Einleitung

Simulated annealing - Algorithmen dienen dem Auffinden des Minimums einer Funktion U, die auf einer großen, aber endlichen Menge A definiert ist. Diese Algorithmen kann man mit Algorithmen vergleichen, die in jedem Schritt versuchen, einen niedrigeren Funktionswert zu erreichen (sog. gradient descent - Algorithmen). Der Hauptnachteil von gradient descent - Algorithmen ist, daß sie zu einem lokalen Minimum konvergieren können, das nicht das Globale ist.
Die Idee des simulated annealing besteht nun darin, zu einem gradient descent - Algorithmus kleine, zufällige Störungen hinzuzufügen. Diese zufälligen Störungen sollten einerseits groß genug gewählt werden, um lokale Minima instabil zu machen, andererseits aber sollten die Störungen auch bis zu ihrem Verschwinden abnehmen, damit sich der Prozeß dem globalen Minimum mehr und mehr annähert. In diesem Widerspruch liegt die Schwierigkeit dieser Methode.
Vom mathematischen Standpunkt aus kann ein simulated annealing - Prozeß als ein zeitinhomogener Markov - Prozeß beschrieben werden.
Zeitinhomogene Markov - Prozesse (auch nichtstationäre Markov - Prozesse genannt) haben in den letzten Jahren wachsendes Interesse erregt (Seneta [28] , Gidas [18], Catoni [4]) und haben dies auch schon früher getan (Dobruschin [11], Iosifescu und Theodorescu [27]).
Weitverbreitet ist simulated annealing in der statistischen Physik und der Quantenfeldtheorie, etwa zur Simulation und Untersuchung von Spin - Gläsern (einen methodischen Überblick findet man z.B. in Sokal [29] und Goodman und Sokal [20]). Große Aufmerksamkeit wurde dem simulated annealing ebenfalls zuteil im Zusammenhang mit kombinatorischen Problemen, etwa dem traveling salesman Problem, und in der Bildrekonstruktion (S. und D. Geman [17], Götze [19]) oder auch in mehr theoretischer Hinsicht (Holley und Stroock [25], Holley, Kusuoka und Stroock [24], Hajek [21], Chiang und Chow [5], [6]).
Die hier angegebene Literatur ist angesichts der Fülle und des raschen Wachstums der Literatur zu diesem Thema sicherlich nicht vollständig und soll auch nur Aufzählung der wichtigsten Arbeiten sein.

Wir wollen die Konvergenzrate eines Algorithmus zur Bildrekonstruktion schätzen, der dem in der Physik gebräuchlichen Fortuin - Kasteleyn - Swendsen - Wang (FKSW -) Algorithmus ([31], [29] S.43 ff) ähnelt.

Der FKSW - Algorithmus wurde von Swendsen und Wang [31] auf der Grundlage einer von Fortuin und Kasteleyn (vgl. [12]) gefundenen Beziehung zwischen dem Potts - Modell und dem random cluster - Modell entwickelt und u.a. von Edwards und Sokal [12] für Monte Carlo - Simulationen verallgemeinert.
Bei der Computersimulation von Phasenübergängen in Spinmodellen trat mit den

üblichen, in jedem Schritt einen Spin ändernden Algorithmen sog. 'critical slowing down' auf, das wir nach [29] beschreiben wollen (dort oder in [34] findet man weitere Einzelheiten).
Sei $U_\beta = \{U_\beta(x)\}_{x \in S}$ eine reellwertige, von einem Parameter β abhängige Funktion, die auf einem Zustandsraum X definiert ist. Wir betrachten eine stationäre Markov - Kette $(Y_t)_t$. Dann ist $\{U_t\} = \{U_\beta(Y_t)\}$ ein stationärer stochastischer Prozeß. Die Varianz des Stichprobenmittels $\bar{U}_\beta$ einer Monte Carlo - Simulation ist von der Größenordnung $2\tau_{int,U_\beta}$, größer als bei Simulationen mit unabhängigen Stichproben, wobei τ_{int,U_β} die sog. Autokorrelationszeit ist. Die Effizienz eines Algorithmus ist bestimmt durch seine Autokorrelationszeit τ_{int,U_β}.
Als critical slowing down bezeichnet man die Tatsache, daß τ_{int,U_β} in der Nähe eines kritischen Parameters β_c stark anwachsen kann. Ein Maß für den Grad des Wachstums ist der Autokorrelationsexponent a, der durch die Beziehung $\tau_{int,U_\beta} \sim |\beta - \beta_c|^{-a}$ definiert ist.
Anhand von Simulationen berechneten und verglichen Edwards und Sokal [12] Autokorrelationszeiten verschiedener Algorithmen. Ähnliches für Simulationen nach der Monte Carlo - Methode in der Quantenfeldtheorie findet man in Wolf [34].

Critical slowing down ergibt sich auch bei Simulationen in der Bildrekonstruktion, wenn Fehler lokal gehäuft auftreten oder mehrere globale Minima existieren. Beide Phänomene wirken sich auch in den theoretischen Analysen der üblichen annealing - Algorithmen in der Bildrekonstruktion stark laufzeitverlängernd aus ([19]).

Daher liegt es nahe, den FKSW - Algorithmus auch für die Bildrekonstruktion zu verwenden und zu untersuchen.

Wir betrachten die Menge B aller möglichen Färbungen eines n x n - Bildes in a Farben ($n, a \in \mathbb{N}$) und definieren hierauf eine Energiefunktion U. Wir erweitern jedes Element von B um eine Menge von Kanten zwischen Bildpunkten. Hierdurch ergibt sich eine Erweiterung der Menge A der Färbungen zu einer Menge X von gefärbten Graphen. Die Energiefunktion U läßt sich in geeigneter Weise auf die Elemente von X ausdehnen.
Der FKSW - Algorithmus ist in [31] und [29] als zweistufiger Algorithmus definiert. Abwechselnd werden (in Abhängigkeit von der vorgefundenen Färbung) Kanten gesetzt und (in Abhängigkeit von der vorgefundenen Kantenstruktur) Komponenten umgefärbt, wobei die Färbungen der Komponenten der gefärbten Graphen aus X ohne Wechselwirkungen mit anderen Komponenten erfolgen. Dem entsprechen zwei Prozesse, ein Kantenprozeß und ein Färbeprozeß, die miteinander gekoppelt sind. Diese wären mathematisch nur schwer zu untersuchen.
Wir haben daher einen Prozeß konstruiert, der sowohl Kanten setzen, als auch Umfärbungen vornehmen kann, wobei eine der oben erwähnten Unabhängigkeit der Wahl der Färbung der einzelnen Komponenten entsprechende Eigenschaft gilt. Es stellte sich heraus, daß dies nach einem allgemeinen Konstruktionsverfahren möglich ist (vgl. Bemerkung 2.4). Dieser Prozeß besitzt die stationäre Verteilung, die von Swendsen und Wang [31] angegeben wurde, und konvergiert gegen eine Irrfahrt auf einer Teilmenge von X, die mit der Menge aller Zustände aus B mit minimaler Energie vergleichbar ist.