

Effiziente Berechnung von Varianzen in Markov Ketten

Maximilian Starke

Fakultät für Informatik, Technische Universität Dresden

12. Februar 2020

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	2
2	Grundlagen	3
2.1	Wahrscheinlichkeitstheorie	3
2.2	Markovketten	6
3	Formale Herleitung eines Algorithmus	10
3.1	Berechnung von Erwartungswerten	10
3.2	Berechnung von Varianzen	12
3.3	Berechnung von Kovarianzen	15
3.4	Die initiale Verteilung und die gesamte Markovkette	16
3.5	Komplexität	17
4	Performancemessung am praktischen Beispiel	18
4.1	Herman's selbst-stabilisierender Algorithmus	18
4.2	Implementation	19
4.2.1	Beschreibung der Softwarelösung	20
5	Ein Blick auf MDPs	21
6	Appendix	21

1 Einführung

Markov-Ketten mit Kantengewichten dienen der Modellierung und Analyse einer wichtigen Zielgröße in probabilistischen Systemen, z.B. der Dauer eines Verbindungsaufbaus in Computernetzwerken. Im Gegensatz zum Erwartungswert der akkumulierten Gewichte bis zum Erreichen eines Zielzustandes wurden die Schwankungen der Zielgröße in der wissenschaftlichen Literatur kaum untersucht. Dabei sind stark volatile Zielgrößen besonders in sicherheitskritischen Systemen zu vermeiden, was wiederum einen stabilen Algorithmus für ihre Berechnung erfordert.

Verhoeff [6] hat bereits weitere praktische Verwendungen zusammengetragen, von denen wir hier zwei erläutern wollen: Die niederländische Regierung hat in Bezug auf Probleme mit hohem Verkehrsaufkommen einst entschieden, anstatt auf möglichst geringe Erwartungswerte der Fahrtzeit hinzuwirken, eher die Minimierung der Varianz der Fahrtzeit in den Fokus zu nehmen. Auf diese Weise ist man im Durchschnitt zwar länger unterwegs, erreicht aber mehr Planungssicherheit, kann also Ankunftszeiten genauer vorhersagen. Wenn wir mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit $\geq p$ rechtzeitig an einem Ort ankommen möchten, dann ist für die Planung des spätestmöglichen Zeitpunkt für den Beginn der Fahrt neben dem Erwartungswert die Varianz von wesentlicher Bedeutung, da zum erwarteten Mittelwert ein von der Varianz abhängender Puffer addiert werden muss. In der Wirtschaft kommt es immer wieder vor, dass Budgets für bestimmte Ausgaben geplant werden. Insofern größere Abweichungen der Kosten nach oben unbedingt zu vermeiden sind, kann es von Vorteil sein, anstatt eine Investition in Höhe von fiktiven 1000€ zu planen, bei der mit 300€ Abweichung der tatsächlichen Kosten gerechnet werden muss, eine zweckgleiche Investition in Höhe von erwarteten 1100€ anzustreben, bei welcher eine Abweichung von nur 50€ erwartet wird.

Verhoeff hat dazu bereits lineare Gleichungssystem für die Berechnung von Varianzen und Kovarianzen präsentiert [6]. Wir wollen zunächst die erforderlichen Grundlagen zu Wahrscheinlichkeitstheorie sowie Markovketten für den Leser darlegen. Anschließend wollen wir einen Algorithmus zur Berechnung von Varianzen und Kovarianzen akkumulierter Kantengewichte formal herleiten. Wir wollen die Betrachtungen von Verhoeff insbesondere um eine ausführliche Herleitung für die Berechnung von Kovarianzen erweitern und zeigen, dass alle ermittelten Gleichungssysteme tatsächlich eindeutig lösbar sind. Abschließend wollen wir eine Implementation des hergeleiteten Algorithmus' hinsichtlich Performance analysieren.

META: Aufgabenstellung:

Nachdem die grundlegende Terminologie ausgearbeitet wurde, ist die Kernaufgabe der Arbeit die formale Erarbeitung und Analyse eines Algorithmus zur Berechnung der Varianz von akkumulierten Gewichten auf Basis von [1]. Der Algorithmus soll implementiert und zur experimentellen Analyse von anwendungsorientierten Beispielen herangezogen werden. Als weitergehende Forschungsfrage soll außerdem untersucht werden, ob das Verfahren auch zur Berechnung von Kovarianzen geeignet ist oder inwieweit der

Algorithmus auf Markov-Entscheidungsprozesse mit
Kantengewichten verallgemeinert werden kann.

2 Grundlagen

2.1 Wahrscheinlichkeitstheorie

Definition 2.1 (diskreter Wahrscheinlichkeitsraum) Wir nennen ein Paar (Ω, P) einen diskreten Wahrscheinlichkeitsraum, wenn Ω eine abzählbare Menge ist und $P : \Omega \rightarrow [0, 1]$ eine Funktion mit

$$\sum_{\omega \in \Omega} P(\omega) = 1. \quad (1)$$

Wir nennen Ω in diesem Zusammenhang auch Ergebnismenge und P eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf Ω .

Definition 2.2 (Zufallsvariable) Sei (Ω, P) ein diskreter Wahrscheinlichkeitsraum. Eine Funktion $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ heißt Zufallsvariable auf (Ω, P) . Wir nennen X auch kurz Zufallsvariable, falls der Kontext (Ω, P) klar ist.

Definition 2.3 (Erwartungswert) Sei (Ω, P) ein diskreter Wahrscheinlichkeitsraum und X eine Zufallsvariable auf (Ω, P) . Mit

$$\mathcal{E}_{(\Omega, P)}(X) := \sum_{\omega \in \Omega} P(\omega) \cdot X(\omega) \quad (2)$$

bezeichnen wir den Erwartungswert von X auf (Ω, P) . Sollte der Kontext (Ω, P) klar sein, schreiben wir auch kurz $\mathcal{E}(X)$.

Beispiel 2.4 Ein manipulierter Spielwürfel habe 6 Seiten $\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$, wobei die 1 im Vergleich zu einem herkömmlichen Würfel mit einer 2 überklebt wurde. Dies drücken wir durch die Zufallsvariable $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R} : s \mapsto \max(2, s)$ aus. Außerdem wurde der Würfel mit ungleichmäßig verteilter Masse so gefertigt, dass nach einem Wurf nicht alle Seiten gleich wahrscheinlich oben liegen. Wir nehmen für dieses Beispiel eine Wahrscheinlichkeitsverteilung mit $P(1) = 0,1$, $P(2) = 0,15$, $P(3) = 0,15$, $P(4) = 0,15$, $P(5) = 0,15$, $P(6) = 0,3$ an. Dann ist im Schnitt nach vielen Würfeln eine Augenzahl pro Wurf von

$$\mathcal{E}(X) = (0,1 + 0,15) \cdot 2 + 0,15 \cdot (3 + 4 + 5) + 0,3 \cdot 6 = 4,1$$

zu erwarten und damit 0,6 Augen mehr als bei einem ungezinkten Würfel mit Erwartungswert 3,5. Würden wir nun alle beschrifteten Zahlen noch zusätzlich quadrieren, erhielten wir einen Würfel mit $Y : \Omega \rightarrow \mathbb{R} : s \mapsto \max(4, s^2)$ und würden im Schnitt 19,3 Augen bei einem Wurf erwarten:

$$\mathcal{E}(Y) = (0,25) \cdot 4 + 0,15 \cdot (9 + 16 + 25) + 0,3 \cdot 36 = 19,3$$

Es lässt sich leicht die folgende Linearität des Erwartungswertes beobachten. Seien X, Y Zufallsvariablen, $c, d \in \mathbb{R}$. Dann gilt:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(X + cY + d) &= \sum_{\omega \in \Omega} P(\omega) \cdot (X + cY + d)(\omega) \\ &= \sum_{\omega \in \Omega} P(\omega) \cdot X(\omega) + c \cdot \sum_{\omega \in \Omega} P(\omega) \cdot Y(\omega) + d \cdot \sum_{\omega \in \Omega} P(\omega) \\ &= \mathcal{E}(X) + c\mathcal{E}(Y) + d\end{aligned}\tag{3}$$

Dabei ist $X + cY + d$ die üblich Notation für die Zufallsvariable gegeben durch $Z : \Omega \rightarrow \mathbb{R} : \omega \mapsto X(\omega) + c \cdot Y(\omega) + d$.

Definition 2.5 (Varianz) Sei (Ω, P) ein diskreter Wahrscheinlichkeitsraum und X eine Zufallsvariable auf (Ω, P) . Mit

$$\mathcal{V}ar_{(\Omega, P)}(X) := \mathcal{E}_{(\Omega, P)} \left((X - \mathcal{E}_{(\Omega, P)}(X))^2 \right)\tag{4}$$

bezeichnen wir die Varianz von X auf (Ω, P) . Sollte der Kontext (Ω, P) klar sein, schreiben wir kurz $\mathcal{V}ar(X)$.

Definition 2.6 (Kovarianz) Seien (Ω, P) ein diskreter Wahrscheinlichkeitsraum und X, Y Zufallsvariablen auf (Ω, P) . Die Kovarianz $\mathcal{C}ov_{(\Omega, P)}(X, Y)$ ist definiert durch:

$$\mathcal{C}ov_{(\Omega, P)}(X, Y) := \mathcal{E} \left((X - \mathcal{E}(X))(Y - \mathcal{E}(Y)) \right)\tag{5}$$

Offensichtlich ist die Varianz ein Spezialfall der Kovarianz, denn aus den Definitionen folgt unmittelbar $\mathcal{V}ar_{(\Omega, P)}(X) = \mathcal{C}ov_{(\Omega, P)}(X, X)$. Wir betrachten im Folgenden, wie sich Kovarianzen durch Erwartungswerte beschreiben lassen.

Lemma 2.7 Seien X und Y Zufallsvariablen. Dann gilt:

$$\mathcal{C}ov(X, Y) = \mathcal{E}(XY) - \mathcal{E}(X)\mathcal{E}(Y)\tag{6}$$

Beweis.

$$\begin{aligned}\mathcal{C}ov(X, Y) &= \mathcal{E} \left((X - \mathcal{E}(X))(Y - \mathcal{E}(Y)) \right) && \text{(Definition 2.6)} \\ &= \mathcal{E}(XY - X\mathcal{E}(Y) - Y\mathcal{E}(X) + \mathcal{E}(X)\mathcal{E}(Y)) \\ &= \mathcal{E}(XY) - 2\mathcal{E}(X)\mathcal{E}(Y) + \mathcal{E}(X)\mathcal{E}(Y) && \text{(Linearität (3))} \\ &= \mathcal{E}(XY) - \mathcal{E}(X)\mathcal{E}(Y)\end{aligned}$$

□

Betrachten wir den Spezialfall $X = Y$ von Lemma 2.7, dann erhalten wir folgende Beziehung für Varianzen:

Korollar 2.8 Sei X eine Zufallsvariable. Dann gilt:

$$\mathcal{V}ar(X) = \mathcal{E}(X^2) - \mathcal{E}(X)^2\tag{7}$$

Dual zur Linearität von Erwartungswerten (3) lässt sich für Varianzen folgende Beziehung feststellen:

Lemma 2.9 Sei X eine Zufallsvariable, $c, d \in \mathbb{R}$. Dann gilt:

$$\mathcal{V}ar(cX + d) = c^2 \mathcal{V}ar(X) \quad (8)$$

Beweis.

$$\begin{aligned} \mathcal{V}ar(cX + d) &= \mathcal{E} \left((cX + d - \mathcal{E}(cX + d))^2 \right) && \text{(Definition 2.5)} \\ &= \mathcal{E} \left((cX + d - c\mathcal{E}(X) - d)^2 \right) && \text{(Linearität von } \mathcal{E} \text{ (3))} \\ &= \mathcal{E} \left(c^2 \cdot (X - \mathcal{E}(X))^2 \right) \\ &= c^2 \cdot \mathcal{E} \left((X - \mathcal{E}(X))^2 \right) && \text{(Linearität von } \mathcal{E} \text{ (3))} \\ &= c^2 \cdot \mathcal{V}ar(X) && \text{(Definition 2.5)} \quad \square \end{aligned}$$

Entsprechend der Intuition ist die Varianz, das Quadrat der Standardabweichung, invariant unter Addition einer Konstanten zur Zufallsvariable. Wird jedoch die Zufallsvariable mit einem Faktor skaliert, so ändert sich die Varianz um das Quadrat des Faktors. Nicht umsonst wird die Varianz auch mittlere quadratische Abweichung genannt.

Durch das Wegfallen von d lässt sich recht trivial auf Gleichungen schließen, welche unter Umständen nicht mehr auf dem ersten Blick als klar und offensichtlich angesehen werden können. Das folgende Korollar soll dies verdeutlichen:

Korollar 2.10 Sei X eine Zufallsvariable und $c \in \mathbb{R}$. Dann gilt:

$$\mathcal{E}((c + X)^2) = (c + \mathcal{E}(X))^2 + \mathcal{V}ar(X) \quad (9)$$

Beweis. Aus Korollar 2.8 folgt unmittelbar

$$\mathcal{V}ar(X + c) = \mathcal{E}((X + c)^2) - (\mathcal{E}(X + c))^2.$$

Die linke Seite kann nach Lemma 2.9 vereinfacht werden zu $\mathcal{V}ar(X + c) = \mathcal{V}ar(X)$. Der Subtrahend $(\mathcal{E}(X + c))^2$ lässt sich aufgrund der Linearität (Gleichung 3) auch als $(\mathcal{E}(X) + c)^2$ schreiben. \square

Beispiel 2.11 Wir wollen nun Beispiel 2.4 fortsetzen. Nach Korollar 2.8 beträgt die Varianz beim ursprünglichen Würfel also $\mathcal{V}ar(X) = \mathcal{E}(X^2) - \mathcal{E}(X)^2 = \mathcal{E}(Y) - \mathcal{E}(X)^2 = 19,3 - 16,81 = 2,49$. Es sei bemerkt, dass wir Y geschickt so gewählt haben, dass $Y = X^2$ gilt. Und tatsächlich ergibt die Berechnung nach Definition 2.5 diesen Wert:

$$\begin{aligned} \mathcal{V}ar(X) &= 0,15 \cdot ((3 - 4,1)^2 + (4 - 4,1)^2 + (5 - 4,1)^2) + \\ &\quad + 0,25 \cdot (2 - 4,1)^2 + 0,3 \cdot (6 - 4,1)^2 \\ &= 0,25 \cdot 4,41 + 0,15 \cdot (1,21 + 0,01 + 0,81) + 0,3 \cdot 3,61 \\ &= 2,49 \end{aligned}$$

Die Kovarianz lässt sich nach Lemma 2.7 berechnen als $\mathcal{C}ov(X, Y) = \mathcal{E}(XY) - \mathcal{E}(X)\mathcal{E}(Y)$. Wir kennen bereits $\mathcal{E}(X)$ sowie $\mathcal{E}(Y)$ und es gilt:

$$\mathcal{E}(XY) = \mathcal{E}(X^3) = 0,25 \cdot 2^3 + 0,15 \cdot (3^3 + 4^3 + 5^3) + 0,3 \cdot 6^3 = 99,2$$

Dann ist $\text{Cov}(X, Y) = 99.2 - 4,1 \cdot 19,3 = 20.07$ und tatsächlich ergibt die explizite Rechnung denselben Wert:

$$\begin{aligned}\text{Cov}(X, Y) &= \mathcal{E}\left((X - \mathcal{E}(X))(Y - \mathcal{E}(Y))\right) \\ &= 0,25 \cdot (2 - 4,1)(4 - 19,3) \\ &\quad + 0,15 \cdot (3 - 4,1)(9 - 19,3) + 0,15 \cdot (4 - 4,1)(16 - 19,3) \\ &\quad + 0,15 \cdot (5 - 4,1)(25 - 19,3) + 0,3 \cdot (6 - 4,1)(36 - 19,3) \\ &= 20.07\end{aligned}$$

2.2 Markovketten

Definition 2.12 (Markovkette) Eine Markovkette ist ein Tupel (Q, P, I) mit den Eigenschaften

- (a) Q ist eine Menge.
- (b) $P : Q \times Q \rightarrow [0, 1]$ mit der Eigenschaft $\forall q \in Q : \sum_{q' \in Q} P(q, q') = 1$
- (c) $I : Q \rightarrow [0, 1]$ ist eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf Q .

Die Bilder von P nennen wir auch Transitionswahrscheinlichkeiten und definieren mit welcher Wahrscheinlichkeit, nämlich $P(q, q')$ vom aktuellen Zustand q in den Zustand q' übergegangen wird. I ist die initiale Verteilung, welche definiert, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein Zustand als Startzustand gewählt wird.

Für theoretische Betrachtungen ist es durchaus sinnvoll unendliche Markovketten zu betrachten. Wir werden uns jedoch auf endliche beschränken, d.h. $|Q| < \infty$, sobald wir zur Berechnung von u.a. Varianzen entsprechende Gleichungssysteme herleiten. Andernfalls bestünde das lineare Gleichungssystem aus unendlich vielen Gleichungen in unendlich vielen Variablen.

Definition 2.13 (Pfad) Sei $M = (Q, P, I)$ eine Markovkette. Die Menge aller endlichen Pfade in M ist definiert durch

$$\text{Paths}(M) := \{p \in Q^k \mid k \in \mathbb{N}_+ \wedge \forall 0 \leq i < k : P(p_i, p_{i+1}) > 0\} \quad (10)$$

Wir bezeichnen mit $|p|$ die Länge eines Pfades, d.h. $|p| := k$ für $p \in Q^k$ und beginnen Indizes bei 0. Die Wahrscheinlichkeit $\tilde{P}(p)$ eines Pfades ist gegeben durch

$$\tilde{P}(p) := \prod_{i=0}^{|p|-2} P(p_i, p_{i+1}) \quad (11)$$

Insbesondere ist $\tilde{P}(p) = 1$ für alle Pfade p mit $|p| = 1$. Für Tupel $p \in Q^k$, $k \in \mathbb{N}^+$, die keine Pfade sind, wäre $\tilde{P}(p) = 0$.

Für $|p| = 2$ entspricht die Wahrscheinlichkeit $\tilde{P}(p)$ genau der Wahrscheinlichkeit gegeben durch die Funktion P , nämlich der Transitionswahrscheinlichkeit aus der Markovkette. \tilde{P} ergibt sich als eindeutige Fortsetzung von P , also $P = \tilde{P}|_{Q \times Q}$, und wir schreiben im Folgenden einfach nur P .

Definition 2.14 (Gewichtsfunktion) Sei $M = (Q, P, I)$ eine Markovkette. Eine Gewichtsfunktion auf M ist eine Abbildung

$$R : Q \times Q \rightarrow \mathbb{R}. \quad (12)$$

Wir bezeichnen Gewichtsfunktionen typischerweise mit R in Anlehnung an das englische Wort *reward*. Offenbar gibt es analog zur Wahrscheinlichkeit P eine eindeutige Fortsetzung für eine Gewichtsfunktion R auf Pfade, gegeben durch Aufsummierung aller Kantengewichte entlang eines solchen:

$$\tilde{R} : \bigcup_{k \in \mathbb{N}_+} Q^k \rightarrow \mathbb{R} : p \mapsto \sum_{i=0}^{|p|-2} R(p_i, p_{i+1}) \quad (13)$$

Wir schreiben im Folgenden einfach R .

Definition 2.15 Sei $M = (Q, P, I)$ eine Markovkette, $s \in Q$ ein (frei gewählter) Startzustand und $A \subseteq Q$ eine Menge von Zielzuständen. Wir bezeichnen die Menge der Pfade, welche in s starten und in A enden, jedoch A nicht zwischenzeitlich schon erreichen mit:

$$\text{Paths}_{s \rightarrow A}(M) := \{p \in \text{Paths}(M) \mid p_0 = s \wedge p_{|p|-1} \in A \wedge \forall i < |p| - 1 : p_i \notin A\} \quad (14)$$

Wir ziehen nun Erkenntnisse heran, die Baier und Katoen in Kapitel 10.1 ihres Buches *Principles of Modelchecking* [1] beschreiben, speziell im Abschnitt *Reachability Probabilities*. Setzen wir einmal voraus, dass von jedem Zustand $q \in Q$, welcher von s erreichbar ist, ein Pfad in die Zielzustandsmenge A existiert, das heißt

$$\exists p \in \text{Paths}_{s \rightarrow \{q\}}(M) \quad \Rightarrow \quad \exists p \in \text{Paths}_{q \rightarrow A}(M).$$

Unter dieser Voraussetzung beobachteten Baier und Katoen, dass es ein fast sicheres Ereignis ist, nach endlich vielen Übergängen in einem Zustand aus A vorbeizukommen. Die endlichen Pfade, welche wir ausschließlich betrachten wollen, lassen sich als Präfixe der unendlichen Pfade $\text{Paths}_{inf}(s) := \{p \in Q^\omega \mid p(0) = s\}$ der Markovkette auffassen. Man sieht leicht, dass sich ein endlicher Pfad mit der Menge an jenen unendlichen Pfaden identifizieren lässt, welche diesen als Präfix haben. Eine Menge endlicher Pfade ist abzählbar, da wir die Pfade als endliche Wörter über dem Alphabet bestehend aus den Zuständen auffassen können. Nach der Beobachtung ist dann

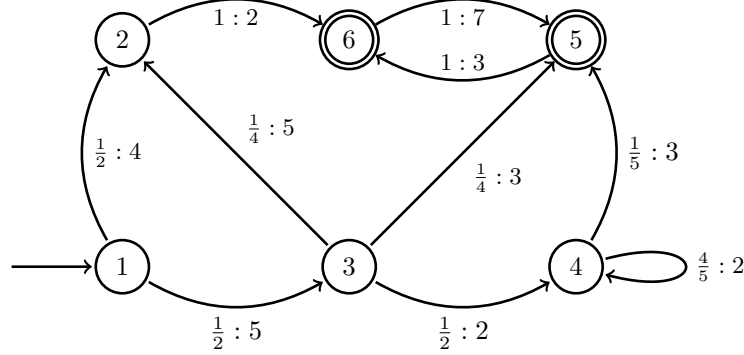
$$(\text{Paths}_{s \rightarrow A}(M), P)$$

ein diskreter Wahrscheinlichkeitsraum, da die Menge aller Pfade, welche A nie besuchen ein fast unmögliches Ereignis darstellt. Die Fortsetzung von R eine Zufallsvariable auf $\text{Paths}_{s \rightarrow A}(M)$.

Beispiel 2.16 Gegeben sei eine Markovkette $M = (Q, P, I)$ mit

$$\begin{aligned} Q &= \{1, 2, 3, 4, 5, 6\} \\ P &= \begin{pmatrix} 0 & 0,5 & 0,5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0,25 & 0 & 0,5 & 0,25 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,8 & 0,2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ I &= (1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0)^\top \end{aligned}$$

Wir betrachten also eine Markovkette mit dem einzigen initialen Zustand 1. Weiterhin sei $\{5, 6\}$ die betrachtete Menge an Zielzuständen, welche wir auf Pfaden erreichen wollen. Eine Markovkette lässt sich immer auch als Graph auffassen, wir beschriften alle Kanten (i, j) mit Übergangswahrscheinlichkeit und Wert der Gewichtsfunktion R in der Schreibweise $P(i, j) : R(i, j)$. Sei die Gewichtsfunktion R implizit definiert durch folgenden Graphen:



Wir wollen nun zur Veranschaulichung den Erwartungswert und die Varianz von R im Wahrscheinlichkeitsraum $(\text{Paths}_{1 \rightarrow \{5,6\}}(M), P)$ betrachten. Die von 5 beziehungsweise 6 ausgehenden Kanten samt Beschriftung werden für diesen Fall irrelevant. Alle Pfade mit Wahrscheinlichkeit 0 können wir direkt entfernen und die Tupel aus Q^n mit Wörtern über dem Alphabet Q identifizieren. Wir erhalten so:

$$\text{rPaths}_{1 \rightarrow \{5,6\}}(M) = \{126, 1326, 135\} \cup \{134^n 5 \in Q^{n+3} \mid n \geq 1\}$$

Sei $\Omega := \text{rPaths}_{1 \rightarrow \{5,6\}}$. Für den Erwartungswert $\mathcal{E}(R)$ ergibt sich:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(R) &= \sum_{p \in \Omega} P(p) \cdot R(p) \\ &= \frac{1}{2} \cdot 6_{[126]} + \frac{1}{8} \cdot 12_{[1326]} + \frac{1}{8} \cdot 8_{[135]} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{20} \cdot \left(\frac{4}{5}\right)^n \cdot (10 + 2n)_{[134^n 5]} \\ &= 10 \end{aligned}$$

Für das Berechnen der unendlichen Summe möchten wir an dieser Stelle auf die Appendix verweisen. Mit Korollar 6.2 und 6.4 und der Zerlegung

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{20} \cdot \left(\frac{4}{5}\right)^n \cdot (10 + 2n) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{4}{5}\right)^n + \frac{1}{10} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{4}{5}\right)^n \cdot n$$

lässt sich der Wert dieser Summe, nämlich 4,5 leicht ausrechnen. Als Varianz

$\text{Var}(R)$ erhalten wir, diesmal unter Verwendung von Korollar 6.6:

$$\begin{aligned}
\text{Var}(R) &= \mathcal{E}((R-10)^2) \\
&= \frac{1}{2} \cdot (6-10)^2 + \frac{1}{8} \cdot (12-10)^2 + \frac{1}{8} \cdot (8-10)^2 + \\
&\quad + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{20} \cdot \left(\frac{4}{5}\right)^n \cdot (10+2n-10)^2 \\
&= 9 + \frac{1}{5} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{4}{5}\right)^n \cdot n^2 \\
&= 9 + 36 \\
&= 45
\end{aligned}$$

Bemerkt sei, dass die Zufallsvariable $X := (R-10)^2$, per Definition

$$(R-10)^2 : \text{rPaths}_{1 \rightarrow \{5,6\}}(M) \rightarrow \mathbb{R} : p \mapsto (R(p)-10)^2$$

im Allgemeinen nicht die Eigenschaft der eindeutigen Fortsetzung von Kanten zu Pfaden erfüllt:

$$\forall n \in \mathbb{N}, p \in Q^n : n > 1 \Rightarrow X(p) = \sum_{i=0}^{n-2} X(p(i), p(i+1))$$

Beispielsweise verletzt $X(1,3) + X(3,2) = 25 + 25 \neq 0 = X(132)$ diese Eigenschaft. Während im Graphen eingezeichnete Kantengewichte immer zu einer Zufallsvariablen auf der Menge der Pfade fortgesetzt werden kann, können wir nicht alle Zufallsvariablen auf Kantengewichte zurückführen, insbesondere X also nicht durch Kantengewichte im Graphen einzeichnen.

An diesem Beispiel sehen wir, dass die explizite Berechnung von Varianzen bereits kompliziert werden kann, wenn nur ein Kreis trivialer Länge im Graphen der Markovkette enthalten ist. Stellen wir uns einen Graphen vor, in dem Knoten a und b existieren sowie Kanten mit positiver Wahrscheinlichkeit für $(a,a), (a,b), (b,a)$. Dann gibt es nicht mehr nur eine Möglichkeit, einen Kreis zu finden, sondern unendlich viele, z.B. $b^\omega, (ab)^\omega, (aab)^\omega, (aaab)^\omega, \dots$.

Definition 2.17 Sei $M = (Q, P, I)$ eine endliche Markovkette, $A \subseteq Q$ eine Zielmenge. Dann bezeichnen wir mit $P_{\rightarrow A}$ die folgende Matrix:

$$P_{\rightarrow A} : Q^2 \rightarrow [0, 1] : \begin{cases} P(s, t) & \text{falls } s \notin A \\ 0 & \text{falls } s \in A \end{cases} \quad (15)$$

Diese Modifikation entspricht dem Entfernen von allen ausgehenden Kanten von Zuständen $a \in A$.

Satz 2.18 Sei $M = (Q, P, I)$ eine endliche Markovkette, $A \subseteq Q$ eine Zielmenge, die von jedem Knoten aus erreichbar ist ($\forall s \in Q : \exists p \in \text{Paths}_{s \rightarrow A}(M)$). Dann ist die Matrix $D := P_{\rightarrow A} - \mathbb{1}$ invertierbar.

Beweis. Aus der linearen Algebra ist bekannt, dass D genau dann invertierbar ist, wenn $Dx = 0$ nur die Lösung $x = 0$ hat. Nehmen wir also an, $x \in R^Q$

mit $x \neq 0$ erfüllt $Dx = 0$. Dann gilt auch $\forall k \in \mathbb{R} : D(kx) = 0$. Wählen wir ein geeignetes k , so erhalten wir eine Lösung z mit einem positiven Eintrag, d.h. $Dz = 0$ und $\exists q \in Q : z_q > 0$. Sei $E \subseteq Q$ die Indexmenge aller maximalen Einträge von z , also $e \in E :\Leftrightarrow \forall q \in Q : z_q \leq z_e$. Sei $s \in A$. Dann folgt aus $(Dz)_s = 0$, dass $\sum_{q \in Q} (P_{\rightarrow A} - \mathbb{1})_{(s,q)} \cdot z_q = -\sum_{q \in Q} \mathbb{1}_{(s,q)} \cdot z_q = 0$ und damit $z_s = 0$.

Sei $s \in E$. Dann ist $z_s > 0$ und daher $s \notin A$. Aus $(Dz)_s = 0$ folgt dann $\sum_{q \in Q} (P_{\rightarrow A} - \mathbb{1})_{(s,q)} \cdot z_q = 0$. Damit bekommen wir $\sum_{q \in Q} P_{(s,q)} \cdot z_q = z_s$. Da nach Definition 2.12 $q \mapsto P(s, q)$ eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf Q ist, folgt schließlich $\forall q \in Q : P(s, q) > 0 \Rightarrow z_q = z_s$. Schließlich kann die gewichtete Summe nur genau dann den maximalen Wert z_s annehmen, wenn alle zu gewichtenden Summanden bereits maximal sind. D.h. für jeden Nachfolgeknoten $t \in Q$ von $s \in E$ in der Markovkette M liegt selbst wieder in E . Da ein Knoten $a \in A$ von s aus erreichbar ist, gilt auch $a \in E$. Aber dann wäre $a \notin A$. Wir erhalten einen Widerspruch. \square

3 Formale Herleitung eines Algorithmus

Ziel ist es nun, Algorithmen zu beschreiben und zu analysieren, welche bei gegebener Markovkette M , gegebenem Startzustand s und gegebener Zielzustandsmenge A die Varianz bzw. Kovarianz berechnen. Wir beschränken uns dabei auf den Fall, dass A von jedem Zustand in M aus erreichbar ist.

Definition 3.1 Sei Q eine Menge, $n \in \mathbb{N}, n > 2$ und $p \in Q^n$, in folgenden Betrachtungen als Pfad aufgefasst. Dann bezeichnen wir mit $p_{\leftarrow 1}$ den Teilpfad von $p = (p_0, \dots, p_{n-1})$ ohne den ersten Knoten p_0 :

$$p_{\leftarrow 1} := (p_1, p_2, \dots, p_{n-1}) \quad (16)$$

3.1 Berechnung von Erwartungswerten

Seien $M = (Q, P, I)$ eine Markovkette, $s \in Q$, $\emptyset \neq A \subseteq Q$ und sei von jedem Zustand $q \in Q$ ein Zustand in A erreichbar. Sei R eine Gewichtsfunktion auf M . Wir betrachten im diskreten Wahrscheinlichkeitsraum $(\text{Paths}_{s \rightarrow A}(M), P)$ den Erwartungswert $\mathcal{E}_{(\text{Paths}_{s \rightarrow A}(M), P)}(R)$, im Folgenden kurz $\mathcal{E}_s(R)$:

$$\mathcal{E}_s(R) = \sum_{p \in \text{Paths}_{s \rightarrow A}(M)} P(p) \cdot R(p) \quad (17)$$

Falls $s \in A$, gilt $|\text{Paths}_{s \rightarrow A}(M)| = 1$ mit dem einzigen enthaltenen Pfad $p = (s)$. Dann sind nach Definition $P(p) = 1$ und $R(p) = 0$. Damit erhalten wir:

$$\mathcal{E}_s(R) = 0 \quad (\text{falls } s \in A) \quad (18)$$

Falls $s \notin A$, besteht jeder Pfad $p \in \text{Paths}_{s \rightarrow A}(M)$ aus mehr als einem Knoten,

und wir erhalten:

$$\mathcal{E}_s(R) = \sum_{p \in \text{Paths}_{s \rightarrow A}(M)} P(s, p_1) \cdot P(p_{\leftarrow 1}) \cdot (R(s, p_1) + R(p_{\leftarrow 1})) \quad (19)$$

$$= \sum_{t \in Q} P(s, t) \cdot \sum_{p' \in \text{Paths}_{t \rightarrow A}(M)} P(p') \cdot (R(s, t) + R(p')) \quad (20)$$

$$= \sum_{t \in Q} P(s, t) \cdot \left(R(s, t) + \sum_{p' \in \text{Paths}_{t \rightarrow A}(M)} P(p') \cdot R(p') \right) \quad (21)$$

$$= \sum_{t \in Q} P(s, t) \cdot (R(s, t) + \mathcal{E}_t(R)) \quad (22)$$

Die Gleichungen 18 und 22 geben uns ein System von $|Q|$ linearen Gleichungen in $|Q|$ Variablen:

$$\begin{aligned} \mu_s &= 0 \quad (\text{falls } s \in A) \\ \mu_s &= \sum_{t \in Q} P(s, t) \cdot (R(s, t) + \mu_t) \quad (\text{falls } s \notin A) \end{aligned} \quad (23)$$

Mit Definition 2.17 ist dieses Gleichungssystem äquivalent zu

$$\mu_s = \sum_{t \in Q} P_{\rightarrow A}(s, t) \cdot (R(s, t) + \mu_t), \quad (24)$$

was sich in Matrixschreibweise mit $\mu = (\mu_s)_{s \in Q}$ ausdrücken lässt als:

$$\mu = \left(\sum_{t \in Q} P_{\rightarrow A}(s, t) \cdot R(s, t) \right)_{s \in Q} + P_{\rightarrow A} \cdot \mu \quad (25)$$

Satz 3.2 (Erwartungswerte in Markovketten) *Seien $M = (Q, P, I)$ eine Markovkette und $\emptyset \neq A \subseteq Q$. Dann ist der Vektor $\mu = (\mu_s)_{s \in Q}$ der Erwartungswerte akkumulierter Kantengewichte einer Gewichtsfunktion R auf Pfaden von s in die Menge A die eindeutige Lösung des Gleichungssystems*

$$(P_{\rightarrow A} - \mathbb{1})\mu = - \left(\sum_{t \in Q} P_{\rightarrow A}(s, t) \cdot R(s, t) \right)_{s \in Q}. \quad (26)$$

Beweis. Wir stellen fest, der Vektor $(\mathcal{E}_s(R))_{s \in Q}$ ist die einzige Lösung des Gleichungssystems (26): Zum einen ist gemäß unserer Herleitung ist der Vektor $(\mathcal{E}_s(R))_{s \in Q}$ eine Lösung dieses Gleichungssystems. Zum anderen ist $P_{\rightarrow A} - \mathbb{1}$ nach Satz 2.18 invertierbar. Somit ist die Lösung eindeutig. \square

Mit dem Gleichungssystem (26) und Standardalgorithmen zum Lösen linearer Gleichungssysteme erhalten wir unmittelbar einen Algorithmus zur Berechnung der Erwartungswerte $E_q(R)$ für $q \in Q$.

Beispiel 3.3 Wir wollen nun Beispiel 2.16 fortsetzen und den Erwartungswert mittels linearem Gleichungssystem lösen. Seien also M und R wie bisher definiert.

Dann ergibt sich die Matrix $P_{\rightarrow\{5,6\}} - \mathbb{1}$ als

$$P_{\rightarrow\{5,6\}} - \mathbb{1} = \begin{pmatrix} -1 & 0,5 & 0,5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0,25 & -1 & 0,5 & 0,25 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0,2 & 0,2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Als Inverse von $P_{\rightarrow\{5,6\}} - \mathbb{1}$ erhalten wir

$$(P_{\rightarrow\{5,6\}} - \mathbb{1})^{-1} = \begin{pmatrix} -1 & -\frac{5}{8} & -\frac{1}{2} & -\frac{5}{4} & -\frac{3}{8} & -\frac{5}{8} \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & -\frac{1}{4} & -1 & -\frac{5}{2} & -\frac{3}{4} & -\frac{1}{4} \\ 0 & 0 & 0 & -5 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Außerdem berechnen wir wie in Satz 3.2 beschrieben einen Vektor:

$$\begin{aligned} b &:= - \left(\sum_{t \in Q} P_{\rightarrow\{5,6\}}(s, t) \cdot R(s, t) \right)_{s \in Q} \\ &= \left(-\frac{9}{2} \quad -2 \quad -3 \quad -\frac{11}{5} \quad 0 \quad 0 \right)^T \end{aligned}$$

Wir erhalten in der Folge für das Produkt $\mu := (P_{\rightarrow\{5,6\}} - \mathbb{1})^{-1}b$ den Vektor

$$\mu = (10 \quad 2 \quad 9 \quad 11 \quad 0 \quad 0)^T.$$

Auf diese Weise haben wir den Erwartungswert aufsummierter Kantengewichte entlang von Pfaden von Knoten 1 bis zum Erreichen eines Knotens in $\{5, 6\}$, nämlich 10 berechnet, kennen jedoch gleichzeitig schon alle Erwartungswerte für den Start in einem anderen Knoten.

3.2 Berechnung von Varianzen

Die Betrachtung zu Kovarianzen sind weitestgehend analog zu den Betrachtungen zu Varianzen, welche wir hier darstellen wollen. Man kann Satz 3.4, welchen wir in diesem Abschnitt zeigen wollen, auch als Korollar des Satzes 3.6 auffassen, welcher im nachfolgenden Abschnitt vorgestellt wird. Man kann also bei Bedarf diesen Abschnitt überspringen. Dennoch wollten wir der Anschaulichkeit wegen den etwas einfacheren Fall der Varianz voranstellen.

Seien $M = (Q, P, I)$ eine Markovkette, $s \in Q$, $\emptyset \neq A \subseteq Q$ und sei von jedem Zustand $q \in Q$ ein Zustand in A erreichbar. Sei R eine Gewichtsfunktion auf M . Wir betrachten in $(\text{Paths}_{s \rightarrow A}(M), P)$ die Varianz $\mathcal{V}ar_{(\text{Paths}_{s \rightarrow A}(M), P)}(R)$:

$$\mathcal{V}ar_{(\text{Paths}_{s \rightarrow A}(M), P)}(R) = \mathcal{E}_{(\text{Paths}_{s \rightarrow A}(M), P)} \left((R - \mathcal{E}_{(\text{Paths}_{s \rightarrow A}(M), P)}(R))^2 \right) \quad (27)$$

Erneut nutzen wir Kurzschreibweise $\mathcal{V}ar_s(R) := \mathcal{V}ar_{(\text{Paths}_{s \rightarrow A}(M), P)}(R)$ und erhalten:

$$\mathcal{V}ar_s(R) = \mathcal{E}_s \left((R - \mathcal{E}_s(R))^2 \right) \quad (28)$$

Falls $s \in A$, gilt $|\text{Paths}_{s \rightarrow A}(M)| = 1$ mit dem einzigen enthaltenen Pfad $p = (s)$. Dann sind nach Definition $P(p) = 1$ und $R(p) = 0$ und der Erwartungswert beträgt $\mathcal{E}_s(R) = 0$, wie wir bereits im vorangegangenen Abschnitt gesehen haben. Damit erhalten wir:

$$\text{Var}_s(R) = 0 \quad (\text{falls } s \in A) \quad (29)$$

Falls $s \notin A$, besteht jeder Pfad $p \in \text{Paths}_{s \rightarrow A}(M)$ aus mehr als einem Knoten, und wir erhalten:

$$\text{Var}_s(R) = \sum_{p \in \text{Paths}_{s \rightarrow A}(M)} P(p) \cdot (R(p) - \mathcal{E}_s(R))^2 \quad (30)$$

$$= \sum_{t \in Q} P(s, t) \cdot \sum_{p' \in \text{Paths}_{t \rightarrow A}(M)} P(p') \cdot (R(s, t) + R(p') - \mathcal{E}_s(R))^2 \quad (31)$$

$$= \sum_{t \in Q} P(s, t) \cdot \mathcal{E}_t \left((R + R(s, t) - \mathcal{E}_s(R))^2 \right) \quad (32)$$

$$= \sum_{t \in Q} P(s, t) \cdot \left(\text{Var}_t(R) + \left(\mathcal{E}_t(R + R(s, t) - \mathcal{E}_s(R)) \right)^2 \right) \quad (33)$$

$$= \sum_{t \in Q} P(s, t) \cdot \left(\text{Var}_t(R) + (\mathcal{E}_t(R) + R(s, t) - \mathcal{E}_s(R))^2 \right) \quad (34)$$

Gleichung (33) erhalten wir durch Anwendung von Korollar 2.8 und Gleichung (34) durch die Linearität des Erwartungswertes nach Gleichung (3). Die Gleichungen (29) und (34) geben uns ähnlich wie im Abschnitt über die Erwartungswerte ein System von $|Q|$ linearen Gleichungen in $|Q|$ Variablen:

$$\begin{aligned} \nu_s &= 0 \quad (\text{falls } s \in A) \\ \nu_s &= \sum_{t \in Q} P(s, t) \cdot \left(\nu_t + (\mathcal{E}_t(R) + R(s, t) - \mathcal{E}_s(R))^2 \right) \quad (\text{falls } s \notin A) \end{aligned} \quad (35)$$

Satz 3.4 (Varianzen in Markovketten) *Seien $M = (Q, P, I)$ eine Markovkette und $\emptyset \neq A \subseteq Q$. Dann ist der Vektor $\nu = (\nu_s)_{s \in Q} = (\text{Var}_s(R))_{s \in Q}$ der Varianzen akkumulierter Kantengewichte einer Gewichtsfunktion R auf Pfaden von s in die Menge A die eindeutige Lösung des Gleichungssystems*

$$(P_{\rightarrow A} - \mathbb{1})\nu = - \left(\sum_{t \in Q} P_{\rightarrow A}(s, t) \cdot S(s, t) \right)_{s \in Q}, \quad (36)$$

wobei S die Gewichtsfunktion definiert durch $S : Q^2 \rightarrow \mathbb{R}_+ : (s, t) \mapsto (\mathcal{E}_t(R) + R(s, t) - \mathcal{E}_s(R))^2$ ist.

Beweis. Durch Anwendung von Definition 2.17 auf Gleichung (35) erhalten wir direkt dieses Gleichungssystem. Daher ist der Vektor der Varianzen tatsächlich eine Lösung. Nach Satz 2.18 ist die Lösung eindeutig. \square

Vergleicht man die Gleichungssysteme (26) und (36), dann bekommen wir:

$$\forall q \in Q : \text{Var}_q(R) = \mathcal{E}_q(S) \quad (37)$$

Damit haben wir die Berechnung der Varianzen gleichzeitig auf die Berechnung von Erwartungswerten zurückgeführt. Um die Varianzen $(\mathcal{V}ar_q(R))_{q \in Q}$ in einer Markovkette zu berechnen, genügt es die Erwartungswerte $(\mathcal{E}_q(R))_{q \in Q}$ im ersten Schritt und $(\mathcal{E}_q(S))_{q \in Q}$ im zweiten Schritt zu berechnen. Berechnen wir zuerst die inverse Matrix $(P_{\rightarrow A} - \mathbb{1})^{-1}$, dann müssen wir zum Lösen beider Gleichungssysteme jeweils nur eine Matrixmultiplikation durchführen.

Beispiel 3.5 Wir wollen erneut an unsere bisherige konkrete Markovkette anknüpfen und setzen Beispiele 2.16 und 3.3 fort. Zunächst berechnen wir die konkrete Gewichtsfunktion S , definiert durch

$$S : Q^2 \rightarrow \mathbb{R}_+ : (s, t) \mapsto (\mathcal{E}_t(R) + R(s, t) - \mathcal{E}_s(R))^2.$$

Diese lässt sich als Matrix notieren:

$$S = \begin{pmatrix} 0 & 16 & 16 & 1 & 100 & 100 \\ 64 & 0 & 49 & 81 & 4 & 0 \\ 1 & 4 & 0 & 16 & 36 & 81 \\ 1 & 81 & 4 & 4 & 64 & 121 \\ 100 & 4 & 81 & 121 & 0 & 9 \\ 100 & 4 & 81 & 121 & 49 & 0 \end{pmatrix}$$

Tatsächlich sind für die weitere Berechnung bei Weitem nicht alle Einträge der Matrix relevant, sondern nur die für solche Paare (s, t) , die Kante in $P_{\rightarrow \{5,6\}}$ darstellen, d.h. $(s, t) \in \text{supp}(P_{\rightarrow \{5,6\}})$. Es reicht also eine Matrix \tilde{S} mit

$$\tilde{S} = \begin{pmatrix} 0 & 16 & 16 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 16 & 36 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 64 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Dann berechnen wir analog zu Beispiel 3.3 nach Satz 3.4 einen Vektor:

$$\begin{aligned} c &:= - \left(\sum_{t \in Q} P_{\rightarrow \{5,6\}}(s, t) \cdot S(s, t) \right)_{s \in Q} \\ &= - \left(\sum_{t \in Q} P_{\rightarrow \{5,6\}}(s, t) \cdot \tilde{S}(s, t) \right)_{s \in Q} \\ &= (-16 \quad 0 \quad -18 \quad -16 \quad 0 \quad 0)^\top \end{aligned}$$

Wir erhalten in der Folge für das Produkt $\nu := (P_{\rightarrow \{5,6\}} - \mathbb{1})^{-1} c$ den Vektor

$$\nu = (45 \quad 0 \quad 58 \quad 80 \quad 0 \quad 0)^\top.$$

Im ersten Eintrag des Vektors sehen wir genau wieder die Varianz, welche wir bereits in Beispiel 2.16 ermittelt haben. Die Varianz für den Startknoten 2 ist 0 in Übereinstimmung mit der Eigenschaft, dass es von dort aus nur einen eindeutigen Pfad gibt und somit die Abweichung vom Erwartungswert in jedem Fall 0 beträgt. Die Varianzen für Knoten 3 und 4 sind entsprechend $\mathcal{V}ar_3(R) = 58$ bzw. $\mathcal{V}ar_4(R) = 80$.

3.3 Berechnung von Kovarianzen

Seien wieder $M = (Q, P, I)$ eine Markovkette, $s \in Q$, $\emptyset \neq A \subseteq Q$ und sei von jedem Zustand $q \in Q$ ein Zustand in A erreichbar. Seien nun X, Y Gewichtsfunktionen auf M . Wir betrachten im diskreten Wahrscheinlichkeitsraum $(\text{Paths}_{s \rightarrow A}(M), P)$ die Kovarianz $\text{Cov}_s(X, Y) := \text{Cov}_{(\text{Paths}_{s \rightarrow A}(M), P)}(X, Y)$:

$$\text{Cov}_s(X, Y) = \mathcal{E}_s((X - \mathcal{E}_s(X))(Y - \mathcal{E}_s(Y))) \quad (38)$$

Falls $s \in A$, gilt $|\text{Paths}_{s \rightarrow A}(M)| = 1$ mit dem einzigen enthaltenen Pfad $p = (s)$. Dann sind nach Definition $P(p) = 1$ und $R(p) = 0$ und die Erwartungswerte betragen $\mathcal{E}_s(X) = \mathcal{E}_s(Y) = 0$. Damit erhalten wir:

$$\text{Cov}_s(X, Y) = 0 \quad (\text{falls } s \in A) \quad (39)$$

Falls $s \notin A$, besteht jeder Pfad $p \in \text{Paths}_{s \rightarrow A}(M)$ aus mehr als einem Knoten, und wir erhalten:

$$\text{Cov}_s(X, Y) = \sum_{p \in \text{Paths}_{s \rightarrow A}(M)} P(p) \cdot ((X(p) - \mathcal{E}_s(X))(Y(p) - \mathcal{E}_s(Y))) \quad (40)$$

$$= \sum_{t \in Q} P(s, t) \sum_{p' \in \text{Paths}_{t \rightarrow A}(M)} P(p') \cdot \left((X(s, t) + X(p') - \mathcal{E}_s(X)) \cdot \right. \\ \left. \cdot (Y(s, t) + Y(p') - \mathcal{E}_s(Y)) \right) \quad (41)$$

$$= \sum_{t \in Q} P(s, t) \cdot \mathcal{E}_t \left((X + X(s, t) - \mathcal{E}_s(X)) \cdot \right. \\ \left. \cdot (Y + Y(s, t) - \mathcal{E}_s(Y)) \right) \quad (42)$$

$$= \sum_{t \in Q} P(s, t) \cdot \left(\begin{aligned} &\mathcal{E}_t(XY) + \mathcal{E}_t(X)(Y(s, t) - \mathcal{E}_s(Y)) + \\ &\quad + \mathcal{E}_t(Y)(X(s, t) - \mathcal{E}_s(X)) + \\ &\quad + (X(s, t) - \mathcal{E}_s(X))(Y(s, t) - \mathcal{E}_s(Y)) \end{aligned} \right) \quad (43)$$

$$= \sum_{t \in Q} P(s, t) \cdot \left(\begin{aligned} &\mathcal{E}_t(XY) - \mathcal{E}_t(X)\mathcal{E}_t(Y) + \\ &\quad + \mathcal{E}_t(X)\mathcal{E}_t(Y) + \mathcal{E}_t(X)(Y(s, t) - \mathcal{E}_s(Y)) + \\ &\quad + \mathcal{E}_t(Y)(X(s, t) - \mathcal{E}_s(X)) + \\ &\quad + (X(s, t) - \mathcal{E}_s(X))(Y(s, t) - \mathcal{E}_s(Y)) \end{aligned} \right) \quad (44)$$

$$= \sum_{t \in Q} P(s, t) \cdot \left(\text{Cov}_t(X, Y) + \left(\mathcal{E}_t(X) + X(s, t) - \mathcal{E}_s(X) \right) \cdot \right. \\ \left. \cdot \left(\mathcal{E}_t(Y) + Y(s, t) - \mathcal{E}_s(Y) \right) \right) \quad (45)$$

Gleichung (41) erhalten wir durch Partitionierung der Pfade nach der ersten Transition. Mittels Anwendung von Definition 2.3 erhalten wir Gleichung (42). Gleichung (43) erhalten wir durch teilweises Ausmultiplizieren und anschließendes Anwenden der Linearität von Erwartungswerten (3). Um Gleichung (44) zu erhalten, addieren wir an geeigneter Stelle $-\mathcal{E}_t(X)\mathcal{E}_t(Y) + \mathcal{E}_t(X)\mathcal{E}_t(Y) = 0$. Danach können wir die ersten zwei Summanden der großen Klammer nach Lemma 2.7 als Kovarianz auffassen sowie den Rest durch geschicktes Ausklammern kompakt darstellen und erhalten Gleichung (45).

Sei die Gewichtsfunktion S auf M definiert als

$$S : Q^2 \rightarrow \mathbb{R} : (s, t) \mapsto (\mathcal{E}_t(X) + X(s, t) - \mathcal{E}_s(X))(\mathcal{E}_t(Y) + Y(s, t) - \mathcal{E}_s(Y)). \quad (46)$$

Die Gleichungen (39) und (45) geben uns ähnlich den Abschnitten über die Erwartungswerte bzw. Kovarianzen ein System von $|Q|$ linearen Gleichungen in $|Q|$ Variablen:

$$\begin{aligned} c_s &= 0 \quad (\text{falls } s \in A) \\ c_s &= \sum_{t \in Q} P(s, t) \cdot (c_t + S(s, t)) \quad (\text{falls } s \notin A) \end{aligned} \quad (47)$$

Satz 3.6 (Kovarianzen in Markovketten) *Seien $M = (Q, P, I)$ eine Markovkette und $\emptyset \neq A \subseteq Q$. Dann ist der Vektor $c = (c_s)_{s \in Q} = (\text{Cov}_s(X, Y))_{s \in Q}$ der Kovarianzen akkumulierter Kantengewichte bezüglich Gewichtsfunktionen X, Y auf Pfaden von s in die Menge A die eindeutige Lösung des Gleichungssystems*

$$(P_{\rightarrow A} - \mathbb{1})c = - \left(\sum_{t \in Q} P_{\rightarrow A}(s, t) \cdot S(s, t) \right)_{s \in Q}, \quad (48)$$

wobei S die in Gleichung (46) definierte aus X und Y abgeleitete Kantengewichtsfunktion bezeichnet.

Beweis. Analog zu vorherigen Abschnitten erhalten wir durch Anwendung von Definition 2.17 auf das Gleichungssystem (47), dass der Vektor der Kovarianzen in der Tat Lösung des dargestellten Gleichungssystems ist. Wieder besitzt das Gleichungssystem eine eindeutige Lösung nach Satz 2.18. \square

Vergleicht man die Gleichungssysteme (26) und (48), dann bekommen wir:

$$\forall q \in Q : \text{Cov}_q(X, Y) = \mathcal{E}_q(S) \quad (49)$$

Das entspricht dem Zurückführen der Berechnung von Kovarianzen auf die Berechnung von Erwartungswerten. Um die Kovarianzen $(\text{Cov}_q(X, Y))_{q \in Q}$ in einer Markovkette zu berechnen, genügt es die Erwartungswerte $(\mathcal{E}_q(X))_{q \in Q}$ sowie $(\mathcal{E}_q(Y))_{q \in Q}$ im ersten Schritt und $(\mathcal{E}_q(S))_{q \in Q}$ im zweiten Schritt zu berechnen. Es ist wie bei den Varianzen möglich, zuerst die inverse Matrix $(P_{\rightarrow A} - \mathbb{1})^{-1}$ zu berechnen, um danach nur noch Matrixmultiplikationen ausführen zu müssen.

3.4 Die initiale Verteilung und die gesamte Markovkette

Wir haben bisher nur über die Erwartungswerte und (Ko-) Varianzen für den Start in einem speziellen Zustand gesprochen. Wenn es darum geht, diese Kenngrößen einer Markovkette $M = (Q, P, I)$ insgesamt zu berechnen, muss aber auch die initiale Zufallsverteilung $I : Q \rightarrow [0, 1]$ in Betracht gezogen werden. Der Erwartungswert der Markovkette ist als die gewichtete Summe $\mu = \sum_{q \in Q} I(q) \cdot \mu_q$ definiert. Um nicht Erwartungswert und (Ko-) Varianz der gesamten Markovkette auf diese Weise gesondert betrachten zu müssen, können wir uns dem Trick bedienen, mit $Q' := Q \cup \{q_{\text{start}}\}$ einen neuen Zustand $q_{\text{start}} \notin Q$ hinzuzufügen. Mit I' und P' definiert als

$$I'(q) := \begin{cases} 1 & q = q_{start} \\ 0 & q \neq q_{start} \end{cases} \quad P'(s, t) := \begin{cases} I(t) & s = q_{start} \wedge t \in Q \\ 0 & s \neq q_{start} \vee t \notin Q \end{cases}$$

erhalten wir eine neue Markovkette $M' = (Q', P', I')$, wobei Erwartungswert und (Ko-) Varianz von M und M' mit den entsprechenden Werten von q_{start} übereinstimmen.

Wir wollen uns deshalb mit der zustandsweisen Betrachtung der Größen begnügen. Ferner können wir die genannten Größen neben alternativen Möglichkeiten mithilfe genau dieser Betrachtung definieren. Seien dazu R, S Gewichtsfunktionen und A eine Zielzustandsmenge. Wir definieren:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{M,A}(R) &:= \mathcal{E}_{(\text{Paths}_{q_{start} \rightarrow A}(M'), P')}(R) \\ \mathcal{Var}_{M,A}(R) &:= \mathcal{Var}_{(\text{Paths}_{q_{start} \rightarrow A}(M'), P')}(R) \\ \mathcal{Cov}_{M,A}(R, S) &:= \mathcal{Cov}_{(\text{Paths}_{q_{start} \rightarrow A}(M'), P')}(R, S) \end{aligned}$$

3.5 Komplexität

Zum Berechnen von Erwartungswerten, Varianzen bzw. Kovarianzen unter Zuhilfenahme der gezeigten linearen Gleichungssysteme, sind mehrere Schritte notwendig:

- Zunächst berechnen wir die Matrix $M_{(P,A)} := (P_{\rightarrow A} - \mathbb{1})$.
- Danach berechnen wir $b_{(P,A,R)} := - \left(\sum_{t \in Q} P_{\rightarrow A}(s, t) \cdot R(s, t) \right)_{s \in Q}$
- Anschließend lösen wir das lineare Gleichungssystem $M_{(P,A)} x_{(P,A,R)} = b_{(P,A,R)}$, wobei gilt $x_{(P,A,R)} = M_{(P,A)}^{-1} b_{(P,A,R)}$.

Für das Berechnen von Erwartungswerten müssen wir nichts weiter tun, denn es gilt $\forall s \in Q : x_{(P,A,R)}(s) = \mathcal{E}_s(R)$. Für die Berechnung von Varianzen und Kovarianzen müssen wir die Schritte lediglich mehrfach ausführen, um zunächst die Erwartungswerte zu berechnen und danach aus diesen einen neuen Reward zu definieren.

Das Berechnen des neuen Rewards ist in $\mathcal{O}(\#edges)$ möglich, wobei $\#edges$ die Zahl der Kanten in der Markovkette bezeichnen soll. Die Ermittlung von $M_{(P,A)}$ ist auf jeden Fall in $\mathcal{O}(|Q|^2)$ möglich. Geht man von dünn besetzten Matrizen aus, so ist bei entsprechender Speicherverwaltung die Berechnung sogar in $\mathcal{O}(\#edges)$ möglich, da nur über echte Kanten iteriert werden muss, nicht aber über entartete Kanten (s, t) im Sinne von $P(s, t) = 0$. Den Vektor $b_{(P,A,R)}$ können wir in $\mathcal{O}(|Q|^2)$ Schritten berechnen, bzw. analog in $\mathcal{O}(\#edges)$ bei einer dünn besetzten Matrix und entsprechender Speicherung.

Das Lösen linearer Gleichungssysteme ist ein Standardproblem und wurde dementsprechend ausführlich untersucht. Ohne ins Detail zu gehen, können wir festhalten, dass sich das lineare Gleichungssystem $Mx = b$ mit $M \in \mathbb{R}^{|Q| \times |Q|}$ in $\mathcal{O}(|Q|^3)$ lösen lässt unter der Annahme, dass jede einzelne Additions- und Multiplikationsoperation in einem Zeitschritt erfolgt. Ein Beispiel für einen Algorithmus ist das Gaußsche Eliminationsverfahren. Will man allerdings ein

solches Gleichungssystem unter Verwendung von durch BigInteger dargestellten rationalen Zahlen explizit und ohne Verlust von Genauigkeit lösen, dann benötigen einzelne Additions- bzw. Multiplikationsschritte mit herkömmlicher Rechentechnik im Allgemeinen mehr als nur einen Taktzyklus des Prozessors. Ein Algorithmus [2] arbeitet unter einem Zeitaufwand in $\mathcal{O}(n^3(\log n)^2)$ unter Nutzung von p-adischen Körpererweiterungen von \mathbb{Q} .

Auch kann das Lösen nicht in weniger als $\mathcal{O}(\#edges)$ Schritten möglich sein, da es mindestens so viele Schritte braucht, die Matrix M überhaupt einzulesen. Dies gibt uns sozusagen eine feste untere Schranke, die kein neuer, in der Zukunft entdeckter Algorithmus brechen kann.

Zusammenfassend können wir festhalten, dass der Zeitaufwand für die Berechnung von Erwartungswerten bzw. (Ko-) Varianzen im wesentlichen vom Algorithmus zum Lösen des linearen Gleichungssystems abhängt, da der Aufwand zur Berechnung von M und b wesentlich geringer ist.

4 Performancemessung am praktischen Beispiel

Um die beschriebene Berechnung von Erwartungswerten, Varianzen und Kovarianzen praktisch zu demonstrieren soll uns hier ein Beispiel dienen, welches unter anderem in den *PRISM Case Studies* [5] zu finden ist. Die Rede ist von *Herman's self-stabilising algorithm* [3].

4.1 Herman's selbst-stabilisierender Algorithmus

Das zu lösende Problem besteht allgemein formuliert darin, dass ein Netzwerk von n identischen Prozessen, welche allesamt mit einer möglicherweise instabilen Startkonfiguration starten, mit Wahrscheinlichkeit 1 nach endlich vielen Schritten des Algorithmus' einen stabilen Zustand erreicht.

Beispiel 4.1 (Stabilisierung im unidirektionalen Ring) Wir nutzen im Folgenden zur Vereinfachung die Abkürzung $n = \{0, \dots, n-1\}$. Sei $n \in 2\mathbb{N} + 1$ eine ungerade natürliche Zahl. Dann betrachten wir einen Ring von n Prozessen P_0, P_1, \dots, P_{n-1} , in welchem unidirektionale Kommunikation stattfindet. Ein Zustand z ist eine Funktion, die jedem Prozess einen booleschen Wert zuordnet, d.h. $z : n \rightarrow 2$. Gesucht ist ein Algorithmus, sodass nach endlich vielen Schritten fast sicher nur noch Zustände folgen, in welchen genau ein Prozess als privilegierter Prozess ausgewählt ist, oder anders ausgedrückt $\exists i \in n : z(i) \wedge \forall j \in n : i \neq j \Rightarrow \neg z(j)$.

Herman hat dazu die folgende Lösung präsentiert:

Algorithmus 4.2 Sei y eine Funktion vom gleichen Typ wie z , also $y : n \rightarrow 2$ und sei $i \in n$ eine Prozess-ID. Wir fassen $y(i)$ als den internen Zustand des Prozesses i auf sowie $y(i-1 \bmod n)$ als den Zustand von dessen Vorgänger, welcher dem Prozess i über die Ringinfrastruktur bekannt wird. Jeder einzelne Prozess führt nun in einem Schritt Folgendes aus:

- Falls $y(i-1 \bmod n) \neq y(i)$, setze für den Folgezustand $y'(i) := \neg y(i)$.
- Falls $y(i-1 \bmod n) = y(i)$, gehe mit Wahrscheinlichkeit 0,5 in den Folgezustand mit $y'(i) := 0$ und sonst in den Folgezustand mit $y'(i) := 1$.

Sei weiterhin f die Funktion

$$f : 2^n \rightarrow 2^n : y \mapsto \{i \mapsto y(i) \Leftrightarrow y(i-1 \bmod n)\}$$

Mit $z := f(y)$ erhalten wir einen prozessbezogenen booleschen Wert, der die gewünschte Bedingung erfüllt, also der bei Grenzwertbetrachtung mit Wahrscheinlichkeit 1 nach endlichen Schritten nur für genau einen Prozess 1 ergibt. Wohlgermerkt kann jeder Prozess P_i seinen Wert $z(i)$ berechnen, da er dafür nur bereits bekannte Stellen von y kennen muss. Als Intuition kann man formulieren, $f(y)(i)$ ist genau dann 1, wenn Prozess i seinen Nachfolgezustand nicht-deterministisch bzw. probabilistisch aussucht.

Dass dieser Algorithmus die geforderte Eigenschaft erfüllt, wollen wir hier nicht zeigen und verweisen auf Hermans Betrachtungen dazu [3]. Jedoch sei angemerkt, dass es sich relativ leicht sehen lässt, wie von jedem Zustand aus ein stabiler Zustand erreicht werden kann sowie dass die Menge der stabilen Zustände abgeschossen ist unter der Zustandsübergangsfunktion, welche aus Hermans Algorithmus hervorgeht.

Ein ringförmiges Netzwerk, welches sich nach Hermans Algorithmus verhält, lässt sich als Markovkette $M = (Q, P, I)$ auffassen. Die Zustände $Q := \{y \in 2^n\}$ sind die Konfigurationen der Prozesse. Wir sehen leicht, dass für jeden Zustand y alle ausgehenden Kanten mit dergleichen Wahrscheinlichkeit beschriftet sind, nämlich $p_y := 2^{-|\text{supp } f(y)|}$. Der Support einer Funktion $f : A \rightarrow B$, $0 \in B$, bezeichnet durch $\text{supp}(f)$, ist dabei die Menge aller Urbilder, welche nicht auf 0 abgebildet werden, d.h. $\text{supp}(f) := \{x \in A \mid f(x) \neq 0\}$. Die Menge der Folgezustände für ein $y \in Q$, bezeichnet durch $\text{Succ}(y)$, können wir schreiben als

$$\text{Succ}(y) := \{y' \in Q \mid \neg f(y)(i) \Rightarrow y'(i) \neq y(i)\}$$

Wir erhalten für P :

$$P(y, y') := \begin{cases} p_y & \text{falls } y' \in \text{Succ}(y) \\ 0 & \text{falls } y' \notin \text{Succ}(y) \end{cases} \quad (50)$$

Für die initiale Verteilung nehmen wir an, dass alle Prozesse mit einem Zufallsbit starten:

$$\forall y \in Q : I(y) := 2^{-n}$$

Als Menge der Zielzustände $A = \{y \in Q \mid 1 = |\text{supp } f(y)|\}$ betrachten wir jene Zustände mit genau einem privilegierten Prozess.

4.2 Implementation

Zu dieser schriftlichen Abhandlung wurde eine Implementation zur Berechnung von Erwartungswerten, Varianzen und Kovarianzen angefertigt und ist öffentlich auf github.com einsehbar [4]. Wir wollen diese Implementation nutzen, um die Performance der vorgestellten Verfahren an anwendungsorientierten Beispielen zu testen. Zunächst sollen aber hier der wesentliche Aufbau und die wesentlichen Features der Softwarelösung kurz beschrieben werden.

4.2.1 Beschreibung der Softwarelösung

Das Tool *MC Analyzer* [4] liefert Algorithmen zur Berechnung von Erwartungswerten, Varianzen und Kovarianzen von akkumulierten Kantengewichten in Markovketten.

META:

amgel beschreiben

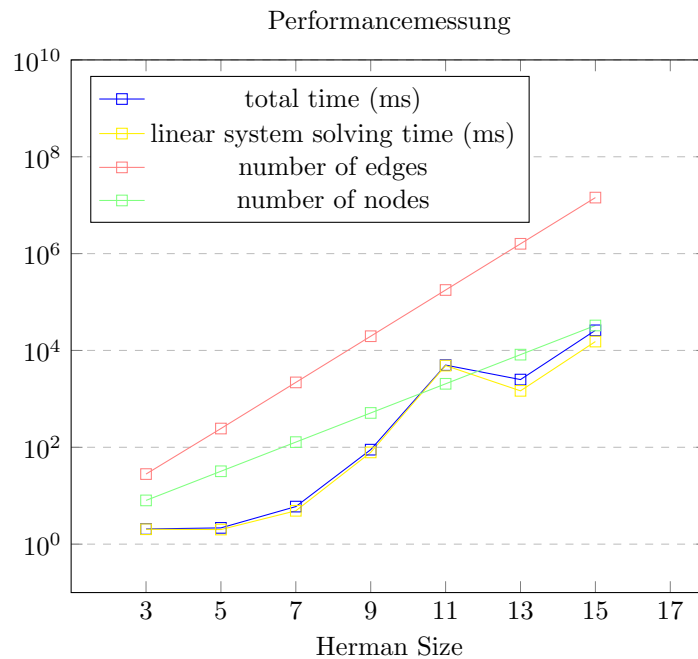
skalierbarkeit des algorithmus'

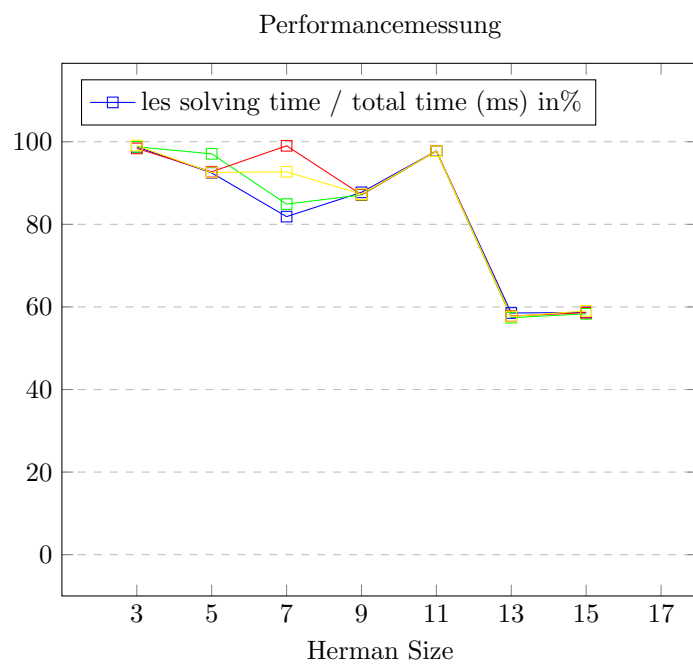
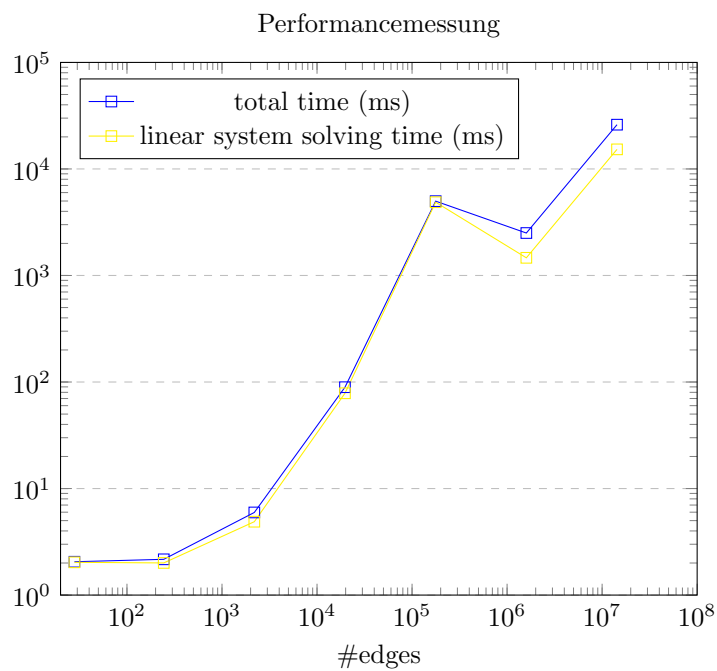
mess daten diagram

vergleich naiver ansatz?

numerische Stabilität

MDPs





5 Ein Blick auf MDPs

6 Appendix

Die folgenden Lemmata sollen mathematische Aussagen bereitstellen, welche nicht zentrales Thema dieser Abhandlung sind, jedoch an bestimmten Stellen

zur Argumentation herangezogen werden.

Lemma 6.1 Seien $n \in \mathbb{N}$ eine natürliche Zahl und $a \in \mathbb{R}_{>0} \setminus \{1\}$. Dann gilt

$$\sum_{i=0}^n a^i = \frac{a^{n+1} - 1}{a - 1} \quad (51)$$

Beweis.

$$(a - 1) \cdot \sum_{i=0}^n a^i = \sum_{i=0}^n a^{i+1} - \sum_{i=0}^n a^i = a^{n+1} - 1 \quad \square$$

Korollar 6.2 Betrachten wir den Grenzwert der Summe aus Lemma 6.1 für $n \rightarrow \infty$, so ergibt sich für $0 < a < 1$:

$$\sum_{i=0}^{\infty} a^i = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^n a^i = \frac{1}{1 - a} \quad (52)$$

Lemma 6.3 Seien $n \in \mathbb{N}$ eine natürliche Zahl und $a \in \mathbb{R}_{>0} \setminus \{1\}$. Dann gilt

$$\sum_{i=0}^n i \cdot a^i = \frac{(an - n - 1)a^{n+1} + a}{(a - 1)^2} \quad (53)$$

Beweis.

$$\begin{aligned} (n+1)a^{n+1} + \sum_{i=0}^n i \cdot a^i &= \sum_{i=0}^{n+1} i \cdot a^i = \sum_{i=0}^n (i+1) \cdot a^{i+1} \\ &= a \sum_{i=0}^n i \cdot a^i + a \sum_{i=0}^n a^i = a \sum_{i=0}^n i \cdot a^i + a \cdot \frac{a^{n+1} - 1}{a - 1} \\ \Rightarrow (a-1) \sum_{i=0}^n i \cdot a^i &= (n+1)a^{n+1} - a \cdot \frac{a^{n+1} - 1}{a - 1} \quad \square \end{aligned}$$

Korollar 6.4 Betrachten wir den Grenzwert der Summe aus Lemma 6.3 für $n \rightarrow \infty$, so ergibt sich für $0 < a < 1$:

$$\sum_{i=0}^{\infty} i \cdot a^i = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^n i \cdot a^i = \frac{a}{(a - 1)^2} \quad (54)$$

Lemma 6.5 Seien $n \in \mathbb{N}$ eine natürliche Zahl und $a \in \mathbb{R}_{>0} \setminus \{1\}$. Dann gilt

$$\sum_{i=0}^n i^2 \cdot a^i = \frac{(-a^2n^2 + a(2n^2 + 2n + 1) - (n+1)^2)a^{n+1} + a(a+1)}{(a-1)^3} \quad (55)$$

Beweis.

$$\begin{aligned}
n^2 a^n + \sum_{i=0}^{n-1} i^2 \cdot a^i &= \sum_{i=0}^n i^2 \cdot a^i = \sum_{i=0}^{n-1} (i+1)^2 \cdot a^{i+1} \\
&= a \sum_{i=0}^{n-1} i^2 \cdot a^i + 2a \sum_{i=0}^{n-1} i \cdot a^i + a \sum_{i=0}^{n-1} a^i \\
&= a \left(\sum_{i=0}^n i^2 \cdot a^i - n^2 a^n \right) + 2a \left(\frac{(an - a - n)a^n + a}{(a-1)^2} \right) + a \left(\frac{a^n - 1}{a-1} \right) \\
\Rightarrow (1-a) \sum_{i=0}^n i^2 \cdot a^i &= -n^2 a^{n+1} + 2a \left(\frac{(an - a - n)a^n + a}{(a-1)^2} \right) + a \left(\frac{a^n - 1}{a-1} \right) \square
\end{aligned}$$

Korollar 6.6 Betrachten wir den Grenzwert der Summe aus Lemma 6.5 für $n \rightarrow \infty$, so ergibt sich für $0 < a < 1$:

$$\sum_{i=0}^{\infty} i^2 \cdot a^i = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^n i^2 \cdot a^i = \frac{a(a+1)}{(a-1)^3} \quad (56)$$

META:

- MarkovketteBeispiel kontrollieren mittels implementation.
- AMGCL beschreiben: Stabilität, Laufzeit nach Messung,
- Diagramme zeichnen und analysieren
- anderes Beispiel finden.
- wie soll das mit verallgemeinerung auf MDPs gehen?
- sanity checks für das Tool -¿ wohldefinierte MCs erkennen
- abschluss subsection: offene bzw. aufgetretene weitere Fragestellungen

Literatur

- [1] Christel Baier und Joost-Pieter Katoen. *Principles of Model Checking (Representation and Mind Series)*. The MIT Press, 2008. ISBN: 026202649X.
- [2] J.D. Dixon. „Exact Solution of Linear Equations Using P-Adic Expansions“. In: *Numerische Mathematik* 40 (1982), S. 137–142. URL: <http://eudml.org/doc/132821>.
- [3] T. Herman. „Probabilistic Self-stabilization“. In: *Information Processing Letters* 35.2 (1990), S. 63–67.
- [4] *MC Analyzer - a tool to calculate edge-reward expects, variances and covariances in discrete time markov chains*. URL: https://github.com/Necktschnagge/markov_chain_analyzer.

- [5] *PRISM - Case Studies*. Jan. 2019. URL: <https://www.prismmodelchecker.org/casestudies/index.php>.
- [6] T. Verhoeff. „Reward variance in Markov chains : a calculational approach“. English. In: *Proceedings of the Eindhoven FASTAR Days 2004 (Eindhoven, The Netherlands, September 3-4, 2004)*. Hrsg. von L.G.W.A. Cleophas und B.W. Watson. Computer Science Reports. Technische Universiteit Eindhoven, 2004.