

# Algorithmische Mathematik II

Andreas Eberle

31. Oktober 2013

# Inhaltsverzeichnis

|  |           |
|--|-----------|
| <b>Inhaltsverzeichnis</b>  | <b>2</b>  |
| <b>I Diskrete Stochastik</b>   | <b>6</b>  |
| Zufall und mathematische Modelle . . . . .                             | 7         |
| <b>1 Diskrete Zufallsvariablen</b>                                     | <b>12</b> |
| 1.1 Ereignisse und ihre Wahrscheinlichkeit . . . . .                   | 14        |
| Ereignisse als Mengen . . . . .  | 15        |
| Wahrscheinlichkeitsverteilungen . . . . .                              | 17        |
| Diskrete Wahrscheinlichkeitsverteilungen . . . . .                     | 20        |
| Gleichverteilungen (Laplace-Modelle) . . . . .                         | 23        |
| Empirische Verteilungen . . . . .                                      | 24        |
| 1.2 Diskrete Zufallsvariablen und ihre Verteilung . . . . .            | 27        |
| Zufallsvariablen, Verteilung und Massenfunktion . . . . .              | 27        |
| Binomialverteilungen . . . . .   | 29        |
| Poissonverteilungen und Poissonscher Grenzwertsatz . . . . .           | 31        |
| Hypergeometrische Verteilungen . . . . .                               | 33        |
| 1.3 Erwartungswert . . . . .   | 35        |
| Transformationssatz . . . . .  | 36        |
| Linearität und Monotonie des Erwartungswertes . . . . .                | 38        |
| Einschluss-/Ausschlussprinzip . . . . .                                | 41        |
| <b>2 Bedingte Wahrscheinlichkeiten und Unabhängigkeit</b>              | <b>43</b> |
| 2.1 Bedingte Wahrscheinlichkeiten . . . . .                            | 43        |
| Erste Anwendungsbeispiele . . . . .                                    | 44        |
| Berechnung von Wahrscheinlichkeiten durch Fallunterscheidung . . . . . | 47        |

|   |           |
|---|-----------|
| Bayessche Regel . . . . .   | 49        |
| 2.2 Mehrstufige Modelle . . . . .                                   | 50        |
| Das kanonische Modell . . . . .                                     | 50        |
| Produktmodelle . . . . .  | 53        |
| Markovketten . . . . .  | 54        |
| Berechnung von Mehr-Schritt-Übergangswahrscheinlichkeiten . . . . . | 58        |
| 2.3 Unabhängige Ereignisse . . . . .                                | 60        |
| Stabilität von Unabhängigkeit unter Komplementbildung . . . . .     | 61        |
| Verteilungen für unabhängige Ereignisse . . . . .                   | 62        |
| Ein erstes Gesetz der großen Zahlen . . . . .                       | 64        |
| 2.4 Unabhängige Zufallsvariablen und Random Walk . . . . .          | 69        |
| Unabhängigkeit von diskreten Zufallsvariablen . . . . .             | 69        |
| Der Random Walk auf $\mathbb{Z}$ . . . . .                          | 73        |
| Symmetrischer Random Walk und Reflektionsprinzip . . . . .          | 75        |
| <b>3 Konvergenzsätze für Zufallsvariablen und Verteilungen</b>      | <b>80</b> |
| 3.1 Varianz und Kovarianz . . . . .                                 | 80        |
| Varianz und Standardabweichung . . . . .                            | 80        |
| Kovarianz und Korrelation . . . . .                                 | 82        |
| Unabhängigkeit und Unkorreliertheit . . . . .                       | 84        |
| 3.2 Das schwache Gesetz der großen Zahlen . . . . .                 | 86        |
| Varianz von Summen . . . . .  | 86        |
| Čebyšev-Ungleichung und Beweis des GGZ . . . . .                    | 87        |
| 3.3 Gleichgewichte von Markov-Ketten . . . . .                      | 89        |
| Gleichgewichte und Stationarität . . . . .                          | 89        |
| 3.4 Konvergenz ins Gleichgewicht . . . . .                          | 93        |
| <br>  |           |
| <b>II Numerische Verfahren</b>                                      | <b>98</b> |
| <br>  |           |
| <b>4 Stochastische Simulation und Monte-Carlo-Verfahren</b>         | <b>99</b> |
| 4.1 Pseudozufallszahlen . . . . .                                   | 99        |
| Zufallszahlengeneratoren . . . . .                                  | 99        |
| Simulation von Gleichverteilungen . . . . .                         | 105       |
| 4.2 Simulationsverfahren . . . . .                                  | 106       |
| Das direkte Verfahren . . . . .                                     | 107       |

|          |  |            |
|----------|--|------------|
|          | Das Acceptance-Rejection-Verfahren . . . . .                             | 108        |
| 4.3      | Metropolis-Algorithmus und Gibbs-Sampler . . . . .                       | 110        |
|          | Metropolis-Hastings-Algorithmus . . . . .                                | 110        |
|          | Gibbs-Sampler . . . . .  | 111        |
|          | Simulated Annealing . . . . .  | 112        |
| 4.4      | Monte-Carlo-Verfahren . . . . .  | 114        |
|          | Fehlerschranken für Monte-Carlo-Schätzer . . . . .                       | 115        |
|          | Varianzreduktion durch Importance Sampling . . . . .                     | 117        |
|          | Markov Chain Monte Carlo . . . . .                                       | 120        |
| <b>5</b> | <b>Iterationsverfahren</b>   | <b>121</b> |
| 5.1      | Konvergenz von Fixpunktiterationen . . . . .                             | 122        |
|          | Banachscher Fixpunktsatz . . . . .                                       | 122        |
|          | Konvergenzordnung . . . . .  | 126        |
| 5.2      | Das Newton-Verfahren . . . . .   | 127        |
|          | Linearisierung von Gleichungssystemen . . . . .                          | 127        |
|          | Lokal quadratische Konvergenz . . . . .                                  | 129        |
|          | Andere Iterationsverfahren im eindimensionalen Fall . . . . .            | 131        |
|          | Modifikationen des Newton-Verfahrens im mehrdimensionalen Fall . . . . . | 132        |
| 5.3      | Differenzgleichungen . . . . .   | 134        |
|          | Approximation von Ableitungen durch Differenzenquotienten . . . . .      | 134        |
|          | LR-Zerlegung für Bandmatrizen . . . . .                                  | 135        |
|          | Diskretisierung der Poissongleichung . . . . .                           | 135        |
|          | Eigenwerte, Matrixnormen und Kondition . . . . .                         | 136        |
| 5.4      | Iterationsverfahren für lineare Gleichungssysteme . . . . .              | 139        |
|          | Klassische Iterationsverfahren . . . . .                                 | 142        |
|          | Relaxationsverfahren . . . . .   | 148        |
| 5.5      | Abstiegsverfahren (optional) . . . . .                                   | 150        |
|          | Gradientenverfahren . . . . .  | 151        |
|          | Verfahren der konjugierten Gradienten (CG) . . . . .                     | 155        |
| <b>6</b> | <b>Interpolation und Quadratur</b>                                       | <b>159</b> |
| 6.1      | Stückweise lineare Interpolation . . . . .                               | 159        |
| 6.2      | Polynominterpolation . . . . .   | 163        |
|          | Wahl der Stützstellen, Čebyšev-Polynome . . . . .                        | 166        |

---

|     |  |            |
|-----|--|------------|
|     | Berechnung des Interpolationspolynoms . . . . .                  | 166        |
| 6.3 | Numerische Integration . . . . .                                 | 169        |
|     | Newton-Cotes-Formeln . . . . .                                   | 171        |
|     | Gauß-Quadratur . . . . .   | 174        |
| 6.4 | Kubische Splines (optional) . . . . .                            | 180        |
|     | Konstruktion einer Basis von $S_m(\Delta)$ . . . . .             | 182        |
|     | Interpolationsproblem für kubische Splines ( $m = 3$ ) . . . . . | 183        |
|     | Berechnung in B-Spline-Basis . . . . .                           | 185        |
|     | <b>Stichwortverzeichnis</b>                                      | <b>186</b> |
|     | <b>Stichwortverzeichnis</b>                                      | <b>186</b> |

# **Teil I**

## **Diskrete Stochastik**

„Stochastik“ ist ein Oberbegriff für die Bereiche „Wahrscheinlichkeitstheorie“ und „Statistik“. Inhalt dieses Teils der Vorlesung ist eine erste Einführung in grundlegende Strukturen und Aussagen der Stochastik, wobei wir uns zunächst auf Zufallsvariablen mit *diskretem*, d.h. endlichem oder abzählbar unendlichem Wertebereich beschränken. Bevor wir die Grundbegriffe der Wahrscheinlichkeitstheorie einführen, wollen wir kurz darüber nachdenken, wie Methoden der Stochastik bei der mathematischen Modellierung von Anwendungsproblemen eingesetzt werden. Dabei wird sich zeigen, dass stochastische Modelle häufig auch dann sinnvoll eingesetzt werden können, wenn das zu beschreibende Phänomen gar nicht zufällig ist.

## Zufall und mathematische Modelle

Beschäftigt man sich mit Grundlagen der Stochastik, dann kommt einem vermutlich die Frage „Was ist Zufall?“ in den Sinn. Diese Frage können und wollen wir hier natürlich nicht beantworten. Wir können aus ihr aber eine andere, viel konkretere Frage ableiten: „Welche Objekte, Phänomene oder Vorgänge können wir sinnvoll unter Verwendung von Methoden der Wahrscheinlichkeitstheorie untersuchen?“. Hier fallen uns auf Anhieb eine ganze Reihe entsprechender „Zufallsvorgänge“ ein, die aber gar nicht immer wirklich zufällig sind:

**ZUFALLSZAHLGENERATOR.** Ein Zufallszahlengenerator ist ein Algorithmus, der eine Folge  $u_0, u_1, u_2, \dots$  von *Pseudozufallszahlen* im Intervall  $[0, 1]$  erzeugt. Beispielsweise generiert der von Marsaglia 1972 eingeführte lineare Kongruenzgenerator Binärzahlen zwischen 0 und 1 mit 32 Nachkommastellen auf folgende Weise: Wir setzen  $m = 2^{32}$  und wählen einen Startwert („seed“)  $x_0 \in \{0, \dots, m - 1\}$ . Dann wird eine Folge  $x_0, x_1, x_2, \dots$  von ganzen Zahlen zwischen 0 und  $m - 1$  induktiv durch die folgende Rekursion definiert:

$$x_{n+1} = (69069 x_n + 1) \bmod m,$$

und man setzt schließlich  $u_n := x_n \cdot 2^{-32}$ . Offensichtlich ist sowohl die Folge  $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$  von Zahlen zwischen 0 und  $2^{32}$ , als auch die Folge  $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$  von Pseudozufallszahlen zwischen 0 und 1 rein deterministisch. Trotzdem verhält sich  $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$  in vielerlei Hinsicht wie eine echte Zufallsfolge: Durch eine ganze Reihe statistischer Tests kann man die Folge  $(u_n)$  nicht von einer echten Zufallsfolge unterscheiden, und in den meisten Simulationen erhält man bei Verwendung von  $(u_n)$  Ergebnisse, die denen für eine echte Zufallsfolge nahezu entsprechen.

**WÜRFELSEQUENZ.** Eine Folge von Augenzahlen beim Würfeln ist ein Standardbeispiel einer Zufallsfolge. Tatsächlich ist diese Folge aber auch nicht wirklich zufällig, denn die Endposition des Würfels könnte man im Prinzip aus den Gesetzen der klassischen Mechanik berechnen, wenn

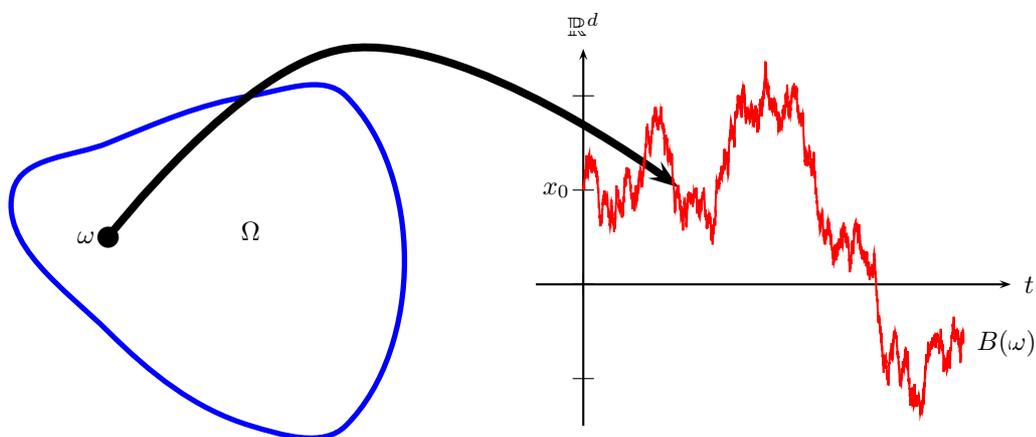
man die Bewegung der Hand des Spielers genau beschreiben könnte. Da diese Bewegung zu kompliziert ist, verwendet man ein elementares stochastisches Modell, das in der Regel die Folge der Augenzahlen sehr gut beschreibt.

**BEWEGUNG VON GASMOLEKÜLEN.** Lässt man quantenmechanische Effekte außer acht, dann bewegen sich auch die Moleküle in einem Gas bei einer gewissen Temperatur nach einem deterministischen Bewegungsgesetz. Da schon ein Mol mehr als  $10^{23}$  Moleküle enthält, ist eine deterministische Modellierung auf der mikroskopischen Ebene für viele Zwecke zu aufwändig. In der statistischen Physik beschreibt man daher die Zustände der Moleküle durch Zufallsvariablen, und leitet daraus die Gesetze der Thermodynamik her.

In den bisher genannten Beispielen setzt man ein stochastisches Modell an, da eine deterministische Beschreibung zu aufwändig ist. In den meisten praktischen Situationen fehlen uns auch einfach Informationen über das zu beschreibende Objekt:

**UNBEKANNTES OBJEKT.** Wenn wir eine bestimmte Größe, eine Beobachtungssequenz, einen Text oder ein Bild, einen Stammbaum etc. nicht genau kennen, sondern nur indirekte Informationen vorliegen haben (z.B. aus einem verrauschten Signal oder einer DNA-Analyse), dann ist eine stochastische Modellierung des gesuchten Objekts häufig angemessen. Das gewählte Modell oder zumindest die Modellparameter hängen dabei von der uns vorliegenden Information ab !

**AKTIENKURS.** Bei der Modellierung eines Aktienkurses kommen mehrere der bisher genannten Aspekte zusammen: Es gibt sehr viele Einflussfaktoren, den zugrundeliegenden Mechanismus kennen wir nicht (oder nur einen sehr begrenzten Teil davon), und das gewählte stochastische Modell hängt stark von unserem Vorwissen ab.



---

**BEOBACHTUNGSVORGANG IN DER QUANTENPHYSIK.** In der Quantenmechanik sind die Zustände nicht mehr deterministisch, sondern werden durch eine Wahrscheinlichkeitsdichte beschrieben. Der beobachtete Wert eines Zustands ist daher echt zufällig. Unter [www.randomnumbers.info](http://www.randomnumbers.info) kann man eine Liste mit Zufallszahlen herunterladen, die mithilfe von quantenphysikalischen Effekten erzeugt worden sind.

Wie wir sehen, werden stochastische Modelle nicht nur bei „echtem Zufall“ eingesetzt, sondern immer dann, wenn *viele Einflussfaktoren* beteiligt sind oder *unzureichende Informationen* über das zugrunde liegende System vorhanden sind. Für die Modellierung ist es nicht unbedingt nötig zu wissen, ob tatsächlich Zufall im Spiel ist. Ob ein mathematisches Modell ein Anwendungsproblem angemessen beschreibt, kann nur empirisch entschieden werden. Dabei geht man folgendermaßen vor:

- Aus dem Anwendungsproblem gewinnt man durch Abstraktion und Idealisierungen ein stochastisches Modell, das in der Sprache der Wahrscheinlichkeitstheorie formuliert ist.
- Ist das Modell festgelegt, dann können mit den mathematischen Methoden der Wahrscheinlichkeitstheorie Folgerungen aus den Grundannahmen hergeleitet werden.
- Diese Folgerungen liefern dann Vorhersagen für das Anwendungsproblem.
- Schließlich überprüft man, ob die Vorhersagen mit den tatsächlichen Beobachtungen übereinstimmen. Falls nicht, versucht man ggf. das Modell zu korrigieren.

In dieser Vorlesung beschränken wir uns meist auf den zweiten Schritt, in einigen einfachen Situationen werden wir aber auch kurz auf den ersten Schritt eingehen. Wichtig ist, dass die Folgerungen im zweiten Schritt *streng logisch* aus den Grundannahmen hergeleitet werden. Das Anwendungsproblem liefert zwar häufig sehr nützliche *Intuition* für mögliche Aussagen oder sogar Beweisverfahren. Der Beweis selbst erfolgt aber innermathematisch unter ausschließlicher Verwendung der formal klar spezifizierten Modellannahmen! Die Anwendungsebene und heuristische Argumentationen sollten wir nicht verdrängen, aber es ist wichtig, dass wir klar zwischen Intuition bzw. Heuristik und formalen Beweisen trennen.

Die Idealisierung im mathematischen Modell ermöglicht die Beschreibung einer Vielzahl ganz unterschiedlicher Anwendungssituationen mit ähnlichen mathematischen Methoden und Modellen. Beispielsweise hat sich die Theorie der stochastischen Prozesse in den letzten 100 Jahren ausgehend von Problemen der Physik und der Finanzmathematik sowie innermathematischen Fragestellungen rasant entwickelt. Heute spielen stochastische Prozesse eine zentrale Rolle in

diesen Bereichen, aber auch in vielen anderen Gebieten, zum Beispiel in der mathematischen Biologie oder in der Informatik. Das oben beschriebene Schema der stochastischen Modellierung wird manchmal sogar bei rein mathematischen Problemen wie der Verteilung von Primzahlen verwendet.

Wir wollen uns abschließend Aspekte des beschriebenen Modellierungsprozesses noch einmal in einem Beispiel ansehen. In diesem Fall ist das mathematische Modell vorgegeben, und es soll untersucht werden, welcher von mehreren Datensätzen am besten zu dem Modell passt.

**Beispiel (0-1 Zufallsfolgen).** Wir betrachten fünf Datensätze, die jeweils aus 120 Nullen oder Einsen bestehen:

|           |   |
|-----------|---|
|           | 0 0 0 1 0 1 1 0 0 1 0 1 0 0 0 1 1 0 1 0 0 0 0 1 1 0 1             |
| <b>tb</b> | 0 0 1 0 0 0 1 1 0 0 0 1 0 0 0 1 1 0 0 1 1 1 0 0 0 1 1 0 1 0       |
|           | 0 1 1 1 0 0 1 1 0 0 1 0 1 1 1 0 0 0 0 1 0 1 1 0 0 1 0 1 1 0       |
|           | 0 0 1 1 0 1 0 0 1 1 1 0 1 1 0 1 0 1 1 0 1 0 1 1 0 1 0 0 1 0       |
| <b>pa</b> | 0 1 1 0 0 1 0 0 0 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1     |
|           | 0 1 0 1 0 1 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 1 0 1 0 1 0 1 0 1 0 1 1       |
|           | 1 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 1 1 0 0 0 1 0 1 0   |
|           | 1 0 1 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 0 1 0 0 1 0 0 1 0 0 1 0   |
| <b>pb</b> | 1 1 1 1 0 1 0 1 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 1 0 1 0 1 0 0 0 0 0 0 1   |
|           | 0 1 0 1 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 1 1 1 1 1 1 0 1 0 1 0 0 0 1   |
|           | 1 0 0 1 1 0 0 0 1 1 1 0 0 0 0 0 1 1 1 1 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 0   |
|           | 0 0 1 0 1 1 1 1 0 1 0 1 0 0 0 0 1 0 1 0 1 1 1 1 0 1 0 1 0 1 0 0   |
| <b>ta</b> | 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0 1 0 1 1 0 1 1 1 0 1 0 0 1 1 1 0 1 1 1 0       |
|           | 0 1 1 1 1 1 1 0 0 1 0 0 0 0 1 0 0 1 0 1 1 0 1 1 0 1 1 0 0 1 1 0 1 |
|           | 0 0 0 1 0 0 1 0 0 1 0 1 0 0 1 1 1 1 1 0 1 1 1 1 1 1 1 0 0 1 0     |
|           | 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 1 0 1 1 0 0 1 1 0 0 0 0 1 0 1 1 0 1 0 1 0 1   |
| <b>fa</b> | 1 0 1 0 1 0 1 0 0 0 1 0 0 1 1 1 0 1 0 1 0 0 1 0 1 1 1 0 0 1       |
|           | 0 1 1 1 0 0 0 0 1 0 0 1 0 1 1 0 0 1 0 1 0 1 0 1 1 1 0 1 0 1       |
|           | 0 1 0 1 0 0 0 1 0 1 0 1 1 0 1 0 1 0 1 1 1 0 0 0 0 1 1 1 0 1       |
|           | 0 1 0 0 0 1 1 0 0 1 1 0 1 0 0 1 0 1 0 0 0 1 0 0 1 0 0 1 0 0       |

Eine dieser 0-1 Folgen wurde mit einem modernen Zufallszahlengenerator erzeugt und ist praktisch nicht von echten Zufallszahlen zu unterscheiden. Die anderen Folgen wurden von verschiedenen Personen von Hand erzeugt, die gebeten wurden, eine möglichst zufällige 0-1 Folge  $x_1, x_2, \dots, x_{120}$  zu erstellen. Das übliche mathematische Modell für eine solche Zufallsfolge sieht folgendermaßen aus:

Die Werte  $x_1, x_2, \dots$  sind Realisierungen einer Folge  $X_1, X_2, \dots$  (0.0.1)  
von unabhängigen, auf  $\{0, 1\}$  gleichverteilten Zufallsvariablen.

Obwohl Vokabeln wie „Zufallsvariable“ oder „unabhängig“ der Anschauung entlehnt sind, haben diese Begriffe eine eindeutig spezifizierte mathematische Bedeutung, siehe unten. Daher können wir nun mathematische Folgerungen aus (0.0.1) herleiten.

---

Wenn wir uns die Zahlenfolgen genauer ansehen, stellen wir fest, dass diese sich zum Teil sehr deutlich in den Längen der auftretenden Blöcke von aufeinanderfolgenden Nullen bzw. Einsen unterscheiden. Einen solchen Block nennt man einen **“Run”**. Jede 0-1 Folge lässt sich eindeutig in Runs maximaler Länge zerlegen. Sei  $R_n$  die Länge des  $n$ -ten Runs in der Zufallsfolge  $X_1, X_2, \dots$ . Mit Wahrscheinlichkeit  $1/2$  folgt auf eine Null eine Eins bzw. umgekehrt, das heißt der Run endet im nächsten Schritt. Daraus folgt, daß die Länge  $R_n$  eines Runs mit Wahrscheinlichkeit  $1/2$  gleich 1, mit Wahrscheinlichkeit  $1/4 = (1/2)^2$  gleich 2, und allgemein mit Wahrscheinlichkeit  $2^{-n}$  gleich  $n$  ist. Zudem kann man beweisen, dass die Zufallsvariablen  $R_1, R_2, \dots$  wieder unabhängig sind. Die durchschnittliche Länge eines Runs ist 2. Daher erwarten wir bei 120 Zeichen ca. 60 Runs, darunter ca. 30 Runs der Länge 1, ca. 30 Runs der Länge  $\geq 2$ , ca. 15 Runs der Länge  $\geq 3$ , ca. 7,5 Runs der Länge  $\geq 4$ , ca. 3,75 Runs der Länge  $\geq 5$ , ca. 1,875 Runs der Länge  $\geq 6$ , und ca. 0,9375 Runs der Länge  $\geq 7$ .

Tatsächlich finden sich in den Datensätzen tb und fa nur jeweils zwei Runs mit Länge 4 und kein einziger Run mit Länge  $\geq 5$ . Daher würden wir nicht erwarten, dass diese Folgen von einem guten Zufallszahlengenerator erzeugt worden sind, obwohl prinzipiell ein solcher Ausgang natürlich möglich ist. In der Tat kann man beweisen, dass im Modell (0.0.1) die Wahrscheinlichkeit dafür, dass es keinen Run der Länge  $\geq 5$  gibt, sehr klein ist. Umgekehrt finden sich im Datensatz pa Runs mit Längen 13 und 15. Erneut ist die Wahrscheinlichkeit dafür äußerst gering, wenn wir das Modell (0.0.1) annehmen.

Zusammenfassend ist (0.0.1) kein geeignetes mathematisches Modell zur Beschreibung der Datensätze tb,fa und pa. Für die Datensätze pb und insbesondere ta liegen die Anzahlen der Runs verschiedener Länge näher bei den im Mittel erwarteten Werten, sodass (0.0.1) ein geeignetes Modell zur Beschreibung dieser Folgen sein könnte. Möglicherweise zeigen aber auch noch weitergehende Tests, dass das Modell doch nicht geeignet ist. Tatsächlich stammt nur die Folge ta von einem Zufallszahlengenerator, und die anderen Folgen wurden von Hand erzeugt.

Abschließend sei noch bemerkt, dass die Unbrauchbarkeit des Modells (0.0.1) für die Folgen tb, fa und pa eine stochastische Modellierung natürlich nicht ausschließt. Zum Beispiel könnte man versuchen die Datensätze tb und fa durch eine Folge von Zufallsvariablen mit negativen Korrelationen, und den Datensatz pa durch eine Folge von Zufallsvariablen mit positiven Korrelationen zu beschreiben.

# Kapitel 1

## Diskrete Zufallsvariablen

Grundlegende Objekte im axiomatischen Aufbau der Wahrscheinlichkeitstheorie nach Kolmogorov sind die Menge  $\Omega$  der in einem Modell in Betracht gezogenen **Fälle**  $\omega$ , die Kollektion  $\mathcal{A}$  der betrachteten **Ereignisse**  $A$ , sowie die **Wahrscheinlichkeitsverteilung**  $P$ , die jedem Ereignis  $A$  eine Wahrscheinlichkeit  $P[A]$  zwischen 0 und 1 zuordnet. Dabei sind Ereignisse Teilmengen von  $\Omega$ , und eine Wahrscheinlichkeitsverteilung ist eine Abbildung von  $\mathcal{A}$  nach  $[0, 1]$ . Zudem sind **Zufallsvariablen**  $X$  von zentralem Interesse, die jedem Fall  $\omega$  einen Wert  $X(\omega)$  zuweisen. Zur Illustration betrachten wir drei elementare Beispiele bevor wir die genannten Objekte formal definieren.

**Beispiel** (Würfeln und Münzwürfe).

a) EINMAL WÜRFELN:

Die Menge der möglichen *Fälle* ist  $\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ . Die Elemente  $\omega \in \Omega$  bezeichnet man auch als *Elementarereignisse* und identifiziert sie mit den einelementigen Mengen  $\{\omega\}$ . Allgemeine *Ereignisse* werden durch Teilmengen von  $\Omega$  beschrieben, zum Beispiel:

|  |   |
|--|---|
| »Augenzahl ist 3«                              | $\{3\}$   |
| »Augenzahl ist gerade«                         | $\{2, 4, 6\}$                                   |
| »Augenzahl ist <b>nicht</b> gerade«            | $\{1, 3, 5\} = \{2, 4, 6\}^C$                   |
| »Augenzahl ist größer als 3«                   | $\{4, 5, 6\}$                                   |
| »Augenzahl ist gerade <b>und</b> größer als 3« | $\{4, 6\} = \{2, 4, 6\} \cap \{4, 5, 6\}$       |
| »Augenzahl gerade <b>oder</b> größer als 3«    | $\{2, 4, 5, 6\} = \{2, 4, 6\} \cup \{4, 5, 6\}$ |

Hierbei schreiben wir  $A^C$  für das Komplement  $\Omega \setminus A$  der Menge  $A$  in der vorgegebenen Grundmenge  $\Omega$ . Für die Wahrscheinlichkeiten sollte im Falle eines »fairen« Würfels gelten:

$$P[\text{»3«}] = \frac{1}{6},$$

$$P[\text{»Augenzahl gerade«}] = \frac{\text{Anzahl günstige Fälle}}{\text{Anzahl mögliche Fälle}} = \frac{|\{2, 4, 6\}|}{|\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}|} = \frac{3}{6} = \frac{1}{2},$$

$$P[\text{»Augenzahl gerade oder größer als 3«}] = \frac{4}{6} = \frac{2}{3}.$$

Beispiele für *Zufallsvariablen* sind

$$X(\omega) = \omega, \quad \text{»Augenzahl des Wurfs«,} \quad \text{oder}$$

$$G(\omega) = \begin{cases} 1 & \text{falls } \omega \in \{1, 2, 3, 4, 5\}, \\ -5 & \text{falls } \omega = 6, \end{cases} \quad \text{»Gewinn bei einem fairen Spiel«.}$$

In einem anderen (detaillierteren) Modell hätte man die Menge  $\Omega$  auch anders wählen können, z.B. könnte  $\Omega$  alle möglichen stabilen Anordnungen des Würfels auf dem Tisch beinhalten. Wir werden später sehen, dass die konkrete Wahl der Menge  $\Omega$  oft gar nicht wesentlich ist - wichtig sind vielmehr die Wahrscheinlichkeiten, mit denen die relevanten Zufallsvariablen Werte in bestimmten Bereichen annehmen.

b) ENDLICH VIELE FAIRE MÜNZWÜRFE:

Es ist naheliegend, als Menge der möglichen Fälle

$$\Omega = \{\omega = (x_1, \dots, x_n) \mid x_i \in \{0, 1\}\} = \{0, 1\}^n$$

zu betrachten, wobei  $n$  die Anzahl der Münzwürfe ist, und 0 für »Kopf« sowie 1 für »Zahl« steht. Alle Ausgänge sind genau dann gleich wahrscheinlich, wenn  $P[\{\omega\}] = 2^{-n}$  für alle  $\omega \in \Omega$  gilt. Dies wird im folgenden angenommen. Zufallsvariablen von Interesse sind beispielsweise das Ergebnis des  $i$ -ten Wurfs

$$X_i(\omega) = x_i,$$

oder die Häufigkeit

$$S_n(\omega) = \sum_{i=1}^n X_i(\omega)$$

von Zahl bei  $n$  Münzwürfen. Das Ereignis » $i$ -ter Wurf ist Kopf« wird durch die Menge

$$A_i = \{\omega \in \Omega \mid X_i(\omega) = 0\} = X_i^{-1}(0)$$

beschrieben. Diese Menge bezeichnen wir in intuitiver Kurznotation auch mit  $\{X_i = 0\}$ .

Es gilt

$$P[X_i = 0] := P[\{X_i = 0\}] = P[A_i] = \frac{1}{2}.$$

Das Ereignis »genau  $k$ -mal Zahl« wird entsprechend durch die Menge

$$A = \{\omega \in \Omega \mid S_n(\omega) = k\} = \{S_n = k\}$$

beschrieben und hat die Wahrscheinlichkeit

$$P[S_n = k] = \binom{n}{k} 2^{-n}.$$

c) UNENDLICH VIELE MÜNZWÜRFE:

Hier kann man als Menge der möglichen Fälle den Raum

$$\Omega = \{\omega = (x_1, x_2, \dots) \mid x_i \in \{0, 1\}\} = \{0, 1\}^{\mathbb{N}}$$

aller binären Folgen ansetzen. Diese Menge ist überabzählbar, da die durch die Dualdarstellung reeller Zahlen definierte Abbildung

$$(x_1, x_2, \dots) \mapsto \sum_{i=1}^{\infty} x_i \cdot 2^{-i}$$

von  $\Omega$  nach  $[0, 1]$  surjektiv ist. Dies hat zur Folge, dass es nicht möglich ist, *jeder* Teilmenge von  $\Omega$  in konsistenter Weise eine Wahrscheinlichkeit zuzuordnen. Die formale Definition von Ereignissen und Wahrscheinlichkeiten ist daher in diesem Fall aufwändiger, und wird erst in der Vorlesung »Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie« systematisch behandelt.

## 1.1 Ereignisse und ihre Wahrscheinlichkeit

Wir werden nun die Kolmogorovsche Definition eines Wahrscheinlichkeitsraums motivieren und formulieren, erste einfache Folgerungen daraus ableiten, und elementare Beispiele betrachten. Ein Wahrscheinlichkeitsraum besteht aus einer nichtleeren Menge  $\Omega$ , die bis auf weiteres fest gewählt sei, einer Kollektion  $\mathcal{A}$  von Teilmengen von  $\Omega$  (den Ereignissen) und einer Abbildung  $P : \Omega \rightarrow [0, 1]$ , die bestimmte Axiome erfüllen.

## Ereignisse als Mengen

Seien  $A$ ,  $B$ , und  $A_i$ ,  $i \in I$ , Ereignisse, d.h. Teilmengen von  $\Omega$ . Hierbei ist  $I$  eine beliebige Indexmenge. Anschaulich stellen wir uns vor, dass ein Element  $\omega \in \Omega$  zufällig ausgewählt wird, und das Ereignis  $A$  eintritt, falls  $\omega$  in  $A$  enthalten ist. „Zufällig“ bedeutet dabei nicht unbedingt, dass alle Fälle gleich wahrscheinlich sind! Wir werden manchmal auch die folgenden Notationen für die Menge  $A$  verwenden:

$$A = \{\omega \in \Omega \mid \omega \in A\} = \{\omega \in A\} = \{\text{»}A \text{ tritt ein«}\}.$$

Da Ereignisse durch Mengen beschrieben werden, können wir mengentheoretische Operationen benutzen, um mehrere Ereignisse zu kombinieren. Wir wollen uns überlegen, was Ereignisse wie  $A^C$ ,  $A \cup B$ ,  $\bigcap_{i \in I} A_i$  usw. anschaulich bedeuten. Um dies herauszufinden, betrachtet man einen möglichen Fall  $\omega$  und untersucht, wann dieser eintritt. Beispielsweise gilt

$$\omega \in A \cup B \quad \Leftrightarrow \quad \omega \in A \text{ oder } \omega \in B,$$

also in anschaulicher Sprechweise:

$$\text{»}A \cup B \text{ tritt ein«} \quad \Leftrightarrow \quad \text{»}A \text{ tritt ein oder } B \text{ tritt ein«}.$$

Entsprechend gilt

$$\omega \in \bigcup_{i \in I} A_i \quad \Leftrightarrow \quad \text{es gibt ein } i \in I \text{ mit } \omega \in A_i,$$

also

$$\text{»}\bigcup_{i \in I} A_i \text{ tritt ein«} \quad \Leftrightarrow \quad \text{»mindestens eines der Ereignisse } A_i \text{ tritt ein«}.$$

Auf analoge Weise überlegen wir uns die Bedeutungen der folgenden Mengenoperationen:

|                            |   |
|----------------------------|---|
| $A \cap B$                 | » $A$ und $B$ treten ein«,                            |
| $\bigcap_{i \in I} A_i$    | »jedes der $A_i$ tritt ein«,                          |
| $A^C = \Omega \setminus A$ | » $A$ tritt nicht ein«,                               |
| $A = \emptyset$            | »unmögliches Ereignis« (tritt nie ein),               |
| $A = \Omega$               | »sicheres Ereignis« (tritt immer ein),                |
| $A = \{\omega\}$           | »Elementarereignis« (tritt nur im Fall $\omega$ ein). |

Die Kollektion  $\mathcal{A}$  aller im Modell zugelassenen bzw. in Betracht gezogenen Ereignisse besteht aus Teilmengen von  $\Omega$ , d.h.  $\mathcal{A}$  ist eine Teilmenge der **Potenzmenge**

$$\mathcal{P}(\Omega) = \{A \mid A \subseteq \Omega\}$$

Die Kollektion  $\mathcal{A}$  sollte unter den oben betrachteten Mengenoperationen (Vereinigungen, Durchschnitte, Komplementbildung) abgeschlossen sein. Genauer fordern wir die Abgeschlossenheit nur unter abzählbaren Vereinigungen und Durchschnitten, da  $\mathcal{A}$  andernfalls immer gleich der Potenzmenge sein müsste sobald alle einelementigen Mengen enthalten sind. Eine effiziente Formulierung der Abgeschlossenheit unter abzählbaren Mengenoperationen führt auf die folgende Definition:

**Definition.** Eine Kollektion  $\mathcal{A} \subseteq \mathcal{P}(\Omega)$  von Teilmengen von  $\Omega$  heißt  $\sigma$ -**Algebra**, falls gilt:

- (i)  $\Omega \in \mathcal{A}$ ,
- (ii) Für alle  $A \in \mathcal{A}$  gilt:  $A^C \in \mathcal{A}$ ,
- (iii) Für  $A_1, A_2, \dots \in \mathcal{A}$  gilt:  $\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i \in \mathcal{A}$ .

**Bemerkung.** Aus der Definition folgt bereits, dass eine  $\sigma$ -Algebra  $\mathcal{A}$  unter allen oben betrachteten endlichen und abzählbar unendlichen Mengenoperationen abgeschlossen ist, denn:

- (a) Nach (i) und (ii) ist  $\emptyset = \Omega^C \in \mathcal{A}$ .
- (b) Sind  $A_1, A_2, \dots \in \mathcal{A}$ , dann folgt nach (ii) und (iii):  $\bigcap_{i=1}^{\infty} A_i = (\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i^C)^C \in \mathcal{A}$ .
- (c) Sind  $A, B \in \mathcal{A}$ , dann folgt nach (iii) und (a):  $A \cup B = A \cup B \cup \emptyset \cup \emptyset \cup \dots \in \mathcal{A}$ .
- (d) Entsprechend folgt  $A \cap B \in \mathcal{A}$  aus (b) und (i).

**Beispiele.** a) POTENZMENGE.

Die Potenzmenge  $\mathcal{A} = \mathcal{P}(\Omega)$  ist stets eine  $\sigma$ -Algebra. In diskreten Modellen, in denen  $\Omega$  abzählbar ist, werden wir diese  $\sigma$ -Algebra häufig verwenden. Bei nichtdiskreten Modellen kann man dagegen **nicht** jede Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P$  auf einer  $\sigma$ -Algebra  $\mathcal{A} \subset \mathcal{P}(\Omega)$  zu einer Wahrscheinlichkeitsverteilung auf  $\mathcal{P}(\Omega)$  erweitern, siehe Beispiel c).

b) PARTIELLE INFORMATION.

Wir betrachten das Modell für  $n$  Münzwürfe mit

$$\Omega = \{\omega = (x_1, \dots, x_n) \mid x_i \in \{0, 1\}\} = \{0, 1\}^n.$$

Sei  $k \leq n$ . Dann ist die Kollektion  $\mathcal{F}_k$  aller Mengen  $A \subseteq \Omega$ , die sich in der Form

$$A = \{(x_1, \dots, x_n) \in \Omega \mid (x_1, \dots, x_k) \in B\} = B \times \{0, 1\}^{n-k}$$

mit  $B \subseteq \{0, 1\}^k$  darstellen lassen, eine  $\sigma$ -Algebra. Die Ereignisse in der  $\sigma$ -Algebra  $\mathcal{F}_k$  sind genau diejenigen, von denen wir schon wissen ob sie eintreten oder nicht, wenn wir nur den Ausgang der ersten  $k$  Münzwürfe kennen. Die  $\sigma$ -Algebra  $\mathcal{F}_k$  beschreibt also die *Information aus den ersten  $k$  Münzwürfen*.

- c) **BORELSCHE  $\sigma$ -ALGEBRA**. Man kann zeigen, dass es auf der Potenzmenge des reellen Intervalls  $\Omega = [0, 1]$  keine Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P$  gibt, die jedem Teilintervall  $(a, b)$  die Länge als Wahrscheinlichkeit zuordnet. Andererseits gibt es eine kleinste  $\sigma$ -Algebra  $\mathcal{B}$ , die alle Teilintervalle enthält. Auf der  $\sigma$ -Algebra  $\mathcal{B}$  existiert eine *kontinuierliche Gleichverteilung* mit der gerade beschriebenen Eigenschaft, siehe Analysis III. Sie enthält zwar alle offenen und alle abgeschlossenen Teilmengen von  $[0, 1]$ , ist aber echt kleiner als die Potenzmenge  $\mathcal{P}([0, 1])$ .

## Wahrscheinlichkeitsverteilungen

Sei  $\Omega$  eine nichtleere Menge und  $\mathcal{A} \subseteq \mathcal{P}(\Omega)$  eine  $\sigma$ -Algebra. Wir wollen nun die Abbildung  $P$  einführen, die jedem Ereignis  $A \in \mathcal{A}$  eine Wahrscheinlichkeit  $P[A]$  zuordnet. Welche Bedingungen (Axiome) sollten wir von  $P$  fordern? Sind  $A, B \in \mathcal{A}$  Ereignisse, dann ist  $A \cup B$  ein Ereignis, welches genau dann eintritt, wenn  $A$  eintritt oder  $B$  eintritt. Angenommen, die beiden Ereignisse  $A$  und  $B$  *treten nicht gleichzeitig ein*, d.h. die Mengen  $A$  und  $B$  sind **disjunkt**. Dann sollte die Wahrscheinlichkeit von  $A \cup B$  die Summe der Wahrscheinlichkeiten von  $A$  und  $B$  sein:

$$A \cap B = \emptyset \quad \Rightarrow \quad P[A \cup B] = P[A] + P[B],$$

d.h. die Abbildung  $P$  ist **additiv**. Wir fordern etwas mehr, nämlich dass eine entsprechende Eigenschaft sogar für *abzählbar* unendliche Vereinigungen von disjunkten Mengen gilt. Dies wird sich als wichtig erweisen, um zu einer leistungsfähigen Theorie zu gelangen, die zum Beispiel Konvergenzaussagen für Folgen von Zufallsvariablen liefert.

**Definition** (Axiome von Kolmogorov). *Eine Abbildung  $P : \mathcal{A} \rightarrow [0, \infty]$ ,  $A \mapsto P[A]$ , heißt **Wahrscheinlichkeitsverteilung** auf  $(\Omega, \mathcal{A})$ , falls gilt:*

- (i)  $P$  ist »normiert«, d.h.

$$P[\Omega] = 1,$$

- (ii)  $P$  ist » $\sigma$ -additiv«, d.h. für Ereignisse  $A_1, A_2, \dots \in \mathcal{A}$  mit  $A_i \cap A_j = \emptyset$  für  $i \neq j$  gilt:

$$P\left[\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i\right] = \sum_{i=1}^{\infty} P[A_i].$$

Ein **Wahrscheinlichkeitsraum**  $(\Omega, \mathcal{A}, P)$  besteht aus einer nichtleeren Menge  $\Omega$ , einer  $\sigma$ -Algebra  $\mathcal{A} \subseteq \mathcal{P}(\Omega)$ , und einer Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P$  auf  $(\Omega, \mathcal{A})$ .

**Bemerkung** (Maße). Gilt nur Eigenschaft (ii) und  $P[\emptyset] = 0$ , dann heißt  $P$  ein **Maß**. Eine Wahrscheinlichkeitsverteilung ist ein normiertes Maß, und wird daher auch äquivalent als **Wahrscheinlichkeitsmaß** bezeichnet. Maße spielen auch in der Analysis eine große Rolle, und werden in der Vorlesung Analysis III systematisch behandelt.

Man kann sich fragen, weshalb wir die Additivität nicht für beliebige Vereinigungen fordern. Würden wir dies tun, dann gäbe es nicht viele interessante Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf kontinuierlichen Räumen. Beispielsweise sollte unter der Gleichverteilung auf dem Intervall  $[0, 1]$  jede Menge, die nur aus einem Punkt besteht, die Wahrscheinlichkeit 0 haben, da sie in beliebig kleinen Intervallen enthalten ist. Würde Additivität für beliebige Vereinigungen gelten, dann müsste auch das ganze Intervall  $[0, 1]$  Wahrscheinlichkeit 0 haben, da es die Vereinigung seiner einelementigen Teilmengen ist. Die Forderung der  $\sigma$ -Additivität liefert also einen angemessenen Kompromiss, der genügend viele interessante Modelle zulässt und es gleichzeitig ermöglicht, sehr weitreichende Aussagen herzuleiten.

Der folgende Satz zeigt, dass Wahrscheinlichkeitsverteilungen einige elementare Eigenschaften besitzen, die wir von der Anschauung her erwarten würden:

**Satz 1.1** (Elementare Eigenschaften und erste Rechenregeln).

Ist  $(\Omega, \mathcal{A}, P)$  ein Wahrscheinlichkeitsraum, dann gelten die folgenden Aussagen:

(i)  $P[\emptyset] = 0$ ,

(ii) Für  $A, B \in \mathcal{A}$  mit  $A \cap B = \emptyset$  gilt

$$P[A \cup B] = P[A] + P[B] \quad \text{»endliche Additivität«.}$$

(iii) Für  $A, B \in \mathcal{A}$  mit  $A \subseteq B$  gilt:

$$P[B] = P[A] + P[B \setminus A].$$

Insbesondere folgt

$$P[A] \leq P[B], \quad \text{»Monotonie«,}$$

$$P[A^C] = 1 - P[A], \quad \text{»Gegeneignis«,}$$

$$P[A] \leq 1.$$

(iv) Für beliebige Ereignisse  $A, B \in \mathcal{A}$  gilt

$$P[A \cup B] = P[A] + P[B] - P[A \cap B] \leq P[A] + P[B].$$

*Beweis.* (i) Wegen der  $\sigma$ -Additivität von  $P$  gilt

$$1 = P[\Omega] = P[\Omega \cup \emptyset \cup \emptyset \cup \dots] = \underbrace{P[\Omega]}_{=1} + \underbrace{P[\emptyset]}_{\geq 0} + P[\emptyset] + \dots,$$

und damit  $P[\emptyset] = 0$ .

(ii) Für disjunkte Ereignisse  $A, B \in \mathcal{A}$  folgt aus der  $\sigma$ -Additivität und mit (i)

$$\begin{aligned} P[A \cup B] &= P[A \cup B \cup \emptyset \cup \emptyset \cup \dots] \\ &= P[A] + P[B] + P[\emptyset] + P[\emptyset] + \dots \\ &= P[A] + P[B]. \end{aligned}$$

(iii) Gilt  $A \subseteq B$ , dann ist  $B = A \cup (B \setminus A)$ . Da diese Vereinigung disjunkt ist, folgt mit (ii)

$$P[B] = P[A] + P[B \setminus A] \geq P[A].$$

Insbesondere ist  $1 = P[\Omega] = P[A] + P[A^c]$ , und somit  $P[A] \leq 1$ .

(iv) Für beliebige Ereignisse  $A, B \in \mathcal{A}$  gilt nach (iii) gilt:

$$\begin{aligned} P[A \cup B] &= P[A] + P[(A \cup B) \setminus A] \\ &= P[A] + P[B \setminus (A \cap B)] \\ &= P[A] + P[B] - P[A \cap B]. \end{aligned}$$

□

Aussage (iv) des Satzes lässt sich für endlich viele Ereignisse verallgemeinern. Beispielsweise folgt durch mehrfache Anwendung von (iv) für die Vereinigung von drei Ereignissen

$$\begin{aligned} P[A \cup B \cup C] &= P[A \cup B] + P[C] - P[(A \cup B) \cap C] \\ &= P[A \cup B] + P[C] - P[(A \cap C) \cup (B \cap C)] \\ &= P[A] + P[B] + P[C] - P[A \cap B] - P[A \cap C] - P[B \cap C] + P[A \cap B \cap C]. \end{aligned}$$

Mit vollständiger Induktion ergibt sich eine Formel für die Wahrscheinlichkeit der Vereinigung einer beliebigen endlichen Anzahl von Ereignissen:

**Korollar** (Einschluss-/Ausschlussprinzip). Für  $n \in \mathbb{N}$  und Ereignisse  $A_1, \dots, A_n \in \mathcal{A}$  gilt:

$$P[\underbrace{A_1 \cup A_2 \cup \dots \cup A_n}_{\text{»eines der } A_i \text{ tritt ein«}}] = \sum_{k=1}^n (-1)^{k-1} \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq n} P[\underbrace{A_{i_1} \cap A_{i_2} \cap \dots \cap A_{i_k}}_{\text{»}A_{i_1}, A_{i_2}, \dots \text{ und } A_{i_k} \text{ treten ein«}}].$$

Das Einschluss-/Ausschlussprinzip werden wir auf eine elegantere Weise am Ende dieses Kapitels beweisen (siehe Satz 1.8).

## Diskrete Wahrscheinlichkeitsverteilungen

Ein ganz einfaches Beispiel für eine diskrete Wahrscheinlichkeitsverteilung ist das Grundmodell für einen Münzwurf oder ein allgemeineres 0-1-Experiment mit Erfolgswahrscheinlichkeit  $p \in [0, 1]$ . Hier ist  $\Omega = \{0, 1\}$ ,  $\mathcal{A} = \mathcal{P}(\Omega) = \{\emptyset, \{0\}, \{1\}, \Omega\}$ , und  $P$  ist gegeben durch

$$\begin{aligned} P[\{1\}] &= p, & P[\emptyset] &= 0, \\ P[\{0\}] &= 1 - p, & P[\Omega] &= 1. \end{aligned}$$

Die Verteilung  $P$  nennt man auch eine (**einstufige**) **Bernoulliverteilung** mit Parameter  $p$ .

Auf analoge Weise erhalten wir Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf endlichen oder abzählbar unendlichen Mengen  $\Omega$ . In diesem Fall können wir die Potenzmenge  $\mathcal{P}[\Omega]$  als  $\sigma$ -Algebra verwenden, und Wahrscheinlichkeiten von beliebigen Ereignissen aus den Wahrscheinlichkeiten der Elementarereignisse berechnen.

**Satz 1.2.** (i) Sei  $0 \leq p(\omega) \leq 1$ ,  $\sum_{\omega \in \Omega} p(\omega) = 1$ , eine Gewichtung der möglichen Fälle. Dann ist durch

$$P[A] := \sum_{\omega \in A} p(\omega), \quad (A \subseteq \Omega),$$

eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf  $(\Omega, \mathcal{P}(\Omega))$  definiert.

(ii) Umgekehrt ist jede Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P$  auf  $(\Omega, \mathcal{P}(\Omega))$  von dieser Form mit

$$p(\omega) = P[\{\omega\}] \quad (\omega \in \Omega).$$

**Definition.** Die Funktion  $p: \Omega \rightarrow [0, 1]$  heißt **Massenfunktion** (*»probability mass function«*) der diskreten Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P$ .

Für den Beweis des Satzes brauchen wir einige Vorbereitungen. Wir bemerken zunächst, dass für eine abzählbare Menge  $A$  die Summe der Gewichte  $p(\omega)$  über  $\omega \in A$  definiert ist durch

$$\sum_{\omega \in A} p(\omega) := \sum_{i=1}^{\infty} p(\omega_i), \quad (1.1.1)$$

wobei  $\omega_1, \omega_2, \dots$  eine beliebige Abzählung von  $A$  ist. Da die Gewichte nichtnegativ sind, existiert die Summe auf der rechten Seite (wobei der Wert  $+\infty$  zugelassen ist). Der erste Teil des folgenden Lemmas zeigt, dass die Summe über  $\omega \in A$  durch (1.1.1) wohldefiniert ist:

**Lemma 1.3.** (i) *Unabhängig von der gewählten Abzählung gilt*

$$\sum_{\omega \in A} p(\omega) = \sup_{\substack{F \subseteq A \\ |F| < \infty}} \sum_{\omega \in F} p(\omega). \quad (1.1.2)$$

*Insbesondere hängt die Summe **monoton** von  $A$  ab, d.h. für  $A \subseteq B$  gilt*

$$\sum_{\omega \in A} p(\omega) \leq \sum_{\omega \in B} p(\omega). \quad (1.1.3)$$

(ii) *Ist  $A = \bigcup_{i=1}^{\infty} A_i$  eine disjunkte Zerlegung, dann gilt:*

$$\sum_{\omega \in A} p(\omega) = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{\omega \in A_i} p(\omega).$$

*Beweis.* (i) Sei  $\omega_1, \omega_2, \dots$  eine beliebige Abzählung von  $A$ . Aus  $p(\omega_i) \geq 0$  für alle  $i \in \mathbb{N}$  folgt, dass die Folge der Partialsummen  $\sum_{i=1}^n p(\omega_i)$  monoton wachsend ist. Somit gilt

$$\sum_{i=1}^{\infty} p(\omega_i) = \sup_{n \in \mathbb{N}} \sum_{i=1}^n p(\omega_i).$$

Falls die Folge der Partialsummen von oben beschränkt ist, existiert dieses Supremum in  $[0, \infty)$ . Andernfalls divergiert die Folge der Partialsummen bestimmt gegen  $+\infty$ . Zu zeigen bleibt

$$\sup_{n \in \mathbb{N}} \sum_{i=1}^n p(\omega_i) = \sup_{\substack{F \subseteq A \\ |F| < \infty}} \sum_{\omega \in F} p(\omega).$$

Wir zeigen zunächst  $\gg \leq \ll$ , und anschließend  $\gg \geq \ll$ :

$\gg \leq \ll$ : Für alle  $n \in \mathbb{N}$  gilt:

$$\sum_{i=1}^n p(\omega_i) \leq \sup_{\substack{F \subseteq A \\ |F| < \infty}} \sum_{\omega \in F} p(\omega),$$

da das Supremum auch über  $F = \{\omega_1, \dots, \omega_n\}$  gebildet wird. Damit folgt  $\gg \leq \ll$ .

$\gg \geq \ll$ : Ist  $F$  eine endliche Teilmenge von  $A$ , dann gibt es ein  $n \in \mathbb{N}$ , so dass  $F \subseteq \{\omega_1, \dots, \omega_n\}$ .

Daher gilt

$$\sum_{\omega \in F} p(\omega) \leq \sum_{i=1}^n p(\omega_i) \leq \sup_{n \in \mathbb{N}} \sum_{i=1}^n p(\omega_i),$$

und es folgt  $\gg \geq \ll$ .

(ii) Falls  $A$  endlich ist, dann gilt  $A_i \neq \emptyset$  nur für endlich viele  $i \in \mathbb{N}$  und alle  $A_i$  sind endlich. Die Behauptung folgt dann aus dem Kommutativ- und dem Assoziativgesetz. Wir nehmen nun an, dass  $A$  abzählbar unendlich ist. In diesem Fall können wir die Aussage aus der Aussage für endliche  $A$  unter Verwendung von (i) herleiten. Wir zeigen erneut  $\gg\leq\ll$  und  $\gg\geq\ll$  separat:

$\gg\leq\ll$ : Ist  $F$  eine endliche Teilmenge von  $A$ , so ist  $F = \bigcup_{i=1}^{\infty} (F \cap A_i)$ . Da diese Vereinigung wieder disjunkt ist, folgt mit  $\sigma$ -Additivität und Gleichung (1.1.3):

$$\sum_{\omega \in F} p(\omega) = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{\omega \in F \cap A_i} p(\omega) \leq \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{\omega \in A_i} p(\omega).$$

Also folgt nach (i) auch:

$$\sum_{\omega \in A} p(\omega) = \sup_{\substack{F \subseteq A \\ |F| < \infty}} \sum_{\omega \in F} p(\omega) \leq \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{\omega \in A_i} p(\omega).$$

$\gg\geq\ll$ : Seien  $F_i \subseteq A_i$  endlich. Da die  $F_i$  wieder disjunkt sind, folgt mit  $\sigma$ -Additivität und Gleichung (1.1.3) für alle  $n \in \mathbb{N}$ :

$$\sum_{i=1}^n \sum_{\omega \in F_i} p(\omega) = \sum_{\omega \in \bigcup_{i=1}^n F_i} p(\omega) \leq \sum_{\omega \in A} p(\omega).$$

Nach (i) folgt dann auch

$$\sum_{i=1}^n \sum_{\omega \in A_i} p(\omega) \leq \sum_{\omega \in A} p(\omega),$$

und damit die Behauptung für  $n \rightarrow \infty$ . □

*Beweis von Satz 1.2.* (i) Nach Voraussetzung gilt  $P[A] \geq 0$  für alle  $A \subseteq \Omega$  und  $P[\Omega] = \sum_{\omega \in \Omega} p(\omega) = 1$ . Seien nun  $A_i$  ( $i \in \mathbb{N}$ ) disjunkt. Dann folgt aus Lemma 1.3.(ii):

$$P\left[\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i\right] = \sum_{\omega \in \bigcup_{i=1}^{\infty} A_i} p(\omega) = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{\omega \in A_i} p(\omega) = \sum_{i=1}^{\infty} P[A_i],$$

also die  $\sigma$ -Additivität von  $P$ .

(ii) Umgekehrt folgt aus der  $\sigma$ -Additivität von  $P$  für  $A \subseteq \Omega$  sofort

$$P[A] = P\left[\underbrace{\bigcup_{\omega \in A} \{\omega\}}_{\text{disjunkt}}\right] = \sum_{\omega \in A} P[\{\omega\}].$$

□

## Gleichverteilungen (Laplace-Modelle)

Ist  $\Omega$  endlich, dann existiert auf  $\mathcal{A} = \mathcal{P}(\Omega)$  eine eindeutige Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P$  mit konstanter Massenfunktion

$$p(\omega) = \frac{1}{|\Omega|} \quad \text{für alle } \omega \in \Omega.$$

Als Wahrscheinlichkeit eines Ereignisses  $A \subseteq \Omega$  ergibt sich

$$P[A] = \sum_{\omega \in A} \frac{1}{|\Omega|} = \frac{|A|}{|\Omega|} = \frac{\text{Anzahl »günstiger« Fälle}}{\text{Anzahl aller Fälle}}. \quad (1.1.4)$$

Die Verteilung  $P$  heißt **Gleichverteilung** auf  $\Omega$  und wird auch mit  $\text{Unif}(\Omega)$  bezeichnet. Laplace (1814) benutzte (1.1.4) als Definition von Wahrscheinlichkeiten. Dabei ist zu beachten, dass die Gleichverteilung nicht erhalten bleibt, wenn man zum Beispiel mehrere Fälle zu einem zusammenfasst. Der Laplacesche Ansatz setzt also voraus, dass man eine Zerlegung in gleich wahrscheinliche Fälle finden kann.

**Beispiele.** a)  $n$  FAIRE MÜNZWÜRFE:

Die Gleichverteilung  $\text{Unif}(\Omega)$  auf  $\Omega = \{0, 1\}^n$  hat die Massenfunktion

$$p(\omega) = \frac{1}{2^n}.$$

Die gleich wahrscheinlichen Fälle sind hier die  $2^n$  möglichen Münzwurfsequenzen.

b) ZUFÄLLIGE PERMUTATIONEN:

Sei  $\Omega = \mathcal{S}_n$  die Menge aller Bijektionen  $\omega: \{1, 2, \dots, n\} \rightarrow \{1, 2, \dots, n\}$ . Der 1 können  $n$  verschiedene Zahlen zugeordnet geordnet werden, der 2 die verbleibenden  $n - 1$ , usw. Somit gibt es insgesamt  $n! = n \cdot (n - 1) \cdot (n - 2) \cdot \dots \cdot 1$  dieser Permutationen. Bezüglich der Gleichverteilung auf  $\mathcal{S}_n$  gilt also

$$P[A] = \frac{|A|}{n!} \quad \text{für alle } A \subseteq \mathcal{S}_n.$$

Anschauliche Beispiele für zufällige Permutationen sind die Anordnung eines gemischten Kartenspiels, oder das zufällige Vertauschen von  $n$  Hüten oder Schlüsseln. In letzterem Beispiel gilt:

$$P[\text{»der } k\text{-te Schlüssel passt auf Schloss } i\text{«}] = P[\{\omega \in \mathcal{S}_n \mid \omega(i) = k\}] = \frac{(n-1)!}{n!} = \frac{1}{n}.$$

Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, dass einer der Schlüssel sofort passt? Das Ereignis »Schlüssel  $i$  passt« wird beschrieben durch die Menge

$$A_i = \{\omega \mid \omega(i) = i\} = \{\text{»}i \text{ ist Fixpunkt von } \omega\text{«}\}.$$

Die Wahrscheinlichkeit für das Ereignis »ein Schlüssel passt« lässt sich dann nach dem Einschluss-/Ausschlussprinzip (Satz 1.8) berechnen:

$$\begin{aligned}
 P[\text{es gibt mindestens einen Fixpunkt}] &= P[A_1 \cup A_2 \cup \dots \cup A_n] \\
 &= \sum_{k=1}^n (-1)^{k+1} \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq n} P[A_{i_1} \cap A_{i_2} \cap \dots \cap A_{i_k}] \\
 &= \sum_{k=1}^n (-1)^{k+1} \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq n} \frac{(n-k)!}{n!} \\
 &= \sum_{k=1}^n (-1)^{k+1} \binom{n}{k} \frac{(n-k)!}{n!} = - \sum_{k=1}^n \frac{(-1)^k}{k!}
 \end{aligned}$$

Hierbei haben wir benutzt, dass es  $\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}$   $k$ -elementige Teilmengen  $\{i_1, \dots, i_k\}$  von  $\{1, \dots, n\}$  gibt. Für das Gegenereignis erhalten wir:

$$\begin{aligned}
 P[\text{kein Schlüssel passt}] &= 1 - P[\text{mindestens ein Fixpunkt}] \\
 &= 1 + \sum_{k=1}^n \frac{(-1)^k}{k!} = \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k}{k!}.
 \end{aligned}$$

Die letzte Summe konvergiert für  $n \rightarrow \infty$  gegen  $e^{-1}$ . Der Grenzwert existiert also und ist weder 0 noch 1! Somit hängt die Wahrscheinlichkeit, dass keiner der Schlüssel passt, für große  $n$  nur wenig von  $n$  ab.

## Empirische Verteilungen

Sei  $x_1, x_2, \dots \in \Omega$  eine Liste von Beobachtungsdaten oder Merkmalsausprägungen, zum Beispiel das Alter aller Einwohner von Bonn. Für  $k \in \mathbb{N}$  ist

$$\begin{aligned}
 N_k[A] &:= |\{i \in \{1, \dots, k\} \mid x_i \in A\}| && \text{die Häufigkeit der Werte in } A \text{ unter } x_1, \dots, x_k, && \text{und} \\
 P_k[A] &:= N_k[A]/k, && \text{die entsprechende relative Häufigkeit von Werten in } A.
 \end{aligned}$$

Für jedes feste  $k$  ist  $P_k$  eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf  $(\Omega, \mathcal{P}(\Omega))$ , deren Massenfunktion

$$p_k(\omega) = \frac{N_k[\{\omega\}]}{k}$$

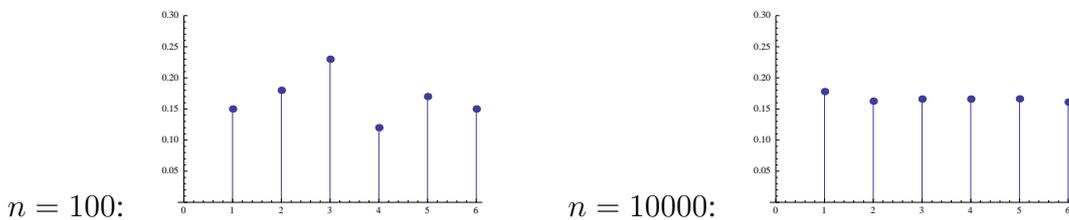
durch die relative Häufigkeit der möglichen Merkmalsausprägungen unter  $x_1, \dots, x_k$  gegeben ist. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P_k$  heißt **empirische Verteilung** der Werte  $x_1, \dots, x_k$ . In der beschreibenden Statistik analysiert man empirische Verteilungen mithilfe verschiedener Kenngrößen.

**Beispiele.** a) ABZÄHLUNG ALLER MÖGLICHEN FÄLLE:

Sei  $x_1, \dots, x_k$  eine Abzählung der Elemente in  $\Omega$ . Dann stimmt die empirische Verteilung  $P_k$  mit der Gleichverteilung auf  $\Omega$  überein.

b) EMPIRISCHE VERTEILUNG VON  $n$  ZUFALLSZAHLN AUS  $\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ :

```
x=RandomChoice[{1,2,3,4,5,6},n];
ListPlot[BinCounts[x[[1 ;; n], {1, 7, 1}]]/n,
  Filling -> Axis, PlotRange -> {0, 0.3},
  PlotStyle -> PointSize[Large]], {n, 1, 100, 1}
```



Das **empirische Gesetz der großen Zahlen** besagt, dass sich die empirischen Verteilungen für  $k \rightarrow \infty$  der zugrundeliegenden Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P$  (hier der Gleichverteilung auf  $\{1, 2, \dots, 6\}$ ) annähern:

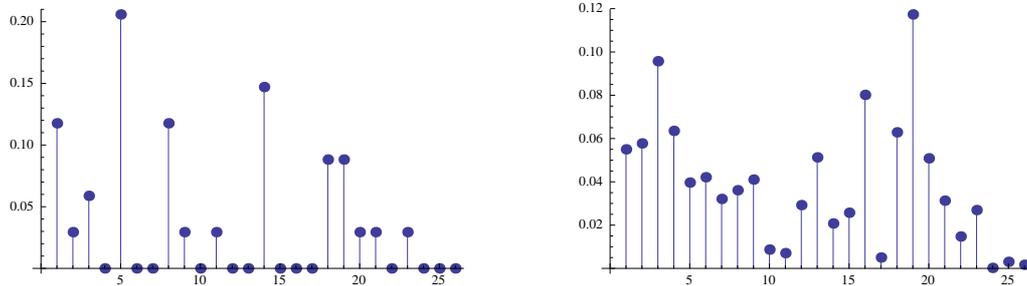
$$P_k[A] = \frac{|\{i \in \{1, \dots, k\} \mid x_i \in A\}|}{k} \rightarrow P[A] \quad \text{für } k \rightarrow \infty.$$

Diese Aussage wird auch als frequentistische „Definition“ der Wahrscheinlichkeit von  $A$  in den empirischen Wissenschaften verwendet. Wir werden die Konvergenz der empirischen Verteilungen von unabhängigen, identisch verteilten Zufallsvariablen unten aus den Kolmogorovschen Axiomen herleiten.

c) EMPIRISCHE VERTEILUNG DER BUCHSTABEN »A« BIS »Z« IN DEM WORT »EISENBANNSCHRANKENWAERTERHAEUSCHEN« UND IN EINEM ENGLISCHEN WÖRTERBUCH:

```
freq = StringCount["eisenbahnschrankenwaerterhaeuschen", #] & /@
  CharacterRange["a", "z"];
relfreq = freq/Total[freq];
ListPlot[relfreq, Filling -> Axis, PlotStyle -> PointSize[Large]]
```

```
freq = Length[DictionaryLookup[# ~~ ___]] & /@
  CharacterRange["a", "z"];
relfreq = freq/Total[freq]; ListPlot[relfreq, Filling -> Axis,
  PlotStyle -> PointSize[Large]]
```

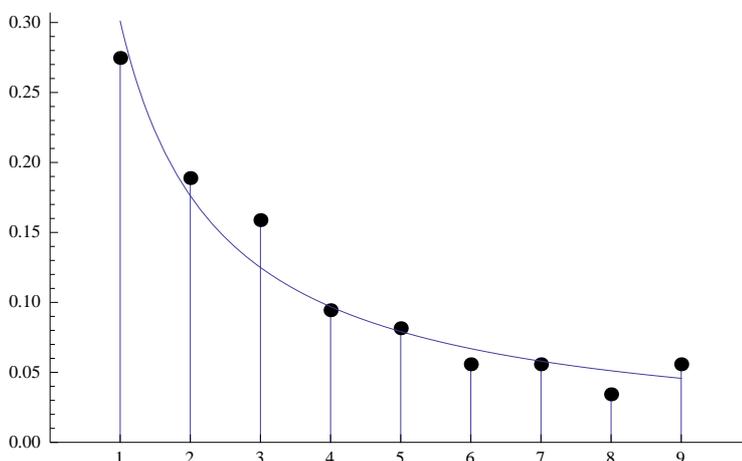


d) BENFORDSCHES GESETZ:

Das Benfordsche Gesetz beschreibt eine Gesetzmäßigkeit in der Verteilung der Anfangsziffern von Zahlen in empirischen Datensätzen. Es lässt sich etwa in Datensätzen über Einwohnerzahlen von Städten, Geldbeträge in der Buchhaltung, Naturkonstanten etc. beobachten. Ist  $d$  die erste Ziffer einer Dezimalzahl, so tritt sie nach dem Benfordschen Gesetz in empirischen Datensätzen näherungsweise mit folgenden relativen Häufigkeiten  $p(d)$  auf:

$$p(d) = \log_{10} \left( 1 + \frac{1}{d} \right) = \log_{10}(d+1) - \log_{10} d.$$

In der Grafik unten (Quelle: »Wolfram Demonstrations Project«) werden die relativen Häufigkeiten der Anfangsziffern 1 bis 9 in den Anzahlen der Telefonanschlüsse in allen Ländern der Erde mit den nach dem Benfordschen Gesetz prognostizierten relativen Häufigkeiten verglichen. Das Benfordsche Gesetz lässt sich mithilfe des empirischen Gesetzes der großen Zahlen herleiten, wenn man annimmt, dass die Daten Realisierungen unabhängiger identisch verteilter Zufallsvariablen mit auf  $[0, 1)$  gleichverteilten logarithmierten Mantissen sind.



## 1.2 Diskrete Zufallsvariablen und ihre Verteilung

Sei  $(\Omega, \mathcal{A}, P)$  ein gegebener Wahrscheinlichkeitsraum. Meistens ist man nicht so sehr an den Elementen  $\omega \in \Omega$  selbst interessiert, sondern an den Werten  $X(\omega)$ , die bestimmte von  $\omega$  (also vom Zufall) abhängende Größen  $X$  annehmen. Entsprechende Abbildungen  $\omega \rightarrow X(\omega)$  nennt man Zufallsvariablen, wenn die Ereignisse

$$\{X \in B\} = \{\omega \in \Omega : X(\omega) \in B\} = X^{-1}(B)$$

für hinreichend viele Teilmengen  $B$  des Wertebereichs von  $X$  in der zugrundeliegenden  $\sigma$ -Algebra  $\mathcal{A}$  enthalten sind. Wir beschränken uns zunächst auf Zufallsvariablen mit abzählbarem Wertebereich.

### Zufallsvariablen, Verteilung und Massenfunktion

**Definition.** (i) Eine *diskrete Zufallsvariable* ist eine Abbildung

$$X : \Omega \rightarrow S, \quad S \text{ abzählbar,}$$

so dass für alle  $a \in S$  gilt:

$$X^{-1}(a) = \{\omega \in \Omega \mid X(\omega) = a\} \in \mathcal{A}. \quad (1.2.1)$$

Für die Menge  $X^{-1}(a)$  schreiben wir im folgenden kurz  $\{X = a\}$ .

(ii) Die **Verteilung** einer diskreten Zufallsvariable  $X : \Omega \rightarrow S$  ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\mu_X$  auf  $S$  mit Gewichten

$$p_X(a) = P[\{X = a\}] \quad (a \in S).$$

Statt  $P[\{X = a\}]$  schreiben wir auch kurz  $P[X = a]$ .

**Bemerkung.** a) Man verifiziert leicht, dass  $p_X$  tatsächlich die Massenfunktion einer Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\mu_X$  auf  $S$  ist. In der Tat gilt  $p_X(a) \geq 0$  für alle  $a \in S$ . Da die Ereignisse  $\{X = a\}$  disjunkt sind, folgt zudem:

$$\sum_{a \in S} p_X(a) = \sum_{a \in S} P[X = a] = P\left[\bigcup_{a \in S} \{X = a\}\right] = P[\Omega] = 1.$$

Für eine beliebige Teilmenge  $B \subseteq S$  des Wertebereichs von  $X$  ist  $\{X \in B\}$  wieder ein Ereignis in der  $\sigma$ -Algebra  $\mathcal{A}$ , denn

$$\{X \in B\} = \underbrace{\{\omega \in \Omega : X(\omega) \in B\}}_{X^{-1}(B)} = \bigcup_{a \in B} \underbrace{\{X = a\}}_{\in \mathcal{A}} \in \mathcal{A}$$

nach der Definition einer  $\sigma$ -Algebra. Wegen der  $\sigma$ -Additivität von  $P$  gilt

$$P[X \in B] = \sum_{a \in B} P[X = a] = \sum_{a \in B} p_X(a) = \mu_X[B].$$

Die Verteilung  $\mu_X$  gibt also an, mit welchen Wahrscheinlichkeiten die Zufallsvariable  $X$  Werte in bestimmten Teilmengen des Wertebereichs  $S$  annimmt.

- b) Ist  $\Omega$  selbst abzählbar und  $\mathcal{A} = \mathcal{P}(\Omega)$ , dann ist jede Abbildung  $X : \Omega \rightarrow S$  eine Zufallsvariable.
- c) Eine **reellwertige Zufallsvariable** ist eine Abbildung  $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ , so dass die Mengen  $\{X \leq c\} = X^{-1}((-\infty, c])$  für alle  $c \in \mathbb{R}$  in der  $\sigma$ -Algebra  $\mathcal{A}$  enthalten sind. Man überzeugt sich leicht, dass diese Definition mit der Definition oben konsistent ist, wenn der Wertebereich  $S$  eine abzählbare Teilmenge von  $\mathbb{R}$  ist.

Wir beginnen mit einem elementaren Beispiel:

**Beispiel** (Zweimal würfeln). Sei  $P = \text{Unif}(\Omega)$  die Gleichverteilung auf der Menge

$$\Omega = \{\omega = (x_1, x_2) : x_i \in \{1, \dots, 6\}\}.$$

Die Augenzahl des  $i$ -ten Würfes ( $i = 1, 2$ ) wird durch  $X_i(\omega) := x_i$  beschrieben. Die Abbildung

$$X_i : \Omega \rightarrow S := \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$$

ist eine diskrete Zufallsvariable. Die Verteilung  $\mu_{X_i}$  hat die Massenfunktion

$$p_{X_i}(a) = P[X_i = a] = \frac{6}{36} = \frac{1}{6} \quad \text{für alle } a \in S,$$

d.h.  $\mu_{X_i}$  ist die Gleichverteilung auf  $S$ .

Die Summe der Augenzahlen bei beiden Würfeln wird durch die Zufallsvariable

$$Y(\omega) := X_1(\omega) + X_2(\omega)$$

beschrieben. Die Gewichte der Verteilung von  $Y$  sind

$$p_Y(a) = P[Y = a] = \begin{cases} \frac{1}{36} & \text{falls } a \in \{2, 12\}, \\ \frac{2}{36} & \text{falls } a \in \{3, 11\}, \\ \text{usw.} & \end{cases}$$

Die Zufallsvariable  $Y$  ist also nicht mehr gleichverteilt !

Das folgende Beispiel verallgemeinert die Situation aus dem letzten Beispiel:

**Beispiel.** Sei  $P$  die Gleichverteilung auf einer endlichen Menge  $\Omega = \{\omega_1, \dots, \omega_n\}$  mit  $n$  Elementen, und sei  $X : \Omega \rightarrow S$  eine beliebige Abbildung in eine Menge  $S$ . Setzen wir  $x_i := X(\omega_i)$ , dann ist  $X$  eine Zufallsvariable mit Massenfunktion

$$P[X = a] = \frac{|\{\omega \in \Omega : X(\omega) = a\}|}{|\Omega|} = \frac{|\{1 \leq i \leq n : x_i = a\}|}{n}.$$

Die Verteilung  $\mu_X$  von  $X$  unter der Gleichverteilung ist also die empirische Verteilung der Werte  $x_1, \dots, x_n$ .

## Binomialverteilungen

Wir wollen nun zeigen, wie man von der Gleichverteilung zu anderen fundamentalen Verteilungen der Wahrscheinlichkeitstheorie gelangt. Dazu betrachten wir zunächst eine endliche Menge (Grundgesamtheit, Zustandsraum, Population)  $S$ . In Anwendungen können die Elemente von  $S$  alles mögliche beschreiben, zum Beispiel die Kugeln in einer Urne, die Einwohner von Bonn, oder die Fledermäuse im Kottenforst. Wir wollen nun die zufällige Entnahme von  $n$  Einzelstichproben aus  $S$  mit Zurücklegen modellieren. Dazu setzen wir

$$\Omega = S^n = \{\omega = (x_1, \dots, x_n) : x_i \in S\}.$$

Wir nehmen an, dass alle kombinierten Stichproben gleich wahrscheinlich sind, d.h. die zugrundeliegende Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P$  sei die Gleichverteilung auf dem Produktraum  $\Omega$ . Erste relevante Zufallsvariablen sind die Stichprobenwerte  $X_i(\omega) = x_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Wie im ersten Beispiel oben gilt

$$P[X_i = a] = \frac{|\{X_i = a\}|}{|\Omega|} = \frac{|S|^{n-1}}{|S|^n} = \frac{1}{|S|} \quad \text{für alle } a \in S,$$

d.h. die Zufallsvariablen  $X_i$  sind gleichverteilt auf  $S$ . Sei nun  $E \subseteq S$  eine Teilmenge des Zustandsraums, die für eine bestimmte Merkmalsausprägung der Stichprobe steht (zum Beispiel Ziehen einer roten Kugel oder Beobachtung einer bestimmten Fledermausart). Die Ereignisse  $\{X_i \in E\}$ , dass diese Merkmalsausprägung bei der  $i$ -ten Einzelstichprobe vorliegt, haben die Wahrscheinlichkeit

$$P[X_i \in E] = \mu_{X_i}[E] = |E|/|S|.$$

Wir betrachten nun die Häufigkeit von  $E$  in der gesamten Stichprobe  $(X_1, \dots, X_n)$ . Diese wird durch die Zufallsvariable  $N : \Omega \rightarrow \{0, 1, 2, \dots, n\}$ ,

$$N(\omega) := |\{1 \leq i \leq n : X_i(\omega) \in E\}|$$

beschrieben. Ist  $p = |E|/|S|$  die relative Häufigkeit des Merkmals  $E$  in der Population  $S$ , dann erhalten wir:

**Lemma 1.4.** Für  $k \in \{0, 1, \dots, n\}$  gilt:

$$P[N = k] = \binom{n}{k} p^k (1 - p)^{n-k}.$$

*Beweis.* Es gilt

$$|\{\omega \in \Omega \mid N(\omega) = k\}| = \binom{n}{k} |E|^k |S \setminus E|^{n-k}.$$

Hierbei gibt  $\binom{n}{k}$  die Anzahl der Möglichkeiten an,  $k$  Indizes aus  $\{1, \dots, n\}$  auszuwählen (diejenigen, für die die Merkmalsausprägung  $E$  vorliegt),  $|E|^k$  ist die Anzahl der Möglichkeiten für die nun festgelegten  $k$  Stichproben Werte aus  $E$  zu wählen, und  $|S \setminus E|^{n-k}$  ist die Anzahl der Möglichkeiten für die verbleibenden  $n - k$  Stichproben Werte aus  $S \setminus E$  zu wählen. Da  $P$  die Gleichverteilung auf  $S^n$  ist, folgt

$$P[N = k] = \frac{\binom{n}{k} |E|^k |S \setminus E|^{n-k}}{|S|^n} = \binom{n}{k} \left(\frac{|E|}{|S|}\right)^k \left(\frac{|S \setminus E|}{|S|}\right)^{n-k} = \binom{n}{k} p^k (1 - p)^{n-k}.$$

□

**Definition.** Sei  $n \in \mathbb{N}$  und  $p \in [0, 1]$ . Die Wahrscheinlichkeitsverteilung auf  $\{0, 1, \dots, n\}$  mit Massenfunktion

$$b_{n,p}(k) = \binom{n}{k} p^k (1 - p)^{n-k}$$

heißt **Binomialverteilung mit Parametern  $n$  und  $p$**  (kurz:  $\text{Bin}(n, p)$ ).

**Bemerkung.** Dass  $b_{n,p}$  die Massenfunktion einer Wahrscheinlichkeitsverteilung ist, kann man mit der allgemeinen binomischen Formel nachrechnen. Dies ist aber gar nicht notwendig, da sich diese Eigenschaft bereits aus Lemma 1.4 ergibt !

Wir haben gesehen, wie sich die Binomialverteilung aus der Gleichverteilung auf einer endlichen Produktmenge ableiten lässt. Binomialverteilungen treten aber noch allgemeiner auf, nämlich als Verteilung der Häufigkeit des Eintretens unabhängiger Ereignisse mit gleichen Wahrscheinlichkeiten. Ereignisse  $E_1, \dots, E_n$  heißen **unabhängig**, falls

$$P[E_{i_1} \cap E_{i_2} \cap \dots \cap E_{i_k}] = P[E_{i_1}] \cdot P[E_{i_2}] \cdots P[E_{i_k}]$$

für alle  $k \leq n$  und  $1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq n$  gilt. Wir werden Unabhängigkeit systematisch in Abschnitt 2.3 diskutieren. Im Vorgriff darauf erwähnen wir schon die folgende wichtige Aussage:

Sind  $E_1, \dots, E_n$  unabhängige Ereignisse mit Wahrscheinlichkeit  $P[E_i] = p$ , dann gilt

$$P[\text{»genau } k \text{ der } E_i \text{ treten ein«}] = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k},$$

d.h. die Anzahl der Ereignisse, die eintreten, ist binomialverteilt.

Der Beweis folgt in Abschnitt 2.3.

## Poissonverteilungen und Poissonscher Grenzwertsatz

Aus der Binomialverteilung lässt sich eine weitere Wahrscheinlichkeitsverteilung ableiten, die die Häufigkeit von seltenen Ereignissen beschreibt. Bevor wir den entsprechenden mathematischen Grenzwertsatz formulieren und beweisen, sehen wir, wie sich in diversen Anwendungssituationen aus einigen wenigen Grundannahmen dasselbe mathematische Modell ergibt, wenn man die Anzahl der Ereignisse, die in einem bestimmten Zeitintervall eintreten, beschreiben möchte.

**Beispiel** (Seltene Ereignisse in stetiger Zeit). Wir betrachten eine Folge von Ereignissen, die zu zufälligen Zeitpunkten eintreten. Dies können zum Beispiel eingehende Schadensfälle bei einer Versicherung, ankommende Anrufe in einer Telefonzentrale, oder radioaktive Zerfälle sein. Wir sind hier auf der Anwendungsebene - mit „Ereignissen“ meinen wir also im Moment keine mathematischen Objekte. Uns interessiert die Anzahl  $N$  der Ereignisse, die in einem festen Zeitintervall der Länge  $t$  eintreten. Der Einfachheit halber und ohne wesentliche Beschränkung der Allgemeinheit setzen wir  $t = 1$ . Wir treffen nun einige Grundannahmen, die näherungsweise erfüllt sein sollten. Diese Grundannahmen sind zunächst wieder auf der Anwendungsebene, und werden erst später durch Annahmen an das mathematische Modell präzisiert. Wir formulieren die Annahmen für die radioaktiven Zerfälle - entsprechende Annahmen gelten aber näherungsweise auch in vielen anderen Situationen.

*Annahme 1:* »Die Zerfälle passieren „unabhängig“ voneinander zu „zufälligen“ Zeitpunkten«.

Um die Verteilung der Anzahl der Zerfälle pro Zeiteinheit näherungsweise bestimmen zu können, unterteilen wir das Zeitintervall  $(0, 1]$  in die  $n$  Teilintervalle  $((k-1)/n, k/n]$ ,  $k = 1, 2, \dots, n$ :



*Annahme 2:* »Wenn  $n$  sehr groß ist, dann passiert in einer Zeitspanne der Länge  $\frac{1}{n}$  „fast immer“ höchstens ein Zerfall«.

In einem stochastischen Modell repräsentiere  $E_i$  das Ereignis, dass im Zeitintervall  $(\frac{i-1}{n}, \frac{i}{n}]$  mindestens ein radioaktiver Zerfall stattfindet. Die Wahrscheinlichkeit von  $E_i$  sei unabhängig von  $i$  und näherungsweise proportional zu  $\frac{1}{n}$ , also:

*Annahme 3:* »Es gilt  $P[E_i] \approx \lambda/n$  mit einer Konstanten  $\lambda \in (0, \infty)$  (der Intensität bzw. Zerfallsrate).«

Wir gehen weiter davon aus, dass sich die erste Annahme dadurch präzisieren lässt, dass wir Unabhängigkeit der Ereignisse  $E_1, \dots, E_n$  fordern. Das ist nicht ganz offensichtlich, lässt sich aber in einem anspruchsvolleren mathematischen Modell, dass die Zeitpunkte aller Zerfälle beschreibt, rechtfertigen. Unter den Annahmen 1, 2 und 3 sollte für das Ereignis, dass genau  $k$  radioaktive Zerfälle im Zeitintervall  $[0, 1]$  stattfinden, dann näherungsweise gelten, dass

$$P[N = k] \approx P[\text{»genau } k \text{ der } E_i \text{ treten ein«}] \approx b_{n, \frac{\lambda}{n}}(k),$$

wobei  $b_{n, \frac{\lambda}{n}}(k)$  das Gewicht von  $k$  unter der Binomialverteilung mit Parametern  $n$  und  $\frac{\lambda}{n}$  ist. Diese Näherung sollte zudem »für große  $n$  immer genauer werden«. Daher sollten wir die Anzahl der Zerfälle pro Zeiteinheit bei Intensität  $\lambda$  durch eine Zufallsvariable mit nichtnegativen ganzzahligen Werten beschreiben, deren Verteilung die Massenfunktion

$$p_\lambda(k) = \lim_{n \rightarrow \infty} b_{n, \frac{\lambda}{n}}(k)$$

hat. Der folgende Satz zeigt, dass  $p_\lambda$  in der Tat die Massenfunktion einer Wahrscheinlichkeitsverteilung ist, nämlich der Poissonverteilung mit Parameter  $\lambda$ .

**Satz 1.5** (Poissonapproximation der Binomialverteilung). *Sei  $\lambda \in (0, \infty)$ . Dann gilt:*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} b_{n, \frac{\lambda}{n}}(k) = \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda}, \quad \text{für alle } k = 0, 1, 2, \dots$$

*Beweis.* Für  $k \in \{0, 1, 2, \dots\}$  und  $n \rightarrow \infty$  gilt

$$\begin{aligned} b_{n, \lambda/n}(k) &= \frac{n!}{k!(n-k)!} \left(\frac{\lambda}{n}\right)^k \left(1 - \frac{\lambda}{n}\right)^{n-k} \\ &= \frac{\lambda^k}{k!} \cdot \underbrace{\frac{n \cdot (n-1) \cdot \dots \cdot (n-k+1)}{n^k}}_{\rightarrow 1} \cdot \underbrace{\left(1 - \frac{\lambda}{n}\right)^n}_{\rightarrow e^{-\lambda}} \cdot \underbrace{\left(1 - \frac{\lambda}{n}\right)^{-k}}_{\rightarrow 1} \rightarrow \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda}. \end{aligned}$$

□

**Definition.** Die Wahrscheinlichkeitsverteilung auf  $\{0, 1, 2, \dots\}$  mit Massenfunktion

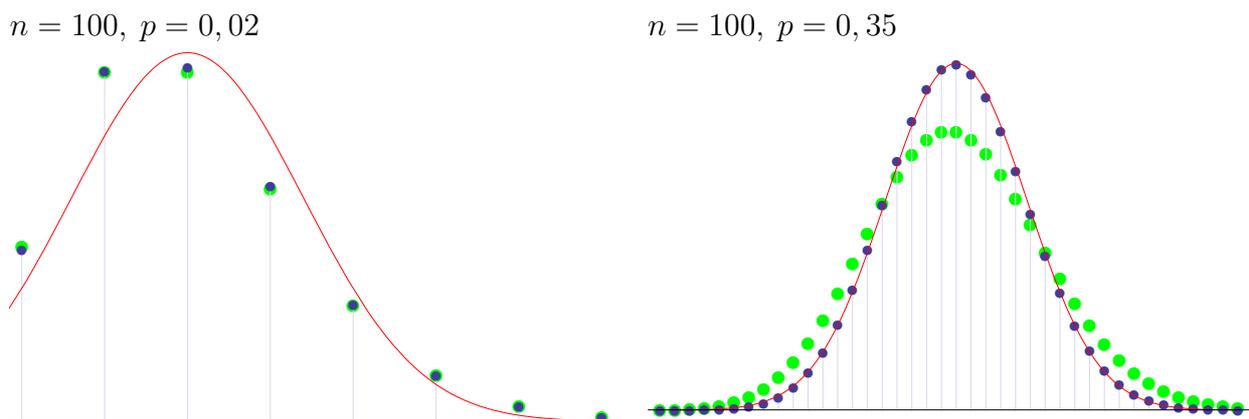
$$p_\lambda(k) = \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda}, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

heißt **Poissonverteilung mit Parameter (Intensität)  $\lambda$** .

Aufgrund des Satzes verwendet man die Poissonverteilung zur näherungsweisen Modellierung der *Häufigkeit seltener Ereignisse* (zum Beispiel Rechtschreibfehler in einer Zeitung, Programmfehler in einer Software, Lottogewinne, Unfälle oder Naturkatastrophen, Zusammenbrüche von Mobilfunknetzen, usw.), und damit zur »Approximation« von Binomialverteilungen mit kleinen Erfolgswahrscheinlichkeiten  $p$ .

Für häufigere Ereignisse (zum Beispiel wenn die Erfolgswahrscheinlichkeit  $p$  unabhängig von  $n$  ist) verwendet man hingegen besser eine Normalverteilung zur näherungsweisen Modellierung der (geeignet reskalierten) relativen Häufigkeit  $\frac{k}{n}$  des Ereignisses für große  $n$ . Definition und Eigenschaften von Normalverteilungen werden wir später kennenlernen.

Die folgenden (mit »Mathematica« erstellten) Graphiken zeigen die Poisson- und Normalapproximation (Poissonverteilung grün, reskalierte Dichte der Normalverteilung rot) der Binomialverteilung  $\text{Bin}(n,p)$  (blau) für unterschiedliche Parameterwerte:



## Hypergeometrische Verteilungen

Abschließend zeigen wir, wie sich eine weitere Klasse von Wahrscheinlichkeitsverteilungen, die hypergeometrischen Verteilungen, aus Gleichverteilungen ableiten lässt. Diese Verteilungen treten bei der Entnahme von Stichproben ohne Zurücklegen aus einer Gesamtpopulation auf.

**Beispiel** (Stichproben ohne Zurücklegen). Wir betrachten eine Population  $S$  mit insgesamt  $m$  Objekten, z.B. die Kugeln in einer Urne, die Wähler in einem Bundesland, oder die Bäume in einem Waldstück. Unter den  $m$  Objekten seien  $r$ , die eine gewisse Eigenschaft/ Merkmalsausprägung besitzen (z.B. Wähler einer bestimmten Partei), und  $m - r$ , die diese Eigenschaft nicht besitzen. Wir wollen die Entnahme einer Zufallsstichprobe von  $n$  Objekten aus der Population beschreiben, wobei  $n \leq \min(r, m - r)$  gelte. Dazu betrachten wir den Grundraum  $\Omega$ , der aus allen Teilmengen (Stichproben)  $\omega \subseteq S$  der Kardinalität  $n$  besteht. Die Menge  $\Omega$  enthält  $\binom{m}{n}$  Ele-

mente. Gehen wir davon aus, dass alle Stichproben gleich wahrscheinlich sind, dann wählen wir als zugrundeliegende Wahrscheinlichkeitsverteilung in unserem Modell die Gleichverteilung

$$P = \text{Unif}(\Omega).$$

Sei nun  $N(\omega)$  die Anzahl der Objekte in der Stichprobe  $\omega$ , die die Merkmalsausprägung haben. Für die Wahrscheinlichkeit, dass genau  $k$  der  $n$  Objekte in der Stichprobe die Merkmalsausprägung haben, ergibt sich

$$P[N = k] = \frac{|\{\omega \in \Omega : N(\omega) = k\}|}{|\Omega|} = \frac{\binom{r}{k} \binom{m-r}{n-k}}{\binom{m}{n}} \quad (k = 0, 1, \dots, n).$$

**Definition.** Die Wahrscheinlichkeitsverteilung auf  $\{0, 1, 2, \dots, n\}$  mit Massenfunktion

$$h_{m,r,n}(k) = \binom{r}{k} \binom{m-r}{n-k} / \binom{m}{n}$$

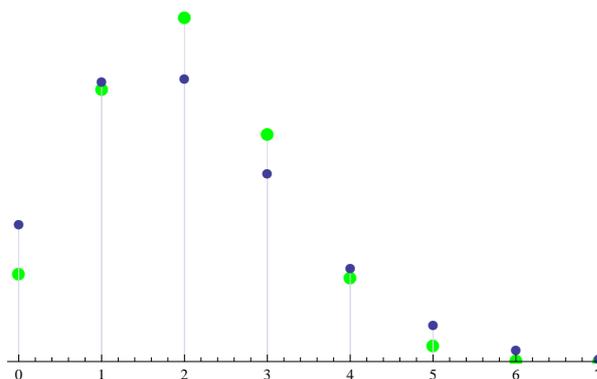
wird **hypergeometrische Verteilung mit Parametern  $m, r$  und  $n$**  genannt.

Ist die zugrundeliegende Population im Verhältnis zur Stichprobe groß, dann sollte sich kein wesentlicher Unterschied bei Ziehen mit und ohne Zurücklegen ergeben, da nur sehr selten dasselbe Objekt zweimal gezogen wird. Dies lässt sich mathematisch zum Beispiel folgendermaßen präzisieren: Für ein festes  $n \in \mathbb{N}$  und  $m, r \rightarrow \infty$  mit  $p = r/m$  fest gilt

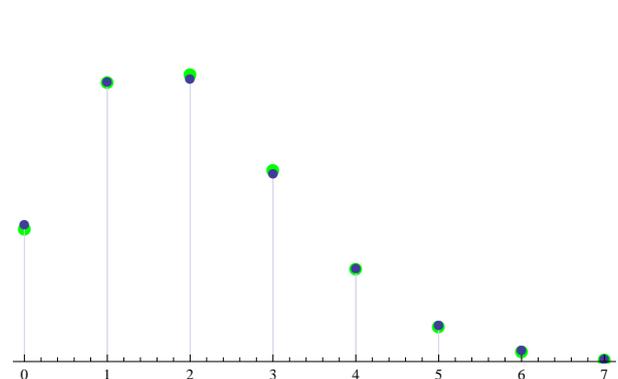
$$h_{m,r,n}(k) \longrightarrow \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k},$$

d.h. die hypergeometrische Verteilung mit Parametern  $m, pm$  und  $n$  nähert sich der Binomialverteilung  $\text{Bin}(n, p)$  an. Der Beweis ist eine Übungsaufgabe. Die folgenden (mit »Mathematica« erstellten) Graphiken zeigen die Gewichte der Binomialverteilung  $\text{Bin}(n, p)$  (blau) und der hypergeometrischen Verteilung  $\text{Hyp}(m, pm, n)$  (grün) für unterschiedliche Parameterwerte:

$n = 100, p = 0,02, m = 300$



$n = 100, p = 0,02, m = 3000$



## 1.3 Erwartungswert

Eine erste wichtige Kenngröße reellwertiger Zufallsvariablen ist ihr Erwartungswert. Wir betrachten eine Zufallsvariable  $X : \Omega \rightarrow S$  auf einem Wahrscheinlichkeitsraum  $(\Omega, \mathcal{A}, P)$ , deren Wertebereich  $S$  eine abzählbare Teilmenge der reellen Zahlen ist. In diesem Fall können wir den Erwartungswert (Mittelwert) von  $X$  bzgl. der zugrundeliegenden Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P$  als gewichtetes Mittel der Werte von  $X$  definieren:

**Definition.** Der *Erwartungswert* von  $X$  bzgl.  $P$  ist gegeben durch

$$E[X] := \sum_{a \in S} a \cdot P[X = a] = \sum_{a \in S} a \cdot p_X(a),$$

sofern die Summe auf der rechten Seite wohldefiniert ist.

Nimmt die Zufallsvariable  $X$  nur nichtnegative Werte  $X(\omega) \geq 0$  an, dann sind alle Summanden der Reihe nichtnegativ, und der Erwartungswert  $E[X]$  ist wohldefiniert in  $[0, \infty]$ . Weiterhin ist  $E[X]$  wohldefiniert und endlich, falls die Reihe absolut konvergiert. Allgemeiner können wir den Erwartungswert immer dann definieren, wenn

$$\sum_{a \in S, a < 0} |a| \cdot P[X = a] < \infty \quad \text{gilt.}$$

Der Erwartungswert  $E[X]$  wird häufig als **Prognosewert** für  $X(\omega)$  verwendet, wenn keine weitere Information vorliegt.

**Bemerkung.** Nach der Definition hängt der Erwartungswert nur von der Verteilung  $\mu_X$  der Zufallsvariablen  $X$  ab! Wir bezeichnen  $E[X]$  daher auch als **Erwartungswert der Wahrscheinlichkeitsverteilung**  $\mu_X$  auf  $\mathbb{R}$ .

**Beispiel** (Gleichverteilte Zufallsvariablen). Ist  $X$  gleichverteilt auf einer endlichen Teilmenge  $S = \{a_1, \dots, a_n\}$  von  $\mathbb{R}$  mit  $a_i \neq a_j$  für  $i \neq j$ , dann ist der Erwartungswert  $E[X]$  das arithmetische Mittel der Werte von  $X$ :

$$E[X] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n a_i.$$

**Beispiel** (Poissonverteilung). Für eine mit Parameter  $\lambda$  Poisson-verteilte Zufallsvariable  $N$  gilt

$$E[N] = \sum_{k=0}^{\infty} k P[N = k] = \sum_{k=0}^{\infty} k \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda} = \lambda \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda^{k-1}}{(k-1)!} e^{-\lambda} = \lambda \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda} = \lambda.$$

Beschreibt  $N$  die Häufigkeit eines Ereignisses (pro Zeiteinheit), dann können wir den Parameter  $\lambda$  dementsprechend als *mittlere Häufigkeit* oder *Intensität* interpretieren.

**Beispiel** (Erwartungswerte von Indikatorfunktionen). Die Indikatorfunktion eines Ereignisses  $A \in \mathcal{A}$  ist die durch

$$I_A(\omega) := \begin{cases} 1 & \text{falls } \omega \in A, \\ 0 & \text{falls } \omega \in A^C, \end{cases}$$

definierte Zufallsvariable. Für den Erwartungswert gilt

$$E[I_A] = 1 \cdot P[X = 1] + 0 \cdot P[X = 0] = P[A].$$

Beträgt beispielsweise die Leistung in einem elementaren Versicherungsvertrag

$$Y(\omega) = \begin{cases} c & \text{falls } \omega \in A, \quad \text{»Schadensfall«,} \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases}$$

dann gilt  $Y = c \cdot I_A$ , und

$$E[Y] = c \cdot P[A].$$

## Transformationsatz

Sei  $X : \Omega \rightarrow S$  eine Zufallsvariable mit Werten in einer beliebigen abzählbaren Menge  $S$  (die nicht notwendig aus reellen Zahlen besteht). Dann können wir Erwartungswerte von Zufallsvariablen der Form

$$g(X)(\omega) := g(X(\omega))$$

mit einer Funktion  $g : S \rightarrow \mathbb{R}$  berechnen. Anstatt dabei über die Werte von  $g(X)$  zu summieren, können wir den Erwartungswert auch direkt aus der Verteilung von  $X$  erhalten.

**Satz 1.6** (Transformationsatz). *Für jede reellwertige Funktion  $g : S \rightarrow \mathbb{R}$  ist*

$$g(X) = g \circ X : \Omega \rightarrow g(S) \subset \mathbb{R}$$

eine diskrete Zufallsvariable. Es gilt

$$E[g(X)] = \sum_{a \in S} g(a) \cdot P[X = a],$$

falls die Summe wohldefiniert ist (also zum Beispiel falls  $g$  nichtnegativ ist, oder die Reihe absolut konvergiert).

*Beweis.* Wegen  $\{g(X) = b\} = \bigcup_{a \in g^{-1}(b)} \{X = a\} \in \mathcal{A}$  für alle  $b \in g(S)$  ist  $g(X)$  wieder eine Zufallsvariable. Da die Vereinigung disjunkt ist, erhalten wir unter Verwendung der  $\sigma$ -Additivität:

$$\begin{aligned} E[g(X)] &= \sum_{b \in g(S)} b \cdot P[g(X) = b] = \sum_{b \in g(S)} b \cdot \sum_{a \in g^{-1}(b)} P[X = a] \\ &= \sum_{b \in g(S)} \sum_{a: g(a)=b} g(a) \cdot P[X = a] = \sum_{a \in S} g(a) \cdot P[X = a]. \end{aligned}$$

□

**Beispiele.** Sei  $X : \Omega \rightarrow S \subset \mathbb{R}$  eine reellwertige Zufallsvariable mit abzählbarem Wertebereich  $S$ .

a) Für den Erwartungswert von  $|X|$  ergibt sich

$$E[|X|] = \sum_{a \in S} |a| \cdot P[X = a].$$

Ist  $E[|X|]$  endlich, dann konvergiert  $E[X] = \sum a \cdot P[X = a]$  absolut.

b) Die **Varianz** einer reellwertigen Zufallsvariable  $X$  mit  $E[|X|] < \infty$  ist definiert als mittlere quadratische Abweichung vom Erwartungswert, d.h.,

$$\text{Var}[X] := E[(X - E[X])^2].$$

Kennen wir  $E[X]$ , dann berechnet sich die Varianz als

$$\text{Var}[X] = \sum_{a \in S} (a - E[X])^2 P[X = a] \in [0, \infty].$$

Ebenso wie der Erwartungswert hängt auch die Varianz nur von der Verteilung  $\mu_X$  ab.

c) Ist  $\Omega$  selbst abzählbar, dann können wir den Erwartungswert auch als **gewichtetes Mittel** über  $\omega \in \Omega$  darstellen. In der Tat folgt für  $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  durch Anwenden des Transformationsatzes:

$$E[X] = E[X \circ id_\Omega] = \sum_{\omega \in \Omega} X(\omega) \cdot P[\{\omega\}],$$

wobei  $id_\Omega(\omega) = \omega$  die identische Abbildung auf  $\Omega$  bezeichnet. Ist  $P$  die Gleichverteilung auf  $\Omega$ , so ist der Erwartungswert das **arithmetische Mittel**

$$E[X] = \frac{1}{|\Omega|} \sum_{\omega \in \Omega} X(\omega).$$

**Beispiel** (Sankt-Petersburg-Paradoxon). Wir betrachten ein Glücksspiel mit fairen Münzwürfen  $X_1, X_2, \dots$ , wobei sich der Gewinn in jeder Runde verdoppelt bis zum ersten Mal »Kopf« fällt. Danach ist das Spiel beendet, und der Spieler erhält den Gewinn ausbezahlt. Wie hoch wäre eine faire Teilnahmegebühr für dieses Spiel?

Wir können den Gewinn beschreiben durch die Zufallsvariable

$$G(\omega) = 2^{T(\omega)}, \quad \text{mit} \quad T(\omega) = \min\{n \in \mathbb{N} : X_n(\omega) = 0\}.$$

Hierbei beschreibt  $T$  die Wartezeit auf den ersten »Kopf«. Als Erwartungswert des Gewinns erhalten wir nach dem Transformationssatz

$$E[G] = \sum_{k=1}^{\infty} 2^k P[T = k] = \sum_{k=1}^{\infty} 2^k P[X_1 = \dots = X_{k-1} = 1, X_k = 0] = \sum_{k=1}^{\infty} 2^k 2^{-k} = \infty.$$

Das Spiel sollte also auf den ersten Blick bei beliebig hoher Teilnahmegebühr attraktiv sein – dennoch wäre wohl kaum jemand bereit, einen sehr hohen Einsatz zu zahlen.

Eine angemessenere Beschreibung – vom Blickwinkel des Spielers aus betrachtet – erhält man, wenn man eine (üblicherweise als monoton wachsend und konkav vorausgesetzte) Nutzenfunktion  $u(x)$  einführt, die den Nutzen beschreibt, den der Spieler vom Kapital  $x$  hat. Für kleine  $x$  könnte etwa  $u(x) = x$  gelten, aber für große  $x$  wäre plausibler  $u(x) < x$ . Dann ist  $c$  ein fairer Einsatz aus Sicht des Spielers, wenn  $u(c) = E[u(G)]$  gilt.

## Linearität und Monotonie des Erwartungswertes

Eine fundamentale Eigenschaft des Erwartungswerts ist, dass dieser linear von der Zufallsvariable abhängt. Dies kann häufig ausgenutzt werden, um Erwartungswerte zu berechnen, siehe dazu die Beispiele unten.

**Satz 1.7** (Linearität des Erwartungswerts). *Seien  $X : \Omega \rightarrow S_X \subseteq \mathbb{R}$  und  $Y : \Omega \rightarrow S_Y \subseteq \mathbb{R}$  diskrete reellwertige Zufallsvariablen auf  $(\Omega, \mathcal{A}, P)$ , für die  $E[|X|]$  und  $E[|Y|]$  endlich sind. Dann gilt:*

$$E[\lambda X + \mu Y] = \lambda E[X] + \mu E[Y] \quad \text{für alle } \lambda, \mu \in \mathbb{R}.$$

*Beweis.* Wir betrachten die durch  $g(x, y) = \lambda x + \mu y$  definierte Abbildung  $g: S_X \times S_Y \rightarrow \mathbb{R}$ . Nach dem Transformationssatz ist  $g(X, Y) = \lambda X + \mu Y$  eine Zufallsvariable mit Werten in  $S_X \times S_Y$  und Erwartungswert

$$\begin{aligned}
 E[\lambda X + \mu Y] &= E[g(X, Y)] = \sum_{(a,b) \in S_X \times S_Y} g(a, b) P[(X, Y) = (a, b)] & (1.3.1) \\
 &= \sum_{a \in S_X} \sum_{b \in S_Y} (\lambda a + \mu b) P[X = a, Y = b] \\
 &= \lambda \sum_{a \in S_X} a \sum_{b \in S_Y} P[X = a, Y = b] + \mu \sum_{b \in S_Y} b \sum_{a \in S_X} P[X = a, Y = b] \\
 &= \lambda \sum_{a \in S_X} a P[X = a] + \mu \sum_{b \in S_Y} b P[Y = b] \\
 &= \lambda E[X] + \mu E[Y].
 \end{aligned}$$

Hierbei haben wir benutzt, dass die Reihe in (1.3.1) absolut konvergiert, da nach einer analogen Rechnung

$$\begin{aligned}
 \sum_{a \in S_X} \sum_{b \in S_Y} |\lambda a + \mu b| P[X = a, Y = b] &\leq |\lambda| \sum_{a \in S_X} |a| P[X = a] + |\mu| \sum_{b \in S_Y} |b| P[Y = b] \\
 &= |\lambda| E[|X|] + |\mu| E[|Y|]
 \end{aligned}$$

gilt. Die rechte Seite ist nach Voraussetzung endlich. □

**Beispiel (Varianz).** Für die Varianz einer reellwertigen Zufallsvariable  $X$  mit  $E[|X|] < \infty$  gilt

$$\begin{aligned}
 \text{Var}[X] &= E[(X - E[X])^2] = E[X^2 - 2X E[X] + E[X]^2] \\
 &= E[X^2] - E[X]^2.
 \end{aligned}$$

Aus der Linearität folgt auch, dass der Erwartungswert monoton von der Zufallsvariablen abhängt:

**Korollar (Monotonie des Erwartungswerts).** *Seien die Voraussetzungen von Satz 1.7 erfüllt. Ist  $X(\omega) \leq Y(\omega)$  für alle  $\omega \in \Omega$ , dann gilt*

$$E[X] \leq E[Y].$$

*Beweis.* Nach Voraussetzung gilt  $(Y - X)(\omega) \geq 0$  für alle  $\omega \in \Omega$ , weshalb der Erwartungswert  $E[Y - X]$  nichtnegativ ist. Aufgrund der Linearität des Erwartungswerts folgt

$$0 \leq E[Y - X] = E[Y] - E[X].$$

□

Die folgenden Beispiele demonstrieren, wie die Linearität häufig ausgenutzt werden kann, um Erwartungswerte auf einfache Weise zu berechnen:

**Beispiel** (Unabhängige 0-1-Experimente, Erwartungswert der Binomialverteilung).

Seien  $A_1, A_2, \dots, A_n \in \mathcal{A}$  unabhängige Ereignisse mit Wahrscheinlichkeit  $p$ , und sei  $X_i = I_{A_i}$  die Indikatorfunktion des Ereignisses  $A_i$ . Die Zufallsvariablen  $X_i$  sind **Bernoulli-verteilt mit Parameter  $p$** , d.h. es gilt

$$X_i = \begin{cases} 1 & \text{mit Wahrscheinlichkeit } p, \\ 0 & \text{mit Wahrscheinlichkeit } 1 - p. \end{cases}$$

Damit erhalten wir

$$E[X_i] = E[I_{A_i}] = P[A_i] = p \quad \forall i = 0, 1, \dots, n.$$

Die Anzahl

$$S_n = X_1 + X_2 + \dots + X_n$$

der Ereignisse, die eintreten, ist binomialverteilt mit Parametern  $n$  und  $p$ , d.h.

$$P[S_n = k] = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}.$$

Den Erwartungswert kann man daher folgendermaßen berechnen:

$$E[S_n] = \sum_{k=0}^n k \cdot P[S_n = k] = \sum_{k=0}^n k \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} = \dots = np.$$

Einfacher benutzt man aber die Linearität des Erwartungswerts, und erhält direkt

$$E[S_n] = E \left[ \sum_{i=1}^n X_i \right] = \sum_{i=1}^n E[X_i] = np.$$

Dies gilt sogar wenn die Ereignisse  $A_1, \dots, A_n$  *nicht unabhängig* sind !

**Beispiel** (Abhängige 0-1-Experimente, Erwartungswert der hypergeometrischen Verteilung).

Wir betrachten eine Population aus  $m$  Objekten, darunter  $r$ , die eine gewisse Eigenschaft besitzen. Aus der Population wird eine Zufallsstichprobe aus  $n$  Objekten ohne Zurücklegen entnommen, wobei  $n \leq \min(r, m-r)$  gelte. Sei  $A_i$  das Ereignis, dass das  $i$ -te Objekt in der Stichprobe die Eigenschaft besitzt, und sei  $X_i = I_{A_i}$ . Dann beschreibt die hypergeometrisch verteilte Zufallsvariable

$$S_n = X_1 + \dots + X_n$$

die Anzahl der Objekte in der Stichprobe mit der Eigenschaft. Als Erwartungswert der Verteilung  $\text{Hyp}(m, r, n)$  erhalten wir daher analog zum letzten Beispiel:

$$E[S_n] = \sum_{i=1}^n E[X_i] = \sum_{i=1}^n P[A_i] = n \frac{r}{m}.$$

Auch im nächsten Beispiel wird eine ähnliche Methode benutzt, um den Erwartungswert zu berechnen:

**Beispiel** (Inversionen von Zufallspermutationen und Sortieren durch Einfügen). Seien  $P$  die Gleichverteilung auf der Menge  $\Omega = \mathcal{S}_n$  aller Bijektionen  $\omega: \{1, \dots, n\} \rightarrow \{1, \dots, n\}$ , und

$$N(\omega) = |\{(i, j) : i < j \text{ und } \omega(i) > \omega(j)\}|,$$

die Anzahl der Inversionen einer Permutation  $\omega \in \mathcal{S}_n$ . Dann gilt

$$N = \sum_{1 \leq i < j \leq n} I_{A_{i,j}}, \quad \text{wobei} \quad A_{i,j} = \{\omega \in \mathcal{S}_n : \omega(i) > \omega(j)\}$$

das Ereignis ist, dass eine Inversion von  $i$  und  $j$  auftritt. Damit erhalten wir

$$E[N] = \sum_{i < j} E[I_{A_{i,j}}] = \sum_{i < j} P[\{\omega \in \mathcal{S}_n : \omega(i) > \omega(j)\}] = \sum_{i < j} \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \binom{n}{2} = \frac{n(n-1)}{4}.$$

**ANWENDUNG:** Beim Sortieren durch Einfügen ( $\gg$ Insertion Sort $\ll$ ) werden die Werte einer Liste  $\{\omega(1), \omega(2), \dots, \omega(n)\}$  der Reihe nach an der richtigen Stelle eingefügt. Dabei wird der Wert  $\omega(i)$  für  $i < j$  beim Einfügen von  $\omega(j)$  genau dann verschoben, wenn  $\omega(j) < \omega(i)$  gilt. Ist die Anfangsanordnung eine zufällige Permutation der korrekten Anordnung, dann ist die mittlere Anzahl der Verschiebungen, die der Algorithmus vornimmt, also gleich  $n(n-1)/4$ .

## Einschluss-/Ausschlussprinzip

Auch das schon oben erwähnte Einschluss-/Ausschlussprinzip lässt sich mithilfe von Indikatorfunktionen elegant beweisen. Dazu verwenden wir die elementaren Identitäten

$$I_{A \cap B} = I_A \cdot I_B \quad \text{und} \quad I_{A^c} = 1 - I_A.$$

**Satz 1.8** (Einschluss-/Ausschlussprinzip). Für  $n \in \mathbb{N}$  und Ereignisse  $A_1, \dots, A_n \in \mathcal{A}$  gilt:

$$P[A_1 \cup A_2 \cup \dots \cup A_n] = \sum_{k=1}^n (-1)^{k-1} \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq n} P[A_{i_1} \cap A_{i_2} \cap \dots \cap A_{i_k}].$$

*Beweis.* Wir betrachten zunächst das Gegenereignis, und drücken die Wahrscheinlichkeiten als Erwartungswerte von Indikatorfunktionen aus. Unter Ausnutzung der Linearität des Erwartungswerts erhalten wir:

$$\begin{aligned}
 P[(A_1 \cup \dots \cup A_n)^C] &= P[A_1^C \cap \dots \cap A_n^C] = E[I_{A_1^C \cap \dots \cap A_n^C}] \\
 &= E\left[\prod_{i=1}^n I_{A_i^C}\right] = E\left[\prod_{i=1}^n (1 - I_{A_i})\right] \\
 &= \sum_{k=0}^n (-1)^k \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq n} E[I_{A_{i_1}} \cdots I_{A_{i_k}}] \\
 &= \sum_{k=0}^n (-1)^k \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq n} E[I_{A_{i_1} \cap \dots \cap A_{i_k}}] \\
 &= \sum_{k=0}^n (-1)^k \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq n} P[A_{i_1} \cap \dots \cap A_{i_k}].
 \end{aligned}$$

Damit folgt

$$\begin{aligned}
 P[A_1 \cup \dots \cup A_n] &= 1 - P[(A_1 \cup \dots \cup A_n)^C] \\
 &= \sum_{k=1}^n (-1)^{k-1} \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq n} P[A_{i_1} \cap A_{i_2} \cap \dots \cap A_{i_k}].
 \end{aligned}$$

□

# Kapitel 2

## Bedingte Wahrscheinlichkeiten und Unabhängigkeit

Um den Zusammenhang zwischen mehreren Ereignissen oder Zufallsvariablen zu beschreiben sind bedingte Wahrscheinlichkeiten von zentraler Bedeutung. In diesem Kapitel werden bedingte Wahrscheinlichkeiten eingeführt, und mehrstufige Modelle mithilfe bedingter Wahrscheinlichkeiten konstruiert. Anschließend werden wir den Begriff der Unabhängigkeit von Ereignissen und Zufallsvariablen systematisch einführen, und erste wichtige Aussagen unter Unabhängigkeitsannahmen herleiten.

### 2.1 Bedingte Wahrscheinlichkeiten

Sei  $(\Omega, \mathcal{A}, P)$  ein fester Wahrscheinlichkeitsraum, und seien  $A, B \in \mathcal{A}$  Ereignisse. Angenommen, wir wissen bereits, dass das Ereignis  $B$  eintritt, und wir wollen die Wahrscheinlichkeit von  $A$  unter dieser Prämisse angeben. Dann sollten wir nur noch die Fälle  $\omega \in B$  in Betracht ziehen, und für diese tritt das Ereignis ein, wenn  $\omega$  in  $A \cap B$  enthalten ist. Damit ist die folgende Definition naheliegend:

**Definition.** Sei  $A, B \in \mathcal{A}$  mit  $P[B] \neq 0$ . Dann heißt

$$P[A|B] := \frac{P[A \cap B]}{P[B]}$$

die *bedingte Wahrscheinlichkeit von  $A$  gegeben  $B$* .

Eine weitere Motivation für die Definition liefern relative Häufigkeiten: Ist  $P$  eine empirische Verteilung, dann sind  $P[A \cap B]$  und  $P[B]$  die relativen Häufigkeiten von  $A \cap B$  und  $B$ , und

$P[A|B]$  ist damit die relative Häufigkeit von  $A \cap B$  unter Elementen aus  $B$ . Die Definition ist also auch konsistent mit einer frequentistischen Interpretation der Wahrscheinlichkeit als Grenzwert von relativen Häufigkeiten.

**Bemerkung.** a) Der Fall  $P[B] \neq 0$  muss ausgeschlossen werden, da sonst sowohl Zähler als auch Nenner in dem Bruch in der Definition gleich 0 sind. Bedingte Wahrscheinlichkeiten gegeben Nullmengen sind im Allgemeinen nicht wohldefiniert.

b) Ist  $P[B] \neq 0$ , dann ist durch die Abbildung

$$P[\bullet|B]: A \mapsto P[A|B]$$

wieder eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf  $(\Omega, \mathcal{A})$  gegeben, die **bedingte Verteilung unter  $P$  gegeben  $B$** . Der Erwartungswert

$$E[X|B] = \sum_{a \in S} a \cdot P[X = a|B]$$

einer diskreten Zufallsvariable  $X: \Omega \rightarrow S$  bzgl. der bedingten Verteilung heißt **bedingte Erwartung von  $X$  gegeben  $B$** .

**Beispiel** (Gleichverteilung). Ist  $P$  die Gleichverteilung auf einer endlichen Menge  $\Omega$ , dann gilt:

$$P[A|B] = \frac{|A \cap B|/|\Omega|}{|B|/|\Omega|} = \frac{|A \cap B|}{|B|} \quad \text{für alle } A, B \subseteq \Omega.$$

## Erste Anwendungsbeispiele

Bei der mathematischen Modellierung von Anwendungsproblemen unter Verwendung bedingter Wahrscheinlichkeiten können leicht Fehler auftreten. An dieser Stelle sollte man also sehr sorgfältig argumentieren, und ggf. zur Kontrolle verschiedene Modellvarianten verwenden. Wir betrachten einige bekannte Beispiele.

**Beispiel** (Zwei-Mädchen-Problem). Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, dass in einer Familie mit zwei Kindern beide Kinder Mädchen sind, wenn mindestens eines der Kinder ein Mädchen ist? Hier können wir als Wahrscheinlichkeitsraum

$$S = \{JJ, JM, MJ, MM\}$$

ansetzen. Wir nehmen vereinfachend an, daß alle Fälle gleich wahrscheinlich sind. Dann gilt:

$$P[\text{»beide Mädchen«} \mid \text{»mindestens ein Mädchen«}] = \frac{|\{MM\}|}{|\{MM, JM, MJ\}|} = \frac{1}{3}.$$

Wir modifizieren die Fragestellung nun etwas. Angenommen, im Nachbarhaus ist heute eine neue Familie eingezogen. Alles, was wir wissen, ist, daß die Familie zwei Kinder hat. Nun sehen wir am Fenster ein Mädchen winken, und gehen davon aus, daß dies eines der beiden Kinder ist. Wie hoch ist nun die Wahrscheinlichkeit, daß beide Kinder Mädchen sind ?

Die naheliegende Antwort  $1/3$  ist in diesem Fall nicht richtig. Dadurch, dass eines der Kinder winkt, sind die Kinder für uns nicht mehr ununterscheidbar. Die Wahrscheinlichkeit, dass das zweite, nicht winkende Kind, ein Mädchen ist beträgt  $1/2$ , und wir erhalten

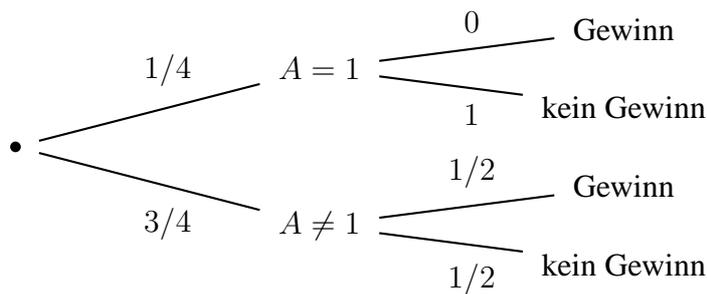
$$P[\text{»beide Mädchen«} \mid \text{»das erste ist Mädchen«}] = \frac{|\{MM\}|}{|\{MM, MJ\}|} = \frac{1}{2}.$$

Haben wir noch Zweifel an der Richtigkeit dieser Aussage, könnten wir ein präziseres Modell aufstellen. Beispielsweise könnten wir das Geschlecht des älteren und des jüngeren Kindes durch Zufallsvariablen  $X_1, X_2 : \Omega \rightarrow \{M, J\}$ , und die Auswahl des winkenden Kindes durch eine weitere Zufallsvariable  $K : \Omega \rightarrow \{1, 2\}$  beschreiben, wobei  $K = 1, 2$  bedeutet, dass das ältere bzw. jüngere Kind winkt. Nehmen wir an, dass  $(X_1, X_2, K)$  gleichverteilt auf der Menge  $\{M, J\}^2 \times \{1, 2\}$  ist, dann ergibt sich

$$P[\text{»beide Mädchen«} \mid \text{»Mädchen winkt«}] = \frac{P[X_1 = X_2 = M]}{P[X_K = M]} = \frac{2/8}{4/8} = \frac{1}{2}.$$

**Beispiel** (Ziegenproblem). In einer leicht abgewandelten Version der Spielshow “Let’s make a deal” steht hinter einer von vier Türen ein Auto, und hinter den drei anderen Türen eine Ziege. Der Kandidat wählt zunächst eine der Türen aus (Tür 1). Anschließend öffnet der Moderator eine der verbleibenden Türen (Tür 2, 3 oder 4), wobei nie die Tür mit dem Auto geöffnet wird. Nun hat der Kandidat die Möglichkeit, die Tür nochmal zu wechseln, oder bei seiner ursprünglichen Wahl zu bleiben. Was ist die günstigere Strategie um das Auto zu gewinnen ?

Sie  $A$  die Nummer Tür mit dem Auto. Bleibt der Kandidat bei seiner ursprünglichen Wahl, dann beträgt die Gewinnwahrscheinlichkeit offensichtlich  $1/4$ , da er bei zufälliger Position des Autos zu Beginn mit Wahrscheinlichkeit  $1/4$  die richtige Tür gewählt hat. Die Situation beim Wechseln können wir uns durch das folgende Baumdiagramm klarmachen:



Steht das Auto hinter Tür 1, dann gewinnt der Spieler beim Wechseln nie. Steht das Auto dagegen hinter einer anderen Tür, dann öffnet der Moderator eine weitere Tür. Damit bleiben beim Wechseln nur noch zwei Türen zur Auswahl, und der Spieler gewinnt in diesem Fall mit Wahrscheinlichkeit  $1/2$ . Insgesamt beträgt die Gewinnwahrscheinlichkeit mit Wechseln also

$$p = \frac{1}{4} \cdot 0 + \frac{3}{4} \cdot \frac{1}{2} = \frac{3}{8},$$

d.h. Wechseln ist für den Kandidaten vorteilhaft.

Formal könnten wir die Situation durch Zufallsvariablen  $A, M : \Omega \rightarrow \{1, 2, 3, 4\}$  beschreiben, die die Nummer der Tür mit dem Auto und der vom Moderator geöffneten Tür angeben. Es ist dann naheliegend anzusetzen, dass  $A$  gleichverteilt ist, während  $M$  gegeben  $A$  bedingt gleichverteilt auf  $\{2, 3, 4\} \setminus A$  ist, d.h.  $P[M = k|A = 1] = 1/3$  für  $k \neq 1$ ,  $P[M = k|A = 2] = 1/2$  für  $k = 3, 4$  und  $= 0$  sonst, usw. Prüfen Sie selbst nach, dass sich in diesem Modell

$$P[A = k|M \neq k] = 3/8 \quad \text{für } k = 2, 3, 4$$

ergibt, d.h. bei Wechseln zu einer Tür  $k \neq 1$ , die der Moderator nicht geöffnet hat, beträgt die Gewinnwahrscheinlichkeit  $3/8$ .

**Beispiel** (Münzwürfe mit partieller Information). Bei 20 fairen Münzwürfen fällt 15-mal »Zahl«. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, dass die ersten 5 Würfe »Zahl« ergeben haben? Sei  $P$  die Gleichverteilung auf

$$\Omega = \{\omega = (x_1, \dots, x_{20}) \mid x_i \in \{0, 1\}\},$$

und sei  $X_i(\omega) = x_i$  der Ausgang des  $i$ -ten Wurfs. Dann gilt:

$$\begin{aligned} P \left[ X_1 = \dots = X_5 = 1 \mid \sum_{i=1}^{20} X_i = 15 \right] &= \frac{P[X_1 = \dots = X_5 = 1 \text{ und } \sum_{i=6}^{20} X_i = 10]}{P[\sum_{i=1}^{20} X_i = 15]} \\ &= \frac{2^{-5} 2^{-15} \binom{15}{10}}{2^{-20} \binom{20}{15}} = \frac{15 \cdot 14 \cdot \dots \cdot 11}{20 \cdot 19 \cdot \dots \cdot 16} \approx \frac{1}{5}. \end{aligned}$$

Dagegen ist  $P[X_1 = \dots = X_5 = 1] = 1/32$ .

## Berechnung von Wahrscheinlichkeiten durch Fallunterscheidung

Wir zeigen nun wie man unbedingte Wahrscheinlichkeiten aus bedingten berechnet. Sei  $\Omega = \bigcup H_i$  eine disjunkte Zerlegung von  $\Omega$  in abzählbar viele Teilmengen  $H_i$ ,  $i \in I$ . Die Mengen  $H_i$  beschreiben unterschiedliche Fälle (oder auch »Hypothesen« in statistischen Anwendungen).

**Satz 2.1 (Formel von der totalen Wahrscheinlichkeit).** Für alle  $A \in \mathcal{A}$  gilt:

$$P[A] = \sum_{\substack{i \in I \\ P[H_i] \neq 0}} P[A|H_i] \cdot P[H_i] \quad (2.1.1)$$

*Beweis.* Es ist  $A = A \cap (\bigcup_{i \in I} H_i) = \bigcup_{i \in I} (A \cap H_i)$  eine disjunkte Vereinigung, also folgt aus der  $\sigma$ -Additivität und wegen  $P[A \cap H_i] \leq P[H_i]$ :

$$P[A] = \sum_{i \in I} P[A \cap H_i] = \sum_{\substack{i \in I, \\ P[H_i] \neq 0}} P[A \cap H_i] = \sum_{\substack{i \in I, \\ P[H_i] \neq 0}} P[A|H_i] \cdot P[H_i].$$

□

**Beispiel.** Urne 1 enthalte 2 rote und 3 schwarze Kugeln, Urne 2 enthalte 3 rote und 4 schwarze Kugeln. Wir legen eine Kugel  $K_1$  von Urne 1 in Urne 2 und ziehen eine Kugel  $K_2$  aus Urne 2. Mit welcher Wahrscheinlichkeit ist  $K_2$  rot?

Durch Bedingen auf die Farbe der ersten Kugel erhalten wir nach Satz 2.1:

$$\begin{aligned} P[K_2 \text{ rot}] &= P[K_2 \text{ rot} \mid K_1 \text{ rot}] \cdot P[K_1 \text{ rot}] + P[K_2 \text{ rot} \mid K_1 \text{ schwarz}] \cdot P[K_1 \text{ schwarz}] \\ &= \frac{4}{8} \cdot \frac{2}{5} + \frac{3}{8} \cdot \frac{3}{5} = \frac{17}{40}. \end{aligned}$$

Ein interessanter Effekt ist, dass bei Wechsel der zugrundeliegenden Wahrscheinlichkeitsverteilung die unbedingte Wahrscheinlichkeit eines Ereignisses  $A$  selbst dann abnehmen kann, wenn alle bedingten Wahrscheinlichkeiten in (2.1.1) zunehmen:

**Beispiel** (Simpson-Paradoxon). Die folgende (im wesentlichen auf Originaldaten basierende) Tabelle zeigt die Zahl der Bewerber und der aufgenommenen Studierenden an der Universität Berkeley in einem bestimmten Jahr:

| BEWERBUNGEN IN BERKELEY |          |                    |          |                    |  |
|-------------------------|----------|--------------------|----------|--------------------|--|
| Statistik 1:            | Männer   | angenommen ( $A$ ) | Frauen   | angenommen ( $A$ ) |  |
|                         | 2083     | 996                | 1067     | 349                |  |
| Empirische Verteilung:  | $P[A M]$ | $\approx 0,48$     | $P[A F]$ | $\approx 0,33$     |  |

GENAUERE ANALYSE DURCH UNTERTEILUNG IN 4 FACHBEREICHE

| Statistik 2: | Männer | angenommen ( $A$ ) |     | Frauen | angenommen ( $A$ ) |     |
|--------------|--------|--------------------|-----|--------|--------------------|-----|
| Bereich 1    | 825    | 511                | 62% | 108    | 89                 | 82% |
| Bereich 2    | 560    | 353                | 63% | 25     | 17                 | 68% |
| Bereich 3    | 325    | 110                | 34% | 593    | 219                | 37% |
| Bereich 4    | 373    | 22                 | 6%  | 341    | 24                 | 7%  |

Sei  $P_F[A] = P[A|F]$  die relative Häufigkeit der angenommenen Bewerber unter Frauen, und  $P_M[A] = P[A|M]$  die entsprechende Annahmquote unter Männern. Hierbei steht  $P$  für die zugrundeliegende empirische Verteilung, und  $P_F$  sowie  $P_M$  sind dementsprechend die empirischen Verteilungen in den Unterpopulationen der weiblichen und männlichen Bewerber. Die vollständige Aufgliederung nach Fachbereichen ergibt folgende Zerlegung in Hypothesen:

$$P_M[A] = \sum_{i=1}^4 P_M[A|H_i] P_M[H_i], \quad P_F[A] = \sum_{i=1}^4 P_F[A|H_i] P_F[H_i].$$

Im Beispiel ist  $P_F[A|H_i] > P_M[A|H_i]$  für *alle*  $i$ , aber *dennoch*  $P_F[A] < P_M[A]$ . Obwohl die Annahmquoten unter männlichen Bewerbern insgesamt höher sind, schneiden also die Frauen in jedem der Fachbereiche besser ab.

Die Gesamtstatistik im Beispiel vermischt verschiedene Populationen und legt deshalb eventuell eine falsche Schlussfolgerung nahe. Bei statistischen Untersuchungen ist es daher wichtig, die Population zunächst in möglichst homogene Unterpopulationen aufzuspalten.

Das Simpson-Paradox tritt auch an vielen anderen Stellen auf. Beispielsweise kann bei der Steuerprogression der Steueranteil insgesamt steigen obwohl der Steuersatz in jeder Einkommensklasse sinkt, weil Personen in höhere Einkommensklassen aufsteigen.

## Bayessche Regel

Eine direkte Konsequenz des Satzes von der totalen Wahrscheinlichkeit ist die Bayessche Regel. Wir betrachten erneut eine disjunkte Zerlegung von  $\Omega$  in Teilmengen (Hypothesen)  $H_i$ .

Wie wahrscheinlich sind die Hypothesen  $H_i$ ? Ohne zusätzliche Information ist  $P[H_i]$  die Wahrscheinlichkeit von  $H_i$ . In der Bayesschen Statistik interpretiert man  $P[H_i]$  als unsere subjektive Einschätzung (aufgrund von vorhandenem oder nicht vorhandenem Vorwissen) über die vorliegende Situation (»a priori degree of belief«).

Angenommen, wir wissen nun zusätzlich, dass ein Ereignis  $A \in \mathcal{A}$  mit  $P[A] \neq 0$  eintritt, und wir kennen die bedingte Wahrscheinlichkeit (»likelihood«)  $P[A|H_i]$  für das Eintreten von  $A$  unter der Hypothese  $H_i$  für jedes  $i \in I$  mit  $P[H_i] \neq 0$ . Wie sieht dann unsere neue Einschätzung der Wahrscheinlichkeiten der  $H_i$  (»a posteriori degree of belief«) aus?

**Korollar** (Bayessche Regel). Für  $A \in \mathcal{A}$  mit  $P[A] \neq 0$  ist

$$P[H_i|A] = \frac{P[A|H_i] \cdot P[H_i]}{\sum_{\substack{k \in I \\ P[H_k] \neq 0}} P[A|H_k] \cdot P[H_k]} \quad \text{für alle } i \in I \text{ mit } P[H_i] \neq 0,$$

d.h. es gilt die Proportionalität

$$P[H_i|A] = c \cdot P[H_i] \cdot P[A|H_i],$$

wobei  $c$  eine von  $i$  unabhängige Konstante ist.

*Beweis.* Nach Satz 2.1 erhalten wir

$$P[H_i|A] = \frac{P[A \cap H_i]}{P[A]} = \frac{P[A|H_i] \cdot P[H_i]}{\sum_{\substack{k \in I \\ P[H_k] \neq 0}} P[A|H_k] \cdot P[H_k]}.$$

□

Die Bayessche Regel besagt, dass die A-posteriori-Wahrscheinlichkeiten  $P[H_i|A]$  als Funktion von  $i$  proportional zum Produkt der A-priori-Wahrscheinlichkeiten  $P[H_i]$  und der Likelihood-Funktion  $i \mapsto P[A|H_i]$  sind. In dieser und ähnlichen Formen bildet sie das Fundament der Bayesschen Statistik.

**Beispiel** (Medizinische Tests). Von 10.000 Personen eines Alters habe einer die Krankheit  $K$ . Ein Test sei positiv (+) bei 96% der Kranken und bei 0,1% der Gesunden. Liegen keine weiteren Informationen vor (z.B. über Risikofaktoren), dann ergibt sich für die A-priori- und A-posteriori-Wahrscheinlichkeiten für die Krankheit  $K$  vor und nach einem positiven Test:

$$\begin{aligned} \text{A priori:} \quad P[K] &= \frac{1}{10000}, & P[K^C] &= \frac{9999}{10000}. \\ \text{Likelihood:} \quad P[+|K] &= 0,96, & P[+|K^C] &= 0,001. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{A posteriori:} \quad P[K|+] &= \frac{P[+|K] \cdot P[K]}{P[+|K] \cdot P[K] + P[+|K^C] \cdot P[K^C]} \\ &= \frac{0,96 \cdot 10^{-4}}{0,96 \cdot 10^{-4} + 10^{-3} \cdot 0,9999} \approx \frac{1}{11}. \end{aligned}$$

Daraus folgt insbesondere:  $P[K^C|+] \approx \frac{10}{11}$ , d.h. ohne zusätzliche Informationen (z.B. durch einen weiteren Test) muss man davon ausgehen, dass  $\frac{10}{11}$  der positiv getesteten Personen in Wirklichkeit gesund sind!

## 2.2 Mehrstufige Modelle

Wir betrachten nun ein  $n$ -stufiges Zufallsexperiment. Der Ausgang des  $k$ -ten Teilexperiments ( $k = 1, \dots, n$ ) werde durch eine Zufallsvariable  $X_k : \Omega \rightarrow S_k$  auf einem Wahrscheinlichkeitsraum  $(\Omega, \mathcal{A}, P)$  beschrieben, wobei wir wieder voraussetzen, dass der Wertebereich  $S_k$  abzählbar ist. Wir nehmen an, dass folgendes gegeben ist:

- Die Verteilung bzw. Massenfunktion von  $X_1$ :

$$P[X_1 = x_1] = p_1(x_1) \quad \text{für alle } x_1 \in S_1, \quad \text{sowie} \quad (2.2.1)$$

- die bedingten Verteilungen/Massenfunktionen von  $X_k$  gegeben  $X_1, \dots, X_{k-1}$ :

$$P[X_k = x_k \mid X_1 = x_1, \dots, X_{k-1} = x_{k-1}] = p_k(x_k \mid x_1, \dots, x_{k-1}) \quad (2.2.2)$$

für  $k = 2, \dots, n$  und alle  $x_1 \in S_1, \dots, x_k \in S_k$  mit  $P[X_1 = x_1, \dots, X_{k-1} = x_{k-1}] \neq 0$ .

Zwei wichtige Spezialfälle sind *Produktmodelle*, in denen die bedingten Massenfunktionen  $p_k(\bullet \mid x_1, \dots, x_{k-1})$  nicht von den vorherigen Werten  $x_1, \dots, x_{k-1}$  abhängen, sowie *Markovketten*, bei denen  $p_k(\bullet \mid x_1, \dots, x_{k-1})$  nur vom letzten Zustand  $x_{k-1}$  abhängt.

### Das kanonische Modell

Zufallsvariablen  $X_1, \dots, X_n$ , die (2.2.1) und (2.2.2) erfüllen, kann man zu gegebenen Massenfunktionen auf unterschiedlichen Wahrscheinlichkeitsräumen realisieren. Im „kanonischen Modell“ realisiert man die Zufallsvariablen als Koordinatenabbildungen

$$X_k(\omega) = \omega_k, \quad k = 1, \dots, n,$$

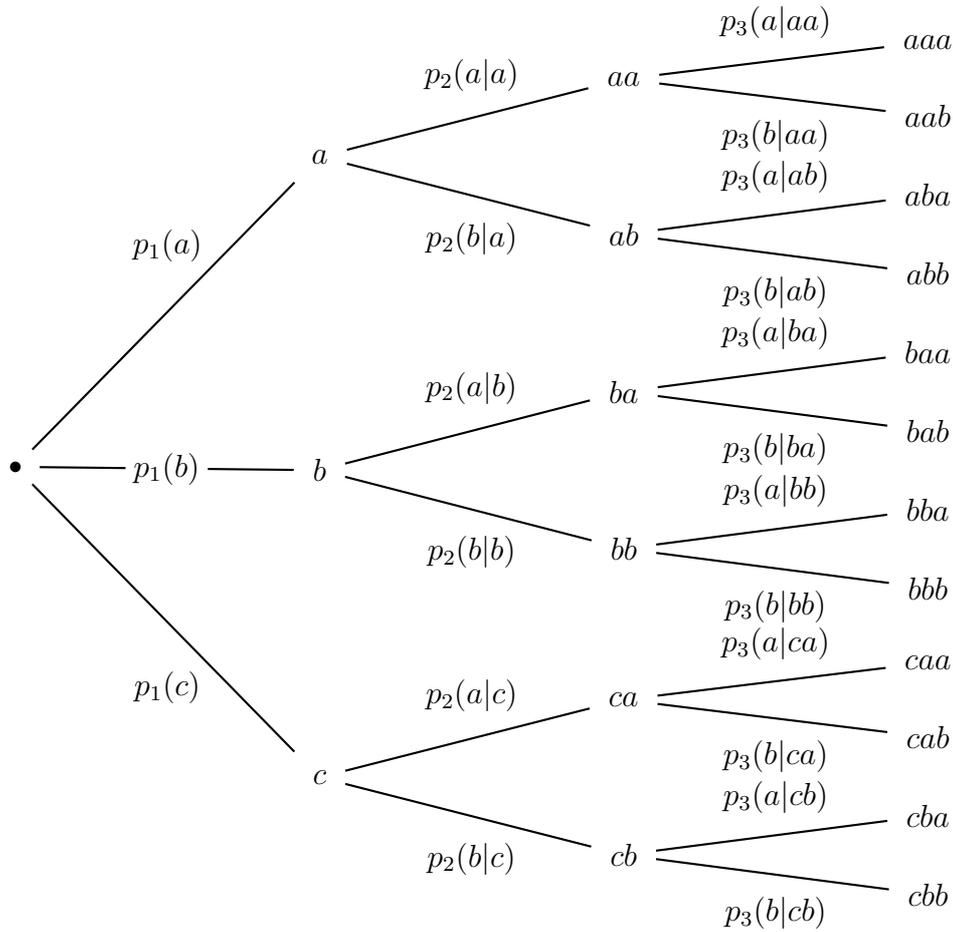


Abbildung 2.1: Dreistufiges Modell mit  $S_1 = \{a, b, c\}$  und  $S_2 = S_3 = \{a, b\}$ .

auf dem mit der  $\sigma$ -Algebra  $\mathcal{A} = \mathcal{P}(\Omega)$  versehenen Produktraum

$$\Omega = S_1 \times \dots \times S_n = \{(\omega_1, \dots, \omega_n) \mid \omega_i \in S_i\}.$$

**Satz 2.2** (Kanonisches Mehrstufenmodell). *Seien  $p_1$  und  $p_k(\bullet \mid x_1, \dots, x_{k-1})$  für jedes  $k = 2, \dots, n$  und  $x_1 \in S_1, \dots, x_{k-1} \in S_{k-1}$  Massenfunktionen von Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf  $S_k$ . Dann existiert genau eine Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P$  auf dem Produktraum  $(\Omega, \mathcal{A})$  mit (2.2.1) und (2.2.2). Diese ist bestimmt durch die Massenfunktion*

$$p(x_1, \dots, x_n) = p_1(x_1) p_2(x_2 \mid x_1) p_3(x_3 \mid x_1, x_2) \cdots p_n(x_n \mid x_1, \dots, x_{n-1}).$$

*Beweis.* EINDEUTIGKEIT: Wir zeigen durch Induktion, dass für eine Verteilung  $P$  mit (2.2.1) und (2.2.2) und  $k = 1, \dots, n$  gilt:

$$P[X_1 = x_1, \dots, X_k = x_k] = p_1(x_1) \cdot p_2(x_2 \mid x_1) \cdots p_k(x_k \mid x_1, \dots, x_{k-1}). \quad (2.2.3)$$

Nach (2.2.1) ist dies für  $k = 1$  der Fall. Zudem folgt aus (2.2.3) für  $k - 1$  nach (2.2.2):

$$\begin{aligned} P[X_1 = x_1, \dots, X_k = x_k] &= P[X_1 = x_1, \dots, X_{k-1} = x_{k-1}] \\ &\quad \cdot P[X_1 = x_1, \dots, X_k = x_k \mid X_1 = x_1, \dots, X_{k-1} = x_{k-1}] \\ &= p_1(x_1) \cdot p_2(x_2 \mid x_1) \cdots p_{k-1}(x_{k-1} \mid x_1, \dots, x_{k-2}) \\ &\quad \cdot p_k(x_k \mid x_1, \dots, x_{k-1}), \end{aligned}$$

also die Behauptung (2.2.3) für  $k$ , falls  $P[X_1 = x_1, \dots, X_{k-1} = x_{k-1}] \neq 0$ . Andernfalls verschwinden beide Seiten in (2.2.3) und die Behauptung ist trivialerweise erfüllt. Für  $k = n$  erhalten wir die Massenfunktion von  $P$ :

$$P[X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n] = p_1(x_1) \cdots p_n(x_n \mid x_1, \dots, x_{n-1}) = p(x_1, \dots, x_n).$$

EXISTENZ: Die Funktion  $p$  ist Massenfunktion einer Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P$  auf  $\Omega$ , denn die Gewichte  $p(x_1, \dots, x_n)$  sind nach Voraussetzung nichtnegativ mit

$$\begin{aligned} \sum_{x_1 \in S_1} \cdots \sum_{x_n \in S_n} p(x_1, \dots, x_n) &= \sum_{x_1 \in S_1} p_1(x_1) \sum_{x_2 \in S_2} p_2(x_2 \mid x_1) \cdots \underbrace{\sum_{x_n \in S_n} p_n(x_n \mid x_1, \dots, x_{n-1})}_{=1} \\ &= 1. \end{aligned}$$

Hierbei haben wir benutzt, dass die Funktionen  $p_k(\bullet \mid x_1, \dots, x_{k-1})$  Massenfunktionen von Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf  $S_k$  sind. Für die Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P$  auf  $\Omega$  gilt

$$\begin{aligned} P[X_1 = x_1, \dots, X_k = x_k] &= \sum_{x_{k+1} \in S_{k+1}} \cdots \sum_{x_n \in S_n} p(x_1, \dots, x_n) \\ &= p_1(x_1) p_2(x_2 \mid x_1) \cdots p_k(x_k \mid x_1, \dots, x_{k-1}) \end{aligned}$$

für  $k = 1, \dots, n$ . Hieraus folgt, dass  $P$  die Bedingungen (2.2.1) und (2.2.2) erfüllt.  $\square$

**Beispiel (Skat).** Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, dass beim Skat jeder Spieler genau einen der vier Buben erhält? Wir beschreiben die Anzahl der Buben der drei Spieler durch die Zufallsvariablen  $X_i(\omega) = \omega_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ , auf dem Produktraum

$$\Omega = \{(\omega_1, \omega_2, \omega_3) : \omega_i \in \{0, 1, 2, 3, 4\}\}.$$

Da es insgesamt 32 Karten gibt, von denen jeder Spieler 10 erhält, sind die bedingten Verteilungen der Zufallvariablen  $X_1, X_2$  und  $X_3$  gegeben durch die hypergeometrischen Verteilungen

$$p_1(x_1) = \binom{4}{x_1} \binom{28}{10-x_1} / \binom{32}{10},$$

$$p_2(x_2 | x_1) = \binom{4-x_1}{x_2} \binom{18+x_1}{10-x_2} / \binom{22}{10} \text{ falls } x_1 + x_2 \leq 4, \text{ 0 sonst, sowie}$$

$$p_3(x_3 | x_1, x_2) = \binom{4-x_1-x_2}{x_3} \binom{18+x_1+x_2}{10-x_3} / \binom{12}{10} \text{ falls } 2 \leq x_1 + x_2 + x_3 \leq 4, \text{ 0 sonst.}$$

Damit erhalten wir für die gesuchte Wahrscheinlichkeit

$$p(1, 1, 1) = p_1(1) p_2(1 | 1) p_3(1 | 1, 1) \approx 5,56\%.$$

## Produktmodelle

Hängt der Ausgang des  $i$ -ten Telexperiments nicht von  $x_1, \dots, x_{i-1}$  ab, dann gilt

$$p_i(x_i | x_1, \dots, x_{i-1}) = p_i(x_i)$$

mit einer von  $x_1, \dots, x_{i-1}$  unabhängigen Massenfunktion  $p_i$  einer Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P_i$  auf  $S_i$ . Sind alle Telexperimente voneinander unabhängig, dann hat die Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P$  eines kanonischen  $n$ -stufigen Modells die Massenfunktion

$$p(x_1, \dots, x_n) = \prod_{i=1}^n p_i(x_i), \quad x \in S_1 \times \dots \times S_n. \quad (2.2.4)$$

**Definition.** Seien  $P_i, i = 1, \dots, n$ , Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf abzählbaren Mengen  $S_i$  mit Massenfunktionen  $p_i$ . Die durch die Massenfunktion (2.2.4) bestimmte Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P = P_1 \otimes \dots \otimes P_n$  auf  $\Omega = S_1 \times \dots \times S_n$  heißt **Produkt** von  $P_1, \dots, P_n$ .

**Beispiel** ( $n$ -dimensionale Bernoulli-Verteilung). Wir betrachten  $n$  unabhängige 0-1-Experimente mit Erfolgswahrscheinlichkeit  $p$ , und setzen entsprechend

$$S_i = \{0, 1\}, \quad p_i(1) = p, \quad p_i(0) = 1 - p \quad \text{für } i = 1, \dots, n.$$

Sei  $k = \sum_{i=1}^n x_i$  die Anzahl der Einsen in einem  $n$ -Tupel  $x \in \Omega = \{0, 1\}^n$ . Dann hat die Verteilung im Produktmodell die Massenfunktion

$$p(x_1, \dots, x_n) = \prod_{i=1}^n p_i(x_i) = p^k (1-p)^{n-k},$$

und wird als **n-dimensionale Bernoulli-Verteilung** bezeichnet.

**Beispiel** (Produkt von Gleichverteilungen). Sind die Mengen  $S_i, i = 1, \dots, n$ , endlich, und ist  $P_i$  die Gleichverteilung auf  $S_i$ , dann ist  $P_1 \otimes \dots \otimes P_n$  die Gleichverteilung auf dem Produktraum  $S_1 \times \dots \times S_n$ .

Die Multiplikativität gilt in Produktmodellen nicht nur für die Massenfunktionen, sondern allgemeiner für die Wahrscheinlichkeiten, dass in den Teilexperimenten bestimmte Ereignisse  $A_1, \dots, A_n$  eintreten:

**Satz 2.3.** *Bezüglich des Produkts  $P = P_1 \otimes \dots \otimes P_n$  gilt für beliebige Ereignisse  $A_i \subseteq S_i, i = 1, \dots, n$ :*

$$\begin{aligned} P[X_1 \in A_1, \dots, X_n \in A_n] &= \prod_{i=1}^n P[X_i \in A_i] & (2.2.5) \\ &\parallel & \\ &\parallel & \\ P[A_1 \times \dots \times A_n] &= \prod_{i=1}^n P_i[A_i] \end{aligned}$$

*Beweis.* Wegen  $(X_1, \dots, X_n)(\omega) = (\omega_1, \dots, \omega_n) = \omega$  ist  $(X_1, \dots, X_n)$  die identische Abbildung auf dem Produktraum, und es gilt

$$\begin{aligned} P[X_1 \in A_1, \dots, X_n \in A_n] &= P[(X_1, \dots, X_n) \in A_1 \times \dots \times A_n] = P[A_1 \times \dots \times A_n] \\ &= \sum_{x \in A_1 \times \dots \times A_n} p(x) = \sum_{x_1 \in A_1} \dots \sum_{x_n \in A_n} \prod_{i=1}^n p_i(x_i) \\ &= \prod_{i=1}^n \sum_{x_i \in A_i} p_i(x_i) = \prod_{i=1}^n P_i[A_i]. \end{aligned}$$

Insbesondere folgt

$$P[X_i \in A_i] = P[X_1 \in S_1, \dots, X_{i-1} \in S_{i-1}, X_i \in A_i, X_{i+1} \in S_{i+1}, \dots, X_n \in S_n] = P_i[A_i],$$

für jedes  $i \in \{1, \dots, n\}$ , und damit die Behauptung.  $\square$

**Bemerkung** (Unabhängigkeit). Satz 2.3 besagt, dass die Koordinatenabbildungen  $X_i(\omega) = \omega_i$  im Produktmodell **unabhängige Zufallsvariablen** sind, siehe Abschnitt 2.4.

## Markovketten

Zur Modellierung einer zufälligen zeitlichen Entwicklung mit abzählbarem Zustandsraum  $S$  betrachten wir den Stichprobenraum

$$\Omega = S^{n+1} = \{(x_0, x_1, \dots, x_n) : x_i \in S\}.$$

Oft ist es naheliegend anzunehmen, dass die Weiterentwicklung des Systems nur vom gegenwärtigen Zustand, aber nicht vom vorherigen Verlauf abhängt (»kein Gedächtnis«), d.h. es ist

$$p_k(x_k \mid x_0, \dots, x_{k-1}) = p_k(x_{k-1}, x_k), \quad (2.2.6)$$

wobei das »Bewegungsgesetz«  $p_k : S \times S \rightarrow [0, 1]$  folgende Bedingungen erfüllt:

- (i)  $p_k(x, y) \geq 0$  für alle  $x, y \in S$ ,
- (ii)  $\sum_{y \in S} p_k(x, y) = 1$  für alle  $x \in S$ .

Die Bedingungen (i) und (ii) besagen, dass  $p_k(x, \bullet)$  für jedes  $x \in S$  und  $k \in \{1, \dots, n\}$  die Massenfunktion einer Wahrscheinlichkeitsverteilung auf  $S$  ist. Diese Wahrscheinlichkeitsverteilung beschreibt die **Übergangswahrscheinlichkeiten** von einem Zustand  $x$  zum nächsten Zustand im  $k$ -ten Schritt. Die Übergangswahrscheinlichkeiten  $p_k(x, y)$ ,  $x, y \in S$ , kann man in einer Matrix  $p_k \in \mathbb{R}^{S \times S}$  zusammenfassen.

**Definition.** Eine Matrix  $p_k(x, y)$  ( $x, y \in S$ ) mit (i) und (ii) heißt **stochastische Matrix** auf  $S$ .

Als Massenfunktion des mehrstufigen Modells ergibt sich aus Gleichung (2.2.6):

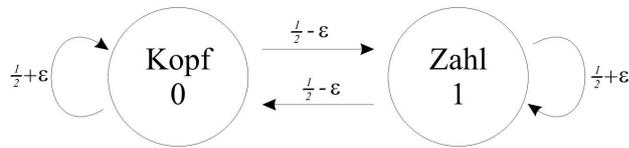
$$p(x_0, x_1, \dots, x_n) = p_0(x_0) p_1(x_0, x_1) p_2(x_1, x_2) \cdots p_n(x_{n-1}, x_n) \quad \text{für } x_0, \dots, x_n \in S,$$

wobei  $p_0$  die Massenfunktion der Verteilung von  $X_0$ , also der **Startverteilung** der zufälligen Entwicklung ist. Eine Folge  $X_0, X_1, X_2, \dots, X_n$  von Zufallsvariablen, deren gemeinsame Verteilung durch das beschriebene mehrstufige Modell gegeben ist, nennt man eine **Markovkette** mit Übergangsmatrizen  $p_k$ ,  $k = 1, \dots, n$ . Den Fall, in dem der Übergangsmechanismus  $p_k(x, y) = p(x, y)$  unabhängig von  $k$  ist, bezeichnet man als **zeitlich homogen**.

In Kapitel 3 werden wir Markovketten systematischer untersuchen. An dieser Stelle betrachten wir noch einige grundlegende Beispiele von Markovketten, und berechnen die Übergangswahrscheinlichkeiten für mehrere Schritte.

**Beispiele.** a) **PRODUKTMODELL:** Produktmodelle sind spezielle Markovketten mit Übergangswahrscheinlichkeiten  $p_k(x, y) = p_k(y)$ , die nicht von  $x$  abhängen.

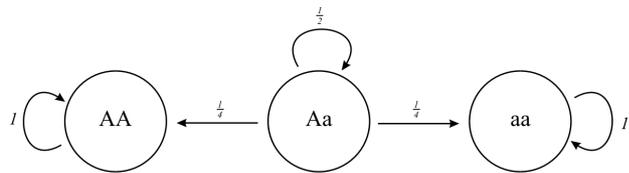
b) **ABHÄNGIGE MÜNZWÜRFE:** Ein einfaches Modell für abhängige Münzwürfe ist eine Markovkette mit Zustandsraum  $S = \{0, 1\}$  und den folgenden Übergangswahrscheinlichkeiten:



Hierbei ist  $\varepsilon \in \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$  ein Parameter, der die Abhängigkeit des nächsten Münzwurfs vom Ausgang des vorherigen Wurfs bestimmt. Die Übergangsmatrix ist

$$p = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \varepsilon & \frac{1}{2} - \varepsilon \\ \frac{1}{2} - \varepsilon & \frac{1}{2} + \varepsilon \end{pmatrix}.$$

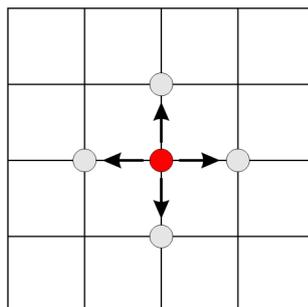
- c) SELBSTBEFRUCHTUNG VON PFLANZEN: Die Selbstbefruchtung ist ein klassisches Verfahren zur Züchtung von Pflanzen vom Genotyp AA bzw. aa, wobei A und a zwei mögliche Allele des Pflanzen-Gens sind. Die Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen den möglichen Genotypen AA, Aa und aa sind durch



gegeben, und die Übergangsmatrix einer entsprechenden Markovkette ist

$$p = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

- d) RANDOM WALK AUF  $\mathbb{Z}^d$ ,  $d \in \mathbb{N}$ : Der klassische Random Walk (Irrfahrt) auf  $S = \mathbb{Z}^d$  ist die Markovkette, die sich in jedem Schritt zu einem zufällig (gleichverteilt) ausgewählten Nachbarpunkt des gegenwärtigen Zustands weiterbewegt:

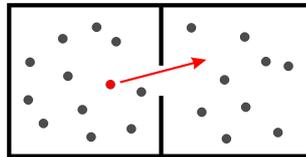


Da in  $d$  Dimensionen jeder Gitterpunkt  $2d$  Nachbarpunkte hat, sind die Übergangswahrscheinlichkeiten durch

$$p(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{2d} & \text{falls } |x - y| = 1, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

gegeben. In Dimension  $d = 1$  ist die Übergangsmatrix eine unendliche (mit  $x \in \mathbb{Z}$  indizierte) Tridiagonalmatrix, die neben der Diagonale die Einträge  $1/2$ , und auf der Diagonalen die Einträge  $0$  hat.

- e) URNENMODELL VON P. UND T. EHRENFEST: Das Ehrenfestsche Urnenmodell ist ein einfaches Modell, das den Austausch von Gasmolekülen zwischen zwei Behältern beschreibt, ohne die räumliche Struktur zu berücksichtigen. Im Modell ist eine feste Anzahl  $n$  von Kugeln (Molekülen) auf zwei Urnen (Behälter) verteilt. Typischerweise ist  $n$  sehr groß, z.B.  $n = 10^{23}$ . Zu jedem Zeitpunkt  $t \in \mathbb{N}$  wechselt eine zufällig ausgewählte Kugel die Urne.



Wir können diesen Vorgang auf zwei ganz verschiedene Arten durch Markovketten beschreiben.

MAKROSKOPISCHE BESCHREIBUNG: Wir betrachten nur die Anzahl der Kugeln in der ersten Urne. Der Zustandsraum ist dann

$$S = \{0, 1, 2, \dots, n\},$$

und die Übergangswahrscheinlichkeiten sind durch

$$p(x, y) = \begin{cases} \frac{x}{n} & \text{falls } y = x - 1, \\ \frac{n-x}{n} & \text{falls } y = x + 1, \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases}$$

gegeben, da in jedem Schritt mit Wahrscheinlichkeit  $x/n$  eine Kugel aus der ersten Urne gezogen wird, wenn sich  $x$  Kugeln dort befinden.

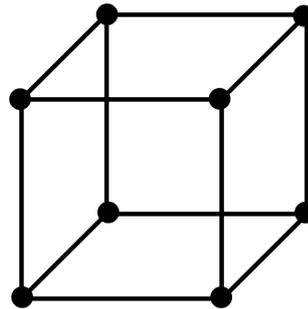
MIKROSKOPISCHE BESCHREIBUNG: Ein detaillierteres Modell ergibt sich, wenn wir für jede einzelne Kugel notieren, ob sich diese in ersten Urne befindet. Der Zustandsraum ist dann

$$S = \{0, 1\}^n = \{(\sigma_1, \dots, \sigma_n) : \sigma_i \in \{0, 1\} \forall i\},$$

wobei  $\sigma_i = 1$  dafür steht, dass sich die  $i$ -te Kugel in der ersten Urne befindet. Man beachte, dass dieser Konfigurationsraum enorm viele Elemente enthält (z.B.  $2^{10^{23}}$ ). Die Übergangswahrscheinlichkeiten sind nun durch

$$p(\sigma, \tilde{\sigma}) = \begin{cases} \frac{1}{n} & \text{falls } \sum_{i=1}^n |\sigma_i - \tilde{\sigma}_i| = 1, \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases}$$

gegeben. Die resultierende Markov-Kette ist ein Random Walk auf dem (in der Regel sehr hochdimensionalen) diskreten Hyperwürfel  $\{0, 1\}^n$ , d.h. sie springt in jedem Schritt von einer Ecke des Hyperwürfels zu einer zufällig ausgewählten benachbarten Ecke.



## Berechnung von Mehr-Schritt-Übergangswahrscheinlichkeiten

Wir berechnen nun die Übergangswahrscheinlichkeiten einer Markovkette bei mehreren Schritten. Es stellt sich heraus, dass sich diese durch Matrizenmultiplikation der Übergangsmatrizen ergeben:

**Satz 2.4** (Markov-Eigenschaft und Übergangswahrscheinlichkeiten). *Für alle  $0 \leq k < l \leq n$  und  $x_0, \dots, x_l \in S$  mit  $P[X_0 = x_0, \dots, X_k = x_k] \neq 0$  gilt*

$$\begin{aligned} P[X_l = x_l \mid X_0 = x_0, \dots, X_k = x_k] &= P[X_l = x_l \mid X_k = x_k] \\ &= (p_{k+1} p_{k+2} \cdots p_l)(x_k, x_l), \end{aligned}$$

wobei

$$(pq)(x, y) := \sum_{z \in S} p(x, z) q(z, y)$$

das Produkt der Matrizen  $p$  und  $q$  an der Stelle  $(x, y)$  bezeichnet.

**Bemerkung.** a) MARKOV-EIGENSCHAFT: Der Satz zeigt, dass die Weiterentwicklung einer Markovkette auch für mehrere Schritte jeweils nur vom gegenwärtigen Zustand  $x_k$  abhängt, und nicht vom vorherigen Verlauf  $x_0, x_1, \dots, x_{k-1}$ .

b)  $n$ -SCHRITT-ÜBERGANGSWAHRSCHEINLICHKEITEN: Die Übergangswahrscheinlichkeiten nach  $n$  Schritten sind nach dem Satz gegeben durch

$$P[X_n = y \mid X_0 = x] = (p_1 p_2 \cdots p_n)(x, y).$$

Im zeitlich homogenen Fall (d.h.  $p_i \equiv p$  unabhängig von  $i$ ) ist die  $n$ -Schritt-Übergangswahrscheinlichkeit von  $x$  nach  $y$  gleich  $p^n(x, y)$ .

*Beweis.* Für  $x_0, \dots, x_l$  wie im Satz vorausgesetzt gilt

$$\begin{aligned} P[X_l = x_l \mid X_0 = x_0, \dots, X_k = x_k] &= \frac{P[X_0 = x_0, \dots, X_k = x_k, X_l = x_l]}{P[X_0 = x_0, \dots, X_k = x_k]} \\ &= \frac{\sum_{x_{k+1}, \dots, x_{l-1}} p_0(x_0) p_1(x_0, x_1) \cdots p_l(x_{l-1}, x_l)}{p_0(x_0) p_1(x_0, x_1) \cdots p_k(x_{k-1}, x_k)} \\ &= \sum_{x_{k+1}} \cdots \sum_{x_{l-1}} p_{k+1}(x_k, x_{k+1}) p_{k+2}(x_{k+1}, x_{k+2}) \cdots p_l(x_{l-1}, x_l) \\ &= (p_{k+1} p_{k+2} \cdots p_l)(x_k, x_l). \end{aligned}$$

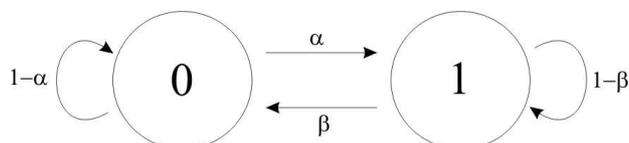
Entsprechend erhalten wir

$$\begin{aligned} P[X_l = x_l \mid X_k = x_k] &= \frac{P[X_k = x_k, X_l = x_l]}{P[X_k = x_k]} \\ &= \frac{\sum_{x_1, \dots, x_{k-1}} \sum_{x_{k+1}, \dots, x_{l-1}} p_0(x_0) p_1(x_0, x_1) \cdots p_l(x_{l-1}, x_l)}{\sum_{x_1, \dots, x_{k-1}} p_0(x_0) p_1(x_0, x_1) \cdots p_k(x_{k-1}, x_k)} \\ &= (p_{k+1} p_{k+2} \cdots p_l)(x_k, x_l). \end{aligned}$$

□

Wir untersuchen abschließend ein einfaches Beispiel, das wir schon jetzt weitgehend vollständig analysieren können:

**Beispiel** (Explizite Berechnung für Zustandsraum mit zwei Elementen). Wir betrachten eine allgemeine zeithomogene Markovkette mit Zustandsraum  $S = \{0, 1\}$ . Die Übergangswahrscheinlichkeiten sind durch



gegeben, wobei wir annehmen, dass  $0 < \alpha, \beta \leq 1$  gilt. Für  $n \in \mathbb{N}$  erhalten wir durch Bedingen auf den Wert zur Zeit  $n - 1$ :

$$\begin{aligned} p^n(0, 0) &= p^{n-1}(0, 0) \cdot p(0, 0) + p^{n-1}(0, 1) \cdot p(1, 0) \\ &= p^{n-1}(0, 0) \cdot (1 - \alpha) + (1 - p^{n-1}(0, 0)) \cdot \beta \\ &= (1 - \alpha - \beta) \cdot p^{n-1}(0, 0) + \beta. \end{aligned}$$

Daraus folgt mit Induktion

$$\begin{aligned} p^n(0, 0) &= \frac{\beta}{\alpha + \beta} + \frac{\alpha}{\alpha + \beta} (1 - \alpha - \beta)^n, \quad \text{und} \\ p^n(0, 1) &= 1 - p^n(0, 0) = \frac{\alpha}{\alpha + \beta} - \frac{\alpha}{\alpha + \beta} (1 - \alpha - \beta)^n. \end{aligned}$$

Analoge Formeln erhält man für  $p^n(1, 0)$  und  $p^n(1, 1)$  durch Vertauschen von  $\alpha$  und  $\beta$ . Für die  $n$ -Schritt-Übergangsmatrix ergibt sich also

$$p^n = \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\beta}{\alpha + \beta} & \frac{\alpha}{\alpha + \beta} \\ \frac{\beta}{\alpha + \beta} & \frac{\alpha}{\alpha + \beta} \end{pmatrix}}_{\text{Gleiche Zeilen}} + \underbrace{(1 - \alpha - \beta)^n \begin{pmatrix} \frac{\alpha}{\alpha + \beta} & \frac{-\alpha}{\alpha + \beta} \\ \frac{-\beta}{\alpha + \beta} & \frac{\beta}{\alpha + \beta} \end{pmatrix}}_{\rightarrow 0 \text{ exponentiell schnell, falls } \alpha < 1 \text{ oder } \beta < 1}.$$

Insbesondere gilt  $p^n(0, \cdot) \approx p^n(1, \cdot)$  für große  $n \in \mathbb{N}$ . Die Kette »vergisst« also ihren Startwert  $X_0$  exponentiell schnell (»Exponentieller Gedächtnisverlust«), und die Verteilung von  $X_n$  nähert sich für  $n \rightarrow \infty$  rasch der Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\mu$  mit Gewichten  $\mu(0) = \frac{\beta}{\alpha + \beta}$  und  $\mu(1) = \frac{\alpha}{\alpha + \beta}$  an (»Konvergenz ins Gleichgewicht«) !.

## 2.3 Unabhängige Ereignisse

Sei  $(\Omega, \mathcal{A}, P)$  ein Wahrscheinlichkeitsraum. Hängen zwei Ereignisse  $A, B \in \mathcal{A}$  nicht voneinander ab, dann sollte gelten:

$$\begin{aligned} P[A|B] &= P[A] && \text{falls } P[B] \neq 0, && \text{sowie} \\ P[B|A] &= P[B] && \text{falls } P[A] \neq 0. \end{aligned}$$

Beide Aussagen sind äquivalent zu der Bedingung

$$P[A \cap B] = P[A] \cdot P[B], \quad (2.3.1)$$

die im Fall  $P[A] = 0$  oder  $P[B] = 0$  automatisch erfüllt ist. Allgemeiner definieren wir für beliebige (endliche, abzählbare oder überabzählbare) Kollektionen von Ereignissen:

**Definition.** Eine Kollektion  $A_i, i \in I$ , von Ereignissen aus  $\mathcal{A}$  heißt **unabhängig** (bzgl.  $P$ ), falls

$$P[A_{i_1} \cap A_{i_2} \cap \dots \cap A_{i_n}] = \prod_{k=1}^n P[A_{i_k}]$$

für alle  $n \in \mathbb{N}$  und alle paarweise verschiedenen  $i_1, \dots, i_n \in I$  gilt.

**Beispiele.** a) Falls  $P[A] \in \{0, 1\}$  gilt, dann ist  $A$  unabhängig von  $B$  für alle  $B \in \mathcal{A}$ . Deterministische Ereignisse sind also von allen anderen Ereignissen unabhängig.

b) Wir betrachten das kanonische Modell für zwei faire Münzwürfe, d.h.  $P$  ist die Gleichverteilung auf  $\Omega = \{0, 1\}^2$ . Die drei Ereignisse

$$\begin{aligned} A_1 &= \{(1, 0), (1, 1)\} \quad \text{»erster Wurf Zahl«,} \\ A_2 &= \{(0, 1), (1, 1)\} \quad \text{»zweiter Wurf Zahl«,} \\ A_3 &= \{(0, 0), (1, 1)\} \quad \text{»beide Würfe gleich«,} \end{aligned}$$

sind **paarweise unabhängig**, denn es gilt:

$$P[A_i \cap A_j] = \frac{1}{4} = P[A_i] \cdot P[A_j] \quad \text{für alle } i \neq j.$$

Trotzdem ist die Kollektion  $A_1, A_2, A_3$  aller drei Ereignisse **nicht unabhängig**, denn

$$P[A_1 \cap A_2 \cap A_3] = \frac{1}{4} \neq \frac{1}{8} = P[A_1] \cdot P[A_2] \cdot P[A_3].$$

### Stabilität von Unabhängigkeit unter Komplementbildung

Sind  $A$  und  $B$  unabhängige Ereignisse, so auch  $A$  und  $B^C$ , denn es gilt

$$P[A \cap B^C] = P[A] - P[A \cap B] = P[A] \cdot (1 - P[B]) = P[A] \cdot P[B^C].$$

Allgemeiner folgt:

**Lemma 2.5.** Sind die Ereignisse  $A_1, \dots, A_n \in \mathcal{A}$  unabhängig, und gilt  $B_j = A_j$  oder  $B_j = A_j^C$  für alle  $j = 1, \dots, n$ , dann sind auch die Ereignisse  $B_1, \dots, B_n$  unabhängig.

*Beweis.* Da wir zum Nachweis der Unabhängigkeit beliebige Unterkollektionen von  $\{B_1, \dots, B_n\}$  betrachten müssen, ist zu zeigen, dass

$$P[C_1 \cap \dots \cap C_n] = P[C_1] \cdot \dots \cdot P[C_n]$$

gilt, falls die Ereignisse  $C_i$  jeweils gleich  $A_i, A_i^C$  oder  $\Omega$  sind. Sei ohne Beschränkung der Allgemeinheit  $C_i = A_i$  für  $i \leq k, C_i = A_i^C$  für  $k < i \leq l$ , und  $C_i = \Omega$  für  $k > l$  mit  $0 \leq k \leq l \leq n$ .

Dann folgt unter Verwendung der Linearität des Erwartungswerts und der Unabhängigkeit von  $A_1, \dots, A_n$ :

$$\begin{aligned}
 P[C_1 \cap \dots \cap C_n] &= P[A_1 \cap \dots \cap A_k \cap A_{k+1}^C \cap \dots \cap A_l^C] \\
 &= E[I_{A_1} \cdots I_{A_k} \cdot (1 - I_{A_{k+1}}) \cdots (1 - I_{A_l})] \\
 &= E[I_{A_1} \cdots I_{A_k} \cdot \sum_{J \subseteq \{k+1, \dots, l\}} (-1)^{|J|} \prod_{j \in J} I_{A_j}] \\
 &= \sum_{J \subseteq \{k+1, \dots, l\}} (-1)^{|J|} P[A_1 \cap \dots \cap A_k \cap \bigcap_{j \in J} A_j] \\
 &= \sum_{J \subseteq \{k+1, \dots, l\}} (-1)^{|J|} P[A_1] \cdots P[A_k] \cdot \prod_{j \in J} P[A_j] \\
 &= P[A_1] \cdots P[A_k] \cdot (1 - P[A_{k+1}]) \cdots (1 - P[A_l]) \\
 &= P[C_1] \cdots P[C_n].
 \end{aligned}$$

□

## Verteilungen für unabhängige Ereignisse

Seien  $A_1, A_2, \dots \in \mathcal{A}$  unabhängige Ereignisse (bzgl.  $P$ ) mit  $P[A_i] = p \in [0, 1]$ . Diese beschreiben zum Beispiel unabhängige Wiederholungen eines Zufallsexperiments. Die Existenz von unendlich vielen unabhängigen Ereignissen auf einem geeigneten Wahrscheinlichkeitsraum setzen wir hier voraus – ein Beweis wird erst in der Vorlesung »Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie« gegeben.

### Geometrische Verteilung

Die »Wartezeit« auf das erste Eintreten eines der Ereignisse ist durch

$$T(\omega) = \inf\{n \in \mathbb{N} : \omega \in A_n\}$$

gegeben, wobei wir hier  $\min \emptyset := \infty$  setzen. Mit Lemma 2.5 können wir die Verteilung der Zufallsvariable  $T : \Omega \rightarrow \mathbb{N} \cup \{\infty\}$  berechnen. Für  $n \in \mathbb{N}$  erhalten wir

$$\begin{aligned}
 P[T = n] &= P[A_1^C \cap A_2^C \cap \dots \cap A_{n-1}^C \cap A_n] \\
 &= P[A_n] \cdot \prod_{i=1}^{n-1} P[A_i^C] \\
 &= p \cdot (1 - p)^{n-1}.
 \end{aligned}$$

**Definition.** Sei  $p \in [0, 1]$ . Die Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\mu$  auf  $\mathbb{N} \cup \{\infty\}$  mit Massenfunktion

$$\mu(n) = p \cdot (1 - p)^{n-1} \quad \text{für } n \in \mathbb{N}$$

heißt **geometrische Verteilung zum Parameter  $p$** , und wird kurz mit  $\text{Geom}(p)$  bezeichnet.

**Bemerkung.** a) Für  $n \in \mathbb{N}$  gilt

$$P[T > n] = P[A_1^C \cap \dots \cap A_n^C] = (1 - p)^n.$$

Ist  $p \neq 0$ , dann folgt insbesondere  $P[T = \infty] = 0$ , d.h. die geometrische Verteilung ist eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf den natürlichen Zahlen. Für  $p = 0$  gilt dagegen  $P[T = \infty] = 1$ .

b) Wegen  $T = \sum_{n=0}^{\infty} I_{\{T > n\}}$  ergibt sich als Erwartungswert der geometrischen Verteilung

$$E[T] = \sum_{n=0}^{\infty} P[T > n] = \frac{1}{1 - (1 - p)} = \frac{1}{p}.$$

### Binomialverteilung

Die Anzahl der Ereignisse unter  $A_1, \dots, A_n$ , die eintreten, ist durch die Zufallsvariable

$$S_n(\omega) = |\{1 \leq i \leq n : \omega \in A_i\}| = \sum_{i=1}^n I_{A_i}(\omega)$$

gegeben. Mithilfe von Lemma 2.5 können wir auch die Verteilung von  $S_n$  berechnen. Für  $0 \leq k \leq n$  gilt

$$\begin{aligned} P[S_n = k] &= \sum_{\substack{I \subseteq \{1, \dots, n\} \\ |I|=k}} P \left[ \bigcap_{i \in I} A_i \cap \bigcap_{i \in \{1, \dots, n\} \setminus I} A_i^C \right] = \sum_{\substack{I \subseteq \{1, \dots, n\} \\ |I|=k}} \prod_{i \in I} P[A_i] \cdot \prod_{i \in I^C} P[A_i^C] \\ &= \sum_{\substack{I \subseteq \{1, \dots, n\} \\ |I|=k}} \prod_{i \in I} p \cdot \prod_{i \in I^C} (1 - p) = \sum_{\substack{I \subseteq \{1, \dots, n\} \\ |I|=k}} p^{|I|} \cdot (1 - p)^{|I^C|} \\ &= \binom{n}{k} p^k (1 - p)^{n-k}, \end{aligned}$$

d.h.  $S_n$  ist binomialverteilt mit Parametern  $n$  und  $p$ .

## Ein erstes Gesetz der großen Zahlen

Das empirische Gesetz der großen Zahlen (GGZ) besagt, dass sich die relative Häufigkeit  $S_n/n$  für das Eintreten der unabhängigen Ereignisse  $A_1, \dots, A_n$  für  $n \rightarrow \infty$  der Erfolgswahrscheinlichkeit  $p$  annähert. Wir können diese Aussage nun mathematisch präzisieren, und aus den Kolmogorovschen Axiomen herleiten. Je nach Präzisierung des Konvergenzbegriffs unterscheidet man zwischen dem schwachen und dem starken Gesetz der großen Zahlen.

**Satz 2.6** (Bernstein-Ungleichung, Schwaches GGZ für unabhängige Ereignisse).

Für alle  $\varepsilon > 0$  und  $n \in \mathbb{N}$  gilt

$$P \left[ \frac{S_n}{n} \geq p + \varepsilon \right] \leq e^{-2\varepsilon^2 n}, \quad \text{und} \quad P \left[ \frac{S_n}{n} \leq p - \varepsilon \right] \leq e^{-2\varepsilon^2 n}.$$

Insbesondere ist

$$P \left[ \left| \frac{S_n}{n} - p \right| > \varepsilon \right] \leq 2e^{-2\varepsilon^2 n},$$

d.h. die Wahrscheinlichkeit für eine Abweichung der relativen Häufigkeit  $S_n/n$  von der Wahrscheinlichkeit  $p$  um mehr als  $\varepsilon$  fällt exponentiell schnell in  $n$  ab.

**Bemerkung.** a) Der Satz liefert eine nachträgliche Rechtfertigung der frequentistischen Interpretation der Wahrscheinlichkeit als asymptotische relative Häufigkeit.

b) Die Aussage kann man zum empirischen Schätzen der Wahrscheinlichkeit  $p$  verwenden: Für große  $n$  gilt

$$p \approx \frac{S_n}{n} = \text{relative Häufigkeit des Ereignisses bei } n \text{ unabhängigen Stichproben.}$$

Simuliert man die Stichproben künstlich auf dem Computer, dann ergibt sich ein *Monte-Carlo-Verfahren* zur näherungsweise Berechnung von  $p$ . Der Satz liefert eine recht präzise Fehlerabschätzung für den Schätz- bzw. Approximationsfehler.

c) Bemerkenswert ist, dass die Abschätzung aus der Bernstein-Ungleichung nicht nur asymptotisch für  $n \rightarrow \infty$ , sondern für jedes feste  $n$  gilt. Solche präzisen *nicht-asymptotischen Abschätzungen* sind für Anwendungen sehr wichtig, und oft nicht einfach herzuleiten.

*Beweis.* Der Beweis von Satz 2.6 besteht aus zwei Teilen: Wir leiten zunächst exponentielle Abschätzungen für die Wahrscheinlichkeiten her, welche von einem Parameter  $\lambda \geq 0$  abhängen. Anschließend optimieren wir die erhaltene Abschätzung durch Wahl von  $\lambda$ .

Wir setzen  $q := 1 - p$ . Wegen  $S_n \sim \text{Bin}(n, p)$  gilt für  $\lambda \geq 0$ :

$$\begin{aligned} P[S_n \geq n(p + \varepsilon)] &= \sum_{k \geq np + n\varepsilon} \binom{n}{k} p^k q^{n-k} \\ &\leq \sum_{k \geq np + n\varepsilon} \binom{n}{k} e^{\lambda k} p^k q^{n-k} e^{-\lambda(np + n\varepsilon)} \\ &\leq \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} (pe^\lambda)^k q^{n-k} e^{-\lambda np} e^{-\lambda n\varepsilon} \\ &= (pe^\lambda + q)^n e^{-\lambda np} e^{-\lambda n\varepsilon} \\ &= (pe^{\lambda q} + qe^{-\lambda p})^n e^{-\lambda n\varepsilon}. \end{aligned}$$

Wir werden unten zeigen, dass für alle  $\lambda \geq 0$  die Abschätzung

$$pe^{\lambda q} + qe^{-\lambda p} \leq e^{\lambda^2/8} \quad (2.3.2)$$

gilt. Damit erhalten wir dann

$$P[S_n \geq n(p + \varepsilon)] \leq e^{n(\frac{\lambda^2}{8} - \lambda\varepsilon)}.$$

Der Exponent auf der rechten Seite ist minimal für  $\lambda = 4\varepsilon$ . Mit dieser Wahl von  $\lambda$  folgt schließlich

$$P[S_n \geq n(p + \varepsilon)] \leq e^{-2n\varepsilon^2}.$$

Die Abschätzung für  $P[S_n \leq n(p - \varepsilon)]$  zeigt man analog, und erhält so die Aussage des Satzes.

Nachzutragen bleibt nur noch der Beweis der Abschätzung (2.3.2). Sei dazu

$$f(\lambda) := \log(pe^{\lambda q} + qe^{-\lambda p}) = \log(e^{-\lambda p}(pe^\lambda + q)) = -\lambda p + \log(pe^\lambda + q).$$

Zu zeigen ist  $f(\lambda) \leq \lambda^2/8$  für alle  $\lambda \geq 0$ . Es gilt  $f(0) = 0$ ,

$$\begin{aligned} f'(\lambda) &= -p + \frac{pe^\lambda}{pe^\lambda + q} = -p + \frac{p}{p + qe^{-\lambda}}, \quad f'(0) = 0, \\ f''(\lambda) &= \frac{pqe^{-\lambda}}{(p + qe^{-\lambda})^2} \leq \frac{1}{4}. \end{aligned}$$

Hierbei haben wir im letzten Schritt die elementare Ungleichung

$$(a + b)^2 = a^2 + b^2 + 2ab \geq 4ab$$

benutzt. Damit folgt für  $\lambda \geq 0$  wie behauptet

$$f(\lambda) = \int_0^\lambda f'(x) dx = \int_0^\lambda \int_0^x f''(y) dy dx \leq \int_0^\lambda \frac{x}{4} dx \leq \frac{\lambda^2}{8}.$$

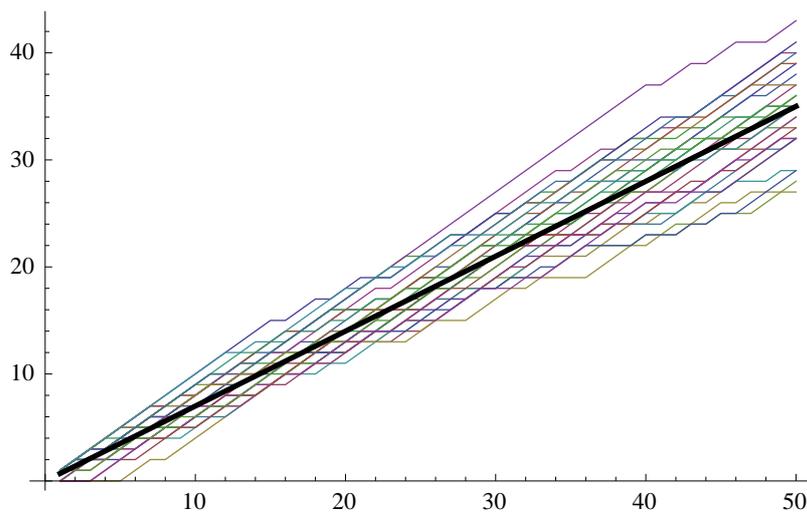
□

Zur Illustration des Satzes simulieren wir den Verlauf von  $S_k$  und  $S_k/k$  für  $k \leq n$  und  $p = 0.7$  mehrfach ( $m$ -mal), und plotten die Massenfunktionen von  $S_n$ .

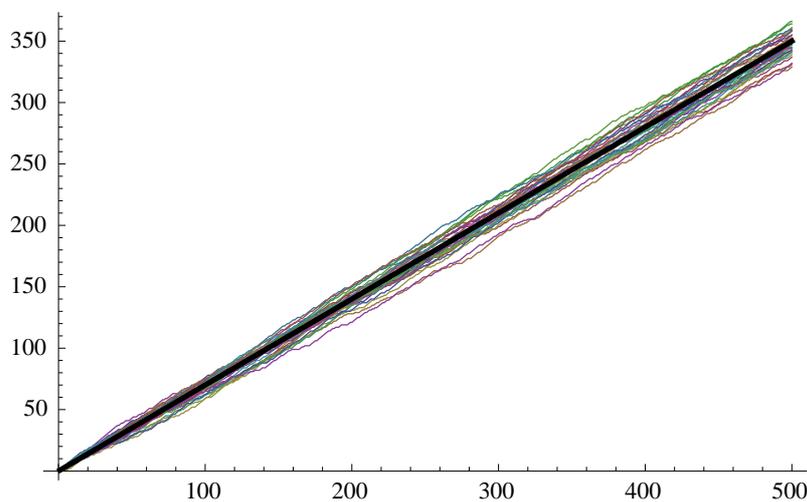
VERLAUF VON  $S_k$  FÜR  $k \leq n$

```
m = 30; nmax = 1000; p = 0.7;
(Wir erzeugen  $m \times nmax$  Bernoulli-Stichproben mit Wahrscheinlichkeit p)
x = RandomChoice[{1 - p, p} -> {0, 1}, {nmax, m}]; s = Accumulate[x];
Das Feld s enthält m Verläufe von  $s_n = x_1 + \dots + x_n, n = 1, \dots, nmax$ 
Manipulate[Show[
  ListLinePlot[Transpose[s[[1 ;; n]]]],
  ListLinePlot[p*Range[n], PlotStyle -> {Black, Thick}],
  {{n, 50}, 1, nmax, 1}]
(Vergleich der  $m$  Verläufe von  $s_n$  mit  $np$ )
```

$n = 50$ :



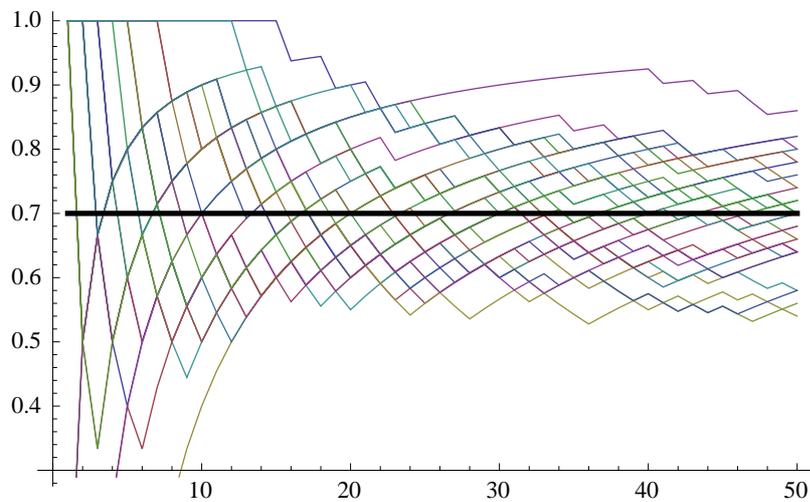
$n = 500$ :



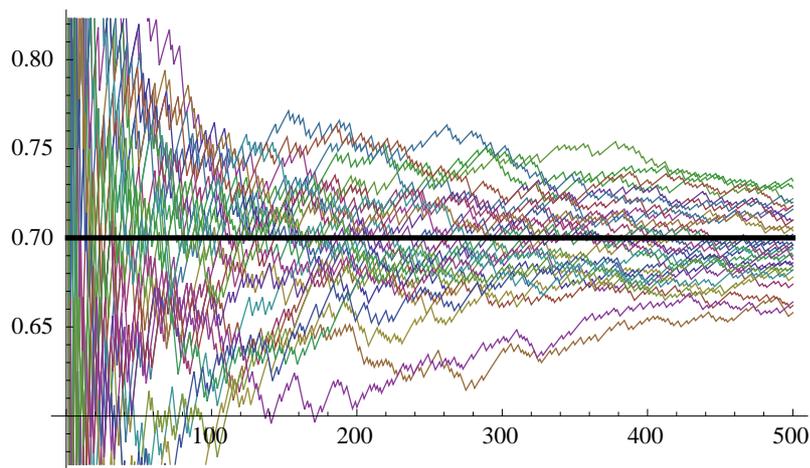
VERLAUF VON  $S_k/k$  FÜR  $k \leq n$

```
mean = s / Range[nmax];
(Das Feld mean enthält m Verläufe der Werte von  $\frac{s_n}{n}$ )
Manipulate[Show[
  ListLinePlot[Transpose[mean[[1 ;; n]]]],
  ListLinePlot[ConstantArray[p, n], PlotStyle -> {Black, Thick}], {{n,
    50}, 1, nmax, 1}]
```

$n = 50$ :



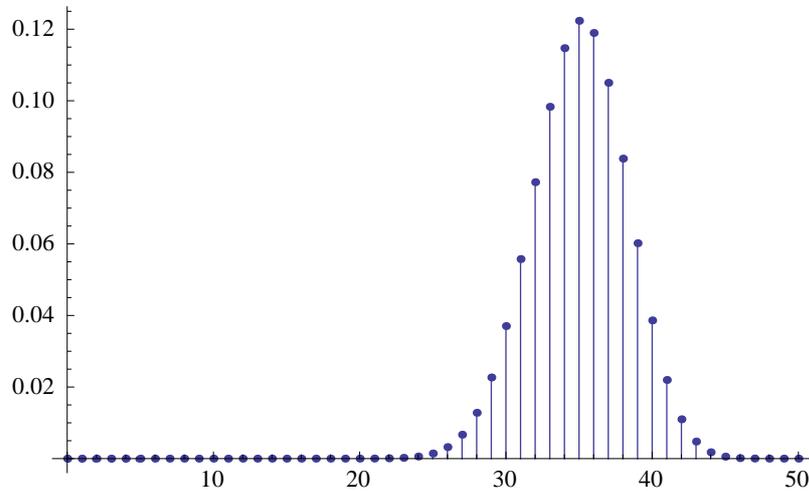
$n = 500$ :



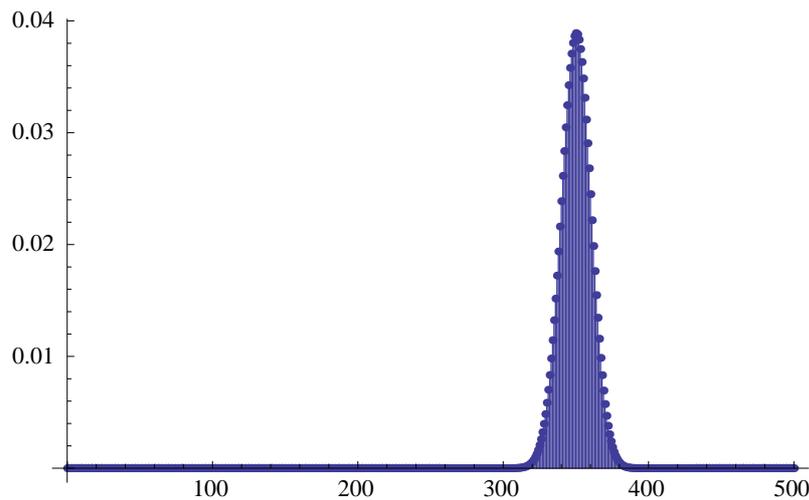
VERTEILUNG VON  $S_n$

```
Manipulate[
  ListPlot[Table[{k, PDF[BinomialDistribution[n, p], k]}, {k, 0, n}],
  PlotRange -> All, Filling -> Axis]
, {{n, 50}, 1, nmax, 1}]
```

$n = 50$ :



$n = 500$ :



Abschließend zeigen wir, dass aus der Bernstein-Ungleichung auch ein starkes Gesetz der großen Zahlen für die relativen Häufigkeiten folgt. Dieses besagt, dass die Zufallsfolge  $S_n/n$  mit Wahrscheinlichkeit 1 für  $n \rightarrow \infty$  gegen  $p$  konvergiert. Wir bemerken zunächst, dass  $\{\lim S_n/n = p\}$  ein Ereignis in der  $\sigma$ -Algebra  $\mathcal{A}$  ist, denn es gilt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{S_n(\omega)}{n} = p \Leftrightarrow \forall k \in \mathbb{N} \exists n_0 \in \mathbb{N} \forall n \geq n_0 : \left| \frac{S_n(\omega)}{n} - p \right| \leq \frac{1}{k},$$

und damit

$$\left\{ \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{S_n}{n} = p \right\} = \bigcap_{k=1}^{\infty} \bigcup_{n_0=1}^{\infty} \bigcap_{n=n_0}^{\infty} \left\{ \left| \frac{S_n}{n} - p \right| \leq \frac{1}{k} \right\} \in \mathcal{A}. \quad (2.3.3)$$

**Korollar** (Starkes GGZ für unabhängige Ereignisse). *Es gilt*

$$P \left[ \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{S_n}{n} = p \right] = 1.$$

*Beweis.* Wir zeigen mithilfe der Bernstein-Ungleichung, dass das Gegenereignis  $\{S_n/n \not\rightarrow p\}$  Wahrscheinlichkeit Null hat. Nach (2.3.3) gilt

$$\left\{ \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{S_n}{n} \neq p \right\} = \bigcup_{k=1}^{\infty} A_k \quad \text{mit} \quad A_k = \bigcap_{n_0=1}^{\infty} \bigcup_{n=n_0}^{\infty} \left\{ \left| \frac{S_n}{n} - p \right| > \frac{1}{k} \right\}.$$

Es genügt also  $P[A_k] = 0$  für jedes  $k \in \mathbb{N}$  zu zeigen. Sei dazu  $k \in \mathbb{N}$  fest gewählt. Aus der Bernstein-Ungleichung folgt für  $n_0 \in \mathbb{N}$ :

$$P[A_k] \leq P \left[ \bigcup_{n=n_0}^{\infty} \left\{ \left| \frac{S_n}{n} - p \right| > \frac{1}{k} \right\} \right] \leq \sum_{n=n_0}^{\infty} 2e^{-2n/k^2}.$$

Für  $n_0 \rightarrow \infty$  konvergieren die Partialsummen auf der rechten Seite gegen Null. Also folgt  $P[A_k] = 0$ , und damit die Behauptung.  $\square$

## 2.4 Unabhängige Zufallsvariablen und Random Walk

Wir erweitern den Begriff der Unabhängigkeit nun von Ereignissen auf Zufallsvariablen. Als Anwendung untersuchen wir eindimensionale Irrfahrten, die sich als Summen unabhängiger Inkremente darstellen lassen.

### Unabhängigkeit von diskreten Zufallsvariablen

Sei  $(\Omega, \mathcal{A}, P)$  ein Wahrscheinlichkeitsraum, und  $I$  eine beliebige Menge.

**Definition.** Eine Familie  $X_i : \Omega \rightarrow S_i$  ( $i \in I$ ) von diskreten Zufallsvariablen auf  $(\Omega, \mathcal{A}, P)$  heißt **unabhängig**, falls die Ereignisse  $\{X_i = a_i\}$  ( $i \in I$ ), für alle  $a_i \in S_i$  unabhängig sind.

Aus der Definition folgt unmittelbar, dass die Zufallsvariablen  $X_i$  ( $i \in I$ ) genau dann unabhängig sind, wenn jede endliche Teilkollektion unabhängig ist. Daher beschränken wir uns im folgenden auf den Fall  $I = \{1, \dots, n\}$  mit  $n \in \mathbb{N}$ . Sind  $X_1 : \Omega \rightarrow S_1, \dots, X_n : \Omega \rightarrow S_n$  diskrete Zufallsvariablen, dann ist auch  $(X_1, \dots, X_n)$  eine Zufallsvariable mit Werten im Produktraum  $S_1 \times \dots \times S_n$ .

**Definition.** Die Verteilung  $\mu_{X_1, \dots, X_n}$  des Zufallsvektors  $(X_1, \dots, X_n)$  unter  $P$  heißt **gemeinsame Verteilung** der Zufallsvariablen  $X_1, \dots, X_n$ .

Die Massenfunktion der gemeinsamen Verteilung ist durch

$$p_{X_1, \dots, X_n}(a_1, \dots, a_n) = P[X_1 = a_1, \dots, X_n = a_n]$$

gegeben. Die gemeinsame Verteilung enthält Informationen über den Zusammenhang zwischen den Zufallsgrößen  $X_i$ .

**Satz 2.7.** *Die folgenden Aussagen sind äquivalent:*

- (i)  $X_1, \dots, X_n$  sind unabhängig.
- (ii)  $p_{X_1, \dots, X_n}(a_1, \dots, a_n) = \prod_{i=1}^n p_{X_i}(a_i)$  für alle  $a_i \in S_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ .
- (iii)  $\mu_{X_1, \dots, X_n} = \bigotimes_{i=1}^n \mu_{X_i}$ .
- (iv) Die Ereignisse  $\{X_1 \in A_1\}, \dots, \{X_n \in A_n\}$  sind unabhängig für beliebige Mengen  $A_i \subseteq S_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ .

*Beweis.* (i)  $\Rightarrow$  (ii): Sind die Zufallsvariablen  $X_1, \dots, X_n$  unabhängig, dann gilt

$$P[X_1 = a_1, \dots, X_n = a_n] = \prod_{i=1}^n P[X_i = a_i].$$

(ii)  $\Leftrightarrow$  (iii) gilt nach Definition des Produkts  $\bigotimes_{i=1}^n \mu_{X_i}$  der Wahrscheinlichkeitsverteilungen  $\mu_{X_i}$ .

(iii)  $\Rightarrow$  (iv): Seien  $A_i \subseteq S_i$  ( $i = 1, \dots, n$ ) und  $1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_m \leq n$ . Um die Produkteigenschaft für die Ereignisse mit Indizes  $i_1, \dots, i_m$  zu zeigen, setzen wir  $B_{i_k} := A_{i_k}$  für alle  $k$  und  $B_i := S_i$  für  $i \notin \{i_1, \dots, i_m\}$ . Mit (iii) folgt dann nach Satz 2.2:

$$\begin{aligned} P[X_{i_1} \in A_{i_1}, \dots, X_{i_m} \in A_{i_m}] &= P[X_1 \in B_1, \dots, X_n \in B_n] \\ &= P[(X_1, \dots, X_n) \in B_1 \times \dots \times B_n] = \mu_{X_1, \dots, X_n}[B_1 \times \dots \times B_n] \\ &= \prod_{i=1}^n \mu_{X_i}[B_i] = \prod_{i=1}^n P[X_i \in B_i] = \prod_{i=1}^m P[X_{i_k} \in A_{i_k}]. \end{aligned}$$

(iv)  $\Rightarrow$  (i) folgt durch Wahl von  $A_i = \{a_i\}$ . □

Als Konsequenz aus Satz 2.7 ergibt sich insbesondere:

**Korollar 2.8.** *Sind  $X_i : \Omega \rightarrow S_i$ ,  $1 \leq i \leq n$ , diskrete Zufallsvariablen, und hat die gemeinsame Massenfunktion eine Darstellung*

$$p_{X_1, \dots, X_n}(a_1, \dots, a_n) = c \cdot \prod_{i=1}^n g_i(a_i) \quad \forall (a_1, \dots, a_n) \in S_1 \times \dots \times S_n$$

in Produktform mit einer Konstanten  $c \in \mathbb{R}$ , und Funktionen  $g_i : S_i \rightarrow [0, \infty)$ , dann sind  $X_1, \dots, X_n$  unabhängig mit Massenfunktion

$$p_{X_i}(a_i) = \frac{g_i(a_i)}{\sum_{a \in S_i} g_i(a)}$$

*Beweis.* Die Werte

$$\tilde{g}_i(a_i) = \frac{g_i(a_i)}{\sum_{a \in S_i} g_i(a)}, \quad a_i \in S_i,$$

sind die Gewichte eine Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\mu_i$  auf  $S_i$ . Nach Voraussetzung gilt

$$\begin{aligned} \mu_{X_1, \dots, X_n}[\{a_1\} \times \dots \times \{a_n\}] &= p_{X_1, \dots, X_n}(a_1, \dots, a_n) \\ &= \tilde{c} \cdot \prod_{i=1}^n \tilde{\mu}_{X_i}[\{a_i\}] \quad \forall (a_1, \dots, a_n) \in S_1 \times \dots \times S_n \end{aligned} \quad (2.4.1)$$

mit einer reellen Konstante  $\tilde{c}$ . Da auf beiden Seiten von (2.4.1) bis auf den Faktor  $\tilde{c}$  die Massenfunktionen von Wahrscheinlichkeitsverteilungen stehen, gilt  $\tilde{c} = 1$ , und damit

$$\mu_{X_1, \dots, X_n} = \bigotimes_{i=1}^n \mu_i.$$

Also sind die  $X_i$  unabhängig mit Verteilung  $\mu_i$ , d.h. mit Massenfunktion  $\tilde{g}_i$ .  $\square$

**Beispiel (Zwei Würfel).** Seien  $X, Y : \Omega \rightarrow \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$  gleichverteilte Zufallsvariablen. Für die Gewichte der gemeinsamen Verteilung von  $X$  und  $Y$  gibt es dann beispielsweise folgende Möglichkeiten:

(1).  $X, Y$  unabhängig.

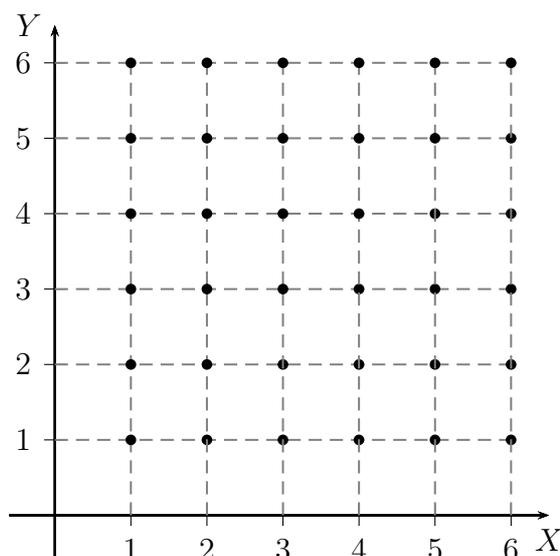


Abbildung 2.2:  $X, Y$  unabhängig;  $\mu_{X,Y} = \mu_X \otimes \mu_Y$ . Gewichte der Punkte sind jeweils  $\frac{1}{36}$

(2).  $X, Y$  deterministisch korreliert, z.B.  $Y = (X + 1) \bmod 6$ .

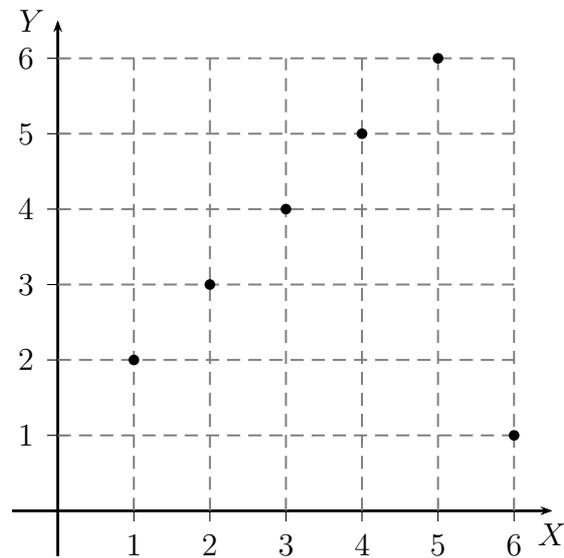


Abbildung 2.3:  $Y = (X + 1) \bmod 6$ . Das Gewicht eines einzelnen Punktes ist  $\frac{1}{6}$ .

(3).  $Y = (X + Z) \bmod 6$ ,  $Z$  unabhängig von  $X$ ,  $Z = 0, \pm 1$  mit Wahrscheinlichkeit  $\frac{1}{3}$ .

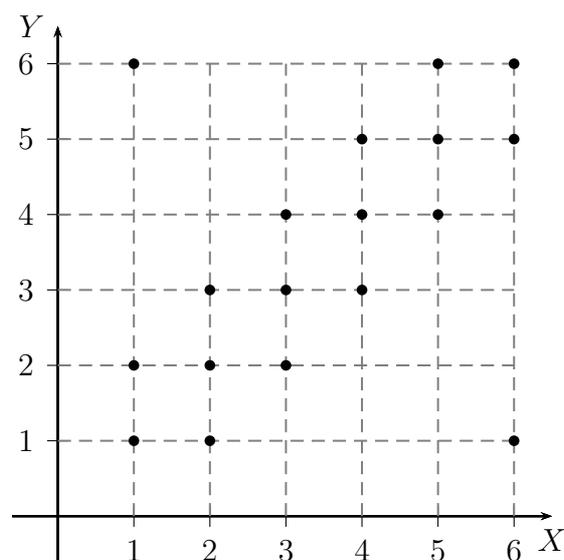


Abbildung 2.4:  $Y = (X + Z) \bmod 6$ ;  $Z \sim \text{unif}\{-1, 0, 1\}$ . Das Gewicht eines einzelnen Punktes ist  $\frac{1}{18}$ .

## Der Random Walk auf $\mathbb{Z}$

Seien  $X_1, X_2, \dots$  unabhängige identisch verteilte (»i.i.d.« – independent and identically distributed) Zufallsvariablen auf dem Wahrscheinlichkeitsraum  $(\Omega, \mathcal{A}, P)$  mit

$$P[X_i = +1] = p, \quad P[X_i = -1] = 1 - p, \quad p \in (0, 1).$$

Die Existenz von unendlich vielen unabhängigen identisch verteilten Zufallsvariablen auf einem geeigneten Wahrscheinlichkeitsraum (unendliches Produktmodell) wird in der Vorlesung »Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie« gezeigt. Sei  $a \in \mathbb{Z}$  ein fester Startwert. Wir betrachten die durch

$$\begin{aligned} S_0 &= a, \\ S_{n+1} &= S_n + X_{n+1}, \end{aligned}$$

definierte zufällige Bewegung (»Irrfahrt« oder »Random Walk«) auf  $\mathbb{Z}$ . Als Position zur Zeit  $n$  ergibt sich

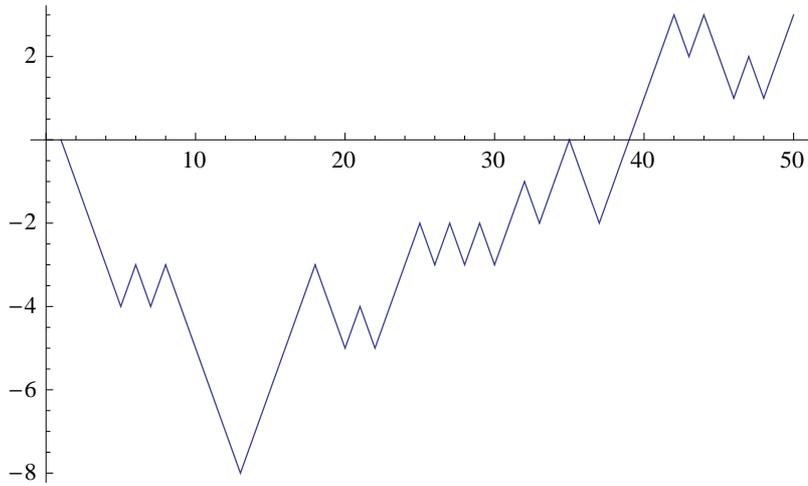
$$S_n = a + X_1 + X_2 + \dots + X_n.$$

Irrfahrten werden unter anderem in primitiven Modellen für die Kapitalentwicklung beim Glücksspiel oder an der Börse (Aktienkurs), sowie die Brownsche Molekularbewegung (im Skalierungslimes Schrittweite  $\rightarrow 0$ ) eingesetzt.

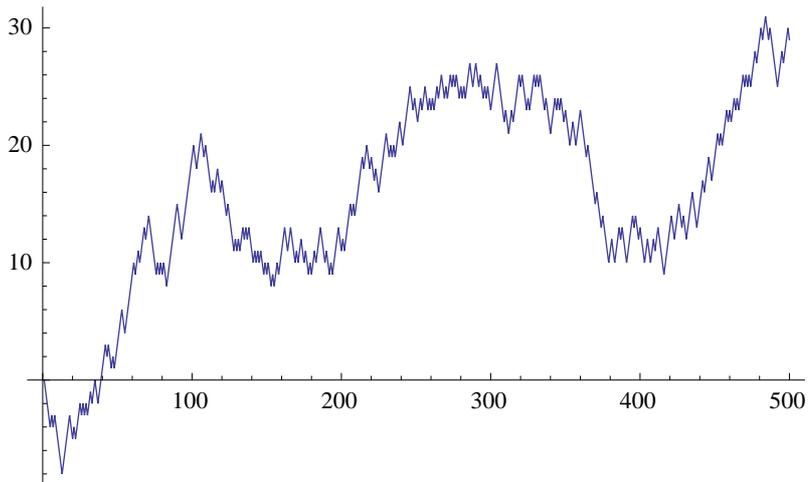
**Beispiel** (Symmetrischer Random Walk,  $p = \frac{1}{2}$ ). Die folgende Mathematica-Routine simuliert 10.000 Schritte eines Random Walks für  $p = \frac{1}{2}$ , und plottet den Verlauf der ersten  $nmax$  Schritte.

```
zufall = RandomChoice[{-1, 1}, 10000];
randomwalk = FoldList[Plus, 0, zufall];
Manipulate[
  ListLinePlot[randomwalk[[1 ;; nmax]]], {nmax, 10, 10000, 10}]
```

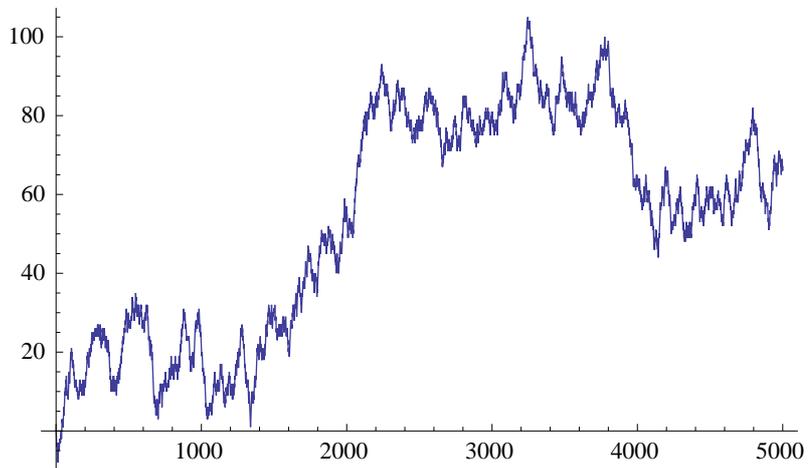
- $nmax = 50$ :



- $nmax = 500$ :



- $nmax = 5000$ :



Wir wollen nun die Verteilung von verschiedenen, durch den Random Walk gegebenen, Zufallsvariablen berechnen. Die Verteilung von  $S_n$  selbst ist eine verzerrte Binomialverteilung:

**Lemma 2.9** (Verteilung von  $S_n$ ). Für  $k \in \mathbb{Z}$  gilt

$$P[S_n = a + k] = \begin{cases} 0 & \text{falls } n + k \text{ ungerade oder } |k| > n, \\ \binom{n}{\frac{n+k}{2}} p^{\frac{n+k}{2}} (1-p)^{\frac{n-k}{2}} & \text{sonst.} \end{cases}$$

*Beweis.* Es gilt

$$S_n = a + k \Leftrightarrow X_1 + \dots + X_n = k \Leftrightarrow \begin{cases} X_i = 1 & \text{genau } \frac{n+k}{2} \text{ mal,} \\ X_i = -1 & \text{genau } \frac{n-k}{2} \text{ mal.} \end{cases}$$

□

**Beispiel** (Rückkehrwahrscheinlichkeit zum Startpunkt). Mithilfe der **Stirlingschen Formel**

$$n! \sim \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n \quad \text{für } n \rightarrow \infty.$$

folgt für  $n \rightarrow \infty$ :

$$\begin{aligned} P[S_{2n} = a] &= \binom{2n}{n} p^n (1-p)^n = \frac{(2n)!}{(n!)^2} p^n (1-p)^n \\ &\sim \frac{\sqrt{4\pi n} (2n/e)^{2n}}{2\pi n (n/e)^{2n}} p^n (1-p)^n = \frac{1}{\sqrt{\pi n}} (4p(1-p))^n, \end{aligned}$$

wobei zwei Folgen  $a_n$  und  $b_n$  **asymptotisch äquivalent** heißen ( $a_n \sim b_n$ ), falls  $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{b_n} = 1$  gilt. Damit ergeben sich zwei unterschiedliche Fälle für die Asymptotik der Rückkehrwahrscheinlichkeiten zum Startpunkt nach  $2n$  Schritten:

- Im symmetrischen Fall  $p = \frac{1}{2}$  gilt  $P[S_{2n} = a] \sim \frac{1}{\sqrt{\pi n}}$ . Die Rückkehrwahrscheinlichkeiten konvergieren also nur langsam gegen 0.
- Im nicht-symmetrischen Fall  $p \neq \frac{1}{2}$  gilt dagegen  $4p(1-p) < 1$ , und die Folge  $P[S_{2n} = a]$  konvergiert für  $n \rightarrow \infty$  exponentiell schnell gegen 0.

## Symmetrischer Random Walk und Reflektionsprinzip

Ab jetzt betrachten wir nur noch die symmetrische Irrfahrt mit  $p = \frac{1}{2}$ . Sei  $\lambda \in \mathbb{Z}$ . Wir wollen die Verteilung der Zufallsvariable

$$T_\lambda(\omega) := \min\{n \in \mathbb{N} : S_n(\omega) = \lambda\}$$

bestimmen, wobei wir wieder  $\min \emptyset := \infty$  setzen. Für  $\lambda \neq a$  ist  $T_\lambda$  die erste **Trefferzeit von**  $\lambda$ , für  $\lambda = a$  ist es hingegen die erste **Rückkehrzeit nach**  $a$ . Beschreibt der Random Walk beispielsweise die Kapitalentwicklung in einem Glücksspiel, dann kann man  $T_0$  als Ruinzeitpunkt interpretieren. Wir wollen nun die Wahrscheinlichkeit

$$P[T_\lambda \leq n] = P\left[\bigcup_{i=1}^n \{S_i = \lambda\}\right]$$

für  $n \in \mathbb{N}$  berechnen. Da das Ereignis  $\{T_\lambda \leq n\}$  von *mehreren* Positionen des Random Walks abhängt  $(S_1, S_2, \dots, S_n)$ , benötigen wir die *gemeinsame* Verteilung dieser Zufallsvariablen. Sei also

$$S_{0:n}(\omega) := (S_0(\omega), S_1(\omega), \dots, S_n(\omega))$$

der *Bewegungsverlauf bis zur Zeit*  $n$ . Dann ist  $S_{0:n}$  eine Zufallsvariable mit Werten im Raum

$$\widehat{\Omega}_a^{(n)} := \{(s_0, s_1, \dots, s_n) : s_0 = a, s_i \in \mathbb{Z} \text{ mit } |s_i - s_{i-1}| = 1 \text{ für alle } i \in \{1, \dots, n\}\}$$

der möglichen Verläufe (Pfade) der Irrfahrt. Sei  $\mu_a$  die Verteilung von  $S_{0:n}$  unter  $P$ .

**Lemma 2.10.**  $\mu_a$  ist die Gleichverteilung auf dem Pfadraum  $\widehat{\Omega}_a^{(n)} \subseteq \mathbb{Z}^{n+1}$ .

*Beweis.* Für  $s_0, \dots, s_n \in \mathbb{Z}$  gilt

$$\begin{aligned} \mu_a[\{(s_0, \dots, s_n)\}] &= P[S_0 = s_0, \dots, S_n = s_n] \\ &= P[S_0 = s_0, X_1 = s_1 - s_0, \dots, X_n = s_n - s_{n-1}] \\ &= \begin{cases} 0 & \text{falls } s_0 \neq a \text{ oder } |s_i - s_{i-1}| \neq 1 \text{ für ein } i \in \{1, \dots, n\}, \\ 2^{-n} & \text{sonst, d.h. falls } (s_0, \dots, s_n) \in \widehat{\Omega}_a^{(n)}. \end{cases} \end{aligned}$$

□

Das Lemma ermöglicht es uns, Wahrscheinlichkeiten für die symmetrische Irrfahrt durch Abzählen zu berechnen. Dazu zeigen wir eine nützliche Invarianzeigenschaft bezüglich der Reflektion der Pfade beim ersten Erreichen eines Levels  $\lambda$ . Den Beweis des folgenden Satzes macht man sich am besten zunächst anhand von Abbildung 2.4 klar.

**Satz 2.11** (Reflektionsprinzip). *Seien  $\lambda, b \in \mathbb{Z}$ . Es gelte entweder  $(a < \lambda \text{ und } b \leq \lambda)$ , oder  $(a > \lambda \text{ und } b \geq \lambda)$ . Dann folgt*

$$P[T_\lambda \leq n, S_n = b] = P[S_n = b^*],$$

wobei  $b^* := \lambda + (\lambda - b) = 2\lambda - b$  die Spiegelung von  $b$  an  $\lambda$  ist.

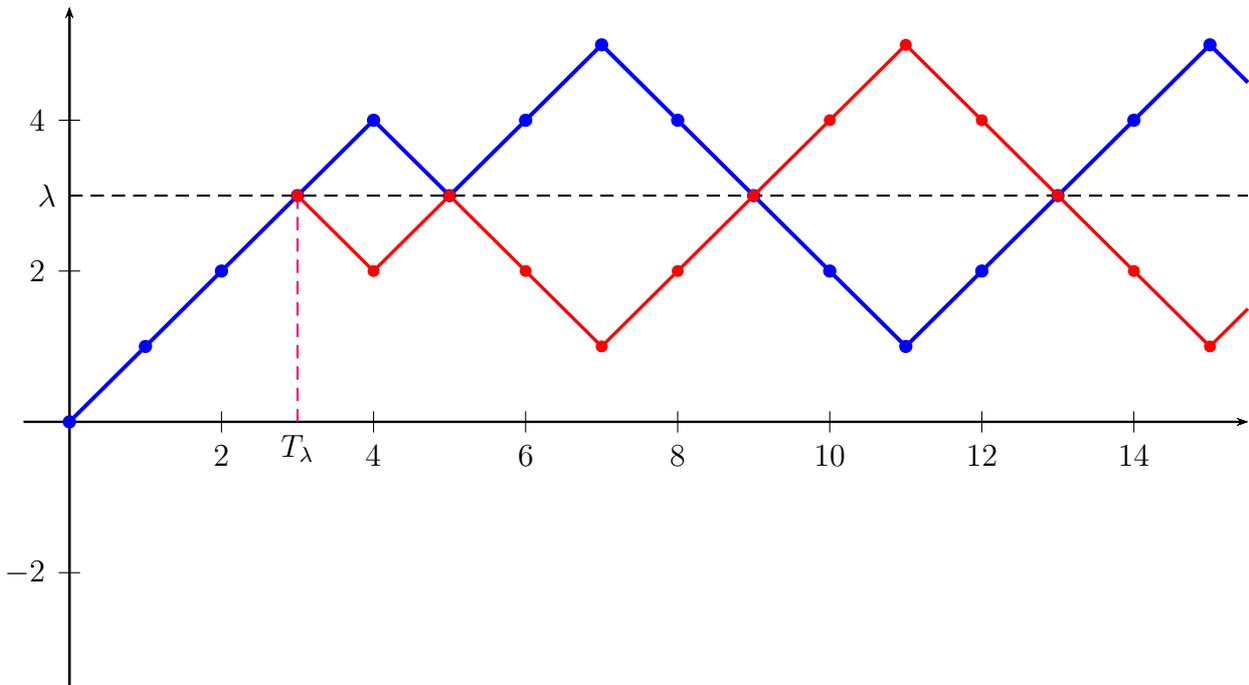


Abbildung 2.5: Reflektionsprinzip

*Beweis.* Es gilt

$$\begin{aligned}
 P[T_\lambda \leq n, S_n = b] &= \mu_a[\overbrace{\{(s_0, \dots, s_n) : s_n = b, s_i = \lambda \text{ für ein } i \in \{1, \dots, n\}\}}^{=:A}], \\
 P[S_n = b^*] &= \mu_a[\underbrace{\{(s_0, \dots, s_n) : s_n = b^*\}}_{=:B}].
 \end{aligned}$$

Die im Bild dargestellte Transformation (Reflexion des Pfades nach Treffen von  $\lambda$ ) definiert eine Bijektion von  $A$  nach  $B$ . Also gilt  $|A| = |B|$ . Da  $\mu_a$  die Gleichverteilung auf  $\widehat{\Omega}_a^{(n)}$  ist, folgt

$$\mu_a[A] = \frac{|A|}{|\widehat{\Omega}_a^{(n)}|} = \frac{|B|}{|\widehat{\Omega}_a^{(n)}|} = \mu_a[B].$$

□

Mithilfe des Reflektionsprinzips können wir nun die Verteilung der ersten Trefferzeiten explizit aus den uns schon bekannten Verteilungen der Zufallsvariablen  $S_n$  berechnen.

**Korollar** (Verteilung der Trefferzeiten). Für  $\lambda \in \mathbb{Z}$  und  $n \in \mathbb{N}$  gilt:

(i)

$$P[T_\lambda \leq n] = \begin{cases} P[S_n \geq \lambda] + P[S_n > \lambda] & \text{falls } \lambda > a, \\ P[S_n \leq \lambda] + P[S_n < \lambda] & \text{falls } \lambda < a. \end{cases}$$

(ii)

$$P[T_\lambda = n] = \begin{cases} \frac{1}{2}P[S_{n-1} = \lambda - 1] - \frac{1}{2}P[S_{n-1} = \lambda + 1] & \text{falls } \lambda > a, \\ \frac{1}{2}P[S_{n-1} = \lambda + 1] - \frac{1}{2}P[S_{n-1} = \lambda - 1] & \text{falls } \lambda < a. \end{cases}$$

*Beweis.* Wir beweisen die Aussagen für  $\lambda > a$ , der andere Fall wird jeweils analog gezeigt.

(i) Ist  $S_n \geq \lambda$ , dann gilt stets  $T_\lambda \leq n$ . Daher folgt nach Satz 2.11:

$$\begin{aligned} P[T_\lambda \leq n] &= \sum_{b \in \mathbb{Z}} \underbrace{P[T_\lambda \leq n, S_n = b]} &= \sum_{b \geq \lambda} P[S_n = b] + \underbrace{\sum_{b < \lambda} P[S_n = b^*]}_{= \sum_{b > \lambda} P[S_n = b]} \\ &= P[S_n = b] \text{ für } b \geq \lambda, \\ &= P[S_n = b^*] \text{ für } b < \lambda. \\ &= P[S_n \geq \lambda] + P[S_n > \lambda]. \end{aligned}$$

(ii) Aus (i) folgt

$$\begin{aligned} P[T_\lambda = n] &= P[T_\lambda \leq n] - P[T_\lambda \leq n-1] \\ &= \underbrace{P[S_n \geq \lambda] - P[S_{n-1} \geq \lambda]}_{=: \mathbf{I}} + \underbrace{P[S_n \geq \lambda + 1] - P[S_{n-1} \geq \lambda + 1]}_{=: \mathbf{II}} \end{aligned}$$

Wegen

$$P[A] - P[B] = P[A \setminus B] + P[A \cap B] - P[B \setminus A] - P[B \cap A] = P[A \setminus B] - P[B \setminus A]$$

erhalten wir für den ersten Term:

$$\begin{aligned} \mathbf{I} &= P[S_n \geq \lambda, S_{n-1} < \lambda] - P[S_{n-1} \geq \lambda, S_n < \lambda] \\ &= P[S_{n-1} = \lambda - 1, S_n = \lambda] - P[S_{n-1} = \lambda, S_n = \lambda - 1] \\ &= \frac{1}{2}P[S_{n-1} = \lambda - 1] - \frac{1}{2}P[S_{n-1} = \lambda]. \end{aligned}$$

Hierbei haben wir benutzt, dass

$$\begin{aligned} &|\{(s_0, \dots, s_n) \in \widehat{\Omega}_a^{(n)} : s_{n-1} = \lambda - 1\}| \\ &= |\{(s_0, \dots, s_n) : s_{n-1} = \lambda - 1 \text{ und } s_n = \lambda\}| \\ &\quad + |\{(s_0, \dots, s_n) : s_{n-1} = \lambda - 1 \text{ und } s_n = \lambda - 2\}| \\ &= 2 \cdot |\{(s_0, \dots, s_n) : s_{n-1} = \lambda - 1, s_n = \lambda\}| \end{aligned}$$

gilt. Mit einer analogen Berechnung für den zweiten Term erhalten wir insgesamt:

$$\begin{aligned} P[T_\lambda = n] &= \mathbf{I} + \mathbf{II} \\ &= \frac{1}{2} (P[S_{n-1} = \lambda - 1] - P[S_{n-1} = \lambda] \\ &\quad + P[S_{n-1} = (\lambda + 1) - 1] - P[S_{n-1} = \lambda + 1]) \\ &= \frac{1}{2} (P[S_{n-1} = \lambda - 1] - P[S_{n-1} = \lambda + 1]). \end{aligned}$$

□

Aus der Verteilung der Trefferzeiten  $T_\lambda$  ergibt sich auch unmittelbar die Verteilung des Maximums

$$M_n := \max(S_0, S_1, \dots, S_n)$$

des Random Walks bis zur Zeit  $n$ .

**Korollar** (Verteilung des Maximums). *Für  $\lambda > a$  gilt*

$$P[M_n \geq \lambda] = P[T_\lambda \leq n] = P[S_n \geq \lambda] + P[S_n > \lambda].$$

# Kapitel 3

## Konvergenzsätze für Zufallsvariablen und ihre Verteilungen

In diesem Kapitel beweisen wir zwei ganz unterschiedliche Konvergenzaussagen für Folgen von Zufallsvariablen bzw. deren Verteilungen: Ein (schwaches) Gesetz der großen Zahlen für Mittelwerte von unkorrelierten Zufallsvariablen mit beschränkten Varianzen, sowie die Konvergenz ins Gleichgewicht der Verteilungen irreduzibler, aperiodischer Markovketten mit endlichem Zustandsraum. Beide Aussagen lassen sich auch zu einem Gesetz der großen Zahlen für Markovketten kombinieren. Der Beweis dieses »Ergodensatzes für Markovketten« wird aber erst in der Vorlesung »Stochastische Prozesse« gegeben.

### 3.1 Varianz und Kovarianz

Wir führen zunächst die Begriffe der Varianz und Standardabweichung, sowie Kovarianz und Korrelation für reellwertige Zufallsvariablen ein.

#### Varianz und Standardabweichung

Sei  $(\Omega, \mathcal{A}, P)$  ein Wahrscheinlichkeitsraum und  $X : \Omega \rightarrow S \subseteq \mathbb{R}$  eine reellwertige Zufallsvariable auf  $(\Omega, \mathcal{A}, P)$  mit abzählbarem Wertebereich  $S$ . Wir setzen voraus, dass  $E[|X|]$  endlich ist.

**Definition.** Die **Varianz** von  $X$  ist definiert als mittlere quadratische Abweichung vom Erwartungswert, d.h.

$$\text{Var}[X] = E[(X - E[X])^2] \in [0, \infty].$$

Die Größe  $\sigma[X] = \sqrt{\text{Var}[X]}$  heißt **Standardabweichung** von  $X$ .

Die Varianz bzw. Standardabweichung kann als Kennzahl für die Größe der Fluktuationen (Streuung) der Zufallsvariablen  $X$  um den Erwartungswert  $E[X]$  und damit als Maß für das Risiko bei Prognose des Ausgangs  $X(\omega)$  durch  $E[X]$  interpretiert werden.

**Bemerkung** (Eigenschaften der Varianz). (a) Die Varianz einer Zufallsvariable hängt nur von ihrer Verteilung ab. Es gilt

$$\text{Var}[X] = \sum_{a \in S} (a - m)^2 p_X(a),$$

wobei  $m := E[X] = \sum_{a \in S} a p_X(a)$  der Erwartungswert von  $X$  ist.

(b) Aus der Linearität des Erwartungswerts folgt

$$\text{Var}[X] = E[X^2 - 2X \cdot E[X] + E[X]^2] = E[X^2] - E[X]^2.$$

Insbesondere ist die Varianz von  $X$  genau dann endlich, wenn  $E[X^2]$  endlich ist.

(c) Entsprechend folgt aus der Linearität des Erwartungswerts

$$\text{Var}[aX + b] = \text{Var}[aX] = a^2 \text{Var}[X] \quad \text{für alle } a, b \in \mathbb{R}.$$

(d) Die Varianz von  $X$  ist genau dann gleich 0, wenn  $X$  *deterministisch* ist, d.h. falls

$$P[X = E[X]] = 1.$$

**Beispiele.** a) VARIANZ VON BERNOULLI-VERTEILUNGEN: Sei  $X = 1$  mit Wahrscheinlichkeit  $p$ , und  $X = 0$  mit Wahrscheinlichkeit  $1 - p$ . Dann gilt  $E[X^2] = E[X] = p$ , und damit

$$\text{Var}[X] = p - p^2 = p(1 - p).$$

b) VARIANZ VON GEOMETRISCHEN VERTEILUNGEN: Sei  $T$  geometrisch verteilt mit Parameter  $p \in (0, 1]$ . Durch zweimaliges Differenzieren der Identität

$$\sum_{k=0}^{\infty} (1-p)^k = \frac{1}{p}$$

erhalten wir

$$E[T] = \sum_{k=1}^{\infty} k (1-p)^{k-1} p = -p \frac{d}{dp} \frac{1}{p} = \frac{1}{p}, \quad \text{sowie}$$

$$E[(T+1)T] = \sum_{k=1}^{\infty} (k+1)k (1-p)^{k-1} p = \sum_{k=2}^{\infty} k(k-1) (1-p)^{k-2} p = p \frac{d^2}{dp^2} \frac{1}{p} = \frac{2}{p^2}.$$

Damit ergibt sich  $E[T^2] = \frac{2}{p^2} - \frac{1}{p}$ , und somit

$$\text{Var}[T] = E[T^2] - E[T]^2 = \frac{1}{p^2} - \frac{1}{p} = \frac{1-p}{p^2}.$$

### Kovarianz und Korrelation

Sei  $p \in [1, \infty)$ . Im folgenden bezeichnen wir mit  $\mathcal{L}^p(\Omega, \mathcal{A}, P)$  den Raum aller (diskreten) Zufallsvariablen  $X: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  mit  $E[|X|^p] < \infty$ . Die Zufallsvariablen aus  $\mathcal{L}^1(\Omega, \mathcal{A}, P)$  haben einen endlichen Erwartungswert. Gilt  $X \in \mathcal{L}^2(\Omega, \mathcal{A}, P)$ , dann ist die Varianz von  $X$  endlich.

**Lemma 3.1** (Cauchy-Schwarz-Ungleichung).

(i) Für  $X, Y \in \mathcal{L}^2(\Omega, \mathcal{A}, P)$  gilt  $X \cdot Y \in \mathcal{L}^1(\Omega, \mathcal{A}, P)$  und

$$E[X \cdot Y]^2 \leq E[|X \cdot Y|]^2 \leq E[X^2] \cdot E[Y^2].$$

(ii) Der Raum  $\mathcal{L}^2(\Omega, \mathcal{A}, P)$  ist ein Vektorraum, und das  $\mathcal{L}^2$  Skalarprodukt

$$(X, Y)_{\mathcal{L}^2} := E[X \cdot Y], \quad X, Y \in \mathcal{L}^2(\Omega, \mathcal{A}, P),$$

ist eine positiv semidefinite symmetrische Bilinearform.

Insbesondere gilt also für eine Zufallsvariable  $X \in \mathcal{L}^2(\Omega, \mathcal{A}, P)$  auch

$$E[|X|] \leq \sqrt{E[X^2]} \sqrt{E[1^2]} < \infty,$$

d.h. der Raum  $\mathcal{L}^2(\Omega, \mathcal{A}, P)$  ist in  $\mathcal{L}^1(\Omega, \mathcal{A}, P)$  enthalten.

*Beweis.* (i) Nach der Cauchy-Schwarz-Ungleichung für Summen gilt

$$\begin{aligned} E[|X Y|]^2 &= \left( \sum_{\substack{a \in X(\Omega) \\ b \in Y(\Omega)}} |a b| P[X = a, Y = b] \right)^2 \\ &= \left( \sum_{a,b} |a| \sqrt{P[X = a, Y = b]} |b| \sqrt{P[X = a, Y = b]} \right)^2 \\ &\leq \sum_{a,b} a^2 P[X = a, Y = b] \sum_{a,b} b^2 P[X = a, Y = b] \\ &= \sum_a a^2 P[X = a] \sum_b b^2 P[Y = b] \\ &= E[X^2] E[Y^2]. \end{aligned}$$

(ii) Seien  $X, Y \in \mathcal{L}^2$  und  $a \in \mathbb{R}$ . Dann ist  $aX + Y$  eine Zufallsvariable, für die wegen der Monotonie und Linearität des Erwartungswerts gilt:

$$E[(aX + Y)^2] = E[a^2 X^2 + 2aXY + Y^2] \leq 2a^2 E[X^2] + 2E[Y^2] < \infty.$$

Die Abbildung  $(X, Y)_{\mathcal{L}^2} = E[XY]$  ist bilinear, da  $E[\bullet]$  linear und symmetrisch ist, und positiv semidefinit wegen  $(X, X)_{\mathcal{L}^2} = E[X^2] \geq 0$  für alle  $X \in \mathcal{L}^2$ .

□

**Definition.** Seien  $X$  und  $Y$  Zufallsvariablen in  $\mathcal{L}^2(\Omega, \mathcal{A}, P)$ .

(i) Die **Kovarianz** von  $X$  und  $Y$  ist definiert als

$$\text{Cov}[X, Y] = E[(X - E[X])(Y - E[Y])] = E[XY] - E[X]E[Y].$$

(ii) Gilt  $\sigma(X), \sigma(Y) \neq 0$ , so heißt

$$\varrho[X, Y] = \frac{\text{Cov}[X, Y]}{\sigma[X]\sigma[Y]}$$

**Korrelationskoeffizient** von  $X$  und  $Y$ .

(iii) Die Zufallsvariablen  $X$  und  $Y$  heißen **unkorreliert**, falls  $\text{Cov}[X, Y] = 0$ , d.h.

$$E[XY] = E[X] \cdot E[Y].$$

Gilt  $\text{Cov}[X, Y] > 0$  bzw.  $< 0$ , dann heißen  $X$  und  $Y$  **positiv** bzw. **negativ korreliert**.

**Bemerkung** (Cauchy-Schwarz-Ungleichung für Kovarianz). Die Kovarianz ist eine symmetrische Bilinearform auf  $\mathcal{L}^2 \times \mathcal{L}^2$  mit

$$\text{Cov}[X, X] = \text{Var}[X] \geq 0 \quad \text{für alle } X \in \mathcal{L}^2.$$

Deshalb, oder nach Lemma 3.1, gilt die Cauchy-Schwarz-Ungleichung

$$|\text{Cov}[X, Y]| \leq \sqrt{\text{Var}[X]} \cdot \sqrt{\text{Var}[Y]} = \sigma[X] \cdot \sigma[Y].$$

Aus der Ungleichung folgt, dass der Korrelationskoeffizient  $\varrho[X, Y]$  stets Werte zwischen  $-1$  und  $1$  annimmt.

**Beispiel (Empirischer Korrelationskoeffizient).** Wenn die gemeinsame Verteilung von  $X$  und  $Y$  eine empirische Verteilung von Daten  $(x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2, i = 1, \dots, n$ , ist, d.h. wenn

$$(X, Y) = (x_i, y_i) \quad \text{mit Wahrscheinlichkeit } 1/n$$

für  $1 \leq i \leq n$  gilt, dann sind die Erwartungswerte und die Kovarianz gegeben durch

$$E[X] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i =: \bar{x}_n, \quad E[Y] = \bar{y}_n,$$

$$\text{Cov}[X, Y] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)(y_i - \bar{y}_n) = \frac{1}{n} \left( \sum_{i=1}^n x_i y_i \right) - \bar{x}_n \bar{y}_n.$$

Der entsprechende **empirische Korrelationskoeffizient** der Daten  $(x_i, y_i)$ ,  $1 \leq i \leq n$ , ist

$$\varrho[X, Y] = \frac{\text{Cov}[X, Y]}{\sigma[X]\sigma[Y]} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)(y_i - \bar{y}_n)}{\left( \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2 \right)^{1/2} \left( \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_n)^2 \right)^{1/2}}$$

Grafik 3.1 zeigt Datensätze mit verschiedenen Korrelationskoeffizienten  $\varrho$ .

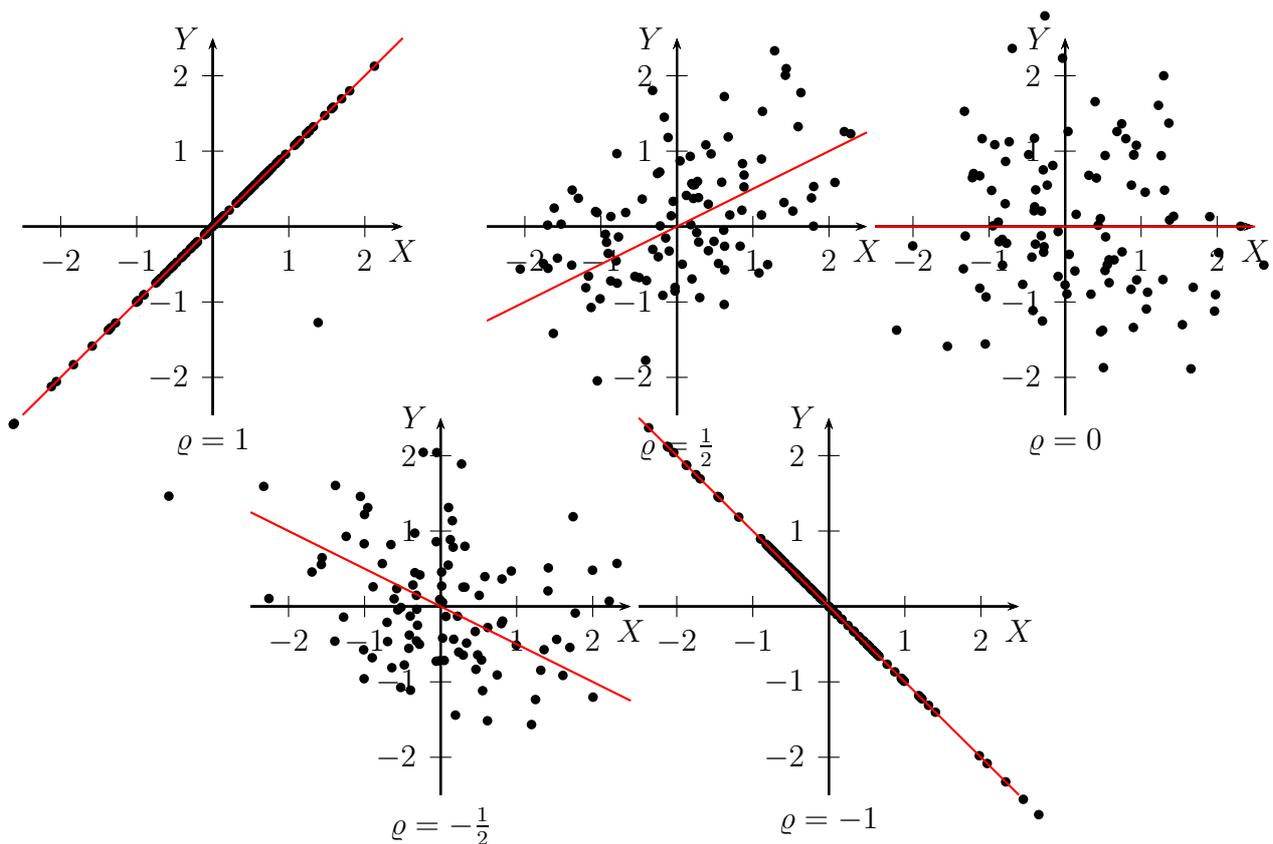


Abbildung 3.1: Korrelationskoeffizienten verschiedener Datensätze

## Unabhängigkeit und Unkorreliertheit

Aus der Unabhängigkeit reellwertiger Zufallsvariablen in  $\mathcal{L}^2$  folgt deren Unkorreliertheit. Allgemeiner gilt sogar:

**Satz 3.2** (Zusammenhang von Unabhängigkeit und Unkorreliertheit). Seien  $X : \Omega \rightarrow S$  und  $Y : \Omega \rightarrow T$  diskrete Zufallsvariablen auf  $(\Omega, \mathcal{A}, P)$ . Dann sind äquivalent:

(i)  $X$  und  $Y$  sind unabhängig.

(ii)  $f(X)$  und  $g(Y)$  sind unkorreliert für beliebige Funktionen  $f : S \rightarrow \mathbb{R}$  und  $g : T \rightarrow \mathbb{R}$  mit  $f(X), g(Y) \in \mathcal{L}^2$ .

**Bemerkung.** Nach Satz 2.7 ist Bedingung (i) äquivalent zu

$$P[X \in A, Y \in B] = P[X \in A] P[Y \in B] \quad \text{für alle } A, B \in \mathcal{A}.$$

Entsprechend ist Bedingung (ii) genau dann erfüllt, wenn

$$E[f(X)g(Y)] = E[f(X)] E[g(Y)] \quad \text{für alle } f, g : S \rightarrow \mathbb{R} \quad \text{mit } f(X), g(Y) \in \mathcal{L}^2.$$

*Beweis.* (i) $\Rightarrow$ (ii): Sind  $X$  und  $Y$  unabhängig, und  $f(X), g(Y) \in \mathcal{L}^2$ , dann folgt

$$\begin{aligned} E[f(X)g(Y)] &= \sum_{a \in S} \sum_{b \in T} f(a) g(b) P[X = a, Y = b] \\ &= \sum_{a \in S} f(a) P[X = a] \sum_{b \in T} g(b) P[Y = b] = E[f(X)] E[g(Y)]. \end{aligned}$$

(ii) $\Rightarrow$ (i): Durch Wahl von  $f = I_{\{a\}}$  und  $g = I_{\{b\}}$  folgt aus (ii) für  $a \in S$  und  $b \in T$ :

$$\begin{aligned} P[X = a, Y = b] &= E[I_{\{a\}}(X) I_{\{b\}}(Y)] \\ &= E[I_{\{a\}}(X)] E[I_{\{b\}}(Y)] = P[X = a] P[Y = b]. \end{aligned}$$

□

Das folgende einfache Beispiel zeigt, dass allein aus der Unkorreliertheit zweier Zufallsvariablen  $X$  und  $Y$  nicht deren Unabhängigkeit folgt.

**Beispiel** (Unkorreliertheit ohne Unabhängigkeit). Sei  $X = +1, 0$ , bzw.  $-1$ , jeweils mit Wahrscheinlichkeit  $1/3$ , und sei  $Y = X^2$ . Dann sind  $X$  und  $Y$  nicht unabhängig, aber unkorreliert, denn

$$\begin{aligned} P[X = 0, Y = 0] &= 1/3 \neq 1/9 = P[X = 0] P[Y = 0], \\ E[XY] &= 0 = E[X] E[Y]. \end{aligned}$$

## 3.2 Das schwache Gesetz der großen Zahlen

Seien  $X_1, X_2, \dots : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  Zufallsvariablen, die auf einem gemeinsamen Wahrscheinlichkeitsraum  $(\Omega, \mathcal{A}, P)$  definiert sind (z.B. wiederholte Ausführungen desselben Zufallsexperiments), und sei

$$S_n(\omega) = X_1(\omega) + \dots + X_n(\omega).$$

Wir betrachten die empirischen Mittelwerte

$$\frac{S_n(\omega)}{n} = \frac{X_1(\omega) + \dots + X_n(\omega)}{n},$$

d.h. die arithmetischen Mittel der ersten  $n$  Beobachtungswerte  $X_1(\omega), \dots, X_n(\omega)$ . Gesetze der großen Zahlen besagen, dass sich unter geeigneten Voraussetzungen die zufälligen „Fluktuationen“ der  $X_i$  für große  $n$  wegmitteln, d.h. in einem noch zu präzisierenden Sinn gilt

$$\frac{S_n(\omega)}{n} \approx E\left[\frac{S_n}{n}\right] \quad \text{für große } n,$$

bzw.

$$\frac{S_n}{n} - \frac{E[S_n]}{n} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0. \quad (3.2.1)$$

Ist insbesondere  $E[X_i] = m$  für alle  $i$ , dann sollten die empirischen Mittelwerte  $S_n/n$  gegen  $m$  konvergieren. Das folgende einfache Beispiel zeigt, dass wir ohne weitere Voraussetzungen an die Zufallsvariablen  $X_i$  kein Gesetz der großen Zahlen erwarten können.

**Beispiel.** Sind die Zufallsvariablen  $X_i$  alle gleich, d.h.  $X_1 = X_2 = \dots$ , so gilt  $\frac{S_n}{n} = X_1$  für alle  $n$ . Es gibt also kein Wegmitteln des Zufalls, somit kein Gesetz großer Zahlen.

Andererseits erwartet man ein Wegmitteln des Zufalls bei *unabhängigen* Wiederholungen desselben Zufallsexperiments. Wir werden nun zeigen, dass sogar im Unkorreliertheit und beschränkte Varianzen der Zufallsvariablen  $X_i$  genügen, um ein Gesetz der großen Zahlen zu erhalten. Dazu berechnen wir die Varianzen der Mittelwerte  $S_n/n$ , und schätzen anschließend die Wahrscheinlichkeiten, dass die zentrierten Mittelwerte in (3.2.1) einen Wert größer als  $\varepsilon$  annehmen, durch die Varianzen ab.

### Varianz von Summen

**Lemma 3.3.** Für Zufallsvariablen  $X_1, \dots, X_n \in \mathcal{L}^2$  gilt:

$$\text{Var}[X_1 + \dots + X_n] = \sum_{i=1}^n \text{Var}[X_i] + 2 \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^n \text{Cov}[X_i, X_j].$$

Falls  $X_1, \dots, X_n$  unkorreliert sind, folgt insbesondere:

$$\text{Var}[X_1 + \dots + X_n] = \sum_{i=1}^n \text{Var}[X_i].$$

*Beweis.* Aufgrund der Bilinearität und Symmetrie der Kovarianz gilt

$$\begin{aligned} \text{Var}[X_1 + \dots + X_n] &= \text{Cov} \left[ \sum_{i=1}^n X_i, \sum_{j=1}^n X_j \right] = \sum_{i,j=1}^n \text{Cov}[X_i, X_j] \\ &= \sum_{i=1}^n \text{Var}[X_i] + 2 \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^n \text{Cov}[X_i, X_j]. \end{aligned}$$

□

**Beispiel** (Varianz der Binomialverteilung). Eine mit Parametern  $n$  und  $p$  binomialverteilte Zufallsvariable ist gegeben durch  $S_n = \sum_{i=1}^n X_i$  mit unabhängigen, Bernoulli ( $p$ )-verteilten Zufallsvariablen  $X_i$ , d.h.

$$X_i = \begin{cases} 1 & \text{mit Wahrscheinlichkeit } p, \\ 0 & \text{mit Wahrscheinlichkeit } 1 - p. \end{cases}$$

Mit Lemma 3.3 erhalten wir für die Varianz der Binomialverteilung:

$$\text{Var}[S_n] = \sum_{i=1}^n \text{Var}[X_i] = n p (1 - p).$$

Insbesondere ist die Standardabweichung einer binomialverteilten Zufallsvariable von der Ordnung  $O(\sqrt{n})$ .

### Čebyšev-Ungleichung und Beweis des GGZ

Für den Beweis des Gesetzes der großen Zahlen nehmen wir an, dass  $X_1, X_2, \dots$  diskrete Zufallsvariablen aus  $\mathcal{L}^2(\Omega, \mathcal{A}, P)$  sind, die folgende Voraussetzungen erfüllen:

ANNAHMEN:

(i) Die Zufallsvariablen sind unkorreliert:

$$\text{Cov}[X_i, X_j] = 0 \quad \text{für alle } i \neq j.$$

(ii) Die Varianzen sind beschränkt:

$$v := \sup_{i \in \mathbb{N}} \text{Var}(X_i) < \infty.$$

## 8 KAPITEL 3. KONVERGENZSÄTZE FÜR ZUFALLSVARIABLEN UND VERTEILUNGEN

Es wird **keine Unabhängigkeit vorausgesetzt!**

**Satz 3.4** (Schwaches Gesetz der großen Zahlen). *Unter den Voraussetzungen (i) und (ii) gilt für alle  $\varepsilon > 0$  und  $n \in \mathbb{N}$ :*

$$P \left[ \left| \frac{S_n}{n} - \frac{E[S_n]}{n} \right| \geq \varepsilon \right] \leq \frac{v}{\varepsilon^2 n}.$$

*Ist insbesondere  $E[X_i] = m$  für alle  $i \in \mathbb{N}$ , dann **konvergieren** die Mittelwerte **stochastisch** gegen den Erwartungswert  $m$ , d.h.*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P \left[ \left| \frac{S_n}{n} - \frac{E[S_n]}{n} \right| \geq \varepsilon \right] = 0 \quad \text{für jedes } \varepsilon > 0.$$

Zum Beweis benötigen wir die folgende wichtige Ungleichung:

**Lemma 3.5** (Čebyšev-Ungleichung). *Für  $X \in \mathcal{L}^2$  und  $c > 0$  gilt:*

$$P[|X - E[X]| \geq c] \leq \frac{1}{c^2} \text{Var}[X].$$

*Beweis.* Es gilt

$$I_{\{|X - E[X]| \geq c\}} \leq \frac{1}{c^2} (X - E[X])^2,$$

denn der Term auf der rechten Seite ist nichtnegativ und  $\geq 1$  auf  $\{|X - E[X]| \geq c\}$ . Durch Bilden des Erwartungswerts folgt

$$P[|X - E[X]| \geq c] = E[I_{\{|X - E[X]| \geq c\}}] \leq E\left[\frac{1}{c^2} (X - E[X])^2\right] = \frac{1}{c^2} E[(X - E[X])^2].$$

□

Der Beweis des Gesetzes der großen Zahlen ergibt sich nun unmittelbar aus Lemma 3.3 und 3.5:

*Beweis von Satz 3.4.* Nach der Čebyšev-Ungleichung und den Annahmen (i) und (ii) gilt

$$P \left[ \left| \frac{S_n}{n} - \frac{E[S_n]}{n} \right| \geq \varepsilon \right] \leq \frac{1}{\varepsilon^2} \text{Var} \left[ \frac{S_n}{n} \right] = \frac{1}{n^2 \varepsilon^2} \text{Var} \left[ \sum_{i=1}^n X_i \right] = \frac{1}{n^2 \varepsilon^2} \sum_{i=1}^n \text{Var}[X_i] \leq \frac{v}{n \varepsilon^2}.$$

für alle  $\varepsilon > 0$  und  $n \in \mathbb{N}$ .

□

**Bemerkung** (Starkes Gesetz der großen Zahlen). In der Vorlesung »Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie« wird gezeigt, dass unter den Voraussetzungen von Satz 3.4 sogar ein **starkes Gesetz der großen Zahlen** gilt, d.h.

$$\frac{S_n(\omega)}{n} \longrightarrow m \quad \text{mit Wahrscheinlichkeit 1.}$$

**BIS HIER ÜBERARBEITET**

### 3.3 Gleichgewichte von Markov-Ketten

Sei  $S$  eine abzählbare Menge,  $\nu$  eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf  $S$ , und  $p(x, y)$ , ( $x, y \in S$ ), eine **stochastische Matrix** bzw. **Übergangsmatrix**, d.h.  $p(x, y)$  erfüllt die folgenden Bedingungen:

- (i)  $p(x, y) \geq 0$  für alle  $x, y \in S$ ,
- (ii)  $\sum_{y \in S} p(x, y) = 1$  für alle  $x \in S$ .

Hier und im folgenden bezeichnen wir diskrete Wahrscheinlichkeitsverteilungen und die entsprechenden Massenfunktionen mit demselben Buchstaben, d.h.  $\nu(x) := \nu(\{x\})$ .

**Definition.** Eine Folge  $X_0, X_1, \dots: \Omega \rightarrow S$  von Zufallsvariablen auf einem Wahrscheinlichkeitsraum  $(\Omega, \mathcal{A}, P)$  heißt **zeitlich homogene Markov-Kette** mit Startverteilung  $\nu$  und Übergangsmatrix  $p$ , falls die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

- (i) Für alle  $x_0 \in S$  gilt:

$$P[X_0 = x_0] = \nu(x_0)$$

- (ii) Für alle  $n \in \mathbb{N}$  und  $x_0, \dots, x_{n+1} \in S$  mit  $P[X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n] \neq 0$  gilt:

$$P[X_{n+1} = x_{n+1} \mid X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n] = p(x_n, x_{n+1}).$$

**Bemerkung.** Die Bedingungen (i) und (ii) sind äquivalent zu:

$$P[X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n] = \nu(x_0) p(x_0, x_1) \cdots p(x_{n-1}, x_n) \quad \text{für alle } n \in \mathbb{N}, x_i \in S.$$

#### Gleichgewichte und Stationarität

Für eine Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\mu$  mit Massenfunktion  $\mu(x) = \mu(\{x\})$  und eine stochastische Matrix  $p$  auf  $S$  setzen wir

$$(\mu p)(y) := \sum_{x \in S} \mu(x) p(x, y), \quad (y \in S),$$

d.h.  $\mu p$  ist der Zeilenvektor, den wir erhalten, wenn wir den Zeilenvektor  $(\mu(x))_{x \in S}$  von links an die Matrix  $p$  multiplizieren.

**Lemma 3.6.** *i) Die Verteilung zur Zeit  $n$  einer Markov-Kette mit Startverteilung  $\nu$  und Übergangsmatrix  $p$  ist  $\nu p^n$ .*

ii) Gilt  $\nu p = \nu$ , dann folgt  $X_n \sim \nu$  für alle  $n \in \mathbb{N}$ . (»Stationarität«)

*Beweis.* i) Wie im Beweis von Satz 2.4 erhalten wir

$$P[X_n = y \mid X_0 = x] = p^n(x, y)$$

für alle  $n \in \mathbb{N}$  und  $x, y \in S$  mit  $P[X_0 = x] \neq 0$ , und damit:

$$\begin{aligned} P[X_n = y] &= \sum_{\substack{x \in S \\ P[X_0 = x] \neq 0}} P[X_n = y \mid X_0 = x] P[X_0 = x] \\ &= \sum_{\substack{x \in S \\ \nu(x) \neq 0}} p^n(x, y) \nu(x) = (\nu p^n)(y). \end{aligned}$$

ii) Aus  $\nu p = \nu$  folgt  $\nu p^n = \nu$  für alle  $n \in \mathbb{N}$ .

□

**Definition.** i) Eine Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\mu$  auf  $S$  heißt **Gleichgewichtsverteilung** (oder **stationäre Verteilung**) der Übergangsmatrix  $p$ , falls  $\mu p = \mu$ , d.h. falls:

$$\sum_{x \in S} \mu(x) p(x, y) = \mu(y) \quad \text{für alle } y \in S.$$

ii)  $\mu$  erfüllt die **Detailed Balance-Bedingung** bzgl. der Übergangsmatrix  $p$ , falls gilt:

$$\mu(x) p(x, y) = \mu(y) p(y, x) \quad \text{für alle } x, y \in S \quad (3.3.1)$$

**Satz 3.7.** Erfüllt  $\mu$  die Detailed Balance-Bedingung (3.3.1), dann ist  $\mu$  eine Gleichgewichtsverteilung von  $p$ .

*Beweis.* Aus der Detailed Balance-Bedingung folgt:

$$\sum_{x \in S} \mu(x) p(x, y) = \sum_{x \in S} \mu(y) p(y, x) = \mu(y).$$

□

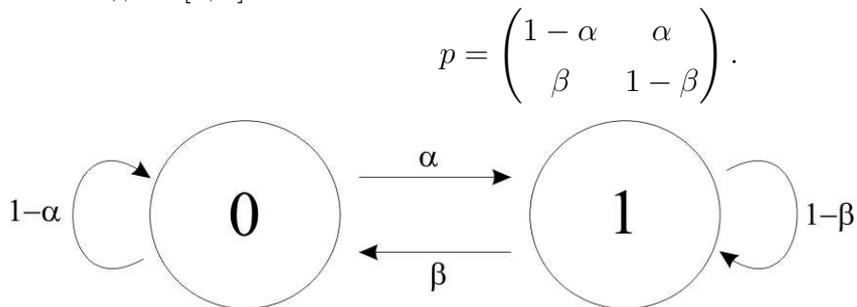
**Bemerkung.** Bei Startverteilung  $\mu$  gilt:

$$\mu(x) p(x, y) = P[X_0 = x, X_1 = y], \quad \text{»Fluss von } x \text{ nach } y\text{«.}$$

DETAILED BALANCE:  $\mu(x) p(x, y) = \mu(y) p(y, x)$   
 »Fluss von  $x$  nach  $y$ « = »Fluss von  $y$  nach  $x$ «  
 GLEICHGEWICHT:  $\sum_{x \in S} \mu(x) p(x, y) = \sum_{x \in S} \mu(y) p(y, x)$   
 »Gesamter Fluss nach  $y$ « = »Gesamter Fluss von  $y$ «.

**Beispiele.** a) MARKOV-KETTE AUF  $S = \{0, 1\}$ :

Seien  $\alpha, \beta \in [0, 1]$  und



Dann ist die Gleichgewichtsbedingung  $\mu p = \mu$  äquivalent zu den folgenden Gleichungen:

$$\begin{aligned} \mu(0) &= \mu(0) (1 - \alpha) + \mu(1) \beta, \\ \mu(1) &= \mu(0) \alpha + \mu(1) (1 - \beta). \end{aligned}$$

Da  $\mu$  eine Wahrscheinlichkeitsverteilung ist, sind beide Gleichungen äquivalent zu

$$\beta (1 - \mu(0)) = \alpha \mu(0).$$

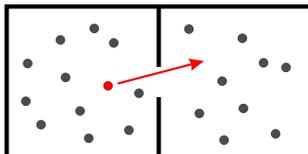
Die letzte Gleichung ist äquivalent zur Detailed Balance-Bedingung (3.3.1). Falls  $\alpha + \beta > 0$  gilt, ist  $\mu = \left( \frac{\beta}{\alpha + \beta}, \frac{\alpha}{\alpha + \beta} \right)$  die eindeutige Gleichgewichtsverteilung und erfüllt die Detailed Balance-Bedingung. Falls  $\alpha = \beta = 0$  gilt, ist jede Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\mu$  eine Gleichgewichtsverteilung mit Detailed Balance-Bedingung.

b) ZYKLISCHER RANDOM WALK: Sei  $S = \mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$  ein diskreter Kreis, und

$$p(k, k + 1) = p, \quad p(k, k - 1) = 1 - p.$$

Die Gleichverteilung  $\mu(x) = \frac{1}{n}$  ist ein Gleichgewicht. Die Detailed Balance-Bedingung ist dagegen nur für  $p = \frac{1}{2}$ , d.h. im symmetrischen Fall, erfüllt.

c) EHRENFEST-MODELL:



Sei  $S = \{0, 1, \dots, n\}$ ,

$$p(k, k - 1) = \frac{k}{n}, \quad p(k, k + 1) = \frac{n - k}{n}.$$

## KAPITEL 3. KONVERGENZSÄTZE FÜR ZUFALLSVARIABLEN UND VERTEILUNGEN

Man kann erwarten, dass sich im Gleichgewicht jede Kugel mit Wahrscheinlichkeit  $\frac{1}{2}$  in jeder der beiden Urnen befindet. Tatsächlich erfüllt die Binomialverteilung  $\mu(k) = \binom{n}{k} 2^{-n}$  mit Parameter  $p = \frac{1}{2}$  die Detailed Balance-Bedingung:

$$\mu(k-1) p(k-1, k) = \mu(k) p(k, k-1) \quad k = 1, \dots, n$$

ist äquivalent zu

$$2^{-n} \frac{n!}{(k-1)!(n-(k-1))!} \frac{n-(k-1)}{n} = 2^{-n} \frac{n!}{k!(n-k)!} \frac{k}{n} \quad k = 1, \dots, n$$

### d) RANDOM WALKS AUF GRAPHEN:

Sei  $(V, E)$  ein endlicher Graph,  $S = V$  die Menge der Knoten.

- Sei

$$p(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{\deg(x)} & \text{falls } \{x, y\} \in E, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Die Detailed Balance-Bedingung lautet in diesem Fall:

$$\mu(x) p(x, y) = \mu(y) p(y, x).$$

Sie ist erfüllt, falls

$$\mu(x) = c \deg(x)$$

gilt, wobei  $c$  eine Konstante ist. Damit  $\mu$  eine Wahrscheinlichkeitsverteilung ist, muss  $c$  so gewählt werden, dass gilt:

$$\sum_{x \in B} \deg(x) = 2|E|.$$

Somit ist die Gleichgewichtsverteilung:

$$\mu(x) = \frac{\deg(x)}{2|E|}.$$

- Sei  $\Delta := \max_{x \in V} \deg(x)$ ,

$$p(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta} & \text{falls } \{x, y\} \in E, \\ 1 - \frac{\deg(x)}{\Delta} & \text{sonst.} \end{cases}$$

Es gilt  $p(x, y) = p(y, x)$  und somit ist die Gleichverteilung auf  $V$  die stationäre Verteilung.

Ist  $\deg(x)$  konstant, dann stimmen die Random Walks in beiden Beispielen überein, und die Gleichverteilung ist ein Gleichgewicht.

Im nächsten Abschnitt zeigen wir:

**Satz** (Konvergenzsatz für Markov-Ketten). *Ist  $S$  endlich, und  $p$  eine irreduzible und aperiodische stochastische Matrix mit Gleichgewicht  $\mu$ , dann gilt für alle Wahrscheinlichkeitsverteilungen  $\nu$  auf  $S$ :*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (\nu p^n)(x) = \mu(x) \quad \text{für alle } x \in S.$$

Aufgrund des Konvergenzsatzes können wir Stichproben von einer Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\mu$  näherungsweise erzeugen, indem wir eine Markov-Kette  $X_n$  mit Gleichgewicht  $\mu$  simulieren, und für großes  $n$  auswerten. Wie findet man eine Markov-Kette mit einer vorgegebenen stationären Verteilung?

### 3.4 Konvergenz ins Gleichgewicht

Sei  $S = \{x_1, \dots, x_m\}$  eine endliche Menge, und

$$\text{WV}(S) := \left\{ \mu = (\mu(x_1), \dots, \mu(x_m)) \mid \mu(x_i) \geq 0, \sum_{i=1}^m \mu(x_i) = 1 \right\} \subseteq \mathbb{R}^m$$

die Menge aller Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf  $S$ . Geometrisch ist  $\text{WV}(S)$  ein Simplex im  $\mathbb{R}^m$ . Wir führen nun einen Abstandsbegriff auf  $\text{WV}(S)$  ein:

**Definition.** Die *Variationsdistanz* zweier Wahrscheinlichkeitsverteilungen  $\mu, \nu$  auf  $S$  ist:

$$d_{TV}(\mu, \nu) := \frac{1}{2} \|\mu - \nu\|_1 = \frac{1}{2} \sum_{x \in S} |\mu(x) - \nu(x)|.$$

**Bemerkung.** a) Für alle  $\mu, \nu \in \text{WV}(S)$  gilt:

$$d_{TV}(\mu, \nu) \leq \frac{1}{2} \sum_{x \in S} (\mu(x) + \nu(x)) = 1.$$

b) Seien  $\mu, \nu$  Wahrscheinlichkeitsverteilungen und  $A := \{x \in S \mid \mu(x) \geq \nu(x)\}$ . Dann gilt:

$$d_{TV}(\mu, \nu) = \sum_{x \in A} (\mu(x) - \nu(x)) = \max_{A \subseteq S} |\mu(A) - \nu(A)|.$$

Der Beweis dieser Aussage ist eine Übungsaufgabe.

## KAPITEL 3. KONVERGENZSÄTZE FÜR ZUFALLSVARIABLEN UND VERTEILUNGEN

Wir betrachten im folgenden eine stochastische Matrix  $p(x, y)$ ,  $(x, y \in S)$ , mit Gleichgewicht  $\mu$ . Die Verteilung einer Markov-Kette mit Startverteilung  $\nu$  und Übergangsmatrix  $p$  zur Zeit  $n$  ist  $\nu p^n$ . Um Konvergenz ins Gleichgewicht zu zeigen, verwenden wir die folgende Annahme:

**MINORISIERUNGSBEDINGUNG:** Es gibt ein  $\delta \in (0, 1]$  und ein  $r \in \mathbb{N}$ , so dass für alle  $x, y \in S$  gilt:

$$p^r(x, y) \geq \delta \cdot \mu(y). \quad (3.4.1)$$

**Satz 3.8.** *Gilt die Minorisierungsbedingung (3.4.1), dann konvergiert  $\nu p^n$  für jede Startverteilung  $\nu$  exponentiell schnell gegen  $\mu$ . Genauer gilt für alle  $n \in \mathbb{N}$  und  $\nu \in \text{WV}(S)$ :*

$$d_{TV}(\nu p^n, \mu) \leq (1 - \delta)^{\lfloor n/r \rfloor}.$$

**Bemerkung.** Insbesondere ist  $\mu$  das **eindeutige** Gleichgewicht: Betrachte eine beliebige Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\nu$  mit  $\nu p = \nu$ . Dann folgt für  $n \rightarrow \infty$ :

$$d_{TV}(\nu, \mu) = d_{TV}(\nu p^n, \mu) \rightarrow 0,$$

also  $d_{TV}(\mu, \nu) = 0$ , und somit  $\mu = \nu$ .

*Beweis.* 1. Durch die Zerlegung

$$p^r(x, y) = \delta \mu(y) + (1 - \delta) q(x, y)$$

der  $r$ -Schritt-Übergangswahrscheinlichkeiten wird eine **stochastische** Matrix  $q$  definiert, denn

- (i) Aus der Minorisierungsbedingung (3.4.1) folgt  $q(x, y) \geq 0$  für alle  $x, y \in S$ .
- (ii) Aus  $\sum_{y \in S} p^r(x, y) = 1$ ,  $\sum_{y \in S} \mu(y) = 1$  folgt  $\sum_{y \in S} q(x, y) = 1$  für alle  $x \in S$ .

Wir setzen im folgenden  $\lambda := 1 - \delta$ . Dann gilt für alle  $\nu \in \text{WV}(S)$ :

$$\nu p^r = (1 - \lambda) \mu + \lambda \nu q. \quad (3.4.2)$$

2. Wir wollen mit vollständiger Induktion zeigen:

$$\nu p^{kr} = (1 - \lambda^k) \mu + \lambda^k \nu q^k \quad \text{für alle } k \geq 0, \quad \nu \in \text{WV}(S). \quad (3.4.3)$$

Für  $k = 0$  ist die Aussage offensichtlich wahr. Gilt (3.4.3) für ein  $k \geq 0$ , dann erhalten wir durch Anwenden von Gleichung (3.4.2) auf  $\tilde{\nu} p^r$  mit  $\tilde{\nu} = \nu q^k$ :

$$\begin{aligned} \nu p^{(k+1)r} &= \nu p^{kr} p^r \\ &= ((1 - \lambda^k) \mu + \lambda^k \underbrace{\nu q^k}_{=\tilde{\nu}}) p^r \\ &= (1 - \lambda^k) \underbrace{\mu p^r}_{=\mu} + (1 - \lambda) \lambda^k \mu + \lambda^{k+1} \nu q^k q \\ &= (1 - \lambda^{k+1}) \mu + \lambda^{k+1} \nu q^{k+1}. \end{aligned}$$

3. Für  $n \in \mathbb{N}$ ,  $n = kr + i$ , ( $k \in \mathbb{N}$ ,  $0 \leq i < r$ ), folgt:

$$\nu p^n = \nu p^{kr} p^i = (1 - \lambda^k) \underbrace{\mu p^i}_{=\mu} + \lambda^k \nu q^k p^i,$$

also

$$\nu p^n - \mu = \lambda^k (\nu q^k p^i - \mu) \quad \text{für alle } \nu \in \text{WV}(S),$$

und damit

$$d_{TV}(\nu p^n, \mu) = \frac{1}{2} \|\nu p^n - \mu\|_1 = \lambda^k d_{TV}(\nu q^k p^i, \mu) \leq \lambda^k$$

nach der letzten Bemerkung.

□

Welche Übergangsmatrizen erfüllen die Minorisierungsbedingung?

**Definition.** i) Die stochastische Matrix  $p$  heißt **irreduzibel**, falls es für alle  $x, y \in S$  ein  $n \in \mathbb{N}$  gibt, so dass  $p^n(x, y) > 0$  gilt.

ii) Die **Periode** von  $x \in S$  ist definiert als

$$\text{Periode}(x) := \text{ggT}(\underbrace{\{n \in \mathbb{N} \mid p^n(x, x) > 0\}}_{=:R(x)}).$$

**Lemma 3.9.** i) Falls  $p$  irreduzibel ist, gilt  $\text{Periode}(x) = \text{Periode}(y)$  für alle  $x, y \in S$ .

ii) Falls  $p$  irreduzibel und aperiodisch (d.h.  $\text{Periode}(x) = 1$  für alle  $x \in S$ ) ist, gibt es ein  $r > 0$ , so dass  $p^r(x, y) > 0$  für alle  $x, y \in S$  gilt.

*Beweis.* Seien  $x, y \in S$ .

i) Sei  $p$  irreduzibel. Dann gibt es ein  $s$  und ein  $t \in \mathbb{N}$ , so dass gilt:

$$p^s(x, y) > 0 \quad \text{und} \quad p^t(y, x) > 0.$$

Für  $a := s + t$  folgt:

- $p^a(x, x) \geq p^s(x, y) p^t(y, x) > 0$ , also  $a \in R(x)$ .
- $p^{n+a}(x, x) \geq p^s(x, y) p^n(y, y) p^t(y, x) > 0$  für alle  $n \in R(y)$ , also  $n + a \in R(x)$  für alle  $n \in R(y)$ .

Periode( $x$ ) ist ein gemeinsamer Teiler von  $R(x)$ , somit Teiler von  $a$  und  $n + a$ , also auch von  $n$  für alle  $n \in R(y)$ . Daher ist Periode( $x$ ) ein gemeinsamer Teiler von  $R(y)$  und somit gilt:

$$\text{Periode}(x) \leq \text{Periode}(y).$$

» $\geq$ « wird analog gezeigt. Es folgt:

$$\text{Periode}(x) = \text{Periode}(y).$$

ii)  $R(x)$  ist abgeschlossen unter Addition, denn falls  $s, t \in R(x)$  ist, gilt:

$$p^{s+t}(x, x) \geq p^s(x, x) p^t(x, x) > 0,$$

und somit  $s + t \in R(x)$ . Da  $p$  aperiodisch ist, folgt  $\text{ggT}(R(x)) = 1$  für alle  $x \in S$ . Nach einem Satz der Zahlentheorie gilt:

Da  $R(x)$  additiv abgeschlossen, gibt es für alle  $x$  ein  $r(x) \in \mathbb{N}$  mit  $n \in R(x)$  für alle  $n \geq r(x)$ .

$n \in R(x)$  impliziert  $p^n(x, x) > 0$ . Da  $p$  irreduzibel ist, folgt, dass es für alle  $x, y$  ein  $r(x, y) \in \mathbb{N}$  gibt, so dass gilt:

$$p^n(x, y) > 0 \quad \text{für alle } n \geq r(x, y).$$

Für  $r \geq \max_{x, y \in S} r(x, y)$  folgt dann  $p^r(x, y) > 0$  für alle  $x, y \in S$ .

□

**Satz 3.10** (Konvergenzsatz für **endliche** Markov-Ketten). *Ist  $p$  irreduzibel und aperiodisch mit Gleichgewicht  $\mu$ , dann gilt:*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} d_{TV}(\nu p^n, \mu) = 0 \quad \text{für alle } \nu \in \text{WV}(S).$$

*Beweis.* Da  $p$  irreduzibel und aperiodisch ist, gibt es ein  $r \in \mathbb{N}$  mit:

$$p^r(x, y) > 0 \quad \text{für alle } x, y \in S.$$

Daher gibt es ein  $r \in \mathbb{N}$  und ein  $\delta > 0$ , so dass gilt:

$$p^r(x, y) > \delta \mu(y) \quad \text{für alle } x, y \in S,$$

(z.B.  $\delta := \min_{x, y \in S} p^r(x, y)$ ). Mit Satz 3.8 folgt die Behauptung. □

## **Teil II**

# **Numerische Verfahren**

# Kapitel 4

## Stochastische Simulation und Monte-Carlo-Verfahren

### 4.1 Pseudozufallszahlen

Ein **(Pseudo-) Zufallszahlengenerator** ist ein Algorithmus, der eine deterministische Folge von ganzen Zahlen  $x_1, x_2, x_3, \dots$  mit Werten zwischen 0 und einem Maximalwert  $m - 1$  erzeugt, welche durch eine vorgegebene Klasse statistischer Tests nicht von einer Folge von Stichproben unabhängiger, auf  $\{0, 1, 2, \dots, m - 1\}$  gleichverteilter Zufallsgrößen unterscheidbar ist. Ein Zufallszahlengenerator erzeugt also nicht wirklich zufällige Zahlen. Die von »guten« Zufallszahlengeneratoren erzeugten Zahlen haben aber statistische Eigenschaften, die denen von echten Zufallszahlen in vielerlei (aber nicht in jeder) Hinsicht sehr ähnlich sind.

#### Zufallszahlengeneratoren

Konkret werden Pseudozufallszahlen üblicherweise über eine deterministische Rekurrenzrelation vom Typ

$$x_{n+1} = f(x_{n-k+1}, x_{n-k+2}, \dots, x_n), \quad n = k, k + 1, k + 2, \dots,$$

aus **Saatwerten**  $x_1, x_2, \dots, x_k$  erzeugt. In vielen Fällen hängt die Funktion  $f$  nur von der letzten erzeugten Zufallszahl  $x_n$  ab. Wir betrachten einige Beispiele:

#### Lineare Kongruenzgeneratoren (LCG)

Bei linearen Kongruenzgeneratoren ist die Rekurrenzrelation vom Typ

$$x_{n+1} = (ax_n + c) \bmod m, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Hierbei sind  $a$ ,  $c$  und  $m$  geeignet zu wählende positive ganze Zahlen, zum Beispiel:

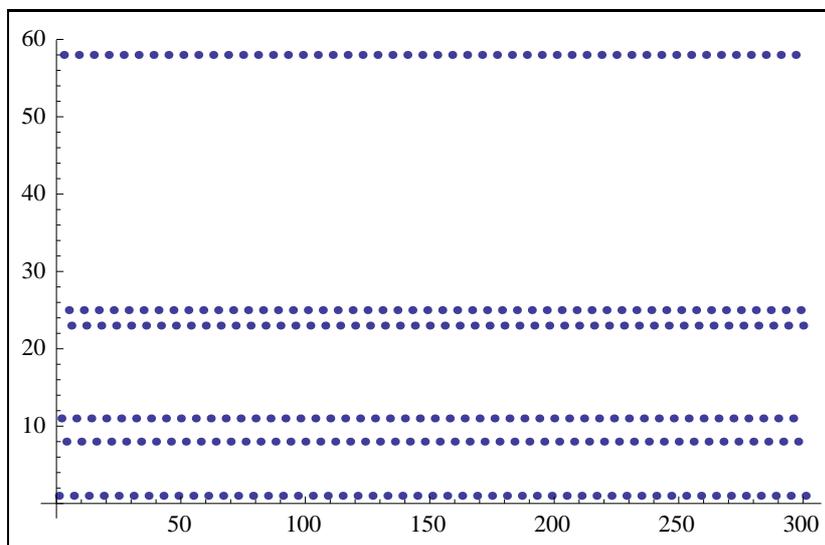
|                       |                    |                         |            |
|-----------------------|--------------------|-------------------------|------------|
| ZX81-Generator :      | $m = 2^{16} + 1$ , | $a = 75$ ,              | $c = 0$ .  |
| RANDU, IBM 360/370 :  | $m = 2^{31}$ ,     | $a = 65539$ ,           | $c = 0$ .  |
| Marsaglia-Generator : | $m = 2^{32}$ ,     | $a = 69069$ ,           | $c = 1$ .  |
| Langlands-Generator : | $m = 2^{48}$ ,     | $a = 142412240584757$ , | $c = 11$ . |

Um einen ersten Eindruck zu erhalten, wie die Qualität der erzeugten Pseudozufallszahlen von  $a$ ,  $c$  und  $m$  abhängt, implementieren wir die Generatoren mit »Mathematica«:

```
f[x_] := Mod[a x + c, m]
```

**Beispiel.** Wir beginnen zur Demonstration mit dem Beispiel eines ganz schlechten LCG:

```
a = 11; c = 0; m = 63; pseudorandomdata = NestList[f, 1, 300];
ListPlot[pseudorandomdata]
```



Die Folge von Zufallszahlen ist in diesem Fall periodisch mit einer Periode, die viel kleiner ist als die maximal mögliche (63). Dies rechnet man auch leicht nach.

Periodizität mit Periode kleiner als  $m$  kann man leicht ausschließen. Es gilt nämlich:

**Satz (Knuth).** *Die Periode eines LCG ist gleich  $m$  genau dann, wenn*

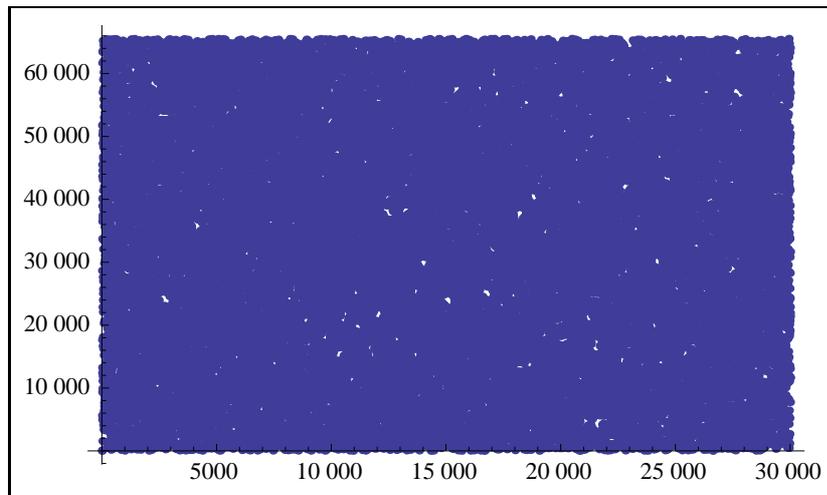
- i)  $c$  und  $m$  teilerfremd sind,*
- ii) jeder Primfaktor von  $m$  ein Teiler von  $a - 1$  ist, und*

iii) falls 4 ein Teiler von  $m$  ist, dann auch von  $a - 1$ .

*Beweis.* siehe D. Knuth: »The art of computer programming, Vol. 2.« □

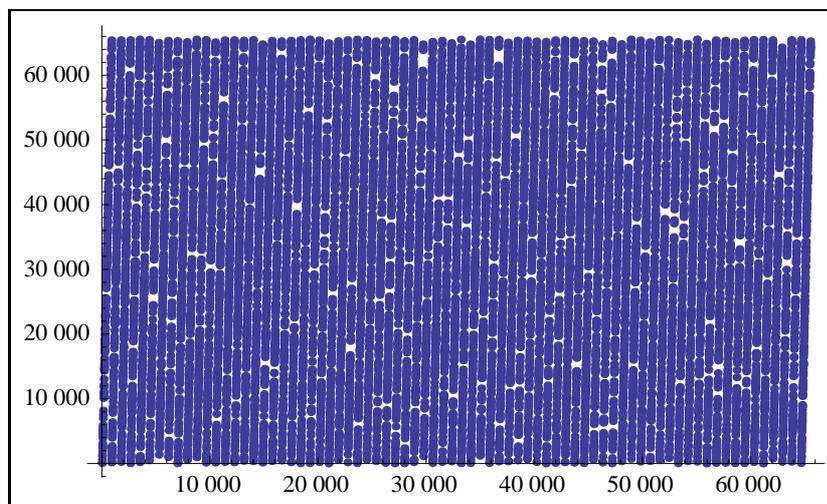
**Beispiel (ZX 81-Generator).** Hier ergibt sich ein besseres Bild, solange wir nur die Verteilung der einzelnen Zufallszahlen betrachten:

```
a = 75; c = 0; m = 2^16 + 1; pseudorandomdata = NestList[f, 1, 30000];
ListPlot[pseudorandomdata]
```



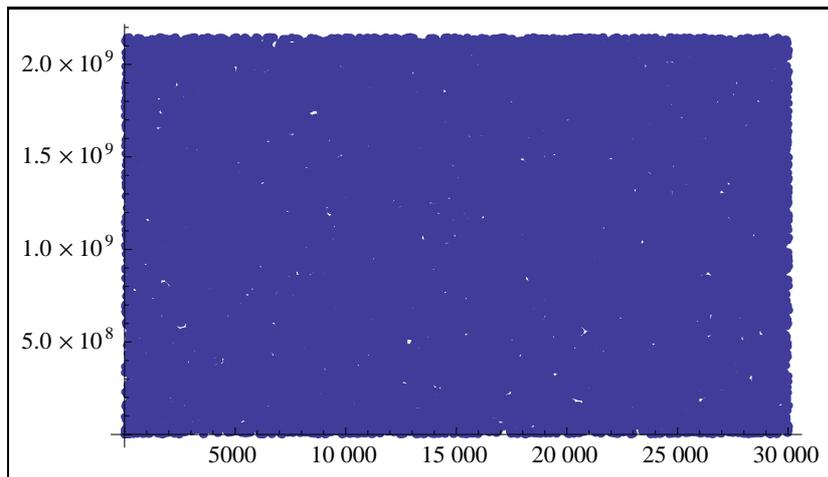
Fassen wir jedoch Paare  $(x_i, x_{i+1})$  von aufeinanderfolgenden Pseudozufallszahlen als Koordinaten eines zweidimensionalen Pseudozufallsvektors auf, und betrachten die empirische Verteilung dieser Vektoren, so ergibt sich keine besonders gute Approximation einer zweidimensionalen Gleichverteilung:

```
blocks = Partition[pseudorandomdata, 2]; ListPlot[blocks]
```

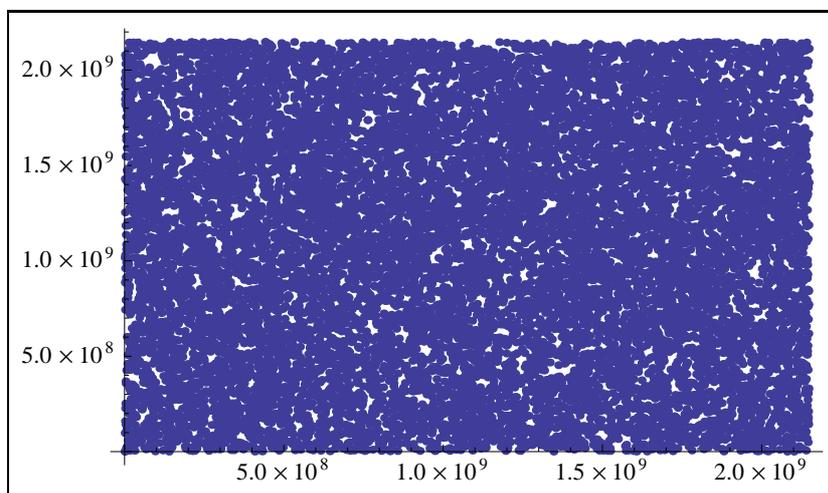


**Beispiel (RANDU).** Hier scheinen sowohl die einzelnen Pseudozufallszahlen  $x_i$  als auch die Vektoren  $(x_i, x_{i+1})$  näherungsweise gleichverteilt zu sein:

```
a = 65539; c = 0; m = 2^31; pseudorandomdata = NestList[f, 1, 30000];
ListPlot[pseudorandomdata]
```

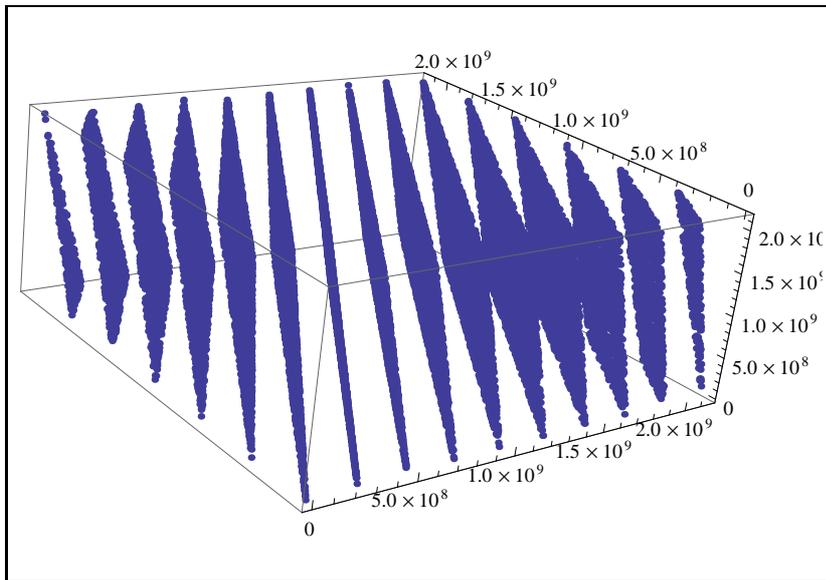


```
blocks = Partition[pseudorandomdata, 2]; ListPlot[blocks]
```



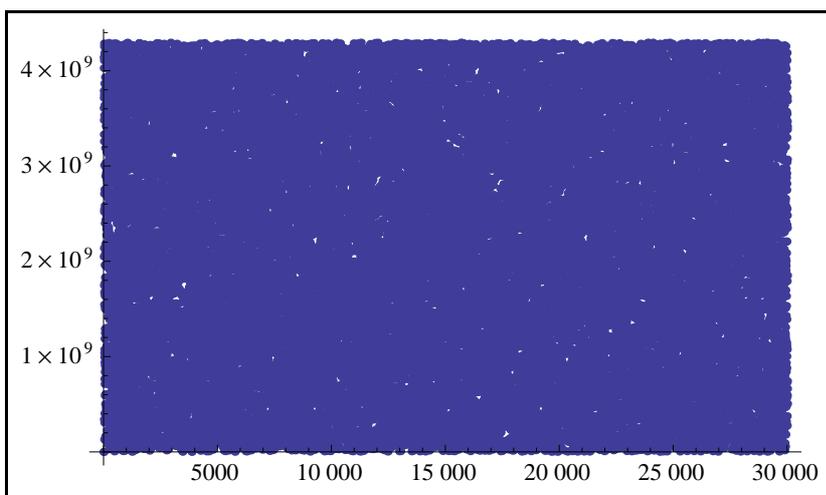
Fassen wir aber jeweils drei aufeinanderfolgende Pseudozufallszahlen als Koordinaten eines Vektors  $(x_i, x_{i+1}, x_{i+2})$  im  $\mathbb{Z}^3$  auf, dann ist die empirische Verteilung dieser Pseudozufallsvektoren keine Gleichverteilung mehr, sondern konzentriert sich auf nur 15 zweidimensionalen Hyperebenen:

```
blocks3 = Partition[pseudorandomdata, 3]; ListPointPlot3D[blocks3]
```

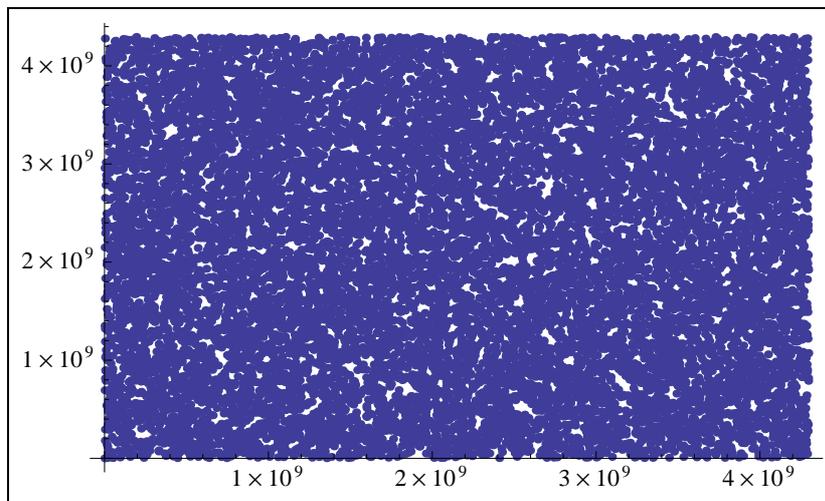


**Beispiel** (Marsaglia-Generator). Der von Marsaglia 1972 vorgeschlagene LCG besteht dagegen alle obigen Tests (und einige weitere):

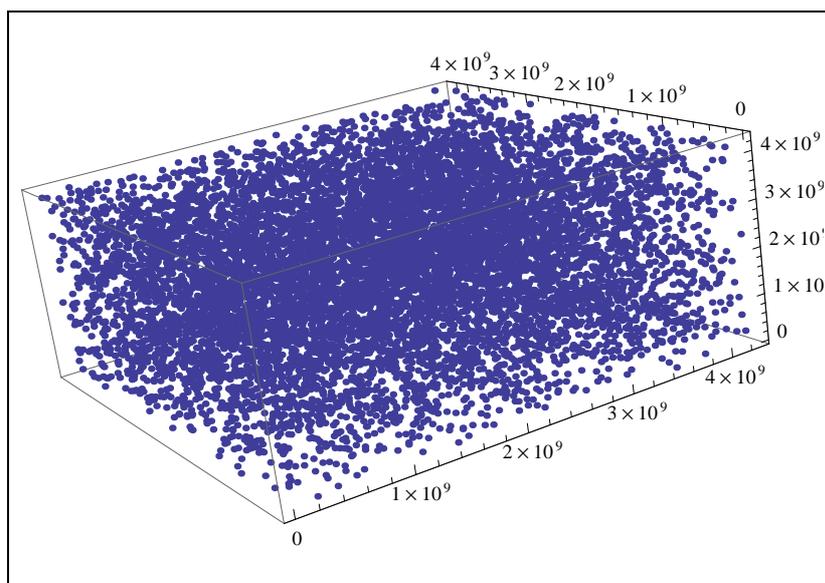
```
a = 60069; c = 1; m = 2^32; pseudorandomdata = NestList[f, 1, 30000];
ListPlot[pseudorandomdata]
```



```
blocks = Partition[pseudorandomdata, 2]; ListPlot[blocks]
```



```
blocks3 = Partition[pseudorandomdata, 3]; ListPointPlot3D[blocks3]
```



Dies bedeutet natürlich nicht, daß die vom Marsaglia-Generator erzeugte Folge eine für *alle* Zwecke akzeptable Approximation einer Folge von unabhängigen Stichproben von der Gleichverteilung ist. Da die Folge in Wirklichkeit deterministisch ist, kann man einen Test konstruieren, der sie von einer echten Zufallsfolge unterscheidet.

### Shift-Register-Generatoren

Bei Shift-Register-Generatoren interpretiert man eine Zahl  $x_n \in \{0, 1, \dots, 2^k - 1\}$  zunächst als Binärzahl bzw. als Vektor aus  $\{0, 1\}^k$ , und wendet dann eine gegebene Matrix  $T$  darauf an, um  $x_{n+1}$  zu erhalten:

$$x_{n+1} = Tx_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

### Kombination von Zufallszahlengeneratoren

Zufallszahlengeneratoren lassen sich kombinieren, zum Beispiel indem man die von mehreren Zufallszahlengeneratoren erzeugten Folgen von Pseudozufallszahlen aus  $\{0, 1, \dots, m - 1\}$  modulo  $m$  addiert. Auf diese Weise erhält man sehr leistungsfähige Zufallszahlengeneratoren, zum Beispiel den Kiss-Generator von Marsaglia, der einen LCG und zwei Shift-Register-Generatoren kombiniert, Periode  $2^{95}$  hat, und umfangreiche statistische Tests besteht.

### Simulation von Gleichverteilungen

#### Zufallszahlen aus $[0,1)$

Ein Zufallszahlengenerator kann natürlich nicht wirklich reelle Pseudozufallszahlen erzeugen, die die Gleichverteilung auf dem Intervall  $[0, 1]$  simulieren, denn dazu würden unendlich viele »zufällige« Nachkommastellen benötigt. Stattdessen werden üblicherweise (pseudo-)zufällige Dezimalzahlen vom Typ

$$u_n = \frac{x_n}{m}, \quad x_n \in \{0, 1, \dots, m - 1\},$$

erzeugt, wobei  $m$  vorgegeben ist (zum Beispiel Darstellungsgenauigkeit des Computers), und  $x_n$  eine Folge ganzzahliger Pseudozufallszahlen aus  $\{0, 1, \dots, m - 1\}$  ist. In »Mathematica« kann man mit

`RandomReal [spec, WorkingPrecision → k]`

pseudozufällige Dezimalzahlen mit einer beliebigen vorgegebenen Anzahl  $k$  von Nachkommastellen erzeugen.

#### Zufallspermutationen

Der folgende Algorithmus erzeugt eine (pseudo-)zufällige Permutation aus  $S_n$  :

#### Algorithmus 4.1 (RPERM).

```
rperm [n_] :=
Module[{x = Range[n], k, a}, Beginn mit Liste 1,2,...,n
Do[
k = RandomInteger[{i, n}];
a = x[[i]]; x[[i]] = x[[k]]; x[[k]] = a; (Vertausche x[[i]] und x[[k]])
, {i, n - 1}]; (Schleife, i läuft von 1 bis n - 1)
x (Ausgabe von x) ]
```

rperm [17] {12, 5, 13, 8, 17, 9, 10, 6, 1, 7, 16, 15, 14, 4, 2, 3, 11}

ÜBUNG:

Sei  $\Omega_n = \{1, 2, \dots, n\} \times \{2, 3, \dots, n\} \times \dots \times \{n-1, n\}$ .

- a) Zeigen Sie, daß die Abbildung  $X(\omega) = \tau_{n-1, \omega_{n-1}} \circ \dots \circ \tau_{2, \omega_2} \circ \tau_{1, \omega_1}$  eine Bijektion von  $\Omega_n$  nach  $S_n$  ist ( $\tau_{i,j}$  bezeichnet die Transposition von  $i$  und  $j$ ).
- b) Folgern Sie, daß der Algorithmus oben tatsächlich eine Stichprobe einer gleichverteilten Zufallspermutation aus  $S_n$  simuliert.

## 4.2 Simulationsverfahren

Die Simulation von Stichproben allgemeinerer Wahrscheinlichkeitsverteilungen geht von der Existenz einer Folge von auf  $[0, 1]$  gleichverteilten Zufallszahlen aus. In Wirklichkeit simuliert ein Zufallszahlengenerator natürlich nur auf  $\{k m^{-1} \mid k = 0, 1, \dots, m-1\}$  gleichverteilte Zufallszahlen, wobei  $m^{-1}$  die Darstellungsgenauigkeit des Computers ist. Außerdem ist eine Folge von Pseudozufallszahlen eigentlich gar nicht zufällig, sondern deterministisch. Diese Aspekte werden im folgenden ignoriert.

Um Simulationsverfahren zu analysieren, benötigen wir noch den Begriff einer auf  $[0, 1]$  gleichverteilten reellwertigen Zufallsvariablen. Die Existenz solcher Zufallsvariablen auf einem geeigneten Wahrscheinlichkeitsraum wird hier vorausgesetzt, und kann erst in der Vorlesung »Analysis III« bzw. in der »Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie« gezeigt werden.

**Definition.** Sei  $(\Omega, \mathcal{A}, P)$  ein Wahrscheinlichkeitsraum, und  $U: \Omega \rightarrow [0, 1]$  eine Abbildung.

(i)  $U$  ist eine **reellwertige Zufallsvariable**, falls gilt:

$$\{\omega \in \Omega \mid U(\omega) \leq y\} \in \mathcal{A} \quad \text{für alle } y \in \mathbb{R}.$$

(ii) Eine reellwertige Zufallsvariable  $U: \Omega \rightarrow [0, 1]$  ist **gleichverteilt auf**  $[0, 1]$ , falls

$$P[U \leq y] = y \quad \text{für alle } y \in [0, 1].$$

Wir notieren dies im folgenden als  $(U \sim \text{Unif}[0, 1])$ .

(iii) Reellwertige Zufallsvariablen  $U_i: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $i \in I$ , heißen **unabhängig**, falls die Ereignisse  $\{U_i \leq y_i\}$ ,  $i \in I$ , für alle  $y_i \in \mathbb{R}$  unabhängig sind.

Ein Zufallszahlengenerator simuliert Stichproben  $u_1 = U_1(\omega)$ ,  $u_2 = U_2(\omega)$ , ... von auf  $[0, 1]$  gleichverteilten unabhängigen Zufallsvariablen. Wie erzeugt man daraus Stichproben von diskreten Verteilungen?

### Das direkte Verfahren

Sei  $S = \{a_1, a_2, \dots\}$  endlich oder abzählbar unendlich, und  $\mu$  eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf  $S$  mit Gewichten  $p_i = p(a_i)$ . Wir setzen

$$s_n := \sum_{i=1}^n p_i, \quad n \in \mathbb{N}, \quad \text{»kumulative Verteilungsfunktion«.}$$

Sei  $U: \Omega \rightarrow [0, 1)$  eine gleichverteilte Zufallsvariable. Wir setzen

$$X(\omega) := a_i, \quad \text{falls } s_{i-1} < U(\omega) \leq s_i, \quad i \in \mathbb{N}.$$

**Lemma 4.2.** Falls  $U \sim \text{Unif}[0, 1)$ , gilt  $X \sim \mu$ .

*Beweis.* Für alle  $i \in \mathbb{N}$  gilt:

$$P[X = a_i] = P[s_{i-1} < U \leq s_i] = P[U \leq s_i] - P[U \leq s_{i-1}] = s_i - s_{i-1} = p_i.$$

□

**Algorithmus 4.3** (Direkte Simulation einer diskreten Verteilung).

INPUT: Gewichte  $p_1, p_2, \dots$ ,

OUTPUT: Pseudozufallsstichprobe  $x$  von  $\mu$ .

$n := 1$

$s := p_1$

erzeuge Zufallszahl  $u \sim \text{Unif}[0, 1)$

**while**  $u > s$  **do**

$n := n + 1$

$s := s + p_n$

**end while**

**return**  $x := a_n$

**Bemerkung.** a) Die mittlere Anzahl von Schritten des Algorithmus ist

$$\sum_{n=1}^{\infty} n p_n = \text{Erwartungswert von Wahrscheinlichkeitsverteilung } (p_n) \text{ auf } \mathbb{N}.$$

b) Für große Zustandsräume  $S$  ist das direkte Verfahren oft nicht praktikabel, siehe Übung.

## Das Acceptance-Rejection-Verfahren

Sei  $S$  eine endliche oder abzählbare Menge,  $\mu$  eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf  $S$  mit Massenfunktion  $p(x)$ , und  $\nu$  eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf  $S$  mit Massenfunktion  $q(x)$ . Angenommen, wir können unabhängige Stichproben von  $\nu$  erzeugen. Wie können wir daraus Stichproben von  $\mu$  erhalten?

IDEE: Erzeuge Stichprobe  $x$  von  $\nu$ , akzeptiere diese mit Wahrscheinlichkeit proportional zu  $\frac{p(x)}{q(x)}$ , sonst verwerfe die Stichprobe und wiederhole.

ANNAHME:

$$\text{es gibt ein } c \in [1, \infty) : \quad p(x) \leq c q(x) \quad \text{für alle } x \in S.$$

Aus der Annahme folgt:

$$\frac{p(x)}{c q(x)} \leq 1 \quad \text{für alle } x \in S,$$

d.h. wir können  $\frac{p(x)}{c q(x)}$  als **Akzeptanzwahrscheinlichkeit** wählen.

**Algorithmus 4.4** (Acceptance-Rejection-Verfahren).

INPUT: Gewichte  $p(y), q(y), c$  ( $y \in S$ ),

OUTPUT: Stichprobe  $x$  von  $\mu$ .

**repeat**

    erzeuge Stichprobe  $x \sim \nu$

    erzeuge Stichprobe  $u \sim \text{Unif}[0, 1]$

**until**  $\frac{p(x)}{c q(x)} \geq u$  { akzeptiere mit Wahrscheinlichkeit  $\frac{p(x)}{c q(x)}$  }

**return**  $x$

ANALYSE DES ALGORITHMUS

Für die verwendeten Zufallsvariablen gilt:

$$X_1, X_2, \dots \sim \nu, \quad (\text{Vorschläge}),$$

$$U_1, U_2, \dots \sim \text{Unif}[0, 1].$$

Es gilt Unabhängigkeit, d.h.

$$P[X_1 = a_1, \dots, X_n = a_n, U_1 \leq y_1, \dots, U_n \leq y_n] = \prod_{i=1}^n P[X_i = a_i] \cdot \prod_{i=1}^n P[U_i \leq y_i]$$

für alle  $n \in \mathbb{N}$ ,  $a_i \in S$  und  $y_i \in \mathbb{R}$ .

Seien

$$T = \min \left\{ n \in \mathbb{N} \mid \frac{p(X_n)}{c q(X_n)} \geq U_n \right\} \quad \text{die »Akzeptanzzeit«, und}$$

$$X_T(\omega) = X_{T(\omega)}(\omega) \quad \text{die ausgegebene Stichprobe.}$$

des Acceptance-Rejection-Verfahrens. Wir erhalten:

**Satz 4.5.** (i)  $T$  ist *geometrisch verteilt* mit Parameter  $1/c$ ,

(ii)  $X_T \sim \mu$ .

**Bemerkung.** Insbesondere ist die mittlere Anzahl von Schritten bis Akzeptanz:

$$E[T] = c.$$

*Beweis.* i) Sei

$$A_n := \left\{ \frac{p(X_n)}{c q(X_n)} \geq U_n \right\}.$$

Aus der Unabhängigkeit der Zufallsvariablen  $X_1, U_1, X_2, U_2, \dots$  folgt, dass auch die Ereignisse  $A_1, A_2, \dots$  unabhängig sind. Dies wird in der Vorlesung »Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie« bewiesen. Zudem gilt wegen der Unabhängigkeit von  $X_n$  und  $U_n$ :

$$\begin{aligned} P[A_n] &= \sum_{a \in S} P \left[ \left\{ U_n \leq \frac{p(a)}{c q(a)} \right\} \cap \{X_n = a\} \right] \\ &= \sum_{a \in S} P \left[ \left\{ U_n \leq \frac{p(a)}{c q(a)} \right\} \right] \cdot P[X_n = a] \\ &= \sum_{a \in S} \frac{p(a)}{c q(a)} \cdot q(a) = \frac{1}{c}. \end{aligned}$$

Also ist

$$T(\omega) = \min\{n \in \mathbb{N} \mid \omega \in A_n\}$$

geometrisch verteilt mit Parameter  $1/c$ .

ii)

$$\begin{aligned} P[X_T = a] &= \sum_{n=1}^{\infty} P[\{X_T = a\} \cap \{T = n\}] \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} P[\{X_n = a\} \cap A_n \cap A_1^C \cap \dots \cap A_{n-1}^C] \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} P[\{X_n = a\} \cap \left\{ \frac{p(a)}{c q(a)} \geq U_n \right\} \cap A_1^C \cap \dots \cap A_{n-1}^C] \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} q(a) \frac{p(a)}{c q(a)} \left(1 - \frac{1}{c}\right)^{n-1} \\ &= \frac{p(a)}{c} \sum_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{c}\right)^{n-1} \\ &= \frac{p(a)}{c} \frac{1}{1 - (1 - \frac{1}{c})} = p(a). \end{aligned}$$

□

### 4.3 Metropolis-Algorithmus und Gibbs-Sampler

Häufig sind direkte oder Acceptance-Rejection-Verfahren zur Simulation von Stichproben einer Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\mu$  nicht praktikabel. Eine Alternative ist die Simulation einer Markovkette  $(X_n)$  mit Gleichgewicht  $\mu$ . Konvergiert die Markovkette ins Gleichgewicht, dann ist die Verteilung von  $X_n$  für hinreichend große  $n$  ungefähr gleich  $\mu$ . Eine Stichprobe  $x_n$  von  $X_n$  ist daher auch eine Näherung einer Stichprobe von  $\mu$ . Um eine Markovkette mit Gleichgewicht  $\mu$  zu finden, benutzt man in der Regel die hinreichende Detailed-Balance-Bedingung. Die zwei wichtigsten Verfahren, die sich auf diese Weise ergeben, sind der Metropolis-Hastings-Algorithmus und der Gibbs Sampler.

#### Metropolis-Hastings-Algorithmus

Sei  $q(x, y)$  eine symmetrische stochastische Matrix, d.h.  $q(x, y) = q(y, x)$  für alle  $x, y \in S$ . Dann erfüllt die Gleichverteilung die Detailed-Balance-Bedingung (3.3.1). Sei nun  $\mu$  eine beliebige Wahrscheinlichkeitsverteilung auf  $S$  mit  $\mu(x) > 0$  für alle  $x \in S$ . Wie können wir die Übergangsmatrix  $q$  so modifizieren, dass die Detailed-Balance-Bedingung bzgl.  $\mu$  erfüllt ist?

**Algorithmus 4.6** (Metropolis-Algorithmus (Update  $x \rightarrow y$ )). schlage Übergang  $x \rightarrow y$  mit Wahrscheinlichkeit  $q(x, y)$  vor  
akzeptiere Übergang mit Wahrscheinlichkeit  $\alpha(x, y) \in [0, 1]$   
sonst verwerfe Vorschlag und bleibe bei  $x$

ÜBERGANGSMATRIX:

$$p(x, y) := \begin{cases} \alpha(x, y) q(x, y) & \text{für } y \neq x, \\ 1 - \sum_{y \neq x} \alpha(x, y) q(x, y) & \text{für } y = x. \end{cases}$$

Die Detailed Balance-Bedingung lautet:

$$\mu(x) \alpha(x, y) = \mu(y) \alpha(y, x) \quad \text{für alle } x, y \in S.$$

Sie ist äquivalent dazu, dass

$$b(x, y) := \mu(x) \alpha(x, y)$$

symmetrisch in  $x$  und  $y$  ist. Was ist die größtmögliche Wahl von  $b(x, y)$ ?

Aus  $\alpha(x, y) \leq 1$  folgen

$$\begin{aligned} b(x, y) &\leq \mu(x), \\ b(x, y) &= b(y, x) \leq \mu(y), \end{aligned}$$

und somit

$$b(x, y) \leq \min(\mu(x), \mu(y)).$$

Der größtmögliche Wert  $b(x, y) = \min(\mu(x), \mu(y))$  entspricht gerade

$$\alpha(x, y) = \min\left(1, \frac{\mu(y)}{\mu(x)}\right) = \begin{cases} 1 & \text{falls } \mu(y) \geq \mu(x), \\ \frac{\mu(y)}{\mu(x)} & \text{falls } \mu(x) > \mu(y). \end{cases}$$

**Definition.** Die Markov-Kette mit Übergangsmatrix

$$p(x, y) = \min\left(1, \frac{\mu(y)}{\mu(x)}\right) \cdot q(x, y) \quad \text{für } y \neq x$$

heißt **Metropolis-Kette** mit Vorschlagsverteilung  $q(x, y)$  und Gleichgewicht  $\mu$ .

**Satz 4.7.**  $\mu$  erfüllt die Detailed Balance-Bedingung bzgl.  $p$ .

*Beweis.* siehe oben. □

Die Konvergenz ins Gleichgewicht der Metropolis-Kette folgt auf endlichen Zustandsräumen unter schwachen Voraussetzungen aus dem Konvergenzsatz für Markovketten. Ist  $S$  endlich,  $\mu(x) > 0$  für alle  $x \in S$  und nicht konstant, und  $q(x, y)$  irreduzibel, dann ist  $p(x, y)$  irreduzibel und aperiodisch. Somit erhalten wir Konvergenz ins Gleichgewicht nach Satz 3.10. Diese asymptotische Aussage löst aber noch nicht die praktischen Probleme, denn die Konvergenz ins Gleichgewicht kann sehr langsam erfolgen! Wichtig sind daher Abschätzungen der Konvergenzgeschwindigkeit und explizite Fehlerschranken. Diese sind in der Regel stark problemabhängig, und in anwendungsrelevanten Fällen meist nicht leicht herzuleiten.

## Gibbs-Sampler

Sei  $S = S_1 \times \dots \times S_d$  ein endlicher Produktraum,  $\mu(x_1, \dots, x_d)$  eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf  $S$  und

$$\mu_i(x_i \mid x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_d) := \frac{\mu(x_1, \dots, x_d)}{\sum_{z \in S_i} \mu(x_1, \dots, x_{i-1}, z, x_{i+1}, \dots, x_d)}$$

die bedingte Verteilung der  $i$ -ten Komponente gegeben die übrigen Komponenten.

**Algorithmus 4.8** (Gibbs-Sampler (Update  $x \rightarrow y$ )).  $y := x$   
**for**  $i := 1, \dots, d$  **do**

```

    update  $y_i \sim \mu_i(\bullet \mid y_1, \dots, y_{i-1}, y_{i+1}, \dots, y_d)$ 
end for
return  $y$ 

```

ÜBERGANGSMATRIX:

$$p = p_d p_{d-1} \cdots p_1,$$

wobei

$$p_i(x, y) = \begin{cases} \mu_i(y_i \mid y_1, \dots, y_{i-1}, y_{i+1}, \dots, y_d) & \text{falls } y_k = x_k \text{ für alle } k \neq i, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

**Satz 4.9.** i)  $\mu$  erfüllt die Detailed Balance-Bedingung bzgl.  $p_i$  für alle  $i = 1, \dots, d$ .

ii)  $\mu$  ist ein Gleichgewicht von  $p$ .

*Beweis.* i) Der Beweis der ersten Aussage ist eine Übungsaufgabe.

ii) Nach der ersten Aussage ist  $\mu$  ein Gleichgewicht von  $p_i$  für alle  $i$ . Also gilt auch

$$\mu p = \mu p_d p_{d-1} \cdots p_1 = \mu.$$

□

**Bemerkung.** Zur Simulation von  $Y_n$ ,  $n \geq 0$ , genügt es, die Massenfunktion  $\mu(x)$  bis auf eine multiplikative Konstante zu kennen:

aus  $\mu(x) = C f(X)$  folgt

$$\alpha(x, y) = \min\left(1, \frac{f(y)}{f(x)}\right) \quad \text{unabhängig von } C.$$

## Simulated Annealing

**Beispiel** (Rucksackproblem). Gegeben:

$$\omega_1, \dots, \omega_d \in \mathbb{R}, \quad \text{»Gewichte«},$$

$$v_1, \dots, v_d \in \mathbb{R}, \quad \text{»Werte«}.$$

Rucksack mit maximalem Gewicht  $b > 0$ , packe soviel Wert wie möglich ein.

$$S = \{0, 1\}^d,$$

alle Konfigurationen,

$$S_b = \{(z_1, \dots, z_d) \in S : \sum_{i=1}^d z_i \omega_i \leq b\}, \quad \text{zulässige Konfigurationen,}$$

$z_i = 1$  :  $i$ -ter Gegenstand im Rucksack.

RUCKSACKPROBLEM:

maximiere  $V(z) = \sum_{i=1}^d z_i v_i$  unter Nebenbedingung  $z \in S_b$ .

Das Rucksackproblem ist **NP-vollständig**, insbesondere ist keine Lösung in  $O(d^k)$  Schritten für ein  $k \in \mathbb{N}$  bekannt.

STOCHASTISCHER ZUGANG: SIMULATED ANNEALING

Für  $\beta > 0$  betrachten wir die Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$\mu_\beta(z) = \begin{cases} \frac{1}{Z_\beta} e^{\beta V(z)} & \text{für } z \in S_b, \\ 0 & \text{für } z \in S \setminus S_b, \end{cases}$$

auf  $S$ , wobei  $Z_\beta = \sum_{z \in S_b} e^{\beta V(z)}$  eine Konstante ist, die  $\mu$  zu einer Wahrscheinlichkeitsverteilung normiert. Für  $\beta = 0$  ist  $\mu_\beta$  die Gleichverteilung auf  $S_b$ . Für  $\beta \rightarrow \infty$  konvergiert  $\mu_\beta$  gegen die Gleichverteilung auf der Menge der globalen Maxima von  $V$ , denn:

$$\mu_\beta(z) = \frac{e^{\beta V(z)}}{Z_\beta} = \frac{1}{\sum_{y \in S_b} e^{\beta(V(y)-V(z))}} \rightarrow \begin{cases} 0 & \text{falls } V(z) \neq \max V, \\ \frac{1}{|\{y \mid V(y) = \max V\}|} & \text{falls } V(z) = \max V. \end{cases}$$

IDEE: Simuliere Stichprobe  $z$  von  $\mu_\beta$  für  $\beta$  groß ( $\beta \rightarrow \infty$ ). Dann ist  $V(z)$  **wahrscheinlich** nahe dem Maximalwert.

METROPOLIS-ALGORITHMUS: Sei  $x^+ := \max(x, 0)$  der Positivteil von  $x$ . Wir wählen als Vorschlagsmatrix die Übergangsmatrix

$$q(z, w) := \begin{cases} \frac{1}{d} & \text{falls } z_i \neq w_i \text{ für genau ein } i \in \{1, \dots, d\}, \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases}$$

des Random Walks auf  $\{0, 1\}^d$ . Für die Akzeptanzwahrscheinlichkeit ergibt sich

$$\alpha_\beta(z, w) = \min \left( 1, \frac{\mu_\beta(w)}{\mu_\beta(z)} \right) = \begin{cases} e^{-\beta(V(z)-V(w))} & \text{für } z, w \in S_b, \\ 0 & \text{für } z \in S_b, w \notin S_b. \end{cases}$$

Der Vorschlag  $w$  wird also mit Wahrscheinlichkeit 1 akzeptiert, wenn  $V(w) \geq V(z)$  gilt – andernfalls wird der Vorschlag nur mit Wahrscheinlichkeit  $\exp -\beta(V(z) - V(w))$  akzeptiert.

**Algorithmus 4.10** (Simulation einer Markov-Kette mit Gleichgewicht  $\mu_\beta$ ). initialisiere  $z^{(0)} \in S_b$

**for**  $n = 1, 2, \dots$  **do**

$z^{(n)} := w := z^{(n-1)}$

erzeuge  $i \sim \text{Unif}\{1, \dots, d\}$

```

 $w_i := 1 - w_i$ 
if  $w \in S_b$  then
  erzeuge  $u \sim \text{Unif}(0, 1)$ 
  if  $u \leq \alpha_\beta(z, w)$  then
     $z^{(n)} := w$ 
  end if
end if
end for

```

**Algorithmus 4.11** (Simulated Annealing). Wie Algorithmus 4.10 aber mit  $\beta = \beta(n) \rightarrow \infty$  für  $n \rightarrow \infty$ .

**Bemerkung.** a) PHYSIKALISCHE INTERPRETATIONEN:

$\mu_\beta$  ist die Verteilung im thermodynamischen Gleichgewicht für die Energiefunktion  $H(z) = -V(z)$  bei der Temperatur  $T = 1/\beta$ . Der Grenzwert  $\beta \rightarrow \infty$  entspricht  $T \rightarrow 0$  (»simuliertes Abkühlen«).

b) Die beim Simulated Annealing-Verfahren simulierte zeitlich inhomogene Markov-Kette findet im allgemeinen nicht das globale Maximum von  $V$ , sondern kann in lokalen Maxima »steckenbleiben«. Man kann zeigen, dass die Verteilung der Markov-Kette zur Zeit  $n$  gegen die Gleichverteilung auf den Maximalstellen konvergiert, falls  $\beta(n)$  nur sehr langsam (logarithmisch) gegen  $+\infty$  geht. In praktischen Anwendungen wird der Algorithmus aber in der Regel mit einem schnelleren »Cooling schedule«  $\beta(n)$  verwendet. Das Auffinden eines globalen Maximums ist dann nicht garantiert – trotzdem erhält man ein oft nützliches **heuristisches** Verfahren.

## 4.4 Monte-Carlo-Verfahren

Sei  $\mu$  eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf einer abzählbaren Menge  $S$ . Wir bezeichnen im folgenden die Massenfunktion ebenfalls mit  $\mu$ , d.h.  $\mu(x) := \mu[\{x\}]$ . Sei  $f : S \rightarrow \mathbb{R}$  eine reellwertige Zufallsvariable mit  $E_\mu[f^2] = \sum_{x \in S} f(x)^2 \mu(x) < \infty$ . Angenommen, wir wollen den Erwartungswert

$$\theta := E_\mu[f] = \sum_{x \in S} f(x) \mu(x)$$

berechnen, aber die Menge  $S$  ist zu groß, um die Summe direkt auszuführen. In einem *Monte-Carlo-Verfahren* simuliert man eine große Anzahl unabhängiger Stichproben  $X_1(\omega), \dots, X_n(\omega)$  von  $\mu$ , und approximiert den Erwartungswert  $\theta$  durch den **Monte-Carlo-Schätzer**<sup>1</sup>

$$\widehat{\theta}_n(\omega) := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i(\omega)).$$

Wir wollen nun verschiedene Abschätzungen für den Approximationsfehler  $|\widehat{\theta}_n - \theta|$  vergleichen. Nach dem Transformationssatz (Satz 1.6) und der Linearität des Erwartungswerts gilt:

$$E[\widehat{\theta}_n] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n E[f(X_i)] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n E_\mu[f] = E_\mu[f] = \theta,$$

d.h.  $\widehat{\theta}_n$  ist ein **erwartungstreuer Schätzer** für  $\theta$ . Der **mittlere quadratische Fehler** («MSE» = Mean Squared Error) des Schätzers ist daher durch die Varianz der Zufallsvariable  $\widehat{\theta}_n$  gegeben:

$$\text{MSE} [\widehat{\theta}_n] = E \left[ |\widehat{\theta}_n - \theta|^2 \right] = \text{Var} [\widehat{\theta}_n].$$

### Fehlerschranken für Monte-Carlo-Schätzer

Explizite Abschätzungen für den Approximationsfehler erhalten wir mit denselben Methoden wie beim Beweis von Gesetzen der großen Zahlen. Seien  $X_1, X_2, \dots$  auf  $(\Omega, \mathcal{A}, P)$  unabhängige Zufallsvariablen mit Verteilung  $\mu$ , und sei  $\widehat{\theta}_n := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i)$  für  $n \in \mathbb{N}$ . Eine einfache Fehlerschranke ergibt sich aus der die Čebyšev-Ungleichung:

**Satz 4.12** (Čebyšev-Schranke). Für  $\varepsilon > 0$  und  $n \in \mathbb{N}$  gilt

$$P \left[ |\widehat{\theta}_n - \theta| \geq \varepsilon \right] \leq \frac{1}{\varepsilon^2} E \left[ |\widehat{\theta}_n - \theta|^2 \right] = \frac{1}{n \varepsilon^2} \text{Var}_\mu[f].$$

Insbesondere ist  $\widehat{\theta}_n$  eine **konsistente Schätzfolge** für  $\theta$ , d.h. für jedes  $\varepsilon > 0$  gilt

$$P \left[ |\widehat{\theta}_n - \theta| \geq \varepsilon \right] \rightarrow 0 \quad \text{für } n \rightarrow \infty.$$

*Beweis.* Da die Zufallsvariablen  $X_i$  unabhängig sind, sind  $f(X_i)$ ,  $i \in \mathbb{N}$ , unkorreliert. Zudem gilt

$$E[f(X_i)] = \sum_{x \in S} f(x) \mu(x) = E_\mu[f] = \theta, \quad \text{und}$$

$$\text{Var}[f(X_i)] = \sum_{x \in S} (f(x) - \theta)^2 \mu(x) = \text{Var}_\mu[f] < \infty$$

nach Voraussetzung. Die Behauptung folgt nun aus Satz 3.4. □

<sup>1</sup>Als **Schätzer** bezeichnet man in der Statistik eine Funktion der gegebenen Daten (hier Stichproben von  $X_1, \dots, X_n$ ), die zum Schätzen eines unbekanntem Parameters verwendet wird.

**Bemerkung.** Insbesondere gilt

$$\|\hat{\theta}_n - \theta\|_{\mathcal{L}^2} = \sqrt{E[|\hat{\theta}_n - \theta|^2]} = O(1/\sqrt{n}).$$

**Beispiel** (Monte Carlo-Schätzung von Wahrscheinlichkeiten). Angenommen, wir wollen die Wahrscheinlichkeit

$$p = \mu[B] = E_\mu[I_B]$$

eines Ereignisses  $B \subseteq S$  näherungsweise berechnen. Ein Monte Carlo-Schätzer für  $p$  ist

$$\hat{p}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I_B(X_i), \quad X_i \text{ unabhängig mit Verteilung } \mu.$$

FEHLERKONTROLLE:

- Mithilfe der Čebyšev-Ungleichung ergibt sich:

$$P[|\hat{p}_n - p| \geq \varepsilon] \leq \frac{1}{\varepsilon^2} \text{Var}(\hat{p}_n) = \frac{1}{n\varepsilon^2} \text{Var}_\mu(I_B) = \frac{p(1-p)}{n\varepsilon^2} \leq \frac{1}{4n\varepsilon^2}.$$

Gilt beispielsweise  $n \geq \frac{5}{\varepsilon^2}$ , dann erhalten wir:

$$P[p \notin (\hat{p}_n - \varepsilon, \hat{p}_n + \varepsilon)] \leq 5\%, \quad \text{unabhängig von } p,$$

d.h. das zufällige Intervall  $(\hat{p}_n - \varepsilon, \hat{p}_n + \varepsilon)$  ist ein **95%-Konfidenzintervall** für den gesuchten Wert  $p$ .

- Mithilfe der Bernstein-Ungleichung (Chernoff-Abschätzung) erhalten wir für  $\delta > 0$  und  $S_n := \sum_{i=1}^n I_B(X_i)$ :

$$P[p \notin (\hat{p}_n - \varepsilon, \hat{p}_n + \varepsilon)] = P\left[\left|\frac{1}{n}S_n - p\right| \geq \varepsilon\right] \leq 2e^{-2n\varepsilon^2} \leq \delta, \quad \text{falls } n \geq \frac{\log(2/\delta)}{2\varepsilon^2}.$$

Für kleine  $\delta$  ist die erhaltene Bedingung an  $n$  wesentlich schwächer als eine entsprechende Bedingung, die man durch Anwenden der Čebyšev-Ungleichung erhält. Für den **relativen Schätzfehler**  $(\hat{p}_n - p)/p$  ergibt sich:

$$P[|\hat{p}_n - p| \geq \varepsilon p] \leq 2e^{-2n\varepsilon^2 p^2} \leq \delta, \quad \text{falls } n \geq \frac{\log(2/\delta)}{2\varepsilon^2 p^2}.$$

Die benötigte Anzahl von Stichproben für eine  $(\varepsilon, \delta)$ -Approximation von  $p$  ist also polynomiell in  $\varepsilon$ ,  $\log(1/\delta)$  und  $1/p$ . Mit einer etwas modifizierten Abschätzung kann man statt der Ordnung  $O(\frac{1}{p^2})$  sogar  $O(\frac{1}{p})$  erhalten, siehe Mitzenmacher und Upfal: »Probability and Computing«.

**Beispiel.** Wie viele Stichproben sind nötig, damit der **relative Fehler** mit 95% Wahrscheinlichkeit unterhalb von 10% liegt? Mithilfe der Čebyšev-Ungleichung ergibt sich:

$$P[|\hat{p}_n - p| \geq 0,1p] \leq \frac{p(1-p)}{n(0,1p)^2} = \frac{100(1-p)}{np} \leq 0,05, \quad \text{falls } n \geq \frac{2000(1-p)}{p}.$$

So sind zum Beispiel für  $p = 10^{-5}$  ungefähr  $n \approx 2 \cdot 10^8$  Stichproben ausreichend. Dies ist nur eine obere Schranke, aber man kann zeigen, dass die tatsächlich benötigte Stichprobenzahl immer noch sehr groß ist. Für solch kleine Wahrscheinlichkeiten ist das einfache Monte Carlo-Verfahren ineffektiv, da die meisten Summanden von  $\hat{\theta}_n$  dann gleich 0 sind. Wir brauchen daher ein alternatives Schätzverfahren mit geringerer Varianz.

**Beispiel** (Monte-Carlo-Schätzung von  $\theta = \int_{[0,1]^d} f(x) dx$ ).

Das mehrdimensionale Integral ist folgendermaßen definiert:

$$\int_{[0,1]^d} f(x) dx := \int_0^1 \dots \int_0^1 f(x_1, \dots, x_d) dx_1 \dots dx_d.$$

Der Wert von  $\theta$  kann mit dem folgenden Algorithmus geschätzt werden.

erzeuge Pseudozufallszahlen  $u_1, u_2, \dots, u_{nd} \in (0, 1)$

$x^{(1)} := (u_1, \dots, u_d)$

$x^{(2)} := (u_{d+1}, \dots, u_{2d})$

...

$x^{(n)} := (u_{(n-1)d+1}, \dots, u_{nd})$

$\hat{\theta}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x^{(i)})$  ist Schätzwert für  $\theta$ .

## Varianzreduktion durch Importance Sampling

Sei  $\nu$  eine weitere Wahrscheinlichkeitsverteilung auf  $S$  mit Massenfunktion  $\nu(x) = \nu(\{x\})$ . Es gelte  $\nu(x) > 0$  für alle  $x \in S$ . Dann können wir den gesuchten Wert  $\theta$  auch als Erwartungswert bzgl.  $\nu$  ausdrücken:

$$\theta = E_\mu[f] = \sum_{x \in S} f(x) \mu(x) = \sum_{x \in S} f(x) \frac{\mu(x)}{\nu(x)} \nu(x) = E_\nu[f \varrho],$$

wobei

$$\varrho(x) = \frac{\mu(x)}{\nu(x)}$$

der Quotient der beiden Massenfunktionen ist. Ein alternativer Monte Carlo-Schätzer für  $\theta$  ist daher

$$\tilde{\theta}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(Y_i) \varrho(Y_i),$$

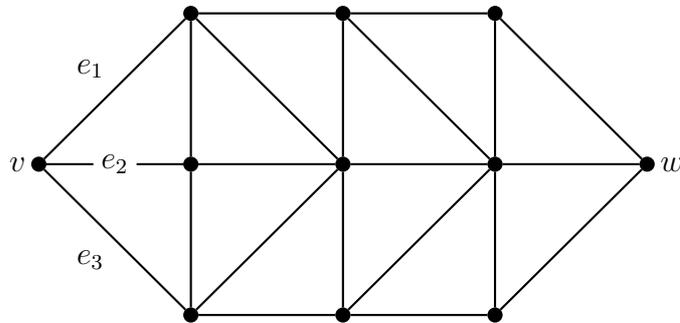


Abbildung 4.1: kleiner Beispielgraph für Perkolation

wobei die  $Y_i$  unabhängige Zufallsvariablen mit Verteilung  $\nu$  sind. Auch  $\tilde{\theta}_n$  ist erwartungstreu:

$$E_\nu[\tilde{\theta}_n] = E_\nu[f \varrho] = \theta.$$

Für die Varianz erhalten wir:

$$\text{Var}_\nu(\tilde{\theta}_n) = \frac{1}{n} \text{Var}_\nu(f \varrho) = \frac{1}{n} \left( \sum_{x \in S} f(x)^2 \varrho(x)^2 \nu(x) - \theta^2 \right).$$

Bei geeigneter Wahl von  $\nu$  kann die Varianz von  $\tilde{\theta}_n$  deutlich kleiner sein als die des Schätzers  $\hat{\theta}_n$ . Faustregel für eine gute Wahl von  $\nu$ :  $\nu(x)$  sollte groß sein, wenn  $|f(x)|$  groß ist.

»Importance Sampling«: Mehr Gewicht für die wichtigen  $x$ !

**Beispiel** (Zuverlässigkeit von Netzwerken; Perkolation). Gegeben sei ein endlicher Graph  $(V, E)$ , wobei  $V$  die Menge der Knoten und  $E$  die Menge der Kanten bezeichnet. Wir nehmen an, dass die Kanten unabhängig voneinander mit Wahrscheinlichkeit  $\varepsilon \ll 1$  ausfallen. Seien  $v, w \in E$  vorgegebene Knoten. Wir wollen die Wahrscheinlichkeit

$$p = P[\text{»}v \text{ nicht verbunden mit } w \text{ durch intakte Kanten«}]$$

approximativ berechnen. Sei

$$S = \{0, 1\}^E = \{(x_e)_{e \in E} \mid x_e \in \{0, 1\}\}$$

die Menge der Konfigurationen von intakten ( $x_l = 0$ ) bzw. defekten ( $x_l = 1$ ) Kanten und  $\mu$  die Wahrscheinlichkeitsverteilung auf  $S$  mit Massenfunktion

$$\mu(x) = \varepsilon^{k(x)} (1 - \varepsilon)^{|E| - k(x)}, \quad k(x) = \sum_{e \in E} x_e.$$

Sei

$$A = \{x \in S \mid v, w \text{ nicht verbunden durch Kanten } e \text{ mit } x_e = 0\}.$$

Dann ist

$$p = \mu(A) = E_\mu[I_A].$$

Der »klassische Monte Carlo-Schätzer« für  $p$  ist

$$\hat{p}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I_A(X_i), \quad X_i \text{ unabhängig mit Verteilung } \mu.$$

Fordern wir nun zum Beispiel

$$\sigma(\hat{p}_n) = \sqrt{\frac{p(1-p)}{n}} \stackrel{!}{\leq} \frac{p}{10},$$

dann benötigen wir eine Stichprobenanzahl

$$n \geq \frac{100(1-p)}{p},$$

um diese Bedingung zu erfüllen. Die Größenordnung von  $p$  für das in der obigen Graphik dargestellte Netzwerk mit  $\varepsilon = 1\%$  lässt sich wie folgt abschätzen:

$$\begin{aligned} 10^{-6} = \mu(\text{»}e_1, e_2, e_3 \text{ versagen«}) &\leq p \leq \mu(\text{»mindestens 3 Kanten versagen«}) \\ &= \binom{22}{3} \cdot 10^{-6} \approx 1,5 \cdot 10^{-3}. \end{aligned}$$

Es sind also eventuell mehrere Millionen Stichproben nötig!

Um die benötigte Stichprobenanzahl zu reduzieren, wenden wir ein Importance Sampling-Verfahren an. Sei

$$\nu(x) = t^{-k(x)} (1-t)^{|E|-k(x)}, \quad k(x) = \sum_{e \in E} x_e,$$

die Verteilung bei Ausfallwahrscheinlichkeit  $t := \frac{3}{22}$ . Da unter  $\nu$  im Schnitt 3 Kanten defekt sind, ist der Ausfall der Verbindung bzgl.  $\nu$  nicht mehr selten. Für den Schätzer

$$\tilde{p}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I_A(Y_i) \frac{\mu(Y_i)}{\nu(Y_i)}, \quad Y_i \text{ unabhängig mit Verteilung } \nu,$$

erhalten wir im Beispiel von oben:

$$\begin{aligned} \text{Var}(\tilde{p}_n) &= \frac{1}{n} \left( \sum_{x \in S} I_A(x)^2 \frac{\mu(x)^2}{\nu(x)} - p^2 \right) \\ &\leq \frac{1}{n} \sum_{k=3}^{22} \binom{|E|}{k} \left( \frac{\varepsilon^2}{t} \right)^k \left( \frac{(1-\varepsilon)^2}{1-t} \right)^{|E|-k} \leq 0,0053 \frac{p}{n}. \end{aligned}$$

Diese Abschätzung ist etwa um den Faktor 200 besser als die für den einfachen Monte Carlo-Schätzer erhaltene Abschätzung der Varianz.

## Markov Chain Monte Carlo

Sei  $\mu \in \text{WV}(S)$ ,  $f: S \rightarrow \mathbb{R}$ .

GESUCHT:

$$\theta = E_{\mu}[f],$$

MARKOV-CHAIN-MONTE CARLO-SCHÄTZER:

$$\hat{\theta}_{n,b} = \frac{1}{n} \sum_{k=b+1}^{b+n} f(X_k),$$

wobei  $b \in \mathbb{N}$  eine feste Konstante (»burn-in-Zeit«) und  $(X_k)_{k \in \mathbb{N}}$  irreduzible Markov-Ketten mit Gleichgewicht  $\mu$  sind.

**Satz** (Ergodensatz / Gesetz der großen Zahlen für Markov-Ketten). : Für alle  $b \in \mathbb{N}$  gilt:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \hat{\theta}_{n,b} = \theta \quad \text{mit Wahrscheinlichkeit 1,}$$

*Beweis.* siehe Vorlesung »Stochastische Prozesse«.

□

Die Analyse des Schätzfehlers ist im Allgemeinen diffizil!

# Kapitel 5

## Iterationsverfahren

**Beispiel.** GESUCHT: numerische Lösung  $x^* \in (0, \frac{\pi}{2})$  von  $\tan(x) - 2x = 0$ .

1. ANSATZ:

$$\tan(x) - 2x = 0 \quad \Leftrightarrow \quad x = \frac{1}{2} \tan(x) =: \phi(x) \quad \text{„Fixpunktgleichung“}.$$

ITERATIONSVERFAHREN:

$$x^{(n+1)} = \phi(x^{(n)}).$$

Konvergiert das Iterationsverfahren?

- falls  $x^{(0)} < x^*$  konvergiert  $x^{(n)}$  gegen 0.
- falls  $x^{(0)} > x^*$  ist  $x^{(n)}$  monoton wachsend bis  $x^{(n)} > \frac{\pi}{2}$ , danach konvergiert  $x^{(n)}$  gegen 0.

2. ANSATZ:

$$\tan(x) - 2x = 0 \quad \Leftrightarrow \quad x = \arctan(2x) =: \tilde{\phi}(x)$$

$x^{(n)}$  konvergiert gegen  $x^*$  für alle  $x^0 \in \mathbb{R}^+$ .

3. ANSATZ: NEWTON-VERFAHREN

$$f(y) := \tan(y) - 2y \stackrel{!}{=} 0.$$

IDEE: Lineare Approximation von  $f$  (durch Tangente):

$$f(y) \approx f(x) + (y - x) f'(x).$$

Die rechte Seite verschwindet für

$$y := x - \frac{f(x)}{f'(x)} =: \phi(x).$$

Es gilt:

$$f(x^*) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \phi(x^*) = x^*.$$

Dies motiviert die **Fixpunktiteration** :

$$x^{(n+1)} = \phi(x^{(n)}).$$

- falls  $x^{(0)} \in (x^*, \frac{\pi}{2})$  oder  $x^{(0)} \in (\phi^{-1}(\frac{\pi}{2}), x^*)$  konvergiert  $x^{(n)}$  sehr schnell gegen  $x^*$ ,
- falls  $x^{(0)} \leq \phi^{-1}(\frac{\pi}{2})$  konvergiert  $x^{(n)}$  nicht gegen  $x^*$ .

Das Beispiel zeigt, dass nicht jede Fixpunktiteration konvergiert. Die Konvergenz kann (abhängig vom Startwert) gegen verschiedene Fixpunkte erfolgen. Konvergenz und Konvergenzgeschwindigkeit hängen wesentlich von der Art der Darstellung einer Gleichung als Fixpunktgleichung ab.

## 5.1 Konvergenz von Fixpunktiterationen

### Banachscher Fixpunktsatz

ALLGEMEINER RAHMEN:  $(X, d)$  ein metrischer Raum,  $\phi: X \rightarrow X$ .

FIXPUNKTITERATION:

$$x^{(n+1)} = \phi(x^{(n)}).$$

**Satz 5.1** (Banachscher Fixpunktsatz). *Ist  $(X, d)$  vollständig und  $\phi$  eine **Kontraktion**, d.h. es existiert eine Konstante  $L \in (0, 1)$  mit*

$$d(\phi(x), \phi(y)) \leq L \cdot d(x, y) \quad \text{für alle } x, y \in X, \quad (5.1.1)$$

dann gilt:

1.  $\phi$  hat genau einen Fixpunkt  $x^* \in X$ .
2. Die Fixpunktiteration  $x^{(n+1)} = \phi(x^{(n)})$  konvergiert für jeden Startwert  $x^{(0)} \in X$  gegen  $x^*$ , und für alle  $n \in \mathbb{N}$  gilt:

$$d(x^{(n)}, x^*) \leq L d(x^{(n-1)}, x^*) \quad \text{„Monotonie“} \quad (5.1.2)$$

$$d(x^{(n)}, x^*) \leq \frac{L^n}{1-L} d(x^{(1)}, x^{(0)}) \quad \text{„A priori-Schranke“} \quad (5.1.3)$$

$$d(x^{(n)}, x^*) \leq \frac{L}{1-L} d(x^{(n)}, x^{(n-1)}) \quad \text{„A posteriori-Schranke“} \quad (5.1.4)$$

*Beweis.* i) Aus (5.1.1) folgt durch Induktion:

$$d(x^{(n+1)}, x^{(n)}) \leq L^n d(x^{(1)}, x^{(0)}) \quad \text{für alle } n \geq 0, \quad (5.1.5)$$

also nach Dreiecksungleichung

$$d(x^{(m)}, x^{(n)}) \leq \sum_{i=n}^{m-1} d(x^{(i+1)}, x^{(i)}) \leq \sum_{i=n}^{m-1} L^i d(x^{(1)}, x^{(0)}) \leq \frac{L^n}{1-L} d(x^{(1)}, x^{(0)}) \quad (5.1.6)$$

für alle  $m \geq n \geq 0$ . Wegen  $L < 1$  ist  $x^{(n)}$  eine Cauchy-Folge, also existiert wegen der vorausgesetzten Vollständigkeit

$$x^* := \lim_{n \rightarrow \infty} x^{(n)}.$$

Zudem gilt wegen der Stetigkeit von  $\phi$  und Gleichung (5.1.5):

$$d(x^*, \phi(x^*)) = \lim_{n \rightarrow \infty} d(x^{(n)}, \phi(x^{(n)})) = \lim_{n \rightarrow \infty} d(x^{(n)}, x^{(n+1)}) = 0,$$

d.h.  $x^*$  ist Fixpunkt. Ist  $y^*$  ein weiterer Fixpunkt, dann gilt:

$$d(x^*, y^*) = d(\phi(x^*), \phi(y^*)) \leq L d(x^*, y^*),$$

also  $d(x^*, y^*) = 0$ , d.h.  $x^* = y^*$  und  $x^*$  ist eindeutiger Fixpunkt.

ii) 1. Es gilt:

$$d(x^{(n)}, x^*) = d(\phi(x^{(n-1)}), \phi(x^*)) \leq L d(x^{(n-1)}, x^*).$$

2.

$$d(x^{(n)}, x^*) = \lim_{m \rightarrow \infty} d(x^{(n)}, x^{(m)}) \leq \frac{L^n}{1-L} d(x^{(1)}, x^{(0)}).$$

3. Analog zu (5.1.6) ergibt sich:

$$d(x^{(m)}, x^{(n)}) \leq \frac{L}{1-L} d(x^{(n)}, x^{(n-1)}) \quad \text{für alle } m \geq n \geq 0.$$

Die Behauptung folgt für  $m \rightarrow \infty$ .

□

NOTATION:  $D\phi(x)$  bezeichnet die Jacobi-Matrix.

**Satz 5.2.** Sei  $C \subseteq \mathbb{R}^n$  abgeschlossen und konvex und  $\phi: C \rightarrow C$  einmal stetig differenzierbar. Gilt

$$L := \sup_{x \in C} \underbrace{\|D\phi(x)\|_2}_{l^2\text{-Matrixnorm}} = \sup_{x \in C} \sup_{v \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}} \frac{\|D\phi(x)(v)\|_2}{\|v\|_2} < 1,$$

dann hat  $\phi$  genau einen Fixpunkt  $x^*$  und  $x^{(n)}$  konvergiert gegen  $x^*$ .

*Beweis.* Für  $x, y \in C$  gilt  $[x, y] \subseteq C$ , also mit  $\gamma(t) := (1-t)x + ty$ :

$$\begin{aligned} \|\phi(y) - \phi(x)\|_2 &= \|\phi(\gamma(1)) - \phi(\gamma(0))\|_2 \\ &= \left\| \int_0^1 \frac{d}{dt} \phi(\gamma(t)) dt \right\|_2 \\ &\leq \int_0^1 \|D\phi(\gamma(t))(\gamma'(t))\|_2 dt \\ &\leq \int_0^1 L \|\gamma'(t)\|_2 dt = L \|y - x\|_2, \end{aligned}$$

d.h.  $\phi$  ist eine Kontraktion bzgl.  $d(x, y) = \|y - x\|_2$ . □

**Bemerkung** (Lokale Konvergenz). Ist  $D \subseteq \mathbb{R}^n$  offen,  $\phi \in C^1(D, D)$  mit Fixpunkt  $x^*$  und gilt  $\|d\phi(x^*)\|_2 < 1$ , dann existiert ein  $\varepsilon > 0$  mit:

$$\|D\phi(x)\|_2 \leq L < 1 \quad \text{für alle } x \in \overline{B_\varepsilon(x^*)}.$$

Nach dem Korollar konvergiert also  $x^{(n)}$  gegen  $x^*$  für alle  $x^{(0)}$  mit  $\|x^{(0)} - x^*\|_2 < \varepsilon$  („lokale Konvergenz“).

**Beispiele.** a) GLEICHUNG VON OBEN:

$$\tan(x) - 2x = 0.$$

1.  $\phi(x) = \frac{1}{2} \tan(x)$ . Dann ist

$$\phi'(x) = \frac{1}{2} (1 + (\tan(x))^2) = \begin{cases} < 1 & \text{für } x < \frac{\pi}{4}, \\ > 1 & \text{für } \frac{\pi}{4} < x < \frac{\pi}{2}. \end{cases}$$

- für  $t < \frac{\pi}{4}$  ist  $\phi$  eine Kontraktion auf  $[0, t]$  und  $x^{(n)}$  konvergiert gegen 0.
- $\phi$  ist keine Kontraktion auf  $(\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2})$ .

2.  $\tilde{\phi}(x) = \arctan(2x)$ . Dann gilt:

$$\tilde{\phi}'(x) = \frac{2}{1+x^2} < 1 \quad \Leftrightarrow \quad x > 1.$$

- für alle  $\varepsilon > 0$  ist  $\tilde{\phi}$  eine Kontraktion auf  $[1 + \varepsilon, \infty)$  und  $x^{(n)}$  konvergiert gegen  $x^* \in [1, \infty)$ .

b) NICHTLINEARES GLEICHUNGSSYSTEM: Sei  $c \in \mathbb{R}$  eine feste Konstante.

$$x_1 = c \cos(x_1) - c \sin(x_2),$$

$$x_2 = c \cos(x_1) - 2c \sin(x_2),$$

$$\phi(x) = c \begin{pmatrix} \cos(x_1) - \sin(x_2) \\ \cos(x_1) - 2 \sin(x_2) \end{pmatrix},$$

$$D\phi(x) = -c \begin{pmatrix} \sin(x_1) & \cos(x_2) \\ \sin(x_1) & 2 \cos(x_2) \end{pmatrix}.$$

Es gilt:

$$\|D\phi(x)\|_F = |c| \sqrt{2 \sin^2(x_1) + 5 \cos^2(x_2)} \leq \sqrt{7} |c|.$$

Damit folgt:

$$\|D\phi(x)\|_2 = \sup_{v \neq 0} \frac{\|D\phi(x)(v)\|_2}{\|v\|_2} \leq \sup_{v \neq 0} \frac{\|D\phi(x)\|_F \|v\|_2}{\|v\|_2} \leq \|D\phi(x)\|_F \leq \sqrt{7} |c|.$$

Somit konvergiert die Fixpunktiteration für  $|c| < 1/\sqrt{7}$  mit  $L = \sqrt{7} |c|$ .

Zum Beispiel ergibt sich für  $c = 0,4$  mit Startwert  $x^{(0)} = (0, 0)$ :

ZIEL: Für den Approximationsfehler soll gelten:

$$\varepsilon_n = \|x^{(n)} - x^*\|_2 \stackrel{!}{\leq} 5 \cdot 10^{-5} =: \delta.$$

- A PRIORI-ABSCHÄTZUNG:

$$\varepsilon_n \leq \frac{L^n}{1-L} \|x^{(1)} - x^{(0)}\|_2 \stackrel{!}{\leq} \delta.$$

Die Ungleichung ist erfüllt, falls gilt:

$$n \geq \log_{L^{-1}} \frac{\|x^{(1)} - x^{(0)}\|_2}{(1-L)\delta} \approx 153,6.$$

- A POSTERIORI-ABSCHÄTZUNG:

$$\frac{L}{1-L} \|x^{(n)} - x^{(n-1)}\|_2 \stackrel{!}{\leq} \delta.$$

Die Ungleichung ist schon für  $n = 39$  erfüllt!

## c) GLEICHGEWICHTE VON MARKOV-KETTEN:

Sei  $S$  endlich, und  $p(x, y)$ ,  $(x, y \in S)$  eine stochastische Matrix. Ein Gleichgewicht  $\mu$  von  $p$  ist ein Fixpunkt der Abbildung

$$\begin{aligned}\phi: \text{WV}(S) &\rightarrow \text{WV}(S), \\ \phi(\mu) &:= \mu p.\end{aligned}$$

Die Menge  $\text{WV}(S)$  ist ein Simplex im  $\mathbb{R}^{|S|}$ , also kompakt. Existiert ein  $L \in (0, 1)$  mit

$$d_{TV}(\mu p, \nu p) \leq L \cdot d_{TV}(\mu, \nu) \quad \text{für alle } \mu, \nu \in \text{WV}(S), \quad (5.1.7)$$

dann existiert nach dem Banachschen Fixpunktsatz 5.1 genau ein Gleichgewicht  $\mu$  von  $p$ , und es gilt:

$$d_{TV}(\mu p^n, \nu) \leq \frac{L^n}{1-L} \cdot d_{TV}(\mu, \nu) \leq \frac{L^n}{1-L} \quad \text{für alle } \mu, \nu \in \text{WV}(S).$$

In vielen Fällen gilt Gleichung (5.1.7) jedoch nur mit  $L = 1$ !

## Konvergenzordnung

**Definition** (Konvergenzordnung). Eine Nullfolge  $\varepsilon_k$  nicht-negativer reeller Zahlen konvergiert

(i) **linear**, falls es ein  $L \in (0, 1)$  und ein  $n \in \mathbb{N}$  gibt, so dass gilt:

$$\varepsilon_{k+1} \leq L \cdot \varepsilon_k \quad \text{für alle } k \geq n.$$

(ii) **superlinear**, falls es eine Nullfolge  $L_k$  gibt, so dass gilt:

$$\varepsilon_{k+1} \leq L_k \cdot \varepsilon_k \quad \text{für alle } k \in \mathbb{N}.$$

(iii) **superlinear mit Ordnung**  $p > 1$ , falls es ein  $C \in (0, \infty)$ ,  $n \in \mathbb{N}$  gibt, so dass gilt:

$$\varepsilon_{k+1} \leq C \cdot \varepsilon_k^p \quad \text{für alle } k \geq n.$$

**Beispiele.** a)  $\varepsilon_k = e^{-\alpha k}$ ,  $\alpha > 0$ . Aufgrund von

$$\varepsilon_{k+1} = e^{-\alpha} \varepsilon_k$$

konvergiert  $\varepsilon_k$  linear.

b)  $\varepsilon_k = e^{-k^2}$ . Aufgrund von

$$\varepsilon_{k+1} = e^{-(k+1)^2} = e^{-2k-1} \varepsilon_k$$

konvergiert  $\varepsilon_k$  superlinear, aber nicht mit Ordnung  $p > 1$ .

c)  $\varepsilon_k = e^{-p^k}$ . Aufgrund von

$$\varepsilon_{k+1} = e^{-p \cdot p^k} = (\varepsilon_k)^p$$

konvergiert  $\varepsilon_k$  superlinear mit Ordnung  $p$ .

Der Banachsche Fixpunktsatz liefert Konvergenz mit Ordnung 1. Der folgende Satz gibt ein Kriterium für Konvergenz mit höherer Ordnung:

**Satz 5.3** (Konvergenz mit höherer Ordnung). Sei  $U \subseteq \mathbb{R}^d$  offen und  $\phi \in C^p(U, \mathbb{R}^d)$  für ein  $p \geq 2$ . Ist  $x^*$  ein Fixpunkt von  $\phi$ , und gilt

$$(D^k \phi)(x^*) = 0 \quad \text{für alle } k = 1, \dots, p-1,$$

dann existiert eine Konstante  $\varepsilon > 0$ , so dass die Iterationsfolge  $x^{(n)}$  mit  $x^{(n+1)} = \phi(x^{(n)})$  für jeden Startwert  $x^{(0)} \in B_\varepsilon(x^*)$  (mindestens) mit Ordnung  $p$  gegen  $x^*$  konvergiert.

Der Beweis basiert auf der Taylorentwicklung von  $\phi$  an der Stelle  $x^*$ , siehe Vorlesung.

Ist die Funktion  $\phi$  vorgegeben, kann man in der Regel nicht erwarten, dass die Bedingung aus dem letzten Satz erfüllt ist. Andererseits kann man sich aber zu einem gegebenen Fixpunkt Iterationsabbildungen  $\phi$  konstruieren, so dass die Konvergenz mit höherer Ordnung erfolgt. Ein wichtiges Beispiel liefert das Newton-Verfahren.

## 5.2 Das Newton-Verfahren

### Linearisierung von Gleichungssystemen

Sei  $D \subseteq \mathbb{R}^d$  offen,  $f : D \rightarrow \mathbb{R}^d$  einmal stetig differenzierbar.

Gesucht ist  $x^* \in D$  mit:

$$f(x^*) = 0.$$

Letztes Gleichungssystem hat  $d$  Gleichungen mit  $d$  Unbekannten und ist im Allgemeinen nicht linear.

ANSATZ: LINEARISIERUNG

$$f(x) \approx \underbrace{f(x^{(0)}) + (Df)(x^{(0)})(x - x^{(0)})}_{:=l(x)} + o(\|x - x^{(0)}\|).$$

- löse  $l(x) = 0$ ,
- Lösung  $x^{(1)}$  liefert Näherung für Nullstelle von  $f$ ,
- Iteration.

Es gilt:

$$l(x) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad Df(x^{(0)})(x - x^{(0)}) = -f(x^{(0)}), \quad \text{lineares Gleichungssystem.}$$

Falls  $Df(x^{(0)})$  invertierbar ist, gilt ferner:

$$l(x) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad x = x^{(0)} - Df(x^{(0)})^{-1} f(x^{(0)}).$$

Dies motiviert das Iterationsverfahren:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - Df(x^{(k)})^{-1} f(x^{(k)}).$$

EINDIMENSIONALER FALL:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}.$$

$x^{(k+1)}$  ist in diesem Fall der Schnittpunkt der Tangente an  $f$  in  $x^{(k)}$  mit der  $x$ -Achse. Falls  $f$  konvex und streng monoton wachsend ist, liegt die Tangente unter dem Graphen von  $f$ . In diesem Fall konvergiert die Newton-Iteration monoton für  $x^{(0)} > x^*$ .

**Beispiel** (Iterationsverfahren zur Berechnung der  $n$ -ten Wurzel).

$$f(x) = x^n - a, \quad n \in \mathbb{N} \setminus \{1\}, \quad a \in \mathbb{R}^+.$$

Die Nullstellen von  $f$  entsprechen den  $n$ -ten Wurzeln von  $a$ .

NEWTON-VERFAHREN:

$$f'(x) = n x^{n-1}.$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{(x^{(k)})^n - a}{n (x^{(k)})^{n-1}} = \frac{n-1}{n} x^{(k)} + \frac{a}{n} (x^{(k)})^{1-n}.$$

**Algorithmus 5.4** (Newton-Verfahren).

INPUT:  $f : D \rightarrow \mathbb{R}^d$ , Anfangsnäherung  $x^{(0)} \in D$ , Fehlertoleranz  $\varepsilon > 0$ .

OUTPUT: Iterationsfolge  $x^{(k)}$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$

$k := 0$

**repeat**

berechne Lösung  $h \in \mathbb{R}^n$  des linearen Gleichungssystems  $Df(x^{(k)})h = -f(x^{(k)})$

$x^{(k+1)} := x^{(k)} + h$

**if**  $x^{(k+1)} \notin D$  **then**

error („overflow“)

**end if**

$k := k + 1$

**until**  $\|f(x^{(k)})\| \leq \varepsilon$

Im folgenden wollen wir die Konvergenz des Newton-Verfahrens untersuchen.

### Lokal quadratische Konvergenz

Im eindimensionalen Fall zeigt Satz 5.3, dass das Newtonverfahren lokal quadratisch konvergiert. Ist beispielsweise  $f \in C^2(\mathbb{R}, \mathbb{R})$  mit  $f' > 0$  und  $f(x^*) = 0$ , dann gilt für die Iterationsabbildung  $\phi(x) = x - f(x)/f'(x)$  des Newton-Verfahrens:

$$\phi'(x) = 1 - \frac{f'(x)}{f'(x)} + \frac{f(x)f''(x)}{f'(x)^2},$$

also  $\phi'(x^*) = 0$ . Nach Satz 5.3 folgt lokale Konvergenz mit Ordnung 2.

Der folgende Satz liefert eine quantitative Abschätzung im mehrdimensionalen Fall. Sei  $\|\cdot\|_V$  eine Norm auf  $\mathbb{R}^d$ , und  $\|\cdot\|_M$  eine verträgliche Matrixnorm.

**Satz 5.5** (Lokal quadratische Konvergenz des Newton-Verfahrens). *Sei  $D \subseteq \mathbb{R}^d$  und  $f : D \rightarrow \mathbb{R}^d$  einmal stetig differenzierbar, und sei  $x^* \in D$  mit  $f(x^*) = 0$ . Existiert eine nichtleere Umgebung  $U = \{x \in \mathbb{R}^d : \|x - x^*\|_V < \varepsilon\}$  von  $x^*$  mit  $U \subseteq D$ , und existiert ein  $L \in (0, \infty)$ , mit den Eigenschaften*

$$\begin{aligned} Df(x) \text{ ist invertierbar für alle } x \in U, \quad \text{und} \\ \|Df(x)^{-1}(Df(y) - Df(x))\|_M \leq L \|x - y\|_V \quad \text{für alle } x, y \in U, \end{aligned} \tag{5.2.1}$$

dann gilt

$$\|x^{(k+1)} - x^*\|_V \leq \frac{L}{2} \|x^{(k)} - x^*\|_V^2$$

für alle  $k \geq 0$  mit  $x^{(k)} \in U$ . Insbesondere konvergiert  $\|x^{(k)} - x^*\|_V$  dann für alle  $x^{(0)}$  mit  $\|x^{(0)} - x^*\|_V < \min(2/L, \varepsilon)$  quadratisch gegen 0.

**Bemerkung.** a) Global gilt im allgemeinen keine Konvergenz (siehe Beispiel unten).

b) Bedingung (5.2.1) ist invariant unter linearen Transformationen

$$f(x) \mapsto \tilde{f}(x) := Af(x), \quad A \in \mathbb{R}^{d \times d} \text{ nicht-singulär.}$$

c) Falls  $Df(x^*)$  invertierbar und  $Df$  Lipschitz-stetig in einer Umgebung von  $x^*$  ist, gibt es eine geeignete Umgebung  $U$  und Konstante  $L$ , so dass Bedingung (5.2.1) erfüllt ist.

*Beweis.* Für  $k \geq 0$  mit  $x^{(k)} \in U$  gilt:

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} - x^* &= x^{(k)} - x^* - Df(x^{(k)})^{-1}(f(x^{(k)}) - f(x^*)) \\ &= Df(x^{(k)})^{-1}(f(x^*) - f(x^{(k)}) - Df(x^{(k)})(x^* - x^{(k)})). \end{aligned} \quad (5.2.2)$$

Sei nun

$$\gamma(t) := (1-t)x^{(k)} + tx^* \in U, \quad 0 \leq t \leq 1,$$

die Verbindungsstrecke von  $x^{(k)}$  nach  $x^*$ . Es gilt:

$$\gamma'(t) = x^* - x^{(k)}.$$

Damit folgt:

$$f(\gamma(1)) - f(\gamma(0)) = f(x^*) - f(x^{(k)}) = \int_0^1 \frac{d}{dt} f(\gamma(t)) dt = \int_0^1 Df(\gamma(t))(x^* - x^{(k)}) dt.$$

Außerdem gilt:

$$Df(x^{(k)})(x^* - x^{(k)}) = \int_0^1 Df(x^{(k)})(x^* - x^{(k)}) dt.$$

Mit Bedingung (5.2.1) folgt:

$$\begin{aligned} \|x^{(k+1)} - x^*\|_V &= \left\| \int_0^1 Df(x^{(k)})^{-1} [Df(\gamma(t)) - Df(x^{(k)})] (x^* - x^{(k)}) dt \right\|_V \\ &\leq \int_0^1 \|Df(x^{(k)})^{-1} [Df(\gamma(t)) - Df(x^{(k)})]\|_M \|x^* - x^{(k)}\|_V dt \\ &\leq L \int_0^1 \|\gamma(t) - x^{(k)}\|_V dt \|x^* - x^{(k)}\|_V \\ &= L \int_0^1 t \|x^* - x^{(k)}\|_V dt \|x^* - x^{(k)}\|_V \\ &= \frac{L}{2} \|x^* - x^{(k)}\|_V^2. \end{aligned}$$

Angenommen,  $x^{(k)} \in U$ ,  $\|x^{(k)} - x^*\|_V \leq \delta$  für ein  $\delta \in (0, \frac{2}{L})$ . Dann gilt:

$$\|x^{(k+1)} - x^*\|_V \leq \frac{L}{2} \|x^{(k)} - x^*\|_V^2 \leq \frac{\delta L}{2} \|x^{(k)} - x^*\|_V < \|x^{(k)} - x^*\|_V.$$

Somit ist  $x^{(k+1)} \in U$  und  $\|x^{(k+1)} - x^*\|_V \leq \delta$ . Durch Induktion folgt die Behauptung für alle  $k \geq 0$  falls  $x^{(0)} \in U$  mit  $\delta := \|x^{(0)} - x^*\|_V < \frac{2}{L}$ .  $\square$

**Beispiel.**  $d = 1$ ,  $f(x) = \arctan(x)$ .  $x^* = 0$  löst  $f(x) = 0$ .

NEWTON-VERFAHREN:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - (1 + x^{(k)})^2 \arctan x^{(k)}.$$

Ist

$$\arctan(|x^{(0)}|) > \frac{2|x^{(0)}|}{1 + |x^{(0)}|^2},$$

dann divergiert  $x^{(k)}$  bestimmt gegen  $\infty$ . Das Newton-Verfahren konvergiert also nicht global.

### Andere Iterationsverfahren im eindimensionalen Fall

Sei  $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  stetig. Gilt  $f(a) \cdot f(b) \leq 0$ , dann existiert nach dem Zwischenwertsatz ein  $x^* \in [a, b]$  mit  $f(x^*) = 0$ . Das Newton-Verfahren konvergiert für  $x^{(0)}$  nahe  $x^*$  quadratisch gegen  $x^*$ , konvergiert aber im allgemeinen nicht global. Außerdem benötigt es die Existenz und Berechnung der Ableitung  $f'$ . Daher werden häufig auch andere Verfahren mit einer kleineren Konvergenzordnung verwendet:

a) BISEKTIONSVERFAHREN:

Sei  $f \in C([a, b])$  mit  $f(a) \cdot f(b) \leq 0$  (Vorzeichenwechsel im Intervall  $[a, b]$ ).

**Algorithmus 5.6** (Bisektionsverfahren).

$$a^{(0)} := a$$

$$b^{(0)} := b$$

**for**  $k = 0, 1, \dots$  **do**

$$x^{(k)} := \frac{a^{(k)} + b^{(k)}}{2}$$

**if**  $f(a^{(k)}) \cdot f(x^{(k)}) \leq 0$  **then**

$$a^{(k+1)} := a^{(k)}$$

$$b^{(k+1)} := x^{(k)}$$

**else**

$$a^{(k+1)} := x^{(k)}$$

$$b^{(k+1)} := b^{(k)}$$

**end if**

**end for**

Das Bisektionsverfahren liefert Intervalle  $[a^{(k)}, b^{(k)}]$  mit  $|b^{(k)} - a^{(k)}| = 2^{-k} |b - a|$ , deren Durchschnitt eine Nullstelle  $x^*$  von  $f$  enthält.

FEHLERABSCHÄTZUNG:

$$|x^{(k)} - x^*| \leq \frac{1}{2} |b^{(k)} - a^{(k)}| \leq 2^{-k-1} |b - a|.$$

Das Bisektionsverfahren konvergiert global, die Konvergenz ist im Allgemeinen nicht monoton und die Konvergenzgeschwindigkeit entspricht linearer Konvergenzordnung.

b) SEKANTENVERFAHREN:

Das Sekantenverfahren funktioniert wie das Newton-Verfahren, wobei man statt der Tangente die Sekante durch die letzten zwei Iterationswerte nimmt:

$$\begin{aligned} x^{(0)} &= a, & x^{(1)} &= b, \\ x^{(k+1)} &= x^{(k)} - \frac{x^{(k)} - x^{(k-1)}}{f(x^{(k)}) - f(x^{(k-1)})} f(x^{(k)}) \quad \text{für alle } k \geq 1. \end{aligned}$$

Der letzte Bruch ist der Kehrwert der Sekantensteigung. Das Sekantenverfahren benötigt keine Berechnung der Ableitung, konvergiert jedoch im allgemeinen nicht global. Im Falle lokaler Konvergenz ist die Ordnung  $(1 + \sqrt{5})/2$  (siehe z.B. Hanke-Bourgeois: „Grundlagen der numerischen Mathematik“).

c) REGULA FALSI-VERFAHREN:

ANNAHME:

$$f(a) \cdot f(b) \leq 0.$$

Das Regula Falsi-Verfahren funktioniert wie das Sekantenverfahren, aber anstelle von  $x^{(k-1)}$  wird  $x^{(l)}$  mit

$$l = \max\{i < k \mid f(x^{(i)}) \cdot f(x^{(k)}) < 0\}$$

verwendet. Das Regula Falsi-Verfahren hat lineare Konvergenzordnung. Es konvergiert global: die Nullstelle befindet sich zwischen  $x^{(l)}$  und  $x^{(k)}$ .

d) KOMBINIERTES VERFAHREN:

Zum Beispiel Bisektionsverfahren für Anfangsnäherung, anschließend Newton-Verfahren für schnelle genaue Approximation von  $x^*$ .

## Modifikationen des Newton-Verfahrens im mehrdimensionalen Fall

Nachteile des Newton-Verfahrens sind die Notwendigkeit der Berechnung der Jacobi-Matrix  $Df(x^{(k)})$ , sowie die fehlende globale Konvergenz. In höheren Dimensionen ist die Berechnung

von  $Df$  oft aufwändig, und in vielen Fällen nur näherungsweise möglich. Aus diesen Gründen verwendet man unter anderem die folgenden Varianten des Newton-Verfahrens:

a) VEREINFACHTES NEWTON-VERFAHREN:

Hier wird die Ableitung  $Df(x^{(k)})$  nicht in jedem Iterationsschritt, sondern nur gelegentlich berechnet. Dazwischen wird jeweils der zuletzt berechnete Wert  $Df(x^{(l)})$ ,  $l < k$ , anstelle von  $Df(x^{(k)})$  benutzt.

b) APPROXIMATION DER JACOBI-MATRIX:

Die Ableitung  $Df(x^{(k)})$  wird in geeigneter Weise mithilfe von Differenzenquotienten approximiert. Ein Beispiel im eindimensionalen Fall ist das oben betrachtete Sekantenverfahren, bei dem  $f'(x^{(k)})$  durch den Differenzenquotienten  $\frac{f(x^{(k)}) - f(x^{(k-1)})}{x^{(k)} - x^{(k-1)}}$  ersetzt wird.

c) GEDÄMPFTES NEWTON-VERFAHREN:

Hier setzt man

$$x^{(k+1)} := x^{(k)} + \lambda^{(k)} p^{(k)}.$$

Dabei ist  $p^{(k)}$  wie im Newton-Verfahren die Lösung des linearen Gleichungssystems

$$Df(x^{(k)})p^{(k)} = -f(x^{(k)}),$$

der Vektor  $p^{(k)}$  wird aber mit einer Schrittweite  $\lambda^{(k)} \in (0, 1]$  multipliziert. Die Schrittweite bestimmt man beispielsweise mit einem *Verwerfungsverfahren*: Man setzt zunächst  $\lambda^{(k)} := 1$ , und berechnet den entsprechenden Wert für  $x^{(k+1)}$ . Ist  $\|f(x^{(k+1)})\|/\|f(x^{(k)})\|$  hinreichend klein, dann wird der erhaltene Wert für  $x^{(k+1)}$  akzeptiert - andernfalls halbiert man die Schrittweite, und führt den letzten Schritt erneut durch. Eine Taylor-Entwicklung zeigt, dass eine Akzeptanzbedingung der Form

$$\|f(x^{(k+1)})\|/\|f(x^{(k)})\| < 1 - 2\mu\lambda^{(k)}$$

mit  $\mu \in (0, 1)$  jeweils nach endlich vielen Schritten erfüllt ist, falls die Norm von einem Skalarprodukt induziert ist.

d) HOMOTOPIEVERFAHREN:

Es werden ein zusätzlicher Parameter  $t \in [0, 1]$  eingeführt, und Funktionen  $f_t(x)$  betrachtet, für die  $f_1(x) = f(x)$  gilt, während das Gleichungssystem  $f_0(x) = 0$  leicht lösbar ist. Man führt dann ein Newton-Verfahren für die Funktion  $f_t$  durch, wobei der Wert von  $t$  im Verlauf des Verfahrens schrittweise von 0 auf 1 erhöht wird.

### 5.3 Differenzgleichungen

Viele praktisch relevante Gleichungssysteme entstehen durch die Diskretisierung von Differentialgleichungen. Im einfachsten Fall verwendet man dazu ein Finite-Differenzen-Verfahren, bei dem Ableitungen durch Differenzenquotienten ersetzt werden.

#### Approximation von Ableitungen durch Differenzenquotienten

Die Taylor-Entwicklung 3. Ordnung einer Funktion  $u \in C^4(\mathbb{R})$  liefert

$$u(x+h) = u(x) + hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(x) + \frac{h^3}{6}u'''(x) + O(h^4), \quad (5.3.1)$$

$$u(x-h) = u(x) - hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(x) - \frac{h^3}{6}u'''(x) + O(h^4). \quad (5.3.2)$$

Hieraus ergibt sich zunächst eine  $O(h)$ -Approximation der ersten Ableitung durch *Vorwärts- und Rückwärts-Differenzenquotienten*:

$$u'(x) = \frac{u(x+h) - u(x)}{h} + O(h) = \frac{u(x) - u(x-h)}{h} + O(h).$$

Subtrahiert man die Gleichungen (5.3.1) und (5.3.2), dann ergibt sich die Approximation

$$u'(x) = \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h} + O(h^2)$$

durch den *zentrierten Differenzenquotienten* mit *verbesselter Ordnung*  $O(h^2)$ .

Entsprechend erhalten wir durch Addition der Gleichungen (5.3.1) und (5.3.2) eine  $O(h^2)$  Approximation der zweiten Ableitung:

$$\begin{aligned} u''(x) &= \frac{(u(x+h) - u(x)) - (u(x) - u(x-h))}{h^2} + O(h^2) \\ &= \frac{u(x+h) - 2u(x) + u(x-h)}{h^2} + O(h^2). \end{aligned} \quad (5.3.3)$$

**Beispiel.** Wir betrachten das lineare Randwertproblem

$$-u''(x) + \lambda(x)u(x) = g(x) \quad \text{für } x \in (0, 1), \quad u(0) = u(1) = 0,$$

wobei  $\lambda, g : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$  vorgegebene stetige Funktionen sind. Gesucht ist eine Lösung  $u \in C^2((0, 1)) \cap C([0, 1])$ . Um die Lösung näherungsweise zu berechnen, wählen wir  $n \in \mathbb{N}$ , setzen  $h := 1/(n+1)$ , und betrachten die Funktionswerte an den Gitterpunkten  $x_j = jh$ ,  $j =$

$0, 1, \dots, n+1$ . Setzen wir  $\lambda_j = \lambda(x_j)$  und  $g_j = g(x_j)$ , dann können wir die Werte  $u(x_j)$  durch  $u_j$  approximieren, wobei  $\vec{u} = (u_1, \dots, u_n)$  das folgende lineare Gleichungssystem löst:

$$\frac{-u_{j-1} + 2u_j - u_{j+1}}{h^2} + \lambda_j u_j = g_j \quad (j = 1, \dots, n),$$

$$u_0 = u_{n+1} = 0,$$

**FEHLERBETRACHTUNG:** Setzt man voraus, dass die Funktionswerte von  $u$  nur bis auf einen Rundungsfehler  $\varepsilon > 0$  korrekt dargestellt sind, dann ist der Differenzenquotient zweiter Ordnung nur bis auf einen Rundungsfehler von der Ordnung  $\varepsilon h^{-2}$  korrekt dargestellt. Zusammen mit dem Diskretisierungsfehler der Ordnung  $O(h^2)$  ergibt sich ein Gesamtfehler, der sich durch  $4\varepsilon h^{-2} + ch^2$  mit einer Konstante  $c$  abschätzen lässt. Der Fehler ist minimal für  $h_{opt} = (4\varepsilon/c)^{1/4}$ , und wächst für kleinere  $h$  rasch an! Es macht also keinen Sinn, zu fein zu diskretisieren. Beispielsweise ist für  $\varepsilon = 10^{-9}$  die in diesem Sinn optimale Maschenweite  $h_{opt}$  von der Größenordnung  $10^{-2}$ .

## LR-Zerlegung für Bandmatrizen

Die Matrix  $A$  in dem oben betrachteten linearen Gleichungssystem ist eine **Tridiagonalmatrix**, d.h. neben der Diagonale sind nur noch die Nachbarreihen mit von null verschiedenen Einträgen besetzt. Solche Matrizen treten allgemein bei der Diskretisierung von *gewöhnlichen* Differentialgleichungen zweiter Ordnung auf. Für Tridiagonalmatrizen gibt es eine LR-Zerlegung, bei der  $L$  und  $R$  eine untere bzw. obere Dreiecksmatrix ist, in der neben der Diagonale nur noch jeweils eine Reihe besetzt ist. Eine entsprechende Zerlegung lässt sich leicht explizit mit Aufwand  $O(n)$  berechnen, siehe Vorlesung.

Allgemeiner kann man eine Zerlegung einer Bandmatrix, bei der oberhalb bzw. unterhalb der Diagonalen noch  $p$  bzw.  $q$  Nachbarreihen nichtverschwindende Einträge haben, mit Aufwand  $O(pqn)$  berechnen.

## Diskretisierung der Poissongleichung

Wir betrachten nun eine Finite-Differenzen-Diskretisierung eines mehrdimensionalen Randwertproblems. Sei  $D \subset \mathbb{R}^d$  offen und beschränkt, und  $g \in C(\bar{D})$ . Gesucht ist eine Funktion  $u \in C^2(D) \cap C(\bar{D})$ , die das Dirichletproblem

$$\Delta u = g \text{ auf } D, \quad u = 0 \text{ auf } \partial D,$$

löst. Im Fall  $D = (0, 1)^2$  diskretisieren wir  $D$  bzw.  $\bar{D}$  durch das Gitter

$$\begin{aligned} D_h &= \{(ih, jh) : i, j = 1, \dots, n\} && \text{bzw.} \\ \bar{D}_h &= \{(ih, jh) : i, j = 0, \dots, n+1\} \end{aligned}$$

mit  $h = 1/(n+1)$ ,  $n \in \mathbb{N}$ . Approximiert man  $\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$  entsprechend zu (5.3.3) durch den Differenzenquotienten

$$\Delta_h u(x, y) = \frac{u(x+h, y) + u(x, y+h) - 4u(x, y) + u(x-h, y) + u(x, y-h)}{h^2},$$

dann ergibt sich die diskretisierte Gleichung

$$\begin{aligned} \Delta_h u(x, y) &= g(x, y) && \text{für } (x, y) \in D_h, \\ \bar{u}(x, y) &= 0 && \text{für } (x, y) \in \bar{D}_h \setminus D_h. \end{aligned}$$

Ordnet man die Werte von  $u$  an den Gitterpunkten lexikographisch in dem Vektor

$$\vec{u} = (u(h, h), u(h, 2h), \dots, u(h, nh), u(2h, h), u(2h, 2h), \dots, u(nh, nh))^T$$

an, dann ergibt sich für  $\vec{u}$  ein lineares Gleichungssystem mit einer **Block-Tridiagonalmatrix**  $A$  der Dimension  $n^2$ , die auf den  $n \times n$ -Blöcken auf der Diagonalen Tridiagonalmatrizen stehen hat, und auf den benachbarten  $n \times n$ -Blöcken negative Einheitsmatrizen, während die anderen  $n \times n$ -Blöcke nur Nullen enthalten. Die Matrix  $A$  ist **dünn besetzt**, da in jeder Zeile nur 5 von 0 verschiedene Einträge stehen - ihre **Bandbreite**  $2n+1$  wächst aber im Gegensatz zum eindimensionalen Fall linear in  $n$ , und damit in  $h^{-1}$ . Der Aufwand der LR-Zerlegung ist dementsprechend mit  $O(n \cdot n \cdot n^2) = O(h^{-4})$  sehr hoch !

Für die Finite-Differenzen-Diskretisierung der Poissongleichung in Dimension  $d > 2$  verschlechtert sich die Situation weiter: Hier ist die Dimension des Gleichungssystems von der Ordnung  $O(h^{-d})$ , die Bandbreite von der Ordnung  $O(h^{1-d})$ , und der Aufwand einer LR-Zerlegung damit von der Ordnung  $O(h^{2-3d})$ . Eine Zerlegung ist also für lineare Gleichungssysteme, die bei der Diskretisierung partieller Differentialgleichungen auftreten, im Allgemeinen nicht praktikabel. Aus diesem Grund werden wir im nächsten Abschnitt Iterationsverfahren zur Lösung großer linearer Gleichungssysteme betrachten. Im Gegensatz zur LR-Zerlegung liefern diese in der Regel nur eine Näherung der Lösung.

## Eigenwerte, Matrixnormen und Kondition

Eine Matrixnorm  $\|\cdot\|_M$  auf  $\mathbb{R}^{d \times d}$  heißt **verträglich** mit einer Norm  $\|\cdot\|_V$  auf  $\mathbb{R}^d$ , falls

$$\|Av\|_V \leq \|A\|_M \cdot \|v\|_V \quad \text{für alle } A \in \mathbb{R}^{d \times d} \text{ und } v \in \mathbb{R}^d.$$

Wichtigstes Beispiel einer verträglichen Matrixnorm ist die durch

$$\|A\|_{V,V} := \sup_{v \neq 0} \frac{\|Av\|_V}{\|v\|_V} = \sup_{\|v\|_V=1} \|Av\|_V$$

definierte, von  $\|\cdot\|_V$  induzierte **Operatornorm**. Im folgenden schreiben wir kurz  $\|A\|_V$  statt  $\|A\|_{V,V}$ . Wir verwenden vor allem die von den  $\ell_p$ -Normen induzierten Matrixnormen

$$\|A\|_p := \|A\|_{\ell^p, \ell^p}, \quad p \in [1, \infty].$$

Es gilt

$$\|A\|_1 = \max_{j=1, \dots, d} \sum_{i=1}^d |a_{i,j}| \quad \text{und} \quad \|A\|_\infty = \max_{i=1, \dots, d} \sum_{j=1}^d |a_{i,j}|,$$

siehe Übung. Die  $\ell^2$ -Operatornorm kann man durch die **Frobenius-Norm** abschätzen:

$$d^{-1/2} \|A\|_F \leq \|A\|_2 \leq \|A\|_F, \quad \|A\|_F := \left( \sum_{i,j=1}^d a_{i,j}^2 \right)^{1/2}.$$

Diese Abschätzung ist jedoch nicht scharf. Um die  $\ell^2$ -Operatornorm exakt zu berechnen, betrachten wir die Eigenwerte von  $A$  bzw.  $A^T A$ :

**Definition.** Der *Spektralradius* einer Matrix  $T \in \mathbb{R}^{d \times d}$  ist

$$\varrho(T) := \max\{|\lambda| \mid \lambda \in \mathbb{C} \text{ Eigenwert von } T\}.$$

**Lemma 5.7** (Spektralradius und Operatornormen).

a) Ist  $\|\cdot\|_V$  eine Norm auf  $\mathbb{R}^d$ , und  $\|\cdot\|_M$  eine verträgliche Matrixnorm auf  $\mathbb{R}^{d \times d}$ , dann gilt

$$\varrho(A) \leq \|A\|_M \quad \text{für alle } A \in \mathbb{R}^{d \times d}.$$

b) Für die  $\ell^2$ -Operatornorm gilt

$$\|A\|_2 = \sqrt{\varrho(A^T A)}.$$

Ist  $A$  symmetrisch, dann gilt

$$\|A\|_2 = \varrho(A).$$

*Beweis.* a) Ist  $\lambda$  ein Eigenwert von  $T$  und  $v$  ein normierter Eigenvektor, dann folgt:

$$|\lambda| = \|\lambda v\|_V = \|T v\|_V \leq \|T\|_M \|v\|_V = \|T\|_M.$$

b) Für  $v \in \mathbb{R}^d$  gilt

$$\|Av\|_2^2 = \langle Av, Av \rangle = \langle v, A^T Av \rangle.$$

Hieraus folgt

$$\|A\|_2^2 = \sup_{\|v\|=1} \langle v, A^T A v \rangle = \varrho(A^T A).$$

Ist  $A$  symmetrisch, dann sind alle Eigenwerte reell, und die Eigenwerte von  $A^T A = A^2$  sind die Quadrate der Eigenwerte von  $A$ . Also gilt  $\varrho(A^T A) = \varrho(A)^2$ .  $\square$

Die  $\ell^p$ -Matrixnormen können wir verwenden, um die Stabilität eines linearen Gleichungssystems  $Ax = b$  zu untersuchen. Die  $\ell^p$ -Kondition einer invertierbaren  $d \times d$ -Matrix  $A$  ist gegeben durch

$$\kappa_p(A) = \|A\|_p \|A^{-1}\|_p,$$

siehe Algorithmische Mathematik 1. Insbesondere folgt

$$\kappa_2(A) = \sqrt{\varrho(A^T A) \varrho((A^{-1})^T A^{-1})} = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(A^T A)}{\lambda_{\min}(A^T A)}},$$

wobei  $\lambda_{\max}(A^T A)$  bzw.  $\lambda_{\min}(A^T A)$  den größten bzw. kleinsten Eigenwert der symmetrischen, positiv definiten Matrix  $A^T A$  bezeichnet. Ist  $A$  symmetrisch, dann gilt entsprechend

$$\kappa_2(A) = \varrho(A) \varrho(A^{-1}) = \frac{\max\{|\lambda| : \lambda \text{ Eigenwert von } A\}}{\min\{|\lambda| : \lambda \text{ Eigenwert von } A\}}.$$

**Beispiel** (Newton-Verfahren). Hier ist das lineare Gleichungssystem

$$(Df)(x^{(k)}) (x^{(k+1)} - x^{(k)}) = -f(x^{(k)})$$

zu lösen. Die  $\ell^2$ -Kondition ist

$$\kappa_2 = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}((Df)^T(Df)(x^{(k)}))}{\lambda_{\min}((Df)^T(Df)(x^{(k)}))}}.$$

Das Gleichungssystem ist dementsprechend schlecht konditioniert, wenn eine Richtung  $v \in \mathbb{R}^d$  mit  $\|v\| = 1$  und  $(Df)(x^{(k)})v \approx 0$  existiert.

**Beispiel** (Diskretisierung der Poissongleichung auf  $(0, 1)^2$ ). Die Eigenwerte des diskretisierten Laplace-Operators  $\Delta_h$  auf  $D_h \subset (0, 1)^2$  kann man explizit berechnen. Es gilt

$$-\Delta_h e_{k,l} = \lambda_{k,l} e_{k,l} \quad \text{für } k, l = 1, \dots, n$$

mit  $e_{k,l}(x, y) = \sin(k\pi x) \sin(l\pi y)$  und

$$\lambda_{k,l} = \frac{4}{h^2} \left( \sin^2 \left( \frac{k\pi h}{2} \right) + \sin^2 \left( \frac{l\pi h}{2} \right) \right).$$

Damit folgt

$$\kappa_2(-\Delta_h) = \frac{\max_{k,l} \lambda_{k,l}}{\min_{k,l} \lambda_{k,l}} = \frac{\lambda_{n,n}}{\lambda_{1,1}} = \frac{\sin^2(\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{2}h)}{\sin^2(\frac{\pi}{2}h)} = O(h^{-2}).$$

Für kleine Maschenweiten  $h$  ist die Finite-Differenzen-Diskretisierung der Poissongleichung also schlecht konditioniert.

## 5.4 Iterationsverfahren für lineare Gleichungssysteme

Gegeben ist ein lineares Gleichungssystem

$$Ax = b, \quad \text{mit } b \in \mathbb{R}^d \text{ und invertierbarer Matrix } A \in \mathbb{R}^{d \times d}.$$

Gesucht ist die Lösung  $x^* \in \mathbb{R}^d$ .

Typisch in Anwendungen ist außerdem, dass  $d$  sehr groß ist und  $A$  „dünn besetzt“ ist, d.h. dass nur wenige Einträge einer Zeile von  $A$  ungleich 0 sind.

**Beispiel** (Poissongleichung). Gesucht ist  $u \in C(\overline{D}) \cap C^2(D)$  mit:

$$\begin{aligned} \Delta u(x) &:= \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2}(x) = g(x) && \text{für alle } x \in D, \\ u(x) &= 0 && \text{für alle } x \in \overline{D} \setminus D. \end{aligned}$$

DISKRETE VERSION:

$$\begin{aligned} D &\subseteq \mathbb{Z}^n \text{ endlich,} \\ \overline{D} &:= \{x \in \mathbb{Z}^n \mid \text{es gibt ein } y \in D : \|x - y\|_2 \leq 1\}, \\ g &= (g_x)_{x \in D} \in \mathbb{R}^{|\overline{D}|}. \end{aligned}$$

Gesucht ist in diesem Fall  $u = (u_x)_{x \in \overline{D}}$  mit:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n [(u_{x+e_i} - u_x) - (u_x - u_{x-e_i})] &= g_x && \text{für alle } x \in D, \\ u_x &= 0 && \text{für alle } x \in \overline{D} \setminus D. \end{aligned}$$

Wir erhalten ein lineares Gleichungssystem

$$A u = b$$

mit hoher Dimension  $d = |\overline{D}|$  und dünn besetzter Matrix:

$$A_{x,y} \neq 0 \quad \text{nur falls} \quad \|x - y\|_2 \leq 1.$$

In Anwendungen wie dieser sind die klassischen Eliminationsverfahren meist zu aufwändig ( $O(d^3)$ ), stattdessen verwendet man Fixpunktiterationen.

ALLGEMEINES ITERATIONSVERFAHREN:

$$A = P - N, \quad P, N \in \mathbb{R}^{d \times d},$$

wobei  $P$  eine invertierbare Matrix, deren Inverses „leicht“ berechenbar ist.  $P$  wird **Präkonditionierer** genannt. Es gilt:

$$\begin{aligned} A x = b & \Leftrightarrow P x = N x + b & \Leftrightarrow x = T x + f =: \phi(x), & \text{wobei} \\ T := P^{-1} N = P^{-1} (P - A) = I - P^{-1} A, & & f := P^{-1} b. & \end{aligned}$$

LINEARE FIXPUNKTITERATION:

$$x^{(k+1)} = T x^{(k)} + f.$$

RESIDUENDARSTELLUNG:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - P^{-1} (A x^{(k)} - b).$$

Der Ausdruck  $(A x^{(k)} - b)$  wird als **Residuum von  $x^{(k)}$**  bezeichnet.

**Bemerkung.** Die Berechnung von  $x^{(k+1)}$  erfordert Inversion von  $P$ !

Im folgenden wollen wir untersuchen, wann die Fixpunktiteration konvergiert.

**Satz 5.8.** 1. Die folgenden Aussagen sind äquivalent:

- (i) Die Iterationsfolge  $x^{(k)}$  konvergiert für jeden Startwert  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^d$  gegen die Lösung  $x^*$  von  $A x = b$ .
- (ii)  $T^k$  konvergiert gegen 0 (d.h.  $(T^k)_{i,j}$  konvergiert gegen 0 für alle  $i, j$ ).
- (iii)  $\rho(T) < 1$ .

## 2. Hinreichende Bedingung:

Ist  $\|\cdot\|_V$  eine Norm auf  $\mathbb{R}^d$  und  $\|\cdot\|_M$  eine verträgliche Matrixnorm mit  $\|T\|_M < 1$ , dann gilt:

$$\|x^{(k+1)} - x^*\|_V \leq \|T\|_M \|x^{(k)} - x^*\|_V \quad \text{für alle } k \in \mathbb{N},$$

d.h.  $x^{(k)}$  konvergiert bzgl.  $\|\cdot\|_V$  monoton gegen  $x^*$ .

*Beweis.* i) • **(i)  $\Leftrightarrow$  (ii):** Wegen

$$Ax^* = b \quad \Leftrightarrow \quad x^* = \phi(x^*)$$

gilt

$$x^{(k+1)} - x^* = \phi(x^{(k)}) - \phi(x^*) = T(x^{(k)} - x^*),$$

für alle  $k \in \mathbb{N}$ , und somit:

$$x^{(k)} - x^* = T^k(x^{(0)} - x^*).$$

$x^{(k)}$  konvergiert also genau dann für alle  $x_0 \in \mathbb{R}^d$  gegen  $x^*$ , wenn  $T^k$  gegen 0 konvergiert.

- **(ii)  $\Rightarrow$  (iii):** Angenommen,  $\varrho(T) \geq 1$ . Dann gibt es einen Eigenwert  $\lambda \in \mathbb{C}$  mit  $|\lambda| \geq 1$  mit Eigenvektor  $v \in \mathbb{C}^d \setminus \{0\}$  von  $T$ :

$$Tv = \lambda v.$$

Daher konvergiert  $T^k v = \lambda^k v$  nicht gegen 0. Somit konvergiert  $T^k$  nicht gegen 0 im Widerspruch zu (ii).

- **(iii)  $\Rightarrow$  (ii):** Wir beweisen diese Richtung für den symmetrischen Fall ( $T = T^t$ ). Da  $T$  symmetrisch ist, gibt es eine orthogonale Matrix  $O \in \mathbb{R}^{d \times d}$ , so dass gilt:

$$T = O D O^T, \quad \text{wobei} \quad D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_d) = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_d \end{pmatrix}$$

die Diagonalmatrix aus Eigenwerten von  $T$  ist. Wegen  $O^T = O^{-1}$  gilt:

$$T^k = (O D O^{-1})^k = O D^k O^T.$$

Aus  $\varrho(T) < 1$  folgt nun für alle Eigenwerte  $|\lambda_i| < 1$ . Also konvergiert  $D^k$  und somit auch  $T^k$  gegen 0.

Den allgemeinen Fall zeigt man via Jordanscher Normalform, siehe z.B. „Hämmerlin/Hoffmann: **Numerische Mathematik**, Satz 8.1“.

ii) Es gilt:

$$\|\phi(x) - \phi(y)\|_V = \|Tx - Ty\|_V \leq \|T\|_M \|x - y\|_V.$$

Wegen  $\|T\|_M < 1$  ist  $\phi$  eine Kontraktion bzgl.  $\|\cdot\|_V$ . Mit dem Banachschen Fixpunktsatz folgt die Behauptung. □

## Klassische Iterationsverfahren

### Keine Präkonditionierung

$$P = I.$$

Dann lautet die Residuendarstellung:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - (Ax^{(k)} - b), \quad \text{und} \quad T = I - A.$$

Bezüglich Konvergenz gilt:

**$\lambda$  ist genau dann Eigenwert von  $A$ , wenn  $1 - \lambda$  Eigenwert von  $T$  ist.**

Also ist der Spektralradius

$$\rho(T) = \max\{|1 - \lambda| \mid \lambda \text{ Eigenwert von } A\}.$$

**Beispiel.** Ist  $A$  symmetrisch und positiv definit („s.p.d.“), dann sind die Eigenwerte von  $A$  reell und positiv. Also gilt

$$\rho(T) = \max\{|1 - \lambda| \mid \lambda \text{ Eigenwert von } A\} < 1 \quad \Leftrightarrow \quad \lambda_{\max}(A) < 2.$$

Die Bedingung an die Eigenwerte ist bei diesem Verfahren zu restriktiv!

### Jacobi-Verfahren / Gesamtschrittverfahren

Es gilt:

$$\begin{aligned} Ax = b &\Leftrightarrow \sum_{j=1}^d a_{ij} x_j = b_i \quad i = 1, \dots, n \\ &\Leftrightarrow a_{ii} x_i = b_i - \sum_{j \neq i} a_{ij} x_j. \end{aligned}$$

**Algorithmus 5.9.**

INPUT: Matrix  $A \in \mathbb{R}^{d \times d}$  mit  $a_{ii} \neq 0$  für alle  $i \leq d$ ,  $b \in \mathbb{R}^d$ , Startwert  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^d$ ,

OUTPUT: Iterationsfolge  $x^{(k)} \in \mathbb{R}^d$ .

**for**  $k := 0, 1, \dots$  **do**

**for**  $i := 1, \dots, d$  **do**

$$x_i^{(k+1)} := \frac{1}{a_{ii}} \left( b_i - \sum_{j \neq i} a_{ij} x_j^{(k)} \right) \quad (5.4.1)$$

**end for**

**end for**

EINORDNUNG IN ALLGEMEINEN RAHMEN:

Die Matrix  $A$  wird in drei Matrizen  $L$ ,  $D$  und  $R$  zerlegt:

$$A = -L + D - R, \quad \text{mit}$$

$$L = - \begin{pmatrix} 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ a_{21} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ a_{d1} & \cdots & a_{d,d-1} & 0 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & a_{dd} \end{pmatrix}, \quad R = - \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1d} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & a_{d-1,d} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

Für das lineare Gleichungssystem gilt mit dieser Zerlegung:

$$Ax = b \quad \Leftrightarrow \quad Dx = (L + R)x + b \quad \Leftrightarrow \quad x = D^{-1}(L + R)x + D^{-1}b.$$

Als Iteration setzen wir:

$$x^{(k+1)} = D^{-1}(L + R)x^{(k)} + D^{-1}b.$$

Also gilt:

$$P = D \quad \text{und} \quad T = D^{-1}(L + R).$$

**Gauß-Seidel-Verfahren / Einzelschrittverfahren**

IDEE: Verwende bereits berechnete Komponenten von  $x^{(k+1)}$  sofort.

**Algorithmus 5.10.** Wie Algorithmus 5.9, aber statt Gleichung (5.4.1) mit der Iteration

$$x_i^{(k+1)} := \frac{1}{a_{ii}} \left( b_i - \sum_{j < i} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j > i} a_{ij} x_j^{(k)} \right) \quad (5.4.2)$$

In Matrixform:

$$D x^{(k+1)} = b + L x^{(k+1)} + R x^{(k)} \quad \Leftrightarrow \quad (D - L) x^{(k+1)} = R x^{(k)} + b.$$

**Einordnung in allgemeinen Rahmen:**

$$P = D - L, \quad T = (D - L)^{-1} R.$$

**Satz 5.11.** *Ist  $A$  strikt diagonaldominant . d.h.*

$$|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|, \quad i = 1, \dots, d,$$

dann konvergieren das Jacobi- und das Gauß-Seidel-Verfahren monoton bzgl. der Maximumnorm  $\|\cdot\|_\infty$  auf  $\mathbb{R}^d$ .

*Beweis.* Wir zeigen:

$$\|T\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |t_{ij}| < 1.$$

Da  $\|\cdot\|_\infty$  die von der Maximumnorm auf Vektoren induzierte Matrixnorm ist, folgt die Behauptung dann aus Satz 5.8.

#### 1. JACOBI-VERFAHREN:

$$T = D^{-1}(L + R), \quad t_{ij} = \begin{cases} -\frac{a_{ij}}{a_{ii}} & \text{für } j \neq i, \\ 0 & \text{für } j = i. \end{cases}$$

Damit folgt:

$$\|T\|_\infty \leq \max_{1 \leq i \leq n} \frac{1}{|a_{ii}|} \sum_{j \neq i} |a_{ij}| =: c$$

Weil  $A$  strikt diagonaldominant ist, folgt  $c < 1$ .

#### 2. GAUSS-SEIDEL-VERFAHREN:

$$T = (D - L)^{-1} R.$$

Sei  $c$  wie oben definiert, wir behaupten:

$$\|T\|_\infty \leq c < 1.$$

Dazu ist zu zeigen:

$$\|T x\|_\infty \leq c \cdot \|x\|_\infty \quad \text{für alle } x \in \mathbb{R}^n.$$

Sei  $y := T x$ . Nach Algorithmus 5.10 ist

$$y_i = \frac{1}{a_{ii}} \left( - \sum_{j < i} a_{ij} y_j - \sum_{j > i} a_{ij} x_j \right).$$

Wir zeigen durch vollständige Induktion nach  $i$  die Aussage:

$$|y_i| \leq c \cdot \|x\|_\infty.$$

Für  $i = 1$  gilt:

$$|y_1| \leq \frac{1}{|a_{11}|} \sum_{j \neq 1} |a_{1j}| \cdot |x_j| \leq c \cdot \|x\|_\infty.$$

Mit der Induktionsvoraussetzung folgt:

$$\begin{aligned} |y_i| &\leq \frac{1}{|a_{ii}|} \left( - \sum_{j=1}^{i-1} |a_{ij}| |y_j| + \sum_{j=i+1}^d |a_{ij}| |x_j| \right) \\ &\leq \frac{1}{|a_{ii}|} \left( \sum_{j \neq i} |a_{ij}| c \|x\|_\infty + \sum_{j=i+1}^d |a_{ij}| \|x\|_\infty \right) \\ &\leq \frac{1}{|a_{ii}|} \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \|x\|_\infty \leq c \|x\|_\infty \quad \text{für alle } i = 1, \dots, d. \end{aligned}$$

Somit gilt:

$$\|T x\|_\infty = \|y\|_\infty \leq c \|x\|_\infty.$$

□

Man kann nicht allgemein sagen, welches Verfahren „besser“ ist. Für bestimmte Klassen von Matrizen kann man zeigen, daß das Gauß-Seidel-Verfahren schneller konvergiert. Wir werden nun zeigen, daß das Gauß-Seidel-Verfahren für symmetrische positiv definite Matrizen  $A$  stets konvergiert.

Sei  $\langle v, w \rangle = \sum_{i=1}^d v_i w_i$  das euklidische Skalarprodukt im  $\mathbb{R}^d$ . Die von einer symmetrisch positiv definiten Matrix induzierte quadratische Form

$$(x, y)_A := \langle x, A y \rangle = \langle A x, y \rangle, \quad (x, y \in \mathbb{R}^n)$$

nennt man auch **Energieskalarprodukt**, die entsprechende Norm

$$\|x\|_A = \sqrt{(x, x)_A}$$

heißt auch **Energienorm**.

**Beispiel** (Diskreter Laplace-Operator). Sei  $D \subset \mathbb{R}^n$  offen und beschränkt, und  $D_h = D \cap (h\mathbb{Z})^n$  die Diskretisierung von  $D$  durch ein Gitter der Maschenweite  $h > 0$ . Weiter sei  $u = (u(x))_{x \in (h\mathbb{Z})^d}$  eine Funktion auf dem Gitter mit  $u(x) = 0$  für alle  $x \in D_h^C$  (Dirichlet-Randbedingungen). Ist  $A = -\Delta_h$  mit der oben betrachteten Diskretisierung des Laplace-Operators, dann gilt

$$(Au)(x) = -(\Delta_h u)(x) = -h^{-2} \sum_{i=1}^n [(u(x + he_i) - u(x)) - (u(x) - u(x - he_i))].$$

Damit erhalten wir für die  $A$ -Energienorm von  $u$ :

$$\begin{aligned} \|u\|_A^2 &= \langle u, Au \rangle = \sum_{x \in D_h} u(x) (Au)(x) = \sum_{x \in (h\mathbb{Z})^n} u(x) (Au)(x) \\ &= h^{-2} \sum_{i=1}^n \left( \sum_x u(x) (u(x) - u(x - he_i)) - \sum_x u(x) (u(x + he_i) - u(x)) \right) \\ &= h^{-2} \sum_{i=1}^n \left( \sum_x u(x + he_i) (u(x + he_i) - u(x)) - \sum_x u(x) (u(x + he_i) - u(x)) \right) \\ &= \sum_{x \in (h\mathbb{Z})^n} \sum_{i=1}^n \underbrace{\left( \frac{u(x + he_i) - u(x)}{h} \right)^2}_{\text{diskrete Richtungs-} \\ &\quad \text{ableitung } \partial_i u(x)} = \underbrace{\sum_{x \in (h\mathbb{Z})^n} \|\nabla_h u(x)\|^2}_{\text{Energie von } u}, \end{aligned}$$

wobei

$$\nabla_h u(x) = h^{-1} (u(x + he_1) - u(x), \dots, u(x + he_n) - u(x)).$$

Es folgt, daß die lineare Abbildung  $A = -\Delta_h$  auf

$$V = \{u = (u(x))_{x \in (h\mathbb{Z})^n} : u(x) = 0 \text{ für alle } x \in D_h^C\} \cong \mathbb{R}^{|D_h|}$$

symmetrisch und positiv definit ist, mit Energienorm

$$\|u\|_A^2 = \sum_{x \in (h\mathbb{Z})^n} \|\nabla_h u(x)\|^2.$$

KONTINUIERLICHES ANALOGON:

$$-\int_D u \Delta u = \int_D \|\nabla u\|^2 \quad \text{falls } u = 0 \text{ auf } \partial D \quad (\text{siehe „Analysis III“}).$$

**Satz 5.12.** Ist  $A$  symmetrisch und positiv definit, dann hat  $Ax = b$  eine eindeutige Lösung  $x^*$  und das Gauß-Seidel-Verfahren konvergiert monoton bzgl.  $\|\cdot\|_A$  gegen  $x^*$ , d.h. es gibt ein  $L < 1$  mit:

$$\|x^{(n+1)} - x^*\|_A \leq L \|x^{(n)} - x^*\|_A.$$

**Bemerkung.** Sei  $A$  symmetrisch positiv definit, dann gilt

$$a_{ii} = (e_i, A e_i) > 0 \quad \text{für alle } i.$$

*Beweis.* Zu zeigen ist:

$$\|T\|_A := \max_{\|x\|_A=1} \|T x\|_A < 1. \quad (5.4.3)$$

Die Behauptung folgt dann aus Satz 5.8

1. Es genügt zu zeigen:

$$\|T x\|_A < 1 \quad \text{für alle } x \in \mathbb{R}^n \text{ mit } \|x\|_A = 1, \quad (5.4.4)$$

da  $\{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x\|_A = 1\}$  kompakt und die Abbildung  $x \mapsto \|x\|_A$  stetig ist und somit in Gleichung (5.4.3) das Maximum angenommen wird.

2. Sei  $T = I - P^{-1} A$ , und  $P$  der Präkonditionierer, dann gilt:

$$\begin{aligned} (T x, T x)_A &= \langle T x, A T x \rangle = \langle x, A T x \rangle - \langle P^{-1} A x, A T x \rangle \\ &= (x, T x)_A - \langle x, A^t (P^{-1})^t A T x \rangle \\ &= (x, T x)_A - (x, (P^{-1})^t A T x)_A \\ &= (x, x)_A - (x, Z x)_A \stackrel{!}{<} (x, x)_A, \end{aligned}$$

wobei

$$\begin{aligned} Z &= P^{-1} A + (P^t)^{-1} A - (P^t)^{-1} A P^{-1} A \\ &= (I + (P^t)^{-1} P - (P^t)^{-1} A) P^{-1} A \\ &= (P^t)^{-1} (P^t + P - A) P^{-1} A. \end{aligned}$$

3. Zu zeigen bleibt:

$$(x, Z x)_A > 0 \quad \text{für alle } x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}.$$

Es gilt:

$$\begin{aligned} (x, Z x)_A &= \langle x, A (P^t)^{-1} (P^t + P - A) P^{-1} A x \rangle \\ &= \langle P^{-1} A x, (P^t + P - A) P^{-1} A x \rangle. \end{aligned}$$

Im Gauß-Seidel-Verfahren gilt:

$$P = D - L, \quad P^t = D - L^t = D - R,$$

da  $A$  symmetrisch ist. Es folgt:

$$P^t + P - A = (D - L) + (D - R) - (D - L - R) = D \quad \text{ist positiv definit.}$$

Also folgt

$$(x, Zx)_A > 0 \quad \text{für alle } x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}.$$

□

**Bemerkung.** Im Beweis haben wir benutzt, daß  $A$  symmetrisch positiv definit und  $P + P^t - A$  positiv definit ist!

## Relaxationsverfahren

ALLGEMEINES ITERATIONSVERFAHREN:

$$x^{(k+1)} = T x^{(k)} + f, \quad T = I - P^{-1} A, \quad f = P^{-1} b.$$

IDEE: erzwinge Konvergenz durch Dämpfungsparameter  $\omega \in (0, 1]$ :

RELAXATIONSVERFAHREN:

$$x^{(k+1)} = \omega (T x^{(k)} + f) + (1 - \omega) x^{(k)}.$$

**Bemerkung.** a)  $x$  ist genau dann Fixpunkt, wenn  $x = \omega (T x + f) + (1 - \omega) x$  gilt. Falls  $\omega \neq 0$  ist dies äquivalent zu  $x = T x + f$  bzw.  $A x = b$ .

b) Die Iterationsmatrix ist

$$T_\omega = \omega T + (1 - \omega) I = I - \omega P^{-1} A,$$

d.h. das Relaxationsverfahren ist ein Iterationsverfahren mit Prädiktionierer

$$P_\omega = \frac{1}{\omega} P.$$

ZIEL: Wähle  $\omega$  so, daß  $\rho(T_\omega)$  möglichst klein ist.

## Relaxiertes Jacobi-Verfahren (Jacobi over-relaxation – „JOR“)

JACOBI-VERFAHREN:

$$x^{(k+1)} = D^{-1} (b + (L + R) x^{(k)})$$

JOR-VERFAHREN:

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= \omega D^{-1} (b + (L + R) x^{(k)}) + (1 - \omega) x^{(k)}, & \text{d.h.} \\ x_i^{(k+1)} &= \frac{\omega}{a_{ii}} \left( b_i - \sum_{j \neq i} a_{ij} x_j^{(k)} \right) + (1 - \omega) x_i^{(k)}. \end{aligned}$$

PRÄKONDITIONIERER:

$$P_\omega = \frac{1}{\omega} P.$$

**Satz 5.13.** *Ist  $A$  eine symmetrisch positiv definite Matrix, dann konvergiert das JOR-Verfahren für alle  $\omega \in (0, 2/\rho(D^{-1}A))$ .*

*Beweis.*

$$T_\omega = I - \omega D^{-1}A,$$

also gilt:

$$\lambda \text{ ist genau dann Eigenwert von } D^{-1}A, \text{ wenn } 1 - \omega \lambda \text{ Eigenwert von } T_\omega \text{ ist.} \quad (5.4.5)$$

Ist  $A$  symmetrisch positiv definit, so auch  $D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$ , d.h. alle Eigenwerte von  $D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$  sind reell und positiv. Da  $D^{-1}A$  ähnlich zu  $D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$  ist, hat auch  $D^{-1}A$  nur reelle und positive Eigenwerte. Es folgt, dass das JOR-Verfahren genau dann konvergiert, wenn für den Spektralradius von  $T_\omega$  gilt:

$$\rho(T_\omega) = \max\{|1 - \omega \lambda| \mid \lambda \text{ Eigenwert von } D^{-1}A\} < 1.$$

Dies ist äquivalent dazu, dass  $\omega \lambda < 2$  für alle Eigenwerte von  $D^{-1}A$  gilt, und da  $D^{-1}A$  nur reelle und positive Eigenwerte hat, ist dies äquivalent zu

$$\omega \rho(D^{-1}A) < 2.$$

□

### Sukzessives Relaxationsverfahren (Successive over-relaxation – „SOR“)

Modifiziere JOR-Verfahren à la Gauß-Seidel-Verfahren:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{\omega}{a_{ii}} \left( b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right) + (1 - \omega) x_i^{(k)}.$$

In Matrixform:

$$x^{(k+1)} = \omega D^{-1} (b + L x^{(k+1)} + R x^{(k)}) + (1 - \omega) x^{(k)}.$$

Dies ist äquivalent zu:

$$\underbrace{\left(\frac{1}{\omega} D - L\right)}_{=P_\omega \text{ Pr\"{a}konditionierer}} x^{(k+1)} = \underbrace{\left(R + \frac{1-\omega}{\omega} D\right)}_{N_\omega} x^{(k)} + b.$$

**Satz 5.14.** *Ist  $A$  symmetrisch positiv definit, dann konvergiert das  $SOR$ -Verfahren für alle  $\omega \in (0, 2)$  monoton bzgl.  $\|\cdot\|_A$ .*

*Beweis.* Verfahre wie bei Satz 5.12:

$$P_\omega = \frac{1}{\omega} D - L, \quad P_\omega^t = \frac{1}{\omega} D - R, \quad A = D - L - R.$$

Dann ist

$$P_\omega + P_\omega^t - A = \left(\frac{2}{\omega} - 1\right) D$$

positiv definit für alle  $\omega < 2$ . Damit folgt die Behauptung.  $\square$

## 5.5 Abstiegsverfahren (optional)

Sei  $A \in \mathbb{R}^{d \times d}$  symmetrisch und positiv definit,  $b \in \mathbb{R}^d$ . Wir betrachten wieder das lineare Gleichungssystem

$$Ax = b. \tag{5.5.1}$$

Wie zuvor wollen wir die eindeutige Lösung  $x^* = A^{-1}b$  numerisch berechnen. Dieses Problem lässt sich in ein **Minimierungsproblem** der folgenden Funktion  $\phi$  umformulieren:

$$\phi(x) := \frac{1}{2} \langle x, Ax \rangle - \langle x, b \rangle.$$

**Lemma 5.15.** *Die Lösung  $x^* = A^{-1}b$  des linearen Gleichungssystems ist das eindeutige Minimum von  $\phi$ , und für alle  $x \in \mathbb{R}^d$  gilt:*

$$\phi(x) - \phi(x^*) = \frac{1}{2} \|x - x^*\|_A^2.$$

*Beweis.* Mit quadratischer Ergänzung sieht man, dass die Funktion

$$\phi(x) = \frac{1}{2} (x, x)_A - (x, A^{-1}b)_A = \frac{1}{2} \|x - x^*\|_A^2 - \frac{1}{2} \|x^*\|_A^2$$

minimal ist für  $x = x^*$ . Das Minimum ist dann

$$\phi(x^*) = -\frac{1}{2} \|x^*\|_A^2.$$

$\square$

ALLGEMEINES ITERATIONSVERFAHREN ZUR MINIMIERUNG VON  $\phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  (LINE SEARCH):

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}.$$

Hierbei bezeichnen

$$p^{(0)}, p^{(1)}, \dots \in \mathbb{R}^d, \quad \text{die „Suchrichtungen“},$$

$$\alpha_0, \alpha_1, \dots \in \mathbb{R}, \quad \text{die „Schrittweiten“},$$

Für die eben betrachtete Funktion  $\phi$  wählt man die Schrittweiten  $\alpha_k$  so, dass

$$\phi(x^{(k+1)}) = \phi(x^*) + \frac{1}{2} \|x^{(k+1)} - x^*\|_A^2$$

minimal unter allen  $x^{(k)} + \alpha p^{(k)}$ ,  $\alpha \in \mathbb{R}$ , ist. Dies ist der Fall für

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= A\text{-orthogonale Projektion von } x^* \text{ auf Gerade } x^{(k)} + \text{span}(p^{(k)}) \\ &= x^{(k)} + \left( x^* - x^{(k)}, \frac{p^{(k)}}{\|p^{(k)}\|_A} \right)_A \frac{p^{(k)}}{\|p^{(k)}\|_A}, \end{aligned}$$

d.h.

$$\alpha_k^{\text{opt}} = \frac{(x^* - x^{(k)}, p^{(k)})_A}{(p^{(k)}, p^{(k)})_A} = \frac{\langle Ax^* - Ax^{(k)}, p^{(k)} \rangle}{\langle p^{(k)}, Ap^{(k)} \rangle}.$$

Es gilt also:

$$\alpha_k^{\text{opt}} = \frac{\langle r^{(k)}, p^{(k)} \rangle}{\langle p^{(k)}, Ap^{(k)} \rangle} \quad \text{mit Residuum} \quad r^{(k)} = b - Ax^{(k)}.$$

Wir betrachten nun zwei spezielle Abstiegsverfahren.

## Gradientenverfahren

Sei

$$p^{(k)} = -\nabla\phi(x^{(k)}), \quad \text{die Richtung des steilsten Abstiegs.}$$

In unserem Fall gilt:

$$\begin{aligned} \phi(x) &= \frac{1}{2} \langle x, Ax \rangle - \langle x, b \rangle, & A \text{ symmetrisch,} \\ p^{(k)} &= -\nabla\phi(x^{(k)}) = b - Ax^{(k)} = r^{(k)}, & \text{„Residuum von } x^{(k)}\text{“,} \\ \alpha_k &= \frac{\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle}{\langle r^{(k)}, Ar^{(k)} \rangle} = \frac{\|r^{(k)}\|^2}{\|r^{(k)}\|_A^2}. \end{aligned}$$

Das Residuum lässt sich rekursiv berechnen:

$$\begin{aligned} r^{(k+1)} &= b - Ax^{(k+1)} = b - Ax^{(k)} - \alpha_k Ar^{(k)} \\ &= r^{(k)} - \alpha_k Ar^{(k)}. \end{aligned}$$

Damit erhalten wir folgenden Algorithmus:

**Algorithmus 5.16** (Steepest Descent).

INPUT:  $A \in \mathbb{R}^{d \times d}$  symmetrisch positiv definit,  $b \in \mathbb{R}^d$ ,  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^d$ ,

OUTPUT: Iterationsfolgen  $x^{(k)} \in \mathbb{R}^d$ ,  $r^{(k)} \in \mathbb{R}^d$ .

$r^{(0)} := b - Ax^{(0)}$

**for**  $k := 0, 1, \dots$  **do**

$$\begin{aligned} \alpha_k &:= \frac{\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle}{\langle r^{(k)}, Ar^{(k)} \rangle} \\ x^{(k+1)} &:= x^{(k)} + \alpha_k r^{(k)} \\ r^{(k+1)} &:= r^{(k)} - \alpha_k Ar^{(k)} \end{aligned}$$

**end for**

**Bemerkung.** Die Iterationsmatrix im  $k$ -ten Schritt des Gradientenverfahrens ist

$$T^{(k)} = I - \alpha_k A, \quad (\text{keine Präkonditionierung!}).$$

Das Gradientenverfahren ist also ein **nicht-stationäres** (d.h. die Iterationsmatrix hängt von  $k$  ab), **nicht präkonditioniertes Verfahren mit Relaxationsparameter**  $\alpha_k$ .

**Satz 5.17.** Ist  $A$  symmetrisch positiv definit, dann konvergiert das Gradientenverfahren für jeden Startwert  $x^{(0)}$  monoton bzgl. der Energienorm  $\|\cdot\|_A$ , und es gilt:

$$\|x^{(k+1)} - x^*\|_A \leq \frac{K_2(A) - 1}{K_2(A) + 1} \cdot \|x^{(k)} - x^*\|_A,$$

wobei  $K_2(A) = \|A\|_2 \cdot \|A^{-1}\|_2$  die  $l^2$ -Kondition der Matrix  $A$  ist.

Wir zeigen zunächst:

**Lemma 5.18.** Ist  $A$  symmetrisch positiv definit mit Eigenwerten  $0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_d$ , dann gilt:

$$\|A\|_2 = \max_{\|x\|=1} \|Ax\| = \lambda_d = \varrho(A),$$

$A^{-1}$  ist symmetrisch positiv definit mit Eigenwerten  $\frac{1}{\lambda_1} \geq \frac{1}{\lambda_2} \geq \dots \geq \frac{1}{\lambda_d} > 0$  und es gilt:

$$K_2(A) = \|A\|_2 \cdot \|A^{-1}\|_2 = \frac{\lambda_d}{\lambda_1}.$$

*Beweis.* Da  $A$  symmetrisch positiv definit ist, gibt es eine Orthonormalbasis von Eigenvektoren  $e_i$  von  $A$ . D.h. es gilt  $\langle e_i, e_j \rangle = \delta_{ij}$  und jeder Vektor  $x$  lässt sich darstellen als  $x = \sum_{i=1}^d c_i e_i$ . Damit folgt:

$$Ax = \sum_{i=1}^d c_i \lambda_i e_i, \quad \|x\|^2 = \sum_{i=1}^d c_i^2, \quad \|Ax\|^2 = \sum_{i=1}^d c_i \lambda_i^2.$$

Weiterhin gilt

$$\|A\|_2 = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} = \max_{i=1 \dots d} |\lambda_i| = \lambda_d.$$

Analog kann man

$$\|A^{-1}\|_2 = \max_{i=1 \dots d} \left| \frac{1}{\lambda_i} \right| = \frac{1}{\lambda_1}$$

zeigen. □

*Beweis von Satz 5.17.* Sei  $T_\alpha := I - \alpha A$  die Iterationsmatrix des Verfahrens mit Relaxationsparameter  $\alpha$ .

i) VERGLEICH MIT  $T_\alpha$ -VERFAHREN:

Wir behaupten, dass der Fehler des Gradientenverfahrens durch den Fehler des Verfahrens mit  $T_\alpha$  für alle  $\alpha \in \mathbb{R}$  beschränkt ist:

$$\|x^{(k+1)} - x^*\|_A \leq \|T_\alpha(x^{(k+1)} - x^*)\|_A.$$

Nach Definition ist  $x^{(k+1)}$  die  $A$ -orthogonale Projektion von  $x^*$  auf die Gerade  $x^{(k)} + \alpha r^{(k)}$ ,  $\alpha \in \mathbb{R}$ . Also gilt für alle  $\alpha \in \mathbb{R}$ :

$$\begin{aligned} \|x^{(k+1)} - x^*\|_A &\leq \|x^{(k)} + \alpha r^{(k)} - x^*\|_A \\ &= \|T_\alpha x^{(k)} + \alpha b - T_\alpha x^* - \alpha b\|_A = \|T_\alpha(x^{(k+1)} - x^*)\|_A. \end{aligned}$$

ii) KONTRAKTIVITÄT VON  $T_\alpha$ :

Seien  $0 < \lambda < \dots < \lambda_d$  die Eigenwerte von  $A$ . Wir behaupten:

$$\|T_\alpha y\|_A \leq \max_{i=1 \dots d} |1 - \alpha \lambda_i| \cdot \|y\|_A \quad \text{für alle } y \in \mathbb{R}^d.$$

Seien  $e_i$  die Eigenvektoren zu  $\lambda_i$  und  $\langle e_i, e_j \rangle = \delta_{ij}$ . Dann gilt:

$$\begin{aligned} T_\alpha e_i &= (1 - \alpha \lambda_i) e_i, & \text{und} \\ AT_\alpha e_i &= \lambda_i (1 - \alpha \lambda_i) e_i. \end{aligned}$$

Für  $y = \sum_{i=1}^n c_i e_i$  folgt:

$$\begin{aligned} \|T_\alpha y\|_A^2 &= (T_\alpha y, AT_\alpha y) \\ &= \left( \sum_{i=1}^d c_i (1 - \alpha \lambda_i) e_i, \sum_{i=1}^d c_i \lambda_i (1 - \alpha \lambda_i) e_i \right) = \sum_{i=1}^d c_i^2 \lambda_i (1 - \alpha \lambda_i)^2. \end{aligned}$$

Mit

$$\|y\|_A^2 = (y, Ay) = \sum_{i=1}^d c_i^2 \lambda_i$$

folgt dann

$$\|T_\alpha y\|_A^2 \leq \max_{i=1..d} (1 - \alpha \lambda_i)^2 \|y\|_A^2.$$

iii) OPTIMIEREN DER ABSCHÄTZUNG:

Nach i) und ii) gilt für alle  $\alpha \geq 0$ :

$$\|x^{(k+1)} - x^*\|_A \leq \|T_\alpha (x^{(k)} - x^*)\|_A \leq c(\alpha) \cdot \|x^{(k)} - x^*\|_A,$$

wobei

$$c(\alpha) := \max_{i=1..d} |1 - \alpha \lambda_i| = \max(1 - \alpha \lambda_1, \alpha \lambda_d - 1)$$

wegen  $1 - \alpha \lambda_1 \geq 1 - \alpha \lambda_2 \geq \dots \geq 1 - \alpha \lambda_d$ . Um eine möglichst gute Abschätzung zu erhalten, wählen wir  $\alpha$  nun so, dass  $c(\alpha)$  minimal wird. Dies ist genau dann der Fall, wenn:

$$\alpha \lambda_d - 1 = 1 - \alpha \lambda_1, \quad \text{d.h.} \quad \alpha = \frac{2}{\lambda_d + \lambda_1},$$

und für diese Wahl von  $\alpha$  gilt:

$$c(\alpha) = 1 - \alpha \lambda_1 = \frac{\lambda_d - \lambda_1}{\lambda_d + \lambda_1} = \frac{\frac{\lambda_d}{\lambda_1} - 1}{\frac{\lambda_d}{\lambda_1} + 1} = \frac{K_2(A) - 1}{K_2(A) + 1}.$$

□

**Bemerkung.** a) Wegen

$$\frac{K_2(A) - 1}{K_2(A) + 1} = 1 - \frac{2}{K_2(A) + 1}$$

kann die Konvergenzgeschwindigkeit des Gradientenverfahrens bei Matrizen mit großer Kondition relativ langsam sein.

b) Das Gradientenverfahren lässt sich auch zur Minimierung nicht-quadratischer Funktionen  $\phi$  verwenden – aber es ist dann im Allgemeinen nicht klar, wie die Schrittweiten  $\alpha_k$  geeignet zu wählen sind.

## Verfahren der konjugierten Gradienten (CG)

**Beispiel** (Abstiegsverfahren im  $\mathbb{R}^2$ ). Gradientenverfahren für  $\phi(x) = \text{const}$ :

Grafik fehlt noch (!!)

Im allgemeinen gilt  $x^{k+2} \neq x^*$ , d.h. die Iteration bringt nicht ab!

Kann man im zweidimensionalen Fall erzwingen, dass  $x^*$  im nächsten Schritt getroffen wird (also das Verfahren abbricht)? Eine hinreichende Bedingung ist:

$$p^{(k+1)} \parallel x^* - x^{(k+1)}, \quad \text{d.h. die } k+1\text{-te Suchrichtung ist parallel zu } x^* - x^{(k+1)}. \quad (5.5.2)$$

Nach Konstruktion ist  $x^{(k+1)}$  die  $A$ -orthogonale Projektion von  $x^*$  auf  $x^{(k)} + \text{span}(p^{(k)})$ , also gilt:

$$x^* - x^{(k+1)} \perp_A p^{(k)}, \quad \text{d.h. die } k\text{-te Suchrichtung ist } A\text{-orthogonal zu } x^* - x^{(k+1)}.$$

Im zweidimensionalen Fall folgt aus  $p^{(k+1)} \perp_A p^{(k)}$  die Gültigkeit von (5.5.2). Dies motiviert folgende **Modifikation des Gradientenverfahrens**:

$$p^{(k+1)} = r^{(k+1)} - \frac{(r^{(k+1)}, p^{(k)})_A}{(p^{(k)}, p^{(k)})_A} p^{(k)}.$$

Es gilt nun:

$$p^{(k+1)} \perp_A p^{(k)},$$

d.h.  $p^{(k+1)}$  ist  $A$ -konjugiert zu  $p^{(k)}$  („konjugierter Gradient“).  $r^{(k+1)}$  bezeichnet das Residuum des Gradientenverfahrens des vorigen Abschnitts.

**Algorithmus 5.19** (CG-Verfahren).

INPUT:  $A \in \mathbb{R}^{d \times d}$  symmetrisch positiv definit,  $b \in \mathbb{R}^d$ ,  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^d$ ,

OUTPUT: Iterationsfolgen  $x^{(k)} \in \mathbb{R}^d$ ,  $r^{(k)} \in \mathbb{R}^d$ ,  $p^{(k)} \in \mathbb{R}^d$ .

$$p^{(0)} := r^{(0)} := b - Ax^{(0)} \quad (5.5.3)$$

**for**  $k := 0, 1, \dots$  **do**

$$\alpha_k := \frac{\langle r^{(k)}, p^{(k)} \rangle}{(p^{(k)}, p^{(k)})_A} \quad (5.5.4)$$

$$x^{(k+1)} := x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)} \quad (5.5.5)$$

$$r^{(k+1)} := r^{(k)} - \alpha_k A p^{(k)} \quad (5.5.6)$$

$$\beta_k := \frac{(r^{(k+1)}, p^{(k)})_A}{(p^{(k)}, p^{(k)})_A} \quad (5.5.7)$$

$$p^{(k+1)} := r^{(k+1)} - \beta_k p^{(k)} \quad (5.5.8)$$

**end for**

Wir wollen nun zeigen, dass das CG-Verfahren im  $\mathbb{R}^d$  nach höchstens  $d$  Schritten abbricht, und die exakte Lösung  $x^*$  liefert. Sei dazu

$$V_k := \text{span}\{p^{(0)}, \dots, p^{(k)}\}.$$

Durch Induktion folgt sofort aus (5.5.3), (5.5.6) und (5.5.8):

$$V_k = \text{span}\{r^{(0)}, \dots, r^{(k)}\} = \text{span}\{r^{(0)}, Ar^{(0)}, \dots, A^k r^{(0)}\}.$$

$V_k$  heißt auch **Krylov-Raum**.

**Satz 5.20.** Für alle  $k \geq 0$  gilt:

i)  $x^{(k)} - x^* \perp_A V_k$ ,

ii)  $r^{(k+1)} \perp_A V_k$ , d.h.  $r^{(0)}, r^{(1)}, \dots, r^{(k+1)}$  sind orthogonal,

iii)  $p^{(k+1)} \perp_A V_k$ , d.h.  $p^{(0)}, p^{(1)}, \dots, p^{(k+1)}$  sind  $A$ -orthogonal.

Inbesondere folgt  $r^{(k)} = 0$ , also  $x^{(k)} = x^*$ , für alle  $k \geq d$ , d.h. das CG-Verfahren liefert nach maximal  $d$  Schritten die exakte Lösung.

**Korollar** (Berechnung der Koeffizienten und Residuen).

$$\alpha_k = \frac{\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle}{\langle p^{(k)}, A p^{(k)} \rangle}, \quad \beta_k = -\frac{\langle r^{(k+1)}, r^{(k+1)} \rangle}{\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle}.$$

*Beweis.* Der Beweis verbleibt als Übungsaufgabe.  $\square$

Diese Art der Berechnung ist effizienter und numerisch stabiler als die Formel von oben, und sollte daher in Implementationen des CG-Verfahrens verwendet werden.

*Beweis von Satz 5.20.* Die Aussagen werden durch vollständige Induktion nach  $k$  bewiesen. Der Induktionsanfang ist eine Übungsaufgabe. Seien die drei Aussagen für  $k$  wahr.

- i) Nach Konstruktion ist  $x^{(k+1)}$  die  $A$ -orthogonale Projektion auf die Gerade  $x^{(k)} + \text{span}(p^{(k)})$ , also gilt

$$(x^{(k+1)} - x^*, p^{(k)})_A = 0.$$

Zudem gilt nach ii):

$$x^{(k+1)} - x^* = x^{(k)} - x^* + \alpha p^{(k)}.$$

Der letzte Ausdruck ist nach Induktionsvoraussetzung  $A$ -orthogonal zu  $V_{k-1}$ , also folgt:

$$x^{(k+1)} - x^* \perp_A V_k.$$

- ii) Für alle  $z \in V^{(k)}$  gilt nach i):

$$0 = (x^{(k+1)} - x^*, z)_A = \langle Ax^{(k+1)} - Ax^*, z \rangle = \langle -r^{(k+1)}, z \rangle.$$

- iii) Nach Konstruktion ist  $p^{(k+1)}$   $A$ -orthogonal zu  $p^{(k)}$ . Zudem gilt für  $z \in V_{k-1}$  nach Induktionsvoraussetzung:

$$(p^{(k+1)}, z)_A = (r^{(k+1)}, z)_A - \beta_k (p^{(k)}, z)_A = \langle r^{(k+1)}, Az \rangle = 0.$$

Also gilt  $p^{(k+1)} \perp_A V_{k-1}$ , und damit  $p^{(k+1)} \perp_A V_k$ .

$\square$

In der Praxis wird das CG-Verfahren häufig schon nach weniger als  $d$  Schritten beendet. Hier gilt folgende Fehlerabschätzung:

**Satz 5.21.** *Ist  $A$  symmetrisch positiv definit, dann gilt*

$$\|x^{(k)} - x^*\|_A \leq \frac{2c^k}{1+c^{2k}} \|x^{(0)} - x^*\|_A,$$

wobei

$$c = \frac{\sqrt{K_2(A)} - 1}{\sqrt{K_2(A)} + 1} = 1 - \frac{2}{\sqrt{K_2(A)} + 1}.$$

*Beweis.* siehe **Quarteroni/Sacco/Saleri**: „Numerische Mathematik 1“. □

**Bemerkung** (Aufwand des CG-Verfahrens.). a) Maximaler Aufwand:

- pro Schritt:  $O(d^2)$  (Multiplikation Matrix  $\times$  Vektor),
- insgesamt:  $O(d^3)$  (exakte Lösung nach  $d$  Schritten).

b) Matrix dünn besetzt (vgl. Programmieraufgabe):

- pro Schritt nur  $O(d)$ .
- insgesamt maximal  $O(d^2)$ .

c) Approximative Lösung: Schrittzahl  $\ll d$ . Daher ist weitere Reduktion des Aufwands möglich.

# Kapitel 6

## Interpolation und Quadratur

### 6.1 Stückweise lineare Interpolation

Seien  $[a, b] \subseteq \mathbb{R}$  ein Intervall,  $-\infty < a < b < \infty$ ,  $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$  **Stützstellen (Knoten)**, und  $y_0, y_1, \dots, y_n \in \mathbb{R}$ . Dann ist

$$\Delta = \{x_0, x_1, \dots, x_n\} \quad \text{ein eindimensionales Gitter.}$$

**Definition.**

$$s(x) := \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} \cdot y_i + \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} \cdot y_{i+1} \quad \text{für } x \in [x_i, x_{i+1}], \quad i = 0, \dots, n-1,$$

heißt **stückweise lineare Interpolation** der Punkte  $(x_i, y_i)$ .

**Bemerkung.**

$$S_1(\Delta) = \{s : [a, b] \rightarrow \mathbb{R} \mid s \text{ stetig, } s \text{ linear auf } [x_i, x_{i+1}] \text{ für alle } i = 0, \dots, n-1\}$$

ist ein Vektorraum mit Dimension  $n + 1$ , **der Raum der linearen Splines**.

**Satz 6.1** (Charakterisierung der stückweise linearen Interpolation als Energieminimierer). *Sei  $s \in S_1(\Delta)$ , und  $f \in C([a, b])$  stetig differenzierbar auf jedem der Teilintervalle  $[x_i, x_{i+1}]$ ,  $i = 0, \dots, n$ , mit*

$$f(x_i) = s(x_i) \quad i = 0, \dots, n.$$

Dann gilt:

$$\int_a^b s'(x)^2 dx \leq \underbrace{\int_a^b f'(x)^2 dx}_{\text{„Energie von } f\text{“}}$$

*Beweis.* Wir definieren das „**Energieskalarprodukt**“

$$(f, g) := \int_a^b f'(x)g'(x)dx$$

zweier stückweise stetig differenzierbar Funktionen  $f, g \in C([a, b])$ . Da  $s'(x)$  konstant auf  $[x_{i-1}, x_i]$  ist, also  $s'(x) =: c_i$  und  $f = g$  auf  $\Delta$  gilt, folgt

$$(s, f - s) = \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} s'(x) (f'(x) - g'(x))dx = \sum_{i=1}^n c_i (f - s)|_{x_{i-1}}^{x_i} = 0,$$

d.h.  $s$  ist orthogonal zu  $f - s$ , und damit:

$$\begin{aligned} (f, f) &= (s + (f - s), s + (f - s)) \\ &= (s, s) + (f - s, f - s) + 2(s, f - s) \geq (s, s). \end{aligned}$$

□

Zu einer beliebigen stetigen Funktion  $f \in C([a, b])$  betrachten wir nun die stückweise lineare Interpolation bzgl. des Gitters  $\Delta$ , d.h. die Funktion

$$\begin{aligned} L_1 f &:= s \in S_1(\Delta), \quad \text{mit} \\ s(x_i) &= f(x_i) \quad \text{für } i = 0, 1, \dots, n. \end{aligned}$$

Die Abbildung

$$L_1 : C([a, b]) \longrightarrow S_1(\Delta) \subset C([a, b])$$

ist eine lineare Projektion. Wir wollen nun eine Abschätzung des Approximationsfehlers  $f - L_1 f$  der stückweise linearen Interpolation herleiten. Dazu betrachten wir die vom  $L^2$ -Skalarprodukt

$$(f, g)_{L^2(a,b)} := \int_a^b f(x)g(x)dx$$

induzierte Norm

$$\|f\|_{L^2(a,b)} = \sqrt{(f, f)_{L^2(a,b)}} = \sqrt{\int_a^b f(x)^2 dx}.$$

Sei  $C^2([a, b])$  der Raum aller auf  $[a, b]$  zweimal stetig differenzierbaren Funktionen  $f$ , wobei die Ableitungen in den Randpunkten einseitig sind.

**Satz 6.2.** Für  $f \in C^2([a, b])$  gilt:

$$\begin{aligned} \|f - L_1 f\|_{L^2(a,b)} &\leq \frac{h^2}{2} \|f''\|_{L^2(a,b)}, \quad \text{und} \\ \|f' - (L_1 f)'\|_{L^2(a,b)} &\leq \frac{h}{\sqrt{2}} \|f''\|_{L^2(a,b)}, \end{aligned}$$

wobei  $h := \max_{1 \leq i \leq n} |x_i - x_{i-1}|$  die (maximale) Gitterweite ist.

Zum Beweis dieses Satzes benötigen wir:

**Lemma 6.3** (Poincaré-Ungleichung). Für  $g \in C^2([\alpha, \beta])$ ,  $-\infty < \alpha < \beta < \infty$ , mit  $g(\alpha) = g(\beta) = 0$  gilt:

$$\int_{\alpha}^{\beta} g^2 dx \leq \frac{(\beta - \alpha)^2}{2} \int_{\alpha}^{\beta} (g')^2 dx \leq \frac{(\beta - \alpha)^2}{2} \sqrt{\int_{\alpha}^{\beta} g^2 dx} \sqrt{\int_{\alpha}^{\beta} (g'')^2 dx}.$$

*Beweis.* Für  $x \in [\alpha, \beta]$  gilt nach dem Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung und der Cauchy-Schwarz-Ungleichung:

$$\begin{aligned} g(x)^2 &= \left( g(\alpha) + \int_{\alpha}^x g'(y) dy \right)^2 = \left( 0 + (g', 1)_{L^2(\alpha, x)} \right)^2 \\ &\leq \|g'\|_{L^2(\alpha, x)}^2 \|1\|_{L^2(\alpha, x)}^2 = \|g'\|_{L^2(\alpha, x)}^2 \int_{\alpha}^x 1^2 dy \\ &\leq (x - \alpha) \|g'\|_{L^2(\alpha, \beta)}^2, \end{aligned}$$

also

$$\int_{\alpha}^{\beta} g(x)^2 dx \leq \int_{\alpha}^{\beta} (x - \alpha) dx \int_{\alpha}^{\beta} (g')^2 dx = \frac{(\beta - \alpha)^2}{2} \int_{\alpha}^{\beta} (g')^2 dx.$$

Somit ist die erste Ungleichung bewiesen. Die zweite Ungleichung folgt durch partielle Integration und die Cauchy-Schwarz-Ungleichung:

$$\begin{aligned} \int_{\alpha}^{\beta} (g')^2 dx &= g g' \Big|_{\alpha}^{\beta} - \int_{\alpha}^{\beta} g g'' dx \\ &= 0 - (g, g'')_{L^2(\alpha, \beta)} \leq \|g\|_{L^2(\alpha, \beta)} \|g''\|_{L^2(\alpha, \beta)}. \end{aligned}$$

□

*Beweis von Satz 6.2.* Sei  $g := f - L_1 f$ . Dann gilt:

$$g(x_i) = 0 \quad \text{für } i = 0, \dots, n.$$

Aus Lemma 6.3 folgt wegen  $|x_{i+1} - x_i| \leq h$ :

$$\begin{aligned} \int_{x_i}^{x_{i+1}} g^2 dx &\leq \left( \frac{h^2}{2} \right)^2 \int_{x_i}^{x_{i+1}} (g'')^2 dx, & \text{und (damit)} \\ \int_{x_i}^{x_{i+1}} (g')^2 dx &\leq \frac{h^2}{2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (g'')^2 dx & \text{für } i = 0, \dots, n-1. \end{aligned}$$

Wegen  $g'' = f''$  folgt die Behauptung durch Summation über  $i$ . □

ANWENDUNG AUF NUMERISCHE INTEGRATION („QUADRATUR“): Sei  $f \in C([a, b])$ .

Gesucht ist

$$I[f] = \int_a^b f(x) dx.$$

ANSATZ:

Stützstellen  $x_i = a + i h$ , ( $i = 0, 1, \dots, n$ ), mit Maschenweite  $h = \frac{b-a}{n}$ .

$$\int_a^b f dx \approx \int_a^b s_n dx,$$

wobei  $s_n$  stückweise lineare Interpolation von  $f$  bzgl.  $\{x_0, \dots, x_n\}$ .

**Definition.**

$$\begin{aligned} T_n[f] &:= \int_a^b s_n dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} s_n dx \\ &= h \cdot \sum_{i=0}^{n-1} \frac{f(x_{i+1}) + f(x_i)}{2} \\ &= h \cdot \left( \frac{1}{2} f(x_0) + f(x_1) + f(x_2) + \dots + f(x_{n-1}) + \frac{1}{2} f(x_n) \right) \end{aligned}$$

heißt *n-te (zusammengesetzte) Trapezformel* zur Approximation von  $I[f]$ .

FEHLERABSCHÄTZUNG:

Sei

$$\varepsilon_n := I[f] - T_n[f].$$

**Satz 6.4.** Für  $f \in C^2([a, b])$  existiert ein  $\xi \in (a, b)$  mit

$$\varepsilon_n = -\frac{b-a}{12} h^2 f''(\xi).$$

*Beweis.*

$$\varepsilon_n = \int_a^b (f - s_n) dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (f - s_n) dx \quad (6.1.1)$$

Durch zweimalige partielle Integration erhalten wir

$$\begin{aligned} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (f - s_n) dx &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx - \frac{x_{i+1} - x_i}{2} \cdot (f(x_{i+1}) + f(x_i)) \\ &= - \int_{x_i}^{x_{i+1}} f'(x) \left( x - \frac{x_{i+1} + x_i}{2} \right) dx \\ &= - \int_{x_i}^{x_{i+1}} f''(x) \frac{1}{2} \underbrace{(x - x_i)(x_{i+1} - x)}_{\geq 0} dx \\ &\geq - \max_{x \in [a, b]} f''(x) \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{1}{2} (x - x_i)(x_{i+1} - x) dx = -\frac{h^3}{12} \max f'' \end{aligned}$$

für  $i = 0, 1, \dots, n - 1$ , und damit gilt nach Gleichung (6.1.1) auch:

$$\varepsilon_n \geq -n \cdot \frac{h^3}{12} \max f'' = -\frac{b-a}{12} h^2 \max f''.$$

Analog folgt:

$$\varepsilon_n \leq -\frac{b-a}{12} h^2 \min f''.$$

Die Behauptung folgt nun aus dem Zwischenwertsatz, da  $f''$  stetig ist.  $\square$

Um eine Approximation höherer Ordnung zu erhalten, werden wir unten stückweise lineare Funktionen durch stückweise Polynome ersetzen. Als ersten Schritt überlegen wir uns deshalb, wie wir gegebene Funktionswerte auf einem Teilintervall durch ein Polynom interpolieren können.

## 6.2 Polynominterpolation

Seien

$$\Pi_n = \left\{ x \mapsto \sum_{i=0}^n a_i x^i \mid a_0, \dots, a_n \in \mathbb{R} \right\} \quad \text{Polynome vom Grad } \leq n, \quad \text{und}$$

$$-\infty < a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq b < \infty \quad \text{Stützstellen bzw. Knoten}$$

innerhalb des Intervalls.

LAGRANGE-INTERPOLATIONSPROBLEM:

Gesucht ist  $p \in \Pi_n$  mit

$$p(x_i) = y_i \quad \text{für } i = 0, \dots, n, \quad (6.2.1)$$

wobei  $y_0, \dots, y_n \in \mathbb{R}$  gegeben sind.

NOTATION:  $p^{(j)}$  bezeichnet im folgenden die  $j$ -te Ableitung von  $p$ .

VERALLGEMEINERTES / HERMITE-INTERPOLATIONSPROBLEM:

Seien  $k_0, \dots, k_n \in \mathbb{N}_0$ . Gesucht ist ein  $p \in \Pi_{N-1}$ , wobei  $N = \sum_{i=0}^n (k_i + 1)$  mit

$$p^{(j)}(x_i) = y_{i,j} \quad \text{für alle } i, j \text{ mit } 0 \leq i \leq n, 0 \leq j \leq k_i, \quad (6.2.2)$$

und  $y_{i,j} \in \mathbb{R}$  gegeben sind. Für  $k_0 = \dots = k_n = 0$  ergibt sich das Lagrange-Interpolationsproblem als Spezialfall.

**Satz 6.5.** *Das verallgemeinerte Interpolationsproblem hat für alle  $y_{i,j} \in \mathbb{R}$ , ( $0 \leq i \leq n$ ,  $0 \leq j \leq k_i$ ), eine eindeutige Lösung  $p \in \Pi_{N-1}$ .*

*Beweis.* Wir betrachten die lineare Abbildung

$$\begin{aligned} l : \Pi_{N-1} &\rightarrow \mathbb{R}^N, \\ p &\mapsto (p^{(j)}(x_i))_{0 \leq i \leq n, 0 \leq j \leq k_i}. \end{aligned}$$

Die Abbildung  $l$  ist injektiv. Gilt nämlich

$$p^{(j)}(x_i) = 0 \quad \text{für alle } i, j \text{ mit } 0 \leq i \leq n, 0 \leq j \leq k_i,$$

dann hat  $p$  eine  $(k_i + 1)$ -fache Nullstelle bei  $x_i$  für alle  $i = 0, 1, \dots, n$ . Somit hat  $p$  insgesamt  $N = \sum_{i=0}^n (k_i + 1)$  Nullstellen (gezählt mit Vielfachheit). Da  $p \in \Pi_{N-1}$  ein Polynom vom Grad  $\leq N - 1$  ist, folgt  $p \equiv 0$ , d.h.  $l$  ist injektiv.

Wegen  $\dim(\Pi_{N-1}) = N = \dim(\mathbb{R}^N)$  folgt weiter sogar, dass  $l$  bijektiv ist, d.h. zu jedem  $y = (y_{i,j}) \in \mathbb{R}^N$  existiert genau ein  $p \in \Pi_{N-1}$  mit  $l(p) = y$ .  $\square$

ANWENDUNG: POLYNOMINTERPOLATION EINER FUNKTION  $f$

Sei  $f \in C^{\max k_i}([a, b])$ . Dann gibt es genau ein Polynom  $p \in \Pi_n$  mit der Eigenschaft

$$p^{(j)}(x_i) = f^{(j)}(x_i) \quad \text{für alle } i, j \text{ mit } 0 \leq i \leq n, 0 \leq j \leq k_i.$$

Im folgenden Satz wird der Approximationsfehler des Lagrange-Interpolationspolynoms abgeschätzt.

**Satz 6.6.** *Sei  $f \in C^{n+1}([a, b])$ , und  $p \in \Pi_n$  mit*

$$p(x_i) = f(x_i) \quad \text{für alle } i = 0, 1, \dots, n.$$

*Dann gibt es zu jedem  $x \in [a, b]$  ein  $\xi \in (a, b)$  mit*

$$f(x) - p(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n). \quad (6.2.3)$$

**Bemerkung.** a)  $\omega(x) := (x - x_0) \cdots (x - x_n)$  heißt **Knotenpolynom** zu den Stützstellen / Knoten  $x_0, \dots, x_n$ . Beachte:  $\omega$  ist ein Polynom vom Grad  $n + 1$ .

b) Für den maximalen Interpolationsfehler auf dem Intervall  $[a, b]$  ergibt sich folgende Abschätzung:

$$\|f - p\| := \max_{a \leq x \leq b} |f(x) - p(x)| \leq \frac{1}{(n+1)!} \|f^{(n+1)}\| \|\omega\|.$$

- c) Für das verallgemeinerte Interpolationsproblem gelten entsprechende Aussagen, siehe z.B. Deufflhard/Hohmann: „Numerische Mathematik“. Das Knotenpolynom ist in diesem Fall zu ersetzen durch:

$$\omega(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i)^{k_i+1} \in \Pi_N.$$

*Beweis von Satz 6.6.* Für  $x \in \{x_0, \dots, x_n\}$  sind beide Seiten von (6.2.3) gleich 0. Sei also  $x \notin \{x_0, \dots, x_n\}$ . Für  $\lambda \in \mathbb{R}$  betrachten wir:

$$h(t) := f(t) - p(t) - \lambda \omega(t).$$

Es gilt  $h(x_i) = 0$  für  $i = 0, 1, \dots, n$ . Zudem gilt  $h(x) = 0$ , wenn wir  $\lambda$  geeignet wählen. In diesem Fall hat  $h$   $n + 2$  Nullstellen, also hat nach dem Satz von Rolle  $h'$   $n + 1$  Nullstellen,  $h''$   $n$  Nullstellen und schließlich  $h^{(n+1)}$  mindestens eine Nullstelle  $\xi \in (a, b)$ . Mit  $p \in \Pi_n$  folgt:

$$\begin{aligned} 0 &= h^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - p^{(n+1)}(\xi) - \lambda \omega^{(n+1)}(\xi) \\ &= f^{(n+1)}(\xi) - \lambda (n + 1)!, \end{aligned}$$

also

$$\lambda = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n + 1)!},$$

und damit:

$$0 = h(x) = f(x) - p(x) - \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n + 1)!} \omega(x).$$

□

**Beispiel (Runge).** Sei

$$f(x) = \frac{1}{1 + x^2}, \quad x \in [-5, 5],$$

und  $p_n(x)$  das Interpolationspolynom zu den äquidistanten Stützstellen  $x_i = -5 + 10 \frac{i}{n}$ , ( $i = 0, \dots, n$ ). Dann divergiert  $|f(x) - p_n(x)|$  für  $|x| \geq 3.64$  (ohne Beweis).

Das Interpolationspolynom ist im allgemeinen zur Approximation ungeeignet – insbesondere bei hohem Grad und äquidistanten Stützstellen! Die Ursache sind große Oszillationen des Interpolationspolynoms.

## Wahl der Stützstellen, Čebyšev-Polynome

Nach Bemerkung b) oben lässt sich der maximale Interpolationsfehler auf dem Intervall  $[a, b]$  durch die Supremums-Norm  $\|\omega\|$  des Knotenpolynoms  $\omega(x) := (x - x_0) \cdots (x - x_n)$  abschätzen. Daher liegt es nahe  $\|\omega\|$  durch geschickte Wahl der Knoten zu minimieren. Dazu können wir o.B.d.A.  $[a, b] = [-1, 1]$  annehmen - anderenfalls führen wir eine affine Koordinatentransformation durch, die das Intervall  $[a, b]$  auf  $[-1, 1]$  abbildet.

Man kann zeigen (siehe Vorlesung), dass  $\|\omega\|$  für  $[a, b] = [-1, 1]$  genau dann minimal ist, wenn  $\omega$  ein Vielfaches des  $n + 1$ -ten Čebyšev-Polynoms

$$T_{n+1}(x) = \cos((n + 1) \arccos(x)), \quad x \in [-1, 1],$$

ist. Aus den Additionstheoremen für die Kosinusfunktion folgt die Dreitermrekursionsformel

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1, \\ T_1(x) &= x, \\ T_{k+1}(x) &= 2xT_k(x) - T_{k-1}(x). \end{aligned}$$

Insbesondere ist  $T_k$  tatsächlich für jedes  $k$  ein Polynom  $k$ -ten Grades. Dass das normierte Čebyšev-Polynom  $T_k$  die Supremumsnorm auf  $[-1, 1]$  unter allen normierten Polynomen vom Grad  $k$  minimiert, liegt daran, dass  $T_k(x)$  auf  $[-1, 1]$  mit maximaler Häufigkeit ( $k$  mal) zwischen dem Maximal- und Minimalwert  $+1$  und  $-1$  hin und her oszilliert, siehe Vorlesung.

Insbesondere hat  $T_{n+1}$   $n + 1$  verschiedene Nullstellen, die explizit durch

$$x_i = -\cos \frac{(2i + 1)\pi}{2(n + 1)} \quad \text{für } i = 0, \dots, n$$

gegeben sind. Die auf diese Weise definierten Knoten  $x_0, \dots, x_n$  heißen **Čebyšev-Knoten**.

## Berechnung des Interpolationspolynoms

### Lagrange-Darstellung

LAGRANGE-GRUNDPOLYNOME:

$$L_i \in \Pi_n \quad \text{mit} \quad L_i(x_j) = \delta_{ij}, \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

$\{L_0, L_1, \dots, L_n\}$  ist eine Basis von  $\Pi_n$ . Offenbar gilt:

$$L_i(x_j) = 0 \quad \text{für alle } j \neq i.$$

Daher gilt:

$$\prod_{j \neq i} (x - x_j) \mid L_i(x).$$

Wegen  $L_i(x_i) = 1$  erhalten wir somit die explizite Formel für die Lagrange-Grundpolynome:

$$L_i(x) = \prod_{j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}.$$

Die Lösung des Lagrange-Interpolationsproblems (6.2.1) lässt sich durch die Lagrange-Grundpolynome darstellen.

**Korollar.**

$$p(x) = \sum_{i=0}^n y_i L_i(x)$$

ist eindeutige Lösung des Lagrange-Interpolationsproblems (6.2.1).

*Beweis.* Es gilt  $p \in \Pi_n$  mit  $p(x_j) = y_j$ . Die Eindeutigkeit folgt aus Satz 6.5. □

Die direkte Berechnung von  $p(x)$  via Lagrange-Darstellung ist instabil und aufwändig.

Alternativ **rekursive** Auswertung:

Seien  $p_{i,k} \in \Pi_{k-i}$  mit  $p_{i,k}(x_j) = y_j$  für alle  $i, j$  mit  $i \leq j \leq k$ .

**Lemma 6.7** (Aitken-Neville-Formel). *i) Für alle  $x \in \mathbb{R}$  und  $i$  mit  $0 \leq i \leq n$  gilt:*

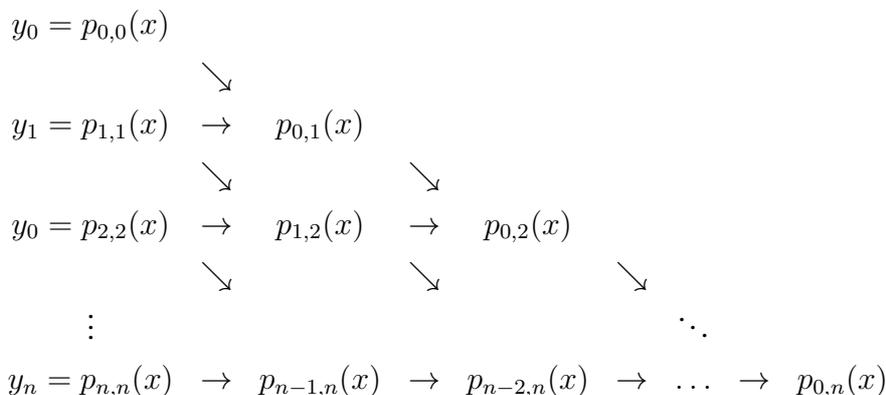
$$p_{i,i}(x) = y_i$$

*ii) Für alle  $x \in \mathbb{R}$  und  $i, k$  mit  $0 \leq i < k \leq n$  gilt:*

$$p_{i,k}(x) = \frac{(x - x_i) p_{i+1,k}(x) - (x - x_k) p_{i,k-1}(x)}{x_k - x_i}.$$

*Beweis.* Der Beweis des Lemmas verbleibt als Übungsaufgabe. □

KONSEQUENZ: NEVILLE-SCHEMA ZUR AUSWERTUNG VON  $p(x)$ :



Das Neville-Schema ist geeignet für Auswertung an einer Stelle ( $\frac{3}{2}n^2 + O(n)$  Multiplikationen bzw. Divisionen). Es ist jedoch unpraktisch zur Berechnung des gesamten Polynoms.

**Newton-Darstellung, dividierte Differenzen**NEWTON-BASIS VON  $\Pi_n$ :

$$1, \quad x - x_0, \quad (x - x_0)(x - x_1), \quad \dots, \quad (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1}).$$

$$p(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \dots + a_n(x - x_0) \cdots (x - x_{n-1}).$$

**Bemerkung.** Effiziente Auswertung von  $p(x)$  mit HORNER-SCHEMA:

$$p(x) = (\cdots((a_n \cdot (x - x_{n-1}) + a_{n-1}) \cdot (x - x_{n-2}) + a_{n-2}) \cdots + a_1) \cdot (x - x_0) + a_0$$

benötigt nur  $n$  Multiplikationen!Berechnung der Koeffizienten  $a_i$  des Interpolationspolynoms in der Newton-Basis:**Satz 6.8** (Newton-Interpolationsformel). *Das eindeutige Interpolationspolynom  $p \in \Pi_n$  mit  $p(x_i) = y_i$  für alle  $i$  mit  $0 \leq i \leq n$  hat die Darstellung*

$$p(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) \\ + \cdots + f[x_0, \dots, x_n](x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1}), \quad \text{wobei}$$

$$f[x_i] := y_i,$$

$$f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_k] := \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}, \dots, x_k] - f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{k-1}]}{x_k - x_i}, \quad 0 \leq i < k \leq n.$$

**Bemerkung.** a) Die Koeffizienten  $f[x_i, \dots, x_k]$  heißen **dividierte Differenzen**.b) Ist  $y_i = f(x_i)$ , dann gilt:

$$\begin{aligned} f[x_i] &= f(x_i) && \text{Funktionswert} \\ f[x_i, x_{i+1}] &= \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} && \text{Differenzenquotient} \\ f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] &= \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}] - f[x_i, x_{i+1}]}{x_{i+2} - x_i} && \text{etc.} \end{aligned}$$

c) Rekursive Berechnung aller dividierten Differenzen mit  $\frac{n(n+1)}{2}$  Divisionen:

$$\begin{array}{ccccccc} f[x_0] = y_0 & & & & & & \\ & \searrow & & & & & \\ f[x_1] = y_1 & \rightarrow & f[x_0, x_1] & & & & \\ & \searrow & & \searrow & & & \\ f[x_2] = y_2 & \rightarrow & f[x_1, x_2] & \rightarrow & f[x_0, x_1, x_2] & & \\ & \searrow & & \searrow & & \searrow & \\ \vdots & & & & & \ddots & \\ f[x_n] = y_n & \rightarrow & f[x_{n-1}, x_n] & \rightarrow & f[x_{n-2}, x_{n-1}, x_n] & \rightarrow & \dots \rightarrow f[x_0, \dots, x_n] \end{array}$$

*Beweis von Satz 6.8.* Wir zeigen die Behauptung durch Induktion nach  $n$ . Wie oben sei  $p_{i,k} \in \Pi_{i,k}$  das Interpolationspolynom zu den Stützstellen  $x_i, \dots, x_k$ . Für  $n = 0$  gilt:

$$p(x) \equiv y_0 = f[x_0].$$

Den Induktionsschritt zeigen wir in zwei Schritten.

- i) **BERECHNUNG DES FÜHRENDEN KOEFFIZIENTEN VON  $p(x)$  IN DER NEWTON-BASIS:**  
Nach der Rekursionsformel von Aitken und Neville (Lemma 6.7) und der Induktionsvoraussetzung gilt:

$$\begin{aligned} p(x) = p_{0,\dots,n}(x) &= \frac{(x-x_0)p_{1,\dots,n}(x) - (x-x_n)p_{0,\dots,n-1}(x)}{x_n - x_0} \\ &= \frac{f[x_1, \dots, x_n](x-x_0) \cdots (x-x_{n-1})}{x_n - x_0} \\ &\quad - \frac{f[x_0, \dots, x_{n-1}](x-x_0) \cdots (x-x_{n-2})(x-x_n)}{x_n - x_0} + r(x) \\ &= f[x_0, \dots, x_n] x^n + \tilde{r}(x) \\ &= f[x_0, \dots, x_n] (x-x_0) \cdots (x-x_{n-1}) + q(x), \end{aligned}$$

wobei  $r, \tilde{r}$  und  $q$  Polynome vom Grad  $\leq n-1$  sind.

- ii) **IDENTIFIKATION VON  $q$ :**

Es gilt

$$y_i = p(x_i) = q(x_i) \quad \text{für } i = 0, \dots, n-1,$$

also wegen der Eindeutigkeit des Interpolationspolynoms und nach Induktionsvoraussetzung:

$$q(x) = p_{0,n-1}(x) = f[x_0] + \cdots + f[x_0, \dots, x_{n-1}](x-x_0) \cdots (x-x_{n-2}).$$

□

## 6.3 Numerische Integration

Sei  $-\infty < a < b < \infty$ ,  $w : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$  stetig, integrierbar und positiv („Gewichtsfunktion“).

GESUCHT:

$$I_w[f] := \int_a^b f(x) w(x) dx.$$

NOTATION: Zur Approximation von  $I_w[f]$  auf kleinen Intervallen  $[a, b]$  betrachten wir **Quadraturformeln** vom Typ

$$Q_{[a,b]}[f] = \sum_{i=0}^m w_i f(x_i)$$

mit **Knoten**  $x_i \in [a, b]$  und **Gewichten**  $w_i \in \mathbb{R}$ . Zu einer **Quadraturformel** erhalten wir ein (zusammengesetztes) **Quadraturverfahren**  $Q_n[f]$ , ( $n \in \mathbb{N}$ ), indem wir das Intervall  $[a, b]$  in  $n$  Teilintervalle der Länge  $h = \frac{b-a}{n}$  unterteilen, und die Quadraturformel auf jedem Teilintervall anwenden, d.h.:

$$Q_n[f] = \sum_{k=0}^{n-1} Q_{[a+kh, a+(k+1)h]}[f].$$

**Beispiel** (Mittelpunktsformel). Sei  $w \equiv 1$ .

$$Q_{[a,b]}^{MP}[f] = (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

$$Q_n^{MP}[f] = \sum_{k=0}^{n-1} h f\left(a + \left(k + \frac{1}{2}\right)h\right) \quad h = \frac{b-a}{n}.$$

**Definition.** i) Die Quadraturformel  $Q_{[a,b]}$  hat **Exaktheitsgrad**  $r \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ , falls

$$Q_{[a,b]}[p] = I_w[p]$$

für alle  $p \in \Pi_r$  gilt.

ii) Das Quadraturverfahren  $Q_n$  hat **Konsistenzordnung**  $s \geq 0$ , falls

$$|Q_n[f] - I_w[f]| = O(n^{-s}) = O(h^s)$$

für alle hinreichend glatten Funktionen  $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  gilt.

**Beispiel** (Mittelpunkts- und Trapezformel). Ist  $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  affin, dann gilt:

$$\int_a^b f(x) dx = (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right) = (b-a) \frac{f(a) + f(b)}{2}.$$

Also haben die Mittelpunkts- und die Trapezregel beide Exaktheitsgrad 1. Mit einer Taylorentwicklung bei  $\frac{a+b}{2}$  ergibt sich zudem für  $f \in C^2$  und  $x \in [a, b]$ :

$$f(x) - f\left(\frac{a+b}{2}\right) = f'\left(\frac{a+b}{2}\right) \left(x - \frac{a+b}{2}\right) + f''(\xi(x)) \frac{1}{2} \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2$$

mit  $\xi(x) \in (a, b)$ . Integrieren dieser Gleichung liefert:

$$\begin{aligned} \left| \int_a^b f(x) dx - Q_{[a,b]}^{MP}[f] \right| &= \left| \int_a^b f' \left( \frac{a+b}{2} \right) \left( x - \frac{a+b}{2} \right) + f''(\xi(x)) \frac{1}{2} \left( x - \frac{a+b}{2} \right)^2 \right| \\ &\leq \sup_{x \in [a,b]} |f''(x)| \frac{1}{2} \int_a^b \left( x - \frac{a+b}{2} \right)^2 dx \\ &= \frac{(b-a)^3}{24} \|f''\|. \end{aligned}$$

Für das zusammengesetzte Quadraturverfahren

$$Q_n^{MP}[f] = \sum_{i=0}^{n-1} Q_{[a+kh, a+(k+1)h]}^{MP}[f], \quad h = \frac{b-a}{n},$$

erhalten wir damit:

$$\begin{aligned} \left| \int_a^b f(x) dx - Q_n^{MP}[f] \right| &= \left| \sum_{k=0}^{n-1} \int_{a+kh}^{a+(k+1)h} f(x) dx - Q_{[a+kh, a+(k+1)h]}^{MP}[f] \right| \\ &\leq \frac{n h^3}{24} \|f''\| = \frac{b-a}{24} h^2 \|f''\| \end{aligned}$$

für alle  $f \in C^2$ . Das Mittelpunktsverfahren hat also – ebenso wie das Trapezverfahren (siehe oben) – Konsistenzordnung 2.

## Newton-Cotes-Formeln

Wie erhält man Quadraturformeln mit höherem Exaktheitsgrad? Wir betrachten eine Quadraturformel

$$Q_{[a,b]}[f] = \sum_{i=0}^m w_i f(x_i)$$

mit Stützstellen  $x_0, \dots, x_m$  zur Approximation von  $\int_a^b f(x) w(x) dx$ .

**Satz 6.9.** Die Quadraturformel hat genau dann Exaktheitsgrad  $\geq m$ , wenn

$$w_i = \int_a^b L_i(x) w(x) dx, \quad i = 0, 1, \dots, m, \quad (6.3.1)$$

gilt, wobei  $L_i$  das  $i$ -te Lagrange-Grundpolynom ist.

*Beweis.* Ist der Exaktheitsgrad  $\geq m$ , dann gilt:

$$\int_a^b L_i(x) w(x) dx = Q_{[a,b]}[L_i] = \sum_{j=0}^m w_j L_i(x_j) = \sum_{j=0}^m w_j \delta_{ij} = w_i, \quad i = 0, 1, \dots, m.$$

Umgekehrt folgt aus (6.3.1) für  $p = L_i$ , ( $i = 0, 1, \dots, m$ ):

$$Q_{[a,b]}[p] = \int_a^b p(x) w(x) dx,$$

also für alle  $p \in \Pi_m = \text{span}\{L_i \mid i = 0, \dots, m\}$ . □

**Definition.** Die *Quadraturformel mit äquidistanten Knoten*

$$x_i = a + i \frac{b-a}{m}, \quad i = 0, 1, \dots, m,$$

bzw.

$$x_i = a + \left(i + \frac{1}{2}\right) \frac{b-a}{m+1}, \quad i = 0, 1, \dots, m,$$

und Gewichten

$$w_i = \int_a^b L_i(x) w(x) dx$$

heißt *geschlossene* bzw. *offene Newton-Cotes-Formel*.

**Beispiele.** Für  $w \equiv 1$ ,  $I[f] = \int_a^b f(x) dx$ , ergeben sich unter anderem folgende Newton-Cotes-Formeln:

- $m = 0$ , **offen**:

$$x_0 = \frac{a+b}{2}, \quad w_0 = \int_a^b 1 dx = b-a,$$

$$Q[f] = (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right), \quad \text{„Mittelpunktsformel“}.$$

- $m = 1$ , **abgeschlossen**:

$$x_0 = a, \quad x_1 = b, \quad w_0 = \int_a^b \frac{x-b}{a-b} dx = \frac{b-a}{2} = w_1,$$

$$Q[f] = \frac{b-a}{2} (f(a) + f(b)), \quad \text{„Trapezformel“}.$$

- $m = 1$ , **offen**:

$$Q[f] = \frac{b-a}{2} \left( f\left(\frac{3}{4}a + \frac{1}{4}b\right) + f\left(\frac{1}{4}a + \frac{3}{4}b\right) \right).$$

- $m = 2$ , **abgeschlossen**:

$$x_0 = a, \quad x_1 = \frac{a+b}{2}, \quad x_2 = b,$$

$$Q[f] = \frac{b-a}{6} \left( f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right), \quad \text{„Simpson-Formel“}.$$

- $m = 2$ , **offen**:

$$Q[f] = \frac{b-a}{3} \left( \frac{3}{8} f\left(\frac{5}{6}a + \frac{1}{6}b\right) + \frac{2}{8} f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{3}{8} f\left(\frac{1}{6}a + \frac{5}{6}b\right) \right).$$

Bei den Formeln höheren Grades erhält man zum Teil negative Gewichte, was zu numerischer Instabilität führen kann. Der Exaktheitsgrad der Newton-Cotes-Formeln ist  $\geq m$  nach Satz 6.9. Die Mittelpunktsformel hat sogar Exaktheitsgrad 1 (statt 0). Allgemeiner gilt:

**Satz 6.10.** Ist  $Q[f] = \sum_{i=0}^m w_i f(x_i)$  eine zu  $\frac{a+b}{2}$  symmetrische Quadraturformel für  $\int_a^b f(x)dx$ , d.h.

$$x_{m-i} = b - x_i \quad \text{und} \quad w_{m-i} = w_i \quad \text{für } i = 0, 1, \dots, m,$$

mit Exaktheitsgrad  $\geq 2q$ , dann hat  $Q$  mindestens Exaktheitsgrad  $2q + 1$ .

*Beweis.* Sei  $p(x) := \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^{2q+1}$ . Aufgrund der Symmetrie gilt:

$$Q[p] = 0 = \int_a^b p(x)dx. \quad (6.3.2)$$

Da  $Q$  Exaktheitsgrad  $\geq 2q$  hat, gilt (6.3.2) auch für alle  $p \in \Pi_{2q}$ , also für alle  $p \in \Pi_{2q+1} = \text{span}(\Pi_{2q}, \left(\cdot - \frac{a+b}{2}\right)^{2q+1})$ .  $\square$

**Beispiel.** Die Simpson-Formel hat Exaktheitsgrad  $\geq 2$ , also hat  $Q$  Exaktheitsgrad  $\geq 3$ . Wegen  $Q[x^4] \neq \int_a^b x^4 dx$  ist der Exaktheitsgrad genau gleich 3.

Das zusammengesetzte Simpson-Verfahren hat die folgende Form:

$$Q_n^{\text{Simpson}}[f] = \sum_{k=0}^{n-1} Q_{[a+kh, a+(k+1)h]}^{\text{Simpson}}[f], \quad h = \frac{b-a}{n},$$

$$= \frac{h}{6} \left( f(a) + 4f\left(a + \frac{h}{2}\right) + 2f(a+h) + 4f\left(a + \frac{3}{2}h\right) + 2f(a+2h) \right. \\ \left. + \dots + 4f\left(b - \frac{h}{2}\right) + f(b) \right).$$

**Satz 6.11** (Konsistenzordnung des Simpson-Verfahrens). Für  $f \in C^4([a, b])$  und  $n \in \mathbb{N}$  gilt:

$$\left| Q_n^{\text{Simpson}}[f] - \int_a^b f(x)dx \right| \leq \frac{b-a}{180} \|f^{(4)}\|_{[a,b]} \left(\frac{h}{2}\right)^4.$$

*Beweis.* Wir zeigen:

$$\left| Q_{[c,c+h]}^{\text{Simpson}}[f] - \int_c^{c+h} f(x) dx \right| \leq \frac{h}{180} \|f^{(4)}\|_{[a,b]} \left(\frac{h}{2}\right)^4 \quad \text{für alle } c \in [a, b-h]. \quad (6.3.3)$$

Die Behauptung folgt dann durch Summation dieser Gleichungen für  $c = a + kh$ , ( $0 \leq k \leq n-1$ ).

Sei  $p \in \Pi_3$  das Hermite-Interpolationspolynom mit:

$$p(c) = f(c), \quad p\left(c + \frac{h}{2}\right) = f\left(c + \frac{h}{2}\right), \quad p'\left(c + \frac{h}{2}\right) = f'\left(c + \frac{h}{2}\right), \quad p(c+h) = f(c+h).$$

Da die Simpson-Formel Exaktheitsgrad 3 hat, gilt:

$$Q_{[c,c+h]}^{\text{Simpson}}[f] = Q_{[c,c+h]}^{\text{Simpson}}[p] = \int_c^{c+h} p(x) dx,$$

also gilt mit Bemerkung c) zu Satz 6.6:

$$\begin{aligned} \left| Q_{[c,c+h]}^{\text{Simpson}}[f] - \int_c^{c+h} f(x) dx \right| &= \left| \int_c^{c+h} (f(x) - p(x)) dx \right| \\ &= \left| \int_c^{c+h} \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} (x-c) \underbrace{\left(x - \left(c + \frac{h}{2}\right)\right)^2 (x - (c+h))}_{\leq 0 \text{ auf } [c,c+h]} dx \right| \\ &\leq \frac{\|f^{(4)}\|_{[a,b]}}{4!} \int_c^{c+h} (x-c) \left(x - \left(c + \frac{h}{2}\right)\right)^2 (c+h-x) dx \\ &= \frac{h}{180} \|f^{(4)}\|_{[a,b]} \left(\frac{h}{2}\right)^4. \end{aligned}$$

Der Wert des Integrals ergibt sich beispielsweise mit der Substitution  $t = \frac{x-c-h/2}{h/2}$ , die das Intervall  $[c, c+h]$  auf  $[-1, 1]$  abbildet.  $\square$

## Gauß-Quadratur

Seien  $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_m \leq b$  Knoten,

$$w_i = \int_a^b L_i(x) w(x) dx, \quad i = 0, 1, \dots, m.$$

Dann hat

$$Q_{[a,b]}[f] = \sum_{i=0}^m w_i f(x_i)$$

Exaktheitsgrad  $\geq m$ .

Bisher haben wir die Knoten fest vorgegeben (äquidistant). Andererseits haben wir schon bei der

Polynominterpolation gesehen, daß sich für äquidistante Knoten im Allgemeinen keine optimalen Approximationseigenschaften ergeben. Kann man durch geeignete Wahl der Knoten einen höheren Exaktheitsgrad als  $m$  erreichen? Was ist der maximale Exaktheitsgrad? Um diese Fragen zu beantworten, betrachten wir das **Knotenpolynom**

$$\omega(x) := \prod_{j=0}^m (x - x_j).$$

Es gilt  $\omega \in \Pi_{m+1}$ .

**Bemerkung.** Es gilt:

$$L_i(x) = \prod_{j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} = \frac{\omega(x)}{(x - x_i) \omega'(x_i)}.$$

**Satz 6.12.** Sei  $k \in \mathbb{N}$ . Die Quadraturformel  $Q_{[a,b]}$  hat genau dann Exaktheitsgrad  $m + k$ , wenn  $\omega$  orthogonal zu  $\Pi_{k-1}$  bzgl. des gewichteten  $L^2$ -Skalarprodukts

$$(f, g)_w := \int_a^b f(x)g(x)w(x)dx$$

ist.

*Beweis.* Hat  $Q$  Exaktheitsgrad  $m + k$ , dann gilt für  $p \in \Pi_{k-1}$ :

$$(\omega, p)_w = \int_a^b \underbrace{\omega(x) p(x)}_{\in \Pi_{m+k}} w(x) dx = Q_{[a,b]}[\omega p] = 0,$$

da  $\omega(x_i) = 0$  für alle  $i$  mit  $0 \leq i \leq m$  ist. Umgekehrt: Gilt  $(\omega, p)_w = 0$  für alle  $p \in \Pi_{k-1}$ , dann ist

$$\int_a^b \omega(x) p(x) w(x) dx = 0 = Q_{[a,b]}[\omega p] \quad \text{für alle } p \in \Pi_{k-1},$$

also auch:

$$\int_a^b (\omega(x) p(x) + q(x)) w(x) dx = Q_{[a,b]}[\omega p + q] \quad \text{für alle } p \in \Pi_{k-1} \text{ und } q \in \Pi_m.$$

Da sich jedes Polynom aus  $\Pi_{m+k}$  in der Form  $\omega p + q$  mit  $p \in \Pi_{k-1}$  und  $q \in \Pi_m$  darstellen lässt, folgt, daß  $Q_{[a,b]}$  Exaktheitsgrad  $m + k$  hat.  $\square$

**Korollar.** i) Der Exaktheitsgrad ist stets  $\leq 2m + 1$ .

ii) Der Exaktheitsgrad ist genau dann  $2m + 1$ , wenn  $\omega$  orthogonal zu  $\Pi_m$  bzgl.  $(\cdot, \cdot)_w$  ist.

*Beweis.* i) Angenommen, der Exaktheitsgrad ist  $\geq 2m + 2$ . Dann ist  $\omega$  orthogonal zu  $\Pi_{m+1}$  und es folgt der Widerspruch

$$(\omega, \omega)_w = \int_a^b \omega(x)^2 w(x) dx = 0.$$

ii) Die zweite Behauptung folgt sofort aus dem Satz. □

Zu klären bleibt, ob und wie wir Knoten  $x_0, \dots, x_m$  finden können, für die das Knotenpolynom  $\omega$  orthogonal zu  $\Pi_m$  ist. Ein normiertes Polynom  $\omega_{m+1} \in \Pi_{m+1}$  mit  $\omega_{m+1} \perp \Pi_m$  kann man mithilfe des **Schmidtschen Orthogonalisierungsverfahrens** konstruieren:

$$\begin{aligned} \omega_0(x) &:= 1 && \text{für alle } x \in [a, b], \\ \omega_{m+1}(x) &:= x^{m+1} - \sum_{i=0}^m (x^{m+1}, \omega_i)_w \omega_i(x) && \text{für alle } m \geq 0. \end{aligned}$$

**Satz 6.13** (Orthogonalpolynome). i)  $\omega_{m+1}$  ist das eindeutige Polynom in  $\Pi_{m+1}$  mit  $\omega_{m+1} \perp \Pi_m$ .

ii) Die Orthogonalpolynome  $\omega_m$  erfüllen die Dreitermrekursion

$$\begin{aligned} \omega_{-1}(x) &= 0, \\ \omega_0(x) &= 1, \\ \omega_{m+1}(x) &= (x - \alpha_m)\omega_m(x) - \beta_m \omega_{m-1}(x), \quad m \geq 0, \quad \text{mit} \end{aligned}$$

$$\alpha_m = \frac{(x \omega_m, \omega_m)_w}{(\omega_m, \omega_m)_w}, \quad \beta_{m+1} = \frac{(\omega_{m+1}, \omega_{m+1})_w}{(\omega_m, \omega_m)_w}, \quad \beta_0 \text{ beliebig.}$$

iii)  $\omega_m$  hat  $m + 1$  einfache reelle Nullstellen  $x_0 < x_1 < \dots < x_m$  im offenen Intervall  $(a, b)$ .

*Beweis.* i) EINDEUTIGKEIT: Sei  $\tilde{\omega}_{m+1} \in \Pi_{m+1}$  normiert mit  $\tilde{\omega}_{m+1} \perp \Pi_m$ . Dann ist  $\omega_{m+1} - \tilde{\omega}_{m+1} \in \Pi_m$  und orthogonal zu  $\Pi_m$ . Damit folgt  $\omega_{m+1} - \tilde{\omega}_{m+1} = 0$  und  $\tilde{\omega}_{m+1} = \omega_{m+1}$ .

ii) Mit Induktion rechnet man nach, daß die durch die Dreitermrekursion definierten normierten Polynome  $\omega_{m+1} \in \Pi_{m+1}$  orthogonal sind. Die Behauptung folgt dann aus der Eindeutigkeit der Orthogonalpolynome.

iii) Seien  $x_0, x_1, \dots, x_k$ ,  $k = 0, \dots, m$ , die Nullstellen von  $\omega_{m+1}$  mit ungerader Vielfachheit, die im offenen Intervall  $(a, b)$  liegen. Zu zeigen ist  $k = m$ . Daraus folgt die Existenz von  $m + 1$  einfachen Nullstellen. Angenommen, es gilt  $k < m$ . Dann ist das Polynom

$$q(x) := \underbrace{\prod_{i=0}^k (x - x_i)}_{\text{Grad } k+1}$$

orthogonal zu  $\omega_{m+1}$ . Da  $\omega_{m+1}(x)$  und  $q(x)$  bei  $x_0, \dots, x_k$  jeweils das Vorzeichen wechseln, hat das Produkt  $\omega_{m+1}(x)q(x)$  konstantes Vorzeichen. Somit folgt der Widerspruch

$$\int_a^b \omega_{m+1}(x)q(x)dx = 0.$$

□

Damit können wir nun im Prinzip Quadraturformeln mit maximalem Exaktheitsgrad  $2m + 1$  angeben:

**Definition.** Seien  $x_0, \dots, x_m$  die Nullstellen des Orthogonalpolynoms  $\omega_{m+1}$ . Die Quadraturformel

$$Q_{[a,b]}^m[f] = \sum_{i=0}^m w_i f(x_i),$$

mit Gewichten

$$w_i = \int_a^b L_i(x) w(x) dx = \int_a^b \frac{\omega_{m+1}(x)}{(x - x_i)\omega'_{m+1}(x)} w(x) dx$$

heißt **Gauß-Formel vom Grad**  $m + 1$ .

**Bemerkung.** a) Die Gauß-Formel hat nach Konstruktion Exaktheitsgrad  $2m + 1$ .

b) Die Berechnung der Stützstellen ist im Allgemeinen nichttrivial – aber diese müssen zu einer gegebenen Gewichtsfunktion nur einmal berechnet werden, und können dann immer wieder verwendet werden.

**Beispiel.** Sei ohne Beschränkung der Allgemeinheit  $[a, b] = [-1, 1]$  und

$$w(x) = \frac{1}{\sqrt{1 - x^2}}.$$

Dann ist

$$(f, g)_w = \int_{-1}^1 f(x)g(x) \frac{1}{\sqrt{1 - x^2}} dx.$$

Mit der Substitution  $x = \cos \theta$ ,  $\sqrt{1-x^2} = \sin \theta$  und  $dx = -\sin \theta d\theta$  folgt:

$$(f, g)_w = \int_0^\pi \underbrace{f(\cos \theta)}_{=: \tilde{f}(\theta)} \underbrace{g(\cos \theta)}_{=: \tilde{g}(\theta)} d\theta = (\tilde{f}, \tilde{g})_{L^2(0, \pi)}.$$

Die Funktionen

$$\tilde{T}_k(\theta) = \cos(k\theta), \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

sind orthogonal bzgl.  $(\cdot, \cdot)_{L^2(0, \pi)}$ . Also sind die Funktionen

$$T_k(x) = \cos(k \cdot \arccos(x)), \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

orthogonal bzgl.  $(\cdot, \cdot)_w$ . Aus den Additionstheoremen für die Kosinusfunktion folgt die Dreitermrekursionsformel

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1, \\ T_1(x) &= x, \\ T_{k+1}(x) &= 2x T_k(x) - T_{k-1}(x). \end{aligned}$$

Insbesondere ist  $T_k$  ein Polynom  $k$ -ten Grades, das  **$k$ -te Čebyšev-Polynom**. Durch Normierung erhalten wir die eindeutigen normierten Orthogonalpolynome

$$\omega_{k+1}(x) = 2^{-k} T_{k+1}(x).$$

Die Nullstellen sind die **Čebyšev-Knoten**

$$x_i = -\cos \frac{(2i+1)\pi}{2(k+1)}, \quad i = 0, \dots, k.$$

Für die Gewichte ergibt sich

$$w_i = \frac{\pi}{k+1} \quad \text{für alle } i.$$

Andere wichtige Gewichtsfunktionen sind zum Beispiel  $w(x) = 1$  und  $w(x) = e^{-x^2}$ .

|                    | GAUSS-LEGENDRE  | GAUSS-ČEBYŠEV                                     | GAUSS-HERMITE   |
|--------------------|---|---|---|
| Intervall          | $[-1, 1]$   | $[-1, 1]$   | $(-\infty, \infty)$   |
| $w(x)$             | 1   | $\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$                          | $e^{-x^2}$  |
| Orthogonalpolynome | $L_k(x) = \frac{1}{2^k k!} \frac{d^k}{dx^k} (x^2 - 1)^k$<br>Legendre-Polynome   | $T_k(x) = \cos(k \arccos(x))$<br>Čebyšev-Polynome | $H_k(x) = (-1)^k e^{x^2} \frac{d^k}{dx^k} e^{-x^2}$<br>Hermite-Polynome |
| Dreitermrekursion  | $L_{k+1}(x) = \frac{2k+1}{k+1} x L_k(x) - \frac{k}{k+1} L_{k-1}(x)$   | $T_{k+1}(x) = 2x T_k(x) - T_{k-1}(x)$             | $H_{k+1}(x) = 2x H_k(x) - 2k H_{k-1}(x)$                                |
| Normierung         | $\omega_{k+1}(x) = \frac{2^{k+1}}{(2^{(k+1)})} L_k(x)$  | $\omega_{k+1}(x) = 2^{-k} T_{k+1}(x)$             | $\omega_{k+1}(x) = 2^{-(k+1)} H_{k+1}(x)$                               |
| Nullstellen        | z.B. n=4:<br>$x_3 = -x_0 = \sqrt{\frac{3}{7} + \frac{2}{7}\sqrt{\frac{6}{5}}}$<br>$x_2 = -x_1 = \sqrt{\frac{3}{7} - \frac{2}{7}\sqrt{\frac{6}{5}}}$ | $x_i = -\cos \frac{(2i+1)\pi}{2 \cdot (k+1)}$     |   |
| Gewichte           | $\omega_3 = \omega_0 = \frac{18-\sqrt{30}}{36}$<br>$\omega_2 = \omega_1 = \frac{18+\sqrt{30}}{36}$  | $\omega_i = \frac{\pi}{k+1}$                      |   |

**Satz 6.14.** Für  $s \in \mathbb{N}$  existieren konstante  $C_L, C_C > 0$  mit

$$\left| Q_{\text{Legendre}}^m[f] - \int_a^b f(x) dx \right| \leq C_L \cdot m^{-s} \|f\|_S, \quad \text{bzw.}$$

$$\left| Q_{\text{Ceb}}^m[f] - \int_a^b f(x) \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx \right| \leq C_C \cdot m^{-s} \|f\|_{S,w} \quad \text{für alle } f \in C^S([-1, 1]),$$

wobei

$$\|f\|_{S,w} := \sqrt{\sum_{k=0}^s \|f^{(k)}\|_w^2}, \quad \|f\|_S := \|f\|_{S,1}.$$

**Ohne Beweis.**

KONSEQUENZ: Gauß-Verfahren erreicht beliebig hohe Ordnung, wenn  $f$  hinreichend regulär ist.

## 6.4 Kubische Splines (optional)

Sei  $[a, b] \subset \mathbb{R}$  ein Intervall,  $a = x < x_1 < \dots < x_n = b$  Stützstellen,  $\Delta = \{x_0, x_1, \dots, x_n\}$  ein Gitter und  $m \in \mathbb{N}$ .

**Definition.**

$$S_m(\Delta) := \{s \in C^{m-1}([a, b]) \mid s|_{[x_{i-1}, x_i]} \text{ ist ein Polynom vom Grad } m \text{ für alle } i = 1, \dots, n\}$$

heißt **Raum der Splines vom Grad  $m$  bzgl. des Gitters  $\Delta$** .

$m = 1$ : stückweise lineare stetige Funktionen,

$m = 3$ : kubische Splines.

Falls  $s \in C^2$  ist, ist die Krümmung der Kurve  $(x, s(x))$  stetig und die Kurve wird als glatt empfunden (Anwendungen bei CAD, Schienenverlegung etc.).

**Beispiel.** Sei  $\varrho(x) = ((x - x_i)^+)^m$ ,  $a^+ := \max(a, 0)$ . Dann ist  $s \in S_m(\Delta)$ .

**Lemma 6.15.**  $S_m(\{x_0, \dots, x_n\})$  ist ein  $(m + n)$ -dimensionaler Vektorraum mit Basis

$$\underbrace{1, x - x_0, (x - x_0)^2, \dots, (x - x_0)^m}_{m+1 \text{ Funktionen}}, \underbrace{((x - x_1)^+)^m, \dots, ((x - x_{n-1})^+)^m}_{n-1 \text{ Funktionen}}.$$

*Beweis.* Wir beweisen das Lemma durch vollständige Induktion nach  $n$ . Für  $n = 1$  ist  $S_m(\{x_0, x_1\}) = \Pi_m$  mit Basis  $1, x - x_0, \dots, (x - x_0)^m$ . Sei die Behauptung für  $n$  wahr. Wegen  $((x - x_n)^+)^m \equiv 0$  auf  $[x_0, x_n]$  folgt die lineare Unabhängigkeit der Funktionen  $1, \dots, ((x - x_n)^+)^m$  aus der linearen Unabhängigkeit der Funktionen  $1, \dots, ((x - x_{n-1})^+)^m$ , die nach Induktionsvoraussetzung erfüllt ist. Zu zeigen bleibt, daß sich jeder Spline  $m$ -ter Ordnung als Linearkombination der angegebenen Basisfunktionen darstellen lässt, dass also für alle  $s \in S_m(\{x_0, \dots, x_{n+1}\})$  gilt:

$$s|_{[x_0, x_n]} \in S_m(\{x_0, \dots, x_n\}).$$

Nach Induktionsvoraussetzung gibt es  $a_k, b_i \in \mathbb{R}$ , so dass gilt:

$$s(x) = \underbrace{\sum_{k=0}^m a_k (x - x_0)^k + \sum_{i=1}^{n-1} b_i ((x - x_i)^+)^m}_{=: \tilde{s}(x)} \quad \text{für alle } x \in [x_0, x_n].$$

Wegen  $s \in C^{m-1}$  gilt:

$$s^{(k)}(x_n) - \tilde{s}^{(k)}(x_n) = 0, \quad k = 0, \dots, m-1.$$

Da  $s - \tilde{s}$  auf  $[x_n, x_{n+1}]$  ein Polynom vom Grad  $m$  ist, gibt es ein  $b_n \in \mathbb{R}$  mit:

$$s(x) - \tilde{s}(x) = b_n (x - x_n)^m \quad \text{für alle } x \in [x_n, x_{n+1}],$$

also

$$s(x) = \tilde{s}(x) + b_n ((x - x_n)^+)^m \quad \text{für alle } x \in [a, b].$$

□

### B-Splines („Bell splines“)

Die in Lemma 6.15 angegebene Basis ist zur numerischen Berechnung eines Splines zu gegebenen Interpolationspunkten  $(x_i, y_i)$  wenig geeignet – wir betrachten daher nun eine andere Basis. Dazu nehmen wir an, daß die Stützstellen äquidistant sind:

$$x_i = a + i h, \quad h = \frac{b - a}{n}.$$

Wir setzen

$$B_0(x) := \begin{cases} 1 & \text{für } |x| \leq \frac{1}{2}, \\ 0 & \text{für } |x| > \frac{1}{2}, \end{cases}$$

$$B_{m+1}(x) := \int_{x-\frac{1}{2}}^{x+\frac{1}{2}} B_m(t) dt.$$

Zum Beispiel ist für  $m = 3$ :

$$B_3(x) = \frac{1}{6} \cdot \begin{cases} (2 - |x|)^3 - 4(1 - |x|^3) & \text{für } |x| \leq 1, \\ (2 - |x|)^3 & \text{für } 1 \leq |x| \leq 2, \\ 0 & \text{für } |x| \geq 2. \end{cases}$$

**Lemma 6.16.** Für alle  $m \in \mathbb{N}$  gilt:

i)  $B_m \in C^{m-1}(\mathbb{R})$  mit  $B_m(x) = 0$  für alle  $|x| \geq \frac{m+1}{2}$ .

ii)  $B_m \in S_m(\Delta_m)$ , wobei

$$\Delta_m = \left\{ -\frac{m+1}{2}, -\frac{m-1}{2}, \dots, \frac{m-1}{2}, \frac{m+1}{2} \right\}.$$

*Beweis.* Der Beweis erfolgt durch vollständige Induktion nach  $m$ . Der Fall  $m = 1$  ist klar. Sei die Induktionsbehauptung für  $m$  wahr. Wegen  $B_m \in C^{m-1}$  folgt  $B_{m+1} \in C^m$ , und

$$B'_{m+1}(x) = B_m\left(x + \frac{1}{2}\right) - B_m\left(x - \frac{1}{2}\right).$$

Der erste Term der Differenz ist ein Polynom vom Grad  $\leq m$  auf dem Intervall  $I$  falls  $(I + \frac{1}{2})$  und  $\Delta_m$  disjunkt sind. Der zweite Term der Differenz ist ein Polynom vom Grad  $m$  auf dem Intervall  $I$  falls  $(I - \frac{1}{2})$  und  $\Delta_m$  disjunkt sind. Daher ist  $B'_{m+1}$  ein Polynom vom Grad  $\leq m$  auf offenen Teilintervallen von  $\Delta_{m+1}$ . Damit ist  $B_{m+1}$  ein Polynom vom Grad  $\leq m + 1$  auf Teilintervallen von  $\Delta_{m+1}$ .  $\square$

### Konstruktion einer Basis von $S_m(\Delta)$

ANNAHME: äquidistantes Gitter

$$\Delta = \{x_0, x_1, \dots, x_n\}, \quad x_i = a + ih, \quad h = \frac{b-a}{n}.$$

Wir definieren

$$B_{m,i}(x) := B_m\left(\frac{x - (a + ih)}{h}\right).$$

**Satz 6.17.** Die  $m + n$  **B-Splines**  $B_{m,i}$ ,  $i = -\frac{m-1}{2}, -\frac{m-1}{2} + 1, \dots, n + \frac{m-1}{2}$ , bilden eine Basis von  $S_m(\Delta)$ .

*Beweis.* Die lineare Unabhängigkeit von  $B_{m,i} \in S_m(\Delta)$  folgt durch Induktion. Wegen  $\dim(S_m(\Delta)) = m + n$  bilden die  $B_{m,i}$  eine Basis.  $\square$

**Beispiel** ( $m = 1$ ).

$$s(x) = \sum_{i=0}^n y_i B_{1,i}(x)$$

ist stückweise lineare Interpolation der Punkte  $(x_i, y_i)$ .

**Interpolationsproblem für kubische Splines ( $m = 3$ )**

Gegeben sind  $y_0, \dots, y_n \in \mathbb{R}, y_{0,1}, y_{n,1} \in \mathbb{R}$ .

Gesucht ist  $s \in S_3(\Delta)$  mit:

$$s(x_i) = y_i \quad \text{für alle } i = 0, 1, \dots, n, \quad (6.4.1)$$

sowie einer der folgenden **Randbedingungen**:

(i) **Hermite-Randbedingungen:**

$$s'(a) = y_{0,1}, \quad s'(b) = y_{n,1},$$

(ii) **periodische Randbedingungen:**

$$s'(a) = s'(b), \quad s''(a) = s''(b),$$

(iii) **natürliche Randbedingungen:**

$$s''(a) = s''(b) = 0.$$

**Bemerkung.** Es gilt  $\dim(S_3(\Delta)) = n+3$ . Da in (6.4.1) nur  $n+1$  Interpolationswerte  $(y_0, \dots, y_n)$  vorgegeben sind, werden zwei zusätzliche Randbedingungen benötigt, um ein eindeutig lösbares Interpolationsproblem zu erhalten. Im folgenden betrachten wir nur Hermite-Randbedingungen – für die anderen Arten von Randbedingungen gelten aber ähnliche Aussagen.

ähnlich wie die linearen Splines erfüllen auch die kubischen Splines eine Energieminimierungseigenschaft:

**Satz 6.18.** Sei  $s \in S_3(\Delta)$  und  $f \in C^4([a, b])$  mit  $f(x_i) = s(x_i)$  für  $i = 0, \dots, n$ ,  $f'(a) = s'(a)$  und  $f'(b) = s'(b)$ . Dann gilt:

$$i) (f'' - s'', l) = 0 \quad \text{für alle } l \in S_1(\Delta),$$

$$ii) \|s''\| \leq \|f''\|,$$

$$iii) \|f'' - s''\| \leq \frac{h^2}{2} \|f^{(4)}\|,$$

$$iv) \|f - s\| \leq \frac{h^4}{4} \|f^{(4)}\|,$$

wobei  $(f, g) = \int_a^b f(x)g(x) dx$  das  $L^2(a, b)$ -Skalarprodukt und  $\|\cdot\|$  die zugehörige Norm bezeichnet.

**Bemerkung.**

$$E[f] = \|f''\|^2 = \int_a^b f''(x)^2 dx$$

ist die Biegeenergie eines Stabes oder einer Holzlatte (englisch „spline“) mit Parametrisierung  $(x, f(x))$  (in erster Näherung für kleine Auslenkungen). Der kubische Spline minimiert  $E$  unter allen Kurven durch die Punkte  $(x_i, y_i)$  mit denselben Hermite-Randbedingungen.

*Beweis.* i) Da  $l'$  auf  $[x_i, x_{i+1}]$  konstant ist, gilt:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} (f'' - s'') l = (f' - s') l \Big|_{x_i}^{x_{i+1}} - \int_{x_i}^{x_{i+1}} (f' - s') l' = (f' - s') l \Big|_{x_i}^{x_{i+1}} - c_i (f - s) \Big|_{x_i}^{x_{i+1}} = 0.$$

Aufsummieren über  $i$  liefert aufgrund der Randbedingungen:

$$\int_a^b (f'' - s'') l = (f' - s') l \Big|_a^b = 0.$$

ii) Wegen  $f = s + (f - s)$ ,  $s'' \in S_1(\Delta)$  und i) gilt:

$$(f'', f'') = (s'', s'') + \underbrace{(f'' - s'', f'' - s'')}_{\geq 0} + 2 \underbrace{(s'', f'' - s'')}_{=0} \geq (s'', s'').$$

iii) Sei  $l \in S_1(\Delta)$  die stückweise lineare Interpolation von  $f''$  bzgl.  $\Delta$ . Nach Satz 6.2 gilt:

$$\|f'' - l\| \leq \frac{h^2}{2} \|f^{(4)}\|.$$

Da  $f'' - s''$  und  $s'' - l$  nach i) orthogonal sind, gilt:

$$\|f'' - l\|^2 = \|f'' - s'' + s'' - l\|^2 = \|f'' - s''\|^2 + \|s'' - l\|^2 \geq \|f'' - s''\|^2.$$

Hieraus folgt die Behauptung.

iv) Die stückweise lineare Interpolation von  $f - s$  bzgl.  $\Delta$  ist die Nullfunktion, also gilt nach Satz 6.2 und iii):

$$\|f - s\| \leq \frac{h^2}{2} \|f'' - s''\| \leq \frac{h^4}{4} \|f^{(4)}\|.$$

□

**Korollar.** Das Interpolationsproblem (6.4.1) mit Hermite-Randbedingungen hat eine eindeutige Lösung  $s \in S_3(\Delta)$ .

*Beweis.* Wir betrachten die lineare Abbildung

$$\begin{aligned}\phi: S_3(\Delta) &\rightarrow \mathbb{R}^{n+3}, \\ s &\mapsto (s(x_0), s(x_1), \dots, s(x_n), s'(a), s'(b)).\end{aligned}$$

Wir zeigen zunächst die **Injektivität** von  $\phi$ . Gilt  $\phi(s) = 0$ , dann löst  $s$  das Interpolationsproblem (6.4.1) mit  $y_i = 0$  für alle  $i$  und  $s'(a) = s'(b) = 0$ . Da auch die Nullfunktion dasselbe Interpolationsproblem löst, folgt nach Satz 6.17:

$$\int_a^b (s'')^2 \leq \int_a^b 0^2 = 0.$$

Da  $s''$  stetig ist, folgt  $s'' = 0$  auf  $[a, b]$ . Somit ist  $s$  affin und mit  $s(a) = s(b) = 0$  folgt  $s = 0$ . Wegen  $\dim(S_3(\Delta)) = n + 3 = \dim(\mathbb{R}^{n+3})$  ist  $\phi$  sogar **bijektiv**, also existiert für alle  $y_0, \dots, y_k$  eine eindeutige Lösung des Interpolationsproblems mit Hermite-Randbedingungen.  $\square$

## Berechnung in B-Spline-Basis

Sei  $s \in S_3(\Delta)$ . Dann ist

$$s(x) = \sum_{i=-1}^{n+1} c_i B_3\left(\frac{x - x_i}{h}\right) \quad \text{für alle } x \in [a, b], \quad \text{wobei } x_i = a + ih.$$

BERECHNUNG DER KOEFFIZIENTEN  $c_i$ :

$$\begin{aligned}B_3(0) &= \frac{2}{3}, & B_3(\pm 1) &= \frac{1}{6}, & B_3(k) &= 0 & \text{für } |k| \geq 2, \\ B_3'(0) &= 0, & B_3'(\pm 1) &= \mp \frac{1}{2}, & B_3'(k) &= 0 & \text{für } |k| \geq 2.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \begin{aligned} s(x_i) &= y_i \\ s'(x_0) &= y_{0,1} \\ s'(x_n) &= y_{n,1} \end{aligned} & \Leftrightarrow & \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & & & 0 \\ \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & & & \\ & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \\ 0 & & & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{-1} \\ c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_n \\ c_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h y_0 \\ y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \\ h y_n \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Dies ist ein lineares Gleichungssystem mit dünn besetzter Matrix.

# Stichwortverzeichnis

- 0-1-Experimente
  - abhängige, 36
  - unabhängige, 35, 45
- $\sigma$ -Additivität, 15
- $\sigma$ -Algebra, 14
  
- a posteriori degree of belief, 41
- a priori degree of belief, 41
- abhängige 0-1-Experimente, 36
- Acceptance-Rejection-Verfahren, 92
- Additivität, endliche, 15
- Akzeptanzwahrscheinlichkeit, 92
- Akzeptanzzeit, 92
- asymptotische Äquivalenz von Folgen, 62
  
- Bayessche Regel, 41
- Bayessche Statistik, 41
- bedingte Erwartung, 38
- bedingte Verteilung, 38
- bedingte Wahrscheinlichkeit, 38
- Benfordsches Gesetz, 24
- Bernoulli-Verteilung, 35
  - n-dimensionale, 45
- Bernstein-Ungleichung, 53
- Binomialverteilung, 28
  - Poissonapproximation, 29
  - Varianz, 71
  
- Cauchy-Schwarz-Ungleichung in  $\mathcal{L}^2$ , 68
  
- Čebyšev-Ungleichung, 73
  
- degree of belief
  - a posteriori, 41
  - a priori, 41
- Detailed Balance-Bedingung, 75
- diskrete Zufallsvariable, 25
  - gemeinsame Verteilung, 58
  - Unabhängigkeit, 58
- diskretes Modell, 14
  - mehrstufiges, 42
  
- Ehrenfest-Modell, 48, 76
- Einschluss-/Ausschlussprinzip, 18
- Elementarereignis, 10
- empirische Verteilung, 22
- Ereignis, 11
  - Verteilungen für unabhängige Ereignisse, 52
  - Elementar-, 10
  - Ereignisse und ihre Wahrscheinlichkeit, 12
  - Indikatorfunktion, 32
  - Unabhängigkeit, 50
- Erfolgswahrscheinlichkeit, 27
- Ergodensatz, 104
- Erwartung, bedingte, 38
- Erwartungswert, 31
  - der Poissonverteilung, 32
  - Linearität, 34
  - Monotonie, 34

- 
- Fluss in Markovketten, 75
  - gemeinsame Verteilung, 58
  - geometrische Verteilung, 52
  - Gesetz der großen Zahlen, 53
    - für Markov-Ketten, 104
    - schwaches, 73
    - starkes, 73
  - gewichtetes Mittel, 33
  - Gewichtung der möglichen Fälle, 18
  - Gibbs-Sampler, 100
  - Gleichgewichte von Markov-Ketten, 73
  - Gleichgewichtsverteilung, 75
    - Konvergenz, 79
  - Gleichverteilung, 21
    - reellwertiger Zufallsvariablen, 90
    - Simulation, 83
  - hypergeometrische Verteilung, 31, 44
  - Hypothesen, 39
  - Importance Sampling, 96
  - Indikatorfunktion einer Ereignisses, 32
  - irreduzible stochastische Matrix, 80
  - Kern, stochastischer, 46
  - Kongruenzgenerator, linearer, 83
  - konsistente Schätzfolge, 94
  - Konvergenz ins Gleichgewicht, 78, 79
  - Konvergenz, stochastische, 73
  - Konvergenzsatz für endliche Markov-Ketten, 81
  - Korrelationskoeffizient, 69
  - Kovarianz, 69
  - kumulative Verteilungsfunktion, 91
  - $\mathcal{L}^2$ -Raum von diskreten Zufallsvariablen, 68
  - $\mathcal{L}^2$ -Skalarprodukt, 68
  - Laplace-Modell, 21
  - likelihood, 41
  - linearer Kongruenzgenerator, 83
  - Münzwurf, 10
    - abhängige Münzwürfe, 47
    - endlich viele faire Münzwürfe, 21
    - Markov-Kette, 76
    - zwei faire Münzwürfe, 51
  - Markov-Kette, 46
    - bei einem Münzwurf, 76
    - Bewegungsgesetz, 46
    - Fluss, 75
    - Gesetz der großen Zahlen, 104
    - Gleichgewicht, 73
    - Konstruktion mit vorgegebenen Gleichgewichtsverteilungen, 99
    - Konvergenzsatz für endliche Markov-Ketten, 81
    - Metropolis-Kette, 100
    - Monte Carlo-Verfahren, 103
    - Simulation mit vorgegebenem Gleichgewicht, 102
    - Stationarität, 74
    - zeitlich homogene, 74
  - Massenfunktion, 18
    - einer diskreten Zufallsvariable, 25
    - eines mehrstufigen diskreten Modells, 42
  - Matrix
    - stochastische / Übergangs-, 73
    - irreduzible stochastische, 80
    - stochastische, 46
  - mehrstufiges diskretes Modell, 42
    - Markov-Kette, **siehe** Markov-Kette
    - Produktmodell, 45

- 
- Wahrscheinlichkeitsverteilung, 42
  - Menge aller möglichen Fälle, 10
  - Metropolis-Algorithmus, 102
  - Metropolis-Kette, 100
    - Konvergenz, 103
  - Minorisierungsbedingung, 79
  - Mittel
    - arithmetisches, 33
    - gewichtetes, 33
  - Monte Carlo-Schätzer, 66, 94
    - Approximationsfehler, 66
    - eines mehrdimensionalen Integrals, 95
    - erwartungstreuer, 66
    - für Wahrscheinlichkeiten, 95
    - mittlere quadratische Fehler, 66
  - Monte Carlo-Verfahren, 66
    - für Markov-Ketten, 103
  - Paradoxon
    - Sankt-Petersburg-, 33
    - Simpson-, 40
  - Periode eines Zustands, 80
  - Permutationen
    - zufällige, **siehe** Zufallspermutationen
  - Poissonapproximation der Binomialverteilung, 29
  - Poissonverteilung, 29
    - Erwartungswert, 32
  - Potenzmenge, 14
  - Produkt von Wahrscheinlichkeitsverteilungen, 45
  - Produktmodell, 45
  - Pseudo-Zufallszahlengenerator, 83
  - Rückkehrzeit, 62
  - Random Walk, 62
    - auf den ganzen Zahlen, 59
    - auf einem Gitter, 47
    - auf Graphen, 77
  - Bewegungsverlauf, 62
    - symmetrischer, 62
    - Trefferzeit, 62
    - Verteilung der Positionen zur Zeit  $n$ , 61
    - zyklischer, 76
  - reellwertige Zufallsvariable, 90
    - gleichverteilt, 90
    - Unabhängigkeit, 90
  - Reflektionsprinzip, 63
  - Rucksackproblem, 101
  - Sankt-Petersburg-Paradoxon, 33
  - Satz
    - Formel von der totalen Wahrscheinlichkeit, 39
  - Schätzfolge
    - konsistente, 94
  - Schwaches Gesetz der großen Zahlen, 73
  - Selbstbefruchtung von Pflanzen, 47
  - Shift-Register-Generatoren, 88
  - $\sigma$ -Additivität von Wahrscheinlichkeitsverteilungen, 15
  - Simpson-Paradoxon, 40
  - Simulated Annealing, 102
    - Algorithmus, 103
  - Simulation einer diskreten Verteilung
    - direkt, 91
  - Simulation einer Markov-Kette mit vorgegebenem Gleichgewicht, 102
  - Simulation von Gleichverteilungen, 83
  - Simulationsverfahren, 90
    - Acceptance-Rejection-Verfahren, 92
    - direktes Verfahren, 91
-

- Standardabweichung, 67
- starkes Gesetz der großen Zahlen, 73
- Stationarität von Markov-Ketten, 74
- Stirlingsche Formel, 61
- stochastische Konvergenz, 73
- stochastische Matrix, 46, 73  
irreduzibel, 80
- stochastischer Kern, 46
- symmetrischer Random Walk, 62
- Transformationssatz, 32
- Trefferzeit, 62  
Verteilung, 63
- Übergangsmatrix, 73
- unabhängige 0-1-Experimente, 35, 45
- Unabhängige Zufallsvariablen, 58
- Unabhängigkeit, 38  
Ereignis  
Verteilung, 52  
reellwertiger Zufallsvariablen, 90  
von Ereignissen, 50
- Unabhängigkeit von diskreten Zufallsvariablen,  
58, 59
- Unabhängigkeit von Ereignissen, 28, 51
- Ungleichung  
Čebyšev-, 73
- Unkorreliertheit, 70
- Varianz, 67  
der Binomialverteilung, 71  
Reduktion durch Importance Sampling, 96  
von Summen, 71
- Variationsdistanz von Wahrscheinlichkeitsverteilungen, 78
- Verteilung  
bedingte, 38  
direkte Simulation einer diskreten Verteilung, 91  
für unabhängige Ereignisse, 52
- Verteilungsfunktion, kumulative, 91
- Würfelnwurf, 25
- Wahrscheinlichkeit  
Akzeptanz-, 92  
bedingte, 38  
Erfolgs-, 27
- Wahrscheinlichkeitsraum, 16
- Wahrscheinlichkeitsverteilung, 15, 18  
einer diskreten Zufallsvariable, 25  
der Trefferzeiten, 63  
des Maximums, 65  
diskrete, 18  
eines mehrstufigen diskreten Modells, 42  
endliche Additivität, 15  
gemeinsame, 58  
geometrische, 52  
Gleichverteilung / Laplace-Modell, 21  
Produkt, 45  
Variationsdistanz, 78
- Warteschlange, 28
- Ziehen mit Zurücklegen, **siehe** Binomialverteilung
- Ziehen ohne Zurücklegen, **siehe** hypergeometrische Verteilung
- Zufallsfolgen, 8
- Zufallspermutationen, 89
- Zufallsvariable, 11, 25  
diskrete, 25  
reellwertige, 32, 90  
Standardabweichung, 67

unabhängige, 58  
Varianz, 67  
Zufallszahlen aus  $[0,1)$ , 89  
Zufallszahlengenerator, 83, 90  
Kombinationen, 89  
zyklischer Random Walk, 76