_t$ .

**Bemerkung:** Entscheidend ist die Tatsache, dass  $\tilde{U}_t$  unabhängig von  $Z_t$  und  $U_t$  ist. In diesem Schritt geschieht also der Übergang von dem schwer zu analysierenden adaptiven MCMC-Verfahren zur leicht zu kontrollierenden Markov-Kette.

*Beweis.* Für die Zeiten an denen  $Z_t$  über dem Intervall liegt, also  $s_i \leq t < T_i$  definieren wir  $\tilde{U}_t$  rekursiv und in Abhängigkeit von  $U_{t+1}, U_t, \tilde{U}_t$  wie folgt (der Verlauf von  $\tilde{Z}_t$  wird in Abbildung 3.2 veranschaulicht):

gegeben			definiert
$U_{t+1}$	$U_t$	$\tilde{U}_t$	$\tilde{U}_{t+1}$
$+a$	$\cdot$	$\cdot$	$+a$
$-b$	$-b$	$-b$	$\left\{ \begin{array}{l} -b \text{ mit W-Keit } p_1 = \frac{1-\eta}{\mathbb{P}[U_{t+1}=-b U_t=-b,Z_t]} \\ +a \text{ sonst} \end{array} \right.$
$-b$	$+a$	$-b$	$\left\{ \begin{array}{l} -b \text{ mit W-Keit } p_2 = \frac{\varepsilon}{\mathbb{P}[U_{t+1}=-b U_t=+a,Z_t]} \\ +a \text{ sonst} \end{array} \right.$
$-b$	$-b$	$+a$	$\left\{ \begin{array}{l} -b \text{ mit } p_3 = \varepsilon \left( 1 + \frac{\mathbb{P}[U_{t+1}=+a U_t=-b,Z_t]}{\mathbb{P}[U_{t+1}=-b U_t=-b,Z_t]} \right) \\ +a \text{ sonst} \end{array} \right.$

Für Zeiten  $t \geq T$  definieren wir  $\tilde{U}_t$  schlicht als eine Markov-Kette mit der obigen Übergangsmatrix.

Wir überprüfen zunächst die Wohldefiniertheit, in dem Sinne, dass alle  $p_1, p_2, p_3$  tatsächlich kleiner als Eins sind. Für  $p_1$  und  $p_2$  folgt dies aus den Ungleichungen (1) und (2)

aus Lemma 3.3.4. Für  $p_3$  berechnen wir mit  $\varepsilon < \frac{1}{2}$  und  $\eta < \frac{1}{2}$ :

$$\begin{aligned} \varepsilon \left( 1 + \frac{\mathbb{P}[\tilde{U}_{t+1} = +a | U_t = -b, Z_t]}{\mathbb{P}[\tilde{U}_{t+1} = -b | U_t = -b, Z_t]} \right) &= \varepsilon \left( 1 + \frac{1 - \mathbb{P}[U_{t+1} = -b | U_t = -b, Z_t]}{\mathbb{P}[U_{t+1} = -b | U_t = -b, Z_t]} \right) \\ &\leq \varepsilon \left( 1 + \frac{1 - (1 - \eta)}{1 - \eta} \right) \leq \varepsilon \left( 1 + \frac{\eta}{1 - \eta} \right) \\ &\leq 2\varepsilon \leq 1 \end{aligned}$$

Zum Beweis des Lemmas überprüfen wir nun für die einzelnen Fälle die Übergangswahrscheinlichkeiten. Für den Übergang  $\tilde{U}_t = -b \rightarrow \tilde{U}_{t+1} = -b$  ist zunächst zu bemerken, dass die Ereignisse  $\{\tilde{U}_t = -b\}$  und  $\{\tilde{U}_t = -b, U_t = -b\}$  gleich sind. Daher gilt:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}[\tilde{U}_{t+1} = -b | \tilde{U}_t = -b, Z_t] &= \mathbb{P}[\tilde{U}_{t+1} = -b | \tilde{U}_t = -b, U_t = -b, Z_t] \\ &= \mathbb{P}[\tilde{U}_{t+1} = -b | U_{t+1} = -b, \tilde{U}_t = -b, U_t = -b, Z_t] \\ &\quad \times \mathbb{P}[U_{t+1} = -b | \tilde{U}_t = -b, U_t = -b, Z_t] \\ &= \frac{(1 - \eta)\mathbb{P}[U_{t+1} = -b | U_t = -b, Z_t]}{\mathbb{P}[U_{t+1} = -b | U_t = -b, Z_t]} \\ &= 1 - \eta \end{aligned}$$

Für den Übergang  $\tilde{U}_t = +a \rightarrow \tilde{U}_{t+1} = -b$  betrachten wir die zwei Gleichungen:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}[\tilde{U}_{t+1} = -b | \tilde{U}_t = +a, U_t = +a, Z_t] &= \mathbb{P}[\tilde{U}_{t+1} = -b | U_{t+1} = -b, \tilde{U}_t = +a, U_t = +a, Z_t] \\ &\quad \times \mathbb{P}[U_{t+1} = -b | \tilde{U}_t = +a, U_t = +a, Z_t] \\ &= \frac{\varepsilon \mathbb{P}[U_{t+1} = -b | U_t = +a, Z_t]}{\mathbb{P}[U_{t+1} = -b | U_t = +a, Z_t]} \\ &= \varepsilon \end{aligned}$$

und:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}[\tilde{U}_{t+1} = -b | \tilde{U}_t = +a, U_t = -b, Z_t] &= \mathbb{P}[\tilde{U}_{t+1} = -b | U_{t+1} = -b, \tilde{U}_t = +a, U_t = -b, Z_t] \\ &\quad \times \mathbb{P}[U_{t+1} = -b | \tilde{U}_t = +a, U_t = -b, Z_t] \\ &= \varepsilon \left( 1 + \frac{\mathbb{P}[U_{t+1} = +a | U_t = -b, Z_t]}{\mathbb{P}[U_{t+1} = -b | U_t = -b, Z_t]} \right) \\ &\quad \times \mathbb{P}[U_{t+1} = -b | U_t = -b, Z_t] \\ &= \varepsilon (\mathbb{P}[U_{t+1} = -b | U_t = -b, Z_t] + \mathbb{P}[U_{t+1} = +a | U_t = -b, Z_t]) \\ &= \varepsilon \end{aligned}$$

Somit ergibt sich:

$$\mathbb{P}[\tilde{U}_{t+1} = -b | \tilde{U}_t = +a] = \varepsilon$$

Über die Gegenwahrscheinlichkeit erhalten wir für die Übergänge  $\tilde{U}_t = +a \rightarrow \tilde{U}_{t+1} = +a$  und  $\tilde{U}_t = -b \rightarrow \tilde{U}_{t+1} = +a$

$$\begin{aligned} \mathbb{P}[\tilde{U}_{t+1} = +a | \tilde{U}_t = +a, Z_t] &= 1 - \mathbb{P}[\tilde{U}_{t+1} = -b | \tilde{U}_t = +a, Z_t] = 1 - \varepsilon \\ \mathbb{P}[\tilde{U}_{t+1} = +a | \tilde{U}_t = -b, Z_t] &= 1 - \mathbb{P}[\tilde{U}_{t+1} = -b | \tilde{U}_t = -b, Z_t] = 1 - (1 - \eta) = \eta \end{aligned}$$

□

Wir folgern nun, dass  $Z_t$  tatsächlich immer in endlicher Zeit in das Intervall  $\bar{\mathcal{K}}$  zurückkehrt.

**Lemma 3.3.7.** *Alle erwarteten Wiedereintrittsdauern sind endlich. Insbesondere existiert ein  $\tau \in \mathbb{R}$ , so dass gilt:*

$$\mathbb{E}[T] \leq \tau$$

*Beweis.* Da die Markov-Kette  $(\tilde{U}_t)$  aperiodisch und irreduzibel ist, konvergiert sie gegen folgende stationäre Verteilung:

$$\pi_{\tilde{U}} = \left( \frac{\eta}{\varepsilon + \eta}, \frac{\varepsilon}{\varepsilon + \eta} \right)$$

Sei  $s_i$  eine beliebige Austrittszeit, für welche  $\tilde{Z}_{s_i+1}$  über dem Intervall liegt. Dann definieren wir mit  $\tilde{T}_i$  die Wiedereintrittsdauer von  $(\tilde{Z}_t)$ , also

$$\tilde{T}_i = \inf_{d \leq 0} \left\{ \sum_{t=s_i+1}^{s+d} \tilde{U}_t \leq -a \right\}$$

Erinnern wir uns an unsere Wahl von  $\eta$  fällt auf, dass  $a\eta < b\varepsilon$  gilt. In der Nähe der Grenzverteilung ist  $\tilde{U}_t$  ungefähr mit  $\pi_{\tilde{U}}$  verteilt. Somit gilt dann:

$$\mathbb{E}[\tilde{U}_t] \approx +a \frac{\varepsilon}{\varepsilon + \eta} - b \frac{\eta}{\varepsilon + \eta} < 0$$

Da nun aber  $\tilde{U}_t$  gegen die Grenzverteilung konvergiert, existiert insbesondere ein Zeitpunkt, ab dem alle Erwartungswerte der folgenden  $U_t$  negativ sind. Mit der Unabhängigkeit der  $\tilde{U}_t$  folgt dann aber:

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[ \sum_{t=s_i+1}^{s+d} \tilde{U}_t \right] &= \sum_{t=s_i+1}^{s+d} \mathbb{E} [\tilde{U}_t] \\ &= \sum_{t=s_i+1}^{s+C} \mathbb{E} [\tilde{U}_t] + \sum_{t=s+C+1}^{s+d} \mathbb{E} [\tilde{U}_t] \\ &\leq -a \quad \text{für } d \text{ groß genug, aber endlich} \end{aligned}$$

Daraus folgt  $\tau := \mathbb{E}[\tilde{T}] < \infty$ .  $\tilde{U}_t$  ist nach Definition immer größer gleich  $U_t$ . Somit ist auch  $\tilde{Z}_t \geq Z_t$  und es folgt  $\tilde{T} < T$ . Daraus folgt dann  $\mathbb{E}[T] < \infty$ . Da  $s_i$  beliebig war und die Argumentation für Austrittszeiten unterhalb des Intervalls analog verläuft, ist die Aussage bewiesen.  $\square$

*Beweis von Satz 3.3.3.* Seien  $(s_i)$  und  $T_i$  die Austrittszeiten bzw. die Wiedereintrittsdauer aus Definition 3.3.5 und sei  $k(t)$  so definiert, dass  $s_{k(t)} \leq t < s_{k(t)+1}$ . Dann gibt es drei mögliche Fälle:

1. Falls  $Z_t \in \bar{\mathcal{Z}}$  bedarf es keiner Abschätzungen
2. Falls  $Z_t > \bar{Z}^{high}$ , gilt  $Z_t \leq Z_{s_{k(t)}} + aT_{k(t)}$  und berechnet man den Erwartungswert auf beiden Seiten gilt:

$$\mathbb{E}[Z_t] \leq (\bar{Z}^{high} + a) + a\tau$$

3. Falls  $Z_t < \bar{Z}^{low}$  lässt sich der Erwartungswert analog beschränken

$$\mathbb{E}[Z_t] \geq (\bar{Z}^{low} - b) - b\tau$$

In jedem Fall folgt:

$$\mathbb{E} \left[ \frac{Z_t}{t} \right] \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0$$

□

**Lemma 3.3.8.** Die Konvergenz  $Z_t/t \xrightarrow{L^1} 0$  impliziert  $N_t/t \xrightarrow{L^1} \Phi$ .

*Beweis.* Mit der Definition von  $Z_t$  gilt

$$\begin{aligned} Z_t &= \log \theta_t(1) - \log \theta_t(2) \\ &= Z_0 + [N_t(1)f(1, \Phi(1), \gamma) + (t - N_t(1))f(0, \Phi(1), \gamma)] \\ &\quad - [N_t(2)f(1, \Phi(2), \gamma) + (t - N_t(2))f(0, \Phi(2), \gamma)] \\ &= Z_0 + N_t(1) [f(1, \Phi(1), \gamma) - f(0, \Phi(1), \gamma)] \\ &\quad + tf(0, \Phi(1), \gamma) - [(t - N_t(1))f(1, \Phi(2), \gamma) + N_t(1)f(0, \Phi(2), \gamma)] \\ &= Z_0 + N_t(1) \underbrace{[f(1, \Phi(1), \gamma) - f(0, \Phi(1), \gamma) + f(1, \Phi(2), \gamma) - f(0, \Phi(2), \gamma)]}_{c:=} \\ &\quad + t(f(0, \Phi(1), \gamma) - f(1, \Phi(2), \gamma)). \end{aligned}$$

Dabei haben wir benutzt, dass  $\gamma$  konstant bleibt und wir somit nur die Treffer in den einzelnen Bereichen zählen müssen um die gesamte Änderung der Gewichte bis zum Zeitpunkt  $t$  zu erhalten. Formen wir nun nach  $N_t(1)/t$  um erhalten wir

$$\frac{N_t(1)}{t} = \frac{Z_t - Z_0}{t} \frac{1}{c} - \frac{f(1, \Phi(2), \gamma) - f(0, \Phi(1), \gamma)}{c}$$

Nutzen wir nun  $Z_t/t \xrightarrow{L^1} 0$  gilt

$$\frac{N_t(1)}{t} \xrightarrow{L^1} \frac{f(1, \Phi(2), \gamma) - f(0, \Phi(1), \gamma)}{f(1, \Phi(1), \gamma) - f(0, \Phi(1), \gamma) + f(1, \Phi(2), \gamma) - f(0, \Phi(2), \gamma)}.$$

Für unser gewähltes Update  $f(\mathbf{1}, \Phi, \gamma) = \gamma(\mathbf{1} - \Phi)$  gilt dann aber gerade

$$\begin{aligned} &\frac{f(1, \Phi(2), \gamma) - f(0, \Phi(1), \gamma)}{f(1, \Phi(1), \gamma) - f(0, \Phi(1), \gamma) + f(1, \Phi(2), \gamma) - f(0, \Phi(2), \gamma)} \\ &= \frac{\gamma[(1 - \Phi(2)) - (0 - \Phi(1))]}{\gamma[(1 - \Phi(1)) - (0 - \Phi(1)) + (1 - \Phi(2)) - (0 - \Phi(2))]} \\ &= \frac{2\Phi(1)}{2} = \Phi(1), \end{aligned}$$

wobei wir benutzt haben, dass  $1 - \Phi(2) = \Phi(1)$  gilt. Für  $N_t(2)/t$  verläuft der Beweis analog. □

### 3.3.3 Verallgemeinerung für $d$ größer als 2

Wir benutzen weiter das Update mit  $f(\mathbf{1}, \Phi, \gamma) = \gamma(\mathbf{1} - \Phi)$ . Es ergibt sich für die Gewichte

$$\log \theta_t(i) = N_t(i)(1 - \Phi(i)) - (t - N_t(i))\Phi(i) = N_t(i) - t\Phi(i).$$

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit können wir annehmen, dass  $\log \theta_0(i) = 0$ ,  $\forall i$ . Da in jedem Schritt nur in Abhängigkeit vom aktuellen  $X_t$  aktualisiert wird, ist  $(X_t, \log \theta_t)$  nach Definition eine Markov-Kette. Wir zeigen nun, dass  $(X_t, \log \theta_t)$   $\lambda$ -irreduzibel ist für ein sigma-endliches Maß  $\lambda$ . Für den Beweis brauchen wir zunächst noch die folgende technische Voraussetzung.

(A5) Die gewünschten Trefferhäufigkeiten sind rationale Zahlen:

$$\Phi = (\Phi(1), \dots, \Phi(d)) \in \mathbb{Q}^d$$

**Bemerkung:** Die Autoren von [12] gehen davon aus, dass die Voraussetzung nicht wirklich einen Einfluss auf die Konvergenz hat, sondern nur für den Beweis benötigt wird.

Dann können wir folgendes Lemma anwenden.

**Lemma 3.3.9.** Sei  $\Theta \subset \mathbb{R}^d$  definiert durch:

$$\Theta := \left\{ x \in \mathbb{R}^d \mid \exists (n_1, \dots, n_d) \in \mathbb{N}^d : z_i = n_i - \Phi(i)S_n, \text{ wobei } S_n = \sum_{j=1}^d n_j \right\}$$

Sei  $\lambda$  das Produktmaß aus Lebesguemaß auf  $\mathcal{X}$  und dem Zählmaß auf  $\Theta$ , dann ist  $(X_t, \log \theta_t)$   $\lambda$ -irreduzibel.

*Beweis von Lemma 3.3.9.* Sei  $\Theta \subset \mathbb{R}^d$  wie im Lemma definiert.  $\Theta$  enthält also die Werte die vom Prozess  $(\log \theta_t)$  erreicht werden können.  $\mu$  bezeichne das Lebesguemaß auf  $\mathcal{X}$  und sei  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ , so dass  $\mu(A) > 0$  und sei  $z^* \in \Theta$  beliebig. Wir möchten nun also zeigen, dass zu einem Zustand zum Zeitpunkt  $s$   $X_s = x_s, \log \theta_s = z_s$  mit Wahrscheinlichkeit größer als Null ein  $t > 0$  existiert, so dass  $X_{s+t} \in A$  und  $\log \theta_{s+t} = z^*$  gilt. Damit hätten wir dann die  $\lambda$ -Irreduzibilität gezeigt, wobei  $\lambda$  das Produktmaß vom Lebesguemaß auf  $\mathcal{X}$  und Zählmaß auf  $\Theta$  wäre. Sei  $n = (n_1, \dots, n_d) \in \mathbb{N}^d$  beliebig. Dann ist die Wahrscheinlichkeit, dass der Prozess  $(X_t)$  jeden Bereiche  $\mathcal{X}_i$  zwischen den Zeitpunkten  $s+1$  und  $s + \sum_{i=1}^d n_i$  genau  $n_i$  mal besucht größer als Null (wegen den positiven Vorschlagswahrscheinlichkeiten aus (A3)). Es gilt also mit  $S_n = \sum_{i=1}^d n_i$ , dass

$$\mathbb{P} \left[ \forall i \in [1 : d] : \sum_{t=s+1}^{s+S_n} \mathbf{1}_{\mathcal{X}_i}(X_t) = n_i \mid X_s, \log \theta_s \right] > 0$$

Weil  $\mu(A) > 0$  und weil  $(\mathcal{X}_i)_i$  eine Partition von  $\mathcal{X}$  ist (mit nicht leeren Bereichen nach (A1)), gibt es eine kleinere Menge  $B \subset A$  mit  $\mu(B) > 0$ , die ganz in einem Bereich liegt (also  $B \subset \mathcal{X}_{i^*}$  für  $i^* \in [1 : d]$ ). Wir benutzen nun folgendes Lemma, welches garantiert, dass es von jedem Punkt zu jedem Punkt aus  $\Theta$  einen „Pfad“ gibt. Den Beweis des Lemmas findet man im Appendix von [12].

**Lemma 3.3.10** (ohne Beweis, Lemma 8 aus [12]).

$$\forall z^{(1)}, z^{(2)} \in \Theta \exists n \in \mathbb{N}^d \forall i \in [1 : d] : z_i^{(1)} + n_i - \left( \sum_{j=1}^d n_j \right) \Phi_i = z_i^{(2)}$$

Nach Lemma 3.3.10 existiert nun ein Pfad, so dass die Kette von  $(x_s, z_s)$  nach  $(x_{s+t-1}, z_{s+t-1})$  kommen kann. Dabei kann  $z_{s+t-1}$  so gewählt werden, dass nach dem letzten Schritt  $(x_{s+t}, z_{s+t})$  gerade so ist, so dass  $x_{s+t} \in B$  und  $z_{s+t} = z^*$ . Es gibt also einen Weg und er hat positive Wahrscheinlichkeit, daher gilt die Behauptung.  $\square$

Nach Lemma 3.3.9 ist die Kette also  $\lambda$ -irreduzibel und somit konvergieren die Trefferwahrscheinlichkeiten für beliebige  $\lambda$ -messbare Menge aus  $\mathcal{X} \times \Theta$  gegen einen festen Wert aus  $[0, 1]$ . Insbesondere konvergieren die relativen Häufigkeiten  $N_t/t$  gegen einen Vektor  $(p_i)$ .

**Lemma 3.3.11.** Es gilt  $(p_i) = \Phi$ .

*Beweis.* Angenommen für einige  $i \in [1 : d]$  gilt  $p_i \neq \Phi(i)$ . Da die Summen von  $(p_i)$  und  $\Phi$  Eins ergeben, muss es somit auch  $i \in [1 : d]$  geben für die  $p_i < \Phi(i)$  gilt, Bereiche also, die weniger besucht werden, als gewünscht. Setze  $\{i_1, i_2, \dots\} = \operatorname{argmin}_{j \in [1:d]} (p_j - \Phi(j))$ . Für beliebiges  $i_k$  und  $j \notin \{i_1, i_2, \dots\}$  gilt nach der Definition von  $Z_t^{(j, i_k)}$  (siehe 3.3.1)

$$Z_t^{(j, i_k)} = -N_t(i_k) + N_t(j) + t(\Phi_{i_k} - \Phi_j) \sim t(-p_{i_k} + \Phi_{i_k} + p_j - \Phi_j) \rightarrow \infty$$

Somit gilt:

$$\forall K > 0 \exists T \in \mathbb{N} \forall t > T : Z_j^{(j, i_k)} > K \quad (3.19)$$

Analog zum Beweis im vorherigen Kapitel betrachten wir wieder die Inkremente  $U_t \in \{+a, -b\}$ , so dass

$$U_t = \begin{cases} -b & I(X_t) \in \{i_1, i_2, \dots\} \\ +a & \text{sonst} \end{cases}$$

Wähle  $\varepsilon > 0$ , so dass, falls  $X_t \notin \mathcal{X}_{i_1} \cup \mathcal{X}_{i_2} \cup \dots$ , dass dann der Vorschlag des Vorschlagskerns  $Q$  mit Wahrscheinlichkeit von mindestens  $\varepsilon$  in  $\mathcal{X}_{i_1} \cup \mathcal{X}_{i_2} \cup \dots$  liegt. Für groß genug  $K$  wird dieser Vorschlag dann immer akzeptiert (analog zu Vorgehen auf Seite 32). Genauso können wir auch die Wahrscheinlichkeit  $\eta$ , dass wir  $\mathcal{X}_{i_1} \cup \mathcal{X}_{i_2} \cup \dots$  wieder verlassen, so klein machen wie wir wollen (siehe ebenfalls Lemma 3.3.4). Wie im vorherigen Kapitel können wir  $U_t$  dann wieder durch eine Markov-Kette  $\tilde{U}_t$  abschätzen. Außerhalb von  $\mathcal{X}_{i_1} \cup \mathcal{X}_{i_2} \cup \dots$  nimmt  $(U_t)$  dann im Mittel ab, ebenso  $\left(Z_t^{(j, i_k)}\right)$ . Das wiederum widerspricht der Annahme (3.19). Somit gilt für alle  $i$ , dass  $p_i = \Phi(i)$  ist.  $\square$

## 4 Anwendung auf Optimierungsprobleme und Ausblick

Wie bereits in Kapitel 2 erwähnt, ist der Wang-Landau-Algorithmus eher aus der Not heraus in der statistischen Physik entwickelt worden. Allerdings ist das gleichverteilte Simulieren komplexer Verteilungen auch in anderen Bereichen der angewandten Mathematik von Nöten. In [6] wird der Algorithmus auf verschiedene (diskrete) Optimierungsprobleme angewandt. Darunter sind beschränkte Parameter-Optimierungsprobleme, aber auch das Problem des Handlungsreisenden.

In diesem Kapitel wollen wir zunächst erläutern, warum sich der Wang-Landau-Algorithmus gut auf diese Probleme anwenden lässt. Dann versuchen wir festzustellen, welche theoretischen Erkenntnisse wie verallgemeinert werden müssten, um auf übliche Optimierungsprobleme anwendbar zu sein. Und schließlich stellen wir unsere Ergebnisse einer Anwendung auf ein konkretes Optimierungsproblem (dem *Rucksackproblem*) vor.

### 4.1 Optimierungsprobleme und gleichmäßiges Generieren von Stichproben

Wir definieren zunächst die Art von Problemen, die wir betrachten wollen.

**Definition 4.1.1.** Ein *beschränktes Optimierungsproblem* (engl. *constraint optimization problem*) auf einem Zustandsraum  $\Omega$  besteht aus

- einer zu minimierenden/maximierenden Kostenfunktion  $E : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$
- Nebenbedingungen, so dass für zulässige Lösungen  $x \in \Omega$  gilt:

$$\begin{aligned} g_i(x) &\leq 0, & i = 1, \dots, q \\ h_i(x) &= 0, & i = q + 1, \dots, m \end{aligned}$$

**Bemerkung:** Es gibt verschiedene Abstufungen über die Komplexität des Problems, je nachdem, ob die Funktionen  $g_i, h_i$  linear, nichtlinear, stetig oder nicht stetig sind. Prinzipiell lassen wir aber alle sinnvollen Funktionen  $g_i, h_i$  zu.

Für viele relevante Kostenfunktion und Nebenbedingungen ist ein solches Problem NP-vollständig und somit deterministisch nicht effizient zu lösen. Deshalb geht man auch hier oft zu randomisierten Approximationen über, insbesondere auch MCMC-Verfahren. In folgendem Beispiel wird das Rucksackproblem erläutert.

**Beispiel 4.1.2** (Rucksackproblem). Sei eine endliche Menge  $U$  von  $N$  Objekten gegeben. Ordne jedem Element ein Gewicht  $w : U \rightarrow \mathbb{R}$  und einen Wert  $v : U \rightarrow \mathbb{R}$  zu. Sei außerdem eine Schranke  $B \in \mathbb{R}$  gegeben. Gesucht ist  $K \subseteq U$ , so dass

$$\sum_{u \in K} w(u) \leq B \text{ und } H(u) := \sum_{u \in K} v(u) \text{ maximal}$$

$(U, w, v, B)$  nennen wir eine Instanz des **Rucksackproblems**. Nun konstruieren wir eine Markov-Kette auf dem Raum der zulässigen  $K \subseteq U$ . Definiere  $Z^{(t)} = (z_1^{(t)}, \dots, z_N^{(t)}) \in$

$\{0, 1\}^N$  mit

$$z_i = 1 \Leftrightarrow \text{packe } i\text{-tes Objekt in Rucksack}$$

Definiere einen Schritt  $t \rightarrow t + 1$  der Markov-Kette wie folgt:

1. Wähle  $I \sim \text{Unif}([1 : d])$
2. Setze  $\bar{Z} = (z_1^{(t)}, \dots, z_{I-1}^{(t)}, 1 - z_I^{(t)}, z_{I+1}^{(t)}, \dots, z_N^{(t)})$
3. Falls  $\bar{Z}$  gültige Lösung ist, setze  $Z^{(t+1)} = \bar{Z}$ , sonst setze  $Z^{(t+1)} = Z^{(t)}$

Iteriert man die definierte Markov-Kette und merkt sich jeweils den aktuell maximalen Wert eines zulässigen Rucksacks, erhält man einen stochastischen Approximationsalgorithmus, ein MCMC-Verfahren.

Analog zum Ising-Modell in der statischen Physik, kann man mit einem solchen Verfahren zwar auf lange Sicht die optimale Lösung finden, die Varianz des Schätzers, bzw. die Laufzeit sind aber wahrscheinlich sehr hoch. Anschaulich lässt sich diese Tatsache folgendermaßen veranschaulichen. Befindet sich die Markov-Kette gerade in einem Zustand, bei dem viele, leichte und günstige Objekte mit in den Rucksack gepackt werden, können andere schwere Objekte nicht mehr dazugepackt werden, ohne das Maximalgewicht zu überschreiten. Dabei könnte eventuell gerade ein solcher Rucksack, der wenige schwere Objekte beinhaltet den Wert maximieren, und umgekehrt. Die Wahrscheinlichkeit in einem, eventuell minder guten Pfad zu bleiben sind sehr hoch. Mit anderen Worten: Wenn ich mich einmal schon auf eine Menge von gewissen Objekten in meinem Rucksack festgelegt habe, wird es exponentiell unwahrscheinlich, das Maximum, welches vielleicht in einem ganz anderen Pfad liegt, zu finden.

Um diese Hindernisse zu überwinden und eine (Markov-)Kette gleichmäßig auf dem Wertebereich des Rucksacks laufen zu lassen, eignet sich der Wang-Landau-Algorithmus und andere adaptive Verfahren. Die Funktion  $H(x)$  dient dazu als „Energiefunktion“. Wir teilen den möglichen Wertebereich des Rucksacks in Bereiche auf und benutzen den Wang-Landau-Algorithmus zum generieren der Stichproben. Der Algorithmus wird versuchen alle Bereiche gleich oft zu besuchen und damit auch die Bereiche mit extremen Werten zumindest häufiger besuchen, als die „normale“ Markov-Kette. Somit können wir hoffen den optimalen Rucksack schneller zu finden.

Als Nebenprodukt erhält man zudem eine Näherung der Zustandsdichte des Problems. Sie eignet sich um mehr über die Natur des Problems zu lernen und zum Beispiel seine genetischen Algorithmen dementsprechend anzupassen. (siehe [11]).

## 4.2 Weiterführende Ideen und FPRAS

Im Folgenden sollen noch einige Ideen für die Zukunft vorgeschlagen werden. Diese entstammen vom Autor der Arbeit und keiner Sekundärquelle. Sie sind nur als grundsätzliche Überlegungen und keinesfalls als Fakten gedacht.

Wir definieren zunächst eine besondere Klasse von randomisierten Approximationsalgorithmen.

**Definition 4.2.1.** Seien  $\varepsilon, \delta > 0$  gegeben, dann heißt eine Zufallsvariable  $Y \in H(\Omega)$  eine  $(\varepsilon, \delta)$ -**Approximation** einer Konstanten  $C$ , falls

$$\mathbb{P}[|Y - C| \geq \varepsilon C] \leq \delta$$

**Definition 4.2.2.** Ein Algorithmus ist ein **fully polynomial randomized approximation scheme (FPRAS)** für  $H$ , falls er für jedes Tripel  $(\varepsilon, \delta, x)$  mit  $\varepsilon, \delta > 0$  eine  $(\varepsilon, \delta)$ -Approximation  $Y$  von  $H(x)$  zurückgibt und der Algorithmus polynomielle Laufzeit in  $1/\varepsilon$ ,  $\log(1/\delta)$  und  $|x|$  hat.

Aufgrund der Natur des Wang-Landau-Algorithmus als gleichmäßig simulierender Algorithmus, besteht nun eventuell die Hoffnung, in Zukunft mit Hilfe des Algorithmus FPRAS für eine größere Menge von Problemen zu konstruieren. Da die Gewichte des Wang-Landau-Algorithmus gegen die tatsächlichen Trefferwahrscheinlichkeiten der Bereiche konvergieren, verhält sich der Algorithmus nach einiger Zeit ähnlich wie das *Multicanonical sampling*, welches in Kapitel 1.4.1 angedeutet wurde. Bei diesem Verfahren verwendet man allerdings einfach eine Markov-Kette mit Metropolis-Hastings-Übergangskern. Für Markov-Ketten mit exponentiellen Zustandsraum kann gezeigt werden, dass sie sich exponentiell schnell ihrer stationären Verteilung annähern - relativ zur Eingabegröße (siehe [17]). Es ist also nicht völlig abwegig, dies auch für eine WL-Kette zu vermuten. Wenn aber die stationäre Verteilung, wie in unserem Fall, ein gleichmäßiges Besuchen der Energie-/Konstenniveaus bedeutet, können wir darauf hoffen auch bestimmte extreme Kostenwerte häufig zu erreichen.

Formaler gilt: Sei  $\Omega$  ein endlicher Zustandsraum mit  $\log |\Omega| = O(n)$  für eine Eingabegröße  $n$ . Sei  $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  eine Kosten-/Nutzen-/Energiefunktion. Dann gilt  $|H(\Omega)| \leq |\Omega|$ . Es kann also maximal so viele Energieniveaus geben, wie ursprüngliche Zustände. Sei nun ein Prozess gleichverteilt auf dem Bild von  $H$ :  $X_t \sim \text{Unif}(H(\Omega))$ . Sei das Optimum, also die Lösung des Optimierungsproblems, gegeben durch  $h^* = \max_{x \in \Omega} H(x)$  bzw.  $h^* = \min_{x \in \Omega} H(x)$ . Sei  $T^* = \inf\{t > 0 | X_t = h^*\}$ . Die Wartezeit bis  $(X_t)$  das Optimum zum ersten Mal trifft ist dann geometrisch verteilt, also  $T \sim \text{Geo}(\bar{p})$ , wobei  $\bar{p} = \frac{1}{|H(\Omega)|}$ . Mit exponentieller Konvergenz der Kette gegen die stationäre Verteilung und exponentiell abfallender Wahrscheinlichkeit für hohe Wartezeiten (aufgrund der geometrischen Verteilung) liefert der WL-Algorithmus dann eventuell tatsächlich eine  $(\varepsilon, \delta)$ -Approximation in polynomieller Zeit bezüglich der Eingabegröße.

Wie bei vielen interessanten Aussagen basieren solche Vermutungen allerdings auf schnellen Mischzeiten der WL-Kette, für die es zur Zeit noch keine allgemeingültigen, theoretischen Beweise gibt. Für stark vereinfachte Beispiele (siehe [9, Kapitel 4]) lassen sich solche Aussagen allerdings zeigen. Zudem müssten einige Annahmen abgeschwächt werden, da z.B. viele nützliche Vorschlagskerne nicht für jedes Zustandspaar positive, nach unten beschränkte Wahrscheinlichkeiten haben (siehe (A2\*) und (A3)).

### 4.3 Anwendung auf das Rucksackproblem

Im Zuge dieser Arbeit wurde der Wang-Landau-Algorithmus auf besagtes Rucksackproblem aus Beispiel 4.1.2 angewandt. Dabei werden nur die Ergebnisse für die einfache Markov-Kette aus Beispiel 4.1.2 und die WL-Kette verglichen. Eigentlich müssten natürlich bessere Verfahren wie *Simulated Annealing* oder *Genetische Algorithmen* als Vergleich herangezogen werden, aber es sollten nur ganz allgemeinen die Vorteile des WL-Verfahrens veranschaulicht werden. Auf den Abbildungen der nächsten Seiten finden sich die Verläufe beider Ketten. Zudem wurde jeweils die Zustandsdichte bestimmt und visualisiert. Der Quellcode des Programms [C++] ist unter [1] zu finden.

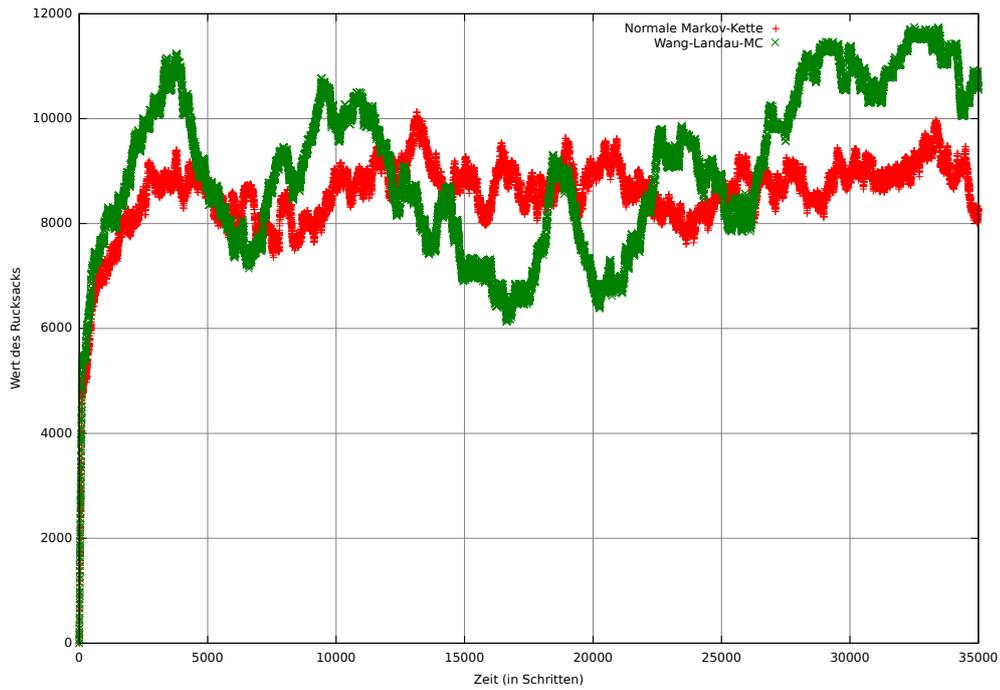


Abbildung 4.1: Verlauf der Rucksackwerte von (1) der in Beispiel 4.1.2 beschriebenen MK (2) einer Wang-Landau-MC. Es ist deutlich am stärkeren Ausschlag zu erkennen, dass der WL-Algorithmus den Zustandsraum gleichmäßiger abläuft. Die Gewichte wurden uniform aus  $[0, 200]$  gewählt, die Werte aus  $[0, 100]$  und das maximale Gewicht  $B = 10000$ .

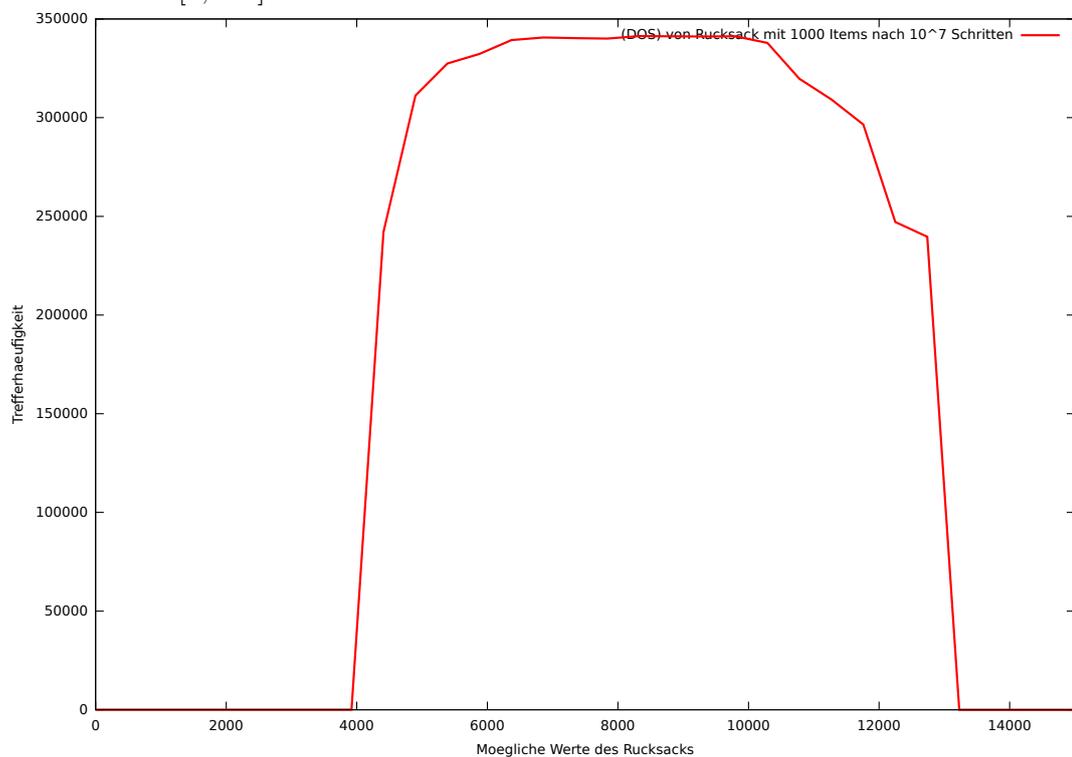


Abbildung 4.2: Zustandsdichte (DOS) eines Rucksacks mit 1000 Objekten. Der Verlauf ist typisch für diese Art von beschränkten Optimierungsproblemen (vgl. Abbildungen in [6]).

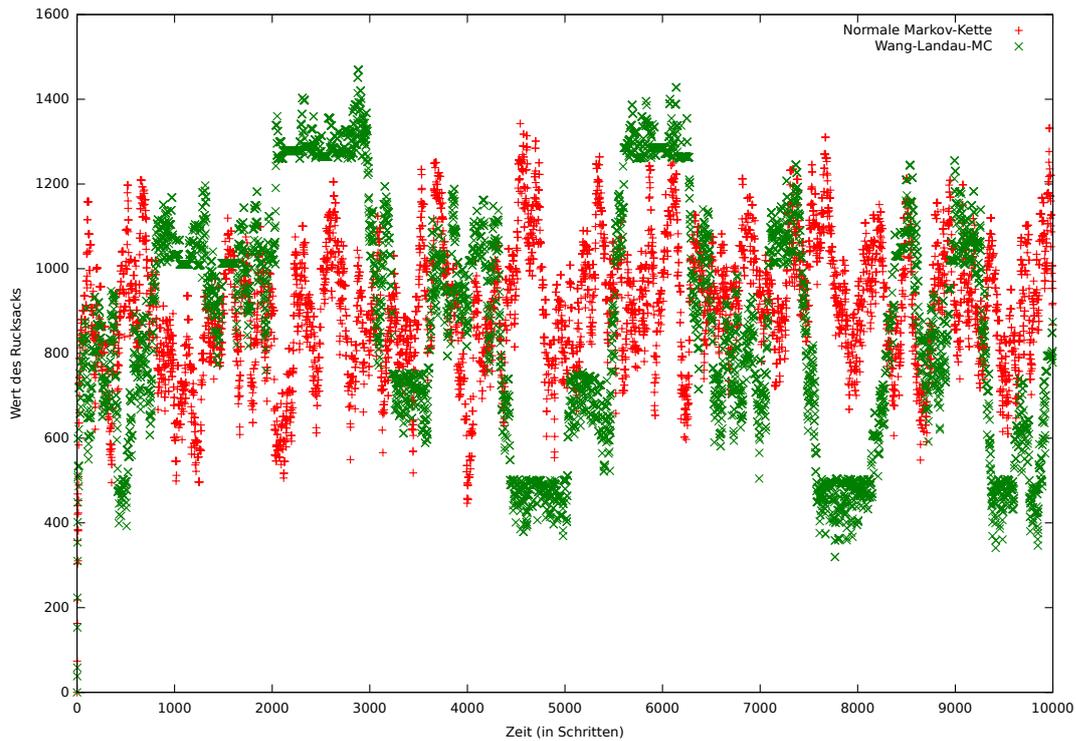


Abbildung 4.3: Verlauf der Werte für einen Rucksack mit 100 Objekten. Es wird besonders gut deutlich, dass die Stichproben innerhalb eines Bereich bezüglich  $\pi$  verteilt sind. Für hohe/tiefe Bereiche liegen die Werte eher am unteren/oberen Rand der Bereiche. Die Gewichte wurden  $w(i), v(i) \sim Unif[0, 100]$  gewählt und das maximale Gewicht  $B = 100$ .

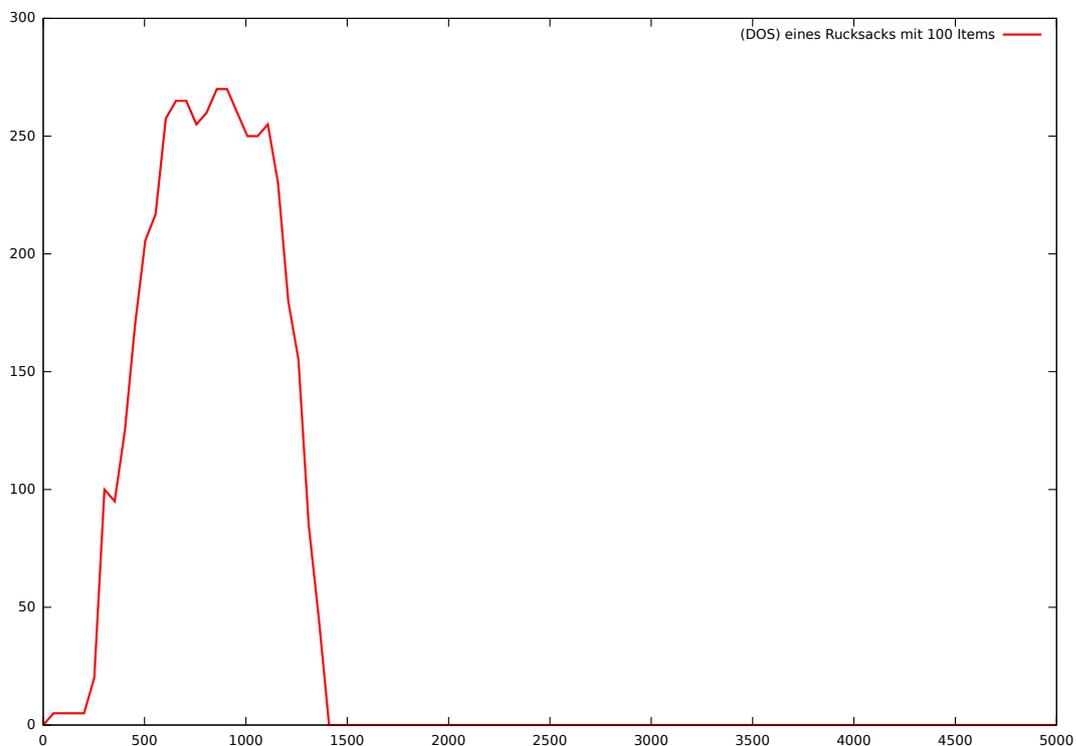


Abbildung 4.4: Zustandsdichte (DOS) eines Rucksacks mit 100 Objekten. Sowohl Werte als auch Gewichte wurden uniform aus  $[0, 100]$  gewählt und das maximale Gewicht  $B = 100$ .

# Literaturverzeichnis

- [1] <http://bcabrera.de/bachelorarbeit/code.zip>.
- [2] [http://de.wikipedia.org/wiki/abelsche\\_partielle\\_summation](http://de.wikipedia.org/wiki/abelsche_partielle_summation) (29th of july 2013).
- [3] [http://en.wikipedia.org/wiki/multicanonical\\_ensemble](http://en.wikipedia.org/wiki/multicanonical_ensemble) (29th of july 2013).
- [4] <http://www.math24.net/method-of-lyapunov-functions.html> (29th of july 2013).
- [5] C. Andrieu, E. Moulines, and P. Priouret. Stability of stochastic approximation under verifiable conditions, 2003.
- [6] M. Argollo de Menezes and A.R. Lima. Using entropy-based methods to study general constrained parameter optimization problems. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 323(0):428 – 434, 2003.
- [7] David J. Earl and Michael W. Deema. Parallel tempering: Theory, applications, and new perspectives. 2005.
- [8] G. Fort, E. Moulines, and P. Priouret. Convergence of adaptive and interacting markov chain monte carlo algorithms. 2012.
- [9] Gersende Fort, Benjamin Jourdain, Estelle Kuhn, Tony Lelièvre, and Gabriel Stoltz. Convergence and efficiency of the wang-landau algorithm. 2012.
- [10] P. Hall and P.P. Heyde. Martingale limit theory and its applications. 1980.
- [11] Torsten Asselmeyer Helge Rose, Werner Ebeling. The density of states - a measure of the difficulty of optimisation problems. 1996.
- [12] Pierre E. Jacob and Robin J. Ryder. The wang-landau algorithm reaches the flat histogram criterion in finite time. 2011.
- [13] A. Johnson. Geometric ergodicity of gibbs samplers. 2009.
- [14] W.S. Kendall and G. Montana. Small sets and markov transition densities. 2002.
- [15] S. C. Kou, Qing Zhou, and Wing Hung Wong. Equi-energy sampler with applications in statistical inference and statistical mechanics. 2006.
- [16] S. Meyn and R.L. Tweedie. Markov chains and stochastic stability. 2009.
- [17] Jin Teng, Boying Zhang, and Dong Xuan. Markov chains with stationary distribution and exponential state space are rapidly mixing. 2011.
- [18] Fugao Wang and D. P. Landau. An efficient, multiple range random walk algorithm to calculate the density of states. 2000.
- [19] D. Williams. Probability with martingales. 1991.

## Ehrenwörtliche Erklärung

Hiermit versichere ich, diese Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen benutzt zu haben. Wörtliche und sinngemäße Zitate sind kenntlich gemacht.

Bonn, den 29. Juli 2013

Benjamin Cabrera