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.

Wir schätzen die Konvergenzrate dieses Prozesses ab.

Hierzu benötigen wir Spektrumsabschätzungen für eine vom untersuchten Prozeß abhängige Dirichletform. Diese entwickeln wir in Kapitel 1.
Wir stellen zwei verschiedene Schranken vor. Zunächst zitieren wir eine (geometrische) Schranke, die auf Poincaré zurückgeht und die sich als recht gut erwiesen hat (vgl [9], [14]) und die daher häufig benützt wird ([19], [25] und Lit. in [9]). Diese werden wir in Kapitel 2 verwenden. Die Qualität der Poincaré - Schranke ist jedoch von der günstigen Wahl eines Pfadsystems in dem vom Prozeß bestimmten Verbindungsgraphen der Elemente aus X abhängig.
Im Hauptteil dieses Kapitels beschäftigen wir uns jedoch mit der Entwicklung einer neuen, analytischen Schranke, die in der Regel schlechter als die Poincaré - Schranke ist, aber nicht auf der Wahl eines Pfadsystems beruht. Wir zeigen hierzu auf kombinatorische Weise die logarithmische Konkavität der Koeffizienten eines mit den Übergangswahrscheinlichkeiten des Prozesses assoziierten Polynoms und leiten aus dieser an sich schon interessanten Tatsache eine Schranke her. Diese Schranke wenden wir in Kapitel 4 an.

In Kapitel 2 definieren wir den Prozeß und zeigen allgemeingültige Aussagen über die Konvergenzrate dieses simulated annealing - Prozesses unter Verwendung der Poincaré - Schranke aus Kapitel 1. Weiter berechnen wir die Größenordnung der Konvergenzrate in Abhängigkeit von der Laufzeit t, falls t größer als eine Relaxationszeit t_0 ist, und vergleichen diese mit den Ergebnissen von Catoni [4] über die (theoretisch) mit den üblichen simulated annealing - Prozessen erzielbare Rate.
Unsere Untersuchung beschränkt sich auf einige, für Anwendungen in der Bildrekonstruktion typische Klassen von Funktionen U, da die Definition der (zeitabhängigen) stationären Verteilung des Prozesses einen von den Wechselwirkungen der Bildpunkte abhängigen Energieanteil benötigt. Dieser Anteil ist ein Maß für die Glattheit bzw. Diskontinuität des Bildes, er ist klein, wenn nur wenige Farbwechsel im Bild vorhanden sind. Zu diesem Anteil haben wir einen von einem Parameter ϵ und einem beobachteten Bild $b \in X$ abhängigen Anteil ϵR_b hinzuaddiert. In der Bildrekonstruktion startet man von einem beobachteten, gestörten Bild und möchte mittels des oben genannten Wechselwirkungsanteils zu einem Zustand kleinster Energie gelangen, der nicht zu weit vom ursprünglichen Bild entfernt ist. Hierzu wird der Abstand zum beobachteten Bild ϵR_b mit in die Energiefunktion U einbezogen.
Statistisch entspricht dieses Vorgehen der Bestimmung eines Maximum likelihood aposteriori Schätzers bezüglich eines statistischen Modells für die Störungen (der Term ϵR_b) unter der Annahme einer apriori Verteilung (welche Bilder mit wenig Diskontinuität bevorzugt) für die Bildmodellparameter.
Die in diesem Kapitel erzielten Ergebnisse sind jedoch nicht von der speziellen Wahl des Anteils ϵR_b abhängig und gelten auch für beliebige (nichtnegative) Funktionen auf der Menge der Bilder B, da nur die maximale Größe, nicht die Gestalt von ϵR_b in die Abschätzungen eingeht.

In Kapitel 3 wenden wir die allgemeingültigen Aussagen aus Kapitel 2 in der Bildrekonstruktion an.

Für die vom beobachteten Bild unabhängige Energiefunktion U konnten wir die in Simulationen erzielte, gute Konvergenzrate bis zum Energieminimum bestätigen. Insbesondere konnten wir zeigen, daß die Relaxationszeit t_0 nur polynomiell, nicht exponentiell, von der Zahl der Pixel N abhängt. Die für die Analyse der üblichen simulated annealing - Algorithmen notwendige Bedingung der Eindeutigkeit des Energieminimums (vgl. [19]) konnte hierbei fallengelassen werden.
Weiter konnten wir für die vom beobachteten Bild abhängige Energiefunktion U (mit mehreren Minima) diese Polynomialität der Relaxationszeit nur bis zu einem bestimmten Energieniveau, nicht bis zum Energieminimum, nachweisen. Für niedrigere Energieniveaus schätzen wir damit die Relaxationszeit (nach oben) als exponentiell ab. Dies ist aber die Größenordnung für das serielle Suchen durch alle derartigen Bilder und damit trivial.
Wir vermuten und werden hierbei durch Simulationen von Besag bestätigt, daß dies in diesem Fall auch für den FKSW - Algorithmus die richtige Größenordnung ist, also keine Verbesserung gegenüber anderen simulated annealing - Algorithmen erzielt wird.

In Kapitel 4 schließlich untersuchen wir Prozesse, die eine lokal inhomogene Energiefunktion U minimieren. Für solche Energiefunktionen U ist die Poincaréschranke nur schlecht anwendbar, da die Wahl des Pfadsystems sehr schwierig ist. Mit unserer neuen, analytischen Schranke konnten wir jedoch zu Aussagen über die Konvergenzrate und die Abhängigkeit von der Laufzeit $t > t_0$ gelangen. Die erzielten Ergebnisse werden mit denen in Kapitel 2 und Catoni [4] verglichen.

Abschließend möchte ich Herrn Prof. Dr. Friedrich Götze für die Betreuung dieser Arbeit und seine mir stets gewährte Unterstützung und Hilfe herzlich danken.
Mein Dank gilt auch der Deutschen Forschungsgemeinschaft und dem Graduiertenkolleg Mathematik an der Universität Bielefeld für ihre finanzielle Unterstützung, die mir diese Arbeit ermöglicht hat.

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Schranken für Eigenwerte von Markov - Prozessen

In diesem Kapitel entwickeln wir Schranken für den zweitgrößten Eigenwert und die Spektrumslücke einer stochastischen Matrix, die von der Struktur eines mit der Matrix assoziierten Graphen abhängen.
Spektrumsschranken, die auf einfach zu berechnenden Größen wie geometrischen Eigenschaften assoziierter Graphen oder einzelnen Matrixeinträgen beruhen, gibt es schon sehr lange (vgl. die zitierte Literatur in [3]).
Anders als in der Numerik steht dabei nicht die möglichst gute Näherung einzelner Eigenwerte im Vordergrund, sondern einfache Handhabbarkeit und möglichst große Allgemeingültigkeit.
Spektrumsschranken, die auf einzelnen Matrixeinträgen beruhen, wurden wohl erstmals von Brauer [3] systematisch untersucht, einen Überblick und Diskussion von geometrischen Spektrumsschranken, die auf Ungleichungen des auf Poincaré zurückgehenden Sobolev - Typs oder des auf Cheeger zurückgehenden Hölder - Typs beruhen, findet man für reversible Markov - Ketten bei Diaconis und Stroock [9] und für nicht reversible Markov - Ketten bei Fill [14].
In diesem Kapitel werden wir zunächst eine Spektrumsabschätzung vom Sobolev - Typ zitieren, die wir in Kapitel 2 benötigen.
Der Großteil dieses Kapitels nimmt jedoch die Entwicklung einer neuartigen Schranke ein. Hierbei wird eine schon länger bekannte Darstellung des charakteristischen Polynoms (einer Modifikation) einer stochastischen Matrix in Abhängigkeit von den gerichteten Teilgraphen des assoziierten Graphen benützt, um auf kombinatorischem Wege die logarithmische Konkavität der Koeffizienten des charakteristischen Polynoms zu zeigen. Aus diesem an sich schon interessanten Ergebnis folgt dann direkt eine Spektrumsschranke.

Notation 1.1 *Sei $X = \{1, ..., n\}$ eine endliche Teilmenge von $\mathbb{N}$.*
Sei $Q = (q(x,y))_{x,y \in X}$ die Übergangsmatrix einer irreduziblen Markovkette.
Sei Q reversibel bezüglich einer Verteilung π, d.h. es gelte

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

für alle $x, y \in X$.
G bezeichne den Graphen mit Knotenmenge X, dessen Kanten durch die Beziehung $(x,y) \in G \Leftrightarrow q(x,y) > 0$ bestimmt sind.

Seien $1 > \mu_1 \geq ... \geq \mu_n$ die Eigenwerte von Q, $\lambda_i = 1 - \mu_i$ $(i = 1, ...n)$ die Eigenwerte von $L := I - Q$.

Bemerkung 1.2 *Die Reversibilität von Q bezüglich π impliziert insbesondere, daß π die stationäre Verteilung von Q ist und (wegen der Irreduzibilität) $\pi(x) > 0$ für alle $x \in X$ gilt.*
Äquivalent hierzu kann man sagen, daß der durch

$$[Q\Phi](x) = \sum_{y \in X} q(x,y)\Phi(y) \ , \quad x \in X,$$

gegebene Operator Q eine selbstadjungierte Kontraktion auf $L^2(\pi)$ ist.
Dieses Q besitzt den größten Eigenwert 1, und wegen der Irreduzibilität sind die konstanten Funktionen die einzigen Eigenfunktionen zum Eigenwert 1.
Die klassische Minimax - Charakterisierung der Eigenwerte (vgl. [26]) ergibt

$$\lambda_1 = \inf \left\{ \frac{\mathcal{E}(\phi,\phi)}{Var(\phi)} : \phi \text{ nicht konstant} \right\},$$

wobei $Var(\phi)$ die Varianz von ϕ bez. π bezeichnet, und

$$\mathcal{E}(\phi,\phi) := \frac{1}{2}\sum_{x,y}(\phi(y) - \phi(x))^2 \alpha(x,y)$$

leicht als die quadratische Form $\phi \to (\phi, L\phi)_{L^2(\pi)}$ identifiziert werden kann, die von L auf $L^2(\pi)$ bestimmt wird. Quadratische Formen, die von Operatoren wie L , die eine Markov Semigruppe erzeugen, bestimmt werden, werden Dirichletformen genannt. Die klassische Dirichletform ist

$$\phi \mapsto \int_R |\nabla\phi(x)|^2 dx \ ,$$

wobei R ein Gebiet in $\mathbb{R}^n$ ist. Die quadratische Form $\mathcal{E}(\phi,\phi)$ ist gerade eine diskrete Version dieser klassischen Form.

Wir zitieren nun (nach [19] S. 8 f) eine Spektrumsabschätzung der Dirichletform $\mathcal{E}(\phi,\phi)$, die wir in Kap. 2 verwenden wollen.

Definition 1.3 *Sei $V \subseteq X$.*
Sei ∂V die Menge aller Knoten aus V^c, die durch Kanten von G mit Knoten aus V verbunden sind.
Sei Γ_V die Menge der Kanten in G, die mit Knoten aus V verbunden sind, und G_V der Teilgraph $(V \cup \partial V, \Gamma_V)$ von G.
Wir betrachten Mengen $\zeta := \{\gamma_x : x \in V\}$ gerichteter Pfade $\gamma_x := (x_0, x_1, ..., x_k)$ in Γ_V , die $x = x_0 \in V$ mit $x_k \in \partial V$ verbinden.
Sei $\mathcal{T}_V$ die Familie aller solcher Mengen ζ von Pfaden.
Wir definieren

$$\mathcal{K} := \min_{\zeta \in \mathcal{T}_V} \max_{(x,y) \in G_V} \alpha(x,y)^{-1} \sum_z |\gamma_z| \ I((x,y) \in \gamma_z) \ \pi(z) \ .$$

Bemerkung 1.4 *Die Größe $\mathcal{K}$ ist klein, wenn die Pfade in G so gewählt werden können, daß keine Kante zu häufig Teil eines Pfades ist. Dagegen ist $\mathcal{K}$ groß, wenn einige wenige Kanten in sehr vielen Pfaden enthalten sind, welches Pfadsystem auch immer man wählt. $\mathcal{K}$ ist also ein Maß für „Flaschenhälse" in G.*
In der Regel kann man $\mathcal{K}$ nicht exakt bestimmen, d.h. über alle $\zeta \in \mathcal{T}_V$ minimieren. Man begnügt sich mit einer möglichst guten, oberen Abschätzung, indem man ein möglichst günstiges Pfadsystem ζ sucht. Für diese Abschätzung gilt Lemma 1.5 dann natürlich auch.

Lemma 1.5 (nach [19]) *Es gilt*

$$\inf \left\{ \frac{\mathcal{E}(\phi,\phi)}{Var(\phi)} : \phi|_{V^c} \textit{ konstant, } \phi \textit{ nicht konstant} \right\} \geq \frac{1}{\mathcal{K}} .$$

Beweis: (nach [19])
Für eine gerichtete Kante $e = (x, y)$ von x nach y und eine Funktion $\phi : X \to \mathbb{R}$ sei $\phi(e) := \phi(x) - \phi(y)$.
Dann folgt aus $\phi|_{V^c} \equiv \phi_0$, wobei ϕ_0 eine Konstante ist, daß

$$\begin{aligned}
Var(\phi) &\leq E_\pi(\phi - \phi_0)^2 \\
&= E_\pi(\sum_{e\in\gamma_x} \phi(e))^2 \\
&\leq E_\pi(\sum_{e\in\gamma_x} \phi(e)^2 \sum_{f\in\gamma_x} 1^2) \\
&= \sum_{e\in G_V} \phi(e)^2 \alpha(e)[\alpha(e)^{-1} \sum_x |\gamma_x| \; I(e \in \gamma_x) \; \pi(x) . \\
&\leq \mathcal{K} \; \mathcal{E}(\phi,\phi) ,
\end{aligned}$$

wobei die erste Ungleichung aus der Cauchy - Schwarz Ungleichung folgt und die zweite aus der Abschätzung der eckigen Klammern durch $\mathcal{K}$.

Für Kap. 4 leiten wir jetzt eine etwas anders geartete Schranke her, die aus der logarithmischen Konkavität der Koeffizienten des charakteristischen Polynoms der Matrix $I - Q$ folgt.
Zunächst leiten wir eine Darstellung der Koeffizienten als gewichtete Summen über bestimmten Graphen her.
Zu einer beliebigen Matrix $M = (m_{ij})_{i,j\in A}$ läßt sich stets ein gewichteter Graph G_M mit Knotenmenge A konstruieren, wobei die Kante $(x \to y)$ das Gewicht m_{ij} erhält. Aus der Korrespondenz von M und G_M ergeben sich nun vielerlei Möglichkeiten, Determinanten als Polynome zu entwickeln, deren Koeffizienten von Teilgraphen von G_M abhängen, oder umgekehrt zu einem vorgegebenen Graphen Matrizen zu definieren, aus deren charakteristischem Polynom sich Folgerungen über den Graphen ziehen lassen. Einen guten Überblick bietet etwa das Buch von Cvetković, Doob und Sachs [7], über die Spektren von Graphen oder von Biggs [1] über algebraische Methoden in der Graphentheorie. Ähnlich wie wir gehen Thomas und Yin [32] vor, die aus einer Cauchy Ungleichung für die Eigenwerte eines Graphen Aussagen über Simulationsprozesse von Teilchensystemen mit unendlich vielen Teilchen folgern.

Definition 1.6 *Sei $W \subseteq X$.*
Ein W-Graph ist ein Baum, der aus Knotenmenge X und gerichteten Kanten $(m \to r)$ mit $m \in X \setminus W$ und $r \in X$, $m \neq r$, besteht, wobei genau eine Kante von jedem Knoten $m \in X \setminus W$ ausgeht.
$G_{(n)}(W)$ oder kürzer $G(W)$ bezeichne die Menge aller W-Graphen.
$G_{(n)}^{(k)}$ oder kürzer $G^{(k)}$ $(1 \leq k \leq n)$ bezeichne die Menge aller W-Graphen, für die W eine k-elementige Teilmenge von X ist.

Bemerkung 1.7 *$G^{(k)}$ besteht aus allen Graphen ohne Schleifen, die genau $n-k$ gerichtete Kanten besitzen, wobei von jedem Knoten höchstens eine Kante ausgeht. Jeder Graph aus $G^{(k)}$ besteht aus k Komponenten.*

Satz 1.8 ([33], [7] S. 39) *Sei $D = diag(1-a_1, ..., 1-a_n)$ eine Diagonalmatrix. Sei $Q = (q_{ij})_{i,j \in X}$ eine stochastische Matrix.*
Die Determinante von $D - Q$ ist ein Polynom in den Unbekannten a_i. Der Koeffizient von $(-a_{i_1}) \cdot ... \cdot (-a_{i_k})$ $\quad (0 \leq k \leq n)$ ist die Summe der Produkte $[g] := \prod_{(r \to s) \in g} q_{rs}$ über alle Graphen $g \in G(\{i_1, ..., i_k\})$.

Bemerkung 1.9 *(1) Speziell für $k = 0$ bedeutet dies, daß der konstante Term gleich 0 ist, da $G(\emptyset) = \emptyset$ gilt.*
Der Koeffizient von $\prod_{i=1}^{n}(-a_i)$ wird gleich 1 gesetzt. $G(X)$ besteht nur aus einem kantenlosen Graphen, und das Produkt einer leeren Menge von Faktoren sei gleich 1 gesetzt.
(2) (nach [16] S. 177) Die stationäre Verteilung einer irreduziblen Markov - Kette mit Übergangswahrscheinlichkeiten - Matrix Q ist gleich

$$\pi_i := \frac{s_i}{\sum_{j \in X} s_j} \ , \quad \text{wobei} \quad s_i = \sum_{g \in G(\{i\})} [g] \ .$$

(3) Ähnliche Darstellungen für das charakteristische Polynom gerichteter Multigraphen in Abhängigkeit von den linear gerichteten Teilgraphen werden in [7] bewiesen.

Beweis: Der Satz wird in [33] und [7] S. 39 erwähnt, in [7] mit dem Hinweis auf einen Beweis in [13]. Wir geben hier einen eigenen Beweis.
Die Beweisidee ist einfach. Wir entwickeln $\det(D - Q)$ mit dem Entwicklungssatz von Laplace und konstruieren induktiv Graphen, die wie im Satz behauptet aussehen.

Definiere $\hat{Q} := (\hat{a}_{ij})_{i,j} := D - Q$.

$$\begin{aligned}
\det(\hat{Q}) &= \sum_{i=1}^{n} (-1)^{i+1} \ \hat{a}_{1i} \ det(\hat{Q}_{1i}) \\
&= (-a_1) \det(\hat{Q}_{11}) + (1 - q_{11}) \det(\hat{Q}_{11}) + \sum_{i=2}^{n} \hat{a}_{1i} \ \det(\hat{Q}_{1i}) \ (-1)^{i+1} \ ,
\end{aligned}$$

wobei $\hat{Q}_{ij}$ aus $\hat{Q}$ durch Streichung der i-ten Zeile und j-ten Spalte hervorgeht.

Nur der erste Term der letzten Zeile ist noch von a_1 abhängig. Es genügt, die Koeffizienten derjenigen Terme des Polynoms $\det(\hat{Q})$ zu bestimmen, die a_1 enthalten, die Koeffizienten aller anderen Terme ergeben sich dann durch Permutation der Indizes der a_i $(i = 1, ..., n)$. Q ist stochastisch, also ist die Konstante von $\det(\hat{Q})$ gleich Null.

Wir beweisen die Aussage des Satzes induktiv.
Für n=1 ist die Aussage trivial.
Angenommen, die Aussage gilt für $(n-1) \times (n-1)$-Matrizen.
Wir zeigen jetzt, daß der Koeffizient von $(-a_1)\prod_{i \in I}(-a_i)$ für alle $I \subseteq \{2, ..., n\}$ auf die im Satz angegebene Weise berechnet werden kann.
Sei $\alpha_i := a_i - q_{i1}$ $(i = 2, ..., n)$.
Dann gilt $\hat{Q}_{11} = E - B$, wobei $E = diag(1-\alpha_2 \ , ..., \ 1-\alpha_n)$ und B stochastisch ist.
Nach Annahme ist $\det(\hat{Q}_{11})$ ein Polynom der Unbekannten α_i $(i = 2, ..., n)$.
Für jeden Graphen $G = (\{2, ...n\}, \mathcal{E}) \in G_{(n-1)}(I)$ und jedes $J \subseteq I$ definieren wir einen Graphen $\hat{G}(G, J) := (X, \mathcal{E} \cup \mathcal{F}) \in G_{(n)}(I)$, wobei $\mathcal{F} = \{(i \to 1) : i \in I \setminus J\}$. Diese Graphen sind paarweise verschieden, d.h. für alle $I_1, I_2 \in \{2, ..., n\}$, $G_1 \in G_{(n-1)}(I_1)$, $G_2 \in G_{(n-1)}(I_2)$, $J_1 \subseteq I_1$ und $J_2 \subseteq I_2$ mit $(I_1, J_1) \neq (I_2, J_2)$ gilt $\hat{G}(G_1, J_1) \neq \hat{G}(G_2, J_2)$.
Für alle $J \subseteq \{2, ..., n\}$ gilt damit

$$G_{(n)}(J) = \bigcup_{I: J \subseteq I} \ \bigcup_{G \in G_{(n-1)}(I)} \hat{G}(G, J) \ ,$$

Sei $\mathcal{K}_I$ $(I \subseteq \{2, ...n\})$ der Koeffizient des Terms $\prod_{i \in I}(-\alpha_i)$ von $\det(\hat{Q}_{11})$.
Wir wissen

$$\begin{aligned}
\det(\hat{Q}_{11}) &= \sum_{I \subseteq \{2,\dots,n\}} \mathcal{K}_I \prod_{i \in I}(-\alpha_i) \\
&= \sum_{I \subseteq \{2,\dots,n\}} \mathcal{K}_I \prod_{i \in I}(-a_i + q_{i1}) \\
&= \sum_{I \subseteq \{2,\dots,n\}} \mathcal{K}_I \sum_{J \subseteq I} \prod_{j \in J}(-a_j) \prod_{k \in I \setminus J} q_{k1} \ .
\end{aligned}$$

Nach Annahme gilt

$$\mathcal{K}_I = \sum_{g \in G_{(n-1)}(I)} \ \prod_{(r \to s) \in g} q_{rs} \ .$$

Also ist der Koeffizient von $(-a_1)\prod_{k \in J}(-a_k)$ $(J \subseteq \{2, ..., n\})$ gleich

$$\begin{aligned}
\sum_{I: J \subseteq I \subseteq X \setminus \{1\}} \mathcal{K}_I \prod_{k \in I \setminus J} q_{k1} &= \sum_{I: J \subseteq I \subseteq X \setminus \{1\}} \ \sum_{g \in G_{(n-1)}(I)} \ \prod_{(r \to s) \in g} q_{rs} \prod_{k \in I \setminus J} q_{k1} \\
&= \sum_{g \in G_{(n)}(J)} \ \prod_{(r \to s) \in g} q_{rs} \ .
\end{aligned}$$

Das ist die Behauptung.
Aus Satz 1.11 folgt nun unmittelbar folgende Aussage für das charakteristische Polynom der Martix $I - Q$:

Korollar 1.10 *Es gilt*

$$\det(I - Q - \lambda I) = \sum_{i=1}^{n} k_i (-1)^i \lambda^i$$
$$\text{mit } k_i := \sum_{g \in G^{(i)}} \prod_{(r \to s) \in g} q_{rs} \ .$$

Für den nachfolgenden Satz benötigen wir folgende Definition:

Definition 1.11 *Eine Folge $a_0, ..., a_n$ reeller Zahlen nennt man logarithmisch konkav, falls $a_i^2 \geq a_{i-1} \cdot a_{i+1}$ für alle $1 \leq i \leq n-1$ gilt.*
Für eine stochastische Matrix Q sei definiert:

$$F(\lambda) := \det(I - Q - \lambda I) = \sum_{i=1}^{n} k_i (-1)^i \lambda^i$$

Im nächsten Satz wollen wir nachweisen, daß die Koeffizientenfolge des Polynoms $F(\lambda)$ logarithmisch konkav ist.
Das wohl bekannteste Beispiel einer logarithmisch konkaven Folge ist die Folge der Binominialkoeffizienten $\binom{n}{k}$ für $k = 1, ..., n$.
Die Frage, ob eine Folge logarithmisch konkav ist, tritt in vielen Problemen der Algebra, Kombinatorik und Geometrie auf. Ein systematischer Überblick der bisher bekannten Methoden, die logarithmische Konkavität einer Folge (und ähnlicher Eigenschaften) zu zeigen, wurde zusammen mit vielen Beispielen von Stanley [30] erarbeitet. Dort finden sich auch viele ähnliche Ergebnisse, etwa über die Koeffizienten reeller Polynome mit reellen Nullstellen oder die gewichteten Summen bestimmter Teilgraphen endlicher Graphen mit Mehrfachkanten.

Satz 1.12 (Logarithmische Konkavität der Koeffizienten)
Sei $Q = (q_{ij})_{i,j \in X}$ eine stochastische Matrix.
Für die Koeffizienten k_i $(i = 2, ..., n)$ des Polynoms $F(\lambda)$ gilt:

$$k_{i-1} \ k_{i+1} \leq k_i^2 \ .$$

Gilt $k_1 \neq 0$, so gilt $k_i \neq 0$ für $i = 1, ..., n$ und damit

$$\frac{k_{i-1}}{k_i} \leq \frac{k_i}{k_{i+1}} \quad (i = 2, ..., n-1) \ .$$

Beweis:
Der Beweis gliedert sich in mehrere Abschnitte, die wir, um das Verständnis zu erleichtern, durchnummerieren.

Abschnitt 1:
Zunächst stellen wir fest, daß die Aussage des Satzes gezeigt ist, wenn eine Injektion der Menge $G^{(i+1)} \times G^{(i-1)}$ in die Menge $G^{(i)} \times G^{(i)}$ existiert, für die eine zusätzliche Eigenschaft gilt.

Sei $[g] := \prod_{(r\rightarrow s)\in g} q_{rs} \quad (g \in G^{(i)},\ i = 1, ..., n)$.
Zu zeigen:

$$k_{i-1}\ k_{i+1} \leq k_i^2 \quad (i = 2, ..., n-1)\ .$$

Wegen

$$k_{i-1}\ k_{i+1} = \sum_{g_1\in G^{(i-1)}} \sum_{g_2\in G^{(i+1)}} [g_1][g_2]$$

und

$$k_i^2 = (\sum_{g\in G^{(i)}} [g])^2 = \sum_{g_1\in G^{(i)}} \sum_{g_2\in G^{(i)}} [g_1][g_2]$$

genügt es also zu zeigen:
Die Menge $G^{(i+1)} \times G^{(i-1)}$ läßt sich injektiv in die Menge $G^{(i)} \times G^{(i)}$ abbilden, so daß für alle $(g_1, g_2) \in G^{(i+1)} \times G^{(i-1)}$ gilt:

$$[g_1][g_2] = [\hat{g}_1][\hat{g}_2]\ ,$$

wobei $(\hat{g}_1, \hat{g}_2) \in G^{(i)} \times G^{(i)}$ das Bild von (g_1, g_2) sei.

Abschnitt 2:
Wir zeigen: Für jedes $(g_1, g_2) \in G^{(i+1)} \times G^{(i-1)}$ gibt es ein $(\hat{g}_1, \hat{g}_2) \in G^{(i)} \times G^{(i)}$ mit $[g_1][g_2] = [\hat{g}_1][\hat{g}_2]$.

Den Nachweis führen wir konstruktiv:
Wir zerlegen g_1 in seine Komponenten und bezeichnen Knoten- und Kantenmenge jeder Komponente. Damit haben wir auch eine Zerlegung der Knotenmenge von g_2 und können jeder der dadurch gegebenen Teilmengen der Knotenmenge die Menge aller Kanten von g_2 zuordnen, deren Fußknoten in dieser Menge liegen.
Jeder der Teilmengen der Zerlegung der Knotenmenge ist also eine Teilmenge der Kantenmenge von g_1 und eine Teilmenge der Kantenmenge von g_2 zugeordnet.
Wir zeigen, daß durch Vertauschen der zugeordneten Kantenmengen für eine der Knotenteilmengen ein Graphenpaar aus $G^{(i)} \times G^{(i)}$ mit den behaupteten Eigenschaften konstruiert werden kann.

Sei $(g_1, g_2) \in G^{(i+1)} \times G^{(i-1)}$ gegeben.
Seien $\mathcal{E}_p$ und $\mathcal{N}$ die Kanten - und Knotenmengen von $g_p \quad (p = 1, 2)$.
Sei $(N_j)_{j=1,\ldots,i+1}$ eine Zerlegung von $\mathcal{N}$, für die gilt:

(i) $\qquad \dot{\bigcup}_{j=1,\ldots,i+1} N_j = \mathcal{N}\ ,$

(ii) $\qquad$ für alle $n, m \in N_j,\ n \neq m$, existiert eine Folge $n = n_1, n_2, ..., n_k = m \in N_j$ mit $(n_l, n_{l+1}) \in \mathcal{E}_1$ oder $(n_{l+1}, n_l) \in \mathcal{E}_1\ (l = 1, ..., k-1)$

(iii) $\qquad (m, n) \notin \mathcal{E}_1$ für alle $m \in N_k,\ n \in N_j$, falls $k \neq j$.

Sei $(E_j^p)_{j=1,\ldots,i+1}$ eine Zerlegung von $\mathcal{E}_p\ (p = 1, 2)$, für die gilt:

(i) $\qquad \dot{\bigcup}_{j=1,\ldots,i+1} E_j^p = \mathcal{E}_p\ ,$

(ii) $\qquad (m, n) \in E_j^p$ falls $m \in N_j, (m, n) \in \mathcal{E}_p$.

$(N_j, E_j^1)_j$ sind die Komponenten von g_1 , und E_j^2 ist die Menge der Kanten von g_2 , deren Fußpunkte in N_j liegen.
Es folgt $|N_j| = |E_j^1| - 1$ für alle $j = 1, ..., i+1$. Nach Definition gilt $|\mathcal{E}_1| = |\mathcal{E}_2| - 2$, also existiert (mindestens) ein j, für das $|E_j^2| = |N_j|$ gilt.
Wir setzen $\hat{\mathcal{E}}_1 := (\mathcal{E}_1 \setminus E_j^1) \cup E_j^2$ und $\hat{\mathcal{E}}_2 := (\mathcal{E}_2 \setminus E_j^2) \cup E_j^1$ und erhalten so zwei neue Graphen $\hat{g}_1 = (\mathcal{N}, \hat{\mathcal{E}}_1)$ und $\hat{g}_2 = (\mathcal{N}, \hat{\mathcal{E}}_2)$.
Für diese gilt

$$[g_1][g_2] = [\hat{g}_1][\hat{g}_2] \ .$$

Wir zeigen jetzt, daß $\hat{g}_1, \hat{g}_2 \in G^{(i)}$ gilt.
Hierzu genügt es zu zeigen, daß $\hat{g}_1$ und $\hat{g}_2$ keine Schleifen enthalten.
Alle Kanten von E_j^1 (beginnen und) enden in N_j , also enthält $\hat{g}_2$ keine Schleifen, und alle Kanten von $\mathcal{E}_1 \setminus E_j^1$ (beginnen und) enden in $\mathcal{N} \setminus N_j$, also enthält $\hat{g}_1$ keine Schleifen.

Wir haben jetzt gezeigt, daß für alle $(g_1, g_2) \in G^{(i+1)} \times G^{(i-1)}$ ein $(\hat{g}_1, \hat{g}_2) \in G^{(i)} \times G^{(i)}$ existiert, so daß $[g_1][g_2] = [\hat{g}_1][\hat{g}_2]$ gilt.

Abschnitt 3:
In den jetzt folgenden Abschnitten werden wir nun die eigentliche Behauptung zeigen und jedem Element $(g_1, g_2) \in G^{(i+1)} \times G^{(i-1)}$ eineindeutig ein $(\hat{g}_1, \hat{g}_2) \in G^{(i)} \times G^{(i)}$ zuordnen, so daß $[g_1][g_2] = [\hat{g}_1][\hat{g}_2]$ gilt.
In diesem Abschnitt zerlegen wir $G^{(i+1)} \times G^{(i-1)}$ und $G^{(i)} \times G^{(i)}$ in Teilmengen, die wir dann einander zuordnen wollen.
Wir geben uns die Kantenmengen eines Graphenpaares (g_1, g_2) aus $G^{(i+1)} \times G^{(i-1)}$ vor und bilden die Mengen M_1 bzw. M_2 aller Graphenpaare aus $G^{(i+1)} \times G^{(i-1)}$ bzw. $G^{(i)} \times G^{(i)}$, die dieselben Kanten wie (g_1, g_2) in gleicher Anzahl besitzen.
Dies führt zu einer disjunkten Zerlegung der Mengen $G^{(i+1)} \times G^{(i-1)}$ und $G^{(i)} \times G^{(i)}$.
Durch die Wahl der Zerlegung folgt die Behauptung, falls $|M_1| \leq |M_2|$ für alle Graphenpaare (g_1, g_2) gilt.

Sei $(g_1, g_2) \in G^{(i+1)} \times G^{(i-1)}$ gegeben, wobei $g_1 = (\mathcal{N}, \mathcal{E}_1)$ und $g_2 = (\mathcal{N}, \mathcal{E}_2)$.
Wir definieren für (g_1, g_2)

$$\begin{aligned}
M_1 \ &:= \ \{(h_1, h_2) \in G^{(i+1)} \times G^{(i-1)} \ , \ h_1 = (\mathcal{N}, \mathcal{H}_1) \ , \ h_2 = (\mathcal{N}, \mathcal{H}_2) \ : \\
&\qquad \mathcal{E}_1 \cup \mathcal{E}_2 = \mathcal{H}_1 \cup \mathcal{H}_2 \ , \ \mathcal{E}_1 \cap \mathcal{E}_2 = \mathcal{H}_1 \cap \mathcal{H}_2\} \ , \\
M_2 \ &:= \ \{(\hat{h}_1, \hat{h}_2) \in G^{(i)} \times G^{(i)} \ , \ \hat{h}_1 = (\mathcal{N}, \hat{\mathcal{H}}_1) \ , \ \hat{h}_2 = (\mathcal{N}, \hat{\mathcal{H}}_2) \ : \\
&\qquad \mathcal{E}_1 \cup \mathcal{E}_2 = \hat{\mathcal{H}}_1 \cup \hat{\mathcal{H}}_2 \ , \ \mathcal{E}_1 \cap \mathcal{E}_2 = \hat{\mathcal{H}}_1 \cap \hat{\mathcal{H}}_2\} \ .
\end{aligned}$$

M_1 und M_2 enthalten alle Graphenpaare aus $G^{(i+1)} \times G^{(i-1)}$ bzw. $G^{(i)} \times G^{(i)}$, die dieselben Kanten wie g_1 und g_2 in gleicher Anzahl besitzen.
Man sieht sofort, daß

$$[g_1][g_2] = [h_1][h_2] = [\hat{h}_1][\hat{h}_2]$$

für alle $(h_1, h_2) \in M_1$, $(\hat{h}_1, \hat{h}_2) \in M_2$ gilt.

Daher genügt es zu zeigen, daß $|M_1| \leq |M_2|$ gilt.

Abschnitt 4: Wir zeigen nun, daß wir jedem Paar von Graphen aus M_1 oder M_2 ein Paar von Teilgraphen zuordnen können, das aus einer einzigen Menge G stammt. Die Elemente von M_1 und M_2 sind also Elemente von G mit zusätzlichen Kanten.

Wir definieren zwei Teilgraphen von g_1 und g_2 wie folgt:
Seien $G_1 = (\mathcal{N}, \mathcal{G}_1)$, $G_2 = (\mathcal{N}, \mathcal{G}_2)$ mit

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}_1 &= \{(m,n) \in \mathcal{E}_1 : (m,\hat{n}) \in \mathcal{E}_2 \text{ für ein } \hat{n} \in \mathcal{N}\} \ , \\
\mathcal{G}_2 &= \{(m,n) \in \mathcal{E}_2 : (m,\hat{n}) \in \mathcal{E}_1 \text{ für ein } \hat{n} \in \mathcal{N}\} \ .
\end{aligned}$$

Dann gilt $G_1, G_2 \in G^{(j)}$ für ein $j \geq i+1$.
Sei

$$\begin{aligned}
G \ := \ & \{(\hat{G}_1, \hat{G}_2) \in G^{(j)} \times G^{(j)}, \ \hat{G}_1 = (\mathcal{N}, \hat{\mathcal{G}}_1), \ \hat{G}_2 = (\mathcal{E}, \hat{\mathcal{G}}_2) : \\
& \hat{\mathcal{G}}_1 \cup \hat{\mathcal{G}}_2 = \mathcal{G}_1 \cup \mathcal{G}_2 \ , \hat{\mathcal{G}}_1 \cap \hat{\mathcal{G}}_2 = \mathcal{G}_1 \cap \mathcal{G}_2\}
\end{aligned}$$

die Menge aller Graphenpaare, die dieselben Kanten wie G_1 und G_2 besitzen.
Wir können die Elemente von M_1 und M_2 als Elemente von G mit zusätzlichen Kanten betrachten.

Abschnitt 5:
Wir konstruieren eine Bijektion zwischen M_1 und einer Teilmenge von M_2.
Es ergibt sich, daß sich jedem nicht einer Ausnahmemenge $H_1 \subseteq M_1$ zugehörigen Element von M_1 durch eine einfache Kantenvertauschung eineindeutig ein Element aus M_2 zuordnen läßt. Elementen aus H_1 wird dann durch eine Konstruktion, die der in Abschnitt 2 ähnelt, eineindeutig ein Element aus einer Teilmenge $H_2 \subseteq M_2$ zugeordnet.
Wir unterscheiden zwei Fälle nach der Zahl der Kanten, die wir den Elementen aus G hinzugefügen.

Fall 1 : g_2 besitzt genau zwei Kanten , die nicht Kanten von G_2 sind (d.h. $|\mathcal{E}_2| = |\mathcal{G}_2| + 2$ und $g_1 = G_1$).

Seien k_1, k_2 die beiden Kanten aus $\mathcal{E}_2 \cap \mathcal{G}_2$.
Für jedes $(G_1, G_2) \in G$, $G_1 = (\mathcal{N}, \mathcal{G}_1)$, $G_2 = (\mathcal{N}, \mathcal{G}_2)$ konstruieren wir folgende neue Graphenpaare:

$$\begin{aligned}
(G_1', G_2') &:= ((\mathcal{N}, \mathcal{G}_1 \cup \{k_1\}) \ , \ (\mathcal{N}, \mathcal{G}_2 \cup \{k_2\})) \ , \\
(G_1'', G_2'') &:= ((\mathcal{N}, \mathcal{G}_1) \ , \ (\mathcal{N}, \mathcal{G}_2 \cup \{k_1, k_2\})) \ .
\end{aligned}$$

Für k_1, k_2 und jedes $(G_1, G_2) \in G$ ist (G_1'', G_2'') möglicherweise ein Element von M_1 und (G_1', G_2') möglicherweise ein Element von M_2.
Seien

$$\begin{aligned}
H_1 &:= \{(G_1, G_2) \in G : (G_1'', G_2'') \in M_1 \ , \ (G_1', G_2') \notin M_2\} \ , \\
H_2 &:= \{(G_1, G_2) \in G : (G_1'', G_2'') \notin M_1 \ , \ (G_1', G_2') \in M_2\} \ .
\end{aligned}$$

Für jedes $(h_1, h_2) \in M_1$ existiert ein $(G_1, G_2) \in G$ mit $(G_1'', G_2'') = (h_1, h_2)$.

Gilt $(G_1, G_2) \notin H_1$, dann gilt $(G_1', G_2') \in M_2$.
Also, falls $|H_1| \leq |H_2|$, so gilt $|M_1| \leq |M_2|$.
Sei $(h_1, h_2) \in M_1$, $h_1 = (\mathcal{N}, \mathcal{H}_1)$, $h_2 = (\mathcal{N}, \mathcal{H}_2)$ und $(h_1, h_2) = (G_1'', G_2'')$ für ein $(G_1, G_2) \in H_1$.
Wir wissen, daß $(G_1', G_2') \notin M_2$ gilt.
Also existiert eine Teilmenge $\mathcal{C}_1$ von $\mathcal{H}_1$, so daß $\mathcal{C}_1 \cup \{k_1\}$ eine Schleife ist.
Sei $\mathcal{C}_2 := \{(m,n) \in \mathcal{H}_2 : (m, \hat{n}) \in \mathcal{C}_1 \text{ für ein } \hat{n} \in \mathcal{N}\}$.
$\mathcal{C}_2 \cup \{k_1\}$ enthält keine Schleife, da diese Menge eine Teilmenge von $\mathcal{H}_2$ ist.
Es folgt, daß $((\mathcal{N}, (\mathcal{H}_1 \setminus \mathcal{C}_1) \cup \{k_1\} \cup \mathcal{C}_2)\ ,\ (\mathcal{N}, (\mathcal{H}_2 \setminus \mathcal{C}_2) \cup \{k_2\} \cup \mathcal{C}_1))$ ein Element von M_2 ist. Weiter gilt $((\mathcal{N}, (\mathcal{H}_1 \setminus \mathcal{C}_1) \cup \mathcal{C}_2)\ ,\ (\mathcal{N}, (\mathcal{H}_2 \setminus \mathcal{C}_2) \cup \mathcal{C}_1)) \in H_2$, da $\mathcal{C}_1 \cup \{k_1\}$ eine Schleife ist.
Also existiert für jedes solche $(h_1, h_2) \in M_1$ ein $(\hat{h}_1, \hat{h}_2) \in M_2$, so daß $(\hat{h}_1, \hat{h}_2) = (G_1', G_2')$ für ein $(G_1, G_2) \in H_2$.

Ist die Zuordnung von $(\hat{h}_1, \hat{h}_2)$ zu (h_1, h_2) eine Injektion, so haben wir $|H_1| \leq |H_2|$ bewiesen.

Angenommen, es existieren zwei verschiedene Elemente $((\mathcal{N}, \mathcal{J}_1), (\mathcal{N}, \mathcal{J}_2 \cup \{k_1, k_2\}))$, $((\mathcal{N}\ ,\ \mathcal{H}_1), (\mathcal{N}, \mathcal{H}_2 \cup \{k_1, k_2\}) \in M_1$, die zum selben Element aus M_2 korrespondieren, das wie oben angegeben konstruiert sei.
Seien $\mathcal{C}_1 \subseteq \mathcal{J}_1$ und $\hat{\mathcal{C}}_1 \subseteq \mathcal{H}_1$ Teilmengen, so daß $\mathcal{C}_1 \cup \{k_1\}$ und $\hat{\mathcal{C}}_1 \cup \{k_1\}$ Schleifen sind.
Seien

$$\begin{aligned}
\mathcal{C}_2 &:= \{(m,n) \in \mathcal{J}_2 : (m, \hat{n}) \in C_1 \text{ für ein } \hat{n} \in \mathcal{N}\}\ , \\
\hat{\mathcal{C}}_2 &:= \{(m,n) \in \mathcal{H}_2 : (m, \hat{n}) \in \hat{C}_1 \text{ für ein } \hat{n} \in \mathcal{N}\}\ .
\end{aligned}$$

Dann gilt wegen der Korrespondenz zum selben Element aus M_2, daß $(\mathcal{J}_1 \setminus \mathcal{C}_1) \cup \mathcal{C}_2 = (\mathcal{H}_1 \setminus \hat{\mathcal{C}}_1) \cup \hat{\mathcal{C}}_2$ und $(\mathcal{J}_2 \setminus \mathcal{C}_2) \cup \mathcal{C}_1 = (\mathcal{H}_2 \setminus \hat{\mathcal{C}}_2) \cup \hat{\mathcal{C}}_1$.
Gilt $\mathcal{C}_1 = \hat{\mathcal{C}}_1$, so gilt nach Voraussetzung $\mathcal{C}_2 = \hat{\mathcal{C}}_2$ und umgekehrt.
Die beiden Elemente von M_1 sind verschieden, also gilt $\mathcal{J}_1 \neq \mathcal{H}_1$ und $\mathcal{J}_2 \neq \mathcal{H}_2$. Damit gilt $\mathcal{C}_1 \neq \hat{\mathcal{C}}_1$ und $\mathcal{C}_2 \neq \hat{\mathcal{C}}_2$.
Aber $(\mathcal{J}_2 \setminus \mathcal{C}_2) \cup \mathcal{C}_1 \cup \{k_1\}$ enthält nur eine Schleife, d.h. es gilt $\mathcal{C}_1 = \hat{\mathcal{C}}_1$ im Widerspruch zu obigem Ergebnis.

Fall 2 : g_2 besitzt mehr als zwei Kanten mehr als G_2.

Sei $\mathcal{D} := (\mathcal{E}_2 \setminus \mathcal{G}_2) \cup (\mathcal{E}_1 \setminus \mathcal{G}_1)$ die Menge der Kanten von g_1 und g_2, die nicht Kanten von G_1 und G_2 sind.
Alle Elemente von $\mathcal{D}$ sind paarweise verschieden.
Ist $(m,n) \in \mathcal{D}$, so gilt $(m,n') \notin \mathcal{D}$ für alle $n' \neq n$.
Es gilt $|\mathcal{D}| = 2k - 2 > 2$ für ein $k \in \mathbb{N}$.
Wir zerlegen $\mathcal{D}$ in Teilmengen $\mathcal{D} = \mathcal{D}_1 \cup \mathcal{D}_2$ bzw. $\mathcal{D} = \hat{\mathcal{D}}_1 \cup \hat{\mathcal{D}}_2$ mit $|\mathcal{D}_1| = k-2$, $|\hat{\mathcal{D}}_1| = |\hat{\mathcal{D}}_2| = k-1$, $|\mathcal{D}_2| = k$.
Wie wir nachfolgend in Lemma 1.13 beweisen werden, läßt sich die Menge aller Zerlegungen $\{(\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2)\}$ von $\mathcal{D}$ injektiv auf die Menge aller Zerlegungen $\{(\hat{\mathcal{D}}_1, \hat{\mathcal{D}}_2)\}$ von $\mathcal{D}$ abbilden, so daß $\mathcal{D}_1 \subseteq \hat{\mathcal{D}}_1$ und $\hat{\mathcal{D}}_2 \subseteq \mathcal{D}_2$ gilt.

Bezeichne im Folgenden $(\hat{\mathcal{D}}_1, \hat{\mathcal{D}}_2)$ stets das injektive Bild von $(\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2)$.
Wir definieren zu jeder Zerlegung $(\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2)$ von $\mathcal{D}$ und jedes $(G_1, G_2) \in G$, $G_1 = (\mathcal{N}, \mathcal{G}_1)$. $G_2 = (\mathcal{N}, \mathcal{G}_2)$ die Graphenpaare

$$\begin{aligned}(G_1', G_2') &:= ((\mathcal{N}, \mathcal{G}_1 \cup \mathcal{D}_1)\ ,\ (\mathcal{N}, \mathcal{G}_2 \cup \mathcal{D}_2))\ ,\\ (G_1'', G_2'') &:= ((\mathcal{N}, \mathcal{G}_1 \cup \hat{\mathcal{D}}_1)\ ,\ (\mathcal{N}, \mathcal{G}_2 \cup \hat{\mathcal{D}}_2))\ .\end{aligned}$$

Die Zuordnung der Graphenpaare (G_1', G_2') und (G_1'', G_2'') zu $(\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2)$ und (G_1, G_2) ist eineindeutig, d.h. aus $(\mathcal{B}_1, \mathcal{B}_2) \neq (\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2)$ oder $(G_1, G_2) \neq (H_1, H_2)$ folgt stets $(H_1', H_2') \neq (G_1', G_2')$ und $(H_1'', H_2'') \neq (G_1'', G_2'')$.
Für eine feste Zerlegung $(\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2)$ seien

$$\begin{aligned}H_1(\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2) &:= \{(G_1, G_2) \in G : (G_1'', G_2'') \in M_1\ ,\ (G_1', G_2') \notin M_2\}\ ,\\ H_2(\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2) &:= \{(G_1, G_2) \in G : (G_1'', G_2'') \notin M_1\ ,\ (G_1', G_2') \in M_2\}\ .\end{aligned}$$

Es gilt $H_1(\mathcal{B}_1, \mathcal{B}_2) \cap H_1(\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2) = \emptyset$ und $H_2(\mathcal{B}_1, \mathcal{B}_2) \cap H_2(\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2) = \emptyset$, falls $(\mathcal{B}_1, \mathcal{B}_2)$ und $(\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2)$ zwei verschiedene Zerlegungen von $\mathcal{D}$ sind. Mit denselben Argumenten wie in Fall 1 ergibt sich mit $k_1 := \hat{\mathcal{D}}_2 \setminus \mathcal{D}_2$, daß $|H_1(\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2)| \leq |H_2(\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2)|$ für alle Zerlegungen $(\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2)$ von $\mathcal{D}$ und damit $|M_1| \leq |M_2|$ gilt.

Damit ist jetzt gezeigt, daß $k_{i+1} k_{i-1} \leq k_i^2 \quad (i = 2, ..., n-1)$ gilt.

Sei nun $k_{i_0} = 0$ für ein $i_0 \in \{2, ..., n\}$.
Dann gilt $[g] = 0$ für alle $g \in G^{(i_0)}$.
Sei $g = (\mathcal{N}, \mathcal{G}) \in G^{(i_0 - 1)}$ und e eine Kante von g.
Dann gilt $[g'] = 0$ für $g' := (\mathcal{N}, \mathcal{G} \setminus \{e\}) \in G^{(i_0)}$.
Daraus folgt $[g] = 0$ für alle $g \in G^{(i_0 - 1)}$ und $k_{i_0 - 1} = 0$.

Also, falls $k_1 \neq 0$, so folgt $k_i \neq 0$ für alle $i = 1, ..., n-1$.

Im Beweis von Satz 1.12 haben wir ein einfaches Lemma benützt, das wir jetzt zeigen.

Lemma 1.13 (Korollar aus dem Satz von Dilworth [10], [22] S. 62 ff)
Sei $N \subseteq \mathbb{N}, |N|$ *gerade.*
Sei $\mathcal{D} := \{D \subseteq N : |D| = \frac{|N|}{2} - 1\}$ *und* $\mathcal{C} := \{C \subseteq N : |C| = \frac{|N|}{2}\}$.
Dann existiert eine Injektion $\varphi : \mathcal{D} \to \mathcal{C}$ *mit* $D \subseteq \varphi(D)$ *für alle* $D \in \mathcal{D}$.

Beweis: Nach dem Satz von Dilworth [22] S. 62 ff gilt:
Für jede teilgeordnete Menge P ist die maximale Mächtigkeit einer Antikette gleich der minimalen Anzahl der Ketten in einer Kettenzerlegung von P.
Wähle nun $P = (\mathcal{P}(N), \subseteq)$.
Es existieren Antiketten der Mächtigkeit $\binom{|N|}{\frac{|N|}{2}}$, also auch Kettenzerlegungen von P, die die Inklusionsbedingung erfüllen.

Um nun den zweitgrößten Eigenwert einer stochastischen Matrix Q von oben abzuschätzen, schätzen wir die (betrags -) kleinste Nullstelle von $F(\lambda)$ (d.h. λ_1) von unten ab.

Lemma 1.14 ([23]) *Sei* $p(z) = \sum_{i=0}^{n} a_i z^i$ *ein Polynom vom Grad* $n \geq 1$ *mit komplexen Koeffizienten.*
Sei $z_0 \in \mathbb{C}$ *mit* $p(z_0) \neq 0$.
Definiere

$$b_m := \frac{1}{m!}\ p^{(m)}(z_0) \quad (m = 0, ..., n)\ .$$

Sei

$$\rho := \frac{1}{2} \min_{1 \leq m \leq n\ :\ b_m \neq 0} |\frac{b_0}{b_m}|^{1/m}\ .$$

Dann enthält die offene Kugel $|z - z_0| < \rho$ *keine Nullstellen von* $p(z)$.

Wir erhalten nun folgende Abschätzung für die Nullstelle λ_1 des Polynoms $F(\lambda)$:

Korollar 1.15 *Sei* Q *eine stochastische Matrix und* $F(\lambda)$ *wie in 1.11 definiert.*
Sei $i_0 := \min\{i : k_i \neq 0\}$.
Dann ist $F(\lambda) \neq 0$ *für* $0 < |\lambda| < \frac{1}{2}\frac{k_{i_0}}{k_{i_0+1}}$, *also gilt* $|\lambda_1| \geq \frac{1}{2}\frac{k_{i_0}}{k_{i_0+1}}$

Beweis: Ohne Einschränkung sei $i_0 = 1$. Gilt $i_0 > 1$, so betrachte statt $F(\lambda)/\lambda$ das Polynom $F(\lambda)/\lambda^{i_0}$.
Nach Lemma 1.14 gilt mit $z_0 = 0$:
$F(\lambda)/\lambda$ ist nullstellenfrei für

$$|\lambda| \leq \frac{1}{2} \min_{1 \leq m \leq n-1} |\frac{k_1}{k_{m+1}}|^{1/m}\ .$$

Nach Satz 1.12 gilt

$$(\frac{k_1}{k_2})^{m-1} \leq \frac{k_1}{k_2}\frac{k_2}{k_3} \cdot ... \cdot \frac{k_{m-1}}{k_m} = \frac{k_1}{k_m}\ .$$

Damit ergibt sich die Behauptung.

Ist λ_1 reell, so läßt sich folgende schärfere Abschätzung zeigen:

Satz 1.16 *Sei* Q *eine stochastische Matrix und* $F(\lambda)$ *wie in 1.11 definiert.*
Sei $i_0 := \min\{i : k_i \neq 0\}$.
Ist λ_1 *reell, so gilt* $\lambda_1 \geq \frac{k_{i_0}}{k_{i_0+1}}$.

Beweis: Ohne Einschränkung sei $i_0 = 1$.
Wir unterscheiden zwei Fälle:
Ist n gerade, so gilt

$$F(\lambda) = \sum_{i=1}^{n} k_i(-1)^i \lambda^i = -\sum_{i=1}^{n/2} k_{2i}(\frac{k_{2i-1}}{k_{2i}} - \lambda)\lambda^{2i-1}\ ,$$

und die Behauptung folgt mit Satz 1.12.
Ist n ungerade, so gilt

$$F(\lambda) = -\sum_{i+1}^{(n-1)/2} k_{2i}(\frac{k_{2i-1}}{k_{2i}} - \lambda)\lambda^{2i-1} - \lambda^n\ .$$

Da $F(\lambda)/\lambda < 0$ für $\lambda = 0$ und $-\lambda^{n-1} < 0$ für $\lambda > 0$ gilt, folgt die Behauptung mit Satz 1.12 .

Abschließend wollen wir in einem Beispiel die beiden vorgestellten Schranken berechnen.

Beispiel: Irrfahrt auf einem Ring $\mathbb{Z}_p$.
Sei p eine ungerade Zahl. Wir betrachten die Irrfahrt auf $X = \mathbb{Z}_p$, wobei die Zahlen modulo p als die p Knoten eines Rings betrachtet werden.
Es gilt $q(x, y) = 1/2$ und $\pi(x) = 1/p$.
Die Eigenwerte von $Q = (q(x, y))_{x,y \in \mathbb{Z}_p}$ lassen sich exakt bestimmen, es gilt (nach [8] S.25 f) $\beta_i = \cos(\frac{2\pi i}{p})$ für $0 \leq i \leq p - 1$, für große p gilt also

$$\beta_1 = 1 - \frac{2\pi^2}{p^2} + O(p^{-4}) \ .$$

Nach Satz 1.16 und Lemma 1.5 ergeben sich nun für β_1 folgende Abschätzungen:
Nach Satz 1.16 gilt $\beta_1 \leq 1 - \frac{k_1}{k_2}$.
Wegen der Symmetrie von Q gilt für $g \in G^{(i)}$ $(0 \leq i \leq p - 1)$:

$$[g] = \sum_{(x \to y) \in g} q(x, y) = (\frac{1}{2})^{p-i} \ .$$

Wegen

$$|G^{(1)}| = p^2$$

und

$$|G^{(2)}| = p \sum_{i=1}^{(p-1)/2} i(p - 2 - i) = 1/12(p^2 - 1)(p - 3)p$$

gilt

$$\frac{k_1}{k_2} = \frac{6p}{(p^2 - 1)(p - 3)} = \frac{6}{p^2} + O(p^{-3}) \ ,$$

also

$$\beta_1 \leq 1 - \frac{6}{p^2} + O(p^{-3}) \ .$$

Für $V = \mathbb{Z}_p \setminus \{0\}$ gilt nach Lemma 1.5 und Bemerkung 1.2 $\beta_1 \leq 1 - \mathcal{K}^{-1}$.
Es gilt $\alpha(x, y) = (2p)^{-1}$.
Für $x \in V$ wähle γ_x als den kürzeren der beiden Pfade von x nach 0.
Dann gilt

$$\mathcal{K} = 2p \sum_{i=1}^{(p-1)/2} i \ p^{-1} = 1/4(p^2 - 1) \ ,$$

also

$$\beta_1 \leq 1 - \frac{4}{p^2} + O(p^{-4}) \ .$$

Beide Schranken besitzen in diesem Beispiel also dieselbe Größenordnung wie β_1. In anderen Beispielen erweist sich allerdings die Poincaré - Schranke zumeist als die bessere Schranke.

Kapitel 2

Allgemeine Aussagen über Konvergenzraten

In der Bildrekonstruktion startet man von einem beobachteten, gestörten Bild und möchte aus diesem das ursprüngliche, ungestörte Bild rekonstruieren. Man geht davon aus, daß das ursprüngliche Bild nur aus wenigen Farbflächen besteht, also nur wenige Farbwechsel im Bild vorhanden sind, und daß die auf das Bild wirkende Störung nur klein ist, d.h. nur wenige Bildpunkte des beobachteten Bildes eine falsche Farbe besitzen.
Diese beiden Annahmen finden Eingang in die Energiefunktion U, die jedem möglichen Bild einen Energiewert zuordnet.
Als Beispiel hierzu betrachten wir die Energiefunktion

$$U(\sigma) \ := \ G(\sigma) + \epsilon R_b(\sigma) \ := \sum_{<i,j>\in\mathcal{F}} \phi(|\sigma_i - \sigma_j|) + \epsilon \sum_{i\in A} \psi(|b_i - \sigma_i|)$$

wobei die Funktionen ϕ und ψ positiv und monoton wachsend seien und $\sigma = (\sigma_i)_{i\in A}$ ein beliebiges Bild, σ_i die Färbung der Bildpunktes i aus der Menge A aller Bildpunkte und $b = (b_i)_{i\in A}$ das beobachtete Bild bezeichne.
Der erste Term $G(\sigma)$ der Energiefunktion ist die Summe der Wechselwirkungen je zweier Bildpunkte aus einer vorgegebenen Menge von Bildpunktpaaren $\mathcal{F}$. Die Wechselwirkung ist um so kleiner, je näher die Farben zweier Bildpunkte auf einer Skala beieinander liegen. Also ist dieser Energieanteil ein Maß für die Glattheit bzw. Diskontinuität des Bildes, er ist klein, wenn nur wenige Farbwechsel im Bild vorhanden sind.
Zu diesem Anteil wird ein von einem Parameter ϵ und dem beobachteten Bild $b \in X$ abhängiger Anteil $\epsilon R_b(\sigma)$ hinzuaddiert, der als ein Maß für den Abstand zum beobachteten Bild interpretiert werden kann.
Die Energiefunktion ist so konstruiert, daß das ursprüngliche Bild sie minimiert.
Mit Hilfe eines Markov-Prozesses, genauer eines simulated annealing-Prozesses, versucht man dieses Energieminimum zu finden. Hierzu wird eine von der Energie U und der Zeit t abhängige Verteilung $\pi_t(\sigma) = \exp(-\beta_t U(\sigma))$ definiert, wobei β_t in t monoton wachse. Für ein Bild σ ist $\pi_t(\sigma)$ um so größer, je kleiner die Energie $U(\sigma)$ ist. Die Verteilung π_t konvergiert (mit wachsendem t) gegen die Gleichverteilung auf der Menge aller Bilder minimaler Energie. Weiter konstruiert man einen bezüglich π_t reversiblen, von der Zeit t abhängigen Markov-Prozeß, der (unter gewissen Randbedingungen) das aktuelle Bild lokal abändert, wobei der Übergang zu einem Bild mit höherer Energie möglich ist, aber mit zunehmender

Zeit t immer weniger wahrscheinlich wird. In Bemerkung 2.3 wird das Vorgehen des Prozesses nochmals genauer erläutert. Wegen der Reversibilität konvergiert der Prozeß zu jedem Zeitpunkt t gegen die Verteilung π_t.
Statistisch entspricht dieses Vorgehen der Bestimmung eines Maximum likelihood aposteriori Schätzers σ^* bezüglich der aposteriori-Verteilung $\exp(-\beta_t \epsilon R_b(\sigma))$, die ein statistischen Modells für die Störungen repräsentiert, unter der Annahme der apriori-Verteilung $\exp(-\beta_t G(\sigma))$, welche Bilder mit wenig Diskontinuität bevorzugt. Ist $\sigma(t)$ die aktuelle Schätzung zum Zeitpunkt t, so ist $P(\sigma(t)|b)$ in Abhängigkeit von t jedoch nicht monoton wachsend, sondern Zeiträume, in denen $P(\sigma(t)|b)$ abnimmt, werden nur zunehmend unwahrscheinlicher.
Realisiert man diesen Prozeß auf der Menge der Bilder selbst, wobei man injedenm Schritt nur einen Bildpunkt ändert, so ergibt sich ein klassischer simulated annealing-Prozeß. Dieser wurde in Götze [19] untersucht. Wie bereits in der Einleitung erwähnt, besitzt dieser Prozeß jedoch unter Umständen sehr lange Laufzeiten, z.B. falls mehrere Energieminima existieren. Wir werden daher einen anderen Prozeß definieren und untersuchen. Zahlreiche Vergleiche zwischen unserem Prozeß und dem klassischen annealing-Prozeß findet man in diesem und den nächsten Kapiteln.
Unser Prozeß realisiert den FKSW - Algorithmus [29], [31], den wir für die Gegebenheiten in der Bildverarbeitung angepaßt haben. Diesem Algorithmus liegt folgende Idee zugrunde:
Man betrachtet zunächst die Menge B aller möglicher Bilder in a Farben und definiert hierauf eine Energiefunktion U. Man setzt aus Elementen von B und Mengen von Kanten zwischen Bildpunkten Elemente einer neuen Menge X von gefärbten Graphen zusammen. Hierbei ist eine Kante zwischen zwei Bildpunkten nur möglich, falls die Bildpunkte gleichgefärbt sind. Die Energiefunktion U läßt sich in geeigneter Weise auf die Elemente von X ausdehnen.
Auf X wird ein simulated annealing - Prozeß definiert, der nicht einzelne Bildpunkte, sondern einfarbige Komponenten umfärbt. Dadurch lassen sich größere Bereiche schneller umfärben und einer optimalen Färbung annähern. Der Prozeß konvergiert gegen eine Irrfahrt auf einer Teilmenge von X, die mit der Menge aller Zustände aus B mit minimaler Energie vergleichbar ist.
Aus technischen Gründen modifizieren wir in diesem Kapitel diese Idee etwas:
Wir verwenden Kanten mit Bewertungen, die den Farbunterschied der Bildpunkte repräsentieren. Die Komponenten der gefärbten Graphen sind daher nicht einfarbig, sondern nur durch die Kantenbewertungen in den Möglichkeiten ihrer Färbung eingeschränkt.
In Kap. 3 werden wir jedoch auf die ursprüngliche Idee zurückkommen.
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 nach einem allgemeinen Konstruktionsverfahren (vgl. Bemerkung 2.4) konstruiert, der sowohl Kanten setzen, als auch Umfärbungen

vornehmen kann. Da wir zu der in [31] und [29] verwendeten Energiefunktion einen zusätzlichen Energieanteil ϵR_b hinzugefügt haben, erfolgen die Färbungen der einzelnen Komponenten unabhängig von den Wechselwirkungen mit anderen Komponenten, aber abhängig vom Energieanteil R_b.
Die zeitabhängigen stationären Verteilungen, die unseren Prozeß bestimmen, sind recht kompliziert und die Berechnungen daher langwierig.
Unsere Untersuchung beschränkt sich auf einige, für Anwendungen in der Bildrekonstruktion typische Klassen von Funktionen U, da die Definition der (zeitabhängigen) stationären Verteilung des Prozesses einen von den Wechselwirkungen der Bildpunkte abhängigen Energieanteil benötigt. Die in diesem Kapitel erzielten Ergebnisse sind jedoch nicht von der speziellen, von einem beobachteten Bild abhängigen Wahl des Anteils R_b abhängig, sondern gelten für beliebige (nichtnegative) Funktionen auf der Menge der Bilder B, da nur die maximale Größe, nicht die Gestalt von ϵR_b in die Abschätzungen eingehen.
In Bemerkung 2.4 werden wir den Zusammenhang zwischen FKSW - Prozessen und den üblichen simulated annealing - Prozessen darstellen und erläutern, nach welchen Regeln die Übergangswahrscheinlichkeiten gewählt werden müssen.
Im ersten Abschnitt dieses Kapitels definieren wir die Klasse der Energiefunktionen und die dazugehörigen simulated annealing - Prozesse, die wir betrachten wollen. Auf diese Definitionen aufbauend erarbeiten wir im zweiten Abschnitt erste Aussagen über die Konvergenzrate dieser Prozesse.

2.1 Definition des Prozesses

Wir führen zunächst einige Bezeichnungen ein:

Notation 2.1 *Seien $A \subset \mathbb{Z}^2$ endlich,*
$F := \{1, ..., a\}$ *(geordnete) Farben* $(a \in \mathbb{N})$,
$K := \{0, ..., a-1\}$ *(geordnete) Kantenbelegungen,*
$B := F^{|A|}$ *Menge der Bilder oder Färbungen von* A,
$\mathcal{F} \subset A \times A$. *Die Elemente von* $\mathcal{F}$ *werden in der Form* $< i, j > \quad (i, j \in A)$ *dargestellt und Kanten genannt, die Elemente von* A *werden als Bildpunkte oder Pixel bezeichnet.*

Definition 2.2 *Wir definieren die Menge der Grundzustände* X *und die Energiefunktion* U *auf* X *wie folgt:*

$$\begin{aligned} X \quad := \quad & \Big\{(\sigma, n) = ((\sigma_i)_{i \in A}, (n_{ij})_{<i,j> \in \mathcal{F}}) \in B \times K^{|\mathcal{F}|} \; : \\ & \text{falls } n_{ij} \neq a-1 \text{ für ein } <i,j> \in \mathcal{F}, \text{ so gilt } |\sigma_i - \sigma_j| = n_{ij} \Big\} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} U : B & \rightarrow \mathbb{R}_+ \\ \sigma & \mapsto \sum_{<i,j> \in \mathcal{F}} \phi(|\sigma_i - \sigma_j|) + \epsilon R_b(\sigma) \, , \end{aligned}$$

wobei ϕ *streng monoton wachsend,* $\phi(0) = 0$, $\epsilon > 0$ *und* $R_b : B \rightarrow \mathbb{R}_+$ *eine positive, reelle, vom beobachteten Bild* $b = (b_i)_{i \in A} \in B$ *abhängige Funktion ist.*

Wir erweitern diese Begriffe auf Elemente aus X :
Für $x = (\sigma, n) \in X$ sei $U(x) := U(\sigma)$, $R_b(x) := R_b(\sigma)$.
Sei

$$\begin{array}{rcl} \Delta : X \times X & \to & \{0,1\} \\ ((\sigma,n)\ ,\ (\rho,m)) & \mapsto & \left\{ \begin{array}{ll} 0 & \text{falls } \sigma \neq \rho \text{ und } n \neq m \text{ oder falls } \sigma = \rho \text{ und} \\ & n_{ij} \neq m_{ij} \text{ für mehr als ein } <i,j> \in \mathcal{F}, \\ 1 & \text{sonst.} \end{array} \right. \end{array}$$

Die Funktion Δ erlaubt uns, bestimmte Übergänge zwischen Elementen aus X zu verbieten.
Sei $q : X \times X \to [0,1]$ eine Funktion, für die gilt:
(I) $q(x,y)$ ist die Übergangsfunktion einer irreduziblen Markov - Kette, wobei aus $\Delta(x,y) = 0$ stets $q(x,y) = 0$ folgen soll.
(R) es existiert ein Wahrscheinlichkeitsmaß π auf X, so daß q reversibel bezüglich π ist, d.h.

$$\alpha(x,y) := \pi(x)p(x,y) = \pi(y)p(y,x) \qquad (x,y \in X)$$

gilt.
Sei $\mathcal{A} : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}_+$, $t \mapsto \beta_t$, eine monoton wachsende, positive, reelle Funktion. Sie wird annealing - Schema genannt.
Seien

$$\begin{array}{rcl} b_t(l) & := & \exp(-\beta_t \phi(l))\ ,\ (l \in K) \\ c_t(l) & := & \left\{ \begin{array}{rcl} b_t(l) - b_t(a-1) & , & l \neq a-1\ , \\ b_t(a-1) & , & l = a-1\ . \end{array} \right. \end{array}$$

Wir definieren für $x = (\sigma, n) \in X$

$$u_t(x) := u_t(\sigma,n) := \exp(-\beta_t \epsilon R_b(\sigma)) \prod_{<i,j>\in\mathcal{F}} c_t(n_{ij})\ .$$

Man beachte, daß σ und n gekoppelt sind, da $x = (\sigma, n) \in X$ gilt. Die Funktion $u_t(x)$ ist also nicht das Produkt zweier unabhängiger Funktionen.
Weiter definieren wir

$$\pi_t(x) := \frac{1}{Z_t} u_t(x)\pi(x)\ ,$$

wobei

$$Z_t := \sum_{x\in X} u_t(x)\pi(x)\ ,$$

und

$$q_t(x,y) := \left\{ \begin{array}{rcl} \min\{1, \frac{u_t(y)}{u_t(x)}\} q(x,y) & , & x \neq y, \\ 1 - \sum_{z\neq x} q_t(x,z) & , & x = y. \end{array} \right.$$

Durch π_t und q_t wird auf X ein Markov - Prozeß definiert.
$q_t(x,y)$ ist reversibel bez. $\pi(x)$, d.h. es gilt

$$\alpha_t(x,y) := \pi_t(x)q_t(x,y) = \pi_t(y)q_t(x,y)\ .$$

Bemerkung 2.3 *(nach [19], [25])*
Wie in Bem. 1.2 bemerkt, ist die Reversibilität von $Q_t := (q_t(x,y))_{x,y\in X}$ *bez.* π_t *äquivalent zu der Aussage, daß der durch*

$$[Q_t\Phi](x) = \sum_{y\in X} q_t(x,y)\Phi(y)\ , \quad x\in X,$$

gegebene Operator Q_t *eine selbstadjungierte Kontraktion auf* $L^2(\pi_t)$ *ist.*
Die Übergangsfunktion $q_t(x,y)$ *bestimmt einen kontinuierlichen Prozeß, der intuitiv wie folgt beschrieben werden kann:*
Der Prozeß, der sich zum Zeitpunkt t im Zustand x befindet, wartet eine exponentiell verteilte (mit Erwartungswert 1) Zeitspanne δ *lang, bevor er zufällig einen benachbarten Zustand y mit Wahrscheinlichkeit* $q(x,y)$ *auswählt. Ist* $u_{t+\delta}(y)\le u_{t+\delta}(x)$*, so geht der Prozeß in den Zustand y über. Ist aber* $u_{t+\delta}(y) > u_{t+\delta}(x)$ *geht er mit Wahrscheinlichkeit* $u_{t+\delta}(y)/u_{t+\delta}(x)$ *in y über, und mit Wahrscheinlichkeit* $1-u_{t+\delta}(y)/u_{t+\delta}(x)$ *bleibt er in x.*
Genauer gesagt sind die Wahrscheinlichkeiten $P_{s,t}(x,y)$ $(s<t)$ *dieses inhomogenen Markov - Prozesses bestimmt durch den infinitesimalen Erzeuger* $L_t := I - Q_t$ *und die Vorwärtsgleichung*

$$\frac{\partial}{\partial t}[P_{s,t}\Phi](x) = -(P_{s,t}[L_t\Phi])(x), \quad t\ge s,\ x\in X\ .$$

Die Verteilung dieses inhomogenen Markov - Prozesses $Y_t,\ t\ge 0$*, ist bestimmt durch* $P_{s,t}(x,y)$ *und die Startverteilung* γ *auf* X*.*

Bemerkung 2.4 *Der von uns definierte Prozeß ist eine Erweiterung des üblichen simulated annealing - Prozesses. Wir wollen damit zwei Ziele verwirklichen. Zum einen soll die stationäre Verteilung des Prozesses die stationäre Verteilung des üblichen simulated annealing - Prozesses als Randverteilung auf B besitzen, zum anderen soll die durch die Kanten zusätzlich gegebene Cluster - Struktur berücksichtigt werden und Cluster nur in Abhängigkeit von* R_b*, nicht aber von* b_t *und damit* ϕ *umgefärbt werden.*
Wir beschreiben zunächst das allgemeine Konstruktionsprinzip, nach dem sowohl die üblichen simulated annealing - Prozesse, als auch unser FKSW - Prozeß konstruiert sind.
Die jetzt folgenden Betrachtungen sind großteils aus Sokal [29] entnommen.
Zu einer vorgegebenen Verteilung π *auf einem Zustandsraum S wird eine irreduzible, bez.* π *reversible Übergangsfunktion p konstruiert. Eine sehr allgemeine Konstruktionsmethode wurde von Metropolis et al. und Hastings entwickelt. Die Idee ist folgende:*
Sei p_0 *eine beliebige irreduzible Übergangsfunktion auf* S*. Wir nennen* p_0 *die Vorschlagsfunktion, mit der wir Vorschläge für mögliche Übergänge* $x\to y$ *erzeugen, die dann mit Wahrscheinlichkeit* a_{xy} *angenommen und mit Wahrscheinlichkeit* $1-a_{xy}$ *abgelehnt werden. Die Übergangsfunktion p ist also*

$$p(x,y) = p_0(x,y)\ a_{xy} \quad \textit{falls } x\ne y, \qquad p(x,x) = 1-\sum_{z\ne x} p(x,z)\ ,$$

wobei natürlich $0 \le a_{xy} \le 1$ *gelten muß.* p *ist genau dann reversibel bez.* π*, wenn gilt*

$$\frac{a_{xy}}{a_{yx}} = \frac{\pi(y)p_0(y,x)}{\pi(x)p_0(x,y)} \; .$$

Dies läßt sich erreichen mit

$$a_{xy} = F\left(\frac{\pi(y)p_0(y,x)}{\pi(x)p_0(x,y)}\right) \; ,$$

wobei $F : [0,\infty] \to [0,1]$ *eine beliebige Funktion ist mit*

$$\frac{F(z)}{F(1/z)} = z \; \textit{ für alle } z \; .$$

Metropolis et al. schlugen $F(z) = \min\{1, z\}$ *vor, unser Prozeß ist damit konstruiert.*
Der übliche, einzelne Bildpunkte ändernde annealing - Prozeß auf der Menge der Bilder B *zur Minimierung der Energiefunktion* U *ist (mit unseren Bezeichnungen) durch die stationäre Verteilung*

$$\pi_{Potts,t}(\sigma) = Z^{-1}_{Potts,t} \; \pi(\sigma) \; \exp(-\beta_t U(\sigma))$$

bestimmt, wobei $\beta_t > 0$, π *eine Verteilung auf* B *und*

$$Z_{Potts,t} := \int_B \exp(-\beta_t U) \; d\pi$$

die Partitionsfunktion ist.
Vereinfachend vernachlässigen wir π *(man nehme* π *etwa als Gleichverteilung an). Dann gilt*

$$\begin{aligned}
Z_{Potts,t} &= \sum_{\sigma \in B} \exp(\beta_t U(\sigma)) \\
&= \sum_{\sigma \in B} \prod_{<i,j>} b_t(|\sigma_i - \sigma_j|) \; \exp(-\beta_t \epsilon R_b(\sigma)) \\
&= \sum_{\sigma \in B} \prod_{<i,j>} \sum_{k=0}^{a-1} b_t(k) \; I(|\sigma_i - \sigma_j| = k) \; \exp(-\beta_t \epsilon R_b(\sigma)) \\
&= \sum_{\sigma \in B} \left[\prod_{<i,j>} c_t(a-1) + \sum_{k=0}^{a-2} c_t(k) \; I(|\sigma_i - \sigma_j| = k) \right] \exp(-\beta_t \epsilon R_b(\sigma)) \\
&= \sum_{n \in K^{|\mathcal{F}|}} \sum_{\sigma \in B} u_t(\sigma, n) \\
&= Z_t \; .
\end{aligned}$$

$\pi_{Potts,t}$ *ist also die Randverteilung der in Def. 2.2 definierten stationären Verteilung* π_t *auf* X.
Weiter gilt für $(\sigma, n), (\rho, m) \in X$

$$\frac{u_t(\sigma,n)}{u_t(\rho,n)} = \exp(-\beta_t(R_b(\sigma) - R_b(\rho)))$$

unabhängig von b_t und ϕ. Da dieser Quotient die Übergangsfunktion q_t bestimmt, erfolgt die Umfärbung der Cluster bei vorgegebener Kantenstruktur $n = (n_{ij})_{ij}$ also mit Übergangswahrscheinlichkeiten, die nur vom Energieanteil R_b, nicht aber von den Wechselwirkungen der Bildpunkte abhängen.

2.2 Abschätzung der Konvergenzrate

In diesem Abschnitt erarbeiten wir erste Abschätzungen der Konvergenzrate. In Satz 2.7 bestimmen wir ein annealing - Schema β_t und berechnen eine obere Schranke für die Wahrscheinlichkeit $P_x(\tau_V > t)$, nach dem Zeitraum t das Energieniveau E nicht unterschritten zu haben, in Abhängigkeit von β_t. Hierbei verwenden wir ein bereits in [25] und [19] angewendetes Verfahren. Wir schätzen $P_x(\tau_V > t) - \pi_t(V)$ durch eine von t abhängige Funktion w_t nach oben ab und stellen für w_t eine Differentialungleichung auf. Aus dieser Ungleichung gewinnen wir das annealing - Schema β_t und eine Abschätzung für $P_x(\tau_V > t)$.
Wir definieren zunächst eine Größe h_x, die ein Maß für das maximale Hindernis ist, um von einem $x = (\sigma, n) \in V$ zu einem $y \in \partial V$ zu gelangen.
Sei für $x \in V$ definiert:

$$\begin{aligned} h_x \quad := \quad \min \Big\{ & N \geq 0 : \text{ Es existiert ein } y = (\rho, m) \in \partial V \text{ und ein Pfad } \xi \text{ in} \\ & G, \text{ der } x \text{ und } y \text{ verbindet, so daß für alle Knoten } (\theta, k) \\ & \text{des Pfades } \epsilon R_b(\theta) \leq \epsilon R_b(\sigma) + N \text{ gilt und für alle } l > 0 \\ & |\{< i,j > \in \mathcal{F} : k_{ij} = l\}| \leq |\{< i,j > \in \mathcal{F} : n_{ij} = l\}| + \frac{N}{(a-1)\phi(l)} \Big\} , \end{aligned} \tag{2.5}$$

Für $V \subset X$ definiere

$$h := h_V := \max \{h_x : x \in V\} \ .$$

Sei

$$M := \max_{(\sigma,n)\in X} \left(\epsilon R_b(\sigma) + \sum_{<i,j>} \phi(a-1) \right) \text{ die maximale Energie.}$$

Für den nächsten Satz wollen wir die Gültigkeit folgender Annahme voraussetzen:
Für ein vorgegebenes $V \subset X$ gelte ($\rho \in L^2(\pi_t)$)

$$\inf \left\{ \frac{\mathcal{E}_t(\rho,\rho)}{Var_t(\rho)} : \rho|_{V^c} \text{ konstant , } \rho \text{ nicht konstant} \right\} \geq \gamma \exp(-2\beta_t h) \tag{2.6}$$

für alle $t \geq 0$ und eine Konstante γ mit $0 < \gamma < 1$. Hierbei bezeichne $Var_t(\rho)$ die Varianz von ρ bez. π_t und $\mathcal{E}_t(\rho,\rho)$ die in Bem. 1.2 definierte Dirichletform (mit α_t statt α)

Satz 2.7 *Sei $V \subset X$.*
Seien (I), (R) und Annahme 2.6 erfüllt.
Bezeichne Y_t , $t \geq 0$, den simulated annealing - Prozeß, der durch q_t mit

$$\beta_t = \frac{1}{2h} \ln \left(\frac{4h\gamma}{5M} t + \exp(2\beta_0 h) \right)$$

für $t \geq 0$ und ein $\beta_0 \geq \frac{\ln(2)}{\phi(a-1)-\phi(a-2)}$ bestimmt ist.
Sei τ_V der Zeitpunkt des ersten Erreichens der Menge $V^c = X \setminus V$.
Bezeichne $P_x(Y_t \in A)$ die Verteilung von Y_t mit Startverteilung ϵ_x.
Dann gilt für $x \in V$

$$P_x(\tau_V > t) \leq 9\ \pi_t(V) + \pi_t(V)^{1/2}\pi_0(x)^{-1/2}\exp(-\frac{3}{2}M(\beta_t - \beta_0))\ .$$

Bemerkung 2.8 *Satz 2.7 sagt im Wesentlichen folgendes aus:*
Das simulated annealing - Schema β_t ist umgekehrt proportional von der Höhe h und logarithmisch von der Zeit t abhängig.
Die Wahrscheinlichkeit $P_x(\tau_V > t)$, nach einem Zeitraum t die Menge V noch nie verlassen zu haben, wenn man in $x \in V$ gestartet ist, wird von der Größe $\pi_t(V)$ bestimmt. Die Annäherung von $P_x(\tau_V > t)$ an ein Vielfaches von $\pi_t(V)$ wird bestimmt vom Produkt eines Termes von der Ordnung $O(t^{-M/h})$ mit $\pi_t(V)^{1/2}$ und $\pi_0(x)^{-1/2}$. Eine große (zeitabhängige) Wahrscheinlichkeit von V und eine kleine (Anfangs -) Wahrscheinlichkeit von x beeinflussen diese Annäherung also negativ.

Beweis: Die Beweisidee stammt aus [19] und wird hier verallgemeinert.
Es gilt

$$P_x(\tau_V > t) = P_x(Y_s \in V \quad \forall s \leq t) \leq \inf_{s \leq t} P_x(Y_s \in V)\ ,$$

da $\{Y_{\hat{s}} \in V \quad \forall \hat{s} \leq t\} \subset \{Y_s \in V\}$ für alle $s \leq t$ gilt.
Weiter gilt

$$\begin{aligned}(P_x(Y_t \in V) - \pi_t(V))^2 &= \left(\sum_y (f_t(y) - 1)1_V(y)\pi_t(y)\right)^2 \\ &\leq \|f_t - 1\|_t^2 \pi_t(V)\ ,\end{aligned}$$

wobei

$$f_t(y) := \frac{P_x(Y_t = y)}{\pi_t(y)} = \frac{P_{0,t}(x,y)}{\pi_t(y)}\ .$$

Wir führen folgende Abkürzungen ein:
$a_t := f_t - 1$, $w_t := \|a_t\|_t^2$.
Um w_t abzuschätzen, stellen wir für w_t eine Differentialungleichung auf.
Mit

$$U_t(\sigma, n) := \epsilon R_b(\sigma)\ + \sum_{<i,j>} \phi(n_{ij})\ - \sum_{<i,j>:n_{ij} \neq a-1} (\phi(a-1) - \phi(n_{ij}))\frac{c_t(a-1)}{c_t(n_{ij})}$$

und

$$< U_t >_t := \sum_{(\sigma,n)} U_t(\sigma, n)\pi_t(\sigma, n)$$

berechnen wir zunächst

$$\frac{d}{dt}Z_t = \frac{d}{dt}\left(\sum_{(\sigma,n)} u_t(\sigma, n)\ \pi(\sigma, n)\right)$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{d}{dt}\left[\sum_{(\sigma,n)} \pi(\sigma,n)\exp(-\beta_t \epsilon R_b(\sigma)) \prod_{<i,j>} c_t(n_{ij})\right] \\
&= -\beta_t' \sum_{(\sigma,n)} u_t(\sigma,n)\ \pi(\sigma,n) \cdot \\
&\cdot \left[\epsilon R_b(\sigma) + \sum_{<i,j>} \frac{\phi(n_{ij})b_t(n_{ij}) - \phi(a-1)b_t(a-1)}{b_t(n_{ij}) - b_t(a-1)}\ 1_{\{n_{ij}\neq a-1\}} + \phi(a-1)1_{\{n_{ij}=a-1\}}\right] \\
&= -\beta_t' \sum_{(\sigma,n)} u_t(\sigma,n)\ \pi(\sigma,n) U_t(\sigma,n) \\
&= -\beta_t'\ Z_t < U_t >_t
\end{aligned}
$$

und

$$
\begin{aligned}
&\frac{d}{dt}\pi_t(\sigma,n) = \frac{d}{dt}\left[\frac{1}{Z_t}\ u_t(\sigma,n)\ \pi(\sigma,n)\right] \\
&\quad = \frac{1}{Z_t^2}\left[\ -\beta_t'\ Z_t\ U_t(\sigma,n)\ u_t(\sigma,n)\ \pi(\sigma,n) + \beta_t'\ Z_t\ u_t(\sigma,n)\ \pi(\sigma,n) < U_t >_t\ \right] \\
&\quad = -\beta_t'\ \pi_t(\sigma,n)\left[\ U_t(\sigma,n) - < U_t >_t\ \right]\ .
\end{aligned}
$$

Sei $\hat{U}_t(\sigma,n) := U_t(\sigma,n) - < U_t >_t$.
Dann ergibt sich

$$
\begin{aligned}
&\frac{d}{dt}f_t(y) = \frac{d}{dt}\left(\frac{P_{0,t}(x,y)}{\pi_t(y)}\right) \\
&\quad = \frac{1}{\pi_t(y)}\left[\ \frac{d}{dt}\ P_{0,t}(x,y) + P_{0,t}(x,y)\ \beta_t'\ \hat{U}_t(\sigma,n)\right] \\
&\quad = \frac{1}{\pi_t(y)}\left[\sum_z P_{0,t}(x,z)q_t(z,y) - P_{0,t}(x,y)q_t(y,z)] + P_{0,t}(x,y)\beta_t'\hat{U}_t(\sigma,n)\right] \\
&\quad = \frac{1}{\pi_t(y)}\sum_z\ (a_t(z) - a_t(y))\ \alpha_t(z,y) + \beta_t'\ \hat{U}_t(\sigma,n)\ f_t(y)
\end{aligned}
$$

und wir erhalten

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}w_t &= -\sum_y\sum_z\ (a_t(y) - a_t(z))^2\ \alpha_t(z,y) \\
&\quad +\ \beta_t'\ \sum_y a_t(y)^2\ \pi_t(y)\ \hat{U}_t(y) \\
&\quad +\ 2\ \beta_t'\ \sum_y\ a_t(y)\ \pi_t(y)\ \hat{U}_t(y) \\
&= -2\mathcal{E}_t(a_t,a_t) \\
&\quad +\ \beta_t'\ \sum_y a_t(y)^2\ \pi_t(y)\ \hat{U}_t(y) \\
&\quad +\ 2\ \beta_t'\ \sum_y\ a_t(y)\ \pi_t(y)\ \hat{U}_t(y)\ .
\end{aligned}
$$

Es erweist sich als günstig, den Markovprozeß Y_t auf X zu modifizieren, indem man V^c durch einen einzigen Zustand x_0 ersetzt.

Definiere $\hat{X} := V \cup \{x_0\}$ und $\hat{q}_t(x,y)$ auf $\hat{X}$ wie folgt:

$$\begin{aligned}
\hat{q}_t(x,y) &= q_t(x,y) && x,y \in V \\
\hat{q}_t(x,x_0) &= \sum_{y \in V^c} q_t(x,y) && x \in V \\
\hat{q}_t(x_0,x) &= \frac{\pi_t(x)}{\pi_t(V^c)}\, \hat{q}_t(x,x_0) && x \in V \\
\hat{q}_t(x_0,x_0) &= 1 - \sum_{x \in V} \hat{q}_t(x_0,x) \; .
\end{aligned}$$

Daraus folgt, daß $\hat{\pi}_t(x) := \pi_t(x)$ für alle $x \in V$ und $\hat{\pi}_t(x_0) := \pi_t(V^c)$ die stationäre Verteilung von $\hat{q}_t$ auf $\hat{X}$ ist.
Also definiert $\hat{q}_t$ eine irreduzible Markovkette auf $\hat{X}$, die reversibel bezüglich $\hat{\pi}_t$ ist.
Ebenso ist ein Start - Prozeß durch $\hat{q}(x,y) := \hat{q}_0(x,y)$ definiert, der reversibel bezüglich $\hat{\pi}(x) = \hat{\pi}_0(x)$ ist.
Bezeichne $\hat{Y}_t$, $t \geq 0$, den simulated annealing - Prozeß auf $\hat{X}$, der durch $\hat{q}_t$ und $\hat{\pi}_t$ bestimmt wird. Sei $\hat{\tau}_V$ der Zeitpunkt des ersten Erreichens von $x_0 \in \hat{X}$. Da offensichtlich $\tau_V = \hat{\tau}_V$ gilt (bei gegebenem $Y_0 = x \in V$), und daher $Y_t = \hat{Y}_t$ gilt, solange $\tau_V > t$ gilt, können wir für $x \in V$ schließen

$$P_x(\tau_V > t) = P_x(\hat{\tau}_V > t) \; .$$

Da jede Funktion $\rho : X \to \mathbb{R}$, die konstant auf V^c ist, eine Funktion $\hat{\rho} : \hat{X} \to \mathbb{R}$ impliziert, die auf V gleich ρ ist, erhalten wir für die Dirichletform $\hat{\mathcal{E}}_t$ auf $\hat{X}$ und solche Funktionen ρ , daß

$$\hat{\mathcal{E}}_t(\hat{\rho},\hat{\rho}) = \mathcal{E}_t(\rho,\rho)$$

gilt.
Also impliziert Annahme 2.6

$$\hat{\mathcal{E}}_t(\hat{\rho},\hat{\rho}) \geq \gamma \exp(-2\beta_t h)\; Var_t(\hat{\rho}) \; .$$

Weiter definieren wir $\hat{U}_t(y) = U_t(y)$ für $y \in V$ und

$$\hat{U}_t(x_0) = \sum_{y \in V^c} U_t(y)\; \pi_t(y) \;/\; \pi_t(V^c) \; .$$

Wir können also statt des Prozesses Y_t auf X den Prozeß $\hat{Y}_t$ auf $\hat{X}$ betrachten. Insbesondere genügt es, in obiger Ungleichung Funktionen w_t zu betrachten, die auf V^c konstant sind.
Zur Vereinfachung der Notation benützen wir weiterhin die Bezeichnungen X , U_t , q_t usw..
Wir wollen nun obige Gleichung für w_t vereinfachen und in eine Differentialungleichung umwandeln.
Hierzu schätzen wir $|\hat{U}_t(\sigma,n)|$:
Zunächst gilt $-M \leq U_t(\sigma,n) \leq M$ falls $\beta_t \geq \frac{\ln(2)}{\phi(a-1)-\phi(a-2)}$.

Denn

$$\begin{aligned} 0 &\le \sum_{<i,j>:n_{ij}\neq a-1} (\phi(a-1)-\phi(n_{ij}))\ \frac{c_t(a-1)}{c_t(n_{ij})} \\ &\le \sum_{<i,j>} \phi(a-1)\ \frac{c_t(a-1)}{c_t(n_{ij})} \\ &\le M\ , \end{aligned}$$

falls

$$\frac{c_t(a-1)}{c_t(n_{ij})} \le 1 \ \Leftrightarrow\ \frac{\ln 2}{\phi(a-1)-\phi(n_{ij})} \le \beta_t\ .$$

Damit haben wir

$$\begin{aligned} U_t(\sigma,n) &= \epsilon R_b(\sigma) + \sum_{<i,j>} \phi(n_{ij}) - \sum_{<i,j>:n_{ij}\neq a-1} (\phi(a-1)-\phi(n_{ij}))\frac{c_t(a-1)}{c_t(n_{ij})} \\ &\ge \epsilon R_b(\sigma) + \sum_{<i,j>} \phi(n_{ij}) - M \\ &\ge -M \end{aligned}$$

und

$$U_t(\sigma,n) \le \epsilon R_b(\sigma) + \sum_{<i,j>} \phi(n_{ij}) \le M\ .$$

Damit ergibt sich für solche β_t :

$$|\hat{U}(\sigma,n)| = |U_t(\sigma,n) - < U_t >_t | \le 2M$$

und

$$||\hat{U}_t 1_V||_t = \int_V \hat{U}_t(y)^2\ d\pi_t(y))^{1/2} \le M\pi_t(V)^{1/2}\ .$$

Mit

$$|a_t(V^c)| = \pi_t(V^c)^{-1}\ |\int_V a_t(y)\ \pi_t(y)\ dy\ | \le w_t^{1/2}\ \pi_t(V)^{1/2}\ \pi_t(V^c)^{-1}$$

gilt

$$\begin{aligned} &\sum_y a_t(y)\ \pi_t(y)\ \hat{U}_t(y) \\ &\le\ ||\ \hat{U}_t\ 1_V||_t\ w_t^{1/2} + |\hat{U}_t(x_0)|\ w_t^{1/2}\ \pi_t(V)^{1/2} \\ &\le\ 4\ M\ \pi_t(V)^{1/2}\ w_t^{1/2}\ . \end{aligned}$$

Daraus folgt

$$w_t' \le [\ -2\gamma \exp(-2\beta_t h) + 2\beta_t' M\ ]\ w_t + 8M\beta_t'\ \pi_t(V)^{1/2}\ w_t^{1/2}\ .$$

Aus dieser Differentialungleichung können wir nun die Aussagen des Satzes folgern.

Definiere

$$
\begin{aligned}
v_t &:= w_t^{1/2} \ , \\
H_t &:= \int_0^t \gamma \exp(-2\beta_s h) - M\beta_s' \ ds \ , \\
o_t &:= 4M\beta_t' \ \pi_t(V)^{1/2} \ , \\
< U_t >_{t,V} &:= \int_V U_t(z) \ d\pi_t(z) \ / \ \pi_t(V) \ .
\end{aligned}
$$

Es gilt

$$
\begin{aligned}
\frac{\pi_t'(V)}{\pi_t(V)} &= \beta_t' \left(\sum_{(\sigma,n)\in V} \hat{U}_t(\sigma,n) \ \pi_t(\sigma,n) \right) \pi_t(V)^{-1} \\
&= -\beta_t' \ (< U_t >_{t,V} - < U_t >_t)
\end{aligned}
$$

und damit

$$
\begin{aligned}
\ln\left(\frac{\pi_s(V)}{\pi_t(V)}\right) &= -\int_s^t \frac{\pi_r'(V)}{\pi_r(V)} \ dr \\
&= \int_s^t \beta_r' \ (< U_r >_{r,V} - < U_r >_r) \ dr \ .
\end{aligned}
$$

Mit $v_t' = w_t'/(2w_t^{1/2})$ ergibt sich

$$
v_t' + H_t' v_t \le o_t \text{ für alle } t \ge 0 \ .
$$

Multiplikation mit e^{H_t} und Integration über t ergibt

$$
v_t \le v_0 e^{-H_t} + e^{-H_t} \int_0^t e^{H_s} o_s \ ds \ .
$$

Wähle β_t so, daß $\frac{5}{2}M\beta_t' = \gamma \exp(-2\beta_t' h)$ gilt, d.h. so, wie im Satz angegeben. Dann gilt

$$
H_t = \int_0^t \frac{3}{2}\beta_s' M ds = \frac{3}{2}M(\beta_t - \beta_0)
$$

und damit

$$
\begin{aligned}
v_t &\le v_0 \exp(-\frac{3}{2}M(\beta_t - \beta_0)) + \\
&+ \exp(-\frac{3}{2}M(\beta_t - \beta_0)) \int_0^t \exp(\int_0^s \frac{3}{2}M(\beta_t - \beta_0)) 4M\beta_s' \frac{\pi_s(V)^{1/2}}{\pi_t(V)^{1/2}} \pi_t(V)^{1/2} ds \\
&\le v_0 \exp(-\frac{3}{2}M(\beta_t - \beta_0)) + \\
&+ 4M\pi_t(V)^{1/2} \int_0^t \exp\left(-\int_s^t (\frac{3}{2}M + \frac{1}{2}(< U_r >_r - < U_r >_{r,V})) d\beta_r\right) d\beta_s \ .
\end{aligned}
$$

Wegen $< U_r >_r - < U_r >_{r,V} \ge -2M$ ergibt sich

$$
\begin{aligned}
v_t &\le v_0 \exp(-\frac{3}{2}M(\beta_t - \beta_0)) + 4M\pi_t(V)^{1/2} \int_0^t \exp(-\frac{M}{2}(\beta_t - \beta_s)) \ d\beta_s \\
&= v_0 \exp(-\frac{3}{2}M(\beta_t - \beta_0)) + 8\pi_t(V)^{1/2} \left(1 - \exp(-\frac{M}{2}(\beta_t - \beta_0))\right) \\
&\le v_0 \exp(-\frac{3}{2}M(\beta_t - \beta_0)) + 8\pi_t(V)^{1/2} \ .
\end{aligned}
$$

Mit $v_0 \leq \pi_0(x)^{-1/2}$ ergibt sich

$$|P_x(Y_t \in V) - \pi_t(V)| \leq \pi_t(V)^{1/2}\pi_0(x)^{-1/2}\exp(-\frac{3}{2}M(\beta_t - \beta_0)) + 8\pi_t(V) \ .$$

Mit der Monotonie von $\pi_t(V)$ können wir schließen:

$$P_x(\tau_V > t) \leq \pi_t(V)^{1/2}\pi_0(x)^{-1/2}\exp(-\frac{3}{2}M(\beta_t - \beta_0)) + 9\pi_t(V) \ .$$

Damit haben wir die Aussagen des Satzes bewiesen.

In den nachfolgenden Korollaren wollen wir nun den Satz konkretisieren und die Konvergenzrate des Prozesses Y_t schätzen.

Mit den Bezeichnungen von Def. 1.3 definieren wir für eine gerichtete Kante e von Γ_V

$$\xi_e := \{\gamma_x : x \in V \ , \ e \in \gamma_x\}$$

als das Teilsystem der Pfade, die e enthalten, und

$$\Xi_e := \{x \in V \ , \ e \in \gamma_x\}$$

als die korrespondierende Menge von Anfangsknoten.
Dann folgt Annahme 2.6 aus der in Lemma 1.5 gegebenen Schranke und der Bedingung, daß ein Pfadsystem $\zeta \in \mathcal{T}_V$ für G_V existiert, so daß

$$\max_{(x,y)\in G_V} \alpha_t(x,y)^{-1} \sum_z |\gamma_z| \ I((x,y) \in \gamma_z) \ \pi_t(z) \ \ \leq \ \ \gamma^{-1}\exp(2\beta_t h)$$

für alle $t \geq 0$ gilt.
Wir werden für $V := \{x \in X : U(x) \geq E\}$ zeigen, daß diese Bedingung erfüllt ist, also Satz 2.7 gilt, falls nachfolgende Annahmen über die Zahl der Zustände in Ξ_e gelten. Die erste Annahme besagt im Wesentlichen, daß die Zahl der Zustände, deren Pfade eine Kante e enthalten, in Abhängigkeit von einer kantenabhängigen Modifikation der Energiefunktion U nicht mehr als exponentiell mit Wachstumsfaktor β wächst. Die zweite Annahme besagt, daß die Gesammtzahl aller Zustände in Abhängigkeit von U nicht mehr als exponentiell mit Wachstumsfaktor β wächst.
Sei $U_0 := \min_{\sigma\in B} U(\sigma)$ die minimale Energie eines Elementes aus B.
Für $(\sigma, n) \in X$ sei

$$\delta(n,l) := |\{< i,j >\in \mathcal{F} : n_{ij} = l\}| \qquad (l = 0, ..., a-1) \ .$$

Für eine Kante $e = ((\sigma, n) \ , \ (\rho, m))$ von G sei

$$\begin{aligned} F_e(v,w) \ := \ \ \# \ \ & \Big\{(\theta,k) \in \Xi_e : R_b(\theta) \leq \max\{R_b(\sigma), R_b(\rho)\} + v, \\ & \delta(k,l) \leq \min\{\delta(n,l), \delta(m,l)\} + w(l) \ \ \forall l = 1, ..., a-2 \\ & \delta(k,a-1) \leq \max\{\delta(n,a-1), \delta(m,a-1)\} + w(a-1)\Big\} \end{aligned}$$

für $0 \leq v \leq \max_\sigma R_b(\sigma)$ und $0 \leq w(l) \leq |\mathcal{F}| \ \ (l \in K)$, und sei

$$G(u) := \#\{\theta \in B : U(\theta) \leq U_0 + u\}$$

für $0 \leq u \leq M - U_0$.
Angenommen es existieren Konstanten $\beta > 0$, $H > 0$ und ein System ξ für G , so daß gilt

$$F_e(v,w) \leq H \exp\left(\beta\ (\ \epsilon\ v + \sum_{l>0} w(l)\phi(l)\ )\right) \tag{2.9}$$

und

$$G(u) \leq H \exp(\beta u)\ G(0)$$

für $0 \leq v \leq \max_\sigma R_b(\sigma)$, $0 \leq w(l) \leq |\mathcal{F}|$ $(l \in K)$ und $0 \leq u \leq M - U_0$.

Korollar 2.10 *Sei* $V := \{x \in X : U(x) \geq E\}$.
Sei $x = (\sigma^{(x)}, n^{(x)}) \in V$ *mit* $|\sigma_i^{(x)} - \sigma_j^{(x)}| = n_{ij}^{(x)}$ *für alle* $< i,j > \in \mathcal{F}$ *gegeben.*
Angenommen, (I), (R) und Annahme 2.9 gelten.
Sei β_t *wie in Satz 2.7 mit Konstanten* β_0 *und* γ *wie unten definiert.*
Dann gilt

$$\frac{P_x(\tau_V > t)}{\pi_t(V)} \leq 10$$

für alle $t \geq t_0 := t_0(M, h, \gamma, \Delta_\pi, H, g, x, \beta_0)$
Weiter gilt

$$\pi_t(V)\ \leq\ 2\ \Delta_\pi\ H\ \exp(\ -(\beta_t - \beta)(E - U_0)\ )\ .$$

Für die Relaxationszeit t_0 *gilt*

$$t_0 := \frac{5M}{4h\gamma} \exp\left[\frac{2h}{M}\left(\ln(\Delta_\pi |V|^{-1/2} 2Hg) + \frac{N(x)}{2}\right) + 2h\beta_0\left(\frac{3}{2} + \frac{1}{2}\frac{U(x)}{M}\right)\right]\ .$$

Für die Bestimmung von β_t*, die Abschätzung von* $\pi_t(V)$ *und der Relaxationszeit* t_0 *benötigen wir folgende Konstanten:*

$$\begin{aligned}
\beta_0 &\geq \max\{2\beta\ ,\ K_\phi\}\ , \\
K_\phi &:= \max\left\{\frac{\ln 2}{\phi(a-1) - \phi(a-2)}\ ,\ \frac{-\ln(1 - e^{-\phi(1)})}{\phi(a-1) - \phi(a-2)}\ ,\ \frac{1}{\phi(a-1)}\right\}\ , \\
\gamma^{-1} &:= 2^a L H d \Delta_\pi e^h\ , \\
d &:= \max_{x \neq y} q(x,y)^{-1}\ , \\
\Delta_\pi &:= \max_{x,y} \frac{\pi(x)}{\pi(y)}\ , \\
L &:= \max_{y \in G_V} |\gamma_y|,\ \textit{(maximale Länge eines Pfades, der } y \textit{ mit } \partial V \textit{ verbindet),} \\
g &:= \#\{\rho \in B : U(\rho) = U_0\}\ \textit{(Anzahl der Zustände minimaler Energie),} \\
N(x) &:= \#\{< i,j > \in \mathcal{F} : n_{ij}^{(x)} \neq a - 1\}\ (N(x) \textit{ ist von } E \textit{ abhängig).}
\end{aligned}$$

Bemerkung 2.11 *Korollar 2.10 konkretisiert Satz 2.7 und gibt den Zeitraum* t *an, in dem* $P_x(\tau_V > t)$ *eine durch* $\pi_t(V)$ *bestimmte Größenordnung erreicht. Weiter wird eine obere Schranke für* $\pi_t(V)$ *angegeben.*

Insbesondere läßt sich mit Korollar 2.10 eine Abschätzung des Zeitraums t angeben, der vergehen muß, bis $P_x(\tau_V > t) < \epsilon$ für ein $\epsilon > 0$ gilt, und damit auch zeigen, daß $P_x(\tau_V > t) \leq K\ t^{-(E-U_0)/(2h)}$ für eine Konstante K gilt. Da die Zeit t ungefähr der Anzahl der tatsächlichen Zustandsänderungen des Prozesses entspricht (vgl. Bem. 2.3), haben wir in den asymptotischen Ergebnissen in [4] S. 76 ff eine Vergleichsmöglichkeit. Dort werden (für $U_0 = 0$) annealing - Schemata für die üblichen simulated annealing - Prozesse angegeben, so daß $P_x(\tau_V > t) \leq \hat{K}\ t^{-E(l)/h(l)}$ für eine Konstante $\hat{K}$ und einem lokal von der Energieanordnung auf den Zuständen abhängigen Quotienten $E(l)/h(l) \geq E/(2h)$ gilt. Wir haben also keine bessere Asymptotik mit unserem Prozeß erreicht als (theoretisch) mit gewöhnlichem simulated annealing erreichbar wäre.
Dennoch ist es sinnvoll, den zusätzlichen Aufwand der Kantensetzung zu betreiben, da wir die Konstante K berechnen können, während von der Konstanten $\hat{K}$ nur ihre Existenz, nicht aber ihre Größe bekannt ist (sie wird als sehr groß angenommen).

Korollar 2.12 *Seien die Voraussetzungen des Korollars 2.10 gegeben.*
Sei $t \geq t_0$.
Dann gilt

$$P_x(\tau_V > t) < K_G\ K_\beta\ K_U\ t^{-(E-U_0)/(2h)}\ ,$$

wobei

$$\begin{aligned} K_G &:= 20\Delta_\pi \gamma^{-(E-U_0)/(2h)} \\ &\quad \text{vom Parameter } \gamma \text{ der Abschätzung der Dirichletform (vgl. S. 25)} \\ &\quad \text{bestimmt wird,} \\ K_\beta &:= H\exp(\beta(E-U_0)) \\ &\quad \text{von den Parametern } \beta \text{ und } H \text{ des Graphen } G \text{ (vgl. S. 32) bestimmt} \\ &\quad \text{wird, und} \\ K_U &:= (\frac{5M}{4h})^{(E-U_0)/(2h)} \\ &\quad \text{vom Quotienten der maximalen Energie } M \text{ zur maximal} \\ &\quad \text{aufzuwendenden Energie } h, \text{ d.h. von der 'Energielandschaft'} \\ &\quad \text{auf } X \text{ bestimmt wird.} \end{aligned}$$

Damit gilt für $\epsilon > 0$

$$P_x(\tau_V > t) \leq \epsilon\ ,$$

falls

$$t > (K^{-1}\ \epsilon)^{-\frac{2h}{E-U_0}}\ ,$$

wobei $K := K_G\ K_\beta\ K_U$.

Bemerkung 2.13 *Korollar 2.12 läßt es günstig erscheinen, den Prozeß nur eine gewisse Zeit laufen zu lassen und dann erneut mit dem zuletzt erreichten Zustand als Startzustand zu starten. Denn gilt nach der Laufzeit $t = (K^{-1}\ \epsilon)^{-2h/(E-U_0)}$, daß $P_x(\tau_V > t) \leq \epsilon$ ist, so ergibt das Korollar eine Laufzeit von $t^n K^{-2(n-1)h/(E-U_0)}$, um $P_x(\tau_V > t) \leq \epsilon^n$ zu erreichen. Startet man nach t Zeiteinheiten dagegen jeweils neu, so erreicht man dies nach einer Gesamtlaufzeit von $n \cdot t$ Zeiteinheiten.*

Beweis: von Korollar 2.12.
Aus 2.10 folgt für $t \geq t_0$

$$\begin{aligned}
P_x(\tau_V > t) &\leq 10\ \pi_t(V) \\
&\leq 20\Delta_\pi H \exp(\ -(\beta_t - \beta)(E - U_0)\ ) \\
&= 20\Delta_\pi H \exp(\beta(E-U_0)) \left(\frac{4h\gamma}{5M}t + \exp(2\beta_0 h)\right)^{-\frac{E-U_0}{2h}} \\
&\leq 20\Delta_\pi H \exp(\beta(E-U_0)) \left(\frac{4h\gamma}{5M}\right)^{-\frac{E-U_0}{2h}} t^{-\frac{E-U_0}{2h}} \\
&= K_G\ K_\beta\ K_U\ t^{-\frac{E-U_0}{2h}}\ .
\end{aligned}$$

Gilt für ein $\epsilon > 0$

$$K\ t^{-\frac{E-U_0}{2h}} < \epsilon \quad \Leftrightarrow \quad t > (K^{-1}\ \epsilon)^{-\frac{2h}{E-U_0}}\ ,$$

so erhalten wir $P_x(\tau_V > t) \leq \epsilon$.

Beweis: von Korollar 2.10. Wir schätzen γ in Annahme 2.6 mittels der Annahmen 2.9 über das Pfadsystem ab.
Seien $x = (\sigma, n)\ ,\ y = (\rho, m)\ ,\ z = (\theta, k) \in X$.
Für eine Kante $e = (x, y) \in G_V$ gilt

$$\begin{aligned}
&\alpha_t(x,y)^{-1} \sum_z |\gamma_z|\ I(e \in \gamma_z)\ \pi_t(z) \\
&= (\min\{\pi_t(x)q(x,y), \pi_t(y)q(y,x)\})^{-1} \sum_z |\gamma_z|\ I(e \in \gamma_z)\ \pi_t(z) \\
&\leq d\Delta_\pi \sum_{(\theta,k)} |\gamma_{(\theta,k)}| I(e \in \gamma_{(\theta,k)}) \exp\left(-\beta_t \epsilon (R_b(\theta) - \max\{R_b(\sigma), R_b(\rho)\})\right) \\
&\cdot\ \max\left\{\prod_{l=0}^{a-1} c_t(l)^{\delta(k,l)-\delta(n,l)}\ ,\ \prod_{l=0}^{a-1} c_t(l)^{\delta(k,l)-\delta(m,l)}\right\} \\
&= d\Delta_\pi \sum_{(\theta,k)} |\gamma_{(\theta,k)}| I(e \in \gamma_{(\theta,k)}) \exp\left(-\beta_t \epsilon (R_b(\theta) - \max\{R_b(\sigma), R_b(\rho)\})\right) \\
&\cdot\ \prod_{l=0}^{a-1} c_t(l)^{\delta(k,l)-\min\{\delta(n,l),\delta(m,l)\}}
\end{aligned}$$

Gleichheit besteht , falls n und m sich nur in der Belegung höchstens einer Kante unterscheiden. Dies ist aber durch die Def. von q in 2.2 gegeben.

$$\leq d\Delta_\pi L \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}^{a-1}} \exp(-\beta_t \epsilon v) \prod_{l=0}^{a-1} c_t(l)^{w(l)} dF(v,w)$$

mit $w(0) := \sum_{l>0} w(l)$ und $F(v,w)$ wie in Ann. 2.9 definiert.

$$\leq d\Delta_\pi L \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}^{a-1}} \exp(-\beta_t \epsilon v) \prod_{l=1}^{a-1} \left(\frac{c_t(l)}{c_t(0)}\right)^{w(l)} dF(v,w)$$

$$
\begin{aligned}
&= d\Delta_\pi L(-1)^a \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}^{a-1}} \exp(-\beta_t \epsilon v)(-\beta_t \epsilon) \prod_{l=1}^{a-1} \left(\frac{c_t(l)}{c_t(0)}\right)^{w(l)} \\
&\cdot \ln\left(\frac{c_t(l)}{c_t(0)}\right) F(v,w) dv\ dw \\
&\leq d\Delta_\pi L H \int_{-h/\epsilon}^{\infty} \int_{-h/((a-1)\phi(1))}^{\infty} \ldots \int_{-h/((a-1)\phi(a-1))}^{\infty} \exp(-\beta_t \epsilon v)(-\beta_t \epsilon) \\
&\cdot \prod_{l=1}^{a-1} \left(\frac{c_t(l)}{c_t(0)} e^{\phi(l)}\right)^{w(l)} \left(-\ln\left(\frac{c_t(l)}{c_t(0)}\right)\right)\ dv\ dw \\
&\quad \text{unter der Annahme } F(v,w) \leq H \exp\left(\beta(\epsilon v + \sum_{l>0} w(l)\phi(l))\right) \\
&\quad \text{und da (nach Def. von } h) \ F(v,w) = 0 \text{ falls } v \leq -h/\epsilon \text{ oder} \\
&\quad w(l) \leq -h/((a-1)\phi(l)) \text{ für ein } l \text{ gilt.} \\
&\leq d\Delta_\pi L H 2^a \exp(h(\beta_t - \beta)) \prod_{l=1}^{a-1} \left(\frac{c_t(l)}{c_t(0)}\right)^{-\frac{h}{(a-1)\phi(l)}} \\
&\quad \text{falls } \beta_t \geq 2\beta, \beta_t > \phi(a-1)^{-1} \\
&\leq d\Delta_\pi L H 2^a \exp(h\beta_t) \prod_{l=1}^{a-1} (b_t(l) e^{-\phi(l)})^{-\frac{h}{(a-1)\phi(l)}} b_t(a-1)^{-\frac{h}{(a-1)\phi(a-1)}} \\
&\quad \text{falls } \frac{c_t(l)}{c_t(0)} \geq e^{-\phi(l)} b_t(l) \\
&\quad \text{d.h. falls } \beta_t \geq \frac{-\ln(1-e^{-\phi(l)})}{\phi(a-1)-\phi(l)} \ , \ l = 1, ..., a-2 \\
&\leq d\Delta_\pi L H 2^a e^h \exp(2h\beta_t) \ .
\end{aligned}
$$

Die Funktion

$$
\prod_{l=1}^{a-1} \left(\frac{c_t(l)}{c_t(0)}\right)^{-\frac{h}{(a-1)\phi(l)}}
$$

nähert sich für wachsendes t asymptotisch von oben der Funktion $\exp(\beta_t h)$. Die Konstante e^h läßt sich, wählt man einen höheren Startwert β_0 , der 1 weiter annähern.
Für $B \subseteq X$ sei

$$
Z_t(B) := \sum_{(\sigma,n)\in B} u_t(\sigma, n) \ .
$$

Setze $\hat{V} := \{\sigma \in B : U(\sigma) \geq E\}$.
Da für ein festes $\sigma \in B$

$$
\sum_n \prod_{<i,j>} c_t(n_{ij}) = \prod_{<i,j>} b_t(|\sigma_i - \sigma_j|)
$$

gilt, folgt

$$
\begin{aligned}
Z_t(V) &= \sum_{x\in V} u_t(x) \\
&= \sum_{(\sigma,n)\in V} \exp(-\beta_t \epsilon R_b(\sigma)) \prod_{<i,j>} c_t(n_{ij})
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{\sigma\in\hat V} \exp(-\beta_t \epsilon R_b(\sigma)) \prod_{<i,j>} b_t(|\sigma_i - \sigma_j|)\\
&= \sum_{\sigma\in\hat V} \exp(-\beta_t U(\sigma))\\
&\le \int_{E-U_0}^{\infty} \exp(-\beta_t v) G(dv)\\
&\le H\ G(0)\ \beta_t \int_{E-U_0}^{\infty} \exp(-v(\beta_t-\beta))\ dv\\
&\quad \text{unter der Annahme } G(v) \le H\ \ \exp(\beta v)\ G(0),\\
&\le 2\ H\ G(0)\ \exp(\ -(\beta_t-\beta)(E-U_0)\ )\\
&\quad\ \text{falls } \beta_t \ge 2\beta\ .
\end{aligned}
$$

Damit folgt $Z_t(X) \le 2HG(0)$.
Die Abschätzung für $\pi_t(V)$ folgt unmittelbar, da $Z_t(X) \ge G(0)$ gilt.
Wir definieren

$$
\begin{aligned}
\hat\pi(\sigma) &:= \min_n \pi(\sigma, n)\ ,\\
s_\pi(\hat V) &:= \sum_{\sigma\in\hat V} \hat\pi(\sigma)\ ,\\
< U >_{\hat V} &:= \sum_{\sigma\in\hat V} U(\sigma) \frac{\hat\pi(\sigma)}{s_\pi(\hat V)}
\end{aligned}
$$

und erhalten

$$
\begin{aligned}
\pi_t(V) = &\sum_{(\sigma,n)\in V} \pi_t(\sigma, n)\\
&= Z_t^{-1} \sum_{(\sigma,n)\in V} \pi(\sigma,n)\ \exp(-\beta_t\epsilon R_b(\sigma)) \prod_{<i,j>} c_t(n_{ij})\\
&\ge Z_t^{-1} \sum_{\sigma\in\hat V} \hat\pi(\sigma)\ \exp(-\beta_t\epsilon R_b(\sigma)) \prod_{<i,j>} b_t(|\sigma_i-\sigma_j|)\\
&\ge Z_t^{-1} \sum_{\sigma\in\hat V} \hat\pi(\sigma)\ \exp(-\beta_t U(\sigma))\\
&\ge Z_t^{-1}\ s_\pi(\hat V)\ \exp(-\beta_t < U >_{\hat V})\\
&\quad \text{(Jensen Ungleichung)}\\
&\ge \Delta_\pi^{-1}\ |\hat V|\ Z_t(X)^{-1}\ \exp(-\beta_t < U >_{\hat V})\ .
\end{aligned}
$$

Weiter gilt für den Anfangszustand x

$$
\begin{aligned}
\pi_0(x) = &\ Z_0^{-1}\ \pi(x)\ u_0(x)\\
&= Z_0^{-1}\ \pi(x)\ \exp(-\beta_0\epsilon R_b(\sigma^{(x)})) \prod_{<i,j>} c_0(n_{ij}^{(x)})\\
&= Z_0^{-1}\ \pi(x)\ \exp(-\beta_0 U(\sigma^{(x)})) \prod_{<i,j>} \left(1 - \frac{b_0(a-1)}{b_0(|\sigma_i^{(x)} - \sigma_j^{(x)}|)}\right)\\
&\quad \text{da } |\sigma_i^{(x)} - \sigma_j^{(x)}| = n_{ij}^{(x)} \text{ für alle } < i,j > \in \mathcal{F} \text{ gilt,}
\end{aligned}
$$

$$\geq \Delta_\pi^{-1} \; Z_0(X)^{-1} \; \exp(-\beta_0 U(x)) \; 2^{-N(x)}$$

$$\text{falls} \quad 1 - \frac{b_0(a-1)}{b_0(n_{ij}^{(x)})} \geq \frac{1}{2} \quad \Leftrightarrow \quad \beta_0 \geq \frac{\ln 2}{\phi(a-1) - \phi(n_{ij}^{(x)})} \; .$$

Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} b_{t,x} \; &:= \; \pi_t(V)^{-1/2} \; \pi_0(x)^{-1/2} \; \exp(-\frac{3}{2}M(\beta_t - \beta_0)) \\ &\leq \Delta_\pi |V|^{-1/2} 2HG(0) 2^{N(x)/2} \exp\left(-\beta_t \left(\frac{3}{2}M - \frac{1}{2} < U >_{\hat{V}}\right) + \beta_0 \left(\frac{3}{2}M + \frac{1}{2}U(x)\right)\right) \; . \end{aligned}$$

Die Bedingung $b_{t,x} \leq 1$ führt zu

$$0 \geq \ln\left(\Delta_\pi |V|^{-1/2} 2HG(0) 2^{N(x)/2}\right) - \beta_t \left(\frac{3}{2}M - \frac{1}{2} < U >_{\hat{V}}\right) + \beta_0 \left(\frac{3}{2}M + \frac{1}{2}U(x)\right)$$

also

$$\beta_t \geq \frac{\ln(\Delta_\pi |V|^{-1/2} 2HG(0) 2^{N(x)/2})}{\frac{3}{2}M - \frac{1}{2} < U >_{\hat{V}}} + \beta_0 \; \frac{\frac{3}{2}M + \frac{1}{2}U(x)}{\frac{3}{2}M - \frac{1}{2} < U >_{\hat{V}}} \; .$$

Dies ist erfüllt, falls

$$\beta_t \geq \frac{1}{M} \ln(\Delta_\pi |V|^{-1/2} 2HG(0)) + \frac{N(x)}{2} + \beta_0 \left(\frac{3}{2} + \frac{U(x)}{2M}\right) \; ,$$

wegen $U(x) \leq M$ und $< U >_{\hat{V}} \leq M$.
Dies folgt, falls

$$t \geq \frac{5M}{4h\gamma} \; \exp\left[\frac{2h}{M}\left(\ln(\Delta_\pi |V|^{-1/2} 2HG(0)) + \frac{N(x)}{2}\right) + 2h\beta_0 \left(\frac{3}{2} + \frac{U(x)}{2M}\right)\right] \; .$$

Bemerkung 2.14 *Wir erläutern kurz an einem Beispiel, wie sich der Prozeß verhält, wenn U nicht von allen Elementen $< i,j > \in \mathcal{F}$ abhängig ist.*
Sei

$$U(\sigma, n) = \sum_{<i,j> \in \mathcal{F}} J_{ij} \; (1 - \delta_{\sigma_i \sigma_j})$$

mit $J_{ij} \in \{0, J\}$.
Wir definieren q_t und π_t mit $b_{ijt}(l) := \exp(-\beta_t \phi_{ij}(l))$ und $\phi_{ij}(1) = J_{ij}$ anstelle von b_t und ϕ und erhalten folgende Situation:
Sei $\hat{X} := \{(\sigma, n) \in X : \exists < i,j > \in \mathcal{F} \text{ mit } J_{ij} = 0 \; , \; n_{ij} = 0\}$.
Dann gilt $u_t(x) = 0$ und damit $\pi_t(x) = 0$, $q_t(y,x) = 0$ und $q_t(x,y) = q(x,y)$ für alle $x \in \hat{X}$, $y \in X \setminus \hat{X}$.
Der durch q_t und π_t definierte Markov - Prozeß läßt sich also wie folgt beschreiben:
Startet der Prozeß in einem Zustand $x \in X \setminus \hat{X}$, so verhält er sich wie der auf $X \setminus \hat{X}$ eingeschränkte Prozeß.
Startet der Prozeß in einem Zustand $x \in \hat{X}$, so verhält er sich zunächst wie ein durch q und π definierter Stopp - Prozeß auf $\hat{X}$, der stoppt, sobald ein $x \in X \setminus \hat{X}$ erreicht wird, und dann wie oben beschrieben.
Der Stopp - Prozeß hat zeitunabhängige Übergangswahrscheinlichkeiten, seine Laufzeit ist lediglich von ihrer günstigen Wahl abhängig.
Solche Prozesse wollen wir hier nicht untersuchen.
Der auf $X \setminus \hat{X}$ operierende Prozeß entspricht dem in diesem Abschnitt untersuchten, wenn man $\mathcal{F}$ durch die Teilmenge $\{< i,j > \in \mathcal{F} : J_{ij} = J\}$ ersetzt.

Kapitel 3

Anwendungen in der Bild - Rekonstruktion

In diesem Kapitel wenden wir die allgemeingültigen Aussagen aus Kap. 2, insbesondere Korollar 2.10, in der Bildrekonstruktion an.
Wir geben uns quadratische Bilder mit einer festen Zahl von Pixeln N vor, wobei jedes Pixel eine Farbe aus einer vorgegebenen Skala von a Farben annehmen kann. Wir betrachten die Gesamtmenge B aller Bilder und suchen mit Hilfe eines Markov-Prozesses Y_t nach demjenigen Bild, das eine vorgegebene Energiefunktion minimiert. Hierzu modifizieren wir die Menge B der Bilder zu einer Menge X von gefärbten Graphen mit einfarbigen Komponenten. Auf dieser Menge ist dann der Markovprozeß definiert.
Wir schätzen die Laufzeit dieses annealing - Prozesses in Abhängigkeit von der Zahl N der Pixel und weiteren, durch die Zahl a der Farben und der Wahl der Energiefunktion E gegebenen Konstanten ab.
Solche Abschätzungen wurden schon für den Fall gemacht, daß das Originalbild durch das eindeutige Minimum der Energiefunktion repräsentiert wird. Hierbei konnte die Energiefunktion allgemeiner als in dieser Arbeit gewählt werden. Allerdings geht in die Abschätzung ein zusätzlicher Parameter (die sog. Peierls-Konstante) ein, der aus der Energiefunktion gewonnen werden muß, und auf den wir in unserer Arbeit verzichten können. Näheres hierzu findet man in Götze [19].
Die von uns betrachteten Bilder lassen sich mit bestimmten Spinsystemen in der Physik vergleichen. Daher ist es uns möglich, Simulationen, die mit Markov - Prozessen in solchen Spinsystemen gemacht wurden, zum Vergleich mit unseren Ergebnissen heranzuziehen. Hierbei ergibt sich folgendes:
Für die vom beobachteten Bild unabhängige Energiefunktion können wir die in Simulationen erzielte, gute Konvergenzrate bis zum Energieminimum bestätigen. Insbesondere können wir zeigen, daß die Relaxationszeit t_0 nur polynomiell, nicht exponentiell, von der Zahl der Pixel N abhängt. Die für die Analyse der üblichen simulated annealing - Algorithmen notwendige Bedingung der Eindeutigkeit des Energieminimums (vgl. [19]) kann hierbei fallengelassen werden.
Weiter können wir für die vom beobachteten Bild abhängige Energiefunktion U (mit mehreren Minima) diese Polynomialität der Relaxationszeit bis zu einem bestimmten Energieniveau, nicht jedoch bis zum Energieminimum nachweisen. Für niedrigere Energieniveaus schätzen wir damit die Relaxationszeit (nach oben) als exponentiell ab. Dies ist aber die Größenordnung für das serielle Suchen durch alle derartigen Bilder und damit trivial.

Wir vermuten und werden hierbei durch Simulationen von Besag bestätigt, daß dies in diesem Fall auch für den FKSW - Algorithmus die richtige Größenordnung ist, also keine Verbesserung gegenüber anderen simulated annealing - Algorithmen erzielt wird.

Bemerkung 3.1 *In diesem Kapitel benützen wir lediglich zwei Kantenbelegungen. Wir ordnen (mit den Bezeichnungen von Kap. 2) jedem $(\sigma, n) \in X$ (eindeutig) ein $(\sigma, \hat{n})$ zu, so daß gilt:*

$$\begin{aligned} \hat{n}_{ij} = 0 \quad &\Leftrightarrow \quad n_{ij} = 0 \ , \\ \hat{n}_{ij} = 1 \quad &\Leftrightarrow \quad n_{ij} \neq 0 \ . \end{aligned}$$

Wir tun dies, weil wir keine Ergebnisse erzielen konnten, die eine differenziertere Kantenbelegung erfordern würde. Im Gegenteil, ist die Menge der Kantenbelegungen mehr als zweiwertig, so erfordert eine Änderung der Kantenbelegung in der Regel mehrere Schritte, ohne daß bezüglich des zu erreichenden Endzustandes mehr Information als mit zweiwertigen Kantenbelegungen gewonnen werden kann. Die Konvergenzrate des Prozesses ist daher eher geringer als mit zweiwertigen Kantenbelegungen.
Wir werden in den einzelnen Abschnitten sehen, daß unsere bisherigen Ergebnisse mit dieser Kantenbelegung anwendbar und sinnvoll sind.

Definition 3.2 *Wir definieren (die Definitionen von Kap. 2 spezialisierend) für ein $n \in \mathbb{N}$*

$$\begin{aligned} A &:= \Big\{(x, y) \in \mathbb{Z}^2 : 0 \leq x, y \leq n\Big\} \ , \\ \mathcal{F} &:= \{< x, y > \in A \times A : |x - y| = 1\} \ , \\ F &:= \{1, ..., a\} \ \ \textit{Farben} \ , \\ K &:= \{0, 1\} \ \ \textit{Kantenbelegungen} \ , \\ B &:= F^{|A|} \ \ \textit{Menge der Bilder}, \\ N &:= n^2 \end{aligned}$$

Die Menge der Grundzustände X definieren wir als

$$X := \Big\{(\sigma, n) \in B \times K^{|\mathcal{F}|} : \ \textit{falls } n_{ij} = 0 \textit{ für ein } < i, j > \in \mathcal{F}, \textit{ so gilt } \sigma_i = \sigma_j\Big\}$$

und die Energiefunktion U auf X wie in 2.2.
Die Elemente von X lassen sich als gefärbte Graphen betrachten, wobei eine Kante zwischen zwei Bildpunkten gesetzt ist, falls $n_{ij} = 0$ gilt. Die Übergangswahrscheinlichkeit $q(x, y)$ zwischen zwei Elementen $x, y \in X$ soll nur dann echt positiv sein, falls x und y gleichgefärbt sind und sich nur in der Belegung n_{ij} einer Kante $< i, j >$ unterscheiden, oder falls x und y die gleichen Kanten besitzen und sich die Färbungen von x und y in nur einer Komponente unterscheiden. Bezeichne also

$$d_H(x, y) := \#\{i : x_i \neq y_i\}$$

den Hammingabstand zweier Vektoren $x, \ y$.
Sei der Graph G wie folgt definiert:

Zwei Knoten $x = (\sigma, n)$, $y = (\rho, m) \in X$ seien durch eine Kante verbunden, falls gilt :
(a) entweder $\sigma = \rho$ und $d_H(n, m) = 1$,
(b) oder $n = m$, und für alle $i, j \in \{k \in A : \sigma_k \neq \rho_k\}$ existiert ein Pfad $i_1, ..., i_k \in A$ mit $i = i_1$, $j = i_k$ und $n_{i_l i_{l+1}} = 0$ für $1 \leq l \leq k-1$.
Die Anfangsverteilung π und die Übergangswahrscheinlichkeiten q seien als stationäre Verteilung und Übergangsfunktion des random walk auf G definiert, d.h.

$$\pi(x) = \frac{d(x)}{2E} \quad , \quad q(x, y) = \frac{1}{d(x)} \ ,$$

wobei $d(x)$ der Grad des Knotens x im Graphen G und E die Gesamtzahl der Kanten des Graphen G ist.
Also sind π und q gerade so definiert, daß $q(x, y) = 0$ gilt, falls $\Delta(x, y) = 0$ gilt (vgl. 2.2).
Seien wie in Def. 2.2

$$\begin{aligned} b_t(l) &:= \exp(-\beta_t \phi(l)), \quad (l = 1, ..., a-1) \ , \\ c_t(l) &:= \begin{cases} b_t(l) - b_t(a-1) & , \quad l \neq a-1 \ , \\ b_t(a-1) & , \quad l = a-1 \ . \end{cases} \end{aligned}$$

Dann gilt

$$\begin{aligned} u_t(x) = u_t(\sigma, n) = & \\ & \exp\left(-\beta_t \epsilon R_b(\sigma)\right) \prod_{<i,j>} (c_t(0)) \delta_{\sigma_i \sigma_j} \delta_{n_{ij},0} + \delta_{n_{ij},1} \left[c_t(a-1) + \sum_{l=1}^{a-2} c_t(l) \delta_{|\sigma_i - \sigma_j|, l} \right] \\ = & \ \exp(-\beta_t \epsilon R_b(\sigma) \cdot \\ & \cdot \prod_{<i,j>} (1 - b_t(a-1)) \delta_{\sigma_i \sigma_j} \delta_{n_{ij},0} + \delta_{n_{ij},1} [b_t(|\sigma_i - \sigma_j|)(1 - \delta_{\sigma_i \sigma_j}) + b_t(a-1) \delta_{\sigma_i \sigma_j}] \end{aligned}$$

Die Definition von u_t in Def. 2.2 ermöglichte für ein $< i, j > \in \mathcal{F}$ zwei Kantenbelegungen, nämlich $n_{ij} = a - 1$ und $n_{ij} = |\sigma_i - \sigma_j|$. In diesem Kapitel gilt dies nur noch, falls $\sigma_i = \sigma_j$ gilt, es kann die Kantenbelegung $n_{ij} = 0$ oder $n_{ij} = 1$ gewählt werden. Gilt $\sigma_i \neq \sigma_j$, so gilt $n_{ij} = 1$. Die entsprechenden Terme in der Def. von u_t lassen sich also zusammenfassen, da bestimmte Elemente der Menge X aus Def. 2.2 zusammenfallen. Seien q_t und π_t wie in 2.2 definiert.
Sei Y_t der von q_t und π_t bestimmte Prozeß.

Bemerkung 3.3 *Die Menge X besteht aus gefärbten Graphen mit einfarbigen Komponenten. Die Definition des Graphen G bedingt, daß Y_t entweder eine Kante verändert (d.h. n_{ij} neu setzt für ein $< i, j > \in \mathcal{F}$) oder eine Komponente umfärbt.*

3.1 Die vom beobachteten Bild unabhängige Wechselwirkungsenergie

In diesem Abschnitt wollen wir Energiefunktionen U betrachten, die lediglich von der Färbung benachbarter Pixel abhängen, nicht aber vom beobachteten Bild. Wir setzen $\epsilon = 0$ in der Definition 2.2 von U.

Zwischen Zuständen minimaler Energie U und Zuständen maximaler Kantenzahl in X besteht folgender Zusammenhang:
Der durch q_t und β_t beschriebene simulated annealing - Prozeß konvergiert gegen die Gleichverteilung auf der Menge aller Zustände aus X mit maximaler Kantenzahl und geeigneter, d.h. mit der Kantenanordnung verträglicher Färbung.
Alle diese Zustände besitzen die Energie $U = 0$, sind also Zustände minimaler Energie.
Folglich konvergiert der Prozeß gegen die Gleichverteilung auf einer Teilmenge der Menge der Zustände minimaler Energie, nämlich der Menge der Zustände maximaler Kantenzahl.
Da jedoch (wegen $\phi \geq 0$) jede Pixelbelegung minimaler Energie mit der maximalen Kantenbelegung verträglich ist, genügt dies.
Wir zitieren zunächst nach [19] ein Lemma, das wir für den Beweis des nachfolgenden Satzes benötigen.

Lemma 3.4 (nach [19]) *Bezeichne $\mathcal{C}_n$ das System aller Teilmengen der Mächtigkeit n der Menge $\{1, ..., m\}$, $m \geq 1$. Dann existiert eine Abbildung $\tau : \mathcal{C}_n \to \mathcal{C}_{n-1}$ $(n \geq 1)$, mit $\tau(B) \subset B$ für alle $B \in \mathcal{C}_n$, so daß*

$$\max_{B \in \mathcal{C}_{n-1}} |\tau^{-1}(B)| \leq \left\lceil \frac{m-n+1}{n} \right\rceil \ .$$

Beweis: Wir geben den Beweis aus [19] wieder.
Wir wenden das Mincut - Maxflow Prinzip von Ford und Fulkerson [15] auf folgendes Netzwerk an. Man verbinde eine Quelle Q mit allen Elementen von $\mathcal{C}_n$ durch Kanten der Kapazität 1 und alle Elemente von $\mathcal{C}_{n-1}$ mit einer Senke S durch Kanten der Kapazität $r := \lceil \frac{m-n+1}{n} \rceil$. Weiter habe jede durch die Inklusionsbedingung $A \subset B$ mit $A \in \mathcal{C}_{n-1}, B \in \mathcal{C}_n$ induzierte Kanten zwischen $\mathcal{C}_n$ und $\mathcal{C}_{n-1}$ die Kapazität $|\mathcal{C}_n$. Jeder minimale Schnitt irgendeines Flusses von Q nach S muß von der Form $A \cup B$ sein, wobei A eine Teilmenge der Kanten ist, die Q mit $\mathcal{C}_n$ verbinden, und B eine Teilmenge der Kanten ist, die S und $\mathcal{C}_{n-1}$ verbinden. Die Kanten zwischen $\mathcal{C}_n$ und $\mathcal{C}_{n-1}$ haben zu große Kapazität, um in einem minimalen Schnitt enthalten zu sein.
Damit ein solcher Schnitt minimal ist, muß der 'Schatten' (in $\mathcal{C}_{n-1}$) derjenigen Elemente aus $\mathcal{C}_n$, die nicht vom Schnitt A von der Quelle Q getrennt werden (wir bezeichnen die Menge dieser Elemente als A_1), durch den Schnitt B von der Senke S getrennt werden. Der 'Schatten' eines Elementes aus $\mathcal{C}_n$ ist hierbei die Menge aller mit diesem Element durch eine Kante des Netzwerks verbundenen Elemente von $\mathcal{C}_{n-1}$. Wir bezeichnen den 'Schatten' von A_1 mit ∂A_1.
Also ist die minimale Kapazität aller Schnitte gleich $\min\{|A| + |B|r\}$, wobei das Minimum über alle wie oben konstruierte Schnittmengen A und B gebildet wird. Mit einem bekannten, kombinatorischen Resultat (vgl. z.B. Bollobas [2],Theorem 3, S.12) erhalten wir

$$|\partial A_1| \geq \frac{|\mathcal{C}_{n-1}|}{|\mathcal{C}_n|} |A_1| = \frac{n}{m-n+1} |A_1| \ .$$

Da $|A_1| = |\mathcal{C}_n| - |A|$, erhalten wir für die Kapazität des minimalen Schnitts

$$\min_{A,B}\{|A| + |B|r\} \quad \geq \quad \min_{A}\{|A| + |\partial A_1|r\}$$

$$\begin{aligned} &\geq \min_A\{|A| + (|\mathcal{C}_n| - |A|)\frac{n}{m-n+1}r\} \\ &\geq |\mathcal{C}_n| \,. \end{aligned}$$

Da alle Kapazitäten ganzzahlig sind, existiert ein ganzzahliger Fluß, der in genau $|\mathcal{C}_n|$ Flüsse der Mächtigkeit 1 von Q nach S zerlegt werden kann, so daß der Gesammtfluß an den Kanten, die mit S verbunden sind, kleiner als r ist. Dies ist äquivalent zur Existenz der gesuchten Abbildung.

Mit Korollar 2.10 können wir nun zeigen, daß die Relaxationszeit t polynomiell von der Zahl der Pixel N abhängt.

Satz 3.5 *Sei $V := \{x \in X : U(x) \geq E\}$.*
Sei β_0 wie in 2.10, wobei $\beta = \phi(1)^{-1}\ln(2N\phi(a-1)E^{-1}a^2)$. Dann gilt für den durch q_t und π_t mit

$$\beta_t = \frac{1}{2(a-1)\phi(a-1)} \ \ln\left[\frac{t}{\hat{K}_a \ N^3} + \exp(\ 2\ \beta_0\ (a-1)\ \phi(a-1))\right]$$

gegebenen Prozeß

$$\frac{P_x(\tau_V > t)}{\pi_t(V)} \leq 10$$

nach der Relaxationszeit (für große N)

$$t \ \geq \ K_a \ N^3 \ \exp(4\ (a-1)\ \phi(a-1)\ \beta_0)\ ,$$

wobei $K_a := 15\ 2^a\ (a+2)^2\ a^2\ e^{\phi(a-1)+1}$ und $\hat{K}_a := (a-1)^{-1}e^{-(a-1)}$ von der Zahl der Farben a abhängige Konstanten sind (vgl. auch Bem. 3.6).

Bemerkung 3.6 *Die Konstante K_a in Satz 3.5 ist sowohl von der Anzahl a der Farben, als auch von ϕ, d.h. von U, abhängig. Die Abhängigkeit von ϕ, e^{a-1} und 2^a ist beweistechnischer Natur, sie entstand durch unscharfe Abschätzungen im Beweis von Korollar 2.10 (vgl. dort die Bemerkung über die Konstante e^h und die Abschätzung von $\pi_0(x)$), die richtige Größenordnung von K_a ist wohl $O(a^5)$.*
Unter Verwendung von Bemerkung 4.8, Satz 4.9 und Korollar 4.10 konnten wir für den Spezialfall

$$\begin{aligned} U : X &\rightarrow \mathbb{R}_+ \\ (\sigma, n) &\mapsto \sum_{<i,j>\in\mathcal{F}} J(1-\delta_{\sigma_i\sigma_j}) \quad (J>0) \end{aligned}$$

eine Relaxationszeit von

$$t = O(a^4)\ N^3\ \exp(2J\beta_0)$$

erreichen. Wir führen dies nicht weiter aus, da die Größenordnung in N der in Satz 3.5 entspricht.

Beweis: Wir konstruieren ein Pfadsystem ξ und bestimmen die Parameter β und H, so daß Annahme 2.9 erfüllt ist und wenden Korollar 2.10 an.
Angenommen es existieren Konstanten $\beta > 0$, $H > 0$ und ein System ξ für G , so daß gilt

$$\max_{((\sigma,n)\ ,\ (\rho,m))\in\xi} \# \left\{ (\theta,k)\in\Xi_e : \sum_{<i,j>} k_{ij} \le \max\left\{ \sum_{<i,j>} n_{ij} \sum_{<i,j>} m_{ij} \right\} + w \right\}$$
$$\le H\exp(\beta w\phi(1))$$

für $0 \le w \le |\mathcal{F}|$, so ist auch Annahme 2.9 erfüllt.
Seien für $x = (\sigma, n)$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_x &:= \{<i,j>\in \mathcal{F} : n_{ij} = 1\} \ , \\ N(\sigma,n) &:= N(n) := \sum_{<i,j>} n_{ij} \ . \end{aligned}$$

Nach Lemma 3.4 existiert eine Abbildung $\tau : \mathcal{C}_n \to \mathcal{C}_{n-1}$, $(n \ge 0)$, wobei $\mathcal{C}_n$ das System aller Teilmengen von $\mathcal{F}$ der Mächtigkeit n sei, so daß $\tau(B) \subseteq B$ für alle $B \in \mathcal{C}_n$ und

$$\max_{\hat{B}\in\mathcal{C}_{n-1}} |\tau^{-1}(\hat{B})| \le \left\lceil \frac{|\mathcal{F}| - n + 1}{n} \right\rceil$$

gilt.
Die Menge $\mathcal{F}_x \backslash \tau(\mathcal{F}_x)$ enthält genau ein Element, das wir mit $< i_x, j_x >$ bezeichnen wollen.
Wir können eine Abbildung

$$\begin{aligned} T : \{x\in X : N(x) = l\} &\to \{x \in X : N(x) = l-1\} \\ (\sigma,n) &\mapsto (\hat{\sigma},\hat{n}) \end{aligned}$$

definieren, so daß gilt:

(1) $n_{ij} = \hat{n}_{ij} \ \ \forall < i,j > \neq < i_x, j_x >$,

(2) $n_{i_x j_x} = 0$,

(3) σ und $\hat{\sigma}$ stimmen bis auf die Komponente von$(\hat{\sigma}, \hat{n})$, die $< i_x, j_x >$ enthält, überein.

Der Übergang von (σ, n) zu $(\hat{\sigma}, \hat{n})$ erfolgt durch maximal drei Zustandsänderungen. Zunächst werden die maximal zwei Komponenten von (σ, n) , die durch $< i_x, j_x >$ verbunden werden können, gleich gefärbt, dann $\hat{n}_{i_x j_x} = 0$ gesetzt.
Sei $x = (\sigma, n) \in X$ mit $U(x) \ge E$ gegeben.
Es gilt

$$E = U(x) = \sum_{<i,j>} \phi(|\sigma_i - \sigma_j|) \ \le\ \phi(a-1) \sum_{<i,j>} n_{ij} \ ,$$

also

$$N(x) \ge E\ \phi(a-1)^{-1} \ .$$

Es ergibt sich

$$\begin{aligned}
|T^{-1}(y)| &\leq \left|\tau^{-1}(\mathcal{F}_y)\right| a^2 \\
&\leq \left\lceil \frac{|\mathcal{F}| - N(x) + 1}{N(x)} \right\rceil \; a^2 \\
&\leq \left\lceil \frac{|\mathcal{F}| - E \; \phi(a-1)^{-1} + 1}{E \; \phi(a-1)^{-1}} \right\rceil \; a^2 \\
&\leq |\mathcal{F}| \; \phi(a-1) \; E^{-1} \; a^2 \qquad\qquad =: \; \tau_E \; .
\end{aligned}$$

Somit ergibt sich folgende grobe Schätzung für $e = (x, y)$:

$$\begin{aligned}
\# \left\{ z \in \Xi_e : N(z) \leq \max\left\{N(x), N(y)\right\} + w \right\} &\leq a^2 \; (1 + \tau_E + \ldots + \tau_E^w) \\
&\leq H \; \exp(\; \beta \; \phi(1) \; w \;)
\end{aligned}$$

mit $H = 2a^2$ und $\beta = \phi(1)^{-1} \; \ln \tau_E$.
Weiter erhalten wir

$$\begin{aligned}
M &= \sum_{<i,j>} \phi(a-1) \leq 2 \; \phi(a-1) \; N \; , \\
L &= 3|\mathcal{F}| = 6N \; , \\
N(x) &\leq 2N \; , \\
h &= (a-1) \; \phi(a-1) \; .
\end{aligned}$$

Wegen $2N \; \leq \; d(x) \; \leq \; (a+2)N$ für $x \in X$ folgt

$$\begin{aligned}
\Delta_\pi &= \max_{x \neq y} \frac{\pi(x)}{\pi(y)} \; = \; \max_{x \neq y} \frac{d(x)}{d(y)} \; = \; \frac{a+2}{2} \\
d &= \max_{x,y} q(x,y)^{-1} \; = \; \max_{x,y} d(x) \; = \; (a+2)N \; .
\end{aligned}$$

Also ergibt sich $\gamma^{-1} = 2^a \; L \; H \; d \; \Delta_\pi \; e^h \; = \; 6 \; 2^a \; N^2 \; (a-1) \; (a+2)^2 \; a^2 \; e^{(a-1)\phi(a-1)}$ und aus Korollar 2.10 folgt die Aussage, falls

$$\begin{aligned}
t \;\; \geq \;\; & 15 \; 2^a N^3 (a-1) \; (a+2)^2 a^2 e^{(a-1)\phi(a-1)+1} \left[\; 2(a+2) \; a^2 |V|^{-1/2} G(0) \right]^{(a-1)/N} \\
& \exp\left(\; 2 \; \beta_0 \; (a-1) \; \phi(a-1) \left(\frac{3}{2} + \frac{U(x)}{4\phi(a-1)N} \right) \right) \; .
\end{aligned}$$

3.2 Die vom beobachteten Bild abhängige Wechselwirkungsenergie

Wir betrachten die Energiefunktion U, die sowohl von der Färbung benachbarter Pixel, als auch vom beobachteten Bild $b \in X$ abhängt.
Sei

$$X_0 := \{x \in X : U(x) \leq U(y) \text{ für alle } y \in X\}$$

die Menge der Zustände minimaler Energie.

Wir zerlegen X_0 in disjunkte Teilmengen

$$X_0 = \bigcup_{\sigma \in F^{|A|}} X_0(\sigma)$$

wobei $X_0(\sigma) := \{(\sigma, n) \in X_0\}$.
Bezeichne $x(\sigma) \in X_0(\sigma)$ das Element maximaler Kantenzahl.
Dann konvergiert der durch q_t und β_t bestimmte Prozeß gegen die Gleichverteilung auf der Menge $\{x(\sigma), \sigma \in F^{|A|}\}$.
Mit Korollar 2.10 können wir nun folgende Aussage zeigen:

Satz 3.7 *Seien*

$$\begin{aligned}
M_\epsilon &:= \left\lceil \phi(1)^{-1} \epsilon \max_{\sigma \in B} R_b(\sigma) \right\rceil \;, \\
V &:= \{x \in X : U(x) \geq E\} \;, \\
\beta_t &:= \frac{1}{2m\phi_a} \ln \left[\frac{t}{\hat{K}_a \; K_E \; N^2 \; (2N + M_\epsilon)} + \exp\left(2 \; \beta_0 \; \phi_a \; m\right) \right] \\
&\quad \text{für ein } \beta_0 \text{ wie in 2.10, wobei } \beta := \phi(1)^{-1} \ln \tau_{E,\epsilon}.
\end{aligned}$$

Gilt $E \geq M_\epsilon$, so gilt für den durch q_t und π_t mit obigem β_t gegebenen Prozeß

$$\frac{P_x(\tau_V > t)}{\pi_t(V)} \leq 10$$

nach der Relaxationszeit

$$t \geq K_a \; K_E \; N^2 \; (2N + M_\epsilon) \; \exp\left(4 \; \phi_a \; m \; \beta_0\right)$$

für große N, wobei

$$\begin{aligned}
K_a &:= 15 \; 2^{a-1} a^{2m} (a+2)^2 (a-1) e^{m(a-1)(\phi(a-1)+1)} \\
&\quad \text{eine von der Zahl } a \text{ der Farben abhängige Konstante ist,} \\
\hat{K}_a &:= m \; (a-1)^{-1} \; e^{-m(a-1)} \\
K_E &:= (\tau_{E,\epsilon}^{\phi(1)^{-1}\phi_a})^m \\
&\quad \text{eine vom Energieniveau } E \text{ und der Werteverteilung der Funktion } U \\
&\quad \text{abhängige Konstante ist,} \\
\tau_{E,\epsilon} &:= \left(2N\phi(a-1)\,(E - M_\epsilon \phi(1))^{-1} \, a^2\right)^m \;, \\
m &:= M_\epsilon + 1 \\
\phi_a &:= (a-1) \; \phi(a-1) \;.
\end{aligned}$$

Bemerkung 3.8 *Gilt $\epsilon < \phi(1) \left(\max_{\sigma \in F^{|A|}} R_b(\sigma)\right)^{-1}$, so gibt es genau ein Element minimaler Energie in X. Dieses ist einfarbig.*
In diesem Fall hängt die Relaxationszeit t_o polynomiell von der Zahl der Pixel N ab. Im Allgemeinen gilt dies jedoch nur für $E \geq M_\epsilon$, für niedrigere Energieniveaus können wir kein Pfadsystem finden, dessen Pfade sicher zu Zuständen mit niedrigerer Energie als der schon erreichten hinführen. Betrachten wir den Graphen G (vgl. Def. 3.2) als Pfadsystem, so ist die Relaxationszeit t_0 exponentiell von der Zahl der Bildpunkte N abhängig.

Bemerkung 3.9 *Sieht man von technischen Anteilen ab (vgl. Bemerkung 3.6), so ist K_a von der Ordnung $O(a^{2m+3})$.*

Beweis: von Satz 3.7
Wir müssen ein Pfadsystem ξ und $H > 0$ und $\beta > 0$ so bestimmen, daß Annahme 2.9 erfüllt ist.
Gilt für alle $e = (x, y) \in \xi$

$$\# \left\{ z \in \Xi_e : \hat{U}(z) \leq \max\{\hat{U}(x), \hat{U}(y)\} + v \right\} \ \leq \ H \exp(\beta v) \ ,$$

wobei $\hat{U}(\theta, k) := \epsilon R_b(\theta) + \phi(1) \ \sum_{<i,j>} k_{ij}$, so ist auch Annahme 2.9 erfüllt.
Wir schätzen zunächst den von ϵ abhängigen Teil der Funktion $\hat{U}$.
Sei $N(\sigma, n) := N(n) := \sum_{<i,j>} n_{ij}$.
Für alle $(\sigma, n) \in X$ gilt

$$0 \ \leq \ \epsilon R_b(\sigma) \leq M_\epsilon \ \phi(1) \ .$$

Damit gilt

$$\phi(1) \ N(\sigma, n) \ \leq \ \hat{U}(\sigma, n) \ \leq \ \phi(1) \ (N(\sigma, n) + M_\epsilon) \ .$$

Sei $\mathcal{F}_x := \{< i, j > \in \mathcal{F} : n_{ij} = 1\}$ für $x = (\sigma, n) \in X$.
Aus Lemma 3.4 folgt unmittelbar die Existenz einer Abbildung $\tau_k : \mathcal{C}_n \to \mathcal{C}_{n-k}$ $(0 < k \leq n)$, wobei $\mathcal{C}_n$ das System aller Teilmengen von $\mathcal{F}$ der Mächtigkeit n sei, so daß $\tau_k(B) \subseteq B$ für alle $B \in \mathcal{C}_n$ und

$$\max_{\hat{B} \in \mathcal{C}_{n-k}} \left|\tau_k^{-1}(B)\right| \ \leq \ \left\lceil \frac{|\mathcal{F}| - n + 1}{n} \right\rceil^k$$

gilt.
Wir definieren eine Abbildung

$$\begin{aligned} T : \{x \in X : N(x) = l\} \ &\to \ \{x \in X : N(x) = l - 1\} \\ (\sigma, n) \ &\mapsto \ (\hat{\sigma}, \hat{n}) \end{aligned}$$

für die gilt:

(1) $n_{ij} = \hat{n}_{ij}$ für alle $< i, j > \notin \mathcal{F}_x \setminus \tau_m(\mathcal{F}_x)$,
(2) $\hat{n}_{i_x j_x} = 0$ für alle $< i, j > \in \mathcal{F}_x \setminus \tau_m(\mathcal{F}_x)$,
(3) σ und $\hat{\sigma}$ stimmen bis auf die Komponenten, die Kanten aus $\mathcal{F}_x \setminus \tau_m(\mathcal{F}_x)$ enthalten, überein.

Der Übergang von (σ, n) zu $(\hat{\sigma}, \hat{n})$ erfolgt durch maximal $3m$ Zustandsänderungen. Zunächst werden für jede Kante $< i, j > \in \tau_m(\mathcal{F}_x)$ die maximal zwei Komponenten von (σ, n) , die durch $< i, j >$ verbunden werden können, gleich gefärbt, dann $\hat{n}_{ij} = 0$ gesetzt.
Es ergibt sich

$$\begin{aligned} |T^{-1}(y)| \ &\leq \ \left|\tau_m^{-1}(\mathcal{F}_y)\right| \ a^{2m} \\ &\leq \ \left(|\mathcal{F}| \ \phi(a-1) \ (E - M_\epsilon \ \phi(1))^{-1} \ a^2\right)^m \ = \ \tau_{E,\epsilon} \ , \end{aligned}$$

denn aus $U(x) \geq E$ folgt $|\mathcal{F}_x| \geq \phi(a-1)^{-1}(E - M_\epsilon \phi(1))$.
Der Übergang von (σ, n) zu $(\hat{\sigma}, \hat{n})$ erniedrigt $\hat{U}(\sigma, n)$ um mindestens $\phi(1)$:

$$\begin{aligned}
\hat{U}(\sigma,n) - \hat{U}(T^{-1}(\sigma,n)) &= \hat{U}(\sigma,n) - \hat{U}(\hat{\sigma},\hat{n}) \\
&= \epsilon\,(R_b(\sigma) - R_b(\hat{\sigma})) + \phi(1) \sum_{<i,j>} (n_{ij} - \hat{n}_{ij}) \\
&\geq -M_\epsilon\ \phi(1) + \phi(1)\,(M_\epsilon + 1) \ = \ \phi(1)\ .
\end{aligned}$$

Wir wollen jetzt h bestimmen:
Es gilt für je zwei Zustände $(\rho, m), (\theta, k)$ des Pfades von (σ, n) nach $(\hat{\sigma}, \hat{n})$

$$\begin{aligned}
|R_b(\sigma) - R_b(\theta)| &\leq \max_{\sigma \in F^{|A|}} R_b(\sigma) \\
\left| \sum_{<i,j>} m_{ij} - \sum_{<ij>} n_{ij} \right| &\leq M_\epsilon + 1\ .
\end{aligned}$$

Wir setzen also

$$h := (M_\epsilon + 1)\ (a-1)\ \phi(a-1) \ = \ m\ \phi_a\ .$$

Damit ergibt sich folgende grobe Schätzung für $e = (x, y)$:

$$\begin{aligned}
&\# \left\{ z \in \Xi_e : \hat{U}(z) \leq \max \left\{ \hat{U}(x), \hat{U}(y) \right\} + v \right\} \\
&\leq \ a^{2m} \left(1 + \tau_{E,\epsilon} + \ldots + \tau_{E,\epsilon}^{\phi(1)^{-1}(v+h)} \right) \\
&\leq \ H \exp(\beta v)
\end{aligned}$$

mit $H := 2 \left(\ a^2\ \tau_{E,\epsilon}^{\phi(1)^{-1}\phi_a} \right)^m$ und $\beta = \phi(1)^{-1} \ln \tau_{E,\epsilon}$.
Weiter setzen wir

$$\begin{aligned}
M &= \phi(a-1)\ (|\mathcal{F}| + M_\epsilon) \ \leq \ \phi(a-1)\ (2N + M_\epsilon)\ , \\
L &= 3\ m\ |\mathcal{F}| \ \leq \ 6\ N\ m\ , \\
\Delta_\pi &= \frac{a+2}{2}\ , \\
d &= (a+2)N\ , \\
N(x) &\leq 2N\ .
\end{aligned}$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned}
\gamma^{-1} &= 2^a\ L\ H\ d\ \Delta_\pi\ e^h \\
&= 6\ 2^a\ N^2\ (a+2)^2\ (a-1)\ m\ e^{m(a-1)\phi(a-1)} \ \left(a^2 \tau_{E,\epsilon}^{\phi(1)^{-1}\phi_a} \right)^m \ ,
\end{aligned}$$

und aus Korollar 2.10 folgt die Aussage , falls

$$\begin{aligned}
t \ \geq \ & 15\ 2^{a-1}\ N^2\ (2N + M_\epsilon)\ (a+2)^2\ (a-1)\ e^{m(a-1)(\phi(a-1)+1)} \left(a^2\ \tau_{E,\epsilon}^{\phi(1)^{-1}\phi_a} \right)^m \\
\cdot \ & \left(2\ (a+2)\ |V|^{-1/2} \left(a^2\ \tau_{E,\epsilon}^{\phi(1)^{-1}\phi_a} \right)^m \ G(0) \right)^{m(a-1)/N} \\
\cdot \ & \exp\left(2\phi_a m \beta_0 \left(\frac{3}{2} + \frac{U(x)}{M} \right) \right)\ .
\end{aligned}$$

Gilt $\epsilon \ < \ \phi(1)\ (\max_\sigma R_b(\sigma))^{-1}$, so gilt $G(0) = 1$ wegen $\epsilon R_b(\sigma) \ < \ \phi(1)$ für alle $\sigma \in F^{|A|}$. Das Element minimaler Energie ist von der Form $\sigma \ = \ (c, \ldots, c) \ \in \ F^{|A|}$ für ein $c \in F$.

Kapitel 4

Die Konvergenzrate bei räumlich inhomogener Energiefunktion

In diesem Kapitel beschäftigen wir uns mit Prozessen, die die räumlich inhomogene Energiefunktion

$$\begin{aligned} U(\sigma) \quad &:= \quad U(\sigma, n) := \sum_{<i,j>\in\mathcal{F}} J_{ij}(1-\delta_{\sigma_i\sigma_j}) + \epsilon R_b(\sigma) \ , \\ &\quad\ \ \text{mit } J_{ij} > 0 \ , \end{aligned}$$

minimieren.
Diese Energiefunktion ist nicht nur von der Anzahl der Kanten $< i, j > \in \mathcal{F}$ abhängig, für die $\sigma_i \neq \sigma_j$ gilt, sondern auch von $< i, j >$ selbst. Dies führt dazu, daß lokale Änderungen der Struktur der Elemente aus X zu sehr unterschiedlichen Veränderungen der Energiefunktion führen können. Es erscheint uns nicht sinnvoll, für diese Energiefunktion Abschätzungen der Konvergenzrate mit Hilfe der Poincaré - Schranke herzuleiten, da diese Schranke die Existenz eines günstigen Pfadsystems voraussetzt (vgl. Bem. 1.4).
Wir wählen eine andere Abschätzung der Dirichletform, nämlich die in Satz 1.16 entwickelte.
Statt Annahme 2.9, die Aussagen über die Anzahl der Zustände mit vorgegebenem relativem Energiezuwachs auf Pfaden voraussetzt, können wir uns mit der schwächeren Annahme 4.4 begnügen (die in Annahme 2.9 ebenfalls vorausgesetzt wird).
Satz 2.7 gilt natürlich auch in diesem Kapitel, wir werden dennoch diesen Satz mit etwas modifizierter Voraussetzung nochmals zeigen, da uns dies für das nachfolgende Korollar günstig erscheint.

4.1 Abschätzung der Dirichletform

Die in Satz 1.16 gegebene Schranke ist noch zu kompliziert, um sie direkt zu berechnen. Wir bringen sie daher in diesem Abschnitt auf eine etwas einfachere Form.
Wir definieren analog zu 2.1 und 2.2:

Definition 4.1 *Seien*

$$F \quad := \quad \{1, ..., a\} \quad \textit{Farben} \ ,$$

$$
\begin{array}{rcl}
K & := & \{0,1\} \ \textit{Kantenbelegungen} \ , \\
b & := & F^{|A|} \ \textit{Menge der Bilder,} \\
\mathcal{F} & \subseteq & A \times A \ , \\
X & := & \Big\{ (\sigma, n) \in B \times K^{|\mathcal{F}|} : \ \textit{falls } n_{ij} = 0 \textit{ für ein } <i,j> \in \mathcal{F}, \textit{ so gilt } \sigma_i = \sigma_j \Big\} \\
U & : & F^{|A|} \to \mathbb{R}_+ \\
\sigma & \mapsto & \displaystyle\sum_{<i,j> \in \mathcal{F}} J_{ij} \ (1 - \delta_{\sigma_i \sigma_j}) \\
 & & \textit{mit } J_{ij} > 0 \ .
\end{array}
$$

Seien q , π und Δ wie in 2.2 definiert.
Wir setzen $b_{ijt} := \exp(-\beta_t J_{ij})$ und definieren

$$
u_t(x) := u_t(\sigma, n) := \prod_{<i,j>} b_{ijt} \delta_{n_{ij},1} + (1 - b_{ijt}) \delta_{n_{ij},0} \delta_{\sigma_i \sigma_j} + \epsilon \ R_b(\sigma)
$$

und q_t und π_t wie in 2.2.
Für $V \subseteq X$ sei definiert:

$$
\begin{array}{rcll}
\hat{q}_t(x,y) & := & q_t(x,y) \ , & x, y \in V \ , \\
\hat{q}_t(x,x_0) & := & \displaystyle\sum_{y \in V^c} q_t(x,y) \ , & x \in V \ , \\
\hat{q}_t(x_0,x) & := & \pi_t(x) \ \pi_t(V)^{-1} \ \hat{q}_t(x,x_0) \ , & x \in V \ , \\
\hat{q}_t(x_0,x_0) & := & 1 - \displaystyle\sum_{x \in V} \hat{q}_t(x_0,x) \ , &
\end{array}
$$

wobei x_0 ein neuer Zustand ist, der V^c ersetzt (vgl. auch mit dem Beweis von 2.7).
Analog sei $\hat{q}$ in Abhängigkeit von q und π definiert.

Lemma 4.2 *Sei $V \subseteq X$.*
Seien $\hat{q}_t$ und $\hat{q}$ wie in 4.1 definiert.
Dann gilt

$$
\inf \left[\frac{\mathcal{E}_t(\phi,\phi)}{Var_t(\phi)} : \phi|_{V^c} \ \textit{konstant, } \phi \ \textit{nicht konstant} \right] \geq \ \gamma \prod_{<i,j>: J_{ij} > 0} \frac{b_{ijt}}{1 - b_{ijt}} \ .
$$

wobei

$$
\gamma := \frac{1}{|V|} \min_{(x \to y) \in G_V} \hat{q}(x,y) \ .
$$

Beweis: Die Graphenmengen $G^{(i)}$ (vgl. Def. 1.6) seien mit den Einträgen der Matrix $\hat{Q}_t := (\hat{q}_t(x,y))_{x,y \in V \cup \{x_0\}}$ gebildet.
Nach Satz 1.16 gilt mit den dort verwendeten Bezeichnungen

$$
\begin{array}{rcl}
\mathcal{D} & := & \inf[\dfrac{\mathcal{E}_t(\phi,\phi)}{Var_t(\phi)} : \phi|_{V^c} \text{ konstant, } \phi \text{ nicht konstant }] \\
 & \geq & \dfrac{\sum_{g \in G^{(1)}} \prod_{(x \to y) \in g} \hat{q}_t(x,y)}{\sum_{g \in G^{(2)}} \prod_{(x \to y) \in g} \hat{q}_t(x,y)}
\end{array}
$$

$$
\begin{aligned}
&\geq \min_{g\in G^{(1)}} \frac{\prod_{(x\to y)\in g} \hat{q}_t(x,y)}{\sum_{\hat{g}\in G^{(2)}:\hat{g}\subseteq g} \prod_{(x\to y)\in g} \hat{q}_t(x,y)} \\
&= \min_{g\in G^{(1)}} \left(\sum_{\hat{g}\in G^{(2)}:\hat{g}\subseteq g} \frac{\prod_{(x\to y)\in \hat{g}} \hat{q}_t(x,y)}{\prod_{(x\to y)\in g} \hat{q}_t(x,y)} \right)^{-1} \\
&= \min_{g\in G^{(1)}} \left(\sum_{(x\to y)\in g} \hat{q}_t(x,y)^{-1} \right)^{-1} \\
&\geq \min_{g\in G^{(1)}} \left(\sum_{(x\to y)\in g} \hat{q}(x,y)^{-1} \right)^{-1} \prod_{<i,j>} \frac{b_{ijt}}{1-b_{ijt}} \\
&\geq \frac{1}{|V|} \min_{(x\to y)\in G_V} \hat{q}(x,y) \prod_{<i,j>} \frac{b_{ijt}}{1-b_{ijt}} \;.
\end{aligned}
$$

4.2 Abschätzung der Konvergenzrate

Wie in 2.7 läßt sich nun eine erste Aussage über die Wahrscheinlichkeit $P_x(\tau_V > t)$ machen, mit der der Prozeß im Zeitraum t die Menge V noch nicht verlassen hat.

Satz 4.3 *Sei $V \subseteq X$.*
Seien (I) und (R) erfüllt.
Sei

$$
M := \sum_{<i,j>} J_{ij} + max_\sigma R(\sigma)
$$

die maximale Energie.
Bezeichne Y_t , $t \geq 0$, den simulated annealing - Prozeß, der durch q_t mit

$$
\beta_t := M^{-1} \ln \left(\frac{\gamma}{2} t + \exp(M\beta_0) \right)
$$

für $\beta_0 \geq 2\ln(2)(\min_{<i,j>} J_{ij})^{-1}$ gegeben ist.
Sei τ_V der Zeitpunkt des ersten Erreichens der Menge $V^c = X \setminus V$.
Bezeichne $P_x(Y_t \in A)$ die Verteilung von Y_t mit Startverteilung ϵ_x .
Dann gilt für $x \in V$:

$$
P_x(\tau_V > t) \leq 5\pi_t(V) + \pi_t(V)^{1/2}\pi_0(x)^{-1/2} \prod_{<i,j>} \frac{b_{ijt}}{1-b_{ijt}} \frac{1-b_{ij0}}{b_{ij0}} \exp(-\max_\sigma R(\sigma)) \;.
$$

Beweis: Dieser Satz läßt sich in weiten Teilen analog dem Beweis zu Satz 2.7 führen. Wir können uns daher auf eine knappe Darstellung beschränken.
Es gilt $P_x(\tau_V > t) \leq \inf_{s\leq t} P_x(Y_s \in V)$ und

$$
(P_x(Y_t \in V) - \pi_t(V))^2 \leq ||f_t - 1||_t^2 \pi_t(V) \text{ , wobei} f_t(y) := \frac{P_x(Y_t = y)}{\pi_t(y)} \;.
$$

Mit $a_t := f_t - 1$, $w_t := ||a_t||_t^2$, $\hat{U}_t(\sigma, n) := \sum_{<i,j>} \delta_{n_{ij},0} \frac{J_{ij}}{1-b_{ijt}} + \epsilon R_b(\sigma)$ für $(\sigma, n) \in X$ und $< \hat{U}_t >_t := \sum_{(\sigma,n)} \hat{U}_t(\sigma, n) \pi_t(\sigma, n)$ gilt

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} Z_t &= -Z_t\, \beta_t' \, < \hat{U}_t >_t \ , \\
\frac{d}{dt} \pi_t(\sigma, n) &= -\pi_t(\sigma, n)\, \beta_t' \, (\hat{U}_t(\sigma, n) - < \hat{U}_t >_t) \ , \\
\frac{d}{dt} f_t(y) &= \pi(y)^{-1} \sum_z (a_t(z) - a_t(y))\, \alpha_t(z, y) + \beta_t \, (\hat{U}_t(\sigma, n) - < \hat{U}_t >_t)\, f_t(y) \ .
\end{aligned}$$

Damit erhalten wir die Gleichung

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} w_t &= -\sum_y \sum_z (a_t(y) - a_t(z))^2 \, \alpha_t(z, y) \\
&\quad + \beta_t' \sum_y a_t(y)^2 \, \pi_t(y)\, (\hat{U}_t(y) - < \hat{U}_t >_t) \\
&\quad + 2\, \beta_t' \sum_y a_t(y)\, \pi_t(y)\, (\hat{U}_t(y) - < \hat{U}_t >_t) \\
&= -\, 2\, \mathcal{E}_t(a_t, a_t) \ + \ \beta_t' \sum_y a_t(y)^2 \, \pi_t(y)\, (\hat{U}_t(y) - < \hat{U}_t >_t) \\
&\quad + 2\, \beta_t' \sum_y a_t(y)\, \pi_t(y)\, (\hat{U}_t(y) - < \hat{U}_t >_t) \ .
\end{aligned}$$

Wir modifizieren den Prozeß Y_t auf X wie im Beweis zu Satz 2.7 in Kap. 2, indem wir V^c als einen einzigen Zustand x_0 auffassen. Wie im Beweis zu Satz 2.7 verwenden wir die alten Bezeichnungen weiter und definieren

$$\hat{U}_t(x_0) := \pi(V^c)^{-1} \sum_{y \in V^c} \hat{U}_t(y) \pi(y) \ .$$

Obige Gleichung für w_t läßt sich vereinfachen und in eine Differentialungleichung umformen.
Sei

$$M_t := \sum_{<i,j>} \frac{J_{ij}}{1 - b_{ijt}} + \epsilon \max_\sigma R_b(\sigma) \ .$$

Dann gilt

$$\begin{aligned}
|\hat{U}_t(\sigma, n)| &\leq M_t \ , \\
|\hat{U}_t(\sigma, n) - < \hat{U}_t >_t | &\leq M_t \ , \\
||(\hat{U}_t - < U_t >_t) 1_V||_t &\leq M_t \, \pi_t(V) \ , \\
|a_t(x_0)| &\leq w_t^{1/2} \, \pi_t(V)^{1/2} \, \pi_t(V^c)^{-1} \ .
\end{aligned}$$

Damit erhalten wir

$$\sum_y \pi_t(y)\, a_t(y)\, (\hat{U}_t(y) - < \hat{U}_t >_t) \ \leq \ 2\, M_t \, \pi_t(V)\, w_t^{1/2} \ ,$$

also

$$w_t' \leq \left(-2\gamma \prod_{<i,j>} \frac{b_{ijt}}{1 - b_{ijt}} + \beta_t' M_t \right) w_t + 4 \beta_t' M_t \pi_t(V)^{1/2} w_t^{1/2} \ .$$

Definiere

$$
\begin{aligned}
v_t &:= w_t^{1/2} \;, \\
H_t &:= \int_0^t \gamma \prod_{<i,j>} \frac{b_{ij\,s}}{1-b_{ij\,s}} - \beta'_s M_s \; ds \;, \\
o_t &:= 2\beta'_t \; M_t \; \pi_t(V)^{1/2} \;, \\
< \hat{U}_t >_{t,V} &:= \pi_t(V)^{-1} \int_V \hat{U}_t(z) \; d\pi_t(z) \;.
\end{aligned}
$$

Wir erhalten

$$
v_t \leq v_0 \exp(-H_t) + \exp(-H_t) \int_0^t \exp(H_s) o_s \; ds \;.
$$

Wähle $t \to \beta_t$ so, daß

$$
0 < 2\beta'_t M_t \leq \gamma \prod_{<i,j>} \frac{b_{ij\,t}}{1-b_{ij\,t}}
$$

gilt. Dies ist erfüllt durch die im Satz angegebene Wahl, falls $\beta_0 \geq 2\ln(2) \; (\min_{<i,j>} J_{ij})^{-1}$.
Daraus folgt

$$
H_t \geq \int_0^t \beta'_s M_s \; ds
$$

und für $s \leq t$

$$
H_t - H_s \geq \int_s^t \beta'_u M_u \; du \;.
$$

Weiter gilt

$$
\left(\frac{\pi_s(V)}{\pi_t(V)} \right)^{1/2} = \exp\left(\frac{1}{2} \int_s^t \beta'_u \; (< \hat{U}_u >_{u,V} - < \hat{U}_u >_u) \; du \right) \;.
$$

Damit gilt folgende Ungleichung:

$$
\begin{aligned}
v_t \;\; &\leq \;\; v_0 \exp\left(-\int_0^t \beta'_s M_s \; ds \right) \\
&\quad + \pi_t(V)^{1/2} \int_0^t \exp\left(-\int_s^t \beta'_r M_r dr \right) \; 2\; \beta'_s \; M_s \; \pi_s(V)^{1/2} \; \pi_t(V)^{-1/2} \; ds \\
&= \;\; v_0 \exp\left(-\int_0^t \beta'_s M_s \; ds \right) \\
&\quad + 2\pi_t(V)^{1/2} \int_0^t \beta'_s M_s \exp\left(-\int_s^t \beta'_r (M_r - \frac{1}{2}(< \hat{U}_r >_{r,V} - < \hat{U}_r >_r)) \; dr \right) ds \\
&\leq \;\; v_0 \exp\left(-\int_0^t \beta'_s M_s ds \right) + 2\pi_t(V)^{1/2} \int_0^t \beta'_s M_s \exp\left(-\frac{1}{2} \int_s^t \beta'_r M_r dr \right) ds \\
&\qquad \text{wegen} \;\; < \hat{U}_r >_{r,V} - < \hat{U}_r >_r \; \geq \; -M_t \\
&\leq \;\; v_0 \prod_{<i,j>} \frac{b_{ij\,t}}{1-b_{ij\,t}} \frac{1-b_{ij\,0}}{b_{ij\,0}} \exp\left(-\max_\sigma R_b(\sigma)(\beta_t - \beta_0) \right) \\
&\quad + 4\pi_t(V)^{1/2} \left(1 - \prod_{<i,j>} \left(\frac{b_{ij\,t}}{1-b_{ij\,t}} \right)^{1/2} \left(\frac{1-b_{ij\,0}}{b_{ij\,0}} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{1}{2} \max_\sigma R_b(\sigma)(\beta_t - \beta_0) \right) \right)
\end{aligned}
$$

$$\text{wegen} \exp\Big(-\int_s^t \beta_r' M_r dr\Big) = \prod_{<i,j>} \frac{b_{ijt}}{1-b_{ijt}} \frac{1-b_{ijs}}{b_{ijs}} \exp\Big(-\max_\sigma R_b(\sigma)(\beta_t-\beta_s)\Big)$$

$$\leq \quad v_0 \prod_{<i,j>} \frac{b_{ijt}}{1-b_{ijt}} \frac{1-b_{ij0}}{b_{ij0}} \exp\Big(-\max_\sigma R_b(\sigma)(\beta_t-\beta_0)\Big) + 4\pi_t(V)^{1/2} \ .$$

Mit $v_0 \leq \pi_0(x)^{-1/2}$ ergibt sich

$$|P_x(Y_t \in V) - \pi_t(V)|$$

$$\leq \quad \pi_t(V)^{1/2}\pi_0(x)^{-1/2} \prod_{<i,j>} \frac{b_{ijt}}{1-b_{ijt}} \frac{1-b_{ij0}}{b_{ij0}} \exp\Big(-\max_\sigma R_b(\sigma)(\beta_t-\beta_0)\Big) + 4\pi_t(V) \ .$$

Aus der Monotonie von $\pi_t(V)$ können wir schließen

$$P_x(Y_t \in V) \leq \pi_t(V)^{1/2}\pi_0(x)^{-1/2} \prod_{<i,j>} \frac{b_{ijt}}{1-b_{ijt}} \frac{1-b_{ij0}}{b_{ij0}} \exp\Big(-\max_\sigma R_b(\sigma)(\beta_t-\beta_0)\Big) + 5\pi_t(V) \ .$$

Damit ist der Satz bewiesen.

Wir können nun aus dem Satz eine Abschätzung der Konvergenzrate des Prozesses Y_t folgern.

Sei

$$\begin{aligned} U_0 &:= \min_\sigma U(\sigma) \ , \\ G(v) &:= \# \Big\{\sigma \in F^{|A|} : u(x) \leq U_0 + v\Big\} \ . \end{aligned}$$

Angenommen, es existieren Konstanten $\beta > 0, H > 0$, so daß gilt

$$G(v) \ \leq \ H \ \exp(\beta v) \ G(0) \ . \tag{4.4}$$

Korollar 4.5 *Sei* $V := \{y \in X : U(y) \geq E\}$
Sei $x = (\sigma^{(x)}, n^{(x)}) \in V$, *wobei für alle* $< i,j > \in \mathcal{F}$ $n_{ij}^{(x)} = 0$ *gelte, falls* $\sigma_i^{(x)} = \sigma_j^{(x)}$.
Angenommen, (I), (R) und Annahme 4.4 gelten.
Dann gilt

$$\frac{P_x(\tau_V > t)}{\pi_t(V)} \leq 6$$

für alle

$$t \geq t_0 := 2\gamma^{-1}(\ \Delta_\pi |V|^{-1/2} H G(0) \ )^2 \prod_{<i,j>} (1-b_{ij0})^{-1} \exp\left(2\beta_0\left(M + \frac{U(x)}{2}\right)\right) \ .$$

Weiter gilt

$$\pi_t(V) \ \leq 2 \ \Delta_\pi \ H \ \exp\left(-(\beta_t - \beta)(E - U_0)\right) \ .$$

Korollar 4.6 *Seien die Voraussetzungen des Korollars 4.5 gegeben.*
Sei $t \geq t_0$. *Dann gilt*

$$P_x(\tau_V > t) \ \leq \ K_G \ K_\beta \ t^{-1/M} \ ,$$

wobei

$$
\begin{array}{rcl}
K_G & := & 12\ \Delta_\pi \left(\frac{\gamma}{2}\right)^{-1/M} \\
 & & \textit{vom Parameter } \gamma \textit{ (vgl. S. 50), d.h. von der gewählten} \\
 & & \textit{ Anfangsübergangsfunktion } p\textit{, bestimmt wird,} \\
K_\beta & := & H \exp(\beta(E - U_0)) \\
 & & \textit{von den Parametern } \beta \textit{ und } H \textit{ des Graphen } G \textit{ (vgl. S. 53)} \\
 & & \textit{bestimmt wird.}
\end{array}
$$

Wir erhalten für $\epsilon > 0$

$$P_x(\tau_V > t) \leq \epsilon \ ,$$

falls

$$t \geq (K^{-1}\epsilon)^{-M} \ ,$$

wobei $K := K_G\ K_\beta$.

Bemerkung 4.7 *Das Korollar ergibt also eine schlechtere Asymptotik als die in Bemerkung 2.11 und Korollar 2.12 angegebene. Die durch die räumlich inhomogene Energiefunktion bedingte schlechtere Abschätzung der Dirichletform wirkt sich hier aus.*

Beweis: von Korollar 4.6
Aus 4.5 folgt

$$
\begin{array}{rcl}
P_x(\tau_V) & \leq & 12\Delta_\pi H \exp(-(\beta_t - \beta)(E - U_0)) \\
 & = & 12\Delta_\pi H \exp(\beta(E - U_0))(\frac{\gamma}{2}t + \exp(M\beta_0))^{-1/M} \\
 & \leq & 12\Delta_\pi H (\frac{\gamma}{2})^{-1/M} \exp(\beta(E - U_0)) t^{-1/M} \\
 & \leq & K_G\ K_\beta\ t^{-1/M} \ .
\end{array}
$$

Gilt für ein $\epsilon > 0$

$$K\ t^{-1/M} < \epsilon \ \Leftrightarrow \ t > (K^{-1}\ \epsilon)^{-M} \ ,$$

so erhalten wir $P_x(\tau_V > t) \leq \epsilon$.
Beweis: von Korollar 4.5
Nach Satz 4.3 gilt

$$P_x(\tau_V > t) \leq 6\pi_t(V) \ ,$$

falls

$$b_{t,x} := \pi_t(V)^{-1/2}\pi_0(x)^{-1/2} \prod_{<i,j>} \frac{b_{ijt}}{1 - b_{ijt}} \frac{1 - b_{ij0}}{b_{ij0}} \exp(-\max_\sigma R_b(\sigma)(\beta_t - \beta_0)) \leq 1 \ .$$

Die Tatsache, daß für ein festes $\sigma \in B$

$$\sum_n \prod_{<i,j>} b_{ijt}\delta_{n_{ij},1} + (1 - b_{ijt})\delta_{n_{ij},0}\delta_{\sigma_i,\sigma_j} = \prod_{<i,j>} b_{ijt} + (1 - b_{ijt})\delta_{\sigma_i\sigma_j}$$

gilt, ermöglicht uns, die Abschätzungen von $\pi_t(V)$ und Z_t auf Abschätzungen in [19] zurückzuführen.
Es gilt für $V := \{y \in X : U(y) \geq E\}$ und $\hat{V} := \{\sigma \in B : U(\sigma) \geq E\}$:

$$\begin{aligned} Z_t(V) &:= \sum_{(\sigma,n)\in V} \exp(-\beta_t R_b(\sigma)) \prod_{<i,j>} b_{ijt}\delta_{n_{ij},0} + (1-b_{ijt})\delta_{\sigma_i\sigma_j}\delta_{n_{ij},1} \\ &= \sum_{\sigma\in\hat{V}} \exp(-\beta_t U(\sigma)) \\ &\leq 2HG(0)\exp(-(\beta_t-\beta)(E-U_0)) \ . \end{aligned}$$

Damit ist die Richtigkeit der oberen Abschätzung für $\pi_t(V)$ gezeigt, und es folgt weiter $Z_t(X) \leq 2HG(0)$.
Wir definieren

$$\begin{aligned} \hat{\pi}(\sigma) &:= \min_n \pi(\sigma, n) \ , \\ s_\pi(\hat{V}) &:= \sum_{\sigma\in\hat{V}} \hat{\pi}(\sigma) \ , \\ < U >_{\hat{V}} &:= \sum_{\sigma\in\hat{V}} U(\sigma)\frac{\hat{\pi}(\sigma)}{s_\pi(\hat{V})} \end{aligned}$$

und erhalten

$$\begin{aligned} \pi_t(V) &= \sum_{(\sigma,n)\in V} \pi_t(\sigma, n) \\ &= \sum_{(\sigma,n)\in V} \frac{1}{Z_t} \sum_{<i,j>} [b_{ijt}\delta_{n_{ij},1} + (1-b_{ijt})\delta_{n_{ij},0}\delta_{\sigma_i\sigma_j}] \exp(-\beta_t R_b(\sigma))\pi(\sigma, n) \\ &= Z_t^{-1} \sum_{\sigma\in\hat{V}} \exp(-\beta_t U(\sigma)) \ \hat{\pi}(\sigma) \\ &\geq s_\pi(\hat{V}) \ Z_t^{-1} \ \exp(-\beta_t < U >_{\hat{V}}) \\ & \ \text{(Jensen Ungleichung)} \\ &\geq \Delta_\pi^{-1} \ |\hat{V}| \ Z_t(X)^{-1} \ \exp(-\beta_t < U >_{\hat{V}}) \ . \end{aligned}$$

Weiter gilt

$$\begin{aligned} \pi_0(x) &= Z_0^{-1}\pi(x)\exp(-\beta_0 R_b(\sigma)) \prod_{<i,j>} b_{ij0}\delta_{n_{ij},1} + (1-b_{ij0})\delta_{n_{ij},0}\delta_{\sigma_i\sigma_j} \\ &\geq \Delta_\pi^{-1} Z_0(X)^{-1} \left(\prod_{<i,j>} b_{ij0} + (1-b_{ij0})\delta_{\sigma_i\sigma_j} \right) \exp(-\beta_0 R_b(\sigma)) \\ & \ \prod_{<i,j>} \delta_{n_{ij},1} + (1-b_{ij0})\delta_{\sigma_i\sigma_j}\delta_{n_{ij},0} \\ & \ \text{da (für x) } \sigma_i \neq \sigma_j \text{ gelten soll, falls } n_{ij} = 1 \text{ gilt.} \\ &\geq \Delta_\pi^{-1} Z_0(X)^{-1} \exp(-\beta_0 U(\sigma)) \prod_{<i,j>} (1-b_{ij0}) \ . \end{aligned}$$

Damit erhalten wir

$$b_{t,x} \leq \Delta_\pi^{1/2} \ |\hat{V}|^{-1/2} \left(2HG(0)\right)^{1/2} \exp\left(\frac{1}{2}\beta_t < U >_V\right)$$

$$
\begin{aligned}
&\cdot\quad \Delta_\pi^{1/2}\,(2HG(0))^{1/2}\exp\left(\frac{1}{2}\beta_0 U(x)\right)\prod_{<i,j>}(1-b_{ij\,0})^{-1/2}\\
&\cdot\quad \prod_{<i,j>}\frac{b_{ij\,t}}{1-b_{ij\,t}}\frac{1-b_{ij\,0}}{b_{ij\,0}}\exp\left(-\max_\sigma R_b(\sigma)(\beta_t-\beta_0)\right)\\
&=\quad \Delta_\pi\;|\hat V|^{-1/2}\;2HG(0)\prod_{<i,j>}\frac{(1-b_{ij\,0})^{1/2}}{1-b_{ij\,t}}\exp\left(-\beta_t\left(M-\frac{<U>_V}{2}\right)\right)\\
&\cdot\quad \exp\left(\beta_0\left(M+\frac{U(x)}{2}\right)\right)\\
&\le\quad \Delta_\pi\;|\hat V|^{-1/2}\;2HG(0)\;\exp\left(-\beta_t\left(M-\frac{<U>_V}{2}\right)\right)\\
&\qquad \exp\left(\beta_0\left(M+\frac{U(x)}{2}\right)\right)\prod_{<i,j>}(1-b_{ij\,0})^{-1/2}\;.
\end{aligned}
$$

Die Bedingung $b_{t,x}\le 1$ ist wegen

$$|\hat U(x)|\le M$$

erfüllt für

$$\beta_t \ge \frac{2\ln(\Delta_\pi|V|^{-1/2}2HG(0))}{M}+\beta_0\left(2+\frac{U(x)}{M}\right)-\frac{1}{M}\ln\left(\prod_{<i,j>}(1-b_{ij\,0})\right)\;.$$

Dies gilt, falls

$$t\ge 2\;\gamma^{-1}\left(\Delta_\pi|V|^{-1/2}2HG(0)\right)^2\exp\left(2\beta_0\left(M+\frac{U(x)}{2}\right)\right)\prod_{<i,j>}(1-b_{ij\,0})^{-1}\;.$$

Bemerkung 4.8 *Vergleicht man Satz 2.7 und Satz 4.3 bzw. Korollar 2.10 und Korollar 4.5, so sieht man, daß in 4.3 und 4.5 die Funktion $b_{ij\,t}$ direkt in die Abschätzungen eingehen, aber die Dirichletform schlecht abgeschätzt werden kann. In 2.7 und 2.10 läßt sich die Dirichletform günstig abschätzen, die Terme, die die Funktion b_{ij} enthalten, müßen aber durch eine Exponentialfunktion genähert werden.*
Versucht man beide Vorteile zu verbinden, so erhält man für einen Spezialfall folgende günstigere Aussagen, die wir nicht explizit beweisen wollen, da die Beweise denen von 2.7 und 4.3 bzw. 2.10 und 4.5 sehr ähneln und aus diesen zusammengesetzt werden können.

Satz 4.9 *Seien (I) und (R) erfüllt, $V\subseteq X$, und U wie in 4.1 mit $J_{ij}=J>0$ definiert.*
Sei (analog zu 2.5) für $x=(\sigma,n)\in X$

$$
\begin{aligned}
h_x \;:=\; \min\Big\{\; & N\ge 0:\ \textit{Es existiert ein } y=(\rho,m)\in\partial V \textit{ und ein Pfad } \xi \textit{ in}\\
& G\ ,\ \textit{der } x \textit{ und } y \textit{ verbindet, so daß für alle Knoten } (\theta,k) \textit{ des}\\
& \textit{Pfades und für alle } l>0 \textit{ gilt :}\ \sum_{<i,j>\in\mathcal{F}}k_{ij}\le\sum_{<i,j>\in\mathcal{F}}n_{ij}+N\;\Big\}
\end{aligned}
$$

und

$$h := \max_{x \in V} h_x \ .$$

Sei

$$M := \max_{(\sigma,n)\in X} \sum_{<i,j>} n_{ij} \ .$$

Sei die Gültigkeit folgender Annahme vorausgesetzt:
Für ein vorgegebenes $V \subseteq X$ gelte

$$\inf \left\{ \frac{\mathcal{E}_t(\rho,\rho)}{Var_t(\rho)} : \rho|_{V^c} \text{ konstant , } \rho \text{ nicht konstant} \right\} \geq \gamma \left(\frac{b_t}{1-b_t} \right)^h$$

Bezeichne Y_t , $t \geq 0$ den simulated annealing - Prozeß, der durch q_t mit

$$\beta_t = J^{-1} \ln \left(1 + \left(\frac{2\gamma h}{3M} \ t + \left(\frac{b_0}{1-b_0} \right)^{-h} \right)^{1/h} \right)$$

für $t \geq 0$ und ein $\beta_0 > 0$ bestimmt ist.
Sei τ_V der Zeitpunkt des ersten Erreichens der Menge V^c.
Bezeichne $P_x(Y_t \in A)$ die Verteilung von Y_t mit Startverteilung ϵ_x.
Dann gilt für $x \in V$

$$P_x(\tau_V > t) \leq 5\pi_t(V) + \pi_t(V)^{1/2}\pi_0(x)^{-1/2} \left(\frac{b_t}{1-b_t} \right)^M \left(\frac{b_0}{1-b_0} \right)^{-M} \ .$$

Diese Aussage gilt auch für das vereinfachte annealing Schema

$$\beta_t = \frac{1}{hJ} \ln \left(\frac{2\gamma h}{3M} t + \left(\frac{b_0}{1-b_0} \right)^{-h} \right)$$

für $t \geq 0$ und ein $\beta > 0$.

Korollar 4.10 *Angenommen, (I), (R) und folgende Annahme (analog zu 2.9) gelten:*
Es existieren Konstanten $\beta > 0$, $H > 0$ und ein System ξ für G , so daß gilt

$$\max_{((\sigma,n)\ ,\ (\rho,m))\in\xi} \# \left\{ (\theta,k) \in \Xi : \sum_{<i,j>} k_{ij} \leq \max\{ \sum_{<i,j>} n_{ij} \ , \ \sum_{<i,j>} m_{ij} \} + v \right\} \leq H \exp(\beta v)$$

für $0 \leq v \leq M - \max\left\{ \sum_{<i,j>} n_{ij} \ , \ \sum_{<i,j>} m_{ij} \right\}$.
Sei β_t wie in 4.9 definiert, wobei

$$\begin{aligned} \beta_0 \quad &\geq \quad J^{-1} \ln \left(e^\beta + 1 \right) \ , \\ \gamma^{-1} \quad &:= \quad 2d\Delta_\pi LH \ . \end{aligned}$$

Dann gilt

$$\frac{P_x(\tau_V > t)}{\pi_t(V)} \leq 6$$

für alle

$$t \geq \frac{3M}{2\gamma h} \left(\Delta_\pi 2HG(0)|V|^{-1/2} \right)^{2hM^{-1}} \left(\frac{b_0}{1-b_0} \right)^{-h(2+U(x)/M)} \ .$$

Literaturverzeichnis

[1] Norman Biggs, Algebraic Graph Theory, Cambridge University Press, 1974

[2] B. Bollobas, Combinatorics, Cambridge Univ. Press, 1986

[3] Alfred Brauer, Limits for the characteristic roots of a Matrix, Duke Mathematical Journal 13 (1946) 387 - 395 (Teil I), 14 (1947) 21 - 26 (Teil II), 15 (1948) 871 - 877 (Teil III), 19 (1952) 75 - 91 (Teil IV)
Eine Richtigstellung eines der Ergebnisse von Brauer wurde veröffentlicht von O. A. Timan, Brauer's Limits for the characteristic roots of irreducible stochastic matrices, U.S.S.R. Computional Mathematics and Mathematical Physics 12 (1972), 240 - 250

[4] Olivier Catoni, Asymptotics of simulated annealing algorithms, Ph.D. Thesis, DIAM, Université Paris - Sud, Orsey, 1990

[5] Chiang, Chow, On the convergence rate of annealing processes, Siam J. Control and Optimation 26, 1455 - 1470

[6] Chiang, Chow, A limit theorem for a class of inhomogeneous Marcov processes, Ann. Probab. 17, 1483 - 1502

[7] Dragoš M. Cveković, Michael Doob, Horst Sachs, Spectra of Graphs, Academic Press, New York, San Francisco, London, 1980

[8] Persi Diaconis, Group Representation in Probability and Statistics, Institute of Mathematical Statistics, Hayward (Calif.)

[9] Persi Diaconis, Daniel Stroock, Geometric Bounds for Eigenvalues of Markov chains, The Annals of Applied Probability, 1 (1991), 36 - 61.

[10] R. P. Dilworth, A decomposition theorem for partially ordered sets, Annals of Mathematics 51 (1950), 161 - 166

[11] Dobrushin, Central Limit Theorem for Nonstationary Marcov chains I, II, Theory of Probability and its Applications, 1 (1956),65 - 80, 329 - 383

[12] Robert G. Edwards, Alan D. Sokal, Generalization of the Fortuin-Kasteleyn-Swendsen-Wang representation and Monte Carlo algorithm, Physical Review D 38 (1988), 2009 - 2012

[13] M. Fiedler, J. Sedláček, O w-basich orientovaných grafů, Časopis Pěst. Mat. 83 (1958), 214 - 225

[14] James Allen Fill, Eigenvalue Bounds on convergence to stationarity for non-reversible Markov chains, with an application to the exclusion process, The Annals of Applied Probability 1 (1991), 62 - 87

[15] L. R. Ford, D. R. Fulkerson, Flows in Networks, Princeton, 1962

[16] M. I. Freidlin, A. D. Wentzell, Random Perturbations of Dynamical Systems, Springer, Grundlehren d. mathem. Wissensch. 260, 1984

[17] Geman, Geman, Stochastic Relaxation, Gibbs Distribution, and the Bayesian Restoration of Images, IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, PAMI - 6 (1984), 721 - 741

[18] Basilis Gidas, Nonstationary Marcov Chains and Convergence of the Annealing Algorithm, Journal of Statistical Physics 39 (1985), 73 - 131

[19] Friedrich Götze, Rate of convergence of simulated annealing processes, Preprint 92-008, SFB 343, Universität Bielefeld, 1992

[20] Jonathan Goodman, Alen D. Sokal, Multigrid Monte Carlo method. Conceptual foundations, Physical Review D 40 (1989) 2035 - 2071

[21] Hajek, Cooling Schedules for Optimal Annealing, Mathematics of Operations Research, 13 (1988), 311 - 329

[22] Marshall Hall, Combinatorial Theory, Blaisdell Publishing Company, Waltham (Mass.), Toronto, London, 1967

[23] Peter Henrici, Applied and Computional Complex Analysis, Vol. 1, Wiley 1974[10].

[24] Holley, Kusuoka, Stroock, Asymptotics of the Spectral Gap with Applications to the theory of simulated annealing, Journal of Funktional Analysis 83 (1989), 333 - 347

[25] Holley, Stroock, Simulated annealing via Sobolev Inequalities, Commun. Math. Phys. 115 (1988), 553 - 569

[26] Roger A. Horn, Charles R. Johnson, Matrix Analysis, Cambridge University Press, 1985

[27] Iosifescu, Theodorescu, Random processes and learning, Springer, 1969

[28] Eugene Seneta, Non - negative Matrices and Marcov Chains, Springer, 1981[9]

[29] Allen D. Sokal, Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics: Foundations and new Algorithms, Cours de Troisieme Cycle de la Physique en Suisse Romande, Lausanne, 1989

[30] Richard P. Stanley, Log - concave and unimodal sequences in algebra, combinatorics, and geometry, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge (Mass.)

[31] Robert H. Swendsen, Jian - Sheng Wang, Nonuniversal Critical Dynamics in Monte Carlo Simulation, Physical Review Letters 58 (1987), 86 - 88

[32] Lawrence E. Thomas, Zhong Yin, Approach to equilibrium for random walks on graphs and for stochastic infinite particle processes, J. Math. Phys. 27 (1986), 2475 - 2477

[33] A. D. Wentzell, On the asymptotics of eigenvalues of matrices with elements of order $\exp\{-V_{ij}/(2\epsilon^2)\}$, Soviet Math. Dokl. 13 (1972), 65 - 68

[34] Ulli Wolf, High Precision Simulations with Fast Algorithms, CERN, Theory Division, Geneve, 1992 (Lecture notes for the 31. Internationalen Universitätswochen für Kern- und Teilchenphysik, Computional Methods in Field Theory, Schladming 1992)