



Schriftliche Ausarbeitung zum Seminarvortrag:

## **Einführung in die Perfekte Simulation**

### **Propp-Wilson-Algorithmus**

**Lisa Brust**

Matrikelnummer: 330793

Master Mathematik

30. Juni 2016

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Motivation</b>	<b>1</b>
1.1	Perfekte Simulation . . . . .	1
<b>2</b>	<b>Propp-Wilson-Algorithmus</b>	<b>2</b>
2.1	Funktionsweise des Propp-Wilson-Algorithmus . . . . .	2
2.2	Nähere Betrachtung des Propp-Wilson-Algorithmus . . . . .	3
2.3	Coupling To The Future . . . . .	4
2.4	Frisches Ziehen . . . . .	5
2.5	Einfluss der Übergangsfunktion . . . . .	6
<b>3</b>	<b>Korrektheit des Propp-Wilson-Algorithmus</b>	<b>6</b>
3.1	0-1-Gesetz für Termination . . . . .	7
3.2	Theorem zur korrekten Verteilung der Ausgabe des Algorithmus	9
<b>4</b>	<b>Quellen</b>	<b>11</b>

# 1 Motivation

## 1.1 Perfekte Simulation

In dieser Ausarbeitung beschäftigen wir uns mit dem Problem, auf effiziente Weise aus einer gegebenen Menge  $S$  eine Stichprobe mit einer gegebener Verteilung  $\pi$  zu ziehen. Dafür wollen wir die Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\pi$  auf der endlichen Menge  $S$  mithilfe eines stochastischen Algorithmus simulieren. Die Grundlage dieses Verfahrens basiert auf einer Markovkette  $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ , die nur Werte aus der betrachteten Menge annimmt und eine irreduzible und aperiodische Übergangsmatrix besitzt. Die invariante Verteilung der Markovkette ist gerade die zu simulierende Verteilung  $\pi$ .

Bei der Perfekten Simulation soll die Verteilung  $\pi$  exakt erreicht werden, weswegen man auch von einer exakten Stichprobe spricht, und nicht nur approximativ, wie zum Beispiel bei der Klassischen Markovketten-Monte-Carlo-Methode. Bei dieser Methode betrachten wir ebenso eine irreduzible und aperiodische Markovkette, deren invariante Verteilung  $\pi$  ist. Die Markovkette ist gemäß  $\mu^{(n)}, n \in \mathbb{N}$ , verteilt und es gilt:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mu^{(n)} = \pi$$

Dann bleibt eine Abweichung zwischen der erhaltenen Verteilung  $\mu^{(n)}$  und der gewünschten Verteilung  $\pi$ , wodurch die optimale Wahl des Abbruchkriteriums schwierig wird. Einerseits muss  $n \in \mathbb{N}$  so groß gewählt werden, dass der Approximationsfehler gering ist und andererseits so klein, dass der Aufwand für den praktischen Gebrauch nicht zu groß wird.

Das Verfahren der Perfekten Simulation unterscheidet sich im Allgemeinen zu der vorangegangenen Methode darin, dass es ein klares Abbruchkriterium besitzt. Auf diesen Aspekt werden wir im Folgenden näher eingehen. Im nächsten Kapitel werden wir den Propp-Wilson-Algorithmus, den Prototyp eines Algorithmus zur Perfekten Simulation, kennenlernen.

## 2 Propp-Wilson-Algorithmus

### 2.1 Funktionsweise des Propp-Wilson-Algorithmus

Wir brauchen für den Propp-Wilson-Algorithmus, wie bereits angemerkt, eine irreduzible und aperiodische Markovkette  $(X_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$  über einer  $k$ -elementigen Zustandsmenge  $S$ , deren invariante Verteilung  $\pi$  ist. Die Markovkette wird mit der folgenden Übergangsregel gebildet:

$$X_{n+1} = \phi(X_n, U_n) \quad , n \in \mathbb{N}_0$$

Dabei ist  $(U_n)_{n \in \mathbb{N}}$  eine Folge von unabhängigen auf  $[0, 1]$  gleichförmig verteilten Zufallsvariablen und  $\phi : S \times [0, 1] \rightarrow S$  eine Übergangsfunktion, deren Treppenfunktionen  $\phi(s, \cdot)$  nur nichttriviale Stufen haben. Des weiteren benötigen wir eine streng wachsende Folge  $(T_1, T_2, T_3, \dots)$  von natürlichen Zahlen. Dann lautet der Propp-Wilson-Algorithmus wie folgt:

1. Setze  $m = 1$ .
2. Simuliere für alle  $s \in S$  eine Markovkette mit Startzustand  $s$ . Diese Markovkette beginnt zum Zeitpunkt  $-T_m$  und läuft bis zum Zeitpunkt 0 unter Verwendung der Übergangsfunktion  $\phi$  mit Eingaben  $U_{-T_m+1}, U_{-T_m+2}, \dots, U_{-1}$ .
3.
  - Falls alle  $k$  Markovketten aus Schritt 2 im gleichen Zustand  $s'$  enden, gebe  $s'$  aus und stoppe den Algorithmus.
  - Fall nicht: Erhöhe  $m$  um 1 und gehe zu Schritt 2.

## 2.2 Nähere Betrachtung des Propp-Wilson-Algorithmus

Sei  $(X_n^{(s)})_{n \in -\mathbb{N}_0}$  eine  $S$ -wertige, irreduzible und aperiodische Markovkette. Der Propp-Wilson-Algorithmus bestimmt ein Verfahren, um die invariante Verteilung  $\pi$  der Markovkette zu erreichen.

Das Konvergenzkriterium liefert, dass eine aperiodische und irreduzible Markovkette nach unendlich vielen Schritten die invariante Verteilung erreicht. Würden wir also eine Markovkette zum Zeitpunkt  $-\infty$  starten und bis zum Zeitpunkt 0 laufen lassen, so würde sie die invariante Verteilung erreichen. Da dies jedoch nicht implementierbar ist, betrachten wir im Propp-Wilson-Algorithmus zuerst eine negative Zeit  $-T_1 \in -\mathbb{N}$  und konstruieren für jeden Zustand  $s$  aus unserer Zustandsmenge  $S$  eine Markovkette, die im Zustand  $s$  zum Zeitpunkt  $-T_1$  startet und bis zum Zeitpunkt 0 läuft, d.h. wir betrachten  $(X_n^{(s)})_{n=-T_1, \dots, 0}$  mit  $X_{-T_1}^{(s)} = s$  und

$$X_{n+1}^{(s)} = \phi(X_n^{(s)}, U_n), \quad -T_1 \leq n < 0.$$

Die folgende Argumentation ist eine Heuristik: Wir nehmen an, dass zum Zeitpunkt 0 alle Markovketten im gleichen Zustand  $s'$  sind. Wir betrachten zudem eine zum Zeitpunkt  $-\infty$  gestartete Markovkette  $(X_n)_{n \in -\mathbb{N}_0}$ , deren Übergangsentscheidungen auf den im Algorithmus gewählten  $U_{-T_1}, \dots, U_{-1}$  basieren. Dann verläuft die Kette  $(X_n)_{n \in -\mathbb{N}_0}$  in ihren letzten  $T_1$  Schritten exakt in den Fußstapfen irgendeiner der Kette  $(X_n^{(s)})_{n=-T_1, \dots, 0}$  und ist damit zum Zeitpunkt 0 ebenso im Zustand  $s'$ . Da die Markovkette  $(X_n)_{n \in -\mathbb{N}_0}$  schon unendlich lange läuft, können wir folgern, dass dieser Zustand die perfekte Verteilung  $\pi$  hat.

Nehmen wir nun an, dass zum Zeitpunkt 0 nicht alle Markovketten im gleichen Zustand sind. Dann lassen wir zum negativen Zeitpunkt  $-T_2$  für jeden Zustand  $s \in S$  eine Markovkette starten und konstruieren sie mit den Realisationen  $U_{-T_2}, \dots, U_{-T_1-1}$  bis zum Zeitpunkt  $-T_1$ . Wir verbinden die Ketten, deren Endzustand dem Startzustand der in  $-T_1$  gestarteten Ketten entspre-

chen und erhalten Ketten der Länge  $T_2$ .

Sollten nun immer noch nicht alle Ketten zum Zeitpunkt 0 im gleichen Zustand sein, betrachten wir den Zeitpunkt  $-T_3$  und konstruieren weitere Ketten. Befinden sich unsere Ketten jedoch im gleichen Zustand, dann ist dieser Zustand eine Stichprobe mit Verteilung  $\pi$ .

Es ist notwendig, dass alle Markovketten mit denselben Realisationen  $(U_n)_{n=-T_1, \dots, -1}$  gebildet werden, da nur dann die Familie dieser Kette die sogenannte Verschmelzungseigenschaft hat. Zwei Markovketten verschmelzen, wenn sie sich zum ersten Mal im gleichen Zustand befinden, da sie ab diesem Zeitpunkt den gleichen Weg zurücklegen werden. Dies begründet sich in derselben Übergangsfunktion und denselben verwendeten Realisationen. Der Verschmelzungszustand ist erreicht, wenn alle Markovketten verschmolzen sind.

Da der Algorithmus den Zustandswechsel der Markovketten in die Vergangenheit verfolgt, wird er auch „Coupling From The Past“ genannt.

### 2.3 Coupling To The Future

Wir fragen uns nun, ob der Verschmelzungszustand ebenso die invariante Verteilung hat, wenn wir die Markovketten zum Zeitpunkt 0 starten und so lange laufen lassen, bis sie verschmolzen sind.

Das folgende Gegenbeispiel zeigt uns, dass dies nicht der Fall ist. Wir betrachten:

$$S = \{1, 2\} \quad P = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \pi = \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}\right)$$

Wir nehmen an, dass die Ketten, die wir in 1 und 2 starten, im Zeitpunkt  $N \in \mathbb{N}$  verschmelzen. Dann wissen wir, dass zum Zeitpunkt  $N - 1$  eine Kette

im Zustand 1 und eine im Zustand 2 sein muss. Da wir aber mit Wahrscheinlichkeit 1 vom Zustand 2 in den Zustand 1 übergehen, konzentriert sich die Verteilung zum Verschmelzungszeitpunkt in 1 und dies entspricht nicht der invarianten Verteilung.

## 2.4 Frisches Ziehen

In diesem Abschnitt wollen wir untersuchen, warum wir dieselben Realisationen  $U_{-T_k}, \dots, U_{-1}$  verwenden müssen. Wir betrachten wieder das Beispiel:

$$S = \{1, 2\} \quad P = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \pi = \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}\right)$$

Sei  $Y$  der Verschmelzungszustand und sei  $K \in \mathbb{N}$  so gewählt, dass die Markovketten, die wir zum Zeitpunkt  $-T_K$  starten, zum Zeitpunkt 0 verschmolzen sind. Die Zeitpunkte wählen wir gemäß  $T_m = 2^{m-1}$ ,  $m = 0, 1, 2, \dots$ . Es folgt:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(Y = 1) &= \sum_{k=1}^{\infty} \mathbb{P}(K = k, Y = 1) \geq \mathbb{P}(K = 1, Y = 1) + \mathbb{P}(K = 2, Y = 1) \\ &= \mathbb{P}(K = 1)\mathbb{P}(Y = 1|K = 1) + \mathbb{P}(K = 2)\mathbb{P}(Y = 1|K = 2) \\ &= \frac{1}{2} \times 1 + \frac{3}{8} \times \frac{2}{3} = \frac{3}{4} > \frac{2}{3} = \pi(1) \end{aligned}$$

Mit

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(K = 2) &= \mathbb{P}(\text{Markovketten mit Startzeitpunkt } -2 \text{ verschmelzen und Markovketten mit Startzeitpunkt } -1 \text{ verschmelzen nicht}) \\ &= \mathbb{P}(\text{Markovketten mit Startzeitpunkt } -2 \text{ verschmelzen}) \times \\ &\mathbb{P}(\text{Markovketten mit Startzeitpunkt } -1 \text{ verschmelzen nicht}) = \frac{3}{4} \times \frac{1}{2} = \frac{3}{8} \end{aligned}$$

Der Verschmelzungszustand  $Y$  hat also nicht die gewünschte Verteilung. Demnach würden wir ein verzerrtes Stichprobenergebnis erhalten.

## 2.5 Einfluss der Übergangsfunktion

Wir betrachten erneut das Beispiel:

$$S = \{1, 2\} \quad \pi = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \quad P = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

Wählen wir die Übergangsfunktion wie folgt:

$$\phi(s, u) = \begin{cases} 1 & \text{falls } u \in [0, \frac{1}{2}] \\ 2 & \text{falls } u \in (\frac{1}{2}, 1] \end{cases} \quad (1)$$

So sehen wir, dass die Ketten im ersten Durchlauf miteinander verschmelzen. Wählen wir diese Übergangsfunktion:

$$\phi(1, u) = \begin{cases} 1 & \text{falls } u \in [0, \frac{1}{2}] \\ 2 & \text{falls } u \in (\frac{1}{2}, 1] \end{cases}$$
$$\phi(2, u) = \begin{cases} 2 & \text{falls } u \in [0, \frac{1}{2}] \\ 1 & \text{falls } u \in (\frac{1}{2}, 1] \end{cases} \quad (2)$$

Dann sehen wir, dass die Ketten nie miteinander verschmelzen.

Die Terminierung ist demnach von der Wahl der Übergangsfunktion  $\phi$  abhängig.

## 3 Korrektheit des Propp-Wilson-Algorithmus

Wir werden in diesem Kapitel auf die Korrektheit des Propp-Wilson-Algorithmus eingehen. Im ersten Teil werden wir beweisen, dass der Algorithmus in endlicher Zeit terminiert. Im zweiten Teil werden wir zeigen, dass die Aus-



gabe zum Zeitpunkt der Terminierung die korrekte Verteilung, sprich die invariante Verteilung, hat.

### 3.1 0-1-Gesetz für Termination

Die Wahrscheinlichkeit, dass der Propp-Wilson-Algorithmus terminiert, ist entweder 0 oder 1.

Um dies zu beweisen betrachten wir zunächst die iterative Anwendung der Übergangsregel, die uns die Position der Markovkette  $X^{(s)}$  zum Zeitpunkt 0 liefert.

$$X_0^{(s)} = \phi(\phi(\dots \phi(\phi(s, U_{-T_1}), U_{-T_1+1}) \dots, U_{-2}), U_{-1}).$$

Wir führen folgende Notation ein:

$$\phi^{(N)}(s, (u)_{-N}^{-1}) = \phi(\phi(\dots \phi(\phi(s, u_{-N}), u_{-N+1}) \dots, u_{-2}), u_{-1})$$

$N \in \mathbb{N}, u_{-N}, \dots, u_{-1} \in [0, 1]$ .

$\phi^{(N)}(\cdot, (u)_{-N}^{-1})$  ist also eine Abbildung  $S \rightarrow S$ .

In Abschnitt 2.1 haben wir bereits erwähnt, dass die Treppenfunktionen  $\phi(s, \cdot)$  nur nichttriviale Stufen haben. Diese Annahme werden wir im folgenden Beweis verwenden.

**Theorem 1.** *Sei  $M$  die Menge der konstanten Abbildungen  $S \rightarrow S$  und sei  $\tau := \inf\{n \in \mathbb{N} : \phi^{(n)}(\cdot, (u)_{-n}^{-1}) \in M\}$  der Verschmelzungszeitpunkt. Existiert ein  $N^* \in \mathbb{N}$ , existiert ein  $s' \in S$  und existieren  $u_{-N^*}, \dots, u_{-1} \in [0, 1]$ , so dass*

$$\phi^{(N^*)}(s, (u)_{-N^*}^{-1}) = s' \quad \forall s \in S$$

Dann gilt  $\mathbb{P}(\tau < \infty) = 1$  und  $\mathbb{E}[\tau] < \infty$ .

Existieren diese Voraussetzungen nicht, dann ist  $\mathbb{P}(\tau < \infty) = 0$ .

*Beweis.* Sei

$$\Phi_1 = (\phi^{(N^*)}(s, (U)_{-N^*}^{-1}))_{s \in S} \in S^S$$

die Position aller Ketten  $X^{(s)}$  zum Zeitpunkt 0, wenn der Algorithmus zum Zeitpunkt  $-N^*$  gestartet wird. Aus der Voraussetzung und der Annahme, dass die Treppenfunktionen  $\phi(s, \cdot)$  nur nichttriviale Stufen haben, folgt, dass ein  $\epsilon > 0$  existiert, so dass

$$\mathbb{P}(\Phi_1 \in M) > \epsilon.$$

Daraus folgt, dass  $\mathbb{P}(\tau > N^*) = 1 - \mathbb{P}(\tau \leq N^*) \leq 1 - \epsilon$ .

Seien nun  $\Phi_z = (\phi^{(N^*)}(s, (U)_{-zN^*}^{-(z-1)N^*-1}))_{s \in S} \in S^S$ ,  $z \in \mathbb{N}$ , unabhängige Kopien von  $\Phi_1$  und sei  $Z^* = \inf\{z \in \mathbb{N} : \Phi_z \in M\}$  das kleinste  $z \in \mathbb{N}$ , so dass  $\Phi_z$  die Verschmelzung erreicht. Dann gilt:

$$\mathbb{P}(Z^* > k)$$

$$= \mathbb{P}(\text{Es findet mind. } k\text{-mal keine Verschmelzung statt})$$

$$\stackrel{\text{Unabh.}}{\leq} \mathbb{P}(\text{Es findet keine Verschmelzung statt})^k = (1 - \epsilon)^k$$

Folglich ist  $Z^*$  nach oben beschränkt durch eine Zufallsgröße  $Y$ , die zum Parameter  $\epsilon$  geometrisch verteilt ist, d.h.  $\mathbb{P}(Y > k) = (1 - \epsilon)^k$ .

Da wir wissen, dass eine geometrisch verteilte Zufallsgröße einen endlichen Erwartungswert hat, besitzt auch  $Z^*$  einen endlichen Erwartungswert.

Wir setzen die ersten  $Z^*$  Ketten ineinander ein und erhalten:

$$\Phi_1 \circ \Phi_2 \circ \dots \circ \Phi_{Z^*} = (\phi^{(Z^*N^*)}(s, (U)_{-Z^*N^*}^{-1}))_{s \in S}$$

Die Abbildung liegt in  $M$  und somit haben wir eine Verschmelzung vorliegen.

Folglich ist  $\tau \leq N^*Z^*$  und

$$\mathbb{E}[\tau] \leq \mathbb{E}[N^*Z^*] \leq N^*\mathbb{E}[Z^*] < \infty$$

Wir wählen  $m$  so, dass  $-T_m \leq -Z^*N^*$ , dann erhalten wir, dass der Propp-Wilson-Algorithmus nach dem  $m$ -ten Schritt terminiert und somit folgt

$$\mathbb{P}(\tau < \infty) = 1.$$

□

### 3.2 Theorem zur korrekten Verteilung der Ausgabe des Algorithmus

**Theorem 2.** *Es sei  $T_k = 2^{k-1}$  für  $k \in \mathbb{N}$  gewählt, und es sei vorausgesetzt, dass der Propp-Wilson-Algorithmus terminiert.*

*Sei  $Y$  der Verschmelzungszustand der Ketten. Dann gilt*

$$\mathbb{P}(Y = s) = \pi(s) \quad \forall s \in S$$

*Beweis.* Sei  $A_k$  das Ereignis, dass der Algorithmus mindestens bis zur Vergangenheit  $-T_k$  zurückgehen muss, um die Verschmelzung aller zum Zeitpunkt  $-T_k$  gestarteten Ketten zum Zeitpunkt 0 zu erreichen.

Dann gilt:  $A_k \subseteq A_{k+1} \subseteq A_{k+2} \subseteq \dots \xrightarrow{\text{Annahme}} \lim_{k \rightarrow \infty} \mathbb{P}(A_k) = \mathbb{P}\left(\bigcup_{k \in \mathbb{N}} A_k\right) = 1$

Sei  $\epsilon > 0 \Rightarrow \exists k \in \mathbb{N} : \mathbb{P}(A_k) \geq 1 - \epsilon$

Sei  $(Y_n)_{n=-T_k, \dots, 0}$  eine „perfekte“ Markovkette mit invarianter Startverteilung  $\pi$ . Dann hat  $Y_n$  zu jedem Zeitpunkt die Verteilung  $\pi$  exakt. Wir nehmen an, dass die Markovkette die Übergangsregel mit denselben Realisationen  $U_{-T_k}, \dots, U_{-1}$  benutzt, die auch die Ketten des Algorithmus benutzen. Die resultierende Verschmelzungseigenschaft liefert uns, dass  $Y = Y(0)$  auf dem Ereignis  $A_k$  ist.

$$\Rightarrow \mathbb{P}(Y = Y(0)) \geq 1 - \epsilon$$

$$\Rightarrow \mathbb{P}(Y \neq Y(0)) \leq \epsilon$$

Wählen wir ein beliebiges, aber festes  $s \in S$ :

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(Y = s) - \pi(s) &= \mathbb{P}(Y = s) - \mathbb{P}(Y(0) = s) \\ &= \mathbb{P}(Y = s, Y(0) = s) + \mathbb{P}(Y = s, Y(0) \neq s) \\ &\quad - \mathbb{P}(Y = s, Y(0) = s) - \mathbb{P}(Y \neq s, Y(0) = s) \\ &\leq \mathbb{P}(Y = s, Y(0) \neq s) \leq \mathbb{P}(Y \neq Y(0)) \\ &\leq \epsilon\end{aligned}$$

und analog:

$$\begin{aligned}\pi(s) - \mathbb{P}(Y = s) &= \mathbb{P}(Y(0) = s) - \mathbb{P}(Y = s) \\ &\leq \mathbb{P}(Y(0) = s, Y \neq s) \\ &\leq \mathbb{P}(Y \neq Y(0)) \\ &\leq \epsilon\end{aligned}$$

Somit erhalten wir  $|\mathbb{P}(Y = s) - \pi(s)| \leq \epsilon \quad \forall s \in S$ . Da  $\epsilon$  beliebig war, folgt die Behauptung.

□

## 4 Quellen

- Wolfgang König. Vorlesungsskript: *Stochastische Algorithmen*. Universität zu Köln. SS 2003
- Michael Scheutzow. Vorlesungsskript: *Stochastische Modelle*. Technische Universität Berlin. WS 2015/16
- Markus Gerstel. Proseminar: Markovketten in der Algorithmik. *Exact Sampling: Der Propp-Wilson-Algorithmus*. Technische Universität München