
Markov-Chain-Monte-Carlo in der stochastischen Geometrie

Überblick

1. Rückwärtssimulation

- Definitionen und Bezeichnungen
- Exakte Simulation von stochastischen rekursiven Folgen
- Dead Leaves Model

2. (Simulation endlicher Punktprozessen, Coupling-Into-And-From-The-Past)

3. Sandwiching

- Boolesches Modell mit Nebenbedingungen
- MCMC-Simulation mittels eines Geburts- und Todesprozesses
- Exakte Simulation durch CIAFTP

Dead Leaves Model

1 Rückwärtssimulation

1.1 Definitionen und Bezeichnungen

X : zeitdiskrete homogene Markov-Kette
repräsentiert ggf. eine zeitstetige Markov-Kette \tilde{X} zu Sprungzeitpunkten.

E : Zustandsraum von X . Hier: separabler metrischer Raum

\mathcal{E} : σ -Algebra auf E

P : Übergangskern von X : $P(x, A) = P(X_{t+1} \in A \mid X_t = x) \quad t \in \mathbb{N}$

π : (einzige) stationäre Verteilung von P

$$\pi(A) = \int_A P(x, A) \pi(dx)$$

1.2 Stochastische rekursive Folgen

Definition 1

Die Markov-Kette X läßt sich darstellen als so genannte SRF:

$$X_t = \varphi(X_{t-1}, U_t) \quad t \in \mathbb{N}$$

$(U_t)_{t \in \mathbb{N}}$: eine Folge von i.i.d* Zufallsvariablen auf Wahrscheinlichkeitsraum \mathcal{U}

$\varphi : E \times \mathcal{U} \rightarrow E$: deterministische Update-Funktion mit

$$\mathbb{P}(\varphi(x, U) = y) = \mathbb{P}(x, \{y\})$$

Definiere die zufällige Update-Funktion $\Phi_t(\cdot) = \varphi(\cdot, U_t)$.

Für $x \in E$ und $s < t \in \mathbb{Z}$ schreibe:

$$\begin{aligned} X_t^s(x) &= \varphi(\dots \varphi(\varphi(x, U_{s+1}), U_{s+2}) \dots, U_t) \\ &= \Phi_t \circ \dots \circ \Phi_{s+1}(x) \end{aligned}$$

Theorem 1

Voraussetzungen:

1. Es existiere ein Zustand $\hat{x} \in E$, so dass

$$\mathbb{P} \left(\tilde{X}_t^0(\hat{x}) \in A \right) \rightarrow \pi(A)$$

2. Es existiere eine f.s. endliche Stoppzeit $T \geq 0$, so dass

$$X_0^{-t}(\hat{x}) = X_0^{-T}(\hat{x}) \quad \forall t \geq T$$

Dann gilt

$$X_0^{-T}(\hat{x}) \sim \pi$$

1.3 Dead Leaves Model

Matheron(1968, 1975), Serra (1982), Jeulin(1997)

S : abgeschlossene Teilmenge des \mathbb{R}^d (Beobachtungsfenster)

U_t : $U_t \subset \mathbb{R}^d$, i.i.d. zufällige abgeschlossene Mengen, $t \in \mathbb{Z}$, mit

$$\mathbb{P}(\exists t > 0 : S \subseteq U_1 \cup \dots \cup U_t) = 1$$

E : Menge aller abgeschlossenen Teilmengen $x \in E$

hier: $d=2$

- Ξ' : Umriss eines Blattes mit zufälliger Orientierung (Korn)
- $s_t \in S$: gleichverteilte Punkte auf S (Keim)
- $U_t \stackrel{d}{=} \Xi' \oplus s_t = \{\xi + s_t : \xi \in \Xi'\}$

Vorwärtssimulation

$\varphi(\cdot, \cdot)$: $x \in E, U \subseteq \mathbb{R}^2$ abgeschlossen

$$\varphi(x, U) := [(x \setminus \text{int}(U)) \cup \partial U] \cap S$$

$X_0 = \emptyset$: keine Blätter vorhanden

$$X_t = [(X_{t-1} \setminus \text{int}(U_t)) \cup \partial U_t] \cap S, \quad t \geq 0$$

Umriß der heruntergefallenen Blätter zur Zeit t .

stationäre Verteilung von $(X_t : t \geq 0)$: Dead Leaves Modell

Stopregel: Erster Zeitpunkt der kompletten Überdeckung

\Rightarrow verfälschtes Ergebnis

Rückwärtssimulation

Dieselben Blätter werden in umgekehrter Reihenfolge plaziert.

$X_0 = \emptyset$: keine Blätter vorhanden

$$X_t = \varphi(X_{t+1}, U_t) := [X_{t+1} \cup \left(\partial U_t \setminus \bigcup_{s < t} (\text{int}(U_s)) \right)] \cap S$$

Stopp, sobald das Beobachtungsfenster vollständig übergedeckt ist.

⇒ exaktes Ergebnis

„Simulation von $-\infty$ “

<http://www.warwick.ac.uk/statsdept/Staff/WSK/dead.html>

Beweisskizze

- $X_t^0(x)$ besitzt eine stationäre Verteilung π ($t \rightarrow \infty$).
- π ist unabhängig von $x \in E$.
- oBdA wähle $\hat{x} = \emptyset$ in Theorem 1.
- Definiere $T_{dl} = \inf\{t \in \mathbb{N}_0 : S \subseteq U_0 \cup \dots \cup U_t\}$,
dann gilt nach Voraussetzung: $T_{dl} < \infty$ f.s. und

$$X_0^{-t} = X_0^{-T_{dl}} \quad \forall t \geq T_{dl}$$

Nach Theorem 1 gilt:

$$X_0^{-T_{dl}} \sim \pi$$

2 Simulation endlicher Punktprozessen

Problem:

- E ist überabzählbar: minimales Element: \emptyset maximales Element: ?

Lösung: SANDWICHING:

$$X_t^{\min(s)} \preceq X_t^s \preceq X_t^{\max(s)}$$

Konstruiere einen „einfachen“ Prozess $(D_t, t \in \mathbb{Z})$, so dass

$$D_t \succeq X_t \quad \forall t \in \mathbb{Z}$$

und

X kann mit Hilfe einer Regel F aus D zurückgewonnen werden.

$F(X_t, U_t)$ hängt vom aktuellen Zustand der Markov-Kette und einer weiteren Zufallsvariablen (U_t) ab.

COUPLING-INTO-AND-FROM-THE-PAST:

Der Prozess (D_t) wird zunächst rückwärts simuliert, um die entsprechenden Realisierungen auf $[-t_n, 0]$ zu erhalten.

1. Isotone Übergänge

- Wähle Startzeitpunkt $-t_1$
- Definiere $X_{-t_1}^{min(-t_1)} = \emptyset$ und $X_{-t_1}^{max(-t_1)} = D_{-t_1}$
- Entwickle X^{min} und X^{max} bis $t = 0$ nach der Regel $F(X_{t-}^{min}, U_t)$ beziehungsweise $F(X_{t-}^{max}, U_t)$.
- Gilt $X_0^{min(-t_1)} = X_0^{max(-t_1)}$ Stop!
Andernfalls: Start in $-t_2 < -t_1$.

SANDWICHING:

$$X_t^{min(s)} \preceq X_t^s \preceq X_t^{max(s)}$$

2. Antitone Übergänge

- Wähle Startzeitpunkt $-t_1$
- Definiere $X_{-t_1}^{min(-t_1)} = \emptyset$ und $X_{-t_1}^{max(-t_1)} = D_{-t_1}$
- Entwickle X^{min} und X^{max} bis $t = 0$ nach der Regel $F(X_{t-}^{max}, U_t)$ beziehungsweise $F(X_{t-}^{min}, U_t)$.

CROSS-OVER-TECHNIK

- Gilt $X_{-t_1}^{min(0)} = X_{-t_1}^{max(0)}$ Stop!

Andernfalls: Start in $-t_2 < -t_1$.

SANDWICHING:

$$X_t^{min(s)} \preceq X_t^s \preceq X_t^{max(s)}$$

3 Boolesches Model mit Nebenbedingungen

- Keimprozess: Poisson-Punktprozess (Intensitätsmaß μ)
- Körner: i.i.d zufällige abgeschlossene Mengen mit Verteilung \mathcal{G} auf H .
hier: Kreisscheiben mit zufälligem Radius $R \leq 1$
- Nebenbedingungen:
(Zusatzinformationen aus experimentellen Daten)
 - $\mathcal{A} = \{\bar{z}_1, \dots, \bar{z}_k\}$, \bar{z}_i müssen von mindestens n_1 aber höchstens n_2 Körnern überdeckt werden.
 - $\mathcal{B} = \{\hat{z}_1, \dots, \hat{z}_k\}$, \hat{z}_i dürfen von keinem Korn abgedeckt werden
 - $\mathcal{C} = \{z_1, \dots, z_k\}$, z_i müssen immer von mindestens einem Korn überlagert werden
 - weitere Bedingungen möglich

3.1 MCMC-Simulation des bedingten Modells

Definition eines räumlichen Geburts- und Todesprozesses, der das Boolesche Modell als (stationäre) Grenzverteilung besitzt.

$$X([u, v]) \leftarrow \text{BooleanModel}(\mu, \text{Leb}(\cdot), \mathcal{G}, [u, v] \times S \times H)$$

Sei Z ein markierter Raum-Zeit-Poisson-Prozess:

1. ein Poisson-Prozess auf \mathbb{R} liefert Geburtszeitpunkte: s
2. zu jedem Geburtszeitpunkt wird gleichverteilt auf S eine Position des Keimes: x
3. Zu jedem Keim werden zwei Marken ermittelt:
 - Korn G gemäß \mathcal{G} und
 - Lebensdauer l i.i.d exp.-verteilte Zufallsvariablen mit $EW = 1$

$$X([0, t]) \leftarrow \text{BooleanModel}(\mu, \text{Leb}(\cdot), \mathcal{G}, [0, t] \times S \times H)$$

$$X_t = \{(x, G) : (x, s, G, l) \in Z, s \leq t \leq s + l\}$$

$$\Rightarrow X_t = \bigcup_{(x, G) \in X_t} (x \oplus G)$$

stationäre Verteilung von X : Boolesches Modell ohne Nebenbedingungen.

Übergang zum bedingten Modell:

$$X = \{X_t : t \in \mathbb{R}\} \xrightarrow{\mathcal{C}} Y = \{Y_t : t \in \mathbb{R}\}$$

1. Geburt (x, G) in X , dann auch in Y .
2. Tod (x, G) in X , dann auch in Y , falls \mathcal{C} nicht verletzt wird;
andernfalls: Verlängerung der Lebensdauer von (x, G)

Verlängerung der Lebensdauer

- Jedem $z_i \in \mathcal{C}$ wird ein Poisson-Prozess P_i mit Intensität 1 zugeordnet.
- (x, G) überdecke $\{z_{i_1}, \dots, z_{i_m}\}$
- Ein beliebiger der zugehörigen P_{i_1}, \dots, P_{i_m} liefert eine neue potentiellen Todeszeitpunkt, falls dieser Prozess zur Zeit nicht verwendet wird.

Beachte: die verlängerten Lebensdauern müssen bei der Entwicklung von Y berücksichtigt werden.

Verfahren ergibt (Y_t) mit Grenzverteilung:

Boolesches Model mit Nebenbedingung \mathcal{C}

3.2 CFTP für das bedingte Modell

Sandwiching:

Definiere einen minimalen und einen maximalen Prozess Y^{min}, Y^{max} , welche einen mittleren Prozess Y^{mid} einschliessen.

Die drei Prozesse erfüllen folgende Bedingungen:

1. Y^{mid} besitzt das Boolesche Modell mit Nebenbedingungen als Gleichgewichtsverteilung
2. Für eine Halbordnung \preceq auf S gelte:

$$Y_t^{min(-T)} \preceq Y_t^{mid(-T)} \preceq Y_t^{max(-T)} \quad \forall t \geq -T$$

falls zum Startzeitpunkt $-T$ gilt:

$$Y_{-T}^{min(-T)} \preceq Y_{-T}^{mid(-T)} \preceq Y_{-T}^{max(-T)}$$

3. Für $-S < -T$ und $t \in [-T, 0]$ gelte:

$$Y_t^{\min(-T)} \preceq Y_t^{\min(-S)} \preceq Y_t^{\text{mid}(-S)} \preceq Y_t^{\max(-S)} \preceq Y_t^{\max(-T)}$$

4. Falls $Y_u^{\min(-T)} = Y_u^{\max(-T)}$ für ein $u \in [-T, 0]$, dann verschmelzen die Pfade, d.h.

$$Y_t^{\min(-T)} = Y_t^{\max(-T)} \quad \forall t \in [u, 0]$$

und es gilt:

$$Y_t^{\min(-S)} = Y_t^{\max(-S)} \quad \forall t \in [u, 0], \quad -S \leq -T$$

5. Es existiert ein fast sicher endlicher Zeitpunkt T , so dass der minimale und der maximale Prozess bis $t = 0$ verschmelzen, wenn in $-T$ gestartet.

Theorem 2

Unter den genannten Voraussetzungen gilt mit

$$T_c := \inf\{t \geq 0 : Y_0^{min(-t)} = Y_0^{max(-t)}\}$$

dass die Verteilung von

$$Y_0^{min(-t)} = Y_0^{max(-t)} \quad \forall t \geq T_c$$

durch das Boolesche Modell mit Nebenbedingungen gegeben ist.

Definition von \preceq

Betrachte zwei Keim-Korn-Menge $\mathcal{D} = \{(x_1, G_1), \dots, (x_n, G_n)\}$ und $\tilde{\mathcal{D}} = \{(\tilde{x}_1, \tilde{G}_1), \dots, (\tilde{x}_n, \tilde{G}_n)\}$.

$D \preceq \tilde{D}$:

- $(x_i, G_i) = (\tilde{x}_{\pi(i)}, \tilde{G}_{\pi(i)}) \quad \forall i \in \{1, \dots, n\} \setminus P(\mathcal{D})$
- $x_i \oplus G_i \subseteq \tilde{x}_{\pi(i)} \oplus \tilde{G}_{\pi(i)} \quad \forall i \in P(\mathcal{D})$

wobei

$P(\mathcal{D}) = \{j : \text{die Lebensdauer von } (x_j, G_j) \text{ wurde verlängert}\}$

und π eine entspr. Permutation der Zahlen $\{1, \dots, n\}$.

Konstruktion von Y^{min}, Y^{max}

Initialisierung:

Gegeben: $-T < 0$, \mathcal{C} , $X[-T, 0]$ (Coupling-Into-The-Past))

$$Y_{-T}^{min(-T)} \leftarrow \{(x, G) : (x, G) \in X_{-T}\}$$
$$Y_{-T}^{max(-T)} \leftarrow Y_{-T}^{min(-T)} \cup \{(z, D) : z \in \mathcal{C}\}$$

D : Kreisscheibe mit Radius $r = 2$.

(z, D) : Körner mit verlängerter Lebensdauer, daher

Zuordnung eines Poisson-Prozesses \ Index:

$$index(z_j, D) \leftarrow j \quad j = 1, \dots, |\mathcal{C}|$$

Rekursive Definition auf $[-T, 0]$

Sei $\mathcal{T} = \{t_1, \dots, t_{m(T)}\}$ Liste aller Geburts- / Todeszeitpunkte von X sowie Ereigniszeitpunkte der Poisson-Prozesse P_j .

$u \leq u + v < t_i$:

$$Y_{u+v}^{min(-T)} = Y_{u+v}^{min(-T)}$$

$$Y_{u+v}^{max(-T)} = Y_{u+v}^{max(-T)}$$

t_i **Geburtszeitpunkt** :

$$Y_{t_i}^{min(-T)} = Y_{t_i}^{min(-T)} \cup \{(x, G)\}$$

$$Y_{t_i}^{max(-T)} = Y_{t_i}^{max(-T)} \cup \{(x, G)\}$$

t_i Todeszeitpunkt:

$$Y_{t_i}^{min(-T)} = \begin{cases} Y_{t_i}^{min(-T)} \setminus \{(x, G)\} & , N^c(Y_{t_i}^{max(-T)} \setminus \{(x, G)\}) = N^c(Y_{t_i}^{max(-T)}) \\ Y_{t_i}^{min(-T)} & , \text{sonst} \end{cases}$$

$$Y_{t_i}^{max(-T)} = \begin{cases} Y_{t_i}^{max(-T)} \setminus \{(x, G)\} & , N^c(Y_{t_i}^{min(-T)} \setminus \{(x, G)\}) = N^c(Y_{t_i}^{min(-T)}) \\ Y_{t_i}^{max(-T)} & , \text{sonst} \end{cases}$$

$N^c(Y_t^s) = \text{Anzahl der überdeckten Punkte } \in \mathcal{C}.$

Verlängerung der Lebensdauer:

relevante P_j : $z_j \in \mathcal{C}$ überlagert von (x, G) in Y^{max}

freie P_j : Poisson-Prozess liefert zur Zeit keine Lebenszeit

$I_r \leftarrow$ Index-Menge der für (x, G) relevanten Poisson-Prozesse

$I_{max} \leftarrow \cup \{j : j \in I_r, \text{Poisson-Prozess } P_j \text{ frei in } Y^{max}\}$

Falls $I_{max} \neq \emptyset$:

Ordne (x, G) Index $j_0 = \min\{j : j \in I_{max}\}$ zu (d.h. Poisson-Prozess P_{j_0})

Verwende denselben Index in Y^{min}

Andernfalls:

$I_r \leftarrow$ Index-Menge der für (x, G) relevanten Poisson-Prozesse

$I_{min} \leftarrow \cup \{j : j \in I_r, \text{Poisson-Prozess } P_j \text{ frei in } Y^{min}\}$

- Setze $Y_{t_i}^{max(-T)} = Y_{t_i}^{max(-T)} \setminus \{(x, G)\}$ und
- vergrößere alle $(x_j, G_j), j \in I_{min}$ um (x, G)

$$x_j \oplus \tilde{G} \leftarrow (x_j \oplus G_j) \cup (x \oplus G)$$

t_i Ereigniszeitpunkt eines Poisson-Prozesses (P_j):

1. Es existiert kein Keim-Korn-Paar mit entsprechendem Index weder in Y^{max} noch in Y^{min} : Keine Veränderung
2. $\exists (x, G)$ in Y^{max} sowie in Y^{min} mit Index j : wie bei $t_i =$ Todeszeitpunkt
3. $\exists (x, G)$ in Y^{max} , aber keines in Y^{min} mit Index j :

$$Y_{t_i}^{min(-T)} = Y_{t_i}^{min(-T)}$$
$$Y_{t_i}^{max(-T)} = \begin{cases} Y_{t_i}^{max(-T)} \setminus \{(x, G)\} & , N^c(Y_{t_i}^{min(-T)} \cup \{(x, G)\}) \\ & = N^c(Y_{t_i}^{min(-T)}) \\ Y_{t_i}^{max(-T)} & , \text{sonst} \end{cases}$$

Ergebnisse:

1. Falls $Y_0^{min(-T)} = Y_0^{max(-T)}$ dann ist diese Konfiguration eine Realisierung des Booleschen Modells mit Nebenbedingungen.
2. Y^{max} stets überdeckt alle Punkte $z \in \mathcal{C}$
3. Körner in Y^{min} sind stets Kreisscheiben mit Radius ≤ 1 .
4. $Y_t^{min(-T)} \supseteq Y_t^{max(-T)} \quad \forall t \in [-T, 0]$
5. Für $-S < -T$ und $t \in [-T, 0]$ gilt:

$$Y_t^{min(-T)} \supseteq Y_t^{min(-S)} \supseteq Y_t^{max(-S)} \supseteq Y_t^{max(-T)}$$

Der Prozess Y^{mid} (Y)

Gegeben: $-T < 0$, \mathcal{C} , $X[-T, 0]$, $Y^{max}[-T, 0]$, $Y^{min}[-T, 0]$

$$Y_{-T}^{mid(-T)} = Y_{-T}^{min(-T)} \leftarrow \{(x, G) : (x, G) \in X_{-T}\}$$

Hieraus folgt: $Y_{-T}^{min(-T)} \preceq Y_{-T}^{mid(-T)} \preceq Y_{-T}^{max(-T)}$

$\mathcal{T} = \{t_1, \dots, t_{m(T)}\}$ Liste aller Geburts- / Todeszeitpunkte von X sowie Ereigniszeitpunkte der Poisson-Prozesse P_j .

t_i **Geburtszeitpunkt** :

$$Y_{t_i}^{mid(-T)} = Y_{t_i}^{mid(-T)} \cup \{(x, G)\}$$

Und damit: $Y_{t_i}^{min(-T)} \preceq Y_{t_i}^{mid(-T)} \preceq Y_{t_i}^{max(-T)}$,

$$\text{falls } Y_{t_i-}^{min(-T)} \preceq Y_{t_i-}^{mid(-T)} \preceq Y_{t_i-}^{max(-T)}$$

t_i Todeszeitpunkt:

$$Y_{t_i}^{mid(-T)} = \begin{cases} Y_{t_i}^{mid(-T)} \setminus \{(x, G)\} & , N^c(Y_{t_i}^{mid(-T)} \setminus \{(x, G)\}) = N^c(Y_{t_i}^{mid(-T)}) \\ Y_{t_i}^{mid(-T)} & , \text{sonst} \end{cases}$$

$N^c(Y_t^s) =$ Anzahl der überdeckten Punkte $z \in \mathcal{C}$.

Verlängerung der Lebensdauer:

relevante P_j : $z_j \in \mathcal{C}$ überlagert von (x, G) in Y^{mid}

freie P_j : Poisson-Prozess liefert zur Zeit keine Lebenszeit

$I_r \leftarrow$ Index-Menge der für (x, G) relevanten Poisson-Prozesse

$I_{max} \leftarrow \cup \{j : j \in I_r, \text{Poisson-Prozess } P_j \text{ frei in } Y^{max}\}$

$I_{mid} \leftarrow \cup \{j : j \in I_r, \text{Poisson-Prozess } P_j \text{ frei in } Y^{mid}\}$

$$\begin{aligned}
I_r &\leftarrow \text{Index-Menge der für } (x, G) \text{ relevanten Poisson-Prozesse} \\
I_{max} &\leftarrow \cup\{j : j \in I_r, \text{ Poisson-Prozess } P_j \text{ frei in } Y^{max}\} \\
I_{mid} &\leftarrow \cup\{j : j \in I_r, \text{ Poisson-Prozess } P_j \text{ frei in } Y^{mid}\}
\end{aligned}$$

Falls $I_{max} \neq \emptyset$:

Ordne (x, G) Index $j_0 = \min\{j : j \in I_{max}\}$ zu (d.h. Poisson-Prozess P_{j_0})

Andernfalls:

Ordne (x, G) Index $j_0 = \min\{j : j \in I_{mid}\}$ zu (d.h. Poisson-Prozess P_{j_0})

Und damit: $Y_{t_i}^{min(-T)} \preceq Y_{t_i}^{mid(-T)} \preceq Y_{t_i}^{max(-T)}$,

falls $Y_{t_i-}^{min(-T)} \preceq Y_{t_i-}^{mid(-T)} \preceq Y_{t_i-}^{max(-T)}$

t_i Ereigniszeitpunkt eines Poisson-Prozesses (P_j):

1. Es existiert kein Keim-Korn-Paar mit entsprechendem Index in Y^{mid} : Keine Veränderung
2. $\exists (x, G)$ in Y^{mid} mit Index j : wie bei $t_i =$ Todeszeitpunkt

Und damit: $Y_{t_i}^{min(-T)} \preceq Y_{t_i}^{mid(-T)} \preceq Y_{t_i}^{max(-T)}$,

falls $Y_{t_i-}^{min(-T)} \preceq Y_{t_i-}^{mid(-T)} \preceq Y_{t_i-}^{max(-T)}$

Theorem 3

Der Prozess $Y_t^{mid(-T)}$, $t \in [-T, 0]$ besitzt dieselben stochastischen Eigenschaften wie der bedingte räumliche Geburts- und Todesprozess Y vom Beginn, gestartet zum Zeitpunkt $-T$ simuliert bis zur Zeit 0.