

Eine Markov-Kette mit absorbierenden Zuständen

Die Abbildung zeigt die Kette aus dem „gamblers ruin problem“ für $m = 2$. Man sieht sofort, dass hier sowohl $\pi_1 = (1, 0, 0)$ als auch $\pi_2 = (0, 0, 1)$ stationäre Verteilungen sind. Die beiden Zustände 0 und 2 haben jeweils keine ausgehenden Kanten. Solche Zustände heißen **absorbierend**.

Definition 133

Wir bezeichnen einen Zustand i als **absorbierend**, wenn aus ihm keine Übergänge herausführen, d.h. $p_{ij} = 0$ für alle $j \neq i$ und folglich $p_{ii} = 1$.

Ein Zustand i heißt **transient**, wenn $f_i < 1$, d.h. mit positiver Wahrscheinlichkeit $1 - f_i > 0$ kehrt der Prozess nach einem Besuch von i nie mehr dorthin zurück.

Ein Zustand i mit $f_i = 1$ heißt **rekurrent**.

Definition 134

Eine Markov-Kette heißt **irreduzibel**, wenn es für alle Zustandspaare $i, j \in S$ eine Zahl $n \in \mathbb{N}$ gibt, so dass $p_{ij}^{(n)} > 0$.

Die Definition besagt anschaulich, dass jeder Zustand von jedem anderen Zustand aus mit positiver Wahrscheinlichkeit erreicht werden kann, wenn man nur genügend viele Schritte durchführt. Dies ist bei endlichen Markov-Ketten genau dann der Fall, wenn der gerichtete Graph des Übergangsdiagramms stark zusammenhängend ist.

Lemma 135

Für irreduzible endliche Markov-Ketten gilt: $f_{ij} = \Pr[T_{ij} < \infty] = 1$ für alle Zustände $i, j \in S$. Zusätzlich gilt auch, dass die Erwartungswerte $h_{ij} = \mathbb{E}[T_{ij}]$ alle existieren.

Beweis:

Wir betrachten zunächst den Beweis für die Existenz von h_{ij} .

Für jeden Zustand k gibt es nach Definition der Irreduzibilität ein n_k , so dass $p_{kj}^{(n_k)} > 0$. Wir halten n_k fest und setzen $n := \max_k n_k$ und $p := \min_k p_{kj}^{(n_k)}$.

Von einem beliebigen Zustand aus gelangen wir nach höchstens n Schritten mit Wahrscheinlichkeit mindestens p nach j . Wir unterteilen die Zeit in Phasen zu n Schritten und nennen eine Phase erfolgreich, wenn während dieser Phase ein Besuch bei j stattgefunden hat. Die Anzahl von Phasen bis zur ersten erfolgreichen Phase können wir durch eine geometrische Verteilung mit Parameter p abschätzen. Die erwartete Anzahl von Phasen ist somit höchstens $1/p$, und wir schließen $h_{ij} \leq (1/p)n$. Daraus folgt sofort, dass auch $f_{ij} = \Pr[T_{ij} < \infty] = 1$. \square

Satz 136

Eine irreduzible endliche Markov-Kette besitzt eine eindeutige stationäre Verteilung π , und es gilt $\pi_j = 1/h_{jj}$ für alle $j \in S$.

Beweis:

Wir zeigen zunächst, dass es einen Vektor $\pi \neq 0$ mit $\pi = \pi P$ gibt. Sei $e := (1, \dots, 1)^T$ der All-1-Vektor und I die Einheitsmatrix. Für jede Übergangsmatrix P gilt $P \cdot e = e$, da sich die Einträge der Zeilen von P zu Eins addieren. Daraus folgt $0 = Pe - e = (P - I)e$, und die Matrix $P - I$ ist somit singulär. Damit ist auch die transponierte Matrix $(P - I)^T = P^T - I$ singulär. Es gibt also einen (Spalten-)Vektor $\pi \neq 0$ mit $(P^T - I) \cdot \pi = 0$ bzw. $\pi^T P = \pi^T$. Wir betrachten zunächst den Fall, dass $\sum_i \pi_i \neq 0$. Dann können wir o.B.d.A. annehmen, dass π normiert ist, also dass $\sum_i \pi_i = 1$ gilt.

Beweis (Forts.):

Wegen Lemma 135 existieren die Erwartungswerte h_{ij} . Für jeden Zustand $j \in S$ gelten somit nach Lemma 129 die Gleichungen

$$\pi_i h_{ij} = \pi_i \left(1 + \sum_{k \neq j} p_{ik} h_{kj} \right) \quad \text{für } i \in S, i \neq j.$$

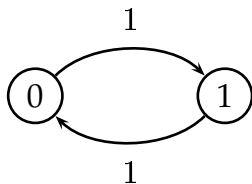
Wir addieren diese Gleichungen und erhalten wegen $\sum_i \pi_i = 1$

$$\begin{aligned} \pi_j h_j + \sum_{i \neq j} \pi_i h_{ij} &= 1 + \sum_{i \in S} \sum_{k \neq j} \pi_i p_{ik} h_{kj} \\ &= 1 + \sum_{k \neq j} h_{kj} \sum_{i \in S} \pi_i p_{ik} = 1 + \sum_{k \neq j} \pi_k h_{kj}. \end{aligned}$$

Wegen $h_j > 0$ ist auch $\pi_j = 1/h_j$ positiv, und π stellt somit einen zulässigen Zustandsvektor dar.

Für den Fall $\sum_i \pi_i = 0$ zeigt die entsprechende Rechnung wie zuvor, dass $\pi_j = 0$ für alle $j \in S$ gilt. Dies steht im Widerspruch zu $\pi \neq 0$. □

Auch wenn eine Markov-Kette irreduzibel ist und somit eine eindeutige stationäre Verteilung besitzt, so muss sie nicht zwangsläufig in diese Verteilung konvergieren.



Eine Markov-Kette mit periodischen Zuständen

Als Startverteilung nehmen wir $q_0 = (1, 0)$ an. Es gilt:

$$q_t = \begin{cases} (1, 0) & \text{falls } t \text{ gerade,} \\ (0, 1) & \text{sonst.} \end{cases}$$

Die Kette pendelt also zwischen den beiden Zustandsvektoren $(1, 0)$ und $(0, 1)$ hin und her.

Definition 137

Die **Periode** eines Zustands j ist definiert als die größte Zahl $\xi \in \mathbb{N}$, so dass gilt:

$$\{n \in \mathbb{N}_0 \mid p_{jj}^{(n)} > 0\} \subseteq \{i \cdot \xi \mid i \in \mathbb{N}_0\}$$

Ein Zustand mit Periode $\xi = 1$ heißt **aperiodisch**. Wir nennen eine Markov-Kette aperiodisch, wenn alle Zustände aperiodisch sind.

Für ein $n \in \mathbb{N}$ gilt $p_{ii}^{(n)} > 0$ genau dann, wenn es im Übergangendiagramm einen geschlossenen Weg von i nach i der Länge n gibt.

Damit folgt insbesondere:

Ein Zustand $i \in S$ einer endlichen Markov-Kette ist sicherlich dann aperiodisch, wenn er im Übergangendiagramm

- eine Schleife besitzt (also $p_{ii} > 0$) oder
- auf mindestens zwei geschlossenen Wegen W_1 und W_2 liegt, deren Längen l_1 und l_2 teilerfremd sind (für die also $\text{ggT}(l_1, l_2) = 1$ gilt).

Lemma 138

Ein Zustand $i \in S$ ist genau dann aperiodisch, falls gilt: Es gibt ein $n_0 \in \mathbb{N}$, so dass $p_{ii}^{(n)} > 0$ für alle $n \in \mathbb{N}$, $n \geq n_0$.

Beweis:

Da je zwei aufeinanderfolgende natürliche Zahlen teilerfremd sind, folgt aus der Existenz eines n_0 mit der im Lemma angegebenen Eigenschaft sofort die Aperiodizität des Zustands. Nehmen wir daher umgekehrt an, dass der Zustand i aperiodisch ist. Mit Hilfe des erweiterten euklidischen Algorithmus kann man die folgende Aussage zeigen. Für je zwei natürliche Zahlen $a, b \in \mathbb{N}$ gibt es ein $n_0 \in \mathbb{N}$, so dass gilt: Bezeichnet $d := \text{ggT}(a, b)$ den größten gemeinsamen Teiler von a und b , so gibt es für alle $n \in \mathbb{N}$, $n \geq n_0$ nichtnegative Zahlen $x, y \in \mathbb{N}_0$ mit $nd = xa + yb$.

Beweis (Forts.):

Wegen $p_{ii}^{(xa+yb)} \geq (p_{ii}^{(a)})^x \cdot (p_{ii}^{(b)})^y$ folgt daraus unmittelbar: Gilt für $a, b \in \mathbb{N}$, dass sowohl $p_{ii}^{(a)}$ als auch $p_{ii}^{(b)}$ positiv sind, so gilt auch $p_{ii}^{(nd)} > 0$ für alle $n \in \mathbb{N}$, $n \geq n_0$.

Aus der Aperiodizität des Zustand i folgt andererseits, dass es Werte a_0, \dots, a_k geben muss mit $p_{ii}^{(a_i)} > 0$ und der Eigenschaft, dass für $d_1 = \text{ggT}(a_0, a_1)$ und $d_i := \text{ggT}(d_{i-1}, a_i)$ für $i = 2, \dots, k$ gilt: $d_1 > d_2 > \dots > d_k = 1$.

Aus beiden Beobachtungen zusammen folgt die Behauptung. □

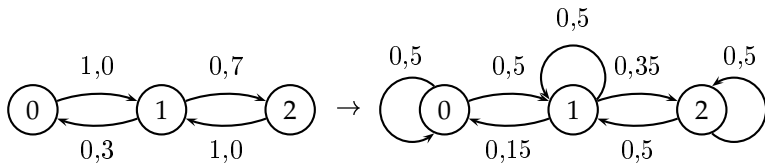
Korollar 139

Für irreduzible, aperiodische endliche Markov-Ketten gilt: Es gibt ein $t \in \mathbb{N}$, so dass unabhängig vom Startzustand $(q_t)_i > 0$ für alle $i \in S$.

Beweis:

Aus der Irreduzibilität folgt, dass die Markov-Kette jeden Zustand $i \in S$ irgendwann besuchen wird. Wegen Lemma 138 wissen wir ferner, dass die Kette hinreichend viele Schritte nach dem ersten Besuch in i in jedem folgenden Zeitschritt mit positiver Wahrscheinlichkeit zu i zurückkehren wird. Da die Kette endlich ist, gibt es daher ein n_0 , so dass die Kette sich unabhängig vom Startzustand für alle $n \geq n_0$ in jedem Zustand $i \in S$ mit positiver Wahrscheinlichkeit aufhält. □

Die **Aperiodizität** einer irreduziblen Markov-Kette kann auf einfache Weise sichergestellt werden. Man fügt an alle Zustände so genannte **Schleifen** an. Diese versieht man mit der Übergangswahrscheinlichkeit $p = 1/2$ und halbiert die Wahrscheinlichkeiten an allen übrigen Kanten.



Einführung von Schleifen

Bei irreduziblen Ketten genügt es, eine einzige Schleife einzuführen, um die Aperiodizität der Kette sicherzustellen.

Definition 140

Irreduzible, aperiodische Markov-Ketten nennt man **ergodisch**.

Satz 141 (Fundamentalsatz für ergodische Markov-Ketten)

Für jede ergodische endliche Markov-Kette $(X_t)_{t \in \mathbb{N}_0}$ gilt unabhängig vom Startzustand

$$\lim_{n \rightarrow \infty} q_n = \pi,$$

wobei π die eindeutige stationäre Verteilung der Kette bezeichnet.

Beweis:

Gemäß Satz 136 existiert eine stationäre Verteilung π . Wir zeigen, dass für beliebige Zustände i und k gilt

$$p_{ik}^{(n)} \rightarrow \pi_k \quad \text{für } n \rightarrow \infty.$$

Daraus folgt die Behauptung, da

$$(q_n)_k = \sum_{i \in S} (q_0)_i \cdot p_{ik}^{(n)} \rightarrow \pi_k \cdot \sum_{i \in S} (q_0)_i = \pi_k.$$

Beweis (Forts.):

$(Y_t)_{t \in \mathbb{N}_0}$ sei eine unabhängige Kopie der Kette $(X_t)_{t \in \mathbb{N}_0}$. Für den Prozess $Z_t := (X_t, Y_t)$ ($t \in \mathbb{N}_0$), bei dem die Ketten X_t und Y_t gewissermaßen „parallel“ betrieben werden, gilt also

$$\begin{aligned} \Pr[(X_{t+1}, Y_{t+1}) = (j_x, j_y) \mid (X_t, Y_t) = (i_x, i_y)] \\ &= \Pr[X_{t+1} = j_x \mid X_t = i_x] \cdot \Pr[Y_{t+1} = j_y \mid Y_t = i_y] \\ &= p_{i_x j_x} \cdot p_{i_y j_y}. \end{aligned}$$

$(Z_t)_{t \in \mathbb{N}_0}$ ist daher ebenfalls eine Markov-Kette. Für die Wahrscheinlichkeit, in n Schritten von (i_x, i_y) nach (j_x, j_y) zu gelangen, erhält man analog $p_{i_x j_x}^{(n)} p_{i_y j_y}^{(n)}$, was für genügend großes n gemäß Lemma 138 positiv ist. $(Z_t)_{t_0 \in \mathbb{N}}$ ist daher ebenfalls ergodisch.

Beweis (Forts.):

Wir starten nun Z_t so, dass die Ketten X_t und Y_t in verschiedenen Zuständen i_x bzw. i_y beginnen, und interessieren uns für den Zeitpunkt H , bei dem sich X_t und Y_t zum ersten Mal im gleichen Zustand befinden.

Die Menge der Zustände von Z_t ist gegeben durch $S \times S$. Wir definieren die Menge

$$M := \{(x, y) \in S \times S \mid x = y\}.$$

von Zuständen der Kette Z_t , an denen sich X_t und Y_t „treffen“. Definieren wir nun die Treffzeit H durch

$$H := \max\{T_{(i_x, i_y), (j_x, j_y)} \mid (i_x, i_y) \in S \times S, (j_x, j_y) \in M\},$$

so folgt aus Lemma 135 und der Endlichkeit der Markov-Kette sofort, dass $\Pr[H < \infty] = 1$ und $\mathbb{E}[H] < \infty$.

Beweis (Forts.):

Da die weitere Entwicklung der Ketten X_t und Y_t ab dem Zeitpunkt H nur vom Zustand $X_H = Y_H$ und der Übergangsmatrix abhängt, wird jeder Zustand $s \in S_Z$ zu den Zeiten $t \geq H$ von X_t und Y_t mit derselben Wahrscheinlichkeit angenommen. Es gilt also $\Pr[X_t = s \mid t \geq H] = \Pr[Y_t = s \mid t \geq H]$ und somit auch

$$\Pr[X_t = s, t \geq H] = \Pr[Y_t = s, t \geq H]. \quad (12)$$

Als Startzustand wählen wir für die Kette X_t den Zustand i , während Y_t in der stationären Verteilung π beginnt (und natürlich auch bleibt). Damit erhalten wir für einen beliebigen Zustand $k \in S$ und $n \geq 1$

$$\begin{aligned} |p_{ik}^{(n)} - \pi_k| &= |\Pr[X_n = k] - \Pr[Y_n = k]| \\ &= |\Pr[X_n = k, n \geq H] + \Pr[X_n = k, n < H] \\ &\quad - \Pr[Y_n = k, n \geq H] - \Pr[Y_n = k, n < H]|. \end{aligned}$$

Beweis (Forts.):

Nun können wir (12) anwenden und schließen, dass

$$|p_{ik}^{(n)} - \pi_k| = |\Pr[X_n = k, n < H] - \Pr[Y_n = k, n < H]|.$$

Zur Abschätzung dieses Ausdrucks benutzen wir die Abschätzung

$$|\Pr[A \cap B] - \Pr[A \cap C]| \leq \Pr[A].$$

für beliebige Ereignisse A , B und C (die offensichtlich ist).

Wir erhalten

$$|p_{ik}^{(n)} - \pi_k| \leq \Pr[n < H].$$

Da $\Pr[H < \infty] = 1$, gilt $\Pr[n < H] \rightarrow 0$ für $n \rightarrow \infty$, d.h. die Wahrscheinlichkeiten $p_{ik}^{(n)}$ konvergieren für $n \rightarrow \infty$ gegen π_k . □

2.6 Doppelstochastische Matrizen

Wie berechnet man die nach Satz 141 (eindeutig bestimmte) stationäre Verteilung, gegen die ergodische endliche Markov-Ketten für jede Startverteilung konvergieren?

Eine Möglichkeit besteht darin, das lineare Gleichungssystem $\pi \cdot P = \pi$ aufzustellen und zu lösen. Für größere Matrizen ist dieses Verfahren allerdings im Allgemeinen sehr aufwändig.

Wir stellen hier einen anderen Ansatz vor.

Definition 142

Eine $n \times n$ Matrix $P = (p_{ij})_{0 \leq i, j < n}$ heißt **stochastisch**, falls alle Einträge p_{ij} nichtnegativ und alle Zeilensummen gleich Eins sind:

$$\sum_{j=0}^{n-1} p_{ij} = 1 \text{ für alle } i = 0, \dots, n-1.$$

Sind zusätzlich auch alle Spaltensummen gleich 1, also

$$\sum_{i=0}^{n-1} p_{ij} = 1 \text{ für alle } j = 0, \dots, n-1,$$

so nennt man P **doppeltstochastisch**.

Die Übergangsmatrix einer Markov-Kette ist immer stochastisch, und umgekehrt.

Lemma 143

Ist P eine doppelstochastische $n \times n$ Matrix, so ist $\pi = (\frac{1}{n}, \dots, \frac{1}{n})$ ein Eigenvektor zum Eigenwert 1 bezüglich Multiplikation von links:

$$\pi = \pi \cdot P.$$

Beweis:

Für alle $0 \leq k < n$ gilt:

$$(\pi \cdot P)_k = \sum_{i=0}^{n-1} \pi_i \cdot p_{ik} = \frac{1}{n} \underbrace{\sum_{i=0}^{n-1} p_{ik}}_{=1} = \frac{1}{n} = \pi_k.$$



Zusammen mit Satz 141 erhalten wir damit sofort:

Satz 144

Für jede ergodische endliche Markov-Kette $(X_t)_{t \in \mathbb{N}_0}$ mit doppelstochastischer Übergangsmatrix gilt unabhängig vom Startzustand

$$\lim_{t \rightarrow \infty} q_t = \left(\frac{1}{n}, \dots, \frac{1}{n} \right),$$

wobei n die Kardinalität der Zustandsmenge bezeichne.

Beweis:

Klar! □

Beispiel 145

Anna und Bodo verabreden sich wieder einmal zu einer Partie Poker. Misstrauisch geworden durch ihre Verluste beim letzten Rendezvous verdächtigt Anna mittlerweile ihren Spielpartner, beim Mischen zu mogeln. Um ganz sicher zu gehen, dass die Karten zukünftig auch wirklich gut gemischt werden, schlägt sie folgendes Verfahren vor: Der Stapel mit Karten wird verdeckt hingelegt; dann werden m -mal jeweils zwei Karten daraus zufällig ausgewählt und vertauscht. Soll Bodo dieser Prozedur zustimmen?

Beispiel 145

Wir modellieren den oben skizzierten Mischvorgang durch eine Markov-Kette. Als Zustandsmenge S wählen wir alle möglichen Anordnungen der Karten. Identifizieren wir die Karten mit den Zahlen $[n] = \{1, \dots, n\}$, so besteht S aus der Menge aller Permutationen der Menge $[n]$.

Betrachten wir nun zwei verschiedene Permutationen $\sigma, \rho \in S$. Nach Definition der Markov-Kette ist die Übergangswahrscheinlichkeit $p_{\sigma, \rho}$ genau dann positiv, wenn es $i, j \in [n]$, $i \neq j$, gibt, so dass

$$\rho(k) = \begin{cases} \sigma(j) & \text{falls } k = i, \\ \sigma(i) & \text{falls } k = j, \\ \sigma(k) & \text{sonst.} \end{cases}$$

Beispiel 145

Da nach Voraussetzung i und j zufällig gewählt werden (und es genau $\binom{n}{2}$ solcher Paare i, j gibt), gilt in diesem Fall $p_{\sigma, \rho} = 1/\binom{n}{2}$.

Da man jede Vertauschung zweier Karten durch nochmaliges Vertauschen wieder rückgängig machen kann, sieht man auch sofort ein, dass $p_{\sigma, \rho} = p_{\rho, \sigma}$ gilt. Die Übergangsmatrix P ist also symmetrisch und damit insbesondere auch doppelstochastisch. Aus Satz 144 folgt somit, dass die Markov-Kette unabhängig von der Startverteilung zur Gleichverteilung konvergiert.

Der von Anna vorgeschlagene Mischvorgang ist also in der Tat sinnvoll: Für $m \rightarrow \infty$ konvergiert die Wahrscheinlichkeitsverteilung für die sich ergebende Kartenreihenfolge gegen die Gleichverteilung, die Karten sind also bestens gemischt!

Beispiel 145

Anmerkung: Man kann zeigen, dass für n Karten bereits $m = O(n \log n)$ Vertauschungen genügen, um einen gut durchmischten Kartenstapel zu erhalten.