Abschätzung der Spektrallücke über die Leitfähigkeit

Alexander Schlüter

18. Januar 2016

Wir haben schon die Leitfähigkeit einer Markovkette als eine Möglichkeit zur Abschätzung ihrer Mischzeit kennengelernt. In diesem Vortrag soll die Spektrallücke einer Markovkette anhand der Eigenwerte ihrer Übergangsmatrix definiert werden. Das Hauptresultat ist eine Abschätzung der Spektrallücke mithilfe der Leitfähigkeit.

Inhaltsverzeichnis

1 Erinnerungen

Im Folgenden sei Ω ein endlicher Zustandsraum mit mehr als einem Element, P eine irreduzible Übergangsmatrix auf Ω mit stationärer Verteilung π.

Definition 1.1. Schreibe für $x, y \in \Omega$

$$Q(x,y) \coloneqq \pi(x)P(x,y).$$

Für $A, B \subset \Omega$ sei das **Randmaß** Q definiert durch

$$Q(A,B) \coloneqq \sum_{x \in A, y \in B} Q(x,y).$$

Die **Leitfähigkeit** einer nichtleeren Menge $S \subset \Omega$ ist

$$\phi(S) \coloneqq \frac{Q(S, S^{\mathsf{c}})}{\pi(S)}$$

und die Leitfähigkeit der ganzen Kette

$$\phi_\star := \min \left\{ \phi(S) \mid S \subset \Omega,\, 0 < \pi(S) \leq \frac{1}{2} \right\}.$$

Wir haben gesehen, dass die Leitfähigkeit die Mischzeit der Markovkette beeinflusst. Markovketten mit einer geringen Leitfähigkeit mischen langsamer, d.h. sie konvergieren langsamer gegen die stationäre Verteilung. Man kann sich auch vorstellen, dass die Leitfähigkeit die „engste Stelle“ der Kette misst, daher der Name „Flaschenhals-Quotient“.

2 Eigenwerte und die Spektrallücke

Die Verteilung einer Markovkette wird im Wesentlichen durch ihre Übergangsmatrix charakterisiert, deshalb ist es sinnvoll, diese mit Mitteln der Linearen Algebra genauer zu betrachten.

Definition 2.1. Seien $f, g \in \mathbb{R}^\Omega$. Definiere

$$\langle f, g \rangle_\pi := \sum_{x \in \Omega} f(x) g(x) \pi(x)$$
$$\|f\|_\pi := \sqrt{\langle f, f \rangle}\,.$$

Schreibe außerdem

$$f \perp_\pi g :\Longleftrightarrow \langle f, g \rangle_\pi = 0\,.$$

f und g heißen dann **π-orthogonal**.

Bemerkung 2.2. Da für alle $x \in \Omega \quad \pi(x) > 0$ gilt, wird hierdurch ein Skalarprodukt auf $\mathbb{R}^\Omega$ definiert und $\ell^2(\pi) := (\mathbb{R}^\Omega, \langle \cdot, \cdot \rangle_\pi)$ ist ein Hilbertraum.

Lemma 2.3. Sei M eine Übergangsmatrix.

(i) Ist λ ein Eigenwert von M, dann gilt $|\lambda| \leq 1$.
(ii) Ist M irreduzibel, dann ist der Eigenraum zum Eigenwert 1 eindimensional und er wird aufgespannt durch $(1, 1, \dots, 1)^\intercal$.
(iii) Ist M irreduzibel und aperiodisch, so ist -1 kein Eigenwert.

Beweis. (i) Sei f Eigenfunktion zu λ und $x \in \Omega$ mit $|f(x)| = \max_{y \in \Omega} |f(y)|$. Dann gilt

$$|\lambda f(x)| = |\sum_{y \in \Omega} M(x, y) f(y)| \leq |f(x)| \sum_{y \in \Omega} M(x, y) = |f(x)|$$

und da f nicht konstant 0 ist, folgt $|\lambda| \leq 1$.

(ii) Da die Zeilensumme 1 ist, ist $(1, 1, \dots, 1)^\intercal$ offensichtlich Eigenfunktion zum Eigenwert 1. Sei f Eigenfunktion zu 1 und $x \in \Omega$ mit $|f(x)| = \max_{y \in \Omega} |f(y)|$. Dann

$$\sum_{y \in \Omega} M(x, y) \frac{f(y)}{f(x)} = 1$$

mit $\frac{f(y)}{f(x)} \leq 1$. Es muss also für alle $y \in \Omega$ mit $M(x,y) > 0$ $\frac{f(y)}{f(x)} = 1$ gelten.
Ist $y \in \Omega$ beliebig, so existiert $t \in \mathbb{N}$ mit $M^t(x,y) > 0$, denn M ist irreduzibel. f ist auch Eigenfunktion von M^t zum Eigenwert 1 und mit dem gleichen Argument wie oben für M^t folgt $f(y) = f(x)$.

(iii) Zeige die Kontraposition: Sei f Eigenfunktion zum Eigenwert -1. Sei $x \in \Omega$ mit $|f(x)| = \max_{y\in\Omega}|f(y)|$.

$$|-f(x)| = |\sum_{y\in\Omega} M(x,y)f(y)| \leq \sum_{y\in\Omega} M(x,y)|f(y)| \leq |f(x)|$$

und da $|f(y)| \leq |f(x)|$ folgt für alle $y \in \Omega$ mit $M(x,y) > 0$, dass $|f(y)| = |f(x)|$.
Ohne Beträge sieht man, dass

$$-f(x) = \sum_{y\in\Omega} M(x,y)f(y)$$

was nur möglich ist, wenn für $y \in \Omega$ mit $M(x,y) > 0$ gilt: $f(y) = -f(x)$.
Sei $t \in \mathcal{T}(x) := \{\, s \in \mathbb{N} \mid M^s(x,x) > 0 \,\}$. Es existiert ein Pfad

$$x = v_0 \to v_1 \to v_2 \to \ldots \to v_{t-1} \to v_t = x$$

mit $v_i \in \Omega$, $M(v_i, v_{i+1}) > 0$ $(0 \leq i \leq t-1)$. Nach obiger Betrachtung ist

$$f(x) = -f(v_{t-1}) = \cdots = (-1)^t f(x)$$

Also muss t gerade sein und $\mathrm{ggT}(\mathcal{T}(x)) \geq 2$, d.h. M ist periodisch.

□

Lemma 2.4. Sei P reversibel bezüglich π. Dann hat $\ell^2(\pi)$ eine Orthonormalbasis $f_1, \ldots, f_{|\Omega|}$, wobei f_i Eigenfunktion von P zum Eigenwert λ_i $(1 \leq i \leq |\Omega|)$ ist. Die Eigenfunktion zum Eigenwert 1 kann als die konstante Einsfunktion $f_1 = \mathbf{1}$ gewählt werden.

Beweis. Aus Reversibilität folgt, dass die Matrix

$$A(x,y) := \pi(x)^{1/2}\pi(y)^{-1/2}P(x,y)$$

symmetrisch ist. Die Behauptung folgt mittels des Spektralsatzes für symmetrische Matrizen. Für den vollen Beweis siehe [LPW08, Lemma 12.2(i)]. □

Bemerkung 2.5. (1) Da A in dem Beweis von Lemma 2.4 symmetrisch ist, sind Eigenfunktionen zu unterschiedlichen Eigenwerten orthogonal. Dies überträgt sich auf die Eigenfunktionen von P: Eigenfunktionen von P zu unterschiedlichen Eigenwerten sind **π-orthogonal**.

(2) Die Eigenfunktionen in der Basis sind im Allgemeinen nicht eindeutig bestimmt, die Vielfachheit der auftretenden Eigenwerte aber schon: Sie entspricht der Dimension des zugehörigen Eigenraumes von P.

Definition 2.6. Für eine reversible Übergangsmatrix P nummerieren wir ihre Eigenwerte in absteigender Ordnung:

$$1 = \lambda_1 > \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_{|\Omega|} \geq -1.$$

Die **Spektrallücke** ist definiert durch $\gamma \coloneqq 1 - \lambda_2$. Schreibe

$$\lambda_\star \coloneqq \max \{\, |\lambda| \mid \lambda \text{ ist Eigenwert von } P,\ \lambda \neq 1 \,\}.$$

Die Differenz $\gamma_\star \coloneqq 1 - \lambda_\star$ heißt **absolute Spektrallücke**.

Bemerkung 2.7. Nach Lemma 2.3(iii) ist für eine irreduzible aperiodische Übergangsmatrix $\gamma_\star > 0$.

3 Die Dirichletform

Bis jetzt ist noch nicht klar, was die Spektrallücke mit der Leitfähigkeit zu tun hat. Die Verbindung wird über die Dirichletform hergestellt.

Ab hier sei die irreduzible Übergangsmatrix P zusätzlich **reversibel** bezüglich der stationären Verteilung π.

Definition 3.1. Die Abbildung

$$\begin{aligned} \mathcal{E} \colon \mathbb{R}^\Omega \times \mathbb{R}^\Omega &\to \mathbb{R} \\ (f, g) &\longmapsto \langle (I - P) f, g \rangle_\pi \end{aligned}$$

heißt **Dirichletform** zu (P, π).

Lemma 3.2. Definiere für $f \in \mathbb{R}^\Omega$

$$\mathcal{E}(f) \coloneqq \frac{1}{2} \sum_{x,y \in \Omega} (f(x) - f(y))^2 \pi(x) P(x, y). \tag{1}$$

Dann gilt $\mathcal{E}(f) = \mathcal{E}(f, f)$.

Beweis. Ausmultiplizieren des Quadrats in Gleichung (1) gibt

$$\mathcal{E}(f) = \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{x,y \in \Omega} f(x)^2 \pi(x) P(x, y)}_{\text{(a)}} - \underbrace{\sum_{x,y \in \Omega} f(x) f(y) \pi(x) P(x, y)}_{\text{(b)}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{x,y \in \Omega} f(y)^2 \pi(x) P(x, y)}_{\text{(c)}}$$

Wegen Reversibilität ist $\pi(x) P(x, y) = \pi(y) P(y, x)$ und die Terme (a) und (c) lassen sich zusammenfassen:

$$\begin{aligned} (a) + (c) &= \sum_{x,y \in \Omega} f(x)^2 \pi(x) P(x, y) \\ &= \sum_{x \in \Omega} f(x)^2 \pi(x) \sum_{y \in \Omega} P(x, y) \\ &= \sum_{x \in \Omega} f(x)^2 \pi(x). \end{aligned}$$

Zusammen mit (b) also

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(f) &= \sum_{x\in\Omega} f(x)^2\pi(x) - \sum_{x\in\Omega}\left(\sum_{y\in\Omega} P(x,y)f(y)\right) f(x)\pi(x)\\ &= \langle f, f\rangle_\pi - \langle Pf, f\rangle_\pi\\ &= \langle (I-P)f, f\rangle_\pi\\ &= \mathcal{E}(f,f)\end{aligned}$$

□

Bemerkung 3.3. Es sei $\mathbf{1}$ die konstante Einsfunktion auf Ω. Dann ist

$$E_\pi(g) = \sum_{x\in\Omega} g(x)\pi(x) = \langle g, \mathbf{1}\rangle_\pi\,,$$

also $E_\pi(g) = 0$ genau dann wenn $g \perp_\pi \mathbf{1}$.

Lemma 3.4. Für die Spektrallücke $\gamma = 1 - \lambda_2$ gilt

$$\begin{aligned}\gamma &= \min\left\{\, \mathcal{E}(g) \mid g \in \mathbb{R}^\Omega,\ g \perp_\pi \mathbf{1},\ \|g\|_\pi = 1 \,\right\} &(2)\\ &= \min\left\{ \frac{\mathcal{E}(g)}{\|g\|_\pi^2} \mid g \in \mathbb{R}^\Omega,\ g \perp_\pi \mathbf{1},\ g \neq 0 \right\} &(3)\end{aligned}$$

Beweis. Sei $n := |\Omega|$. Laut Lemma 2.4 gibt es in $\ell^2(\pi)$ eine Orthonormalbasis $f_1, \dots, f_n$ von Eigenfunktionen von P, wobei $f_1 = \mathbf{1}$. Ist $g \in \mathbb{R}^\Omega$, so kann g in der ONB entwickelt werden zu

$$g = \sum_{j=1}^n \langle g, f_j\rangle_\pi f_j\,.$$

Setze $a_j := \langle g, f_j\rangle_\pi$. Ist $g \perp_\pi \mathbf{1}$, d.h. $\langle g, f_1\rangle_\pi = 0$, so fällt der erste Summand weg. Gilt auch $\|g\|_\pi = 1$, dann ist

$$1 = \|g\|_\pi^2 = \langle g, g\rangle_\pi = \sum_{j=2}^n a_j^2\,.$$

Insgesamt

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(f) = \langle (I-P)g, g\rangle_\pi &= \langle\, (I-P)\sum_{j=2}^n a_j f_j\,,\, g\,\rangle_\pi\\ &= \langle \sum_{j=2}^n a_j(1-\lambda_j)f_j\,,\, g\,\rangle_\pi = \sum_{j=2}^n a_j^2(1-\lambda_j)\\ &\geq (1-\lambda_2)\sum_{j=2}^n a_j^2 = (1-\lambda_2)\end{aligned}$$

mit Gleichheit im vorletzten Schritt für $g = f_2$. Damit ist Gleichung (2) gezeigt.

Die Ungleichung „$\geq$“ von (2) zu (3) ist klar. Sei $g \in \mathbb{R}^\Omega$ mit $g \perp_\pi \mathbf{1}$, $\|g\|_\pi \neq 0$. Dann hat $\widetilde{g} \coloneqq g/\|g\|_\pi$ Norm 1 und

$$\mathcal{E}(\widetilde{g}) = \langle (I-P)\frac{g}{\|g\|_\pi}, \frac{g}{\|g\|_\pi}\rangle_\pi = \frac{\mathcal{E}(g)}{\|g\|_\pi^2}\,.$$

Also gilt auch „$\leq$“. $\square$

4 Abschätzung der Spektrallücke über die Leitfähigkeit

Wir formulieren jetzt das Hauptresultat:

Satz 4.1 (Jerrum und Sinclair (1989), Lawler und Sokal (1988))
Sei P eine irreduzible, reversible Übergangsmatrix mit stationärer Verteilung π. Sei λ_2 der zweitgrößte Eigenwert von P und $\phi_\star$ die Leitfähigkeit. Dann gilt für die Spektrallücke $\gamma = 1 - \lambda_2$:

$$\frac{\phi_\star^2}{2} \leq \gamma \leq 2\phi_\star\,. \tag{4}$$

Bemerkung 4.1. Die Abschätzung nach oben ist linear in $\phi_\star$, die Abschätzung nach unten ist quadratisch. Die folgenden Beispiele zeigen, dass es Fälle gibt in denen die obere Abschätzung die richtige Ordnung hat, und welche, in denen die untere Abschätzung die richtige Ordnung hat.

Beispiel 4.2 (Träge Irrfahrt auf dem n-dimensionalen Hyperwürfel)**.** Sei $\Omega = \{-1,1\}^n$ der n-dimensionale Hyperwürfel. Betrachte die Menge $S \coloneqq \{\, x \in \Omega \mid x_1 = -1 \,\}$ der Ecken, deren erste Koordinate -1 ist. Die stationäre Verteilung ist die Gleichverteilung $\pi = (2^{-n}, 2^{-n}, \ldots, 2^{-n})^\mathsf{T}$. Also gilt

$$\pi(S) = 2^{-n}|S| = 2^{-n} \cdot 2^{n-1} = \frac{1}{2}\,.$$

Es sei E die Menge der Kanten. Es ist $\{x,y\} \in E$ genau dann, wenn sich x und y in genau einer Koordinate unterscheiden. Der Rand von S ist deshalb

$$\begin{aligned}\partial S &= \{\, \{x,y\} \in E \mid x \in S \text{ und } y \in S^\mathsf{c} \,\}\\ &= \left\{\, \{(-1,v),(1,v)\} \mid v \in \{-1,1\}^{n-1} \,\right\}.\end{aligned}$$

Folglich ist $|\partial S| = 2^{n-1}$. Die Leitfähigkeit der Menge S lässt sich nun berechnen:

$$\begin{aligned}\phi(S) &= \frac{Q(S,S^\mathsf{c})}{\pi(S)} = 2\sum_{x\in S, y \in S^\mathsf{c}} \pi(x)P(x,y)\\ &= 2\cdot|\partial S|\cdot 2^{-n}\cdot\frac{1}{2n} = 2\cdot 2^{n-1}\cdot 2^{-n}\cdot\frac{1}{2n} = \frac{1}{2n}\end{aligned}$$

Es folgt

$$2\phi_\star \leq 2\phi(S) = \frac{1}{n}\,. \tag{5}$$

Für jede Teilmenge $J \subset \{1, \dots, n\}$ definiere $f_J : \Omega \to \mathbb{R}$ durch

$$f_J(x_1, \dots, x_n) \coloneqq \prod_{j \in J} x_j \,.$$

Beh.: f_J ist Eigenfunktion von P zum Eigenwert $1 - |J|/n$.

Beweis. Sei $x \in \Omega$ beliebig. Partitioniere Ω durch vier Mengen:

$$\begin{aligned}
A &\coloneqq \{\, y \in \Omega \mid y \text{ unterscheidet sich von } x \text{ nur in einer Koordinate aus } J \,\} \\
B &\coloneqq \{\, y \in \Omega \mid y \text{ unterscheidet sich von } x \text{ nur in einer Koordinate aus } J^{\mathsf{c}} \,\} \\
C &\coloneqq \{x\} \\
D &\coloneqq \{\, y \in \Omega \mid y \text{ unterscheidet sich von } x \text{ in mehr als einer Koordinate} \,\}
\end{aligned}$$

Für $y \in D$ ist $P(x,y) = 0$. Außerdem ist $|A| = |J|$ und $|B| = |J^{\mathsf{c}}| = n - |J|$. Ändert man eine Koordinate von x, die in J enthalten ist, so dreht sich das Vorzeichen von f_J um: $f_J(y) = -f_J(x)$. Ändert man aber eine Koordinate aus J^{c}, so hat dies keinen Einfluss auf f_J, d.h. $f_J(y) = f_J(x)$. Wir können also rechnen

$$\begin{aligned}
Pf(x) &= \sum_{y \in \Omega} P(x,y) f(y) \\
&= P(x,x) f(x) + \sum_{y \in A} P(x,y) f(y) + \sum_{y \in B} P(x,y) f(y) \\
&= \frac{1}{2} f(x) + |J| \cdot \frac{1}{2n} \cdot (-f(x)) + (n - |J|) \frac{1}{2n} f(x) \\
&= (1 - \frac{|J|}{n}) f(x) \,.
\end{aligned}$$

$\Diamond$

Beh.: Es gibt keine weiteren Eigenwerte.

Beweis. Zeige zunächst, dass für $I, J \subset \Omega$ mit $I \neq J$ gilt: $\langle f_I, f_J \rangle_\pi = 0$. Sei dazu o.B.d.A. $k \in I \setminus J$. Dann haben wir

$$\begin{aligned}
\langle f_I, f_J \rangle_\pi &= \sum_{x \in \Omega} f_I(x) f_J(x) \pi(x) \\
&= 2^{-n} \sum_{(x_1, \dots, \cancel{x_k}, \dots, x_n)} \sum_{x_k \in \{-1,1\}} x_k \cdot f_{I \setminus \{k\}}(x) f_J(x) \\
&= 0 \,,
\end{aligned}$$

wobei die letzte Gleichheit gilt, da weder $f_{I \setminus \{k\}}$ noch f_J von x_k abhängen. Die Menge

$$Z \coloneqq \{\, f_J \mid J \subset \{1, \dots, n\} \,\}$$

ist demnach linear unabhängig und $|Z| = 2^n = \dim(\mathbb{R}^\Omega)$, also ist Z eine Basis von $\mathbb{R}^\Omega$.

Wäre nun μ ein anderer Eigenwert von P, so wäre nach Bemerkung 2.5 die zugehörige Eigenfunktion g π-orthogonal auf allen Eigenvektoren zu anderen Eigenwerten, also auch auf allen Elementen aus Z. Dann wäre g linear unabhängig zu Z. Dies ist ein Widerspruch.

$\Diamond$

Wie wir gesehen haben, ist der zweitgrößte Eigenwert der Übergangsmatrix $\lambda_2 = 1-1/n$ und die Spektrallücke ist $\gamma = 1 - \lambda_2 = 1/n$. Wegen

$$\frac{1}{n} = \gamma \overset{4.1}{\leq} 2\phi_\star \overset{(5)}{\leq} \frac{1}{n}$$

gilt

$$\gamma = \frac{1}{n} = 2\phi_\star$$

und die obere Abschätzung aus Satz 4.1 ist scharf und von korrekter Ordnung in n.

Beispiel 4.1 (Träge Irrfahrt auf dem $2n$-Zykel)
Setze $\omega := \exp(i\pi/n)$. Sei $\Omega = \{\, \omega^j \mid 0 \leq j < 2n \,\}$ die Menge der $2n$ Punkte mit regelmäßigem Abstand auf dem komplexen Einheitskreis. Ω bildet mit der komplexen Multiplikation eine Gruppe und wir können eine Übergangsmatrix durch Angabe der Inkrementenverteilung μ definieren:

$$\mu(x) := \begin{cases} 1/2 & \text{für } x = 1, \\ 1/4 & \text{für } x \in \{\omega, \omega^{-1}\}, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Die Matrix ist symmetrisch, also ist sie reversibel bezüglich der Gleichverteilung auf Ω. Für jede Menge $S \subset \Omega$ ist die Leitfähigkeit

$$\phi(S) = \frac{Q(S, S^{\mathrm{c}})}{\pi(S)} = \frac{|\partial S| \left(\frac{1}{4}\right) \left(\frac{1}{2n}\right)}{\frac{|S|}{2n}} \,.$$

Der Nenner wird unter allen S mit $\pi(S) \leq 1/2$ maximal für $|S| = n$. Für jede echte Teilmenge $S \subsetneq \Omega$ gilt $|\partial S| \geq 2$. Die Menge $S = \{\omega, \omega^2, \ldots, \omega^n\}$ hat folglich minimale Leitfähigkeit und wir haben

$$\phi_\star = \frac{2 \left(\frac{1}{4}\right) \left(\frac{1}{2n}\right)}{\frac{n}{2n}} = \frac{1}{2n} \tag{6}$$

Für $0 \leq j < 2n$ definiere $f_j : \Omega \to \mathbb{C}, f_j(x) := x^j$. Dann gilt für alle $k \in \{0, \ldots, 2n-1\}$

$$\begin{aligned} Pf_j(\omega^k) &= \frac{1}{2} f_j(\omega^k) + \frac{1}{4} \left(f_j(\omega^{k-1}) + f_j(\omega^{k+1}) \right) \\ &= \omega^{jk} \left(\frac{1}{2} + \frac{\omega^j + \omega^{-j}}{4} \right) = \frac{1 + \cos(\pi \frac{j}{n})}{2} f_j(\omega^k) \,. \end{aligned}$$

Diese Eigenfunktionen sind zwar komplexwertig, aber da die Matrix und die Eigenwerte reell sind, gibt es auch reelle Eigenfunktionen (z. B. der Realteil $\Re(f_j)$). Außerdem sind für $i \neq j, i \neq 2n-j$ die Eigenwerte zu f_i, f_j verschieden und die Eigenfunktionen f_j, f_{2n-j} ($j \notin \{0, n\}$) sind linear unabhängig. Deshalb ist die Menge $\{f_j \mid 0 \leq j < 2n\}$ eine Basis von $\mathbb{C}^\Omega$ und es gibt keine weiteren Eigenwerte. Der zweitgrößte ist

$$\lambda_2 = \frac{1 + \cos(\pi/n)}{2} = 1 - \frac{\pi^2}{4n^2} + \mathcal{O}(n^{-4}) \qquad \text{für } n \to \infty.$$

Die Spektrallücke ergibt sich zu $\gamma = \pi^2/(4n^2) + \mathcal{O}(n^{-4})$. Satz 4.1 liefert die untere Schranke

$$\gamma \geq \frac{\phi_\star^2}{2} \overset{(6)}{=} \frac{1}{8n^2}$$

mit der korrekten Ordnung in n.

Wir wollen nun Satz 4.1 beweisen.

Beweis der oberen Schranke in Satz 4.1. Für jedes $S \subset \Omega$ mit $0 < \pi(S) \leq 1/2$ definiere eine Funktion g_S durch

$$g_S(x) := \begin{cases} -\pi(S^\mathsf{c}) & \text{für } x \in S, \\ \pi(S) & \text{für } x \notin S. \end{cases}$$

Dann ist

$$\begin{aligned} E_\pi(g_S) &= \sum_{x \in \Omega} g_S(x)\pi(x) = -\pi(S^\mathsf{c}) \sum_{x \in S} \pi(x) + \pi(S) \sum_{x \in S^\mathsf{c}} \pi(x) \\ &= -\pi(S^\mathsf{c})\pi(S) + \pi(S)\pi(S^\mathsf{c}) = 0\,. \end{aligned}$$

Außerdem

$$\begin{aligned} \|g_S\|_\pi^2 &= \sum_{x \in \Omega} g_S(x)^2 \pi(x) = \pi(S^\mathsf{c})^2 \pi(S) + \pi(S)^2 \pi(S^\mathsf{c}) \\ &= \pi(S^\mathsf{c})\pi(S)(\pi(S^\mathsf{c}) + \pi(S)) = \pi(S^\mathsf{c})\pi(S) \end{aligned}$$

und nach Lemma 3.2 gilt

$$\mathcal{E}(g_S) = \frac{1}{2} \sum_{x,y \in \Omega} (g_S(x) - g_S(y))^2 \pi(x) P(x,y)\,.$$

Da g_S auf S und S^c konstant ist, ist für $x, y \in S$ bzw. $x, y \in S^\mathsf{c}$ $(g_S(x) - g_S(y))^2 = 0$. Wegen Reversibilität sind die Fälle $x \in S, y \in S^\mathsf{c}$ und $y \in S, x \in S^\mathsf{c}$ symmetrisch. Übrig bleibt

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(g_S) &= \frac{1}{2} \cdot 2 \sum_{x \in S, y \in S^\mathsf{c}} (g_S(x) - g_S(y))^2 \pi(x) P(x,y) \\ &= \sum_{x \in S, y \in S^\mathsf{c}} (\pi(S) + \pi(S^\mathsf{c}))^2 \pi(x) P(x,y) \\ &= Q(S, S^\mathsf{c}) \end{aligned}$$

Laut Lemma 3.4 ist

$$\begin{aligned}\gamma &= \min\left\{ \frac{\mathcal{E}(g)}{\|g\|_\pi^2} \mid g \in \mathbb{R}^\Omega,\ g \perp_\pi \mathbf{1},\ g \neq 0 \right\} \\ &\le \frac{\mathcal{E}(g_S)}{\|g_S\|_\pi^2} = \frac{Q(S, S^\mathsf{c})}{\pi(S)\pi(S^\mathsf{c})}\,.\end{aligned}$$

Aus $\pi(S) \le 1/2$ folgt $\pi(S^\mathsf{c}) \ge 1/2$, deshalb

$$\gamma \le \frac{2Q(S, S^\mathsf{c})}{\pi(S)} = 2\phi(S)\,.$$

Da dies für alle $S \subset \Omega$ mit $0 < \pi(S) \le 1/2$ gilt, ist auch

$$\gamma \le 2\phi_\star\,.$$

□

Vor dem Beweis der unteren Schranke brauchen wir das folgende Lemma:

Lemma 4.3. Sei ψ eine nichtnegative Funktion auf Ω. Ordne Ω so, dass ψ monoton fällt. Wenn $\pi\{\psi > 0\} \le 1/2$, dann gilt

$$E_\pi(\psi) \le \phi_\star^{-1} \sum_{\substack{x,y \in \Omega \\ x<y}} (\psi(x) - \psi(y))Q(x, y)\,.$$

Beweis. Seit $t > 0$ beliebig. Definiere $S \coloneqq \{\, x \in \Omega \mid \psi(x) > t \,\}$.
Es ist $\pi(S) \le \pi\{\psi > 0\} \le 1/2$. Falls $\pi(S) > 0$, so gilt

$$\phi_\star \le \frac{Q(S, S^\mathsf{c})}{\pi(S)} = \frac{\sum_{x,y\in\Omega} Q(x, y)\mathbb{1}_{\{\psi(x)>t\ge\psi(y)\}}}{\pi\{\psi > t\}}$$

Nach Wahl der Ordnung ist $\psi(x) > \psi(y)$ nur wenn $x < y$, deshalb

$$\pi\{\psi > t\} \le \phi_\star^{-1} \sum_{x<y} Q(x, y)\mathbb{1}_{\{\psi(x)>t\ge\psi(y)\}}\,. \tag{7}$$

Da die rechte Seite nichtnegativ ist, gilt diese Ungleichung auch für $\pi(S) = 0$. Es gilt

$$E_\pi(\psi) = \int_0^\infty \pi\{\psi > t\}\,\mathrm{d}t$$

und

$$\psi(x) - \psi(y) = \int_0^\infty \mathbb{1}_{\{\psi(x)>t\ge\psi(y)\}}\,\mathrm{d}t\,,$$

also gibt integrieren von Gleichung (7) über t

$$E_\pi(\psi) \le \phi_\star^{-1} \sum_{x<y} (\psi(x) - \psi(y))Q(x, y)\,.$$

□

Beweis der unteren Schranke in Satz 4.1. Sei f_2 eine Eigenfunktion zum Eigenwert λ_2. Ohne Einschränkung sei $\pi\{f_2 > 0\} \leq 1/2$ (sonst wechsle auf $-f_2$).
Definiere $f := \max\{f_2, 0\}$. Nach Bemerkung 2.5 ist $f_2 \perp_\pi \mathbf{1}$, was nur möglich ist, wenn f_2 sowohl positive als auch negative Einträge hat. f ist deswegen nicht die Nullfunktion.

Beh.: Für alle $x \in \Omega$ gilt $((I-P)f)(x) \leq \gamma f(x)$.
Beweis. Sei $x \in \Omega$ beliebig. Falls $f(x) = 0$, so gilt aufgrund der Nichtnegativität von f

$$((I-P)f)(x) = 0 - \sum_{y \in \Omega} P(x,y) f(y) \leq 0 = \gamma f(x)\,.$$

Falls $f(x) > 0$, so gilt wegen $f \geq f_2$

$$\begin{aligned}((I-P)f)(x) &= f_2(x) - \sum_{y \in \Omega} P(x,y) f(x) \\ &\leq f_2(x) - \sum_{y \in \Omega} P(x,y) f_2(x) = (1-\lambda_2) f_2(x) = \gamma f(x)\end{aligned}$$

$\lozenge$

Mit Lemma 3.2 und weil f nichtnegativ ist, folgt

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(f) = \langle (I-P)f, f\rangle_\pi &= \sum_{x \in \Omega} ((I-P)f)(x) f(x) \pi(x) \\ &\leq \sum_{x \in \Omega} \gamma f(x)^2 \pi(x) = \gamma \langle f, f\rangle_\pi\,.\end{aligned}$$

Wie oben bemerkt ist f nicht konstant Null, wir können also umstellen zu

$$\gamma \geq \frac{\mathcal{E}(f)}{\langle f, f\rangle_\pi} =: R\,. \tag{8}$$

Wir wollen Lemma 4.3 für $\psi = f^2$ anwenden. Dies ist möglich, denn $\pi\{f^2 > 0\} = \pi\{f_2^2 > 0\} \leq 1/2$. Nach entsprechender Wahl der Ordnung auf Ω haben wir

$$\langle f, f\rangle_\pi^2 = E_\pi(f^2)^2 \leq \phi_\star^{-2} \left[\sum_{x<y} (f(x)^2 - f(y)^2) Q(x,y)\right]^2$$

Mit der Cauchy–Schwarz-Ungleichung bekommt man

$$\langle f, f\rangle_\pi^2 \leq \phi_\star^{-2} \left[\sum_{x<y} (f(x) - f(y))^2 Q(x,y)\right] \left[\sum_{x<y} (f(x) + f(y))^2 Q(x,y)\right]\,. \tag{9}$$

Es gilt

$$(f(x) + f(y))^2 = 2f(x)^2 + 2f(y)^2 - (f(x) - f(y))^2$$

und der rechte Faktor in Gleichung (9) lautet

$$\sum_{x<y}(f(x)-f(y))^2Q(x,y) = 2\sum_{x<y}(f(x)^2+f(y)^2)Q(x,y) \tag{10}$$

$$+\sum_{x<y}(f(x)-f(y))^2Q(x,y)\,. \tag{11}$$

Wegen Reversibilität ist $Q(x,y) = Q(y,x)$ und es gilt für den ersten Term (10) die Abschätzung

$$\begin{aligned}\sum_{x<y}(f(x)^2+f(y)^2)Q(x,y) &= \sum_{x\in\Omega} f(x)^2\pi(x)\sum_{\substack{y\in\Omega\\ x<y}} P(x,y) + \sum_{y\in\Omega} f(y)^2\pi(y)\sum_{\substack{x\in\Omega\\ x<y}} P(y,x)\\ &= \sum_{x\in\Omega} f(x)^2\pi(x)(1-P(x,x)) \le \langle f,f\rangle_\pi\,.\end{aligned}$$

Im ersten Faktor von Gleichung (9) wie auch im zweiten Term aus Gleichung (11) fallen Summanden mit $x=y$ weg, deswegen finden wir die Dirichletform wieder:

$$\begin{aligned}\sum_{x<y}(f(x)-f(y))^2Q(x,y) &= \frac{1}{2}\left(\sum_{x<y}(f(x)-f(y))^2Q(x,y)+\sum_{y<x}(f(x)-f(y))^2Q(x,y)\right)\\ &= \frac{1}{2}\sum_{x.y\in\Omega}(f(x)-f(y))^2Q(x,y)\\ &= \mathcal{E}(f)\,.\end{aligned}$$

Insgesamt ist Gleichung (9) äquivalent zu

$$\langle f,f\rangle_\pi^2 \le \phi_\star^{-2}\cdot\mathcal{E}(f)\cdot\left(2\langle f,f\rangle_\pi-\mathcal{E}(f)\right)\,.$$

Teile durch $\langle f,f\rangle_\pi^2$ und stelle um zu

$$\phi_\star^2 \le R(2-R)\,,$$

d.h.

$$1-\phi_\star^2 \ge 1-2R+R^2 = (1-R)^2 \ge (1-\gamma)^2\,,$$

wobei im letzten Schritt auf Gleichung (8) zurückgegriffen wurde. Schließlich gilt

$$\left(1-\frac{\phi_\star^2}{2}\right)^2 = 1-\phi_\star^2+\frac{\phi_\star^4}{4} \ge 1-\phi_\star^2 \ge (1-\gamma)^2\,,$$

und die untere Schranke $\phi_\star^2/2 \le \gamma$ ist bewiesen. □

Literatur

[LPW08] David A. Levin, Yuval Peres und Elizabeth L. Wilmer. *Markov Chains and Mixing Times*. American Mathematical Society, 2008. URL: `http://pages.uoregon.edu/dlevin/MARKOV/`.