CARL VON OSSIETZKY universität OLDENBURG
FAKULTÄT V
MATHEMATIK UND NATURWISSENSCHAFTEN

Studiengang Diplom-Mathematik

DIPLOMARBEIT

Der Diaconis-Sturmfels-Algorithmus: Bindeglied zwischen statistischer Anwendung und kommutativer Algebra

eingereicht am:	20.9.2007
von:	Stefan Dihlmann
	geboren am 29.12.1981
	in Mühlacker, Württemberg
wohnhaft in:	39606 Busch, Altmark
	Straße der Freundschaft 21
Matrikelnr:	8137500
Erstgutachter:	Prof. Dr. Christine Müller
Zweitgutachter:	Prof. Dr. Wiland Schmale

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung

Die algebraische Statistik ist eine junge Disziplin, welche sich als Brückenschlag zwischen der statistischen Anwendung und der kommutativen Algebra erweist. In der vorliegenden Diplomarbeit wird ausgehend von der Veröffentlichung [DS98] erläutert, wie ein spezieller Metropolis-Sampler verwendet werden kann um die Anpassungsgüte von Daten an ein Modell der Exponentialfamilie signifikant nachzuweisen, ohne dabei die klassische χ^2-Approximation zu verwenden. Wie bei MCMC-Methoden üblich, ist dieses Verfahren sehr rechenintensiv, was aber Dank genügend Rechenkapazität von PC´s zwischenzeitlich weniger ein Problem darstellt. Da Verteilungen der Exponentialfamilie in sehr vielen Anwendungen eine Rolle spielen, ist das Verfahren eine interessante Alternative zur klassischen Approximation, auch wenn aufgrund geringem Stichprobenumfangs die χ^2-Approximation fragwürdig ist.

Im ersten Teil der Diplomarbeit werden die Grundlagen zur Konvergenz des Metropolis Algorithmus erläutert. Bei der Erarbeitung dieses Themas erweist es sich als nützlich und elegant, zuerst Markovketten auf höchstens abzählbaren Zustandsräumen einzuführen und sich später auf den endlichen Fall zu beschränken. Um eine Markovkette zu charakterisieren werden nach den grundlegenden Eigenschaften in Kapitel 2.1 die Zustände in Kapitel 2.2 anhand der Übergangsmatrix P zuerst qualitativ bezüglich ihres Kommunikationsverhaltens untersucht. In Kapitel 2.3 werden diese bezüglich ihres Rückkehrverhaltens quantitativ einer genaueren Untersuchung unterzogen. Ein wichtiges Werkzeug in der Theorie der Markovketten ist der Begriff der Stoppzeit und die daraus resultierende Verallgemeinerung der Markoveigenschaft auf zufällige Zeitpunkte in Kapitel 2.4. Nachdem in Kapitel 2.5 die Frage beantwortet wird unter welchen Umständen eine Übergangsmatrix eine eindeutige invariante Verteilung besitzt, wird in Kapitel 2.6 belegt, dass in diesem Fall ein Markovprozess mit dieser Übergangsmatrix und einer beliebigen Anfangsverteilung tatsächlich gegen die invariante Verteilung konvergiert. Der Metropolis Algorithmus stellt die ganze Sache auf den Kopf: Die invariante Verteilung ist gegeben und man möchte ein Verfahren, welches Zufallselemente entlang dieser Verteilung generiert.

Nachdem im zweiten Teil der Arbeit algebraisch statistische Modelle eingeführt werden, wird in Kapitel 2.2 erläutert, wie die Information über den unbekannten Parameter anhand einer suffizienten Statistik modelliert werden kann. Es wird aufgezeigt, dass die Wahrscheinlichkeit von Stichproben, konditioniert nach der suffizienten Statistik, keine unbekannten Parameter mehr besitzen.

Die Eindeutigkeit der Maximum Likelihood Schätzung in torischen Modellen wird in Kapitel 3.3 gezeigt. Die Fragestellung lautet nun: Weichen die beobachteten Daten mehr oder weniger von der ML-Schätzung unter H_0 ab als jene hypothetischen, die die selbe suffiziente Statistik aufweisen. In diesem Kontext findet der eingangs illustrierte Metropolis Sampler in Kapitel 3.4 seine Anwendung bei der Approximation des p-Wertes der χ^2-Statistik. Jedoch taucht eine neue Herausforderung auf: Die Simulation dieses p-Wertes erfordert die Existenz von Markovbasen. Jene verbinden die Menge aller Elemente mit suffizienter Statistik zu einer abgeschlossenen, irreduziblen und aperiodischen Kommunikationsklasse. Zur Berechnung der Markovbasen werden Methoden aus der kommutativen Algebra in Kapitel 3.5 herangezogen; das statistische Problem wird in ein nicht minder schweres algebraisches Problem übersetzt. Jedoch ist die Theorie der Gröbnerbasen so ausgereift, dass es in den gängigen Programmpaketen wie etwa CoCoA oder Maple implementiert ist.

Die Berechnung von Markovbasen kann über den Diaconis-Sturmfels-Algorithmus getätigt werden. Dieser ist keine Neuentdeckung, sondern ein in der kommutativen Algebra als Eliminationstheorem bezeichnetes Resultat und verdient seine Beachtung dadurch, dass er in diesem Kontext das Bindeglied zwischen zwei mathematischen Disziplinen darstellt. Für Datensätze mit strukturellen Nullen oder fehlenden Einträgen finden sich in [BFH75] und [Agr07] detaillierte Modellbeschreibungen. Es wird sich zeigen, dass hierfür die Berechnung der universellen Gröbnerbasis eines bestimmten Ideals eine Methodik liefert, für solche Fälle eine Markovbasis zu generieren. Dies ermöglicht die Konstruktion einer irreduziblen Markovkette auf der Referenzmenge in Form des Metropolis Samplers. Da die Berechnungen sehr computerintensiv sein können werden noch Gradschranken angegeben. In Kapitel 2.9 wird gezeigt, wie die universelle Gröbnerbasis berechnet werden kann.

Kapitel 2

Theorie zur Konvergenz des Metropolis-Samplers

2.1 Markovketten mit höchstens abzählbarem Zustandsraum

Um Markovketten in dem klassischen Kontext der Zufallsvariablen zu beschreiben, zuerst die grundlegende Definition eines stochastischen Prozesses:

Definition 2.1.1 ***(stochastischer Prozess).*** *Sei $\mathcal{S}$ eine nichtleere, höchstens abzählbare Menge. Als ein $\mathcal{S}$-wertiger stochastischer Prozess wird ein Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ zusammen mit messbaren Zufallsvariablen $X_k : \Omega \to \mathcal{S}, k \in \mathbb{N}_0$ bezeichnet.*

Die allgemeine Definition eines stochastischen Prozesses stellt, bis auf die Messbarkeit, keine weiteren Anforderungen an die Zufallsvariablen. Eine wichtige Unterklasse dieser Prozesse sind Markovprozesse. Jene zeichnen sich dadurch aus, dass die Zufallsvariablen eine gewisse Abhängigkeitsstruktur aufweisen, in dem Sinne, dass die Information über einen Zustand nur von dem vorherigen Iterationsschritt abhängt. Für Markovprozesse ergeben sich elegante mathematische Resultate bezüglich ihrer Struktur und ihrem Langzeitverhalten. Noch anzumerken ist, dass die Indizierung mit Elementen aus $\mathbb{N}_0$ oftmals als zeitliche Entwicklung interpretiert wird.

Definition 2.1.2 ***(Markovprozess / -eigenschaft).*** *Sei $X_k : \Omega \to \mathcal{S}, k \in \mathbb{N}_0$ ein $\mathcal{S}$-wertiger stochastischer Prozess. Erfüllt dieser für alle $k \in \mathbb{N}$ und beliebige $i_0, \ldots, i_{k-1}$, $i, j \in \mathcal{S}$ im Falle der Wohldefiniertheit beider Seiten die Bedingung*

$$\mathbb{P}(X_{k+1} = j \,|\, X_0 = i_0, \ldots, X_{k-1} = i_{k-1}, X_k = i) = \mathbb{P}(X_{k+1} = j \,|\, X_k = i),$$

wird von einem Markovprozess gesprochen. Die Gleicheit beider Seiten wird als Markoveigenschaft bezeichnet. Sind in obiger Gleichung die bedingten Wahrscheinlichkeiten unabhängig von k, bezeichnet man diesen Prozess als homogen (HMP).

Bemerkung: Die Schreibweise $X_0 = i_0, \ldots, X_k = i_k$ in obiger Definition ist eine sinnvolle Abkürzung für das Ereignis $\{X_0 = i_0\} \cap \ldots \cap \{X_k = i_k\}$, welches auch als Pfad oder Trajektorie bezeichnet wird. Wie üblich steht $\{X_k = i_k\}$ für $\{\omega \in \Omega \ : \ X_k(\omega) = i_k\}$. Natürlich ist man bei einem Prozess nicht nur an den Übergangswahrscheinlichkeiten interessiert, sondern auch an den absoluten Wahrscheinlichkeiten der einzelnen Pfade.

Satz 2.1.3 ***(Wahrscheinlichkeit eines Pfades).*** *Die Zufallsvariablen $X_0, X_1, \ldots$ bilden genau dann einen Markovprozess, wenn für alle $i_0, \ldots, i_n \in \mathcal{S}$ im Falle der Wohldefiniertheit gilt:*

$$\mathbb{P}(X_0 = i_0, \ldots, X_n = i_n) = \mathbb{P}(X_0 = i_0)\mathbb{P}(X_1 = i_1 \mid X_0 = i_0) \cdots \mathbb{P}(X_n = i_n \mid X_{n-1} = i_{n-1}). \tag{2.1}$$

Der Beweis wird induktiv geführt. Aus Darstellungsgründen bezeichne $A_k := \{X_k = i_k\}$ für $0 \leq k \leq n$. Sei ein Markovprozess $X_0, X_1, \ldots$ gegeben. Für $\mathbb{P}(A_1) > 0$ ist $\mathbb{P}(A_0 \cap A_1) = \mathbb{P}(A_1)\mathbb{P}(A_0 \mid A_1)$.
Gelte die Behauptung für ein $(n-1)$ und sei $\mathbb{P}(A_0 \cap \ldots \cap A_{n-1}) > 0$, dann ist auch $\mathbb{P}(A_0 \cap \ldots \cap A_l) > 0$ für $1 \leq l \leq n-1$. Dies bedeutet, dass die auftretenden bedingten Wahrscheinlichkeiten wohldefiniert sind. Setze $B_{n-1} := A_0 \cap \ldots \cap A_{n-1}$. Nun ist unter Verwendung der Induktionsannahme

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(A_n \cap B_{n-1}) &= \mathbb{P}(B_{n-1})\mathbb{P}(A_n \mid B_{n-1}) \\ &= \mathbb{P}(A_0)\mathbb{P}(A_1 \mid A_0) \cdots \mathbb{P}(A_{n-1} \mid A_{n-2})\mathbb{P}(A_n \mid B_{n-1}).\end{aligned}$$

Wegen der Markoveigenschaft ist $\mathbb{P}(A_n \mid B_{n-1}) = \mathbb{P}(A_n \mid A_{n-1})$, es folgt Gleichung (2.1). Für die Rückrichtung gelte Gleichung (2.1) im Falle der Wohldefiniertheit. Es wird wieder induktiv verfahren. Für $n = 2$ ergibt sich die Definition der bedingten Wahrscheinlichkeit. Gelte nun Gleichung (2.1) für ein $n \in \mathbb{N}$ und geeignte Ereignisse $A_0, \ldots A_n$:

$$\mathbb{P}(B_n) = \mathbb{P}(A_0)\mathbb{P}(A_1 \mid A_0) \cdots \mathbb{P}(A_n \mid A_{n-1}).$$

Die Wohldefiniertheit von $\mathbb{P}(A_{n+1} \mid B_n)$ ist gewährleistet, wenn $\mathbb{P}(B_n) > 0$. Ist weiter $\mathbb{P}(A_{n+1} \mid A_n)$ wohldefiniert und dividiert man Gleichung (2.1) für (n+1) auf der linken Seite durch $\mathbb{P}(B_n)$ und auf der rechten durch $\mathbb{P}(A_0)\mathbb{P}(A_1 \mid A_0) \cdots \mathbb{P}(A_n \mid A_{n-1})$, ergibt dies eine wohldefinierte Gleichung und somit die gesuchte Markoveigenschaft für $(n+1)$, was den Beweis komplettiert. (vgl [Kre90] S.197)

□

Korollar 2.1.4 *Die Zufallsvariablen $X_0, X_1, \ldots$ bilden genau dann einen Markovprozess, wenn für alle Teilmengen $E \subseteq \mathcal{S}^{n+1}$ im Falle der Wohldefiniertheit gilt:*

$$\begin{aligned}&\mathbb{P}((X_0, \ldots, X_n) \in E) \\ = &\sum_{(i_0,\ldots,i_n)\in E} \mathbb{P}(X_0 = i_0)\mathbb{P}(X_1 = i_1 \mid X_0 = i_0) \cdots \mathbb{P}(X_n = i_n \mid X_{n-1} = i_{n-1}).\end{aligned}$$

Beweis: Verwende die σ-Additivität von $\mathbb{P}$.

□

Lemma 2.1.5 *Es sei B ein Ereignis. Ist C eine disjunkte Vereinigung von Ereignissen $C_1, \ldots, C_s$ mit $\mathbb{P}(B \cap C_r) > 0$ für alle $r = 1, \ldots, s$ und sind alle $\mathbb{P}(A \mid B \cap C_r)$ gleich, dann ist $\mathbb{P}(A \mid B \cap C) = \mathbb{P}(A \mid B \cap C_r)$ für beliebige r.*

Beweis: Es ist

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(A \mid B \cap C_r)\mathbb{P}(B \cap C) &= \mathbb{P}(A \mid B \cap C_r) \sum_{i=1}^{s} \mathbb{P}(B \cap C_i) \\
&= \sum_{i=1}^{s} \mathbb{P}(A \mid B \cap C_i)\mathbb{P}(B \cap C_i) \\
&= \sum_{i=1}^{s} \mathbb{P}(A \cap B \cap C_i) = \mathbb{P}(A \cap B \cap C) \\
&= \mathbb{P}(A \mid B \cap C)\mathbb{P}(B \cap C).
\end{aligned}$$

Division durch $\mathbb{P}(B \cap C)$ beendet den Beweis.[Kre90]

□

Satz 2.1.6 ***(Markoveigenschaft für Mengen).*** *Für einen Markovprozess $X_0, X_1, \ldots$ gilt für alle $0 < n < m$, $i_n \in \mathcal{S}$ sowie Teilmengen $E \subseteq \mathcal{S}^n$, $F \subseteq \mathcal{S}^{m-n}$, dass*

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}((X_{n+1}, \ldots, X_m) \in F \mid X_n = i_n,\ (X_0, \ldots, X_{n-1}) \in E) \\
&\qquad = \mathbb{P}((X_{n+1}, \ldots, X_m) \in F \mid X_n = i_n).
\end{aligned}$$

Beweis: Wegen Lemma 2.1.5 ist E ohne Einschränkung einelementig. Unter Verwendung der σ-Additivität kann weiter angenommen werden, dass F nur aus einem Element besteht. Mit Satz 2.1.3 ergibt sich für die linke Seite obiger Gleichung

$$\begin{aligned}
& \frac{\mathbb{P}(A_m \cap \ldots \cap A_0)}{\mathbb{P}(A_0 \cap \ldots \cap A_n)} \\
= \quad & \frac{\mathbb{P}(A_0)\mathbb{P}(A_1 \mid A_0) \cdots \mathbb{P}(A_n \mid A_{n-1}) \cdots \mathbb{P}(A_m \mid A_{m-1})}{\mathbb{P}(A_0)\mathbb{P}(A_1 \mid A_0) \cdots \mathbb{P}(A_n \mid A_{n-1})} \\
= \quad & \mathbb{P}(A_{n+1} \mid A_n) \cdots \mathbb{P}(A_m \mid A_{m-1}).
\end{aligned}$$

Dies ist aber aufgrund der Markoveigenschaft identisch mit

$$\mathbb{P}(A_{n+1} \mid A_n)\mathbb{P}(A_{n+2} \mid A_{n+1} \cap A_n) \cdots \mathbb{P}(A_m \mid A_{m-1} \cap \ldots \cap A_n) = \mathbb{P}(A_m \cap \ldots \cap A_{n+1} \mid A_n).$$

(Vgl. [Kön05] S.10f)

□

Eine einprägsame Version dieses Satzes kann wie folgt formuliert werden:

Korollar 2.1.7 ***(Unabhängigkeit von Vergangenheit und Zukunft bei gegebener Gegenwart).*** *Mit den Voraussetzungen des vorherigen Satzes gilt im Falle der Wohldefiniertheit:*

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}((X_0, \ldots, X_{n-1}) \in E, (X_{n+1}, \ldots, X_m) \in F \mid X_n = i_n) \\ = \ & \mathbb{P}((X_0, \ldots, X_{n-1}) \in E \mid X_n = i_n)\mathbb{P}((X_{n+1}, \ldots, X_m) \in F \mid X_n = i_n). \end{aligned}$$

Beweis: Multiplikation beider Seiten der Gleichung aus Satz 2.1.6 mit der bedingten Wahrscheinlichkeit $\mathbb{P}((X_0, \ldots, X_{n-1}) \in E \mid X_n = i_n)$ ergibt die Behauptung.

□

Wie zu sehen ist, sind die Charakterisierungen von Markovprozessen durch rechnerisch schwerfällige Schreibweisen gegeben, welche auch in der verwendeten Literatur stark variieren. Es stellt sich die Frage, ob nicht eine mehr anwendungsorientierte Darstellung für bestimmte Prozesse gefunden werden kann. Für homogene Markovprozesse wird im Folgenden aufgezeigt, wie die Übergangswahrscheinlichkeiten elegant als stochastische Matrix repräsentiert werden können. Diese Matrix trägt, wie sich herausstellen wird, einen wesentlichen Teil der Information über einen HMP.

Betrachtet wird nun die Frage, ob es zu gegebenen Zahlen $q_{i_0,\ldots,i_k}$ stets einen Wahrscheinlichkeitsraum und zugehörige Zufallsvariablen gibt, so dass

$$\mathbb{P}(X_0 = j, X_1 = i_1, \ldots, X_k = i_k) = q_{i_0,\ldots,i_k}. \tag{2.2}$$

Lemma 2.1.8 ***(Konstruktion von homogenen Markovprozessen).*** *Gelte $0 \leq q_i$, $i \in \mathcal{S}$, $\sum_{i \in \mathcal{S}} q_i = 1$ und für jede $\mathcal{S}$-wertige endliche Folge $i_0, \ldots, i_k$ sei eine nichtnegative Zahl $q_{i_0,\ldots,i_k}$ gegeben, so dass*

$$\forall i_0, \ldots, i_{k-1} : \sum_{i \in \mathcal{S}} q_{i_0,\ldots,i_{k-1},i} = q_{i_0,\ldots,i_{k-1}}.$$

Dann gibt es einen Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ und Zufallsvariablen $X_k : \Omega \to \mathcal{S}, k \in \mathbb{N}_0$, die für alle $i_0, \ldots, i_k \in \mathcal{S}$ die Gleichung (2.2) erfüllen.

Beweis: Die Grundidee ist, dass man ausgehend von der Gleichverteilung auf $\Omega := [0,1]$ zufällig Punkte generiert. Mit einer Partition von Ω in disjunkte Intervalle ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein generierter Punkt in diesem Intervall liegt gleich dem Lebesquemaß des Intervalls. Seien die $q_{i_0,\dots,i_k}$ mit den genannten Bedingungen gegeben. Partitionierung von Ω in disjunkte Intervalle I_i, $i \in \mathcal{S}$ derart, dass jedes Intervall I_i die Länge q_i besitzt, ermöglicht die Definition von $X_0 : \Omega \to \mathcal{S}$ als diejenige Abbildung, die die Punkte in I_i dem jeweiligen $i \in \mathcal{S}$ zuordnet. Nun ist $\mathbb{P}(X_0 = i) = q_i$. Im Weiteren wird nun für jedes $i \in \mathcal{S}$ das Intervall I_i in disjunkte Teilintervalle I_{ij}, $j \in \mathcal{S}$ der Längen q_{ij} aufgespalten. Setze $X_1 : \Omega \to \mathcal{S}$ als Abbildung, die dem Intervall I_{ij} den Wert j zuordnet. Somit ist $\mathbb{P}(X_0 = i, X_1 = j) = q_{ij}$. Iteration ergibt die Behauptung. ([Beh00] S.8f.)

□

Homogene Markovprozesse werden gerne in Gestalt einer Markovkette repräsentiert.

Definition 2.1.9 ***(Markovkette).*** *Eine endliche Markovkette (kurz: Kette) ist ein Tripel ($\mathcal{S}$,p,P) bestehend aus:*

- *Einer Menge $\mathcal{S}$, dem Zustandsraum.*
- *Einem Vektor $p = (p_i)_{i\in\mathcal{S}}$ mit $p(i) \geq 0$ und $\sum_{i\in\mathcal{S}} p_i = 1$, der Anfangsverteilung, welche mit Wahrscheinlichkeit p_i angibt, dass die Kette im Zustand i beginnt.*
- *Einer stochastischen Matrix $P = (p_{ij})_{i,j\in\mathcal{S}}, p_{ij} \geq 0$ f.a. $i,j \in \mathcal{S}$ und $\sum_j p_{ij} = 1$. Die Einträge p_{ij} dieser Übergangsmatrix geben die Wahrscheinlichkeit an, um vom Zustand i nach dem nächsten Iterationsschritt (Übergang) bei Zustand j anzukommen.*

Ist $\mathcal{S}$ eine abzählbar unendliche Menge, so wird der Begriff der Übergangsmatrix strapaziert, da sie ein Element aus $\mathbb{R}_{\geq 0}^{\mathbb{N}\times\mathbb{N}}$ ist. Leicht ist zu sehen, dass auch im unendlichen Fall das Produkt zweier stochastischer Matrizen $P = (p_{ij})_{i,j\in\mathcal{S}}$ und $Q = (q_{ij})_{i,j\in\mathcal{S}}$ wieder eine stochastische Matrix ist, denn für die i-te Zeilensumme von $R := PQ$ ergibt sich:

$$\sum_{j\in\mathcal{S}} r_{ij} = \sum_{j\in\mathcal{S}} \sum_{k\in\mathcal{S}} p_{ik} q_{kj} = \sum_{k\in\mathcal{S}} p_{ik} \sum_{j\in\mathcal{S}} q_{kj} = 1.$$

Satz 2.1.10 ***(Darstellungssatz).*** *Markovketten sind im Wesentlichen äquivalent zu homogenen Markovprozessen.*

Beweis: Sei eine Kette wie in Definition (2.1.9) gegeben. Setze $q_i := p_i$ und $q_{ij} := p_i p_{ij}$, beziehungsweise nach Iteration:

$$q_{i_0,\dots,i_k} := p_{i_0} p_{i_0 i_1} \cdots p_{i_{k-1} i_k}.$$

Trivialerweise ist $\sum_{i\in\mathcal{S}} q_i = 1$. Nach Voraussetzung ist $\sum_{j\in\mathcal{S}} p_{ij} = 1$ für $i \in \mathcal{S}$ und somit ist

$$\begin{aligned}\sum_{i\in\mathcal{S}} q_{i_0,\dots,i_k,i} &= \sum_{i\in\mathcal{S}} p_{i_0}p_{i_0i_1}\cdots p_{i_{k-1}i_k}p_{i_ki}\\ &= p_{i_0}p_{i_0i_1}\cdots p_{i_{k-1}i_k}\sum_{i\in\mathcal{S}} p_{i_ki}\\ &= p_{i_0}p_{i_0i_1}\cdots p_{i_{k-1}i_k}.\end{aligned}$$

Die Voraussetzungen aus Lemma 2.1.8 werden somit erfüllt und die damit erzeugten Zufallsvariablen ergeben einen HMP mit $\mathbb{P}(X_{k+1} = j \mid X_k = i) = p_{ij}$ im Falle der Wohldefiniertheit.

Sei umgekehrt ein HMP wie in Definition (2.1.2) gegeben. Um Definition (2.1.9) zu erhalten wird natürlich $p_i := \mathbb{P}(X_0 = i)$ gesetzt. Intuitiv wäre man geneigt p_{ij} über $\mathbb{P}(X_{k+1} = j \mid X_k = i)$ zu erklären, was aber aufgrund eventuell fehlender Wohldefiniertheit scheitern könnte. Für jene $i \in \mathcal{S}$, die von dem HMP überhaupt erreicht werden können, also diejenigen für die ein $k' \in \mathbb{N}$ exisitiert mit $\mathbb{P}(X_{k'} = i) > 0$, kann nun $p_{ij} := \mathbb{P}(X_{k+1} = j \mid X_k = i)$ für alle $j \in \mathcal{S}$ gesetzt werden, wobei etwa $k := \min\{k' \mid \mathbb{P}(X_{k'} = i) > 0\}$. Gilt aber für einen Zustand $\mathbb{P}(X_k = i) = 0$, $\forall k \in \mathbb{N}$, dann kann $p_{ij} \geq 0$ beliebig gesetzt werden, solange $\sum_j p_{ij} = 1$ gewahrt bleibt. Es ergibt sich eine Kette gemäß Definition (2.1.9), die den Zufallsvariablen $X_0, X_1, \dots$ entspricht. ([Beh00] S.8f)

□

Um in eindeutiger Weise einem HMP eine ihn beschreibende Übergangsmatrix zuordnen zu können, ist es also notwendig, dass jeder Zustand mit positiver Wahrscheinlichkeit erreicht wird. Es gibt Ketten, die formal unterschiedlich sind, aber den selben Prozess beschreiben.

Beispiel 2.1.11 *Sei $\mathcal{S} := \{1, 2\}$ und $p := (p_1, p_2) := (1, 0)$ die Anfangsverteilung, welche für jedes $0 \leq a \leq 1$ mit der Übergangsmatrix*

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ a & 1-a \end{pmatrix}$$

eine Markovkette erklärt. All diese Prozesse beginnen deterministisch in Zustand $\{1\}$ und werden diesen auch nicht verlassen. Die Gesamtheit dieser Markovketten beschreiben alle und den selben HMP.

Die Berechnung der Verteilung eines HMP zu einem gegebenen Zeitpunkt lässt sich durch eine Matrixmultiplikation mit der Übergangsmatrix P darstellen. Hierzu wird die Verteilung p als Zeilenvektor gedacht.

Satz 2.1.12 ***(Berechnung von Verteilungen durch Linksmultiplikation).*** *Für die Verteilung $p^{(n+1)}$ einer Markovkette mit Übergangsmatrix P zum Zeitpunkt $(n + 1)$ ist*

$$p^{(n+1)} = p^{(n)} \cdot P = p \cdot P^{n+1}.$$

Beweis: Mit Hilfe des Gesetzes der totalen Wahrscheinlichkeit ist

$$p_j^{(n+1)} := \mathbb{P}(X_{n+1} = j) = \sum_i \mathbb{P}(X_{n+1} = j \,|\, X_n = i)\mathbb{P}(X_n = i) = \sum_i p_{ij} p_i^{(n)}.$$

Iteration ergibt die Behauptung.

□

Insbesondere folgt wegen der Homogenität, dass $\mathbb{P}(X_{m+n} = j \mid X_m = i) = \mathbb{P}_i(X_n = j) = p_{ij}^{(n)}$. Es erscheint somit sinnvoll $P^n = (p_{ij}^{(n)})_{i,j\in\mathcal{S}}$ als n-Schritt-Übergangsmatrix zu bezeichnen. Schreibt man weiter die Gleichung $P^{(m+n)} = P^m P^n$ explizit aus, erhält man die in der Literatur als Chapman-Kolmogorov-Gleichungen bezeichnete Identität:

$$p_{ij}^{(m+n)} = \sum_{k\in\mathcal{S}} p_{ik}^{(m)} p_{ki}^{(n)}, \qquad i, j \in \mathcal{S}.$$

Nun folgen zur Demonstration der Theorie einige Beispiele:

Beispiel 2.1.13 ***(Irrfahrt auf*** $\mathbb{Z}$***).*** *Sei X_0 eine $\mathbb{Z}$-wertige Zufallsvariable und $\{Z_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ seien u.i.v. Zufallsvariablen mit den Werten ± 1. Y_n nehme den Wert 1 mit Wahrscheinlichkeit p an und den Wert -1 mit Wahrscheinlichkeit $q := 1-p$. Setze $X_n := X_{n-1} + Z_n$ für jedes $n \in \mathbb{N}$. Die Übergangsmatrix des Prozesses $\{X_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ besitzt die Einträge p in der rechten und die Einträge q in der linken Nebendiagonalen. Ist $p = 1/2$, heißt die Irrfahrt symmetrisch.*

Beispiel 2.1.14 ***(Irrfahrt auf*** $\{1, \ldots, N\}$***).*** *Ähnlich wie bei der Irrfahrt auf $\mathbb{Z}$ springt man in einem Zeitschritt mit Wahrscheinlichkeit q zum linken Nachbarn und mit Wahrscheinlichkeit p zum rechten. Für die Randpunkte müssen zusätzliche Regeln angegeben werden. Ein Randpunkt, etwa 1, heißt absorbierend, falls $p_{11} = 1$ und reflektierend, falls $p_{12} = 1$, sprich wenn die Kette bei dem Randpunkt ankommt sie deterministisch zu dem vorherigen Zustand springt. Zum Beispiel besitzt die Irrfahrt auf $\{1, \ldots, 5\}$ mit absorbierendem Zustand 1 und reflektierendem Zustand 5 die Übergangsmatrix*

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1-p & 0 & p & 0 & 0 \\ 0 & 1-p & 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & 1-p & 0 & p \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Beispiel 2.1.15 ***(Polyas Urnenschema).*** *In einer Urne liegen endliche Anzahlen roter und schwarzer Kugeln. Zu jedem Zeitpunkt $n \in \mathbb{N}_0$ wird zufällig eine Kugel gezogen und zusammen mit einer neuen Kugel derselben Farbe wieder zurück in die Urne gelegt. Die Anzahl roter und schwarzer Kugeln (r, s) beschreibt einen homogenen Markovprozess auf $\mathbb{N}_0^2$. Die Übergangsmatrix P hat die Einträge $p_{(r,s),(r+1,s)} = \frac{r}{r+s}$ und $p_{(r,s)(r,s+1)} = \frac{s}{r+s}$ für $(r, s) \in \mathbb{N}_0^2$, alle anderen Einträge sind gleich Null.*

2.2 Irreduzibilität und Aperiodizität

In diesem Abschnitt werden strukturelle Eigenschaften von Markovprozessen untersucht. Insbesondere ist von Bedeutung, wie oft Zustände besucht werden und ob jeder Zustand von jedem anderen erreicht wird.

Definition 2.2.1 ***(Kommunikation, Irreduzibilität).*** *Seien $i, j \in \mathcal{S}$ zwei beliebige Zustände und P eine Übergangsmatrix. $i \rightsquigarrow j$ soll bedeuten, dass eine in i beginnende Kette mit Übergangsmatrix P irgendwann Zustand j erreicht, formal also folgende Bedingung erfüllt: $\exists n \in \mathbb{N}_0 : \quad p_{ij}^{(n)} > 0$. Gilt darüber hinaus $j \rightsquigarrow i$, so bezeichnet man dies als Kommunikation beider Zustände, welche mit $i \leftrightsquigarrow j$ bezeichnet wird. P heißt irreduzibel, falls alle Zustände kommunizieren.*

Es sei angemerkt, dass die Eigenschaft der Irreduzibilität auf Markovprozesse übertragen werden kann - beziehungsweise eine Eigenschaft von diesen ist - da in diesem Fall die Zuordnung eines HMP und einer Übergangsmatrix unter Ausschluss der Permutationen von $\mathcal{S}$ eindeutig wird.

Satz 2.2.2 *Kommunikation ist eine Äquivalenzrelation.*

Beweis: Immer gilt $i \leftrightsquigarrow i$, da $p_{ii}^{(0)} = 1$. Für die Äquivalenzrelation ist nur noch zu zeigen, dass Transitivität gilt. Seien i, j, l Zustände und gelte $i \leftrightsquigarrow j$ und $j \leftrightsquigarrow l$, dann gibt es $n, n' \in \mathbb{N}_0$ mit $p_{ij}^{(n)} > 0$ und $p_{jl}^{(n')} > 0$. Sei $n'' := n + n'$ und somit $P^{n''} = P^n P^{n'}$. Wegen der Chapman-Kolmogorov-Gleichung gibt es ein $c \geq 0$ derart, dass

$$p_{il}^{(n'')} = p_{ij}^{(n)} p_{jl}^{(n')} + c \geq p_{ij}^{(n)} p_{jl}^{(n')} > 0.$$

Somit folgt $i \rightsquigarrow l$ und insgesamt die Behauptung.

$\square$

Beispiel 2.2.3

1. *Seien P und Q zwei irreduzible stochastische Matrizen. Die Übergangsmatrix $\left(\begin{smallmatrix} P & 0 \\ 0 & Q \end{smallmatrix}\right)$ ist natürlich reduzibel.*

2. *Die Irrfahrt auf $\mathbb{Z}$ ist für $p \in (0, 1)$ irreduzibel.*

3. *In Polyas Urnenschema kommunizieren keine zwei unterschiedlichen Zustände aus $\mathbb{N}_0^2$ miteinander. Somit zerfällt $\mathbb{N}_0^2$ in einelementige Äquivalenzklassen.*

Definition 2.2.4 ***(Abgeschlossenheit).*** *Eine Kommunikationsklasse $J \subseteq \mathcal{S}$ heißt abgeschlossen bezüglich P, wenn $J \not\rightsquigarrow \mathcal{S} \setminus J$, d.h. wenn für je zwei Elemente $j \in J$ und $i \in \mathcal{S} \setminus J$ gilt, dass $i \not\rightsquigarrow j$.*

Leicht ist zu sehen ist, dass für eine abgeschlossene Kommunikationsklasse $C \subseteq \mathcal{S}$ die Matrix $P = (p_{ij})_{i,j \in C}$ ebenfalls eine stochastische Matrix ist. Sowohl für abgeschlossene als auch nicht abgeschlossene Klassen wird später die qualitative Aussage $i \leftrightsquigarrow j$ im Kontext von Rekurrenz und Transienz wieder aufgegriffen und quantitativ untersucht.

Beispiel 2.2.5

1. *In Polyas Urnenschema ist die Menge* $\{(r,s) \in N_0^2 \ : \ r \geq r_0 \quad s \geq s_0\}$ *abgeschlossen. Jedoch gilt dies für keine Klasse.*

2. *Die Irrfahrt auf* $\{1, \dots N\}$ *mit absorbierenden Rändern besitzt die Klassen* $\{1\}, \{N\}$ *und* $\{2, \dots, N-1\}$. *Aber nur* $\{1\}$ *und* $\{N\}$ *sind abgeschlossen, da* $\{2, \dots, N-1\} \rightsquigarrow \{1\}$ *als auch* $\{2, \dots, N-1\} \rightsquigarrow \{N\}$.

Um zeitliche Regelmäßigkeiten zu erfassen, beziehungsweise auszuschließen, ist es notwendig den Begriff einer Periode einzuführen. Für $a_1, \dots, a_n \in \mathbb{N}_0$ mit $\max(a_1, \dots, a_n) > 0$ sei im Weiteren der größte gemeinsame Teiler $ggT(a_1, \dots, a_n)$ die größte positive Zahl, die alle a_i teilt.

Definition 2.2.6 ***(Periode, Aperiodizität).*** *Es sei* $N_i := \left\{ n \,|\, p_{ii}^{(n)} > 0, n \in \mathbb{N} \right\}$. *Der größte gemeinsame Teiler von* N_i *bezeichne die Periode eines Zustandes* $i \in \mathcal{S}$. *Diese drückt aus, nach welchen Schritten es überhaupt möglich wäre, wieder in den Anfangszustand zu gelangen. Ist jene für* $i \in \mathcal{S}$ *gleich 1, ist von* ***Aperiodizität*** *die Rede. Wie üblich ist* $ggT\ \emptyset := \infty$.

Da für $n_1, n_2 \in N_i$ gilt, dass $p_{ii}^{(n_1+n_2)} \geq p_{ii}^{(n_1)} p_{ii}^{(n_2)} > 0$, ist N_i insbesondere additiv abgeschlossen. Diese Definition mahnt zur Vorsicht. Besitzt ein Zustand die Periode d, dann kann nur die Aussage getroffen werden, dass zwischen Vielfachen von d Iterationen eine Kette definitiv nicht wieder bei Zustand i angelangt.

Satz 2.2.7 ***(Klasseneigenschaft Periode).*** *Es gelte* $i \leftrightsquigarrow j$, *dann besitzen die Zustände* i *und* j *dieselbe Periode. Insbesondere genügt es bei einer irreduziblen Kette die Periode eines einzigen Zustandes zu kennen.*

Beweis: Wähle n', $n'' \in \mathbb{N}_0$ derart, dass $p_{ij}^{(n')} > 0$, $p_{ji}^{(n'')} > 0$. Mit dem Beweisargument von Satz (2.2.2) ist $p_{ii}^{(n'+n'')} > 0$, $p_{jj}^{(n'+n'')} > 0$ und $N_i \neq \emptyset \neq N_j$. Mit der Periode $d_i := ggT(N_i)$ gilt $d_i | (n' + n'')$. Für beliebiges $n \in N_j$ ergibt sich

$$p_{ii}^{(n+n'+n'')} \geq p_{ij}^{(n')} p_{jj}^{(n)} p_{ji}^{(n'')} > 0,$$

beziehungsweise $d_i | (n + n' + n'')$. Zusammen mit $d_i | (n' + n'')$ folgt, dass d_i auch n teilt. Da $n \in N_j$ beliebig gewählt wurde, folgt $d_i | d_j$. Durch analoge Argumentation mit der Periode von j ergibt sich die gesuchte Gleichheit $d_j = d_i$. ([Beh00],[Bre99])

$\square$

Beispiel 2.2.8

Für Polyas Urnenschema besteht keine Möglichkeit, zu einem beliebigen Punkt in $\mathbb{N}_0^2$ *zurück zu kommen. Somit ist die Periode gleich* ∞.

2. *Die Irrfahrt auf $\mathbb{Z}$ mit $p \in (0,1)$ besitzt keine* ***Haltebedingung*** *in dem Sinne, dass sie nach einer Iteration immer noch in dem selben Zustand sein kann. Es ergibt sich für den einen Diagonaleintrag p_{ii} von P^2, dass*

$$p_{ii}^{(2)} = \sum_{z \in \mathbb{Z}} p_{iz}p_{zi} = p_{i,(i+1)}p_{(i+1),i} + p_{i,(i-1)}p_{(i-1),i} = 2pq > 0.$$

   Somit ist die Periode Zwei.

3. *Jeder homogene Markovprozess mit einer irreduziblen Übergangsmatrix P, in der mindestens ein Diagonaleintrag ungleich Null ist, etwa $p_{ii} \neq 0$ für ein $i \in \mathcal{S}$, ist wegen Satz 2.2.7 aperiodisch.*

Nun zwei Lemmata, die eine Darstellung des größten gemeinsamen Teilers von $a_1, \ldots,$ a_k als ganzzahlige Linearkombination dieser Zahlen garantieren. Diese Darstellung wird als Bézoutidentität bezeichnet.

Lemma 2.2.9 ***(Existenz des ggT).*** *Besitzt eine bezüglich Addition und Subtraktion abgeschlossene Menge $M \subseteq \mathbb{Z}$ mindestens ein Element ungleich Null, dann gibt es ein kleinstes positives $a \in M$. Mit diesem ist $M = \{k \cdot a \ ; \ k \in \mathbb{Z}\}$.*

Beweis: Es sei $0 \neq c \in \mathcal{S}$. Wegen der Abgeschlossenheit sind $c - c = 0$ und somit auch $0 - c = -c$ in $\mathcal{S}$ enthalten. Also gibt es mindestens ein Element größer Null. Bezeichne a das kleinste positive Element in M. Wegen Abgeschlossenheit bzgl. Addition und Subtraktion ist $a+a, a+a+a, \ldots \in M$ und $0, -a, -a-a, \ldots \in M$, d.h. $\{k \cdot a \ ; \ k \in \mathbb{Z}\} \subseteq M$.

Sei nun $c \in M$. Division mit Rest liefert: Es gibt ein $k \in \mathbb{Z}$ und ein $0 \leq r < a$, so dass $c = ka + r$. Da aber $r = c - ka \in M$, würde $r > 0$ der Minimalität von a widersprechen. Somit ist $M \subseteq \{k \cdot a \ ; \ k \in \mathbb{Z}\}$.([Bre99])

□

Lemma 2.2.10 ***(Bézoutidentität).*** *Für $a_1, \ldots, a_n \in \mathbb{N}_0$ mit $ggT(a_1, \ldots, a_n) = d$ gibt es $n_1, \ldots, n_k \in \mathbb{Z}$ derart, dass $d = \sum_{i=1}^{k} n_i a_i$.*

Beweis: Die Menge $M = \left\{ \sum_{i=1}^{k} n_i a_i \ ; \ n_1, \ldots n_k \in \mathbb{Z} \right\}$ ist abgeschlossen bezüglich Addition und Subtraktion und somit existiert mit Lemma (2.2.9) ein kleinstes positives Element $a = \sum_{i=1}^{k} n_i' a_i$ mit geeigneten $n_1' \ldots, n_k' \in \mathbb{Z}$, so dass $M = \{k \cdot a \ ; \ k \in \mathbb{Z}\}$. Da d alle a_i teilt, ist dies auch für die Linearkombination a der Fall. Es folgt $0 < d \leq a$. Da aber auch jedes a_i in M liegt und somit ein Vielfaches von a ist, muss folgen, dass $a \leq ggT(a_1, \ldots, a_k)$. Es folgt $d = a$.

□

Satz 2.2.11 *Für eine beliebige, bezüglich Addition abgeschlossene Menge $A = \{a_1, a_2, \ldots\}$ natürlicher Zahlen ist der $ggT(A) = 1$ genau dann, wenn es eine Zahl $n \in \mathbb{N}$ gibt, so dass $N \in A$ für alle $N \geq n$.*

Beweis: Es gelte $ggT(A) = 1$. Die Folge $(ggT\,\{a_1, \ldots, a_{k'}\})_{k'=1,\ldots}$ natürlicher Zahlen ist monoton fallend und wird somit konstant. Gelte für ein geeignetes $k \in \mathbb{N}$, dass $ggT\,\{a_1, \ldots, a_k\} = 1$. Es existiert also eine Bézoutidentität

$$1 = \sum_{i=1}^{k} n_i a_i$$

für geeignete $n_1, \ldots, n_k \in \mathbb{Z}$. Werden die positiven und negativen Komponenten getrennt, erhält man $1 = M - L$ mit $M, L \in A$. Sei nun $N \in \mathbb{N}, N \geq L(L-1) =: n$. Division mit Rest ergibt die Darstellung $N = aL + r, a \in \mathbb{Z},\ r \in [0, L-1]$ und mit Verwendung der Bézoutidentität ergibt sich $N = aL + r(M - L) = (a - r)L + rM$. Gilt $(a - r) \geq 0$, dann ist N, wegen der Abgeschlossenheit bezüglich Addition, aus A. Dies wird nun gezeigt: Angenommen $a \leq L - 2$, dann wäre $N = aL + r \leq (L-2)L + r < L(L-1)$; ein Widerspruch. Also ist $a \geq L - 1$, $a - r \geq 0$ und $N \in A$.

Gelte nun umgekehrt, dass es ein $n \in \mathbb{N}$ gibt, so dass für alle $N \in \mathbb{N}$ mit $N \geq n$ gilt: $N \in A$. Angenommen $ggT(A) > 1$, dann wären alle Zahlen, die **nicht** von der Form $k \cdot ggT(A), k \in \mathbb{N}$ sind auch nicht in A enthalten. Somit wäre insbesondere etwa $n + 1 \notin A$; ein Widerspruch. ([Bre99] S. 417f)

□

Die Rückrichtung lässt sich auch abkürzen: Sind ab einem Index alle Zahlen enthalten, so auch zwei Primzahlen, deshalb ist $ggT(A) = 1$. Ziel dieses Abschnittes ist folgende Aussage, die später im Kontext der Kopplung von Markovketten wieder aufgegriffen wird:

Korollar 2.2.12 *Eine Übergangsmatrix P ist genau dann irreduzibel und aperiodisch wenn gilt:*

$$\forall i, j \in \mathcal{S} \exists n \forall k \geq n : \ p_{ij}^{(k)} > 0.$$

Beweis: Sei P irreduzibel und aperiodisch. Für $i, j \in \mathcal{S}$ gibt es wegen der Irreduzibilität ein $k_{ij} \in \mathbb{N}$, so dass $p_{ij}^{(k_{ij})} > 0$. Weiter existiert wegen der additiven Abgeschlossenheit von N_j ein $m \in \mathbb{N}$, so dass $N \in N_i, \forall i \in \mathcal{S}$ für $N \geq m$. Es ist

$$p_{ij}^{(k_{ij}+N)} \geq p_{ij}^{(k_{ij})} p_{jj}^{(N)} > 0.$$

Setze $n := m + k_{ij}$. Die Rückrichtung ist eine unmittelbare Folgerung von Satz 2.2.11.

□

2.3 Rekurrenz und Transienz

Die qualitative Aussage $i \rightsquigarrow j$ soll in diesem Abschnitt quantitativ behandelt werden. Das Langzeitverhalten von Markovketten hängt wesentlich davon ab, ob ein Zustand i mit Wahrscheinlichkeit Eins wieder besucht wird. Eine naheliegende Herangehensweise ist, bei gegebenem HMP zuerst die Übergangsmatrix zu charakterisieren. Zu dieser werden alle Anfangsverteilungen betrachtet, die deterministisch in einem Punkt $i \in \mathcal{S}$ beginnen. Allgemein wird für eine Anfangsverteilung v auch $\mathbb{P}_v$ anstatt $\mathbb{P}$ geschrieben. Ist $p_i = 1$ wird, um die Anfangsverteilung des Prozesses zu betonen, auch $\mathbb{P}_i$ geschrieben. Es ist

$$\mathbb{P}_i(X_0 = i_0, \ldots, X_n = i_n) = \delta_{ii_0} p_{i_0 i_1} \cdots p_{i_{n-1} i_n},$$

wobei δ das Kroneckersymbol darstellt.

Definition 2.3.1 ***(Treffzeit).*** *Der zufällige Zeitpunkt in dem eine Kette das erste Mal den Zustand $i \in \mathcal{S}$ besucht ist*

$$T_i := \inf \{ n \in \mathbb{N} \ : \ X_n = i \},$$

mit $\inf \emptyset = \infty$*, falls die Kette den Zustand i nie besucht. T wird als Treffzeit bezeichnet.*

Die Wahrscheinlichkeit, dass eine in $i \in \mathcal{S}$ gestartete Kette zum Zeitpunkt n das erste Mal den Zustand $j \in \mathcal{S}$ erreicht, ist

$$f_{ij}^{(n)} := \mathbb{P}_i(X_1 \neq j, \ldots, X_{n-1} \neq j, X_n = j) = \mathbb{P}_i(T_j = n), \qquad i, j \in \mathcal{S}, n \in \mathbb{N}.$$

Die Summe $f_{ij} := \sum_{n \in \mathbb{N}} f_{ij}^{(n)}$ steht für die Wahrscheinlichkeit, dass die Kette irgendwann bei Zustand j angelangt und kann somit als die Wahrscheinlichkeit für das Ereignis $\{T_j < \infty\}$ interpretiert werden. Da die Ereignisse $\{T = 1\}, \{T = 2\}, \ldots$ disjunkt sind, ist stets per Konstruktion $f_{ij} \in [0, 1]$.

Satz 2.3.2 ***(Erneuerungsgleichung).*** *Für eine Übergangsmatrix P ist*

$$p_{ii}^{(n)} = \sum_{k=1}^{n} p_{ii}^{(n-k)} f_{ii}^{(k)} = \sum_{t=0}^{n-1} f_{ii}^{(n-t)} p_{ii}^{(t)}, \qquad n \in \mathbb{N}, i \in \mathcal{S}.$$

Da $p_{ii}^{(n)} = \mathbb{P}_i(X_n = i)$, ist die Erneuerungsgleichung intuitiv einsichtig: $f_{ii}^{(n-t)} p_{ii}^{(t)}$ ist der Ausdruck dafür, dass die Kette das erste Mal zur Zeit $(n-t)$ in den Zustand i zurück kehrt und dann in t Schritten wieder dort angelangt.
Beweis: Das Ereignis $\{X_n = i\}$ kann disjunkt zerlegt werden bezüglich dem ersten Zeitpunkt an dem die Kette den Zustand i erreicht. Somit ist

$$p_{ii}^{(n)} = \sum_{k=1}^{n} \mathbb{P}_i(T_i = k, X_n = i) = \sum_{k=1}^{n} \mathbb{P}_i(X_n = i \mid X_1 \neq i, \ldots, X_{k-1} \neq i, X_k = i) f_{ii}^{(k)}.$$

Mit der Markoveigenschaft, insbesondere mit Satz 2.1.6 ist

$$
\begin{aligned}
p_{ii}^{(n)} &= \sum_{k=1}^{n} \mathbb{P}_i(X_n = i \mid X_k = i) f_{ii}^{(k)} = \sum_{k=1}^{n} p_{ii}^{(n-k)} f_{ii}^{(k)} \\
&= f_{ii}^{(1)} p_{ii}^{(n-1)} + \ldots + f_{(ii)}^{(n)} p_{ii}^{(0)} = \sum_{t=0}^{n-1} p_{ii}^{(t)} f_{ii}^{(n-t)}.
\end{aligned}
$$

([Kön05])

□

Definition 2.3.3 ***(Rekurrenz, Transienz).*** *Ein Zustand $i \in \mathcal{S}$ heißt rekurrent, falls $f_{ii} = 1$. In Worten: Falls eine in $i \in \mathcal{S}$ gestartete Kette mit Wahrscheinlichkeit Eins wieder zu i zurückkehrt. Ist $f_{ii} < 1$ für einen Zustand, wird dieser als transient bezeichnet.*

Somit ist ein Zustand entweder rekurrent oder transient. Eine äquivalente Formulierung der Rekurrenz ergibt sich durch folgende Überlegung: Wird die erwartete Anzahl an Besuchen in Zustand $i \in \mathcal{S}$ durch eine in i gestartete Kette betrachtet, ergibt sich wegen der Linearität des Erwartungswertes, dass

$$
\mathbb{E}_i\Big(\sum_{n\in\mathbb{N}_0} 1_{\{X_n=i\}}\Big) = \sum_{n\in\mathbb{N}_0} \mathbb{E}_i(1_{\{X_n=i\}}) = \sum_{n\in\mathbb{N}_0} p_{ii}^{(n)},
$$

wobei $\mathbb{E}_i$ den Erwartungswert unter $\mathbb{P}_i$ bezeichnet (Notation s. [Kre90] S. 210). Es besteht ein Zusammenhang zwischen der erwarteten Anzahl an Besuchen und der Rekurrenz. Präzisiert wird dies mit folgendem Resultat:

Satz 2.3.4 ***(Rekurrenzkriterium).*** *Ein Zustand $i \in \mathcal{S}$ ist genau dann rekurrent, wenn $\sum_{n\in\mathbb{N}_0} p_{ii}^{(n)} = \infty$. In Worten: Wenn er erwartungsgemäß unendlich oft besucht wird.*

Beweis: Für $s \in (0,1)$ ist wegen der Erneuerungsgleichung 2.3.2

$$
\sum_{n\in\mathbb{N}_0} p_{ii}^{(n)} s^n = 1 + \sum_{n\in\mathbb{N}} s^n p_{ii}^{(n)} = 1 + \sum_{n\in\mathbb{N}} s^n \sum_{k=1}^{n} f_{ii}^{(k)} p_{ii}^{(n-k)}.
$$

Die Summe auf der rechten Seite ergibt ausgeschrieben:

$$
\begin{array}{lllll}
n = 1 \;: & & s^1(f_{ii}^{(1)} p_{ii}^{(0)}) & & \\
n = 2 \;: & + & s^2(f_{ii}^{(1)} p_{ii}^{(1)} & + \; f_{ii}^{(2)} p_{ii}^{(0)}) & \\
n = 3 \;: & + & s^3(f_{ii}^{(1)} p_{ii}^{(2)} & + \; f_{ii}^{(2)} p_{ii}^{(1)} & + \; f_{ii}^{(3)} p_{ii}^{(0)}) \\
\vdots & & \vdots & \vdots & \ddots \\
n = n_0 : & + & s^{n_0}(f_{ii}^{(1)} p_{ii}^{(n_0-1)} & + f_{ii}^{(2)} p_{ii}^{(n_0-2)} & + \ldots + f_{ii}^{(n_0)} p_{ii}^{(0)}) \\
\vdots & & \vdots & \vdots & \ddots
\end{array}
$$

Werden im obigen Schema nur endlich viele Zeilen betrachtet, etwa n_0-viele, ergibt sich für $k \leq n_0$ die k-te Spaltensumme :

$$\begin{aligned} f_{ii}^{(k)}(s^k p_{ii}^{(0)} + s^{k+1} p_{ii}^1 + \ldots + s^{n_0} p_{ii}^{(n_0-k)}) &= f_{ii}^{(k)} \sum_{n=k}^{n_0} s^n p_{ii}^{(n-k)} \\ = f_{ii}^{(k)} s^k \sum_{n=k}^{n_0} s^{n-k} p_{ii}^{(n-k)} &= f_{ii}^{(k)} s^k \sum_{n=0}^{n_0-k} s^n p_{ii}^{(n)}, \end{aligned}$$

wobei die letzte Gleichung durch eine Indexverschiebung um den Wert k erreicht wird. Die Summe aller Ausdrücke bis zur Zeile n_0 ist folglich

$$\sum_{k=1}^{n_0} f_{ii}^{(k)} s^k \sum_{n=0}^{n_0-k} s^n p_{ii}^{(n)}.$$

Für $n_0 \to \infty$ ist somit insgesamt

$$\sum_{n \in \mathbb{N}_0} p_{ii}^{(n)} s^n = 1 + \sum_{k \in \mathbb{N}} f_{ii}^{(k)} s^k \sum_{n \in \mathbb{N}_0} s^n p_{ii}^{(n)}.$$

Für die beiden Abbildungen $g, h : [0,1] \to \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ mit

$$g(s) := \sum_{n \in \mathbb{N}_0} p_{ii}^{(n)} s^n, \qquad h(s) = \sum_{k \in \mathbb{N}} f_{ii}^{(k)} s^k$$

gilt somit die Beziehung $g(s) = 1 + h(s)g(s)$. Per Definition ist für einen rekurrenten Zustand $1 = f_{ii} = h(1)$. Der Grenzübergang $s \nearrow 1$ ergibt $g(1) = 1 + g(1)$, was impliziert, dass $\sum p_{ii}^{(n)} = g(1) = \infty$.
Ist ein Zustand jedoch transient und deshalb $f_{ii} < 1$, ergibt die Umformung $g(s) = \frac{1}{1-h(s)}$ und Grenzwertbildung $s \nearrow 1$, dass $\sum_{n \in \mathbb{N}_0} p_{ii}^{(n)} = \frac{1}{1-f_{ii}} < \infty$. Die Rückrichtung des Beweises kann aus der letzten Gleichung einfach abgelesen werden. ([Kön05])

$\square$

Beispiel 2.3.5 *Für die Irrfahrt auf $\mathbb{Z}$ soll im Folgenden untersucht werden, ob Rekurrenz zutrifft. Um in $2n$ Iterationsschritten wieder zum Anfangszustand zurückzukehren, werden genau n Sprünge zu einem größeren Nachbarn und n Sprünge zu einem kleineren benötigt. Insgesamt gibt es dafür $\binom{2n}{n} = \frac{(2n)!}{n!n!}$ Möglichkeiten. Für $i \in \mathbb{Z}$ ergibt sich somit:*

$$p_{ii}^{(2n)} = \frac{(2n)!}{n!n!} p^n (1-p)^n.$$

Stirlings Formel [1] besagt insbesondere, dass $n! \propto (n/e)^n \sqrt{2\pi n}$. Durch Einsetzen ergibt sich:

[1] Siehe etwa [Pat89].

$$\frac{(2n)!}{n!n!} \quad \propto \quad \frac{\sqrt{4\pi n}}{2\pi n} \cdot \frac{(2n/e)^{2n}}{((n/e)^n)^2} = \frac{4^n}{\sqrt{\pi n}} \propto \frac{4^n}{\sqrt{n}}.$$

Somit ist $p_{ii}^{(2n)} \propto \frac{1}{\sqrt{n}}(4p(1-p))^n$. *Da* $p_{ii}^{(2n+1)} = 0$ *für alle* $i \in \mathcal{S}, n \in \mathbb{N}$, *ist nun*

$$\sum_{k\in\mathbb{N}} p_{ii}^{(k)} = \sum_{n\in\mathbb{N}} p_{ii}^{(2n)} \propto \sum_{n\in\mathbb{N}} \underbrace{\frac{(4p(1-p))^{2n}}{\sqrt{2n}}}_{=:a_n}.$$

Das Konvergenzverhalten der linken Reihe ist insbesondere identisch mit dem der Reihe auf der rechten Seite. Da $\lim_{n\to\infty} a_{n+1}/a_n = (4p(1-p))^2 < 1$ *ist für* $p \neq 1/2$ *und gleich Eins für* $p = 1/2$, *ist wegen Satz 2.3.4 und wegen dem Quotientenkriterium (Grundkurs Analysis) jeder Punkt aus* $\mathbb{Z}$ *genau dann rekurrent, wenn die Irrfahrt symmetrisch ist. ([Bre99] S.97f)*

Korollar 2.3.6 *Für alle* $i, j \in \mathcal{S}$ *gilt:*

$$\sum_{n\in\mathbb{N}} p_{ij}^{(n)} = f_{ij} \sum_{n\in\mathbb{N}_0} p_{jj}^{(n)}.$$

Insbesondere folgt für ein transientes $j \in \mathcal{S}$, *dass* $\sum_{n\in\mathbb{N}_0} p_{ij}^{(n)} < \infty$.

Beweis: In Analogie zu dem Beweis der Erneuerungsgleichung 2.3.2 lässt sich herleiten, dass

$$p_{ij}^{(n)} = \sum_{k=1}^{n} f_{ij}^{(k)} p_{jj}^{(n-k)}, \qquad i, j \in \mathcal{S}, n \in \mathbb{N}.$$

Wird über alle $n \in \mathbb{N}$ summiert, ergibt sich die Beziehung

$$\sum_{n\in\mathbb{N}} p_{ij}^{(n)} = \sum_{n\in\mathbb{N}} \sum_{k=1}^{n} f_{ij}^{(k)} p_{jj}^{(n-k)}.$$

Die selbe Indexverschiebung wie im Beweis des Rekurrenzkriteriums 2.3.4 für $s = 1$ und die danach folgende Grenzwertbildung ergeben:

$$\sum_{n\in\mathbb{N}} p_{ij}^{(n)} = \sum_{k\in\mathbb{N}} f_{ij}^{(k)} \sum_{n\in\mathbb{N}_0} p_{ii}^{(n)} = f_{ij} \sum_{n\in\mathbb{N}_0} p_{jj}^{(n)}.$$

Ist $j \in \mathcal{S}$ transient, ist dies mit dem Rekurrenzkriterium eine endliche Summe.

$\square$

Im Folgenden wird ersichtlich, wie sich Kommunikationsklassen bezüglich ihrem Rekurrenzverhalten charakterisieren lassen.

Satz 2.3.7 ***(Rekurrente und transiente Klassen).*** *Es seien $i, j \in \mathcal{S}$ mit $i \leftrightsquigarrow j$. Dann ist j genau dann rekurrent, wenn i es ist.*

Beweis: Für Zustände $i, j \in \mathcal{S}$ mit $i \leftrightsquigarrow j$ gibt es Zahlen $k', k'' \in \mathbb{N}_0$, so dass $p_{ij}^{(k')}, p_{ji}^{(k'')} > 0$. Sei i rekurrent. Wie in dem Beweis von Satz 2.2.2 ist

$$p_{jj}^{(k+k'+k'')} \geq p_{ii}^{(k)} p_{ij}^{(k')} p_{ji}^{(k'')}, \qquad k \in \mathbb{N}_0.$$

Wird über alle k summiert, dann ist

$$\sum_{k \in \mathbb{N}_0} p_{jj}^{(k+k'+k'')} \geq (\sum_{k \in \mathbb{N}_0} p_{ii}^{(k)}) p_{ij}^{(k')} p_{ji}^{(k'')} = \infty.$$

Mit dem Rekurrenzsatz ist somit auch j rekurrent. Es folgt die Behauptung. (vgl [Bre99])

□

Es ist zu sehen, dass abgeschlossene Klassen sowohl rekurrent als auch transient sein können. Für nicht abgeschlossene Klassen gibt folgender Satz Aufschluss. Ist ein Zustand $j \in \mathcal{S}$ von einem rekurrenten Zustand $i \in \mathcal{S}$ erreichbar, liegen beide Zustände in der selben Kommunikationsklasse.

Satz 2.3.8 *Es seien $i, j \in \mathcal{S}$ mit $i \rightsquigarrow j$. Falls i rekurrent ist, so gilt auch $j \rightsquigarrow i$ und j ist dann ebenfalls rekurrent.*

Beweis: Ohne Einschränkung sei $i \neq j$. Angenommen $j \not\rightsquigarrow i$. Es gilt also $p_{ji}^{(n)} = 0$ für alle $n \in \mathbb{N}$. Sei $N := \min\{n \in \mathbb{N}_0 \ : \ p_{ij}^{(n)} > 0\}$. Behauptung: Für alle $n \in \mathbb{N}$ ist $\mathbb{P}_i(X_N = j, X_n = j) = 0$.
Zuerst der Fall $n > N$: $\mathbb{P}_i(X_N = j, X_n = i) = p_{ij}^{(N)} p_{ji}^{(n)} = 0$.
Der Fall $N = n$ kann wegen $i \neq j$ nicht eintreten.
Für $n < N$ ist, wegen der Minimalität von N, $\mathbb{P}_i(X_N = j, X_n = i) = p_{ii}^{(n)} p_{ij}^{(N-n)} = 0$. Mit dieser Vorarbeit ist für ein $M \in \mathbb{N}$

$$\mathbb{P}_i(T_i \leq M, X_N = j) = \sum_{n=1}^{M} \mathbb{P}_i(T_i = n, X_N = j) \leq \sum_{n=1}^{M} \mathbb{P}_i(X_n = i, X_N = j) = 0.$$

Für die erste Rückkehr vor dem Zeitpunkt M folgt

$$\sum_{n=1}^{M} f_{ii}^{(n)} = \mathbb{P}_i(T_i \leq M) = \mathbb{P}_i(T_i \leq M, X_N \neq j) \leq \mathbb{P}_i(X_N \neq j) = 1 - \mathbb{P}_i(X_N = j) = 1 - p_{ij}^{(N)}.$$

Für $M \nearrow \infty$ folgt mit der Rekurrenz von i, dass $1 = f_{ii} = \sum_{n \in \mathbb{N}} f_{ii}^{(n)} \leq 1 - p_{ij}^{(N)} < 1$; ein Widerspruch. Somit gilt $j \rightsquigarrow i$. Die beiden Zustände liegen somit in der selben rekurrenten Klasse.

Korollar 2.3.9 *Nicht abgeschlossene Klassen sind transient, rekurrente Klassen sind automatisch abgeschlossen.*

Beweis: Sei $J \subseteq \mathcal{S}$ eine nicht abgeschlossene Klasse. Dann gibt es Zustände $i \in J$, $j \in \mathcal{S} \setminus J$, so dass $i \rightsquigarrow j$. Angenommen J wäre rekurrent, dann würde mit dem vorangegangenen Satz folgen, dass $j \rightsquigarrow i$. Somit gilt $i \leftrightsquigarrow j$ und $j \in J$, insbesondere folgt mit beliebigen $j \in \mathcal{S} \setminus J$, dass J abgeschlossen ist; ein Widerspruch.

□

Abgeschlossene Klassen können jedoch sowohl rekurrent als auch transient sein, wie die Irrfahrt auf $\mathbb{Z}$ belegt.
Eine feinere Unterteilung der rekurrenten Klassen wird in dem Kapitel über *Invariante Maße und Verteilungen* angegeben. Da die Einschränkung einer stochastischen Matrix auf eine abgeschlossene Klasse wieder abgeschlossen und zudem irreduzibel ist, lassen sich diese Klassen getrennt voneinander untersuchen. Dass in einer rekurrenten Klasse jeder Zustand jeden anderen mit Wahrscheinlichkeit Eins erreicht, belegt folgendes Lemma.

Lemma 2.3.10 *Liegen $i, j \in \mathcal{S}$ in der selben rekurrenten Klasse, dann gilt $f_{ij} = f_{ji} = 1$.*

Beweis: Wegen der Rekurrenz ist $f_{ii} = f_{jj} = 1$. Sei also $i \neq j$ und
$N := \min\left\{n \in \mathbb{N} \ : \ p_{ji}^n > 0\right\}$. Für M>N ist

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(T_j \leq M, X_N = i) &= \sum_{n=1}^{M} \mathbb{P}_j(T_j = n, X_N = i) \\
&= \sum_{n=1}^{N-1} f_{jj}^{(n)} p_{ji}^{(N-n)} + \sum_{n=N+1}^{M} \mathbb{P}_j(T_j = n, X_N = i) \\
&= \sum_{n=1}^{N-1} f_{jj}^{(n)} p_{ji}^{(N-n)} + \sum_{n=N+1}^{M} \mathbb{P}_j(T_j \geq N, X_N = i) f_{jj}^{(n-N)}.
\end{aligned}$$

Die erste Summe verschwindet, da $p_{ji}^{(N-n)} = 0$ für $n \in \{1, \ldots, N-1\}$. In der zweiten Summe wird wie folgt abgeschätzt: $\mathbb{P}_j(T_j \geq N, X_N = i) \leq p_{ji}^{(N)}$. Insgesamt ergibt sich:

$$\mathbb{P}_j(T_j \leq M; X_N = i) \leq \sum_{n=N+1}^{M} p_{ji}^{(N)} f_{jj}^{(n-N)} \leq p_{ji}^{(N)} f_{jj}.$$

Wegen der Rekurrenz von j ist $\lim_{M\to\infty} \mathbb{P}_j(T_j \leq M) = \lim_{M\to\infty} \sum_{k=1}^{M} = f_{jj} = 1$. Damit ergibt sich

$$p_{ji}^{(N)} = \mathbb{P}_j(X_N = i) = \lim_{M\to\infty} \mathbb{P}_j(T_j \leq M, X_N = i) \leq p_{ji}^{(N)} f_{ij}.$$

Da stets $f_{ij} \in [0,1]$ folgt mit $p_{ji}^{(N)} > 0$, dass $f_{ij} = 1$. ([Kön05])

□

Wie in der späteren Anwendung des Metropolis-Samplers bei bedingten exponentiellen Verteilungen, werden Ketten auf einer endlichen Menge $\mathcal{S}$ betrachtet. In diesem Fall ist folgendes Kriterium sehr hilfreich:

Satz 2.3.11 *Ist $\mathcal{S}$ eine endliche Menge, dann ist jede irreduzible Kette rekurrent.*

Beweis: Eine Kette habe die Übergangsmatrix P. Da diese eine stochastische Matrix ist, ist für jedes $i \in \mathcal{S}, n \in \mathbb{N}$ $\sum_{j\in\mathcal{S}} p_{ij}^{(n)} = 1$. Somit ist

$$\sum_{j\in\mathcal{S}} \underbrace{\sum_{n\in\mathbb{N}} p_{ij}^{(n)}}_{=:r_j} = \sum_{n\in\mathbb{N}} \sum_{j\in\mathcal{S}} p_{ij}^{(n)} = \infty.$$

Da $\#\mathcal{S} < \infty$, ist mindestens einer der endlich vielen Summanden $r_j, j \in \mathcal{S}$ gleich unendlich, etwa $r_s = \infty$. Mit dem ersten Teil von Korrolar 2.3.6 folgt, dass $\sum_{n\in\mathbb{N}} p_{ss}^{(n)} = \infty$. Da wegen der Irreduzibilität gilt, dass $s \rightsquigarrow i$ für alle $i \in \mathcal{S}$, folgt mit Satz 2.3.8 die Behauptung. ([Kön05], [Beh00] S.105)

□

2.4 Stoppzeiten und starke Markoveigenschaft

Im Folgenden wird präzisiert was darunter verstanden wird, dass eine Zufallsvariable T nur von $X_0, \dots, X_n$ abhängt. Durch geeignete Ausdünnung von $\mathcal{A}$ kann die Aussage verstanden werden. Dazu ist es notwendig, sich daran zu gewöhnen, dass eine Information über einen Prozess als sub-σ-Algebra interpretiert wird. Nach der Gewöhnung erscheint dies als intuitive Sichtweise. Ziel ist es, Aussagen über die Anzahl von Besuchen von rekurrenten und transienten Zuständen zu gewinnen.

Definition 2.4.1 ***(Stoppzeit).*** *Sei $X_0, X_1, \dots$ ein stochastischer Prozess auf dem Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ und sei $\mathcal{F}_k := \sigma(X_0, \dots, X_k)$ die kleinste σ-Algebra, bezüglich der $X_0, \dots, X_k$ messbar sind [2]. Eine Stoppzeit ist eine messbare Zufallsvariable $T : \Omega \to \mathbb{N}_0 \cup \{\infty\}$ mit der Eigenschaft, dass $\{T = n\} \in \mathcal{F}_n$ für alle $n \in \mathbb{N}_0$, d.h. das Ereignis $\{T = n\}$ hängt nur von $X_0, \dots, X_n$ ab.*

Die Messbarkeit zum Zeitpunkt $n \in \mathbb{N}$ besagt anschaulich, dass der Prozess bis zu diesem Iterationsschritt Auskunft geben kann, ob das Ereignis $\{T = n\}$ eintritt oder nicht. In diesem Sinne werden σ-Algebren als Information über den Prozess betrachtet. Natürlich ist $\mathcal{F}_0 \subseteq \mathcal{F}_1 \subseteq \ldots \subseteq \mathcal{A}$; die Kenntniss über den Verlauf des Prozesses nimmt zu.

[2]Siehe hierzu [Kre90].

Beispiel 2.4.2 *Eine in der Theorie der Markovketten wichtige Stoppzeit ist die im vorherigen Kapitel eingeführte Treffzeit* $T_i := \inf\{n \in \mathbb{N} \ : \ X_n = i\}$*, welche das erste Eintreffen bei Zustand* $i \in \mathcal{S}$ *angibt. Verallgemeinert auf Mengen* $A \subseteq \mathcal{S}$ *verwendet man die Treffzeit* $T_A := \inf\{n \ : \ X_n \in A\}$*.*
Die Zufallsvariable

$$\tau := \inf\{n \ : \ X_{n+1} = i\}$$

*ist **keine** Stoppzeit, da* $\{\tau = m\} = \{X_0 \neq i, \dots, X_m \neq i, X_{m+1} = i\}$*.*

Lemma 2.4.3 *Mit einer Stoppzeit* T *sei* $X_T(\omega) := X_{T(\omega)}(\omega)$ *für* $\omega \in \Omega$*. Die Abbildung* X_T *ist eine* $\mathcal{A}$*-messbare Zufallsvariable.*

Beweis: Das Ereignis $\{X_T = i\}$, $i \in \mathcal{S}$ lässt sich darstellen als

$$(\{T = 0\} \cap \{X_0 = i\}) \cup (\{T = 1\} \cap \{X_1 = i\}) \cup \dots$$

und ist, da σ-Algebren definitionsgemäß abzählbar vereingungsstabil sind, somit aus $\mathcal{A}$.

□

Dass die Markoveigenschaft eines homogenen Markovprozesses nicht nur bei festen Zeitpunkten angewendet werden kann, sondern auch bei zufälligen, ist ein wichtiges Hilfsmittel in der wahrscheinlichkeitstheoretischen Untersuchung von Markovketten.

Satz 2.4.4 ***(Starke Markoveigenschaft).*** *Es sei* $(X_k)_{k\in\mathbb{N}_0}$ *ein homogener Markovprozess und* T *eine Stoppzeit mit* $T < \infty$*. Falls* $\mathbb{P}(X_T = i) > 0$ *für ein* $i \in \mathcal{S}$*, so ist für alle* $i_1, \dots, i_m \in \mathcal{S}$ *und* $m \in \mathbb{N}$

$$\mathbb{P}(X_{T+1} = i_1, \dots, X_{T+m} = i_m \mid X_T = i) = \mathbb{P}_i(X_1 = i_1, \dots, X_m = i_m).$$

Ebenso sind die Prozesse vor und nach der Stoppzeit T stochastisch unabhängig.

Beweis: Die starke Markoveigenschaft wird auf die gewöhnliche Markoveigenschaft zurückgeführt. Multiplikation mit $\mathbb{P}(X_T = i)$ ergibt:

$$\mathbb{P}(X_{T+1} = i_1, \dots, X_{T+m} = i_m, X_T = i) = \mathbb{P}(X_T = i)\mathbb{P}_i(X_1 = i_1, \dots, X_m = i_m),$$

was im Weiteren bewiesen wird. Für die linke Seite, zerlegt nach allen (endlichen) Werten die T einnimmt, ergibt sich mit Lemma 2.4.3 :

$$\sum_{n\in\mathbb{N}_0} \mathbb{P}(X_{n+1} = i_1, \dots, X_{n+m} = i_m, X_n = i, T = n).$$

Da $\{T = n\} \in \mathcal{F}_n$, lässt sich $\mathbb{P}(T = n, X_n = i)$ als Summe geeigneter Pfadwahrscheinlichkeiten darstellen. [1] Mit Satz 2.1.6 ist deshalb

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = i_1, \ldots, X_{n+m} = i_m, X_n = i, T = n) = \mathbb{P}(T = n, X_n = i) p_{ii_1} p_{i_1 i_2} \cdots p_{i_{m-1} i_m}.$$

Wird nun noch über alle $n \in \mathbb{N}_0$ summiert, folgt was zu zeigen war.

□

Korollar 2.4.5 *Es sei $i \in \mathcal{S}$ und $t_i := \mathbb{P}_i(T_i = \infty) < 1$. Weiter ist $V_i := \sum_{n \in \mathbb{N}} 1_{\{X_n = i\}}$ die Anzahl der Besuche in i. Ist i transient, dann ist für jedes $k \in N$ $\mathbb{P}_i(V_i > k) = (1 - t_i)^k$, d.h. V_i ist unter $\mathbb{P}_i$ geometrisch verteilt.* [3]

Beweis: Definiere sukzessiv eine Folge von Stoppzeiten durch $T_i^{(0)} = 0$ und $T^{(k+1)} = \inf \left\{ n > T_i^{(k)} \ : \ X_n = i \right\}$ für jedes $k \in \mathbb{N}_0$. Offensichtlich ist $\{V_i > k\} = \{T_i^{(k)} < \infty\}$ falls die Kette in i startet. Also gilt für alle $k, l \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}_i(V_i > k + l \mid V_i > l) &= \mathbb{P}_i(T_i^{(k+l)} < \infty \mid T_i^{(l)} < \infty) \\
&= \lim_{n \to \infty} \mathbb{P}_i(T_i^{(k+l)} \leq T_i^{(l)} + n \mid X_{T_i^{(l)}} = i, T_i^{(l)} < \infty) \\
&= \lim_{n \to \infty} \mathbb{P}_i(T_i^{(k)} \leq n) \\
&= \mathbb{P}_i(T_i^{(k)} < \infty) = \mathbb{P}_i(V_i > k).
\end{aligned}$$

Im dritten Schritt wurde die starke Markoveigenschaft verwendet. Somit ist V_i geometrisch verteilt mit Parameter $1 - \mathbb{P}_i(V_i > 1) = 1 - \mathbb{P}_i(T_i < \infty) = \mathbb{P}(T_i = \infty) = t_i$, falls $t_i \in (0, 1)$. ([Kön05] S.22)

□

Insbesondere werden transiente Klassen $\mathbb{P}$-f.s. ($\mathbb{P}$ fast sicher) nur endlich oft besucht. Für das Langzeitverhalten von Ketten genügt es wegen Korollar 2.3.9 somit die Einschränkung einer stochastischen Matrix auf abgeschlossene Klassen zu betrachten. Sobald ein Prozess in einer abgeschlossenen Klasse ist, verlässt er diese nicht mehr. Diese Klassen können somit einzeln studiert werden. Deswegen wird nun angenommen, dass P irreduzibel ist.

Korollar 2.4.6 *Es sei P irreduzibel. Ein rekurrenter Zustand $i \in \mathcal{S}$ wird $\mathbb{P}$-f.s. unendlich oft besucht.*

---

[1] Die Menge $F := \{\{X_0 = i_0, \ldots, X_n = i_n\} \ , \ i_0 \ldots i_n \in \mathcal{S}\}$ ist in jeder σ-Algebra enthalten, bezüglich der $X_0, \ldots, X_n$ messbar sind. Da aber die Potenzmenge $\mathcal{P}(F)$ von F schon eine σ-Algebra ist, folgt, dass $\mathcal{F}_n = \mathcal{P}(F)$. ([Beh00] S.106)

[3] Siehe Anhang zur geometrischen Verteilung

Beweis: Definiere sukzessiv eine Folge von Stoppzeiten durch $T_i^{(0)} = 0$ und $T^{(k+1)} = \inf \left\{ n > T_i^{(k)} \ : \ X_n = i \right\}$ für jedes $k \in \mathbb{N}_0$. Wegen Lemma 2.3.10 ist $f_{ji} = 1$ für alle $j \in \mathcal{S}$ und somit $\mathbb{P}(T_i^{(0)} < \infty) = 1$. Mit der starken Markoveigenschaft startet der Prozess nach $T_i^{(0)}$ in i und besitzt wieder die Übergangsmatrix P. Da i rekurrent ist, ist $f_{ii} = 1$ und $T_i^{(1)}$ endlich, ebenso alle weiteren $T_i^{(n)}, n \in \mathbb{N}$.

□

Da transiente Zustände oder Klassen nur endlich oft besucht werden, interessiert es nicht, ob sie eine invariante Verteilung besitzen. Wird in einer transienten Klasse begonnen, bleibt man entweder immer in dieser, wenn sie abgeschlossen ist, wobei jeder Zustand endlich oft besucht wird und sie somit insbesondere unendlich groß ist. Oder aber es kann sein, dass man in eine abgeschlossene Klasse gelangt. Diese lassen sich getrennt untersuchen. Dies ist der Grund warum irreduzible Übergangsmatrizen betrachtet werden. Zu beachten ist: abgeschlossene Klassen können an sich sowohl rekurrent als auch transient sein.

2.5 Invariante Maße und Verteilungen

Definition 2.5.1 ***(Maß, Invarianz).*** *Als Verallgemeinerung des Begriffs einer Verteilung wird als Maß eine Abbildung $v : \mathcal{S} \to [0, \infty)$ bezeichnet. Maße werden auch gern in Vektorschreibweise angegeben. Bezeichne v_i sowie $v(i)$ die i-te Koordinate dieses Zeilenvektors. Ein Maß heißt stationär oder invariant bezüglich einer stochastischen Matrix P, falls*

$$v_i = \sum_{j \in \mathcal{S}} v_j p_{ji}, i \in \mathcal{S}. \tag{2.3}$$

Invarianz lässt sich in Matrixschreibweise als Bedingung $v = v \cdot P$ angeben. In der Sprache der linearen Algebra ist ein invariantes Maß ein nichtnegativer Linkseigenvektor zum Linkseigenwert Eins. Aber selbst im endlichen Fall kann das Lösen dieses Gleichungssystems mit Nebenbedingung aufgrund der Mächtigkeit von $\mathcal{S}$ ein technisch nicht durchführbares Unterfangen darstellen. Wie bereits gezeigt, genügt es irreduzible, rekurrente Übergangmatrizen zu betrachten. Invariante Maße kann es sehr viele geben, zum Beispiel ist für die Einheitsheitsmatrix jede Verteilung invariant.

Lemma 2.5.2 *Ist P eine irreduzible stochastische Matrix und $v \neq 0$ ein invariantes nichttriviales Maß, dann ist $v(i) > 0$ für alle $i \in \mathcal{S}$, d.h. v ist positiv definit.*

Beweis: Sei $i \in \mathcal{S}$. Da $v \neq 0$ gibt es ein $i_0 \in \mathcal{S}$, so dass $v(i_0) \neq 0$. Wegen der Irreduzibilität existiert ein $n_0 \in \mathbb{N}$ für das $p_{i_0 i}^{(n_0)} > 0$. Aus der Invarianz folgt, dass $v(i) \geq v(i_0) P_{i_0 i}^{(n_0)} > 0$.

□

Ist $\mathcal{S}$ endlich, dann lässt sich jedes nichttriviale ($0 \neq v_j \neq \infty$ für alle $j \in \mathcal{S}$), invariante Maß zu einer invarianten Verteilung normieren. Im Folgenden sei P stets irreduzibel. Die erwartete Anzahl an Besuchen in $i \in \mathcal{S}$ für eine in $k \in \mathcal{S}$ gestartete Kette bis zur ersten Rückkehr in den Anfangszustand ist

$$\gamma_k(i) := \mathbb{E}_k\Big(\sum_{n=1}^{T_k} 1_{\{X_n=i\}}\Big).$$

Die Bedeutung von γ_k liegt darin, dass dieses Maß im irreduziblen, rekurrenten Fall das bis auf einen multiplikativen Faktor eindeutig bestimmte, nichttriviale, invariante Maß bezüglich P ist. Für ein rekurrentes k ist T_k $\mathbb{P}_k$-f.s. endlich und für $n \in \{1, \dots, T_k\}$ ist $X_n = k$ genau dann, wenn $n = T_k$; deswegen ist $\gamma_k(k) = \mathbb{E}_k(1) = 1$.

Satz 2.5.3 ***(Existenz und Eindeutigkeit des invarianten Maßes).*** *Es sei P irreduzibel und rekurrent und sei $k \in \mathcal{S}$. Es gelten:*

1. *γ_k ist ein invariantes Maß.*
2. *Für jedes $i \in \mathcal{S}$ gilt $0 < \gamma_k(i) < \infty$.*
3. *γ_k ist das eindeutig bestimmte Maß mit Wert Eins in k.*

Beweis:
(1) Es ist

$$\begin{aligned} \gamma_k(i) &= \mathbb{E}_k\Big(\sum_{n\in\mathbb{N}} 1_{\{X_n=i, n\le T_k\}}\Big) = \sum_{n\in\mathbb{N}} \mathbb{P}_k(X_n = i, n \le T_k) \\ &= \sum_{n\in\mathbb{N}} \sum_{j\in\mathcal{S}} \mathbb{P}(X_n = i, X_{n-1} = j, n \le T_k). \end{aligned}$$

Das Ereignis $\{n \le T_k\}$ ist identisch mit $\{T_k \le n-1\}^c \in \mathcal{F}_{n-1}$. Nun kann die Markoveigenschaft für Mengen aus Satz 2.1.6 zum Zeitpunkt $(n-1)$ verwendet werden. Mit deren Hilfe ist

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_n = i, X_{n-1} = j, n \le T_k) &= \mathbb{P}_k(X_n = i \mid X_{n-1} = j, n \le T_k)\mathbb{P}_k(X_{n-1} = j, n \le T_k) \\ &= p_{ji}\mathbb{P}_k(X_{n-1} = j, n \le T_k) \\ &= p_{ji}\mathbb{P}_k(X_{n-1}, n-1 \le T_k - 1). \end{aligned}$$

Einsetzen ergibt

$$\gamma_k(i) = \sum_{j\in\mathcal{S}} p_{ji} \sum_{n\in\mathbb{N}} \mathbb{P}_k(X_{n-1} = j, n-1 \le T_k - 1).$$

Nach einer Indexverschiebung ist dies identisch mit

$$\sum_{j\in\mathcal{S}} p_{ji} \sum_{n\in\mathbb{N}_0} \mathbb{P}_k(X_n = j, n \le T_k - 1) = \sum_{j\in\mathcal{S}} p_{ji} \sum_{n=0}^{T_k-1} \mathbb{P}_k(X_n = j).$$

Für $j = k$ ist $\mathbb{P}_k(X_0 = j) = 1 = \mathbb{P}(X_{T_k} = j)$ und für $j \neq k$ ist $\mathbb{P}_k(X_0 = j) = 0 = \mathbb{P}(X_{T_k} = j)$. Somit lässt sich $\gamma_k(i)$ weiter umformen:

$$\gamma_k(i) = \sum_{j \in \mathcal{S}} p_{ji} \sum_{n=1}^{T_k} \mathbb{P}_k(X_n = j) = \sum_{j \in \mathcal{S}} \gamma_k(j) p_{ji}.$$

Deshalb ist γ_k eine invariante Verteilung von P.

(2) γ_k ist wegen (1) auch invariant bezüglich mehrfacher Multiplikation mit P, sprich γ_k ist eine invariante Verteilung bezüglich aller natürlichen Potenzen von P. Für jedes $n \in \mathbb{N}_0, i \in \mathcal{S}$ ist

$$\gamma_k(i) = \sum_{j \in \mathcal{S}} \gamma_k(j) p_{ji}^{(n)} = \gamma_k(k) p_{ki}^{(n)} + \sum_{j \in \mathcal{S} \setminus \{k\}} \gamma_k(j) p_{ji}^{(n)}.$$

Wie bereits bekannt, ist wegen der Rekurrenz der Klasse $\gamma_k(k) = 1$. Somit ist $\gamma_k(i) \geq p_{ki}^{(n)}$. Angenommen für ein $i \in \mathcal{S}$ wäre $\gamma_k(i) = 0$ und somit auch $p_{ki}^{(n)} = 0$ für alle $n \in \mathbb{N}$, so widerspräche dies der Irreduzibilität von P. Somit ist γ_k positiv definit.
Bleibt zu zeigen, dass γ_k nur endliche Werte annimmt. Es ist

$$1 = \gamma_k(k) = \sum_{j \in \mathcal{S}} \gamma_k(j) p_{jk}^{(n)}, \qquad n \in \mathbb{N}.$$

Angenommen, es gäbe ein $j \in \mathcal{S}$ mit $\gamma_k(j) = \infty$. Da P irreduzibel ist, existiert ein $n_0 \in \mathbb{N}_0$, so dass $p_{jk}^{(n_0)} > 0$. Es folgt $1 = \gamma(k) \geq \gamma_k(j) p_{jk}^{(n_0)} = \infty$; ein Widerspruch.

(3) Es sei λ ein weiteres invariantes Maß mit $\lambda(k) = 1$. Dann ist $(\lambda - \gamma_k) = (\lambda - \gamma_k) \cdot P$ und $\lambda(k) - \gamma_k(k) = 0$. Ist $(\lambda - \gamma_k)$ ein Maß, dann folgt wegen der Nullstelle bei k mit Lemma 2.5.2, dass es identisch Null sein muss. Somit wäre $\lambda = \gamma_k$. Es bleibt deshalb noch zu zeigen, dass $\lambda(j) - \gamma_k(j) \geq 0$.
Für jedes $j \in \mathcal{S}$ ist wegen der Invarianz $\lambda(j) = \sum_{i \in \mathcal{S} \setminus \{k\}} \lambda(i) p_{ij} + p_{kj}$. Die $\lambda(i)$ auf der rechten Seite können über die Invarianz von λ durch $\sum_{i_1 \in \mathcal{S}} \lambda(i_1) p_{i_1 i}$ ersetzt werden. Zusammen ergibt sich:

$$\begin{aligned}
\lambda(j) &= \sum_{i \in \mathcal{S} \setminus \{k\}} \Big(\sum_{i_1 \in \mathcal{S} \setminus \{k\}} \lambda(i_1) p_{i_1 i} + p_{ki} \Big) p_{ij} + p_{kj} \\
&= \sum_{i, i_1 \in \mathcal{S} \setminus \{k\}} \lambda(i_1) p_{i_1 i} p_{ij} + \sum_{i \in \mathcal{S} \setminus \{k\}} p_{ki} p_{ij} + p_{kj} \\
&= \sum_{i, i_1 \in \mathcal{S} \setminus \{k\}} \lambda(i_1) p_{i_1 i} p_{ij} + \mathbb{P}_k(T_k \geq 2, X_2 = j) + \mathbb{P}_k(T_k \geq 1, X_1 = j).
\end{aligned}$$

Wird dies iterativ fortgesetzt, so ist für jedes $n \in \mathbb{N}$

$$\begin{aligned}
\lambda(j) &= \sum_{i_0,\dots i_n \in \mathcal{S}\setminus\{k\}} \lambda(i_n)\Big(\prod_{r=1}^{n} p_{i_r i_{r-1}}\Big) p_{i_0 j} + \sum_{r=1}^{n+1} \mathbb{P}_k(T_k \geq r, X_r = j) \\
&\geq \sum_{r=1}^{n+1} \mathbb{P}_k(T_k \geq r, X_r = j) \\
&= \mathbb{E}_k\Bigg(\sum_{r=1}^{\min\{T_k, n+1\}} 1_{\{X_r = j\}}\Bigg).
\end{aligned}$$

Für $n \nearrow \infty$ steht als Grenzwert auf der rechten Seite $\gamma_k(j)$. Somit ist $\lambda(j) - \gamma_k(j) \geq 0$ und $(\lambda - \gamma_k)$ ist ein Maß. ([Bre99] S.101f, [Kön05] S.24f, [Nor98] S.34f)

□

Da wegen Satz 2.3.11 im endlichen Fall stets Rekurrenz eintritt und da im endlichen Fall γ_k immer zu $\gamma_k / \sum_{i \in \mathcal{S}} \gamma_k(i)$ normiert werden kann, existiert für jede irreduzible Übergangsmatrix P auf endlichem Zustandsraum eine invariante Verteilung. Die Frage, unter welchen Bedingungen im Allgemeinen eine invariante Verteilung existiert, erfordert eine Unterteilung der rekurrenten Zustände. Deswegen wird an dieser Stelle die erwartete Rückkehrzeit zu einem Zustand $i \in \mathcal{S}$ eingeführt:

$$\mu_i := \mathbb{E}_i(T_i) := \sum_{n \in \mathbb{N}} n \mathbb{P}_i(T_i = n) = \sum_{n \in \mathbb{N}} n f_{ii}^{(n)} \in [0, \infty).$$

Wie vor dem Satz 2.3.2 angemerkt, ist stets $f_{ii} \in [0,1]$. Da $\sum_{n \in \mathbb{N}} f_{ii}^{(n)} \leq \sum_{n \in \mathbb{N}} n f_{ii}^{(n)}$, folgt aus einer endlichen erwarteten Rückkehrzeit insbesondere Rekurrenz.

Definition 2.5.4 ***(Positive und negative Rekurrenz).*** *Ein Zustand $i \in \mathcal{S}$ heißt positiv rekurrent, falls $\mu_i < \infty$. Ist ein Zustand i nicht positiv rekurrent, aber rekurrent, wird er als negativ rekurrent bezeichnet.*

Satz 2.5.5 ***(Invarianz und positive Rekurrenz).*** *Sei P irreduzibel, dann sind folgende Aussagen äquivalent:*

1. *Es existiert eine invariante Verteilung.*
2. *Es gibt einen positiv rekurrenten Zustand in $\mathcal{S}$.*
3. *Alle Zustände in $\mathcal{S}$ sind positiv rekurrent.*

Beweis:

(3)⇒(2) ist offensichtlich.

(2)⇒(1). Sei $k \in \mathcal{S}$ mit $\mu_k < \infty$ womit k insbesondere rekurrent ist. Wegen der Linearität des Erwartungswertes ist

$$\sum_{j \in \mathcal{S}} \gamma_k(j) = \sum_{j \in \mathcal{S}} \mathbb{E}_k\Big(\sum_{n=1}^{T_k} 1_{\{X_n=j\}}\Big) = \mathbb{E}_k\Big(\sum_{n=1}^{T_k} \sum_{j \in \mathcal{S}} 1_{\{X_n=j\}}\Big) = \mathbb{E}_k(T_k) = \mu_k < \infty. \quad (2.4)$$

γ_k kann somit normiert werden und $\gamma'_k := \gamma_k/\mu_k$ ist die gesuchte invariante Verteilung.

(1)⇒(3). Sei π eine invariante Verteilung. Mit Lemma 2.5.2 ist $\pi(k) > 0$ für alle $k \in \mathcal{S}$. $\gamma := \pi/\pi(k)$ ist ein invariantes Maß mit $\gamma(k) = 1$. Dies ist nach Satz 2.5.3 eindeutig bestimmt und somit ist $\gamma = \gamma_k$. Wie in Gleichung (2.4) ist

$$\mu_k = \sum_{j \in \mathcal{S}} \gamma_k(j) = \frac{1}{\pi(k)} \sum_{j \in \mathcal{S}} \pi(j) = \frac{1}{\pi(k)} < \infty.$$

Insgesamt folgt, dass alle Zustände $k \in \mathcal{S}$ positiv rekurrent sind. ([Nor98] S.35f, [Kön05] S.24f)

□

Es ergeben sich interessante Folgerungen.

Beobachtung 2.5.6

1. *Da die invarianten Maße bis auf einen multiplikativen Faktor eindeutig waren, ist die invariante Verteilung insbesondere eindeutig.*

2. *Da $\sum_{j \in \mathcal{S}} \gamma_k(j) = \mu_k$, ist jeder irreduzible HMP genau dann positiv rekurrent, wenn für ein invariantes Maß γ gilt, dass $\sum_{j \in \mathcal{S}} \gamma(j) < \infty$.*

3. *Positive Rekurrenz ist eine Klasseneigenschaft. Somit sind irreduzible Übergangsmatrizen entweder transient, positiv rekurrent oder negativ rekurrent.*

Beispiel 2.5.7 *Die symmetrische Irrfahrt ist, wie gezeigt, rekurrent. Für $c \geq 0$ ist $\sum_{j \in \mathbb{Z}} cp_{ji} = cp_{(i-1),i} + cp_{(i+1),i} = c$. Insbesondere ist dies auch für $c = 1$ der Fall. Diese ist nun nach Satz 2.5.3 das einzige invariante Maß, welches den Wert 1 irgendwo annimmt. Jedoch lässt es sich nicht normieren. Die symmetrische Irrfahrt ist somit wegen Satz 2.5.5 negativ rekurrent.*

Auch irreduzible, transiente Ketten können ein invariantes Maß besitzen, wie etwa bei einer nichtsymmetrischen Irrfahrt mit $p \in (0, 1)$ zu sehen ist. Dort ist jede konstante Funktion invariant. Somit ist die Existenz eines invarianten Maßes nicht hinreichend für Rekurrenz. Da aber im transienten Fall jeder Zustand nur endlich oft besucht wird, sind solche Ketten nur von pathologischem Interesse und für Modellierungen uninteressant.

Beispiel 2.5.8 ***(Irrfahrt auf*** $\mathbb{N}_0$ ***mit reflektierendem Randpunkt).*** *Wie bei einer Irrfahrt auf* $\mathbb{Z}$ *bewegt sich ein Prozess mit Wahrscheinlichkeit* p *zum größeren Nachbarn und mit Wahrscheinlichkeit* $q = 1-p$ *zum kleineren. Für den Zustand* 0 *wird wieder eine Sonderregel benötigt, dieser sei reflektierend. Für* $p \in (0,1)$ *ist dieser Prozess irreduzibel. Es interessiert, unter welchen Bedingungen der Prozess eine invariante Verteilung besitzt. Gleichung (2.3) ergibt in diesem Fall folgende Bedingungen für ein invariantes Maß* v*:*

$$v_0 = qv_1, \tag{2.5}$$

$$v_1 = v_0 + qv_2, \tag{2.6}$$

$$v_i = pv_{i-1} + qv_{i+1}, \qquad 2 \leq i \in \mathbb{N}. \tag{2.7}$$

Wird v_1 *in Gleichung (2.6) anhand (2.5) ersetzt, ergibt sich* $qv_2 = v_0/q - v_0 = (1/q - 1)v_0 = p/q \cdot v_0$*. Induktiv wird nun gezeigt, dass* $qv_i = v_0\left(\frac{p}{q}\right)^{i-1}$ *für alle* $i \in \mathbb{N}$*. Das bedeutet, dass ein invariantes Maß durch Angabe eines einzigen Wertes vollständig bestimmt ist. Angenommen, dies gelte für ein* $i \in \mathbb{N}$*. Mit (2.7) ist mit Verwendung der Induktionsannahme* $(I.A.)$

$$qv_{i+1} = v_i - pv_{i-1} \overset{I.A.}{=} v_0\left(\frac{p}{q}\right)^{i-1}\left(\frac{1}{q} - 1\right) = v_0\left(\frac{p}{q}\right)^{i}.$$

Das Kriterium für positive Rekurrenz hat damit folgende Gestalt:

$$\sum_{n\in\mathbb{N}_0} v_i = v_0 + v_0\frac{1}{q}\sum_{i\in\mathbb{N}_0}\left(\frac{p}{q}\right)^{i} < \infty.$$

Somit ist die Irrfahrt genau dann positiv rekurrent, wenn $p/q < 1$ *und somit* $p < 1/2$ *ist. Die invariante Verteilung* π *lässt sich nun mit*

$$\pi_0 = \left(1 + \frac{1}{q}\sum_{i\in\mathbb{N}_0}\left(\frac{p}{q}\right)^{i}\right)^{-1}$$

berechnen.

Als Fazit lässt sich festhalten, dass für eine irreduzible Kette genau einer der folgenden Fälle eintritt:

- Die Kette ist **transient**. Sie kann ein invariantes Maß besitzen, aber da sie jeden Zustand nur endlich oft besucht gibt es keine invariante Verteilung.
- Die Kette ist **negativ rekurrent**. Sie besitzt zwar ein Invariantes Maß, welches aber nicht zu einer invarianten Verteilung normiert werden kann.
- Die Kette ist **positiv rekurrent**. Es exisitiert eine eindeutige invariante Verteilung.

(vgl [Kön05])

2.6 Konvergenz in Verteilung

Bisher wurde aufgezeigt, unter welchen Voraussetzungen stochastische Matrizen invariante Verteilungen besitzen. Ziel dieses Abschnittes ist es, diese Resultate auf Markovketten zu übertragen. Es wird sich herausstellen, dass die Verteilung eines irreduziblen, positiv rekurrenten, homogenen Markovprozesses in endlicher Zeit die invariante Verteilung annimmt. Daraus kann eine Konvergenzaussage abgeleitet werden, die später das Herzstück der MCMC-Methode bildet. Zentrales Argument in dem vorliegenden Kapitel ist die Kopplung von zwei Prozessen, welche die selben Übergangswahrscheinlichkeiten besitzen. Für den nächsten Satz sei angemerkt, dass, wie üblich, $\inf \emptyset := \infty$ gesetzt wird.

Satz 2.6.1 ***(Treffzeit zweier Prozesse).*** *Besitzen die beiden stochastisch unabhängigen homogenen Markovprozesse $\{X_n\}_{n\in\mathbb{N}_0}$ und $\{Y_n\}_{n\in\mathbb{N}_0}$ die selbe irreduzible, aperiodische und positiv rekurrrente Übergangsmatrix, dann ist die Treffzeit*

$$T := \inf\{n \in \mathbb{N}_0 \ : \ X_n = Y_n\}$$

mit Wahrscheinlichkeit Eins endlich.

Beweis: Für jedes $n \in \mathbb{N}_0$ sei $Z_n := (X_n, Y_n) : \Omega \times \Omega \to \mathcal{S}^2$. Der stochastische Prozess $\{Z_n\}_{n\in\mathbb{N}_0}$ hat wegen der stochastischen Unabhängigkeit beider Prozesse die Übergangswahrscheinlichkeiten

$$\mathbb{P}(Z_{n+k} = (j,l) \mid Z_n = (i,k)) = p_{ij}^{(k)} p_{kl}^{(k)}, \qquad i,j,k,l \in \mathcal{S}, \ n,k \in \mathbb{N}_0.$$

Mit Korollar 2.2.12 gibt es für alle $i,j,k,l \in \mathcal{S}$ einen Index $g \in \mathbb{N}$, so dass $p_{ij}^{(G)} p_{kl}^{(G)} > 0$ für $G > g$. Somit ist $\{Z_n\}_{n\in\mathbb{N}_0}$ insbesondere irreduzibel.

Sei π die invariante Verteilung von P, dann ist offensichtlich $\pi \times \pi$ die invariante Verteilung des neuen Prozesses. Mit Satz 2.5.5 ist $\{Z_n\}_{n\in\mathbb{N}_0}$ positiv rekurrent und insbesondere rekurrent. Deswegen wird mit Lemma 2.3.10 auch die Diagonale $(i,i), i \in \mathcal{S}$ mit Wahrscheinlichkeit Eins in endlicher Zeit besucht. Somit ist jede Treffzeit $T_{(i,i)}, i \in \mathcal{S}$ endlich. ([Bre99] S.130, [Kön05] S.28f, [Nor98] S.41ff)

□

Die Aperiodizität ist wesentlich im obigen Beweis. Sie garantiert die Irreduzibilität der Paar-Markovkette und damit auch, dass sich die Ketten definitiv treffen. Im Folgenden wird dies an einem Gegenbeispiel illustriert.

Beispiel 2.6.2 *Sei $\mathcal{S} = \{1,2\}$. Die irreduzible Übergangsmatrix $P := \left(\begin{smallmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{smallmatrix}\right)$ besitzt die Periode 2. Der Produktraum $\mathcal{S}^2 = \{(1,1),(1,2),(2,1),(2,2)\}$ und die darauf erklärten Übergansgwahrscheinlichkeiten $p_{ik}p_{jl}, \ i,j,k,l \in \{1,2\}$ ergeben folgende Matrix:*

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Dies zeigt, dass $\mathcal{S}^2$ in die abgeschlossenen Klassen $\{(1,1),(2,2)\}$ und $\{(1,2),(2,1)\}$ zerfällt. Beginnt ein gepaarter Prozess in letzterer Klasse, werden sich die einzelnen Ketten ***nie*** *treffen.*

Satz 2.6.3 ***(Kopplung von Markovketten).*** *Besitzen die beiden unabhängigen homogenen Markovprozesse $\{X_n\}_{n\in\mathbb{N}_0}$ und $\{Y_n\}_{n\in\mathbb{N}_0}$ die selbe irreduzible aperiodische und positiv rekurrrente Übergangsmatrix, dann sind die Verteilungen von X_n und Y_n nach dem Zeitpunkt T identisch. Insbesondere ist dies der Fall, falls ein Prozess mit der invarianten Verteilung beginnt.*

Beweis: Wie in Satz 2.6.1 gezeigt wurde, ist $T < \infty$ $\mathbb{P}$-f.s. Die Beweisidee ist, dass $X_T = Y_T$ und deshalb beide Ketten zum Zeitpunkt T nicht unterscheidbar sind. Um das Ereignis X_T zu erfassen, ist es notwendig, wieder die Paar-Kette $\{Z_n\}_{n\in\mathbb{N}_0}$ zu betrachten. Die Anwendung der starken Markoveigenschaft auf die Paarkette liefert die Behauptung. Sei η die Verteilung von X_0 und π jene von Y_0 und bezeichne $\mathbb{P}_{\eta\times\pi}$ das Wahrscheinlichkeitsmaß auf $\mathcal{A}\times\mathcal{A}$. Für $n \in \mathbb{N}_0$ wird das Ereignis $\{X_{T+n} = j\}, j \in \mathcal{S}$ in $\Omega\times\Omega$ nach allen Werten aufgespalten, die X_T annehmen kann.

$$\mathbb{P}_{\eta\times\pi}(X_{T+n} = j) = \sum_{i\in\mathcal{S}} \mathbb{P}_{\eta\times\pi}(X_{T+n} = j, X_T = i).$$

Mit Satz 2.4.4 ist dies identisch mit:

$$\sum_{i\in\mathcal{S}} \mathbb{P}_{\eta\times\pi}(X_T = i)p_{ij}^{(n)}.$$

Da aber

$$\mathbb{P}_{\eta\times\pi}(X_T = i) = \mathbb{P}_{\eta\times\pi}(Z_T = (i,i)) = \mathbb{P}_{\eta\times\pi}(Y_T = i)$$

für alle $i \in \mathcal{S}$, folgt insgesamt, dass

$$\mathbb{P}_{\eta\times\pi}(X_{T+n} = j) = \mathbb{P}_{\eta\times\pi}(Y_{T+n} = j).$$

□

Die Aussage des letzten Satzes lässt sich leicht in eine Konvergenzaussage überführen. Diese bildet das Fundament des Metropolis-Algorithmus. Hierzu kann die Konvergenz zweier Verteilungen p und v bezüglich folgender Metrik $d : [0,1] \to [0,1]$ verstanden werden:

$$d(p,v) := \frac{1}{2}\sum_{i\in\mathcal{S}} |v_i - p_i|.$$

Korollar 2.6.4 ***(Konvergenz in Verteilung).*** *Für zwei irreduzible, aperiodische und positiv rekurrente Ketten mit der selben Übergangsmatrix, aber eventuell unterschiedlichen Anfangsverteilungen p und v gilt:*

$$d(p^{(n)}, v^{(n)}) \overset{n\to\infty}{\longrightarrow} 0.$$

Insbesondere gilt dies auch, falls eine davon die invariante Verteilung ist.

Beweis: Es sei $m \in \mathbb{N}, i \in \mathcal{S}$. Für die beiden Prozesse $\{X_n\}_{n\in\mathbb{N}_0}$ und $\{Y_n\}_{n\in\mathbb{N}_0}$ mit identischer Übergangsmatrix sind wegen Satz 2.6.3 die Verteilungen für alle $n \in \mathbb{N}$ mit $T \leq n$ identisch. Deshalb ist

$$\begin{aligned} & |\mathbb{P}(X_n = i) - \mathbb{P}(Y_n = i)| = |\mathbb{P}(X_n = i, T > n) - \mathbb{P}(Y_n = i, T > n)| \\ \leq \; & \mathbb{P}(X_n = i, T > n) + \mathbb{P}(Y_n = i, T > n) \leq 2\mathbb{P}(T > n). \end{aligned}$$

Wegen Satz 2.6.1 konvergiert $\mathbb{P}(T > n)$ in Wahrscheinlichkeit gegen 0.

□

Ist etwa $X_0 = i$ fest, ist zu sehen, dass für alle $i, j \in \mathcal{S}$: $\lim_{n\to\infty} p_{ij}^{(n)} = \pi_j$, wobei π die invariante Verteilung darstellt, d.h die Potenzen der Übergangsmatrix konvergieren zeilenweise gegen die invariante Verteilung.

2.7 Der Metropolis Algorithmus

Stellt sich bei einer gegebenen Verteilung die Frage, ob sie eine stationäre Verteilung ist, kann folgendes hinreichendes Kriterium Aufschluss geben:

Lemma 2.7.1 ***(Reversibiltätskriterium).*** *Gilt für eine Kette (S,v,P) die Bedingung*

$$\forall i, j \in \mathcal{S}: \quad v(i)p_{ij} = v(j)p_{ji},$$

dann ist v bereits eine invariante Verteilung.

Der Beweis ist eine Anwendung der totalen Wahrscheinlichkeit (siehe [Bre99] S.130f). Für ein festes $i \in \mathcal{S}$ ergibt Summation über alle $j \in \mathcal{S}$

$$v(i) = v(i) \sum_{j\in\mathcal{S}} p_{ij} = \sum_{j\in\mathcal{S}} v(i)p_{ij} = \sum_{j\in\mathcal{S}} v(j)p_{ji}$$

und somit v=vP.

□

Die Bezeichnung „reversibel“ stammt von der induktiv leicht zu zeigenden Aussage, dass für eine das Reversibilitätskriterium erfüllende Kette $\mathbb{P}_v(X_0 = i_0, \ldots, X_n = i_n) = \mathbb{P}_v(X_0 = i_n, \ldots X_n = i_0)$ für alle $n \in \mathbb{N}, i_0, \ldots, i_n \in \mathcal{S}$ ist. Die Kette ist somit invariant bezüglich Zeitumkehr.

Nach der Vorarbeit in den vorherigen Abschnitten kann, ausgehend von der Theorie der Markovketten, die Fragestellung modifiziert werden. Wie sich herausstellen wird ist es möglich, zu einer beliebigen Verteilung v mit echt positiven Einträgen eine Kette mit beliebiger Anfangsverteilung oder einem deterministischen Anfang zu konstruieren, welche als invariante Verteilung v annimmt. Dies entspricht der Erzeugung von Zufallselementen entlang einer Verteilung.

Definition 2.7.2 ***(Akzeptanzfunktion).*** *Für eine echte Verteilung v , d.h. $v_i \neq 0, i \in \mathcal{S}$, wird die Funktion $\alpha : \mathcal{S} \times \mathcal{S} \to (0,1]$ mit*

$$\alpha(x,y) := \min\left\{ \quad \frac{v_y}{v_x} \ , \ 1 \quad \right\}, \qquad x, y \in \mathcal{S}$$

als Akzeptanzfunktion bezeichnet.

Im Folgenden sei $\mathcal{S}$ stets endlich.

Satz 2.7.3 *Für eine symmetrische Übergangsmatrix Q und eine echte Verteilung v gilt:*

$$v_x \alpha(x,y) q_{xy} = v_y \alpha(y,x) q_{yx}, \qquad x, y \in \mathcal{S}.$$

Beweis: Sei ohne Einschränkung $q_{xy} \neq 0$ und $v_x q_{xy} < v_y q_{yx}$. Dann ist $\frac{v_y}{v_x} > 1$, $\alpha(x,y) = 1$ und $\alpha(y,x) = \frac{v_x}{v_y}$. Es ergibt sich

$$v_y \alpha(y,x) q_{yx} = v_y \frac{v_x}{v_y} q_{yx} = v_x \alpha(x,y) q_{xy}.$$

In diesem Sinne ist das Reversibilitätskriterium bezüglich den Übergangswahrscheinlichkeiten $\alpha(y,x) q_{yx}$ erfüllt.

$\square$

Das algorithmische Verfahren zur Erzeugung von Zufallsvariablen gliedert sich in zwei Schritte. Ähnlich wie bei der klassischen Akzeptanz-Verwerfungsmethode wird, beginnend von einem Startwert x, ein Kandidat y bezüglich der als Verteilung aufgefassten Zeile $(q_{xy})_{y \in \mathcal{S}}$ der Übergangsmatrix ausgewählt. Im nächsten Schritt wird dieser mit Wahrscheinlichkeit α akzeptiert. Hintereinanderausführung liefert folgenden Algorithmus (vgl [CG95]):

Initiiere die Kette mit einem beliebigen Anfangswert $x^{(0)}$. Für $i = 0, 1, \ldots, n$

- Wähle y mit Wahrscheinlichkeit $q_{x^{(i)}y}$
- Erzeuge Realisation ω von $U \sim \mathcal{U}_{[0,1]}$
- Für $\omega \leq \alpha(x^{(i)}, y)$ setze $x^{(i+1)} := y$
- Sonst setze $x^{(i+1)} := x^{(i)}$

Ausgabe $\left\{ x^{(0)}, \ldots, x^{(n)} \right\}$.

Durch die Akzeptanzfunktion werden entweder die Übergänge von x nach y oder die von y nach x reduziert. Die **Haltebedingung** $x^{(i+1)} := x^{(i)}$ garantiert, dass die diesem Prozess zugrunde liegende, nicht weiter angegebene Übergangsmatrix stochastisch ist. Ist Q darüber hinaus irreduzibel und aperiodisch, kommunizieren immer noch alle Zustände miteinander, ebenso bleibt die Aperiodizität erhalten.

Somit konvergiert die Verteilung der $x^{(n)}$ gegen die eindeutige invariante Verteilung. Da das Reversibilitätskriterium erfüllt ist, ist diese gleich v. In der Praxis wird die Konvergenz durch eine größtmögliche Burn-In Phase realisiert. Wie an der Konstruktion von α zu sehen, muss, da ein Faktor sich herauskürzt, die invariante Verteilung nur bis auf ein skalares Vielfaches genau bekannt sein. Diese zentrale Eigenschaft wird später bei bedingten exponentiellen Verteilungen ausgenutzt, da die Verteilung in diesem Fall effektiv nur bis auf einen Faktor genau bestimmt werden kann.

Kapitel 3

Algebraisch statistische Modelle

3.1 Äquivalente Definitionen algebraisch statistischer Modelle

Allgemein besteht ein statistisches Modell aus einer Menge von Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf einem Zustandsraum $\mathcal{X}$. Ist dieser endlich, etwa $\#\mathcal{X} = m$ lässt sich die Verteilung einer Zufallsvariablen X als Punkt des $\mathbb{R}^m$ angeben. Ein statistisches Modell ist, in seiner allgemeinsten Definition, zunächst nichts anderes als eine Teilmenge des m-dimensionalen Simplex

$$\Delta_m := \left\{ p \in \mathbb{R}^m \ : \ \sum_{i=1}^{m} p_i = 1 \ \wedge \ 0 \leq \ p_j, \ 1 \leq j \leq m \right\},$$

der als konvexe Hülle der kanonischen Basis dargestellt werden kann. Durch Angabe von $p \in \Delta$ ist eine Verteilung vollständig bestimmt. Jedoch werden Verteilungsfamilien auch gern als Parametrisierungen eines Parameterraumes Θ angegeben. Dies wird im Folgenden am Beispiel der torischen Modelle demonstriert. Sei $A \in \mathbb{N}_0^{d \times m}$ eine Matrix mit natürlichen Einträgen und der technischen Bedingung, dass $(1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^m$ im Aufspann der Zeilen enthalten ist und sei $h \in \mathbb{R}_{>0}^m$ ein Vektor. Die Bedingung an die Matrix A werden von allen relevanten Modellen erfüllt. Diese Einschränkung wird in Beobachtung 3.2.2 wieder aufgegriffen und erläutert.

Definition 3.1.1 ***(Torisches Modell).*** *Sei $\Theta = \mathbb{R}_{>0}^d$ der zu einem statistischen Modell zugehörige Parameterraum und $\Phi^{A,h}$ eine polynomielle Parametrisierung folgender Gestalt:*

$$\Phi^{A,h} : \Theta \to \mathbb{R}^m, \qquad \Phi_j^{A,h}(\theta) := h_j \prod_{i=1}^{d} \theta_i^{a_{ij}}.$$

Die Menge

$$M_{A,h} := \Phi^{A,h}(\Theta) \cap \Delta_m$$

wird als torisches statistisches Modell bezeichnet.

Für $m < d$ führt die Parametrisierung zu einer Reduktion der freien Parameter. Anstatt $\mathbb{R}^m$ werden auch gerne $\mathbb{R}^{m_1 \times m_2}$ oder andere Produkte zugelassen. Für $\mathbb{R}^{m_1 \times m_2}$ wird dann die Matrix $A \in \mathbb{N}_0^{d \times m_1 m_2}$ betrachtet. Äquivalent zu dieser Definition ist folgende:

Definition 3.1.2 ***(Torisches Modell).*** *Sei* $\Theta = \mathbb{R}^d_{>0}$ *und sei* $\hat{\Phi}^{A,h}$ *als rationale Parametrisierung mit*

$$\hat{\Phi}^{A,h} : \Theta \to \mathbb{R}^m, \qquad \hat{\Phi}^{A,h}_j(\theta) := Z(\theta)^{-1} \cdot h_j \cdot \prod_{i=1}^{d} \theta_i^{a_{ij}}$$

erklärt, wobei mit

$$Z(\theta) := \sum_{j=1}^{m} h_j \prod_{i=1}^{d} \theta_i^{a_{ij}}$$

die Normalisierungskonstante gemeint ist. Das torische Modell ist nun $M_{A,h} := \hat{\Phi}^{A,h}(\Theta)$.

Diese Modelle sind, wenn auch nicht auf den ersten Blick ersichtlich, allgemein geläufig. Aufgabe der Modellierung ist es, $\Phi^{A,h}$ geeignet zu wählen, um damit die Klasse der Parameter entsprechend den Modellannahmen einzuschränken. Die Modelle sind bei festem Stichprobenumfang alle Multinomialmodelle, deren Parameter zusätzliche Bedingungen erfüllen. Eine ausführliche Behandlung der unterschiedlichen Schemata (multinomial, produktmultinomial, poisson) findet sich in [BFH75], Kapitel 3.2.

Beispiel 3.1.3 ***(Bernoulliexperiment).*** *Hier ist* $\Theta = \mathbb{R}^2_{>0}$. *Sei* A *eine* $2 \times (m+1)$ *Matrix mit*

$$A := \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & \dots & m-1 & m \\ m & m-1 & m-2 & \dots & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Wird $h_i = \binom{m}{i}$ *für* $i = 0, 1 \dots, m$ *gesetzt, ergibt sich für das Modell* $M_{A,h}$:

$$\hat{\Phi}^{A,h}_j = Z(\theta)^{-1} \binom{m}{j} \theta_1^j \theta_2^{m-j}.$$

Da aber

$$Z(\theta) = \sum_{j=0}^{m} \binom{m}{j} \theta_1^j \theta_2^{m-j} = (\theta_1 + \theta_2)^m,$$

kann das Modell dargestellt werden als

$$\hat{\Phi}^{A,h}_j = \binom{m}{j} \Big(\frac{\theta_1}{\theta_1 + \theta_2}\Big)^j \Big(\frac{\theta_2}{\theta_1 + \theta_2}\Big)^{m-j}.$$

Eine Substitution mit $\theta := \theta_1/(\theta_1 + \theta_2)$ *und* $1 - \theta := \theta_2/(\theta_1 + \theta_2)$ *ergibt die vertraute Form des Modells mit* $\theta \in [0, 1]$.

Beispiel 3.1.4 ***(stochastische Unabhängigkeit zweier Zufallsvariablen).*** *Sei* $\Theta = \mathbb{R}^{m_1 \times m_2}_{>0}$ *der zu zwei diskreten Zufallsvariablen* X_1 *und* X_2 *gehörende Parameterraum. Mit* $h = (1, \dots, 1)$ *und der* $(m_1 + m_2) \times m_1 m_2$*-dimensionalen Matrix* A *mit der Gestalt*

$$A = \begin{pmatrix} E_{m_1} & \otimes & 1_{m_2} \\ 1_{m_1} & \otimes & E_{m_2} \end{pmatrix},$$

wobei $\otimes$ das Kroneckerprodukt darstellt. Der Vektor $1_{m_1} \in \mathbb{R}^{1\times m_1}$ besitzt nur Einsen als Einträge, ebenso $1_{m_2} \in \mathbb{R}^{1\times m_2}$. Die Matrizen $E_{m_1} \in \mathbb{R}^{m_1\times m_1}$ und $E_{m_2} \in \mathbb{R}^{m_2\times m_2}$ sind die entsprechenden Einheitsmatrizen. Mit Parametern $\alpha := (\alpha_1, \dots, \alpha_{m_1})$ für die erste Zufallsvariable und $\beta := (\beta_1, \dots, \beta_{m_2})$ für die zweite hat das torische Modell nun die Gestalt $\hat{\Phi}^A_{ij} = Z(\alpha,\beta)^{-1}\alpha_i\beta_j$, mit der Normierungskonstanten

$$Z(\alpha,\beta) = \sum_{i=1}^{m_1}\sum_{j=1}^{m_2}\alpha_i\beta_j = \left(\sum_{i=1}^{m_1}\alpha_i\right)\left(\sum_{j=1}^{m_2}\beta_j\right).$$

Für das beschriebene Modell ergibt sich die Darstellung

$$\hat{\Phi}^A_{ij}(\alpha,\beta) = \frac{\alpha_i}{\sum_{i=1}^{m_1}\alpha_i}\frac{\beta_j}{\sum_{j=1}^{m_2}\beta_j}.$$

Eine Substitution mit $\hat{\alpha}_i := \alpha_i / \sum_{i=1}^{m_1}\alpha_i$ und $\hat{\beta}_j := \beta_j / \sum_{j=1}^{m_1}\beta_j$ ergibt die gewohnte Form des Unabhängigkeitsmodells; die Parametermenge ist nun $\Delta_{m_1} \times \Delta_{m_2}$.

Ist etwa $m_1 = 2$ und $m_2 = 3$, wird das Unabhängigkeitsmodell durch die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

präsentiert. Jede Spalte steht für einen Eintrag der 2×3 Kontingenztafel, beispielsweise steht die dritte Spalte für den $(1,3)$-Eintrag. Für dieses Modell ist $\hat{\Phi}^A : \mathbb{R}^5_{>0} \to \mathbb{R}^{2\times 3}_{>0}$ gegeben durch

$$(\alpha_1,\alpha_2,\beta_1,\beta_2,\beta_3) \mapsto \frac{1}{(\alpha_1+\alpha_2)(\beta_1+\beta_2+\beta_3)}\begin{pmatrix} \alpha_1\beta_1 & \alpha_1\beta_2 & \alpha_1\beta_3 \\ \alpha_2\beta_1 & \alpha_2\beta_2 & \alpha_2\beta_3 \end{pmatrix}.$$

Eine äquivalente Darstellung für torische Modelle ergibt sich durch Logarithmieren. Sei $h' := (\ln(h_1), \dots, \ln(h_m))$ und $\theta' := (\ln(\theta_1), \dots, \ln(\theta_d))$.

Definition 3.1.5 ***(Loglineares Modell).*** *Sei $\Theta = \mathbb{R}^d$ diesmal der gesamte Raum und eine Matrix A mit den genannten Eigenschaften. Das Loglineare Modell für eine Verteilung ist*

$$\ln(p_j) = h'_j + \sum_{i=1}^{d} a_{ij}\theta'_i.$$

Ein weiteres geläufiges Modell ist das Exponentialmodell für eine Menge $\mathcal{X}$, welches im weiteren die Nomenklatur liefert.

Definition 3.1.6 ***(diskretes Exponentialmodell).*** *Die Gesamtheit aller Dichten, welche in faktorieller Form die Gestalt*

$$\mathbb{P}_\theta(x) = h(x)\exp(\theta^t T(x) - B(\theta))$$

annehmen, mit einer Normierungskonstanten $B(\theta)$,$\theta \in \Theta = \mathbb{R}^d$, Abbildungen $T : \mathcal{X} \to \mathbb{N}_0^d$ und $h : \mathcal{X} \to \mathbb{R}_{>0}$, wird als d-parametrische Exponentialfamilie bezeichnet.

Beobachtung 3.1.7 *Es sei $\mathcal{X}$ endlich. Ein Modell ist genau dann torisch, wenn es exponentiell ist.*

Beweis: Zur Darstellung sei $\mathcal{X} = \{x_1, \ldots, x_m\}$. Setze $T(x_j) := a_j$ und $A := [a_1, \ldots, a_m]$ und $Z(\theta) := \exp(-B(\theta))$. Da $\#\mathcal{X} < \infty$ kann die Abbildung h als Vektor der Länge m dargestellt werden. Es ist

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}_\theta(x_j) &= h(x_j)\exp(\theta^t T(x_j) - B(\theta)) \\
p_j &= Z(\theta) h_j \exp(\theta^t T(x_j)) \\
&= Z(\theta) h_j \prod_{1=1}^{d} (e^{\theta_i})^{a_{ij}}.
\end{aligned}$$

Eine Substitution mit $\theta_i' := \exp(\theta_i)$, $1 \leq i \leq d$ liefert das gewünschte Resultat.

□

Weitere detaillierte Modellbeschreibungen für diskrete Daten, die unter obige Modelbeschreibung fallen, wie etwa die der Symmetrie in Kontingenztafeln, Quasisymmetrie und marginale Homogenität werden etwa in [Agr07] behandelt. In [BFH75] finden sich Modelle für Quasiunabhängigkeit, hierzu ist auch die Fallstudie [DM04a] erwähnenswert.

3.2 Suffizienz und Konditionierung

In diesem Kapitel wird ein klassisches Resultat aus der Exponentialfamilie angeführt. Es wird gezeigt, dass eine einfachere Statistik, nämlich $T : \mathcal{X} \to \mathbb{N}_0^d$ beziehungsweise die Matrix $A : \mathbb{N}_0^m \to \mathbb{N}_0^d$ alle Information über den Parameter $\theta \in \Theta$ enthält. Die gesamte Unsicherheit über θ kann schon anhand T modelliert werden. Um dies zu illustrieren, werden für u.i.v. $\mathcal{X}$-wertige Zufallsvariablen $X_1, \ldots, X_N$ aus der Exponentialfamilie Realisierungen $x_1, \ldots, x_N \in \mathcal{X}$, auch Stichproben genannt, beobachtet. Es sei mit $Z := (X_1, \ldots, X_N) : \Omega^N \to \mathcal{X}^N$ ein Zufallselement erklärt. Die Wahrscheinlichkeit für einen Stichprobenvektor $(x_1, \ldots, x_N) \in \mathcal{X}^N$ beträgt für ein unbekanntes $\theta \in \Theta$ somit

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}_\theta(Z = (x_1, \ldots, x_N)) &= \prod_{k=1}^{N} h(x_k)\exp\left(\theta^t T(x_k) - B(\theta)\right) \\
&= \left(\prod_{k=1}^{N} h(x_k)\right) \exp(\langle \theta, \sum_{j=1}^{N} T(x_j)\rangle - NB(\theta)).
\end{aligned}$$

Die Struktur dieser Likelihood ermöglicht folgendes Resultat, was sich in dieser Diplomarbeit als wichtiges Bindeglied zwischen der kommutativen Algebra und der Statistik erweisen wird.

Satz 3.2.1 *Die Wahrscheinlichkeit für den Zufallsvektor $Z := (X_1, \ldots, X_N)$ ist bei gegebenem $T_N(Z) :=\sum_{k=1}^{N} T(X_k)$ unabhängig von $\theta \in \Theta$. Dies besagt, dass $T_N(Z)$ eine suffiziente Statistik für θ ist. Gilt $h = (1, \ldots, 1)$, ergibt sich eine Gleichverteilung unter allen Elementen mit derselben Realisierung der suffizienten Statistik.*

Beweis: Für ein gegebenes $b \in \mathbb{N}_0^d$ sei

$$\mathcal{R}_b := \left\{ (x_1, \ldots, x_N) \in \mathcal{X}^N : \sum_{i=1}^{N} T(x_i) = b \in \mathbb{N}^d \right\}$$

die Menge der N Beobachtungen, die dieselbe Realisierung der suffizienten Statistik besitzen. Ist $\mathbb{P}_\theta(T_N(Z) = b) > 0$, dann ist für beliebige $z := (x_1, \ldots, x_N) \in \mathcal{X}^N$ mit $T_N(z) = b$

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}_\theta(Z = z \mid T_N(Z) = b) &= \frac{e^{(\langle \theta, T_N(z)\rangle - NB(\theta))} \left(\prod_{k=1}^{N} h(x_k) \right)}{e^{(\langle \theta, b\rangle - NB(\theta))} \sum_{\{y \in \mathcal{X}^N \,|\, T_N(y) = b\}} \prod_{k=1}^{N} h(y_k)} \\
&= \frac{\prod_{k=1}^{N} h(x_k)}{\sum_{\{y \in \mathcal{X}^N \,|\, T_N(y) = b\}} \prod_{k=1}^{N} h(y_k)}
\end{aligned}$$

und gleich 0 für $T_N(z) \neq b$. Ist $h = (1, \ldots, 1)$, vereinfacht sich der letzte Ausdruck zu

$$\frac{1}{\# \{ z \,|\, T_N(z) = b \}} = \frac{1}{\# \mathcal{R}_b}.$$

([Wit74] S.331, [Rap03], [Agr07] Kapitel 6.7.1)

□

Lesenswert ist in diesem Kontext auch Kapitel 3 in [BFH75]. Wie später ersichtlich wird, genügt es bei der algebraischen Betrachtung nur Modelle mit einem Vektor $h = (1, \ldots, 1)$ zu betrachten. Der allgemeine Fall kann daraus durch eine geeignete Substitution abgeleitet werden. Deshalb wird nun davon ausgegangen, dass etwa Gleichverteilung auf $\mathcal{R}_b$ besteht. Es ist im Allgemeinen schwierig von dieser (Gleich-)Verteilung auf $\mathcal{R}_b$ Stichproben zu generieren. Folgender Ansatz ist dafür hilfreich: Sei als Referenzmenge die Menge

$$\mathcal{S}_b := \left\{ u : \mathcal{X} \to \mathbb{N}_0 : \sum_{x \in \mathcal{X}} u(x) T(x) = b \in \mathbb{N}^d \right\}$$

bezeichnet. Es existiert eine natürliche Einbettung $\pi : \mathcal{R}_b \to \mathcal{S}_b$, welche durch folgende Formel gegeben ist:

$$\pi(x_1, \ldots, x_N) := \sum_{x \in \mathcal{X}} e_x \sum_{i=1}^{N} 1_{\{x_i = x\}}.$$

Diese Abbildung zählt die Daten. Entspricht $\mathcal{X}$ wie bei dem Unabhängigkeitsmodell der Menge der Koordinaten, bedeutet dies, dass π eine Kontingenztafel erstellt. Hier stellt $\{e_x, x \in \mathcal{X}\}$ die kanonische Basis des $\mathbb{R}^m$ dar. Wird von einer Ordnung auf $\mathcal{X}$ ausgegangen, lässt sich $u : \mathcal{X} \to \mathbb{N}_0$ als Vektor beschreiben, was die Notation angenehmer gestaltet. Somit ist

$$\mathcal{S}_b = \left\{ u \in \mathbb{N}_0^m : Au = b \in \mathbb{N}_0^d \right\}.$$

Beobachtung 3.2.2 *Die im vorherigen Kapitel gestellte Bedingung, dass* $(1, \ldots, 1) \in \mathbb{N}^m$ *im Zeilenraum von* A *liegt, garantiert zum Einen, dass aus einem gegebenen* b *der Stichprobenumfang rekonstruiert werden kann, welcher den Koordinatensummen entspricht. Desweiteren haben alle Elemente aus* $\mathcal{S}_b$ *denselben Stichprobenumfang. Ausserdem ist jede Spalte* a_i *von* A *ungleich Null, da sonst jede Linearkombination der Zeilen im i-ten Eintrag eine Null stehen hätte. Stets ist* $\#\mathcal{S}_b < \infty$. *Da man ausgehend von einem beobachteten Vektor* $u \in \mathbb{N}_0^m$ *die Menge* $\mathcal{S}_b$ *definiert, ist* $\mathcal{S}_b \neq \emptyset$.

Beweis: Es ist nur noch die erste Aussage zu zeigen. Liegt $(1, \ldots, 1)$ im Zeilenraum von A, dann gibt es ein Produkt $Q \in \mathbb{R}^{d \times d}$ von Elementarmatrizen (siehe dazu [Fis05]) derart, dass etwa die erste Zeile von $Q \cdot A$ identisch ist mit $(1, \ldots, 1)$. In der ersten Zeile von $Q \cdot A \cdot u$ steht nun der Stichprobenumfang N. Ist umgekehrt ein $b \in \mathbb{N}_0^d$ gegeben, kann, dann ist der erste Eintrag von $Q \cdot b$ gleich dem Stichprobenumfang.

□

Es werden auch andere Darstellungsweisen von $\mathcal{S}_b$ zugelassen.

Beispiel 3.2.3 *Für das Unabhängigkeitsmodell in* 3×3 *Matrizen entspricht* $\mathcal{X}$ *der Menge* $\{(i, j) \ : \ 1 \leq i, j \leq 3\}$. *Die Struktur von der modellbeschreibenden Matrix* A *lässt erkennen, dass* $b \in \mathbb{N}_0^6$ *der zusammengesetzte Vektor aus der Zeilen- und Spaltensumme der Kontingenztafel ist. Die Referenzmenge ist somit die Menge aller Matrizen mit identischer Zeilen und Spaltensumme. Sei beispielsweise die Einheitsmatrix* $E_3 \in \mathbb{N}_0^{3 \times 3}$ *die beobachtete Kontingenztafel* u, *dann ist* $b = (1, 1, 1, 1, 1, 1)^t$. *Die Referenzmenge lässt sich explizit angeben:*

$$\mathcal{S}_b = \left\{ E_3, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \right\}.$$

Um das Bild von A zu berechnen ist es erforderlich, Daten (im Unabhängigkeitsmodell Kontingenztafeln) in vektorieller Form zu verwenden. Jedoch ist es bei der Darstellung von $\mathcal{S}_b$ angebracht Kontingenztafeln in Matrixform zu betrachten. Aus Gründen der

Übersichtlichkeit wird, da Verwechslungen ausgeschlossen sind, auf diese formale Unterscheidung im Folgenden verzichtet.

Es ist noch zu klären, welche Verteilung das durch π auf $\mathcal{S}_b$ induzierte Bildmaß annimmt.

Satz und Definition 3.2.4 ***(Hypergeometrische Verteilung)***. *Das Bildmaß $\mathbb{H}_b$ von $\mathbb{P}(\bullet \,|\, T_N = b)$ unter π ist gegeben durch*

$$\frac{N!}{\#\mathcal{R}_b} \prod_{x \in \mathcal{X}} (u(x)!)^{-1}.$$

Dieses Bildmaß wird als die hypergeometrische Verteilung bezeichnet.

Beweis: Betrachtet wird das zu dem Stichprobenvektor

$$z = (x_1, \ldots, x_N) \in \mathcal{X}^N$$

gehörige Bild $u := (u_1, \ldots u_m)^t \in \mathbb{N}_0^m$ unter der Abbildung π. Es ist zu sehen, dass das Bild jeder der $N!$ Umordnungen von z zu demselben Vektor u führt. Es gibt aber $(u_1! \cdots u_m!)$ viele Permutationen unter denen z sich nicht ändert. Für die Gesamtzahl an Permutationen gilt:

$$N! = (u_1! \cdots u_m!) \cdot k,$$

wobei k die Anzahl der Permutationen ist unter denen z nicht invariant bleibt. Folglich gibt es genau

$$\frac{N!}{u_1! \cdots u_m!}$$

unterschiedliche Stichproben, die denselben Datenvektor $u \in \mathbb{N}_0^m$ erzeugen. Für $\mathbb{H}_b$ ergibt sich:

$$\mathbb{H}_b(u) := \mathbb{P}(\pi^{-1}(u) \mid Au = b) = \frac{\#\left\{z \in \mathcal{X}^N \mid \pi(z) = u\right\}}{\#\mathcal{R}_b} = \frac{N!}{\#\mathcal{R}_b} \prod_{i=1}^{m} (u_i!)^{-1}.$$

(vgl. [Rap03])

□

Alle Elemente der Referenzmenge besitzen die selbe Realisierung der suffizienten Statistik. Es ist zu sehen, dass der Schwachpunkt die Berechnung der bedingten Verteilung darstellt. Nach dem nun folgenden Exkurs zur Maximum-Likelihood-Schätzungen wird ersichtlich, inwiefern ein Metropolis-Sampler bezüglich der hypergeometrischen Verteilung verwendet werden kann um Hypothesen zu überprüfen. Wie bereits in Abschnitt 2.7 erwähnt, ist dafür der im Allgemeinen unbekannte Faktor $\frac{N!}{\#\mathcal{R}_b}$ irrelevant.

3.3 Maximum Likelihood Schätzungen

Im Hinblick auf die Überprüfung einer Nullhyphothese ist es erforderlich, Maximum-Likelihood Schätzungen der Parameter unter einem Modell H_0 zu berechnen. Dass diese Schätzungen innerhalb eines torischen Modells wohldefiniert sind, ist die zentrale Aussage dieses Abschnittes. Stichproben $x_1, \ldots, x_N \in \mathcal{X}$ werden wie im Beweis von Satz 3.2.4 gezählt. Wir wechseln die Notation und beschreiben die (bedingte) Likelihood $L_{u_1,\ldots,u_m} : \Theta \to [0,1]$ für Zähldaten $u_1, \ldots, u_m \in \mathbb{N}_0$ mit $\sum_{i=1}^m u_i = N$ als

$$\begin{aligned} L_{u_1,\ldots,u_m}(\theta) &= \frac{N}{u_1! \cdots u_m!} \Phi_1(\theta)^{u_1} \cdots \Phi_m(\theta)^{u_m} \\ &\propto \frac{N}{u_1! \cdots u_m!} \prod_{i=1}^{d} \prod_{j=1}^{m} \theta_i^{a_{ij} u_j} \\ &\propto \prod_{i=1}^{d} \theta_i^{a_{i1}u_1 + \ldots, a_{im}u_m} =: \theta^{Au}. \end{aligned} \tag{3.1}$$

Diesen Ausdruck gilt es nun unter der Nebenbedingung $\sum_{j=1}^m h_j \theta^{a_j} = 1$ zu maximieren. Ohne Einschränkung wird zur besseren Übersichtlichkeit die Nebenbedingung $\sum_{j=1}^m \theta^{a_j} = 1$ verwendet, der allgemeine Fall folgt analog.

Satz 3.3.1 *Sei ein torisches Modell $M_{A,h}$ und Zähldaten u mit $\sum_{i=1}^m u_i = N$ samt einer Realisierung $b = Au$ der suffizienten Statistik gegeben. Sei weiter $\hat{p} := \Phi(\hat{\theta})$ ein beliebiges lokales Maximum des genannten Optimierungsproblems. Es gilt:*

$$A \cdot \hat{p} = \frac{1}{N} \cdot b.$$

Beweis: Wie für Maximierung unter Nebenbedingungen üblich, wird die Lagrangesche Multiplikatorenregel angewandt. Jede Lösung des Optimierungsproblems ist auch eine von

$$M_\theta := \theta^b + \lambda \cdot (1 - \sum_{j=1}^m \theta^{a_j}).$$

Ableiten und Multiplikation mit θ_k ergibt für θ^b :

$$\theta_k \cdot \frac{\partial}{\partial \theta_k} \theta^b = b_k \cdot \theta^b, \qquad 1 \leq k \leq m.$$

Entsprechend wird mit $(1 - \sum_{j=1}^m \theta^{a_j})$ verfahren. Es ist

$$\theta_k \frac{\partial}{\partial \theta_k} \sum_{j=1}^m \theta^{a_j} = \sum_{j1}^m a_{kj} \theta^{a_j}, \qquad 1 \leq k \leq m.$$

Nullsetzen von $\nabla_\theta M_\theta$ beziehungsweise $\langle \theta, \nabla_\theta M_\theta \rangle$ liefert für die ML-Schätzung $\hat{\theta}$ folgende Bedingung:

$$(\hat{\theta})^b \cdot b = \lambda \cdot \sum_{j=1}^{m} (\hat{\theta})^{a_j} \cdot a_j = \lambda \cdot A \cdot \hat{p}.$$

Somit ist $A \cdot \hat{p}$ ein skalares Vielfaches des Vektors $b = Au$. Da nach Vorraussetzung der Vektor $(1, \ldots, 1)$ im Zeilenraum der Matrix A liegt, lässt sich der Stichprobenumfang rekonstruieren. Da sich die Wahrscheinlichkeiten zu Eins addieren, ist der Skalar λ' in der Gleichung

$$b = Au = \lambda' A\hat{p}$$

genau der Stichprobenumfang $\sum_{j=1}^{m} u_j = N$. ([PS05] S.9f)

□

Für ein Modell $A \in \mathbb{N}_0^{d \times m}$ und einen Vektor $b \in \mathbb{N}_0^d$ setze:

$$P_A(b) := \left\{ p \in \mathbb{R}^m \; : \; A \cdot p = \frac{1}{N} \cdot b \quad \wedge \quad p_j > 0, \, 1 \leq j \leq m \right\};$$

die Menge der potentiellen ML-Schätzungen für eine Stichprobe.

Satz 3.3.2 ***(Eindeutigkeit der ML-Schätzung).*** *Für ein torisches Modell A sei u der echt positive Stichprobenvektor und b=Au die Realisierung der suffizienten Statistik $A : \mathbb{N}_0^m \to \mathbb{N}_0^d$. Der Schnitt von $P_A(b)$ und dem torischen Modell $\Phi^A(\mathbb{R}_{>0}^d)$ besteht aus genau einem einzigen Punkt. Dieser ist die ML-Schätzung $\hat{p}$ für die Daten u.*

Beweis: Betrachtet wird im Folgenden die als Entropiefunktion bezeichnete Abbildung

$$H : \mathbb{R}_{\geq 0}^m \to \mathbb{R}_{\geq 0}, \qquad (p_1, \ldots, p_m) \mapsto -\sum_{i=1}^{m} p_i \ln(p_i),$$

mit der Konvention $p_i \cdot \ln p_i := 0$ für $p_i = 0$. Die Hessematrix $(\partial^2/\partial p_i \partial p_j)$ ist eine Diagonalmatrix mit Diagonaleinträgen $-1/p_1, \ldots, -1/p_m$. Somit ist die Funktion streng konkav auf $\mathbb{R}_{>0}^m$:

$$H(\lambda p + (1-\lambda)q) > \lambda H(p) + (1-\lambda)H(q), \qquad p \neq q \quad \wedge \quad 0 < \lambda < 1.$$

Nicht nur die Funktion H, sondern auch ihre Einschränkung auf das Polytop $P_A(b)$ nimmt ihr eindeutig bestimmtes Maximum in einem Punkt $p^* := (p_1^*, \ldots, p_m^*) \in P_A(b)$ an. Für $u \in \ker(A)$ verschwinden die partiellen Ableitungen an dem Punkt p^* im folgenden Sinne:

$$u_1 \cdot \frac{\partial H}{\partial p_1}(p^*) + \ldots + u_m \cdot \frac{\partial H}{\partial p_m}(p^*) = 0. \tag{3.2}$$

Die Ableitung von $x \cdot \ln(x)$ ist $\ln(x) + 1$. Da sich $(1, \ldots, 1)$ im Zeilenraum von A befindet, folgt mit vorheriger Gleichung für $u \in \ker(A)$:

$$0 = \sum_{j=1}^{m} u_j \ln(p_j^*) + \sum_{j=1}^{m} u_j = \sum_{j=1}^{m} u_j \ln(p_j^*),$$

was impliziert, dass $(\ln(p_1^*), \ldots, \ln(p_m^*))$ ebenso im Zeilenraum von A liegt. Sei etwa $\sum_{i=1}^d \nu_i^* a_{ij} = \ln(p_j^*)$ für $j = 1, \ldots, m$. Durch Setzung von $\theta_i^* := \exp(\nu_i^*)$ für alle $i = 1, \ldots, d$ erhält man schließlich:

$$p_j^* = \prod_{i=1}^d \exp(\nu_i^* a_{ij}) = \prod_{i=1}^d \theta_i^{*a_ij} = (\theta^*)^{a_j}.$$

Somit ist $p^* = \Phi^A(\theta^*)$ für ein geeignetes $\theta^* \in \mathbb{R}_{>0}^d$ und der Schnitt ist nicht leer. Angenommen es gäbe einen Punkt q mit $p^* \neq q \in P_A(b) \cap \Phi(\mathbb{R}_{>0}^d)$. Wegen der strengen Konkavität von H würde für diesen Punkt q folgen, dass er identisch mit p^* wäre; ein Widerspruch.
Diese Eindeutigkeit liefert für die Optimierung aus Satz (3.3.1), dass $\hat{p} = p^*$ und $\hat{\theta}^* = \theta^*$. ([PS05] S.9f, [Agr07] S. 336)

□

Beispiel 3.3.3 *Es sei* $u = (u_{ij}) \in \mathbb{N}_0^{m_1 \times m_2}$ *die beobachtete Kontingenztafel. Die ML-Schätzung im Unabhängigkeitsmodell für die Parametervektoren* $\alpha \in \mathbb{R}_{>0}^{m_1}$ *und* $\beta \in \mathbb{R}_{>0}^{m_2}$ *sind durch die normalisierten Zeilen- und Spaltensummen*

$$\hat{\alpha}_i = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{m_2} u_{ij} \quad \textit{und} \quad \hat{\beta}_k = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{m_1} u_{jk}, \quad i = 1, \ldots, m_1; k = 1, \ldots, m_2$$

gegeben.

Beweis: Ohne Einschränkung wird der Beweis am Beispiel $m_1 = 2, m_2 = 3$ durchgeführt. Betrachte die Parametrisierung Φ^A zu dem Unabhängigkeitsmodell aus 3.1.4. Da $\alpha_2 = 1 - \alpha_1$ und $\beta_3 = 1 - \beta_2 - \beta_1$, kann folgende Parametrisierung betrachtet werden:

$$(\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2, \beta_3) \mapsto \begin{pmatrix} \alpha_1\beta_1 & \alpha_1\beta_2 & \alpha_1(1-\beta_1-\beta_2) \\ (1-\alpha_1)\beta_1 & (1-\alpha_1)\beta_2 & (1-\alpha_1)(1-\beta_1-\beta_2) \end{pmatrix}.$$

Es ergibt sich für die Log-Likelihoodfunktion $L_u(\alpha, \beta)$ bezüglich u, dass

$$\begin{aligned} L_u(\alpha,\beta) &= (u_{11}+u_{12}+u_{13})\log(\alpha_1) + (u_{21}+u_{22}+u_{23})\log(1-\alpha_1) \\ &+ (u_{11}+u_{21})\log(\beta_1) + (u_{12}+u_{22})\log(\beta_2) + (u_{13}+u_{23})\log(1-\beta_2-\beta_1). \end{aligned}$$

Für die Ableitung von $L_u(\alpha, \beta)$ bezüglich α_1 ergibt sich, dass

$$\frac{\partial L_u}{\partial \alpha_1} = \frac{u_{11}+u_{12}+u_{13}}{\alpha_1} - \frac{u_{21}+u_{22}+u_{23}}{1-\alpha_1}$$

gilt. Nullsetzen dieser partiellen Ableitung ergibt

$$\hat{\alpha}_1 = \frac{u_{11}+u_{12}+u_{13}}{u_{11}+u_{12}+u_{13}+u_{21}+u_{22}+u_{23}} = \frac{1}{N}(u_{11}+u_{12}+u_{13}).$$

In völliger Analogie ergeben sich für $\frac{\partial L_u}{\partial \beta_1}$ und $\frac{\partial L_u}{\partial \beta_2}$ nach Nullsetzen die ML-Schätzungen

$$\hat{\beta}_1 = \frac{1}{N}(u_{11} + u_{21}) \quad \text{und} \quad \hat{\beta}_1 = \frac{1}{N}(u_{12} + u_{22}).$$

([Stu96] S.16)

□

Im Allgemeinen kann es höchstgradig nichttrivial sein die ML-Schätzungen zu berechnen. Es empfiehlt sich, sofern möglich, auf bekannte Resultate auf zu bauen. Für praktische Problemstellungen werden auch gern iterative Methoden wie etwa die von Newton-Raphson oder die Fisher-Scoring-Methode zur Berechnung herangezogen; siehe etwa [Agr07], [MN89]. In [HKS04] wird eine algebraische Betrachtung vorgeschlagen.

3.4 Überprüfen der Anpassungsgüte

Sind Daten $u \in \mathbb{N}_0^m$ gegeben, ist eine klassische Frage, inwiefern sie einem bestimmten algebraisch statistischen Modell entsprechen. Für die Überprüfung einer Nullhypothese $M_{A,h}$ ergibt sich die Überlegung, inwiefern die Daten unter allen theoretischen Daten mit der selben Realisierung der suffizienten Statistik (der Referenzmenge) verglichen werden können.

Definition 3.4.1 ***(Verallgemeinerter bedingter p-Wert).*** *Sei $u \in \mathbb{N}_0^m$ mit $Au = b$ gegeben. Ein bedingter p-Wert ist ein Erwartungswert der Form*

$$\mathbb{E}_{\mathbb{H}_b}[g(v)], \qquad v \in \mathcal{S}_b,$$

mit einer Funktion $g : \mathcal{S}_b \to [0,1]$.

Beispiel 3.4.2 ***(Bedingter p-Wert).*** *Setze $g(v) := 1_{\{\mathbb{H}_b(v) \leq \mathbb{H}_b(u)\}}(v)$ als die Indikatorfunktion auf $\mathcal{S}_b$, die alle Elemente zählt, welche unter der hypergeometrischen Verteilung eine geringere Wahrscheinlichkeit als u besitzen. Der Erwartungswert*

$$\mu = \mathbb{E}_{\mathbb{H}_b}[1_{\{\mathbb{H}_b(v) \leq \mathbb{H}_b(u)\}}(v)]$$

wird als exakter p-Wert bezeichnet.

Beispiel 3.4.3 ***(p-Wert des χ^2-Testes).*** *Sei*

$$h(v) = \sum_{j=1}^{m} \frac{(\hat{u}_j - v_j)^2}{\hat{u}_j}$$

die Pearson χ^2-Teststatistik wobei $\hat{u}_j$ die Maximum-Likelihood-Schätzung unter der Nullhypothese $M_{A,h}$ darstellt. Sei $g(v) := 1_{\{h(v) \geq h(u)\}}(v)$, dann ist $\mu = \mathbb{E}_{\mathbb{H}_b}[1_{\{h(v) \geq h(u)\}}(v)]$ der p-Wert des χ^2-Tests. Er beschreibt die Wahrscheinlichkeit, dass die Daten unter H_0 bei gegebenem $T_N(z) = b$ stärker von der ML-Schätzung abweichen als die beobachteten.

Für die Berechnung eines p-Wertes ist es notwendig, $\mathcal{S}_b$ vollständig zu bestimmen. Dieser Themenkreis wird in [Stu95] behandelt. Eine weitere Herangehensweise ist der in [MP83] angeführte Netzwerkalgorithmus. Die komplette Berechnung von $\mathcal{S}_b$ bietet sich aber nur in einigen Sonderfällen an, da die Mächtigkeit dieser Menge in relevanten Fällen meist astronomische Größen annimmt. Deshalb erscheint es sinnvoll eine Methodik zu entwickeln, welche entlang der hypergeometrischen Verteilung Zufallselemente $\gamma_1, \ldots, \gamma_M \in \mathcal{S}_b$ generiert, was äquivalent dazu ist, gleichverteilte Stichproben aus $\mathcal{R}_b$ zu generieren. Die Schätzung

$$\hat{\mu} := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{M} g(\gamma_i)$$

ist dann ein unverfälschter Schätzer für $\mu = \mathbb{E}_{\mathbb{H}_b}[g(v)]$. (vgl [Sul])

Im Hinblick auf die Anwendung des Metropolis-Samplers muss die Möglichkeit eines irreduziblen, aperiodischen Spazierganges auf $\mathcal{S}_b$ geschaffen werden.

Definition 3.4.4 ***(Markovbasis).*** *Gelte für eine Menge von Vektoren $f_1, \ldots, f_L \in \mathbb{Z}^d$:*

$$Af_l = 0, \qquad 1 \leq l \leq L \tag{3.3}$$

und für beliebige Elemente $u, v \in \mathbb{N}_0^m$ mit $Au = Av$ sei eine endliche Schrittfolge $(\epsilon_1, f_{i_1}), \ldots, (\epsilon_k, f_{i_k})$ mit $e_j = \pm 1, j = 1, \ldots, k$ gegeben, derart, dass

$$v = u + \sum_{j=1}^{k} \epsilon_j f_{i_j} \qquad \text{und} \qquad u + \sum_{j=1}^{l} \epsilon_j f_{i_j} \geq 0, \qquad 1 \leq l \leq k \tag{3.4}$$

*so bezeichnet man $MB := \{f_1, \ldots, f_L\}$ als **Markovbasis**.*

Pfade werden auch in der Gestalt

$$u,\ u_1 := u - \epsilon_1 f_{i_1},\ u_2 := u - \epsilon_1 f_{i_1} - \epsilon_2 f_{i_2}, \ldots, u_k := v$$

mit $u_i \in \mathcal{S}_b$ angegeben.
Die Grundlagen zur Berechnung solcher Markovbasen für torische Modelle werden in dem Kapitel über den Diaconis-Sturmfels-Algorithmus geschildert. Angenommen, man hätte schon eine Markovbasis, dann hat der Metropolis-Sampler folgende Gestalt:

Satz 3.4.5 ***(Modifizierter Metropolis Sampler).*** *Folgender Algorithmus beschreibt einen symmetrischen, irreduziblen und aperiodischen Markovprozess:*

Initiiere die Kette mit einem beliebigen Element $u^{(0)} \in \mathcal{S}_b$.

Für $k = 0, 1, \ldots, n$:

- *Wähle mit Wahrscheinlichkeit* $\frac{1}{L}$ *ein* $f_l \in MB$.
- *Wähle mit Wahrscheinlichkeit* $\frac{1}{2}$ *ein Vorzeichen* $\epsilon \in \{-1, +1\}$.
- *Falls* $u' := u^{(k)} + \epsilon f_l \geq 0$, *erzeuge Realisation* ω *von* $U \sim \mathcal{U}_{[0,1]}$.
- *Für* $\omega \leq \min\left\{\mathbb{H}_b(u')/\mathbb{H}_b(u^{(k)})\ ,\ 1\ \right\}$ *setze* $u^{(k+1)} := u'$
- *Sonst setze* $u^{(k+1)} := u^{(k)}$
- *Iteriere.*

Ausgabe: $\{u^{(0)}, u^{(1)}, \dots, u^{(n+1)}\}$.

Die damit erzeugten Zufallsvariabeln konvergieren in Verteilung wegen Lemma 2.7.1 und Satz 2.7.3 gegen $\mathbb{H}_b$.

Beweis: Ohne Einschränkung sei die Markovbasis minimal bezüglich Inklusion. Sei in dem Algorithmus $u' \geq 0$. Dann ist $P_{u,u'} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{L}$. Da aber $u = u' - \epsilon f_l$ der einzige Weg von u' nach u ist, gilt auch $P_{u'u} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{L}$, deswegen ist die Kette symmetrisch.
Die Gleichung (3.3) garantiert, dass sich bei Addition/Subtraktion der Wert $b \in \mathbb{N}_0^d$ nicht ändert. Zusammen mit (3.4) ist gewährleistet, dass es sich um eine irreduzible Kette handelt. Es bleibt zu zeigen, dass es sich um einen aperiodischen Prozess handelt. Angenommen, es gibt kein $f_l \neq 0$, dann wäre $\mathcal{S}_b = \{u\}$. Eine Haltebedingung wäre erfüllt und die Kette somit aperiodisch.
Gelte nun $f_l \neq 0$ für mindestens ein $l \in \{1, \dots, L\}$. Da die Koordinatensumme von u mit der von $u + f_l$ übereinstimmt, ist mindestens eine Koordinate von f_l negativ. Insbesondere führt mehrfaches Addieren zu einer „Grenze“ von $\mathcal{S}_b$ in dem Sinne, dass $u + nf_l \in \mathcal{S}_b$, aber $u + (n+1)f_l \notin \mathcal{S}_b$ für ein $n \in \mathbb{N}_0$. Ist die Kette in dem Zustand $u + nf_l$, dann besitzt sie eine gewisse Wahrscheinlichkeit α, im nächsten Iterationsschritt des Algorithmus immer noch den Zustand zu besetzen. Wegen Satz 2.2.7 ist der Prozess nun aperiodisch.

□

Für die Berechnung von $\mathbb{H}_b(u + \epsilon f_l)/\mathbb{H}_b(u)$, innerhalb dieses speziellen Metropolis-Samplers, ergibt sich eine vereinfachte Darstellung. Der unbekannte Faktor $\frac{N!}{\#\mathcal{R}_b}$ kürzt sich heraus. Es ist

$$\begin{aligned} \mathbb{H}_b(u + \epsilon f_l)/\mathbb{H}_b(u) &= \frac{\prod_{x \in \mathcal{X}} ((u(x) + \epsilon f_l(x))!)^{-1}}{\prod_{x \in \mathcal{X}} (u(x)!)^{-1}} \\ &= \prod_{x \in \mathcal{X}} \frac{u(x)!}{(u(x) + \epsilon f_l(x))!} \\ &= \prod_{\substack{x \in \mathcal{X} \\ f_l(x) \neq 0}} \frac{u(x)!}{(u(x) + \epsilon f_l(x))!}. \end{aligned} \tag{3.5}$$

Somit bleiben im Allgemeinen wenig Terme übrig, etwa im Unabhängigkeitsmodell besitzt das Produkt 3.5 nur 4 Faktoren (siehe Anhang). Was bis jetzt nicht gezeigt wurde, ist eine Methode zur Berechnung der Markovbasen. Siehe dazu das nächste Kapitel.

3.5 Der Diaconis-Sturmfels-Algorithmus

Nun wird davon ausgegangen, dass $A \in \mathbb{N}_0^{d\times m}$ ein torisches Modell vollständig beschreibt. Bei dieser Betrachtung werden die statistischen Auflagen an die Parametrisierung gelöst und aufgezeigt, wie dadurch Markovbasen, beziehungsweise dazu korrespondierende Idealbasen, mit Hilfe der Gröbnerbasentheorie berechnet werden können. Wie in [Sul] gezeigt, kann für ein allgemeines h die in diesem Abschnitt behandelte Herangehensweise durch eine einfache lineare Koordinatentransformation zurückgeführt werden. Da dies nicht nur im Hinblick auf das Unabhängigkeits- oder Symmetriemodell irrelevant ist, wird dieser Fall ohne Einschränkung vernachlässigt. Die Nomenklatur ist orientiert an [DS98], [Stu96], [Rap03]. Sei $A = [T(x_1), \ldots, T(x_m)] \in \mathbb{N}_0^{d\times m}$ die modellbeschreibende Matrix und $T : \mathcal{X} \to \mathbb{N}_0^d$ die suffiziente Statistik. Für jedes $x' \in \mathcal{X}$ wird eine mit x bezeichnete Unbestimmte eingeführt. Somit ist $K[\mathcal{X}] := K[x_1, \ldots, x_m]$ ein Polynomring in m Unbekannten. Weiter sei für die Unbestimmten $y_1, \ldots, y_m$ der Polynomring $K[\mathcal{Y}] := K[y_1, \ldots, y_m]$ erklärt. Das algebraische Äquivalent zu dem torischen Modell Φ^A ist der Ringmorphismus

$$\begin{array}{rcl} \phi_T : K[\mathcal{X}] & \to & K[\mathcal{Y}] \\ \phi_T(x) & \mapsto & \mathcal{Y}^{T(x)}, \qquad x \in \mathcal{X}. \end{array}$$

Dieser bildet jede Unbekannte $x \in \mathcal{X}$ auf ein Monom $\mathcal{Y}^{T(x)} = \prod_{i=1}^m y_i^{T_i(x)}$ ab (vgl. Gleichung 3.1). Hauptgegenstand der Untersuchung ist der Kern dieser Abbildung.

Satz 3.5.1 *Der Kern von ϕ_T wird als K-Vektorraum von der Menge*

$$\{\mathcal{X}^u - \mathcal{X}^v \ : \ u, v \in \mathbb{N}_0^m, \quad Au = Av\}$$

aufgespannt.

Beweis: Es sei $I_T := \langle \{\mathcal{X}^u - \mathcal{X}^v \ : \quad Au = Av\} \rangle_K$. Betrachte das Monom $\mathcal{X}^u \in K[\mathcal{X}]$, beziehungsweise das Bild

$$\phi_T(\mathcal{X}^u) = \prod_{i=1}^m \phi_T(x_i)^{u_i} = \prod_{i=1}^m \mathcal{Y}^{u_i T(x_i)} = \mathcal{Y}^{Au}.$$

Somit liegt ein Binom $\mathcal{X}^u - \mathcal{X}^v$ genau dann in $\ker \phi_T$, wenn gilt, dass $Au = Av$. Es ergibt sich $I_T \subseteq \ker \phi_T$.
Es bleibt zu zeigen, dass jedes Polynom in $\ker \phi_T$ eine Linearkombination von Binomen

aus I_T ist. Angenommen I_T wäre eine echte Teilmenge von $\ker \phi_T$, dann gäbe es zu einer beliebigen Monomordnung $\prec$ auf $K[\mathcal{X}]$ ein $g \in \ker \phi_T \setminus I_T$, $g \neq 0$ mit

$$LM_\prec(g) = \min \{LM_\prec(p),\ p \in \ker \phi_T \setminus I_T\}\,.$$

Sei etwa $LM_\prec(g) = \mathcal{X}^u$ und ohne Einschränkung $LK_\prec(g) = 1$. Da $g \in \ker \phi_T$, existiert ein weiteres Monom $\mathcal{X}^v$ in g mit $\phi_T(\mathcal{X}^v) = \phi_T(\mathcal{X}^u)$. Betrachtet man $g' := g - (\mathcal{X}^u - \mathcal{X}^v)$, dann ist $g' \neq 0$, da sonst schon g in I_T wäre.

Nun ist aber $LM_{\prec}(g') \prec LM_{\prec}(g)$. Da jedoch $g \in \ker \phi_T \backslash I_T$ ergibt sich ein Widerspruch zur Minimalität. Insgesamt folgt $\ker \phi_T = I_T$. ([DS98])

□

Ein Vektor $u \in \ker_{\mathbb{Z}} A$ (in funktioneller Schreibweise $u : \mathcal{X} \to \mathbb{Z}$) kann eindeutig als $u = u^+ - u^-$ dargestellt werden, wobei $u^+(x) := \max\{u(x), 0\}$ und $u^-(x) := \max\{-u(x), 0\}$. Da u^+ und u^- disjunkte Träger besitzen, ist für $u \in \ker_{\mathbb{Z}} A$ stets $Au^+ = Au^-$.

Korollar 3.5.2 *Es sei ϕ_T der zu $A \in \mathbb{N}_0^d$ assoziierte K-lineare Ringmorphismus. Dann ist*

$$\ker \phi_T = \langle \left\{ \mathcal{X}^{u^+} - \mathcal{X}^{u^-} \ : \ u \in \mathbb{Z}^m, \ Au = 0 \right\} \rangle_{K[\mathcal{X}]}.$$

Beweis: Jedes Binom $\mathcal{X}^u - \mathcal{X}^v$ mit $Au = Av$ besitzt nach Ausklammern gemeinsamer Faktoren die Gestalt $\mathcal{X}^u - \mathcal{X}^v = \mathcal{X}^w(\mathcal{X}^{u'} - \mathcal{X}^{v'})$, wobei u', v' disjunkte Träger besitzen. Es muss gelten $\phi_T(\mathcal{X}^{u'}) = \phi_T(\mathcal{X}^{v'})$.

□

Korollar 3.5.3 *Zu jeder Monomordnung $\prec$ gibt es eine endliche Menge $G_{\prec} \subset \ker(A)$, so dass $\left\{ \mathcal{X}^{u^+} - \mathcal{X}^{u^-} \ : \ u \in G_{\prec} \right\}$ eine reduzierte Gröbnerbasis bezüglich $\prec$ ist.*

Beweis: Nach Hilberts Basissatz [1] ist I_A endlich erzeugt, etwa durch

$$\left\{ \mathcal{X}^{u_i^+} - \mathcal{X}^{u_i^-} \ : 1 \leq i \leq n \right\}$$

für ein geeignetes $n \in \mathbb{N}$. In jedem Schritt des Buchbergeralgorithmus[1] erhält die S-Polynombildung die binomische Struktur. Per Konstruktion ist $S \in I_A$, somit wird eine Gröbnerbasis $GB_{\prec}$ erhalten mit $Au = 0$ für alle $u \in GB_{\prec}$. Ebenso zerstört die Reduktion nicht die binomische Gestalt.

□

Markovbasen stellen einen Bezug zwischen Statistik und kommutativer Algebra her.

Beobachtung 3.5.4 *Bezeichne $f_{i_j}^{\epsilon_j}$ im Falle $\epsilon_j = 1$ den Vektor $f_{i_j}^+$ und für $\epsilon_j = -1$ entsprechend $f_{i_j}^-$. Sind zwei Elemente u, v mit $Au = Av$ durch die Schrittfolge $(\epsilon_1, f_{i_1}), \ldots, (\epsilon_J, f_{i_J})$ verbunden, dann gilt:*

$$\begin{aligned} \mathcal{X}^u - \mathcal{X}^v &= (\mathcal{X}^u - \mathcal{X}^{u_1}) + (\mathcal{X}^{u_1} - \mathcal{X}^{u_2}) + \ldots + (\mathcal{X}^{u_{k-1}} - \mathcal{X}^v) \\ &= \epsilon_1 \mathcal{X}^{u - f_{i_1}^{\epsilon_1}} (\mathcal{X}^{f_{i_1}^+} - \mathcal{X}^{f_{i_1}^-}) + \ldots + \epsilon_k \mathcal{X}^{u_{k-1} - f_{i_k}^{\epsilon_1}} (\mathcal{X}^{f_{i_k}^+} - \mathcal{X}^{f_{i_k}^-}). \end{aligned}$$

Das Binom $\mathcal{X}^u - \mathcal{X}^v$ liegt in dem Ideal, das von den zu der Markovbasis assoziierten Binomen erzeugt wird. [Din98]

[1] Siehe etwa [CLO07].

Die Wohldefiniertheit der angegebenen Monome und eine präzise Formulierung ist im nächsten Satz enthalten. Bezeichne $I_M := \langle \left\{ \mathcal{X}^{f_i^+} - \mathcal{X}^{f_i^-} \mid 1 \leq i \leq L \right\} \rangle_{K[\mathcal{X}]}$ das Ideal, welches von der zu der Markovbasis assoziierten Menge von Binomen erzeugt wird.

Satz 3.5.5 *Die Vektoren $f_1, \ldots, f_L \in \mathbb{Z}^m$ bilden genau dann eine Markovbasis, wenn*

$$\left\{ \mathcal{X}^{f_i^+} - \mathcal{X}^{f_i^-} \mid 1 \leq i \leq L \right\}$$

ein Erzeuger von $I_T = \ker \phi_T$ ist.

Beweis: Eigenschaft (3.3) einer Markovbasis besagt, dass $I_M \subseteq I_T$. Gelte Eigenschaft (3.4). Da $\ker \phi_T = I_T$ genügt es zu zeigen, dass für einen beliebigen Vektor $u \in \mathbb{Z}^m$ mit $Au = 0$ die Differenz $\mathcal{X}^{u^+} - \mathcal{X}^{u^-}$ in I_M liegt. Dazu wird verwendet, dass $Au^+ = Au^-$. Insbesondere sind u^+ und u^- durch die Markovbasis ineinander überführbar. Die Induktion nach der Anzahl an Überführungsschritten k von u^+ nach u^- gestaltet sich wie folgt:

Angenommen u^+ und u^- können mit einem Schritt ineinander überführt werden, etwa $u^- = u^+ + f_{i_1}$, dann ist $u^- - u^+ = f_{i_1}^+ - f_{i_1}^-$, woraus $u^- = f_{i_1}^+$ und $u^+ = f_{i_1}^-$ folgt (Disjunktheit der Träger). Das ergibt

$$\mathcal{X}^{u^+} - \mathcal{X}^{u^-} = -(\mathcal{X}^{f_{i_1}^+} - \mathcal{X}^{f_{i_1}^-}) \in I_M.$$

Ist jedoch $\epsilon_1 = -1$, also $u^- = u^+ - f_{i_1}$, ergibt sich mit der selben Argumentation $\mathcal{X}^{u^+} - \mathcal{X}^{u^-} = \mathcal{X}^{f_{i_1}^+} - \mathcal{X}^{f_{i_1}^-} \in I_M$. Gelte nun die Behauptung für ein $k \in \mathbb{N}$. Weiter sei $u \in \mathbb{Z}^m$ mit $Au = 0$ und einer Überführung der Länge $k+1$, etwa

$$u^- = u^+ + \sum_{j=1}^{k+1} \epsilon_j f_{i_j} \qquad \textit{und} \qquad u^+ + \sum_{j=1}^{l} \epsilon_j f_{i_j} \geq 0, \qquad 1 \leq l \leq k+1 \tag{3.6}$$

gegeben. Es ist $\mathcal{X}^{u^+} - \mathcal{X}^{u^+ + \epsilon_1 f_{i_1}} \in I_M$. Der Übergang mit Länge k von u^- nach $u^- - \sum_{j=2}^{k+1} \epsilon_j f_{i_j} \geq 0$ ergibt nach Induktionsannahme, dass $\mathcal{X}^{u^+ + \epsilon_1 f_{i_1}} - \mathcal{X}^{u^-} \in I_M$. Eine Addition beider Differenzen liefert $\mathcal{X}^{u^+} - \mathcal{X}^{u^-} \in I_M$.

Sei umgekehrt $I_M = I_T$ und seien Vektoren $u, v \in \mathbb{N}_0^m$ mit $Au = Av$ gegeben. Es gibt eine Darstellung bezüglich der Markovbasis der Länge L:

$$\mathcal{X}^u - \mathcal{X}^v = \sum_{j=1}^{L} \epsilon_j \mathcal{X}^{h_j} (\mathcal{X}^{f_{i_j}^+} - \mathcal{X}^{f_{i_j}^-}), \qquad e_j \in \{-1, 0, 1\},$$

mit geeigneteten $h_j \in \mathbb{N}_0^m$, $j = 1 \ldots L$. Es wird wieder induktiv verfahren. Für k=1 folgt unmittelbar Eigenschaft (3.4) einer Markovbasis. Sei $k > 1$, dann ist $\mathcal{X}^u = \mathcal{X}^{h_r} \mathcal{X}^{f_{i_r}^{\pm}}$, etwa $\mathcal{X}^u = \mathcal{X}^{h_r} \mathcal{X}^{f_{i_r}^-}$ für ein geeignetes $1 \leq r \leq L$. Es ist zu sehen, dass $u - f_{i_r}^- \geq 0$ und somit auch $u+f_{i_r} \geq 0$. Wird nun $\mathcal{X}^{h_r}(\mathcal{X}^{f_{i_r}^+} - \mathcal{X}^{f_{i_r}^-})$ auf beiden Seiten der Gleichung subtrahiert und wird $h_r + f_{i_r}^+ = u + f_{i_r}$ verwendet, erhält man einen Ausdruck für $\mathcal{X}^{u+f_{i_r}} - \mathcal{X}^b$ der Länge $k-1$. Da aber $u + f_{i_r}$ mit erlaubten Schritten in v überführt werden kann, gilt Eigenschaft (3.4) für alle $u, v \in \mathbb{N}_0^m$ mit $Au = Av$. ([DS98])

□

Da es genügt einen beliebigen Erzeuger von I_T zu benennen, stellt die Theorie der Gröbnerbasen ein nützliches Verfahren zur Berechnung bereit.

Satz 3.5.6 *Sei K ein Körper mit Charakteristik ungleich 2. Betrachte das auf $K[\mathcal{X}, \mathcal{Y}]$ erklärte Ideal*

$$I := \langle \{x_i - \mathcal{Y}^{Ae_i} \ : \ 1 \leq i \leq m\} \rangle_{K[\mathcal{X},\mathcal{Y}]},$$

mit den kanonischen Basisvektoren $e_i, 1 \leq i \leq m$. Es ist $I_T = I \cap K[\mathcal{X}]$.

Beweis: Zuerst die Richtung „$I_T \subseteq I$“. Angenommen es gelte für beliebige $u \in \mathbb{N}_0^m$, dass $\mathcal{X}^y - \mathcal{Y}^{Au} \in I$, dann folgt $\mathcal{X}^u - \mathcal{X}^v = \mathcal{X}^u - \mathcal{Y}^{Au} - (\mathcal{X}^v - \mathcal{Y}^{Av}) \in I$ für alle u, v mit $Au = Av$. Somit genügt es zu zeigen, dass $\mathcal{X}^v - \mathcal{Y}^{Av} \in I$ für beliebige $v \in \mathbb{N}_0^m$. Der Beweis wird über eine Induktion nach dem Totalgrad $|v| := |v_1 + \ldots + v_m|$ geführt.
Für alle v mit $|v| = 1$, etwa $v = e_i$, ist $\mathcal{X}^v - \mathcal{Y}^{Av} = x_i - \mathcal{Y}^{Ae_i}$ ein Element des Erzeugers von I. Sei nun $|v| = n$ und die Behauptung gelte für alle Vektoren kleineren Totalgrades, dann ist

$$R := \underbrace{(x_i - \mathcal{Y}^{Ae_i})}_{\in I}(\mathcal{X}^{v-e_i} + \mathcal{Y}^{A(v-e_i)}) \in I,$$

$$S := (x_i + \mathcal{Y}^{Ae_i})\underbrace{(\mathcal{X}^{v-e_i} - \mathcal{Y}^{A(v-e_i)})}_{\in I} \in I,$$

womit auch die Summe $R + S = 2(\mathcal{X}^v - \mathcal{Y}^{Av})$ in I ist. Mit einer Charakteristik ungleich 2 folgt für alle u, v mit $Au = Av$: $\mathcal{X}^u - \mathcal{X}^v \in I$.

Für die andere Richtung des Beweises wird der Definitionsbereich des Ringmorphismus $\phi_T : K[\mathcal{X}] \to K[\mathcal{Y}]$ auf $K[\mathcal{X}, \mathcal{Y}]$ erweitert. Sei $\phi'_T : K[\mathcal{X}, \mathcal{Y}] \to K[\mathcal{Y}]$ die durch $\phi'_T(\mathcal{Y}^w) := \mathcal{Y}^w$ erklärte Erweiterung. Es wird gezeigt:

$$I \cap K[\mathcal{X}] \subseteq \ker \phi'_T \cap K[\mathcal{X}] \subseteq I_T.$$

Die letzte Inklusion ist offensichtlich, da $\ker \phi'_T \cap K[\mathcal{X}] \subseteq \ker \phi_T = I_T$. Die erste Inklusion ergibt sich mit dem Erzeugendensystem von I. Es ist $\phi'_T(x_i - \mathcal{Y}^{Ae_i}) = 0$ und somit ist $I \subseteq \ker \phi'_T$, beziehungsweise $I \cap K[\mathcal{X}] \subseteq \ker \phi'_T \cap K[\mathcal{X}]$. Zusammenfassend ist nun $I \cap K[\mathcal{X}] = I_T$, was zu zeigen war. ([Din98])

□

Satz 3.5.7 ***(Diaconis-Sturmfels-Algorithmus).*** *Es sei $\prec$ die lexikographische Ordnung (oder eine andere Eliminationsordnung) mit $y \succ x$ für alle $y \in \mathcal{Y}, x \in \mathcal{X}$. Eine lex-Gröbnerbasis $G_\prec$ von I_T kann berechnet werden, in dem eine lex-Gröbnerbasis $H_\prec$ von I berechnet wird und nur jene Binome verwendet werden, die als Unbestimmte ausschließlich die zu $\mathcal{X}$ gehörigen Unbekannten besitzen. Somit ist*

$$G_\prec := H_\prec \cap K[\mathcal{X}]$$

eine lex-Gröbnerbasis von I_T.

Beweis: Es ist zu zeigen, dass $\langle LM(I_T)\rangle = \langle LT(G_\prec)\rangle$. Nach Satz 3.5.7 ist $I_T = I \cap K[\mathcal{X}]$ und somit ist insbesondere $\langle LM(I_T)\rangle \subseteq \langle LT(G_\prec)\rangle$. Für die andere Inklusion sei $f \in I_T$ beliebig. Es ist zu zeigen, dass es ein $LT_\prec(g), g \in G_\prec$ gibt, welches das Leitmonom von f teilt. Es ist $f \in I_T \subseteq I$. Deswegen gibt es ein $g \in H_\prec$ mit $LM_\prec(g)|LM_\prec(f)$. Das Polynom f enthält nur Unbestimmte in $\mathcal{X}$. Wegen der lex-Ordnung mit $x \prec y, x \in \mathcal{X}, y \in \mathcal{Y}$ ist jedes Monom mit Unbestimmten in $\mathcal{Y}$ größer als $LM_\prec(f)$. Somit ist $LM_\prec(g) \in K[\mathcal{X}]$ und $g \in G_\prec$, was zu zeigen war. ([CLO07])

□

Beispiel 3.5.8 ***(Markovbasis für*** 3×3***-Kontingenztafeln).*** *In diesem Falle ist $m_1 = m_2 = 3$. Das Modell der Unabhängigkeit wird in diesem Falle wie in Beispiel 3.1.4 präsentiert durch die Matrix*

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Folgende Befehle in Maple berechnen eine Markovbasis $H_\prec$:

- *with(grobner);*
- *ideal:=*$[x_{11} - \alpha_1 * \beta_1,\ x_{12} - \alpha_1 * \beta_2,\ x_{13} - \alpha_1 * \beta_3,\ x_{21} - \alpha_2 * \beta_1,\ x_{22} - \alpha_2 * \beta_2,\ x_{23} - \alpha_2 * \beta_3,\ x_{31} - \alpha_3 * \beta_1,\ x_{32} - \alpha_3 * \beta_2,\ x_{33} - \alpha_3 * \beta_3]$;
- *varlist:=*$[\alpha_1,\ \alpha_2,\ \alpha_3,\ \beta_1,\ \beta_2,\ \beta_3,\ x_{11},\ x_{12},\ x_{13}, x_{21},\ x_{22},\ x_{23},\ x_{31},\ x_{32},\ x_{33}]$;
- *gbasis(ideal,varlist,plex);*

In der Ausgabe sind 36 Binome von denen neun die Variabeln $\alpha_1,\ \alpha_2,\ \alpha_3,\ \beta_1,\ \beta_2,\ \beta_3,$ nicht beinhalten. Diese sind nun eine reduzierte lex-Gröbnerbasis von I_T. Die zu diesen Binomen assoziierten Matrizen

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

sind eine Markovbasis von $\mathcal{S}_b$. Matrizen dieser Gestalt, sowie die zugehörigen Binome, werden als Matrizen/ Binome vom $\left(\begin{smallmatrix} + & - \\ - & + \end{smallmatrix}\right)$-Typ bezeichnet.

Für $I \times J$ Kontingenztafeln ist offensichtlich, dass Matrizen vom $\left(\begin{smallmatrix} + & - \\ - & + \end{smallmatrix}\right)$-Typ eine Markovbasis bilden und somit, wegen Satz 3.5.5, die dazu assoziierten Binome I_T erzeugen. Es gilt aber zusätzlich eine stärkere Aussage.

Satz 3.5.9 *Für eine beliebige Ordnung mit $x_{11} \succ x_{12} \succ \ldots \succ x_{1J} \succ x_{21} \succ \ldots \succ x_{IJ}$ ist die Menge*

$$\{x_{ik}x_{jl} - x_{il}x_{jk} \ : \ 1 \leq i < j \leq I \ , \ 1 \leq k < l \leq J\}$$

die reduzierte Gröbnerbasis von I_T.

Beweis: Kein Leitmonom der angegebenen Menge von Binomen teilt ein anderes. Für jedes Element aus einer Markovbasis ist die Zeilen- als auch die Spaltensumme Null. Für ein Element $\mathcal{X}^{u^+} - \mathcal{X}^{u^-}$ der reduzierten Gröbnerbasis ist $u^+ \succ u^-$. Wird u in Matrixform dargestellt, bedeutet dies, dass aufgrund der Wahl der Monomordnung in der ersten Zeile, die kein Nullvektor ist, der erste Eintrag ungleich Null positiv sein muss. Sei die Koordinate von diesem mit (i_0, k_0) bezeichnet. Weiter muss es einen Eintrag $(i_0, l_0),\ k_0 < l_0$ geben, welcher negativ ist. Unterhalb von diesem muss wieder ein Eintrag $(j_0, l_0),\ i_0 < j_0$ positiv sein. Angenommen u wäre nicht vom $\left(\begin{smallmatrix} + & - \\ - & + \end{smallmatrix}\right)$-Typ. Wegen der Reduziertheit muss gelten, dass

$$LM_{\prec}(\mathcal{X}^{u^+} - \mathcal{X}^{u^-}) = \mathcal{X}^{u^+} \notin \{x_{ik}x_{jl} \ : \ 1 \leq i < j \leq I \ , \ 1 \leq k < l \leq J\}\,.$$

Da aber $x_{i_0k_0}x_{j_0l_0} | \mathcal{X}^{u^+}$, bedeutet dies einen Widerspruch zur Annahme.

□

Beobachtung 3.5.10 ***(Rekonstruktion eines Pfades).*** *Sind die zu der Markovbasis $f_1, \ldots, f_L$ assoziierten Binome eine Gröbnerbasis, lässt sich für $u, v \in \mathbb{N}_0^m$ mit $Au = Av$ eine Schrittfolge mit Hilfe des Divisionsalgorithmus rekonstruieren.*

Beweis: Ohne Einschränkung sind die Leitmonome der zur Markovbasis MB assoziierten Menge an Binomen die Monome $\mathcal{X}^{f_i^+}, 1 \leq i \leq L$. Die Eigenschaften einer Gröbnerbasis garantieren, dass der Divisionsalgorithmus mit Rest 0 terminiert. Insbesondere hat jener in diesem Sonderfall die Gestalt:

Initialsiere $u^{(0)} := u,\ v^{(0)} := v$. Solange $u^{(0)} - v^{(0)} \neq 0$:

- Für $u^{(k)} > v^{(k)}$ wähle f_i derart, dass $u^{(k)} - f_i^+ > 0$.
  Setze $u^{(k+1)} := u^{(k)} - f_i$ und $v^{(k+1)} := v^{(k)}$.
- Für $u^{(k)} < v^{(k)}$ wähle f_i derart, dass $v^{(k)} - f_i^+ > 0$.
  Setze $u^{(k+1)} := u^{(k)}$ und $v^{(k+1)} := v^{(k)} - f_i$.

Der Pfad wird nun von beiden Seiten gleichzeitig rekonstruiert. Der Terminationsschritt des Algorithmus verbindet beide Pfade.

□

Korollar 3.5.11 *Die zu einer Markovbasis $f_1, \ldots, f_L$ assoziierten Binome sind genau dann eine Gröbnerbasis zu einer Monomordnung $\prec$, wenn es für $a, b \in \mathcal{S}_t$ zwei Folgen $(f_{i_j})_{1 \leq j \leq J}$ und $(f_{z_k})_{1 \leq k \leq K}$ gibt mit*

$$\begin{aligned} a - \sum_{r=1}^{j+1} f_{i_r} &\prec a - \sum_{r=1}^{j} f_{i_r}, \qquad 0 \leq j \leq J-1, \\ b - \sum_{r=1}^{k+1} f_{z_r} &\prec a - \sum_{r=1}^{k} f_{z_r}, \qquad 0 \leq k \leq K-1, \end{aligned}$$

und es gilt $a - \sum_{r=1}^{J} f_{i_r} = b - \sum_{r=1}^{k+1} f_{z_r}$. [DS98]

Illustriert wird dies an einem einfachen Beispiel.

Beispiel 3.5.12 *Die Frage, wieviele Möglichkeiten es für $c_1, c_2, c_3 \in \mathbb{N}_0$ gibt, so dass $c_1 + 2c_2 + 3c_3 = 10$, führt zu der Abbildung $T : \mathbb{N}_0^3 \to \mathbb{N}_0$ mit $T(c_1, c_2, c_3) = c_1 + 2c_2 + 3c_3$. Maple gibt mit $x_1 \succ x_2 \succ x_3$ als lexikographische Gröbnerbasis von I_T die Polynome*

$$x_1^2 - x_2, \; x_1x_2 - x_3, \; x_1x_3 - x_2^2, \; x_2^3 - x_3^2$$

an. Eine Markovbasis wäre somit

$$f_1 := (2, -1, 0), \; f_2 := (1, 1, -1), \; f_3 := (1, -2, 1), \; f_4 := (0, 3, -2).$$

Die Vektoren ermöglichen die Konstruktion eines Pfades in $\mathcal{S}_{10}$. Der Divisionsalgorithmus liefert für $u = (4, 0, 2)$ und $v = (2, 4, 0)$:

0	$u^{(0)}$	$= (4,0,2)$	$v^{(0)}$	$= (2,4,0)$
1	$u^{(1)} = u^{(0)} - f_1$	$= (2,1,2)$	$v^{(1)} = v^{(0)}$	
2	$u^{(2)} = u^{(1)}$		$v^{(2)} = v^{(1)} - f_1$	$= (0,5,0)$
3	$u^{(3)} = u^{(1)} - f_1$	$= (0,2,2)$	$v^{(3)} = v^{(2)}$	
4	$u^{(4)} = u^{(3)}$	$= (0,2,2)$	$= v^{(4)} = v^{(3)} - f_4$	$= (0,2,2)$

Somit ist $u - f_1 - f_1 = v - f_1 - f_4$ beziehungsweise $u = v + f_1 - f_4$.

Wie bereits gesehen sind im Allgemeinen die zu einer Markovbasis assoziierten Binome keine Gröbnerbasis. Dennoch bietet es sich an, zur Berechnung diese Hilfsmittel zu verwenden.

In Analogie zur Beweisstruktur von Satz 3.5.7 ergibt sich für Modelle mit strukurellen Nullen (etwa zu schwangeren Männern) oder fehlenden Datensätzen (etwa: Diagonaleinträge in Kontingenztafeln können nicht beobachtet werden) folgende Herangehensweise an:

Korollar 3.5.13 *Sei $\mathcal{X}' \subseteq \mathcal{X}$ eine beliebige Teilmenge und $K[\mathcal{X}']$ der entsprechende Polynomring mit der lex-Ordnung mit $x' \succ x$ für alle $x \in \mathcal{X} \setminus \mathcal{X}', x' \in \mathcal{X}'$; $T' : \mathcal{X}' \to \mathbb{N}_0$ sei die entsprechende Einschränkung der suffizienten Statistik $T : \mathcal{X} \to \mathbb{N}_0$. Ist $H_\prec$ eine Gröbnerbasis für I_T, dann ist $\{g \in H_\prec \ : \ supp(g) \subseteq \mathcal{X}'\}$ eine Gröbnerbasis auf*

$$I_{T'} = I_T \cap k[\mathcal{X}'].$$

Somit kann die Referenzmenge bei strukturellen Nullen oder fehlenden Daten dadurch gewonnen werden, dass nur jene Elemente der Markovbasis verwendet werden, welche die zu $\mathcal{X}'$ gehörenden Einträge modifizieren. Es bietet sich an eine universelle Gröbnerbasis zu berechnen und daraus die entsprechenden Elemente auszuwählen.

Beispiel 3.5.14 *Eine natürliche Verallgemeinerung des Unabhängigkeitsmodells auf Kontingenztafeln mit fehlenden Einträgen oder strukturellen Nullen ist das Modell der Quasiunabhänigkeit in $I \times J$-Kontingenztafeln. Eine präzise loglineare Modellbeschreibung findet sich in [BFH75]. Suffiziente Statistik ist wieder die Abbildung, welche Randhäufigkeiten der Kontingenztafel erstellt. Im Folgenden sei eine strukturelle Null mit $[0]$ notiert. Als Fortsetzung von Beispiel 3.5.8 wird nun das Quasiunabhängigkeitsmodell betrachtet, in dem die Diagonaleinträge strukturelle Nullen darstellen. Für Daten, die in jeder Zeile und Spalte nur einen beobachteten Wert haben, besteht die Referenzmenge nur aus den zwei Matrizen*

$$\begin{pmatrix} [0] & 1 & 0 \\ 0 & [0] & 1 \\ 1 & 0 & [0] \end{pmatrix} \quad \textit{und} \quad \begin{pmatrix} [0] & 0 & 1 \\ 1 & [0] & 0 \\ 0 & 1 & [0] \end{pmatrix}.$$

Diese beiden Elemente können nicht wie in Beispiel 3.5.8 durch Matrizen vom $\left(\begin{smallmatrix} + & - \\ - & + \end{smallmatrix}\right)$-Typ ineinander überführt werden. Eine analoge Berechnung in Maple mit

- *varlist:=*$[\alpha_1,\ \alpha_2,\ \alpha_3,\ \beta_1,\ \beta_2,\ \beta_3,\ x_{11},\ x_{12},\ x_{13}, x_{21},\ x_{22},\ x_{23},\ x_{31},\ x_{32},\ x_{33}]$;
- *gbasis(ideal,varlist,plex);*

ergibt wieder die neun Binome vom $\left(\begin{smallmatrix} + & - \\ - & + \end{smallmatrix}\right)$-Typ sowie $x_{12}x_{23}x_{31} - x_{13}x_{21}x_{32}$. Die dazu gehörende Matrix verbindet die Referenzmenge. Da alle Matrizen vom $\left(\begin{smallmatrix} + & - \\ - & + \end{smallmatrix}\right)$-Typ ein Diagonalelement ungleich 0 *besitzen ist*

$$\left\{ \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \right\}$$

eine Markovbasis für das beschriebene Quasiunabhängigkeitsmodell.

Somit bietet es sich an, eine Gröbnerbasis zu berechnen, die bezüglich allen Monomordnungen eine Gröbnerbasis ist. Für Modelle mit strukturellen Nullen an beliebiger Stelle ist eine Markovbasis dann durch jene Elemente gegeben, deren Träger die strukturellen Nullen nicht beinhalten.

3.6 Universelle Gröbnerbasen

In den folgenden Abschnitten, welche an dem Buch [Stu96] orientiert sind, wird die Existenz universeller Gröbnerbasen belegt und ein Berechnungsweg aufgezeigt. Es wird als bekannt vorausgesetzt, dass jedes Ideal $I \subset K[\mathcal{X}]$ zu einer festen Monomordnung eine eindeutig bestimmte reduzierte Gröbnerbasis besitzt, siehe etwa [CLO07]. Mit den Standardmonomen $B_{i,\prec}$ bezüglich einer Monomordnung $\prec$ ist $R/I \cong \langle B_{i,\prec}\rangle_K$. Bei mehr als einer Unbestimmten gibt es zwar überabzählbar viele Monomordnungen, aber bei einem gegebenen Ideal lassen sich diese als endlich viele Äquivalenzklassen beschreiben.

Satz 3.6.1 *Jedes Ideal $I \in K[\mathcal{X}]$ besitzt nur endlich viele unterschiedliche Anfangsideale.*

Beweis: Ohne Einschränkung sei $I \neq \{0\}$. Angenommen I habe eine unendliche Menge J_0 von Anfangsidealen. Sei $f \in I \backslash \{0\}$. Da f endlich viele Monome besitzt und da immer eines seiner Monome in einem Anfangsideal liegt, muss es ein Monom $\mathcal{X}^{u^{(1)}}$ in f geben, so dass die Menge $J_1 := \left\{M \in J_0 \ : \ \mathcal{X}^{u^{(1)}} \in M\right\}$ unendlich viele Anfangsideale beinhaltet. Da $\# J_1 = \infty$, gibt es mindestens ein $M \in J_1$ mit $M \supsetneqq \langle \mathcal{X}^{u^{(1)}}\rangle$. Sei $\mathcal{X}^v \in M \setminus \langle \mathcal{X}^{u^{(1)}}\rangle$. Division mit Rest liefert

$$\mathcal{X}^v = f_2 - r, \qquad f_2 \in I, r \in \langle B_M\rangle_K,$$

wobei $\langle B_M\rangle_K$ die Standardmonome von I bezüglich dem Anfangsideal M darstellen. Da $\mathcal{X}^v \in M$, ist $f_2 = \mathcal{X}^v - r \neq 0$. Per Konstruktion liegt kein Monom von f_2 in $\langle \mathcal{X}^{u^{(1)}}\rangle$. Sei nun $\mathcal{X}^{u^{(2)}}$ ein Monom in f_2 für das $J_2 := \left\{M \in J_1 \ : \ \mathcal{X}^{u^{(2)}} \in M\right\}$ unendlich viele Elemente besitzt. Wieder gibt es ein $f_3 \in I \setminus \{0\}$, dessen Monome nicht in $\langle \mathcal{X}^{u^{(1)}}, \mathcal{X}^{u^{(2)}}\rangle$ liegen.
Iteration ergibt eine echt steigende Kette

$$\langle \mathcal{X}^{u^{(1)}}\rangle \subset \langle \mathcal{X}^{u^{(1)}}, \mathcal{X}^{u^{(2)}}\rangle \subset \langle \mathcal{X}^{u^{(1)}}, \mathcal{X}^{u^{(2)}}, \mathcal{X}^{u^{(3)}}\rangle \subset \dots.$$

Da aber $K[\mathcal{X}]$ wegen des Hilbertschen Basissatzes noethersch ist, ergibt sich ein Widerspruch zur Annahme. Somit gibt es nur endlich viele Anfangsideale. ([Stu96])

$\square$

Definition 3.6.2 ***(Universelle Gröbnerbasis).*** *Eine Gröbnerbasis U von $I \subseteq K[\mathcal{X}]$ heißt universell, wenn sie die Vereinigung aller reduzierten Gröbnerbasen ist. Somit ist eine universelle Gröbnerbasis wegen Satz 3.6.1 insbesondere endlich.*

Notationell ist es angenehm, I_A anstatt I_T zu schreiben. Es wurde bereits in Korollar 3.5.3 gezeigt, dass reduzierte Gröbnerbasen von I_A wieder eine binomische Struktur aufweisen, also auch die universelle Gröbnerbasis U_A von I_A. Im Weiteren wird eine präzisere Beschreibung von U_A unternommen.

Definition 3.6.3 ***(Primitive und minimal primitive Binome).*** *Ein Binom $0 \neq \mathcal{X}^{u^+} - \mathcal{X}^{u^-} \in I_A$ heißt primitiv, falls kein anderes Binom aus $\mathcal{X}^{v^+} - \mathcal{X}^{v^-} \in I_A$ existiert mit $\mathcal{X}^{v^+} \mid \mathcal{X}^{u^+}$ und $\mathcal{X}^{v^-} \mid \mathcal{X}^{u^-}$. Eine Unterklasse der primitiven Binome sind die minimal primitiven Binome. Für ein solches ist der Träger von u minimal bezüglich Inklusion und die Koordinaten von u sind teilerfremd. Die zu den Binomen assoziierten Vektoren werden ebenfalls mit diesen Eigenschaften bezeichnet.*

Beispiel 3.6.4 *Für die Matrix A des Unabhängigkeitsmodells sind die Binome vom $\left(\begin{smallmatrix} + & - \\ - & + \end{smallmatrix}\right)$-Typ minimal primitiv.*

Beispiel 3.6.5 *Es sei $A := (1,2,5) \in \mathbb{N}^{1\times 3}$. Das Binom $x_3 - x_1^3 x_2 \in I_A$ ist primitiv, aber nicht minimal. Die minimal primitiven Polynome sind $\pm(x_1^2 - x_2)$, $\pm(x_1^5 - x_3)$, $\pm(x_2^5 - x_3^2)$.*

Definition 3.6.6 ***(Graverbasis).*** *Besitzt I_A die zu $\pm u_1, \dots, \pm u_r$ assoziierten primitiven Binome, dann werden die zu $u_1, \dots, u_r$ assoziierten Binome als Graverbasis Gr_A bezeichnet.*

Lemma 3.6.7 *Alle Binome aus U_A sind primitiv.*

Beweis: Ohne Einschränkung gelte für alle Elemente $\mathcal{X}^{u^+} - \mathcal{X}^{u^-}$ der reduzierten Gröbnerbasis $G_\prec$ von I_A, dass $\mathcal{X}^{u^+} \succ \mathcal{X}^{u^-}$. Das Anfangsideal $in_\prec(I_A)$ besitzt als minimalen Erzeuger die zugehörigen Monome $\sigma^+ := \left\{\mathcal{X}^{u^+} \;:\; \mathcal{X}^{u^+} - \mathcal{X}^{u^-} \in G_\prec\right\}$. Die Menge $\sigma^- := \left\{\mathcal{X}^{u^-} \;:\; \mathcal{X}^{u^+} - \mathcal{X}^{u^-} \in G_\prec\right\}$ ist wegen der Reduziertheit ein minimaler Erzeuger von $\langle B_\prec\rangle_K$. Angenommen es gäbe ein $v \in \ker(A)$, $v \neq u$ mit $\mathcal{X}^{v^+} \mid \mathcal{X}^{u^+}$ und $\mathcal{X}^{v^-} \mid \mathcal{X}^{u^-}$. Wäre $v^+ \succ v^-$, dann wäre σ^+ kein minimaler Erzeuger des Anfangsideals; ein Widerspruch. Somit bleibt die Möglichkeit, dass $v^+ \prec v^-$. Dies impliziert aber, dass $\mathcal{X}^{u^-} \notin \langle B_\prec\rangle_K$; ein Widerspruch.

□

Somit ist $U_A \subseteq Gr_A$. Es bezeichne C_A die Menge aller minimal primitiven Binome.

Satz 3.6.8 ***(Einschnüren der universellen Gröbnerbasis).*** *Für alle $A \in \mathbb{N}_0^{d\times m}$ ist*

$$C_A \subseteq U_A \subseteq Gr_A.$$

Beweis: Es ist noch zu zeigen, dass jedes minimal primitive Element in einer reduzierten Gröbnerbasis G_A enthalten ist. Sei $u \in \ker A$ minimal primitiv. Wähle eine Eliminationsordnung $\prec$ mit der Eigenschaft

$$\{x_i \;:\; i \notin supp(u)\} \succ \{x_j \;:\; j \in supp(u)\}$$

und $\mathcal{X}^{u^+} \succ \mathcal{X}^{u^-}$. Angenommen, $\mathcal{X}^{u^+} - \mathcal{X}^{u^-}$ wäre nicht in der reduzierten Gröbnerbasis $G_\prec$ von I_A. Dann gibt es ein $v \in \ker(A) \setminus \{0, u\}$ mit $\mathcal{X}^{v^+} | \mathcal{X}^{u^+}$ und $\mathcal{X}^{v^+} \succ \mathcal{X}^{v^-}$.

Dies zusammen mit der Inklusion $supp(v^+) \subseteq supp(u)$ garantiert, dass $supp(v^-) \subseteq supp(u)$, womit $supp(v) \subseteq supp(u)$ ist. Da aber u minimal primitiv ist, ist v ein ganzzahliges Vielfaches von u. Da aber $\mathcal{X}^{v^+} | \mathcal{X}^{u^+}$, ist $u = v$; ein Widerspruch.

□

Zur Berechnung später mehr.

Beispiel 3.6.9 ***(Fortsetzung von Beispiel 3.6.5).*** *Sei $A := (i, j, k)$ mit teilerfremden $i, j, k \in N$. Es ist $C_A = \left\{x_1^j - x_2^i, x_1^k - x_3^i, x_2^k - x_3^j\right\}$. Betrachte die folgenden drei Fälle:*

- *Für $A = (1, 2, 3)$ ist $U_A = Gr_A = C_A \cup \{x_3 - x_1x_2, x_1x_3 - x_2^2\}$.*
- *Für $A = (1, 2, 4)$ ist $C_A = U_A$ und $Gr_A \setminus U_A = \{x_3 - x_1^2x_2\}$.*
- *Für $A = (1, 2, 5)$ ist $U_A \setminus C_A = \{x_3 - x_1x_2^2, x_1x_3 - x_2^3\}$ und $Gr_A \setminus U_A = \{x_3 - x_1^3x_2\}$.*

Die Berechnungen wurden mit dem Programm 4ti2 (s. [tt]) durchgeführt.

Beispiel 3.6.10 *Für das Unabhängigkeitsmodell in 2×3 Kontingenztafeln ist $C_A = U_A = Gr_A$ und somit die Binome vom $\left(\begin{smallmatrix}+ & -\\ - & +\end{smallmatrix}\right)$-Typ die universelle Gröbnerbasis. Im Falle von 3×3-Kontingenztafeln sind die Binome vom $\left(\begin{smallmatrix}+ & -\\ - & +\end{smallmatrix}\right)$-Typ, wie in Beispiel 3.5.14 ersichtlich, keine universelle Gröbnerbasis. Es gilt $C_A \subset U_A = Gr_A$.*

3.7 Totalgradschranken

Als Totalgrad eines Binoms $\mathcal{X}^u - \mathcal{X}^v \in K[\mathcal{X}]$ sei die Einsnorm des Leitmonoms bezeichnet.

Satz 3.7.1 *Angenommen, es ist $rang(A) = d$. Mit*

$$D(A) := \max\left\{|det(a_{i_1}, \ldots, a_{i_d})| \ : \ 1 \leq i_1 < \ldots < i_d \leq n\right\}$$

ist der Totalgrad jedes primitiven Binoms in I_A kleiner als $(d+1)(m-d)D(A)$.

Ist $rang(A) < d$, kann durch Streichen einiger Zeilen die Voraussetzung aus Satz 3.7.1 erreicht werden. Der Beweis benötigt zur besseren Überschaubarkeit drei Lemmata, in denen stets $rang(A) = d$ vorausgesetzt wird.

Lemma 3.7.2 *Ist $u \in \ker_{\mathbb{Z}}(A)$ minimal primitiv, dann besitzt der Träger von $u : \mathcal{X} \to \mathbb{Z}$ höchstens $(d+1)$ Elemente.*

Beweis: Angenommen, der minimal primitive Vektor $u \in \ker_{\mathbb{Z}}(A)$ habe $r \geq d+2$ Einträge ungleich Null. Sei B die $d \times r$ Submatrix von A, die durch Streichen der zu Null assoziierten Spalten aus A hervorgeht. Es ist

$$\dim\ \ker_{\mathbb{Z}}(B) = r - rang(B) \geq 2.$$

Somit gibt es mindestens ein $v' \neq 0 \in \ker_{\mathbb{Z}}(A)$ mit mindestens einem Eintrag gleich Null. Wird die Aktion von v' auf A erweitert (Auffüllen mit Nullen), ist der Träger von v' echt kleiner als der von v, was einen Widerspruch zur Minimalität von v darstellt.

□

Lemma 3.7.3 *Ist* $u = (u_1, \ldots, u_m) \in \ker_{\mathbb{Z}}(A)$ *minimal primitiv, dann ist*

$$|u_i| \leq D(A),\ 1 \leq i \leq m.$$

Beweis: Es sei $supp(u) = \{i_1, \ldots, i_r\}$. Wegen Lemma 3.7.2 ist $r \leq d+1$. Mit der Minimalität von u folgt, dass die $d \times r$ Matrix $(a_{i_1}, \ldots, a_{i_r})$ den Rang $r-1$ besitzt. Da $rang(A) = d$, gibt es Spaltenvektoren $a_{i_{r+1}}, \ldots, a_{i_{d+1}}$, so dass sowohl die $d{\times}d$ Matrix $C := (a_{i_1}, \ldots, a_{i_r}, a_{i_{r+1}}, \ldots, a_{i_d})$ als auch die $d{\times}(d{+}1)$ Matrix $B := (a_{i_1}, \ldots, a_{i_r}, a_{i_{r+1}}, \ldots, a_{i_{d+1}})$ jeweils den Rang d haben. Es ist $\dim\ker(B) = 1$. Betrachte folgendes quadratisches Gleichungssystem mit Unbekannten $s_1, \ldots, s_{d+1}$:

$$ai_1 s_1 + \ldots + a_{i_d} x_d = -a_{i_{d+1}} s_{d+1}.$$

Setze $s_{d+1} := (-1)^{d+1} \det(C)$ und wende auf dieses Gleichungssystem mit invertierbarer Matrix C die Cramersche Regel[2] an. Bezeichne e_j den j-ten kanonischen Basisvektor in $\mathbb{Z}^{d+1}$. Es folgt:

$$\sum_{j=1}^{d+1} (-1)^j \cdot \det(a_{i_1}, \ldots, a_{i_{j-1}}, a_{i_{j+1}}, \ldots, a_{i_{d+1}}) \cdot e_{i_j} \in \ker(B). \tag{3.7}$$

Die Einschränkung von u auf $\{i_1, \ldots, i_{d+1}\}$ liegt ebenso in $\ker_{\mathbb{Z}}(B)$ und ist somit ein rationales Vielfaches von (3.7). Da aber (3.7) ganzzahlig ist und u minimal primitiv, muss (3.7) ein ganzzahliges Vielfaches von u sein. Es folgt die Behauptung.

□

Sind $u, v \in \mathbb{Z}^m$, so wird u als konform zu v bezeichnet, falls $supp(u^+) \subseteq supp(v^+)$ und $supp(u^-) \subseteq supp(v^-)$ gilt.

Lemma 3.7.4 *Jeder Vektor* $v \in \ker(A)$ *besitzt eine Darstellung*

$$v = \lambda_1 u_1 + \ldots + \lambda_{m-d} u_{m-d}, \qquad \lambda_i \in \mathbb{Q}_{\geq 0},\ 1 \leq i \leq m-d;$$

wobei alle $u_i \in \ker_{\mathbb{Z}}(A)$ *minimal primitiv und konform zu* v *sind.*

[2] etwa in [Fis05] S. 196

Beweis: Für ein festes d kann induktiv über m verfahren werden. Für $m = d$ ist $\ker(A) = 0$. Für $m = d + 1$ ist jedes Element nichtnegatives Vielfaches eines minimal primitiven Elements. Gelte nun die Behauptung für $(m-1) \in \mathbb{N}$. Ohne Einschränkung ist v nicht minimal primitiv. Ist der Träger von v kleiner als $\{1, \ldots, m\}$, folgt die Behauptung mit der Induktionsannahme. Sei also $supp(v) = \{1, \ldots, m\}$. Wähle ein minimal primitives Element $r = (r_1, \ldots, r_m)$ mit $r_1 v_1 > 0$. Setze

$$\lambda := \min \left\{ \frac{v_i}{r_i} \ : \ v_i/r_i \text{ ist wohldefiniert} \wedge v_i/r_i > 0 \ , \ 1 \leq i \leq m \right\}.$$

Sei etwa $\lambda = \frac{v_k}{r_k}$, dann ist $v - \lambda r \in \ker(A)$ konform zu v und der $k-$te Eintrag ist Null. Per Induktionsannahme kann $v - \lambda r$ als nichtnegative rationale Linearkombination von $(m - d - 1)$ minimal primitiven Elementen dargestellt werden und da $v = \lambda r + (v - \lambda r)$, ist v somit eine Linearkombination von höchstens $(m-d)$ Elementen, was zu zeigen war.

□

Beweis von Satz 3.7.1:
Sei $v \in \ker_{\mathbb{Z}}(A)$ ein primitives Element. Ist v minimal primitiv, folgt die Behauptung mit Lemma 3.7.3. Im Allgemeinen gibt es mit Lemma 3.7.4 eine nichtnegative rationale Linearkombination $u = \lambda_1 u_1 + \ldots + \lambda_{m-d} u_{m-d}$ mit den genannten Bedingungen. Da alle u_i konform zu v sind, ist $v^+ = \lambda_1 u_1^+ + \ldots + \lambda_{m-d} u_{m-d}^+$ und $v^- = \lambda_1 u_1^- + \ldots + \lambda_{m-d} u_{m-d}^-$.
Angenommen, es wäre ein λ_i größer als 1, dann wäre der ganzzahlige Vektor v^+ koordinatenweise größer als der ganzzahlige Vektor u_i^+. Ebenso wäre der Vektor u_i^- koordinatenweise kleiner als v^-. Mit anderen Worten gilt, dass $\mathcal{X}^{u_i^+} \mid \mathcal{X}^{v^+}$ und $\mathcal{X}^{u_i^-} \mid \mathcal{X}^{v^-}$. Dies aber widerspräche der Tatsache, dass v primitiv ist. Somit ist $0 \leq \lambda_i \leq 1, i = 1, \ldots, m - d$.

Nehmen wir nun an, dass der Totalgrad von $\mathcal{X}^{v^+} - \mathcal{X}^{v^-}$ die Einsnorm von v^+ ist. Mit der Dreiecksungleichung ist

$$\begin{aligned} \|v^+\|_1 &\leq \sum_{i=1}^{m-d} \lambda_j \cdot \|u_j^+\|_1 && (3.8) \\ &\leq (m-d) \cdot \max \left\{ \|u_j^+\|_1 \ : \ 1 \leq j \leq m - d \right\} && (3.9) \\ &\leq (m-d)(d+1)D(A). && (3.10) \end{aligned}$$

Die letzte Ungleichung folgt aus Lemma 3.7.2 zusammen mit Lemma 3.7.3.

□

Für eine beliebige Matrix A wird keine Aussage über die Mächtigkeit des Trägers eines minimal primitiven Elements getätigt. Somit ist in diesem Fall $m(m-d)D(A)$ eine obere Schranke für den Totalgrad. $D(A)$ ist wegen der Hadamard'schen Ungleichung kleiner als das Supremum der Einsnormen der Spalten von A.

Definition 3.7.5 ***(Homogenität).*** *Ein Polynom $f \in K[\mathcal{X}]$ heißt homogen vom Totalgrad n, falls alle Monome aus f denselben Totalgrad n besitzen. Ein Ideal $I \subset K[\mathcal{X}]$ heißt homogen, falls für alle $f \in I$ eine Darstellung*

$$f = f_1 + \ldots + f_s$$

existiert mit homogenen $f_i \in I$.

Lemma 3.7.6 *Das Ideal $I_A = \langle \mathcal{X}^{u^+} - \mathcal{X}^{u^-} \ : \ Au = 0 \rangle$ ist genau dann homogen, wenn $(1, \ldots, 1) \in \mathbb{N}^m$ im Zeilenraum von A liegt.*

Beweis: Ein Binom $\mathcal{X}^{u^+} - \mathcal{X}^{u^-}$ ist genau dann homogen, wenn $u = u^+ - u^-$ die Koordinatensumme 0 hat. I_A ist somit homogen, falls dies für seine Erzeuger zutrifft. Nach [Stu96] ist dies genau dann der Fall, wenn

$$(1, \ldots, 1) = (\ker(A))^\perp = Bild(A^t).$$

□

Korollar 3.7.7 *In algebraisch statistischen Modellen besitzt jedes primitive Binom aus I_A einen Totalgrad kleiner als $\frac{1}{2}(d+1)(m-d)D(A)$.*

Beweis: Mit Lemma 3.7.2 und 3.7.3 gilt im homogenen Fall :$\|u^+\|_1 = \|u^-\|_1 \leq \frac{1}{2}(d+1)D(A)$. Wird nun noch wie bei (3.10) abgeschätzt, folgt die Behauptung.

□

3.8 Die Gröbnerregion

Für die Berechnung universeller Gröbnerbasen ist es notwendig, sich mit einigen Eigenschaften von Monomordnungen näher zu befassen. Der Begriff des Anfangsideals wird in dem Sinne erweitert, dass dieses nicht zwingend ein Monomideal sein muss.

Definition 3.8.1 *Sei $\omega \in \mathbb{R}^m$ ein beliebiger Vektor. Für ein Polynom $f = \sum c_i \mathcal{X}^{a_i} \in K[\mathcal{X}]$ sei die Anfangsform in_ω als die Summe aller $c_i \mathcal{X}^{a_i}$ erklärt, für die das Skalarprodukt $\omega \cdot a_1$ maximal ist unter allen Monomen in f. Weiter sei für ein Ideal $I \subset K[\mathcal{X}]$ das Anfangsideal bezüglich ω durch*

$$in_\omega := \langle in_\omega(f) \ : \ f \in I \rangle$$

erklärt.

Für $\omega \geq 0$ und eine Monomordnung $\prec$ sei eine neue Monomordnung $\prec_\omega$ erklärt mit

$$a \prec_\omega b \quad :\Leftrightarrow \quad a \cdot \omega < b \cdot \omega \text{ oder } \{a \cdot \omega = b \cdot \omega \text{ und } a \prec b\}.$$

für alle $a, b \in \mathbb{N}_0^m$.

Im Allgemeinen ist das Anfangsideal in_ω kein Monomideal.

Beispiel 3.8.2 *Es sei* $f := x_1^4x_2^4 + x_1^2x_2^5 + x_2 \in K[x_1, x_2]$ *und* $I := \langle f\rangle$. *Für* $\omega = (1, 1)$ *ist* $in_\omega = \langle x_1^4x_2^4\rangle$ *ein Monomideal. Wird aber etwa* $\omega = (1, 2)$ *gewählt, ergibt sich* $in_\omega = \langle x_1^4x_2^4 + x_1^2x_2^5\rangle$ *und dies ist kein Monomideal.*

Lemma 3.8.3 *Für jedes Ideal* $I \subset K[\mathcal{X}]$ *ist* $in_\prec(in_\omega(I)) = in_{\prec_\omega}(I)$.

Beweis: Für jedes $f \in I$ ist $in_\prec(in_\omega(f)) = in_{\prec_\omega}(f)$. Das impliziert, dass $in_\prec(in_\omega(I))$ und $in_{\prec_\omega}(I)$ dieselben Monome beinhalten.

□

Es ergeben sich zwei unmittelbare Folgerungen, die die Berechnung von Gröbnerbasen bezüglich nichtmonomialer Anfangsideale ermöglichen:

Korollar 3.8.4 *Ist* $\omega \geq 0$ *und ist* G *Gröbnerbasis von* I *bezüglich* $\prec_\omega$, *dann ist* $\{in_\omega(g) : g \in G\}$ *eine Gröbnerbasis für* $in_\omega(I)$ *bezüglich* $\prec$.

Korollar 3.8.5 *Ist* $\omega \geq 0$ *und* $in_\omega(I)$ *ein Monomideal, dann ist* $in_\omega(I) = in_{\prec_\omega}(I)$.

Beweis: Das Anfangsideal eines Monomideals ist wiederum das Anfangsideal. Somit ist $in_\prec(in_\omega(I)) = in_\omega(I) = in_{\prec_\omega}(I)$.

□

Satz 3.8.6 *Für jedes Ideal* $I \subset K[\mathcal{X}]$ *und jede Monomordnung* $\prec$ *auf* $K[\mathcal{X}]$ *gibt es einen nichtnegativen Vektor* $\omega \in \mathbb{N}_0^m$, *so dass* $in_\omega(I) = in_\prec(I)$.

Beweis: siehe [Stu96].

Definition 3.8.7 ***(Gröbnerregion).*** *Für ein Ideal* $I \subset K[\mathcal{X}]$ *wird die Menge*

$$GR(I) := \{\omega \in \mathbb{R}^m \ : \ \exists \omega' \geq 0 : \ in_\omega = in_{\omega'}\}$$

als Gröbnerregion bezeichnet.

Per Konstruktion ist stets $\mathbb{R}_+^m \subseteq GR(I)$. Ein Beispiel dafür, dass für ein Ideal die Gröbnerregion nicht dem gesamten $\mathbb{R}^m$ entspricht, findet sich in [Stu96], Beispiel 1.7. Im hiesigen Kontext gilt folgendes Resultat:

Satz 3.8.8 *Ist ein Ideal* $I \subset K[\mathcal{X}]$ *homogen, dann erstreckt sich die Gröbnerregion über den ganzen Raum* $\mathbb{R}^m$.

Beweis: Sei $\omega \in \mathbb{R}^m$. Es existiert ein $\lambda \in \mathbb{R}_{>0}$, so dass $\omega' := \omega + (\lambda, \ldots, \lambda) \geq 0$. Kann gezeigt werden, dass $in_\omega(I) = in_{\omega'}(I)$, ist der Beweis beendet. Da I homogen ist, gibt es für alle $f \in I$ eine Darstellung $f = f_0 + f_1 + \ldots + f_r$ mit homogenen $f_0, f_1, \ldots, f_r \in I$. Die ω-Anfangsform von f ist somit $in_\omega(f) = in_\omega(f_{i_1}) + \ldots + in_\omega(f_{i_s})$ für eine geeignete Teilmenge $\{i_1, \ldots, i_s\}$ von Indizes. Jeder Summand $in_\omega(f_{i_j})$ liegt in $in_{\omega'}$ und somit auch in $in_\omega(f)$. Es folgt $in_\omega \subseteq in_{\omega'}$. Die Rückrichtung folgt analog.

□

3.9 Berechnung universeller Gröbnerbasen

Zu einer Matrix $A \in \mathbb{N}_0^{d\times m}$ sei

$$\Lambda(A) := \begin{pmatrix} A & 0 \\ E & E \end{pmatrix},$$

wobei $0 \in N_0^{d\times m}$ die Nullmatrix und $E \in \mathbb{N}_0^{m\times m}$ die Einheitsmatrix symbolisieren. Da $\ker(\Lambda(A)) = \{\ (u,-u)\ :\ u \in \ker(A)\}$, ist der Kern der Matrix A isomorph zu dem von $\Lambda(A) \in \mathbb{N}_0^{(d+m)\times 2m}$. Das torische Ideal $I_{\Lambda(A)}$ ist das Ideal

$$I_{\Lambda(A)} = \langle \mathcal{X}^{u^+}\mathcal{Y}^{u^-} - \mathcal{X}^{u^-}\mathcal{Y}^{u^+}\ :\ u \in \ker(A)\rangle$$

in dem Polynomring $K[\mathcal{X},\mathcal{Y}] := K[x_1,\dots,x_m,y_1,\dots,y_m]$.

Satz 3.9.1 *Für die Matrix $\Lambda(A)$ sind folgende Mengen an Binomen identisch:*

1. *Die Graverbasis von $I_{\Lambda(A)}$.*
2. *Die universelle Gröbnerbasis von $I_{\Lambda(A)}$.*
3. *Die reduzierte Gröbnerbasis von $I_{\Lambda(A)}$.*
4. *Bis auf skalare Vielfache ein beliebiges minimales Erzeugendensystem von $I_{\Lambda(A)}$.*

Beweis: Ein Vektor $u \in \ker(A)$ ist genau dann primitiv, wenn $(u,-u) \in \ker\Lambda(A)$ primitiv ist. Somit ist

$$Gr_{\Lambda(A)} = \left\{\mathcal{X}^{u^+}\mathcal{Y}^{u^-} - \mathcal{X}^{u^-}\mathcal{Y}^{u^+}\ :\ \mathcal{X}^{u^+} - \mathcal{X}^{u^-} \in Gr_A\right\}.$$

Offensichtlich ist $Gr_{\Lambda(A)}$ ein Erzeuger von $I_{\Lambda(A)}$. Nun wird gezeigt, dass $Gr_{\Lambda(A)}$ bis auf skalare Vielfache das eindeutig bestimmte minimale Erzeugendensystem ist. Angenommen dies wäre nicht der Fall, dann gibt es ein $g := \mathcal{X}^{u^+}\mathcal{Y}^{u^-} - \mathcal{X}^{u^-}\mathcal{Y}^{u^+} \in Gr_{\Lambda(A)}$, so dass $B := Gr_{\Lambda(A)} \setminus \{g\}$ ein Erzeuger von $I_{\Lambda(A)}$ ist. Insbesondere ist $g \in \langle B\rangle$. Deshalb gibt es (nach eventueller Substitution $v \mapsto -v$) ein $\mathcal{X}^{v^+}\mathcal{Y}^{v^-} \in I_{\Lambda(A)}$ welches $\mathcal{X}^{u^+}\mathcal{Y}^{u^-}$ teilt. Dies bedeutet aber, dass $u \in \ker(A)$ nicht primitiv ist. Ein Widerspruch. Da jede reduzierte Gröbnerbasis minimal ist und da $U_{\Lambda(A)} \subseteq Gr_{\Lambda(A)}$, folgt die Behauptung.

□

Korollar 3.9.2 ***(Berechnung der Graverbasis** Gr_A**).*** *Für die Bestimmung von Gr_A ergibt sich folgendes Vorgehen:*

1. *Wähle eine beliebige Monomordnung $\prec$ auf $K[\mathcal{X},\mathcal{Y}]$ und berechne dazu die reduzierte Gröbnerbasis.*
2. *Substituiere $y_1,\dots y_m \mapsto 1$.*

Im Allgemeinen ist die universelle Gröbnerbasis U_A nicht identisch mit Gr_A. Im Folgenden ist das Ideal I_A homogen und die Gröbnerregion somit ganz $\mathbb{R}^m$. Für eine Monomordnung $\prec$ und $\omega \in \mathbb{R}^m$ bezeichne G_ω die reduzierte Gröbnerbasis von I_A bezüglich $\prec_\omega$. Da $GR_A = \mathbb{R}^m$, werden alle reduzierten Gröbnerbasen von I_A durchlaufen, wenn ω den gesamten Raum durchläuft . Für $u \in \ker(A)$ sei

$$\begin{aligned} C_+[u] &:= \left\{\omega \in \mathbb{R}^m \ : \ \omega \cdot u^+ > \omega \cdot u^- \ \wedge \ \mathcal{X}^{u^+} - \mathcal{X}^{u^-} \in G_\omega\right\}, \\ C_-[u] &:= \left\{\omega \in \mathbb{R}^m \ : \ \omega \cdot u^+ < \omega \cdot u^- \ \wedge \ \mathcal{X}^{u^+} - \mathcal{X}^{u^-} \in G_\omega\right\}. \end{aligned}$$

Das zu $u \in \mathbb{Z}^m$ assoziierte Binom $\mathcal{X}^{u^+} - \mathcal{X}^{u^-}$ liegt genau dann in der universellen Gröbnerbasis U_A, wenn $C_+[u] \cap C_-[u] \neq \emptyset$. Für $v \in \mathbb{N}_0^m$ setze

$$M(v) := \{\omega \in \mathbb{R}^m \ : \ \mathcal{X}^v \notin in_\omega(I_A)\}.$$

Satz 3.9.3 *Die Menge $C_+[u]$ ist identisch mit*

$$M(u^-) \cap \left(\bigcap_{i \in supp(u^+)} M(u^+ - e_i) \right).$$

Beweis: Ein Vektor $\omega \in \mathbb{R}^m$ ist genau dann in $C_+[u]$, wenn $\mathcal{X}^{u^+} - \mathcal{X}^{u^-}$ in der reduzierten Gröbnerbasis G_ω mit Leitterm $\mathcal{X}^{u^+}$ enthalten ist. Dies ist genau dann der Fall, wenn $\mathcal{X}^{u^-}$ als auch jeder echte Teiler von $\mathcal{X}^{u^+}$ ein Standardmonom ist . Gleichbedeutend dazu ist, dass $\omega \in M(u^-)$ und $\omega \in M(u^+ - e_i)$ für alle $i \in supp(u^+)$.

□

Beobachtung 3.9.4 *M(v) kann anhand der Graverbasis Gr_A berechnet werden.*

Beweis: Wegen den Eigenschaften der Monomordnungen ist $in_\omega(I_A) = \langle in_\omega(f) \ : \ f \in Gr_A \rangle$. Da Gr_A reduziert ist, ergibt sich

$$\begin{aligned} M(v) &= \left\{\omega \in \mathbb{R}^m \ : \ \mathcal{X}^v \notin \langle in_\omega(f) \ : \ f \in Gr_A \rangle\right\} \\ &= \left\{\omega \in \mathbb{R}^m \ : \ \omega u^+ > \omega u^- \ : \ u \in Gr_A \ \wedge \ \mathcal{X}^{u^-} | \mathcal{X}^v\right\}. \end{aligned} \tag{3.11}$$

□

Beispiel 3.9.5 *Die 3×6 Matrix A sei definiert durch*

$$A := \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Die mit Korollar 3.9.2 berechnete Graverbasis ist

$$\begin{aligned} Gr_A &= \big\{x_1x_4 - x_2^2, x_1x_6 - x_3^2, x_4x_6 - x_5^2, x_1x_5 - x_2x_3, x_4x_3 - x_2x_5, \\ &\quad x_6x_2 - x_3x_5, x_1x_5^2 - x_2^2x_6, x_4x_3^2 - x_5^2x_1, x_6x_2^2 - x_3^2x_4, x_1x_4x_6 - x_2x_3x_5\big\}. \end{aligned}$$

Mit Hilfe von Lemma 3.7.2 ist zu sehen, dass im Gegensatz zu den anderen, das letzte Binom nicht minimal primitiv ist. Es genügt, das Binom $x_1x_4x_6 - x_2x_3x_5$ auf Zugehörigkeit bezüglich U_A zu überprüfen. Betrachte den zu dem Binom assoziierten Vektor $u := (1, -1, -1, 1, -1, 1)$. *Es ist die Frage ob $C_+[u] \cup C_-[u]$ leer ist oder nicht. Die Berechnung dieser beiden Mengen kann mit Satz 3.9.3 bewältigt werden. Mit Gleichung 3.11 ist*

$$\begin{aligned} M(u^-) &= \{\omega \in \mathbb{R}^6 \ : \ \omega_1 + \omega_5 > \omega_2 + \omega_3 \ , \ \omega_2 + \omega_6 > \omega_3 + \omega_5 \ , \ \omega_3\omega_4 > \omega_2\omega_5\}, \\ M(u^+ - e_1) &= \{\omega \in \mathbb{R}^6 \ : \ 2\omega_5 > \omega_4 + \omega_6\}, \\ M(u^+ - e_4) &= \{\omega \in \mathbb{R}^6 \ : \ 2\omega_3 > \omega_1 + \omega_6\}, \\ M(u^+ - e_6) &= \{\omega \in \mathbb{R}^6 \ : \ 2\omega_2 > \omega_1\omega_4\}. \end{aligned}$$

Werden diese Mengen geschnitten, ergibt sich $C_+[u] = \emptyset$. Vertauschen u^+ und u^- ihre Rollen, ergibt sich analog $C_-[u] = \emptyset$, es folgt $Gr_A \setminus U_A = \{x_1x_4x_6 - x_2x_3x_5\}$.

Kapitel 4

Abschließende Bemerkungen

Wie ersichtlich wurde bietet die in dieser Arbeit vorgeschlagene Algebraisierung ein umfassendes Werkzeug zur Überprüfung von Hypothesen und kann unter Umständen als Gegenargument zu eventuell fragwürdiger χ^2-Approximation verwendet werden. Für das Übersetzen des statistischen Problems in ein algebraisches bietet sich die Berechnung von Markovbasen mit Hilfe der Theorie über Gröbnerbasen an. Für das Unabhängigkeitsmodell zweier Zufallsvariabeln kann eine spezielle Markovbasis relativ einfach erhalten werden. Die Berechung über den Diaconis-Sturmfels-Algorithmus ermöglicht aber auch in diesem Fall durch Wahl einer geeigneten Monomordnung die Berechnung von Markovbasen für nicht vollständige Matrizen. Leider wurde von dem Autor der Diplomarbeit das Programm 4ti2 zu spät entdeckt. In diesem spiegelt sich die Anstrengung wieder, zu dieser Thematik schnelle Verfahren zur Berechung zu entwickeln. Im Falle des Modells keine-3-Wege Interaktion mit $m_1 = m_2 = m_3 = 3$ besitzt die mit 4ti2 berechnete minimale Markovbasis schon 81 Elemente, wovon 27 den Grad 4 besitzen und die restlichen 54 den Grad 6. Für $m_1 = m_2 = m_3 = 4$ besteht die generierte Markovbasis aus 148.968 Elementen, siehe etwa [AT]. Für allgemeine m_1, m_2, m_3 ist es nach wie vor eine Herausforderung, eine Markovbasis zu berechnen. Dies zeigt insbesondere, dass der auf diese Fragestellung modifizierte Metropolis-Sampler im Allgemeinen aus einer viel zu großen Liste aus Basiselementen auswählen muss. Dies könnte in Grenzfällen zu Schwierigkeiten mit den implementierten Pseudo-Generatoren für u.i.v Zufallsvariablen führen. Aber durch Typisierung der Basiselemente können sich Vereinfachungen in der Programmierung ergeben, z.B. dass im Unabhängigkeitsmodell bei der Implementiereung nicht auf eine Liste zurückgegriffen wird, sondern die Schritte vom $\left(\begin{smallmatrix} + & - \\ - & + \end{smallmatrix}\right)$-Typ durch zufällige Wahl von zwei Zeilen und Spalten realisiert werden. Leider konnte die Frage nach der Konvergenzgeschwindigkeit mangels Zeit nicht mehr angerissen werden. Dieser Themenkreis wird in [DSC95] behandelt. Gegenwärtig wird weiter versucht, eine größtmögliche Klasse von Modellen in den hier geschilderten Kontext zu bringen. Dazu zählt etwa die Betrachtung von hierarchischen loglinearen Modellen, etwa in [Sul]. Die Schwierigkeit für ein gegebenes Modell explizit eine Markovbasis anzugeben ist im Allgemeinen noch nicht beantwortet worden. Weitere algebraische Methoden wie z.B. die Klassifizierung von Elementen der Markovbasis würden weitere Transfairüberlegungen ergeben.

Kapitel 5

Anhang

5.1 Die Geometrische Verteilung

Definition 5.1.1 ***(Geometrische Verteilung).*** *Eine Zufallsvariable V mit Dichte $\mathbb{P}(V=n) = t(1-t)^{n-1}$, $n \in \mathbb{N}$ heißt geometrische Verteilung. Diese Verteilung beschreibt die Wahrscheinlichkeit, dass genau n Versuche bis zum ersten Treffer bei unabhängigen Bernoulliversuchen benötigt werden.*

Für die Verteilungsfunktion ergibt sich mit Hilfe der geometrischen Reihe:

$$\mathbb{P}(V \leq n) = t \sum_{k=1}^{n} (1-t)^{k-1} = t \cdot \frac{1-(1-t)^n}{t} = 1-(1-t)^n.$$

Eine die geometrische Verteilung definierende Eigenschaft ist die Gedächtnislosigkeit.

Satz 5.1.2 ***(Gedächtnislosigkeit der geometrischen Verteilung).*** *Eine diskrete $\mathbb{N}$-wertige Zufallsvariable V ist genau dann geometrisch verteilt, wenn sie gedächtnislos ist im folgenden Sinne:*

$$\mathbb{P}(V > s+t \mid V > t) = \mathbb{P}(V > s), \qquad s, t \in \mathbb{N}. \tag{5.1}$$

Beweis: Die Gleichung (5.1) ist äquivalent zu

$$\mathbb{P}(V > s+t) = \mathbb{P}(V > s+t, V > t) = \mathbb{P}(V > t)\mathbb{P}(V > s), \qquad s, t \in \mathbb{N}, \tag{5.2}$$

welche die Grundlage des Beweises bildet. Ist eine Zufallsvariable geometrisch verteilt, dann ergibt sich mit der Verteilungsfunktion, dass $\mathbb{P}(V > l) = (1-t)^l$ und $\mathbb{P}(V > k) = (1-t)^k$ für alle $k, l \in \mathbb{N}$. Werden diese beiden Größen multipliziert, ergibt sich Gleichung (5.2).

Gelte umgekehrt Gleichung (5.2). Es genügt zu zeigen, dass es ein $q \in (0,1)$ gibt, so dass $\mathbb{P}(V > N) = q^n, n \in \mathbb{N}$. Behauptung: $\mathbb{P}(V > 1)$ ist ein solches q. Dies ist eine Folgerung aus Gleichung (5.2). Setze $k = l = 1$, dann ist $\mathbb{P}(V > 2) = \mathbb{P}(V > 1)^2$. Gilt die Behauptung für ein $n \in \mathbb{N}$, dann ist mit $k = 1, l = n$ $\mathbb{P}(V > n+1) = \mathbb{P}(V > n)\mathbb{P}(V > 1) = \mathbb{P}(V > 1)^{n+1}$. Induktiv folgt die Behauptung. Der Parameter t dieser Verteilung ist $\mathbb{P}(V = 1) = 1 - \mathbb{P}(V > 1)$.

□

5.2 Unabhängigkeitsmodell

Für das Unabhängigkeitsmodell vereinfacht sich Gleichung 3.5 weiter. Wie gezeigt wurde ist die Gesamtheit aller Matrizen vom $\left(\begin{smallmatrix}+&-\\-&+\end{smallmatrix}\right)$-Typ eine Markovbasis. Sei $f = (f_{ij})$ eine solche Matrix. Für die Ablehnungswahrscheinlichkeit des Metropolis- Samplers ergibt sich, dass

$$\begin{aligned}
\mathbb{H}_b(u+\epsilon f)/\mathbb{H}_b(u) &= \prod_{\substack{ij\\ \epsilon f_{ij}\neq 0}} \frac{u_{ij}!}{(u_{ij}+\epsilon f_{ij})!} \\
&= \prod_{\substack{i,j\\ \epsilon f_{ij}=1}} \frac{u_{ij}!}{(u_{ij}+1)!} \prod_{\substack{i,j\\ \epsilon f_{ij}=-1}} \frac{u_{ij}!}{(u_{ij}-1)!} \\
&= \prod_{\substack{i,j\\ \epsilon f_{ij}=1}} (u_{ij}+1)^{-1} \prod_{\substack{i,j\\ \epsilon f_{ij}=-1}} u_{ij}.
\end{aligned}$$

Es bleibt nur noch das Produkt von vier Zahlen zu berechnen.

```
%------------Beipiel zum Unabhängigkeitsmodell-------



%Matrix aus Diaconis98 tabelle 1


U=[68 119 26 7;20 84 17 94 ;15 54 14 10;5 29 14 16];

[row,col]=size(U);




sumofcol=[sum(U(1,:)),sum(U(2,:)),sum(U(3,:)),sum(U(4,:))];
sumofrow=[sum(U(:,1)),sum(U(:,2)),sum(U(:,3)),sum(U(:,4))];
total=592;

%die ML Schätzung
MML=sumofcol'*sumofrow/total;

%Berechnung des Chiq.-Wertes
k=0
    for l=1:row
            for p=1:col
                k=k+(MML(l,p)-U(l,p))*(MML(l,p)-U(l,p))/MML(l,p);
```

```
            end
        end
mlM=k
% Ergibt 138.2898


 chi_count=0;


for i=1:1000000
    h=1;
        col_rand_1=floor(col*rand(1))+1;   % Zufällige Wahl zweier Zeilen
        col_rand_2=floor(col*rand(1))+1;   % Wahrscheinlichkeit, dass col_rand_1
    while col_rand_2==col_rand_1           % kleiner als col_rand_2 ist 0.5
        col_rand_2=floor(col*rand(1))+1;
        col_rand_1=floor(col*rand(1))+1;
    end
        row_rand_1=floor(row*rand(1))+1;   % Zufällige Wahl der Spalten
        row_rand_2=floor(row*rand(1))+1;
    while row_rand_2==row_rand_1
        row_rand_2=floor(row*rand(1))+1;
        row_rand_1=floor(row*rand(1))+1;
    end
   if (U(row_rand_1,col_rand_2)>=1 & U(row_rand_2,col_rand_1)>=1)
        h=h*U(row_rand_1,col_rand_2)*U(row_rand_2,col_rand_1)/
        ((U(row_rand_1,col_rand_1)+1)*(U(row_rand_2,col_rand_2)+1));
        if rand(1)<=h
         % Setzen des neuen Zustands
         % mit Wahrscheinlichkeit alpha,
         % falls dieser zulässig ist
            U(row_rand_1,col_rand_1)=U(row_rand_1,col_rand_1)+1;
            U(row_rand_2,col_rand_2)=U(row_rand_2,col_rand_2)+1;
            U(row_rand_1,col_rand_2)=U(row_rand_1,col_rand_2)-1;
            U(row_rand_2,col_rand_1)=U(row_rand_2,col_rand_1)-1;
        end
    end
    U;
        k=0;
        for l=1:row
            for p=1:col                    % Berechnung der Statistik
                k=k+(MML(l,p)-U(l,p))*(MML(l,p)-U(l,p))/MML(l,p);
            end
        end
                                            % Zählen der Elemente mit
```

```
        if k>=mlM                               % größerem Wert
            chi_count=chi_count+1;
        end
        chi_count;
end


%nach Burn-In ist der approximative p-Wert der Chiquadratstatistik nun

pvalue=chi_count/1000000
 % ergibt 2.0000e-006

dies belegt dass die Hypothese der Unabhängigkeit verworfen werden kann.
```

5.3 Keine-3-Wege-Interaktion

Als eine Verallgemeinerung dieses Modells für 3 Zufallsvariabeln kann das Modell Keine 3-Wege-Interaktion angesehen werden. Eine Modellbeschreibung findet sich in [BFH75].

```
%-----------------------------------------------------------------
%-----------*Berechnungen zu dem Modell: "keine 3 wege Interakion"-----
%-----------------------------------------------------------------


%Als ersters wird die suffiziente Matrix A generiert
%bezeichne u_{+ij}, u_{i+j}, u_{ij+}  die Randhäufigkeiten, diese sind suffizient.
%Werden die Elemente der der 3x3x3 Tafel vektorisiert mit der Ordnung
% (1,1,1),...,(1,3,3),(2,1,1), ...,(3,3,3) ist die Matrix A, die den Vektor
% (u_{+11},u_{+12},...,u_{+22},...,u_{+33},u_{1+1},u_{1+2},...,u_{11+},..u_{33+})'
%erzeugt gegeben durch:


eins=[ 1 1 1];
A=[kron(eins , kron( eye(3), eye(3)))
   kron(eye(3) , kron( eins, eye(3)))
   kron(eye(3) ,kron( eye(3), eins))]




%-----------------------------------------------------------------------
%* mit 4ti2 kann eine reduzierte Markovbasis bezüglich A berechnet werden *--
```

```
%     Die Spalten folgender Matrix MB sind die Elemente der Markovbasis     -
%             Das Ergenbis aus 4ti2 wurde transponiert                      -
%---------------------------------------------------------------------------



MB=[
  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0  0 -1  1  0  1 -1
  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0  0 -1  1  0  1 -1  0
  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1  0 -1 -1  0  1  0  0  0 -1  0  1  1  0 -1
  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1 -1 -1  0  1  1 -1  0  0 -1  1  1  0 -1 -1  1  0
  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0  0 -1  1  0  1 -1  0  0  0
  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1 -1  0  0  0  0 -1  1  0 -1  1  0  0  0  0  1 -1
  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1 -1  1 -1  0 -1  0  1  0 -1  1 -1  1  0  1  0 -1
  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1 -1  0 -1  0  1  0  1 -1 -1  1  0  1  0 -1  0 -1  1
  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0  0 -1  1  0  1 -1  0  0  0  0
  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1 -1  0  0  0  0 -1  1  0 -1  1  0  0  0  0  1 -1  0
  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1 -1  0  0  1 -1 -1  0  1 -1  1  0  0 -1  1  1  0 -1
  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1  0 -1 -1  0  1  0  0  0 -1  0  1  1  0 -1  0  0  0
  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1  0 -1 -1  1  0  0 -1  1 -1  0  1  1 -1  0  0  1 -1
  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1  0 -1  0 -1  1 -1  1  0 -1  0  1  0  1 -1  1 -1  0
  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1  0 -1  0  0  0 -1  0  1 -1  0  1  0  0  0  1  0 -1
  0  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0 -1  1  0  0  0  0  1 -1  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0
  0  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0 -1  0  1  1  0 -1  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0
  0  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0  0 -1  1  0  1 -1  0  0  0  0  0  0  0  0  0
  0  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0 -1  1  0  1 -1
  0  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0  0 -1  0  1  1  0 -1
  0  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0  0 -1  1  0  0  0  0  1 -1
  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0 -1  1  0  0  0  0  1 -1  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0  0
  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0  0 -1  0  1  1  0 -1  0  0  0  0  1 -1  0 -1  1
  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0  0 -1  1  0  1 -1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0 -1  1  0  1 -1  0
  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0 -1  0  1  1  0 -1
  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0  0 -1  1  0  0  0  0  1 -1  0
  0  0  0  1  0 -1 -1  0  1 -1  0  1  0  0  0  1  0 -1  1  0 -1 -1  0  1  0  0  0
  0  0  0  1  0 -1 -1  0  1  0  0  0 -1  0  1  1  0 -1  0  0  0  0  0  0  0  0  0
  0  0  0  1  0 -1 -1  0  1  0  0  0 -1  1  0  1 -1  0  0  0  0  0 -1  1  0  1 -1
  0  0  0  1  0 -1 -1  0  1  0  0  0  0 -1  1  0  1 -1  0  0  0 -1  1  0  1 -1  0
  0  0  0  1  0 -1 -1  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0 -1  0  1  1  0 -1
  0  0  0  1  0 -1 -1  0  1  1  0 -1 -1  0  1  0  0  0 -1  0  1  0  0  0  1  0 -1
  0  1 -1 -1  0  1  1 -1  0  0 -1  1  1  0 -1 -1  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
  0  1 -1 -1  0  1  1 -1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0 -1  1  1  0 -1 -1  1  0
  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0 -1  0  1  1  0 -1  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0  0
  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0  0 -1  1  0  0  0  0  1 -1  0  0  0  0  1 -1  0 -1  1
  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0  0 -1  1  0  1 -1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
```

```
 0  1 -1  0 -1  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0 -1  1  0  1 -1  0  0  0
 0  1 -1  0 -1  1  0  0  0  0  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0 -1  1  0  0  0  0  1 -1
 0  1 -1  0 -1  1  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0  0 -1  0  1  1  0 -1  0  0  0
 0  1 -1  0  0  0  0 -1  1 -1  0  1  0  0  0  1  0 -1  1 -1  0  0  0  0 -1  1  0
 0  1 -1  0  0  0  0 -1  1  0 -1  1  0  0  0  0  1 -1  0  0  0  0  0  0  0  0  0
 0  1 -1  0  0  0  0 -1  1  0 -1  1  0  1 -1  0  0  0  0  0  0  0 -1  1  0  1 -1
 0  1 -1  0  0  0  0 -1  1  0  0  0  0 -1  1  0  1 -1  0 -1  1  0  1 -1  0  0  0
 0  1 -1  0  0  0  0 -1  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0 -1  1  0  0  0  0  1 -1
 0  1 -1  0  0  0  0 -1  1  1 -1  0  0  0  0 -1  1  0 -1  0  1  0  0  0  1  0 -1
 0  1 -1  1 -1  0 -1  0  1  0 -1  1 -1  1  0  1  0 -1  0  0  0  0  0  0  0  0  0
 0  1 -1  1 -1  0 -1  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0 -1  1 -1  1  0  1  0 -1
 1 -1  0 -1  0  1  0  1 -1 -1  1  0  1  0 -1  0 -1  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0
 1 -1  0 -1  0  1  0  1 -1  0  0  0  0  0  0  0  0  0 -1  1  0  1  0 -1  0 -1  1
 1 -1  0 -1  1  0  0  0  0 -1  0  1  1  0 -1  0  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0
 1 -1  0 -1  1  0  0  0  0 -1  1  0  0  0  0  1 -1  0  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0
 1 -1  0 -1  1  0  0  0  0 -1  1  0  1 -1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
 1 -1  0 -1  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0 -1  1  0  1 -1  0  0  0  0
 1 -1  0 -1  1  0  0  0  0  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0 -1  1  0  0  0  0  1 -1  0
 1 -1  0 -1  1  0  0  0  0  0  1 -1  0 -1  1  0  0  0 -1  0  1  1  0 -1  0  0  0
 1 -1  0  0  0  0 -1  1  0 -1  0  1  0  0  0  1  0 -1  0  1 -1  0  0  0  0 -1  1
 1 -1  0  0  0  0 -1  1  0 -1  1  0  0  0  0  1 -1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
 1 -1  0  0  0  0 -1  1  0 -1  1  0  1 -1  0  0  0  0  0  0  0 -1  1  0  1 -1  0
 1 -1  0  0  0  0 -1  1  0  0  0  0 -1  1  0  1 -1  0 -1  1  0  1 -1  0  0  0  0
 1 -1  0  0  0  0 -1  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0 -1  1  0  0  0  0  1 -1  0
 1 -1  0  0  0  0 -1  1  0  0  1 -1  0  0  0  0 -1  1 -1  0  1  0  0  0  1  0 -1
 1 -1  0  0  1 -1 -1  0  1 -1  1  0  0 -1  1  1  0 -1  0  0  0  0  0  0  0  0  0
 1 -1  0  0  1 -1 -1  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0 -1  1  0  0 -1  1  1  0 -1
 1  0 -1 -1  0  1  0  0  0 -1  0  1  0  0  0  1  0 -1  0  0  0  1  0 -1 -1  0  1
 1  0 -1 -1  0  1  0  0  0 -1  0  1  1  0 -1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
 1  0 -1 -1  0  1  0  0  0 -1  1  0  1 -1  0  0  0  0  0 -1  1  0  1 -1  0  0  0
 1  0 -1 -1  0  1  0  0  0  0 -1  1  0  1 -1  0  0  0 -1  1  0  1 -1  0  0  0  0
 1  0 -1 -1  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0 -1  0  1  1  0 -1  0  0  0
 1  0 -1 -1  0  1  0  0  0  0  0  0  1  0 -1 -1  0  1 -1  0  1  0  0  0  1  0 -1
 1  0 -1 -1  1  0  0 -1  1 -1  0  1  1 -1  0  0  1 -1  0  0  0  0  0  0  0  0  0
 1  0 -1 -1  1  0  0 -1  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0 -1  0  1  1 -1  0  0  1 -1
 1  0 -1  0 -1  1 -1  1  0 -1  0  1  0  1 -1  1 -1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
 1  0 -1  0 -1  1 -1  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0 -1  0  1  0  1 -1  1 -1  0
 1  0 -1  0  0  0 -1  0  1 -1  0  1  0  0  0  1  0 -1  0  0  0  0  0  0  0  0  0
 1  0 -1  0  0  0 -1  0  1 -1  0  1  1  0 -1  0  0  0  0  0  0 -1  0  1  1  0 -1
 1  0 -1  0  0  0 -1  0  1 -1  1  0  0  0  0  1 -1  0  0 -1  1  0  0  0  0  1 -1
 1  0 -1  0  0  0 -1  0  1  0 -1  1  0  0  0  0  1 -1 -1  1  0  0  0  0  1 -1  0
 1  0 -1  0  0  0 -1  0  1  0  0  0 -1  0  1  1  0 -1 -1  0  1  1  0 -1  0  0  0
 1  0 -1  0  0  0 -1  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0 -1  0  1  0  0  0  1  0 -1
]'
```

```
u=[ 9 16 41 85 52 105 77 30 38 8 8 46 35 29 54 37 15 22 11 14 38 47 35 115 25 21 42]'
u_dach=[12.01 14.43 39.58 85.75 52.51 103.8 73.24 31.06 40.66
 9.436 12.25 40.27 36.55 24.17 57.27 34.01 15.58 24.45 6.552
 11.32 45.13 44.68 39.32 113 31.77 19.36 36.87]';
chi=chiquadrat(u)


      chi_vec=[];
      chi_count=0;
for i=1:100000
      u_neu=[];    %  Auswahl eines beliebigen
      M=MB(:,(floor(81 * rand(1)) +1));    %  Elements der Markovbasis
      e= -1+2*round(rand(1));              %  Wahl des Vorzeichens
       M=e*M  ;
       for j=1:length(M)
           h=1;                            % Initialisierung der chiq.-statistik

           if   (M(j)==-1) & (u(j)-1>=0)   % Überprüfen der Zulässigkeit
               u_neu=[u_neu;u(j)-1];       % Erzeugen des neuen Kandidaten
               h=h*u(j) ;                  % Berechnung für Akzeptanzw'keit
           elseif  (M(j)==1)
               u_neu=[u_neu;u(j)+1];       % Ebenso mit diesen Einträgen
               h=h/(u(j)+1) ;              % (vgl Unanhängigkeitsmodell)
           elseif  (M(j)==0)
               u_neu=[u_neu;u(j)];
           else
               break;
           end
       end
       if length(u_neu)==27              % d.h. Falls der Schritt zulässig ist
           if rand(1)<=min(h,1)          % Akzeptanzwahrscheinlichkeit
               u=u_neu;                  % Neuer Zustand
           end
       end
       %if chiquadrat(u)>=chi                  % Zählen der Elemente mit
       %   chi_count=chi_count+1;              % größerem Wert der Statistik
      end
       %if (i>=1000 & mod(i,500)==0)          % Dokumentation jedes 500sten
```

```
    %   chi_vec=[chi_vec,chiquadrat(u)];     % Schrittes
    %end                                     % (nach anfänglichem Burn In)

end


chi_count/100000


chi_vec

% Nach einem Burn-In von 100.000 Schritten
% ergab der Algorithmus einen sehr geringen p-Wert.
% Somit kann von keinem 3-Wege Effekt ausgegangen werden
```

5.4 Symmetrie in Kontingenztafeln

Um auf Symmetrie in $I \times I$-Kontingenztafeln zu testen wurden in [BFH75] Kap. 8.2 die ML-Schätzungen hergeleitet. Diese sind

$$\hat{u}_{ij} = \begin{cases} \frac{u_{ij}+u_{ji}}{2} & i \neq j \\ u_{ii} & i = j \end{cases}.$$

Die Realisierung der suffizienten Statistik einer Matrix für das Symmetriemodell ist mit $(u_{ii}, i = 1, \ldots, I, (u_{ij} + u_{ji}), (u_{ij} + u_{ji}), j = i+1, \ldots, I, i = 1, \ldots, (I-1))^t$ gegeben (siehe hierzu [KK07]). Im Falle der 5×5-Matrizen ist die suffiziente Statistik $T : 5 \times 5 \to \mathbb{N}_0^9$ definiert durch

$$\begin{aligned}
T((1,1)) &:= (1,0,0,0,0,0,0,0,0)^t \\
T((2,2)) &:= (0,1,0,0,0,0,0,0,0)^t \\
T((3,3)) &:= (0,0,1,0,0,0,0,0,0)^t \\
T((1,2)) &:= (0,0,0,1,1,0,0,0,0)^t \\
T((2,1)) &:= (0,0,0,1,1,0,0,0,0)^t \\
&\vdots \\
T((4,5)) &:= (0,0,0,0,0,0,0,1,1)^t \\
T((5,4)) &:= (0,0,0,0,0,0,0,1,1)^t.
\end{aligned}$$

Der allgemeine Fall lässt sich analog konstruieren. Eine Markovbasis lässt sich durch scharfes Hinsehen rekonstruieren. Das Ideal I_T wird erzeugt von

$$\{x_{ij} - x_{ji} \; : \; 1 \leq i < j \leq I\}.$$

Ein möglicher nächster Zustand des Metropolis-Samplers wird dadurch generiert, dass zu einem beliebig gewählten (i, j)-Eintrag mit $i \neq j$ der Wert 1 und zu dem entsprechenden (j, i)-Eintrag der Wert -1 addiert wird. Die Ablehnungswahrscheinlichkeit des Metropolis-Samplers ist somit

$$\min\left\{\frac{u_{ji}}{u_{ij}+1}\ ,\ 1\right\}.$$

```
%---------------------------Beispiel----------------------
%------------------------Symmetriemodell------------------

 U= [35 4 6 4 7;
     2 47 3 8 2;
     4 5 25 3 7;
     5 2 3 23 3;
     3 6 5 8 11]
% Für diese Matrix sind  10 erwartete Werte
% ausserhalb der Diagonalen kleiner als 5
% Diese Matrix besitz eine Chiquadratwert von 11.4838
% Ergebnis simulierter p-Wert, nach jeweil 500000 Iterationen:
% 0.3214  0.3255 0.3274  0.3300  0.3289  0.3301  0.3253
% 0.3205  0.3197 0.3297  0.3215  0.3381  0.3259


 U= [35 4 2 4 5;
     2 47 3 5 2;
     4 5 25 3 3;
     5 2 3 23 1;
     3 6 5 8 11]
 % Für diese Matrix sind  alle erwarteten Werte
 % ausserhalb der Diagonalen kleiner als 5
 % Diese Matrix besitz eine Chiquadratwert von  11.6746
 % Ergebnis simulierter p-Wert:


 U= [10 2 1 1 3;
     6 17 4 0 4;
     1 0 23 0 2;
     1 2 0 14 0;
     0 5 0 3 31]

 % Chiquadratwert 16.1111
 % Strukturelle Null und 16 Werte ausserhalb der Diagonalen sind
 % kleiner als 5
```

```
   % Ergebnis simulierter p-Wert:  0.0307

   U=[0 0 0 0 0;
      0 1 0 0 0;
      1 0 22 4 0;
      2 1 23 34 2;
      2 1 6 7 6]



  % Daten aus Discordant Sib Pairs
  % Chiquadratwert von 29.1481
  % Ergebnis simulierter p-Wert: 6.0000e-006

  z=0;
for k=1:500000
  p=floor(5 * rand(1)) +1;           %  Auswahl eines beliebigen
  q=floor(5 * rand(1)) +1;           %  Eintrags der Matrix


 while (p==q);
         p=floor(5 * rand(1)) +1;    %  Herausfiltern der Diagonaleinträge
         q=floor(5 * rand(1)) +1;
    end

        if ( U(q,p)-1 >=0)           %  Der MC-Algorithmus
           if  ( rand(1) <=min(U(q,p)/(U(p,q)+1),1))
                       U(p,q)=U(p,q)+1;
                       U(q,p)=U(q,p)-1;
           end
        end

           chi=0 ;           %Berechnung der jeweiligen Chiquadratstatistik
     for i=1:4
        for j=(i+1):5
           if (U(i,j)+U(j,i)~=0)    %Sonderfall strukturelle Nullen
           chi=chi+(U(i,j)-U(j,i))^2/(U(i,j)+U(j,i));
           end
        end
     end
      if (chi >=   11.6746)  % Zählen, wieviel Matrizen einen größeren Wert
           z=z+1;            % der Chiquadratstatistik aufweisen
        end
      end
Ergebnis=z/500000
```

Literaturverzeichnis

[Agr92] Alan Agresti. A survey of exact inference for contingency tables. With comments and a rejoinder by the author. *Stat. Sci.*, 7(1):131–177, 1992.

[Agr07] Alan Agresti. *An introduction to categorical data analysis. 2nd ed.* Wiley Series in Probability and Statistics; Wiley Interscience. Hoboken, NJ: John Wiley , 2007.

[AT] Satoshi AOKI and Akimichi TAKEMURA. The list of indispensable moves of the unique minimal markov basis for $3 \times 4 \times k$ and $4 \times 4 \times 4$ contingency tables with fixed two-dimensional marginals.

[AT05] Satoshi Aoki and Akimichi Takemura. Markov chain Monte Carlo exact tests for incomplete two-way contingency tables. *J. Stat. Comput. Simulation*, 75(10):787–812, 2005.

[BC89] Julian Besag and Peter Clifford. Generalized Monte Carlo significance tests. *Biometrika*, 76(4):633–642, 1989.

[Beh00] Ehrhard Behrends. *Introduction to Markov chains. With special emphasis on rapid mixing.* Advanced Lectures in Mathematics. Braunschweig: Vieweg. , 2000.

[BFH75] Yvonne M.M. Bishop, Stephen E. Fienberg, and Paul W. Holland. *Discrete multivariate analysis: Theory and practice. With the collaboration of Richard J. Light and Frederick Mosteller.* Cambridge, Mass. - London: The MIT Press., 1975.

[Bre99] Pierre Bremaud. *Markov chains. Gibbs fields, Monte Carlo simulation, and queues.* Texts in Applied Mathematics. New York, NY: Springer, 1999.

[CDDH05] Yuguo Chen, Ian Dinwoodie, Adrian Dobra, and Mark Huber. Lattice points, contingency tables, and sampling. Mathematical Society (AMS). Contemporary Mathematics 374, 65-78 (2005)., 2005.

[CG95] Siddhartha Chib and Edward Greenberg. Understanding the metropolis-hastings algorithm. *The American Statistician*, 49(4):327–335, 1995.

[CLO07] David Cox, John Little, and Donal O'Shea. *Ideals, varieties, and algorithms. An introduction to computational algebraic geometry and commutative algebra. 3rd ed.* Undergraduate Texts in Mathematics. New York, NY: Springer. , 2007.

[Din98] Ian H. Dinwoodie. The Diaconis-Sturmfels algorithm and rules of succession. *Bernoulli*, 4(3):401–410, 1998.

[DM04a] I.H. Dinwoodie and Brenda MacGibbon. Exact analysis of a paired sibling data. *Comput. Stat.*, 19(4):525–534, 2004.

[DM04b] I.H. Dinwoodie and Brenda MacGibbon. Exact analysis of a paired sibling data. *Comput. Stat.*, 19(4):525–534, 2004.

[DS98] Persi Diaconis and Bernd Sturmfels. Algebraic Algorithms for Sampling from Conditional Distributions. *Ann. Stat.*, 26(1):363–397, 1998.

[DSC95] Persi Diaconis and Laurent Saloff-Coste. What do we know about the metropolis algorithm? In *STOC '95: Proceedings of the twenty-seventh annual ACM symposium on Theory of computing*, pages 112–129, New York, NY, USA, 1995. ACM Press.

[Fis05] Gerd Fischer. *Lineare Algebra, 15th revised ed.* Vieweg Studium: Grundkurs Mathematik. Wiesbaden: Vieweg , 2005.

[HKS04] Serkan Hosten, Amit Khetan, and Bernd Sturmfels. Solving the likelihood equations, 2004.

[KK07] Anne Krampe and Sonja Kuhnt. Bowker's test for symmetry and modifications within the algebraic framework. *Comput. Stat. Data Anal.*, 51(9):4124–4142, 2007.

[Kön05] Wolfgang König. Stochastische Prozesse. Markovketten in diskreter und stetiger Zeit. www.math.uni-leipzig.de/ koenig/www/StPrSS06.pdf , 2005.

[Kre90] Ulrich Krengel. Probability theory. (Wahrscheinlichkeitstheorie.). Fischer, Gerd (ed.) et al., 1990.

[MN89] P. McCullagh and J.A. Nelder. *Generalized linear models. 2nd ed.* Monographs on Statistics and Applied Probability. 37. London etc.: Chapman and Hall. , 1989.

[MP83] Cyrus R. Mehta and Nitin R. Patel. A network algorithm for performing Fisher's exact test in r$\times c$ contingency tables. *J. Am. Stat. Assoc.*, 78:427–434, 1983.

[Nor98] James R. Norris. *Markov chains. Reprint.* Cambridge Series in Statistical and Probabilistic Mathematics, 2. Cambridge: Cambridge Univ. Press , 1998.

[Pat89] J. M. Patin. A very short proof of stirling's formula. *Am. Math. Monthly*, 96(1):41–42, 1989.

[PS05] Lior (ed.) Pachter and Bernd (ed.) Sturmfels. *Algebraic Statistics for Computational Biology.* Cambridge: Cambridge University Press , 2005.

[Rap03] Fabio Rapallo. Algebraic Markov Bases and MCMC for Two-Way Contingency Tables. *Scand. J. Stat.*, 30(2):385–397, 2003.

[Stu95] Bernd Sturmfels. On vector partition functions. *J. Comb. Theory, Ser. A*, 72(2):302–309, 1995.

[Stu96] Bernd Sturmfels. *Gröbner Bases and Convex Polytopes.* University Lecture Series. 8. Providece, RI: American Mathematical Society (AMS). xi, 162 p. , 1996.

[Sul] Seth Sullivant. Log-linear models, toric varieties, and their markov bases. http://www.math.harvard.edu/ seths/lecture2.pdf.

[Sul06] Seth Sullivant. Statistical models are algebraic varieties. http://www.math.harvard.edu/ seths/lecture1.pdf, 2006.

[tt] 4ti2 team. 4ti2 – a software package for algebraic, geometric and combinatorial problems on linear spaces. Available at www.4ti2.de.

[Wit74] Hermann Witting. *Mathematische Statistik. Eine Einführung in Theorie und Methoden. 2., durchges. Aufl.* Teubner Studienbücher Mathematik. Leitfäden der angewandten Mathematik und Mechanik LAMM. Band 9. Stuttgart: B. G. Teubner, 1974.

[zVAbPS] Mitschriften zur Vorlesung Algebra2 bei Prof.Dr. Schmale. Algebra 2.

Erklärung

Hiermit versichere ich, dass ich diese Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel und Quellen benutzt habe.