

### 3. Markov ketju Monte Carlo

Olemme nyt valmiita soveltamaan Markov ketjujen teoriaa sämpläämiseen. Tämä sämpläysmenetelmä tunnetaan nimellä Markov-ketju Monte Carlo.

Haluaisimme sämplätä jostakin todennäköisyysmitasta  $\nu$  äärellisellä joukolla  $\mathcal{S}$ . Ideana on konstruoida tätä tarkoitusta varten Markov ketju  $X = (X(t))_{t \in \mathbb{Z}_{\geq 0}}$  tila-avaruudella  $\mathcal{S}$  (eli siirtymätodennäköisyysmatriisista  $P \in \mathbb{R}^{\mathcal{S} \times \mathcal{S}}$ ). Jotta se soveltuisi sämpläämiseen, haluamme, että:

- Markov-ketjun siirtymiä on käytännössä mahdollista sämplätä.
  - Tyypillisesti annetulla  $x$  siirtymätodennäköisyyksistä  $P_{x,y}$  nolasta eroavia on huomattavasti vähemmän kuin kaikkia mahdollisia tiloja  $y \in \mathcal{S}$ . Lisäksi nämä siirtymätodennäköisyydet ovat helposti laskettavissa.
- Tilan  $X(t)$  jakauma suppenee kohti mittaa  $\nu$ , kun  $t \rightarrow \infty$ .
  - Tyypillisesti tätä varten tarkistetaan että  $\nu$  on siirtymätodennäköisyysmatriisin  $P$  stationaarinen jakauma, ja lisäksi, että siirtymätodennäköisyysmatriisi on redusoitumaton ja aperiodinen (kts. Lause V.28).

Valitaan mielivaltainen alkutila  $X(0)$  (käytännössä yleensä jokin helposti kuvailtava tila), ja simuloidaan Markov-ketjua valitsemalla peräkkäisiä satunnaisia siirtymiä siirtymätodennäköisyyksien mukaisesti. Suurella  $t$ , satunnaismuuttuja  $X(t)$  noudattaa sitten likimääräisesti haluttua jakaumaa  $\nu$  (sitä paremmin, mitä suurempi  $t$ ), ja kelpaa satunnaisotokseksi.

Aloitamme tarkastelemalla käytännöllisesti simulaatioiden näkökulmasta kysymystä Markov ketjujen konvergenssista kohti stationaarista jakaumaa.

Tarkastelemme sen jälkeen yksityiskohtaisemmin Ising-mallin simulaatiota Glauber-dynamiikalla ja itseään välttävän polymeerin simulaatiota taitosalgoritmillä.

#### 3.1. Markov-ketjun konvergenssista simulaatioiden näkökulmasta

Oletetaan, että on jo löydetty jokin siirtymätodennäköisyysmatriisi  $P$ , joka määrittelee redusoitumattoman ja aperiodisen Markov-ketjun, jonka yksikäsitteinen stationaarinen jakauma  $\pi$  on haluttu todennäköisyysmitta,  $\pi = \nu$ . Lauseen V.28 perusteella siis mistä tahansa alkutilasta  $X(0)$  lähtien, saamme  $\mathbb{P}[X(t) = x] \rightarrow \pi_x$  kun  $t \rightarrow \infty$ . Lause ei kuitenkaan kerro kuinka suuri  $t$  pitäisi valita, että tilan  $X(t)$  jakauma olisi halutulla tarkkuudella  $\pi$ .

Mitä edes tarkoitamme "halutulla tarkkuudella"? Jakaumien läheisyyttä voi kvantifioida monella tavalla, käytämme tässä konkretian vuoksi totaalivariaatioetäisyyttä: jos  $\nu$  ja  $\nu'$  ovat kaksi todennäköisyysmittaa samalla avaruudella  $\Omega$  (joka on varustettu samalla tapahtumien sigma-algebralla), niin merkitsemme

$$d_{\text{TV}}(\nu, \nu') = \sup_E |\nu[E] - \nu'[E]|,$$

missä supremum on yli kaikkien tapahtumien  $E \subset \Omega$ . Siis  $d_{\text{TV}}(\nu, \nu')$  kertoo kuinka suuren virheen tapahtuman todennäköisyyteen pahimmillaan aiheuttaa toisen todennäköisyysmitan käyttäminen toisen sijasta. Äärellisillä todennäköisyysavaruuksilla toki kaikki seuraavat ovat yhtäpitäviä:

- $\nu_n \xrightarrow{w} \nu$  kun  $n \rightarrow \infty$ .
- Kaikilla  $x \in \Omega$  pätee  $\nu_n[\{x\}] \rightarrow \nu[\{x\}]$  kun  $n \rightarrow \infty$ .

- $d_{\text{TV}}(\nu_n, \nu) \rightarrow 0$  kun  $n \rightarrow \infty$ .

Redusoitumattoman aperiodisen Markov-ketjun konvergenssi stationaariseen jakumaan on itseasiassa eksponentiaalisen nopeaa. Jos merkitään tilan  $X(t)$  jakaumaa  $\underline{\mu}^{(t)}$ , niin pätee alkutilasta riippumatta

$$d_{\text{TV}}(\underline{\mu}^{(t)}, \underline{\pi}) \leq Ce^{-t/\tau_{\text{exp}}}$$

jollakin  $\tau_{\text{exp}} > 0$ . Standardi tapa tämän osoittamiseksi on tarkistaa, että matriisin  $P$  ominaisarvo 1 on yksinkertainen, ja muut ominaisarvot ovat yksikköympyrän sisällä (kts. Perron-Frobenius lause) — silloin

$$\tau_{\text{exp}} = -\log \left( \sup \left\{ |\lambda| \mid \det(\lambda - P) = 0 \right\} \right).$$

Aikaskaalaa  $\tau_{\text{exp}}$  kutsutaan Markov-ketjun *relaksaatioajaksi* (toisinaan käytetään hieman erilaisia määritelmiä eksponentiaalisen konvergenssin nopeuden kvantifioimiseksi, esimerkiksi erilaiset “autokorrelaatioajat” ovat simulaatioiden kannalta relevantteja). Tämän eksponentiaalisen konvergenssin perusteella on siis taattua, että kun  $t \gtrsim \log(1/\varepsilon) \times \tau_{\text{exp}}$ , tilan  $X(t)$  tuottaman otoksen jakauman virhe on korkeintaan  $\varepsilon$ .

Yhtä sämpläysongelmaa varten voisimme valita erilaisia Markov-ketjuja  $P$ , ja käyttää niitä Monte Carlo simulaatioon. Ylläolevan perusteella on siis periaatteessa toivottavaa, että Markov-ketjun  $P$  konvergenssinopeudessa esiintyvä relaksaatioaika  $\tau_{\text{exp}}$  on mahdollisimman pieni, koska Markov-ketjua pitää ajaa tätä suuruusluokkaa oleva askelmäärä luotettavan otoksen tuottamiseksi. Lisäksi pitää huomioida se, kuinka paljon resursseja (esim. prosessoriaikaa) yhden askeleen tuottaminen kuluttaa (äärimmäisenä esimerkkinä: on aina periaatteessa mahdollista määritellä Markov-ketju, joka hyppää yhdellä askeleella mistä tahansa alkutilasta haluttuun stationaariseen jakumaan, mutta silloin yhden askeleen tuottaminen on yhtä vaikeaa kuin alkuperäisestä jakaumasta sämpläminen). Käytännössä käänteisen tehokkuuden mittari on relaksaatioaika kerrottuna yhden Markov-ketjun askeleen simuloimiseen kuluvilla resursseilla.

Todellisissa ongelmissa ylläolevat pohdinnat ovat itseasiassa vielä huomattavasti liian naiiveja. Erityisesti malleissa on kokoparametri, vaikkapa  $N$ , sekä muita parametreja (vaikkapa ferromagneetin lämpötila). Tila-avaruus  $\mathcal{S} = \mathcal{S}_N$  riippuu kokoparametrin  $N$ , ja  $\#\mathcal{S}_N$  on tyypillisesti eksponentiaalisen suuri kokoparametrissa  $N$ . Haluaisimme valita mahdollisimman suuren  $N$  ollaksemme lähellä termodynaamista rajaa. Toisaalta suuri  $N$  epäilemättä samalla kasvattaa ainakin vastaavan Markov-ketjun ajamiseen tarvittavia laskennallisia resursseja. Mallin Markov-ketju Monte Carlo simulaatiossa siis tärkeää on, miten autokorrelaatioaika kerrottuna yhden Markov-ketjun askeleen simuloimiseen kuluvilla resursseilla käyttäytyy kokoparametrin  $N$  funktiona. Lisäksi autokorrelaatioaika riippuu mahdollisesti mallin muista parametreista (vaikkapa lämpötilasta). Saattaa käydä niin, että kun suurella  $N$  muut parametrit ovat lähellä kriittisiä arvoja (esim. ferromagneetti lähellä faasitransitiopistettä), mallilla on vaikkapa pitkän kantaman korrelaatioita (tyypillistä nk. jatkuvissa faasitransitioissa), joiden takia Markov-ketjun autokorrelaatioaika on paljon pidempi kuin tyypillisillä parametrin arvoilla. Tällaiset kriittiset pisteet ovat usein kiinnostavia, joten simulaatioiden haluttaisiin pysyvän tehokkaina myös tällaisilla parametrin arvoilla.

Sämpläämismenetelmän hyvyyden arviointi on ylipäänsä monimutkainen (käytännöllinen) kysymys, jossa pitää huomioida erityisesti se, mitä tarkoitusta varten otoksia halutaan tuottaa. Käytännössä tärkeää on miettiä esimerkiksi sitä, vaatiikko yhden Markov-ketjun askeleen tuottaminen eksponentiaalisen vai polynomiaalisen määrän resursseja kokoparametrissa, ja samoin onko autokorrelaatioaika eksponentiaalisen suuri vai rajoitettu polynomilla. Pääsääntöisesti, eksponentiaalisen suuria laskennallisia resursseja vaativat menetelmät ovat käyttökelvottomia, ja polynomiaalisista menetelmistä tulee valita se, jonka käyttämät resurssit ovat asympotoottisesti pienimmät.

### 3.2. Ising mallin simuloinnista

Tarkastelemme nyt Ising-mallin simuloimista Markov-ketju Monte Carlo -menetelmällä. Tässä luvussa pidetään kiinnitettyinä seuraavat valinnat:

- äärellinen graafi  $G = (V, E)$
- todennäköisyysavaruus  $\Omega = \{-1, +1\}^V$
- Hamiltonin funktio  $H: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ,
- käänteinen lämpötila  $\beta > 0$
- partitiofunktio  $Z = \sum_{\underline{\sigma} \in \Omega} e^{-\beta H(\underline{\sigma})}$
- Boltzmann-jakauma  $\nu[\{\underline{\sigma}\}] = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(\underline{\sigma})}$

Useat väitteet pätevät ilman tarkkaa Hamiltonin funktion valintaa, mutta olemme toki pääasiallisesti kiinnostuneita Ising-mallin Hamiltonin funktiosta

$$H(\underline{\sigma}) = - \sum_{\{v,w\} \in E} \sigma_v \sigma_w - B \sum_{v \in V} \sigma_v, \quad (\text{V.17})$$

missä parametri  $B \in \mathbb{R}$  kuvaa ulkoista magneettikenttää.

#### 3.2.1. Diskreettiaikainen Glauber-dynamiikka

Diskreettiaikainen Glauber-dynamiikka on Markov-ketju Ising-mallin tila-avaruudella  $\mathcal{S} = \Omega = \{-1, 1\}^V$ . Sanallisesti tämän Markov ketjun satunnainen askel kuvaillaan seuraavasti:

- Valitaan umpimähkään satunnainen graafin piste  $w \in V$ .
- Päivitetään spinin arvo pisteessä  $w$  ehdollisesta Boltzmann-jakaumasta, kun muiden spinien arvot on annettu.

Glauber-dynamiikka jäljittelee lämpöliikkeen vaikutusta ferromagneettisen materiaalin konfiguraatioon. Yllä olevien valintojen idea on, että kukin piste on yhtä altis lämpöliikkeelle, ja lämpöliikkeen (satunnainen) vaikutus asettaa spinin lokaaliin lämpötasapainoon ympäristönsä kanssa.

Konkreettisesti Markov-ketjun siirtymätodennäköisyydet ovat

$$\begin{aligned} P_{\underline{\sigma}, \underline{\tau}} &= 0 & \text{jos } \# \{v \in V \mid \sigma_v \neq \tau_v\} > 1 \\ P_{\underline{\sigma}, \underline{\tau}} &= \frac{1}{\#V} \frac{e^{-\beta H(\underline{\tau})}}{e^{-\beta H(\underline{\sigma})} + e^{-\beta H(\underline{\tau})}} & \text{jos } \# \{v \in V \mid \sigma_v \neq \tau_v\} = 1 \\ P_{\underline{\sigma}, \underline{\sigma}} &= 1 - \sum_{\underline{\tau} \neq \underline{\sigma}} P_{\underline{\sigma}, \underline{\tau}}. \end{aligned} \quad (\text{V.18})$$

**Lause V.34.** *Ising-mallin diskreettiaikainen Glauber-dynamiikka on redusoitumaton ja aperiodinen Markov-ketju, jonka yksikäsitteinen stationaarinen jakauma on Boltzmann-jakauma  $\nu$ .*

Lauseen V.28 perusteella saamme seurauksena Glauber-dynamiikan konvergenssin kohti Boltzmann-jakaumaa.

**Seuraus V.35.** *Jos  $X = (X(t))_{t \in \mathbb{Z}_{\geq 0}}$  on Ising-mallin diskreettiaikaisen Glauber-dynamiikan määrittelemä Markov-ketju millä tahansa alkujakaumalla  $\mathbb{P}[X(0) = \underline{\sigma}] = \nu_{\underline{\sigma}}$ , niin  $X(t)$  suppenee kohti Boltzmann-jakaumaa  $\nu$  kun  $t \rightarrow \infty$ , eli kaikilla  $\underline{\sigma} \in \mathcal{S}$  pätee*

$$\mathbb{P}[X(t) = \underline{\sigma}] \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} \nu[\{\underline{\sigma}\}] = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(\underline{\sigma})}.$$

*Lauseen V.34 todistus.* Todistamme stationaarisuuden käyttäen Lemman V.19 “detailed balance” ehtoa. Haluamme siis osoittaa, että kaikilla  $\underline{\sigma}, \underline{\tau} \in \mathcal{S}$  pätee

$$\nu[\{\underline{\sigma}\}] P_{\underline{\sigma}, \underline{\tau}} = \nu[\{\underline{\tau}\}] P_{\underline{\tau}, \underline{\sigma}}.$$

Siirtymätodennäköisyyksien kaavan (V.18) perusteella molemmat puolet ovat nollia jos  $\#\{v \in V | \sigma_v \neq \tau_v\} > 1$ . Jos  $\underline{\sigma} = \underline{\tau}$ , niin molemmat puolet ovat joka tapauksessa samat. Riittää siis tarkistaa ehto tapauksessa, jossa konfiguraatiot  $\underline{\sigma}$  ja  $\underline{\tau}$  eroavat tasan yhdessä kohdassa,  $\#\{v \in V | \sigma_v \neq \tau_v\} = 1$ . Silloin eksplisiittisistä kaavoista Boltzmann-jakaumalle ja siirtymätodennäköisyyksille nähdään, että molemmat puolet ovat

$$\frac{1}{Z} \frac{1}{\#V} \frac{e^{-\beta H(\underline{\sigma})} e^{-\beta H(\underline{\tau})}}{e^{-\beta H(\underline{\sigma})} + e^{-\beta H(\underline{\tau})}}.$$

Boltzmann-jakauman  $\nu$  stationaarisuus  $\nu P = \nu$  seuraa.

Huomataan, että kaikilla  $\underline{\sigma}$  pätee  $P_{\underline{\sigma}, \underline{\sigma}} > 0$ , koska kaavoista (V.18) alimmaisessa summassa on  $\#V$  nollasta eroavaa termiä, joista kukin on positiivinen mutta pienempi kuin  $\frac{1}{\#V}$ . Tästä seuraa, että Glauber-dynamiikka on aperiodinen.

Olkoon  $\underline{\sigma}, \underline{\tau} \in \mathcal{S}$ , ja  $m = \#\{v \in V | \sigma_v \neq \tau_v\}$ . Silloin on olemassa jono konfiguraatioita

$$\underline{\sigma} = \underline{\sigma}^{(0)}, \underline{\sigma}^{(1)}, \underline{\sigma}^{(2)}, \dots, \underline{\sigma}^{(m-1)}, \underline{\sigma}^{(m)} = \underline{\tau}$$

siten, että jokainen saadaan edellisestä tasan yhtä spinin arvoa muuttamalla,  $\#\{v \in V | \sigma_v^{(j-1)} \neq \sigma_v^{(j)}\} =$

1. Koska kaikki siirtymätodennäköisyydet  $P_{\underline{\sigma}^{(j-1)}, \underline{\sigma}^{(j)}}$  ovat positiivisia, näemme, että  $m$  askeleen siirtymätodennäköisyys

$$(P^m)_{\underline{\sigma}, \underline{\tau}} \geq P_{\underline{\sigma}^{(0)}, \underline{\sigma}^{(1)}} P_{\underline{\sigma}^{(1)}, \underline{\sigma}^{(2)}} \cdots P_{\underline{\sigma}^{(m-1)}, \underline{\sigma}^{(m)}} > 0$$

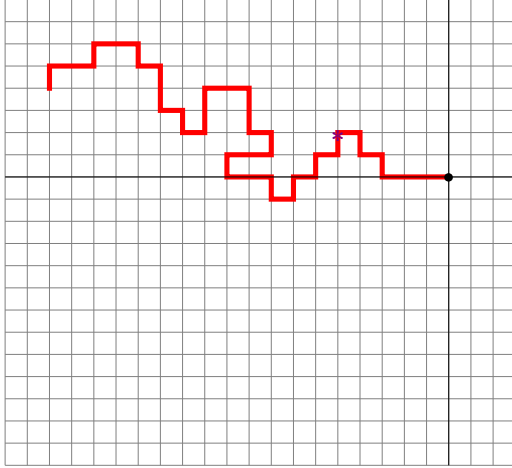
on myös positiivinen. □

### 3.3. Itseään välttävän polymeerin simuloinnista

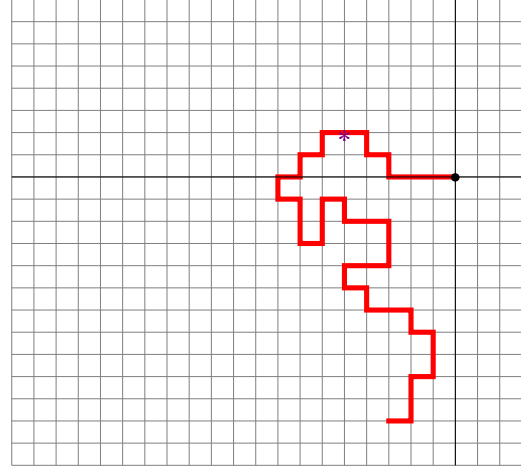
Kiinnitämme  $N > 0$  ja  $d \in \mathbb{Z}_{>0}$ , ja tarkastelemme tasaista todennäköisyysmittaa  $\nu$  hilan  $\mathbb{Z}^d$  origosta lähtevien  $N$  askeleen itseään välttävien kävelyjen joukolla  $\mathcal{C}_N$ , siis

$$\nu[\{\mathbf{X}\}] = \frac{1}{c_N} \quad \forall \mathbf{X} \in \mathcal{C}_N.$$

Esitämme tällaisen itseään välttävän satunnaiskävelyn näplämisestä erään Markov-ketju Monte Carlo -algoritmin, nk. taitosalgoritmin (engl. “pivot algorithm”). Se on yksi tehokkaimmista tunnetuista tavoista simuloida itseään välttäviä satunnaiskävelyitä.



(a) Kävely ennen taitosta.



(b) Kävely taitoksen jälkeen.

KUVA V.1. Taitosalgoritmi itseään välttävän kävelyn simuloimiseksi. Kuva V.1(a): itseään välttävästä kävelystä valitaan satunnainen taitoskohta  $T$ . Kuva V.1(b): ensimmäiset  $T$  askelta pidetään ennallaan, ja loppuihin askeliin sovelletaan satunnaista hilasymmetriaa.

### 3.3.1. Taitosalgoritmi itseään välttäville kävelyille

Taitosalgoritmi on siis Markov-ketju tila-avaruudella  $\mathcal{S} = \mathcal{C}_N$ . Sanallisesti sen satunnainen askel kuvaillaan seuraavasti:

- Valitaan umpimähkään satunnainen taitoskohta  $T \in \llbracket 0, N - 1 \rrbracket$ .
- Pidetään itseään välttävän kävelyn ensimmäiset  $T$  askelta ennallaan, ja sovelletaan viimeisiin  $N - T$  askeleeseen tasaisesti satunnaisesti valittua hilan  $\mathbb{Z}^d$  symmetriaa  $R$ . Jos näin saatu kävely on itseään välttävä, siirrytään siihen, muussa tapauksessa pysytään edellisessä itseään välttävässä kävelyssä.

Hilan  $\mathbb{Z}^d$  symmetriat ovat määritelmän mukaan sellaiset ortogonaaliset lineaarikuvaukset  $R: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ , jotka säilyttävät hilan, eli  $R(\mathbb{Z}^d) = \mathbb{Z}^d$ . Kantavektoreista  $\underline{e}_1, \dots, \underline{e}_d$  kukin kuvautuu silloin välttämättä muotoa  $\pm \underline{e}_j$  olevaksi vektoriksi. Kääntäen, jos  $\epsilon_1, \dots, \epsilon_d \in \{-1, +1\}$  ja jos  $j: \llbracket 1, d \rrbracket \rightarrow \llbracket 1, d \rrbracket$  on bijektio, niin muotoa  $\underline{e}_i \mapsto \epsilon_i \underline{e}_{j(i)}$  oleva lineaarikuvauks on hilan  $\mathbb{Z}^d$  symmetria. Siis hilasymmetrioiden joukko

$$\mathcal{O}_{\mathbb{Z}^d} = \left\{ R \in \mathbb{R}^{d \times d} \mid R R^\top = \mathbb{I}, R(\mathbb{Z}^d) = \mathbb{Z}^d \right\} \quad (\text{V.19})$$

on äärellinen joukko, jonka alkioden lukumäärä on  $\#\mathcal{O}_{\mathbb{Z}^d} = d! 2^d$ .

Olkoon  $\mathbf{X}: \llbracket 0, N \rrbracket \rightarrow \mathbb{Z}^d$  kävely, ja  $T \in \llbracket 0, N - 1 \rrbracket$  taitoskohta, ja  $R \in \mathcal{O}_{\mathbb{Z}^d}$  hilasymmetria. Taitoskohdasta  $T$  symmetrialla  $R$  taitettu kävely  $\mathbf{X}' = M_{T,R}(\mathbf{X})$  määritellään seuraavasti:

$$\mathbf{X}'(t) = \begin{cases} \mathbf{X}(t) & \text{jos } 0 \leq t \leq T \\ \mathbf{X}(T) + R(\mathbf{X}(t) - \mathbf{X}(T)) & \text{jos } T < t \leq N. \end{cases} \quad (\text{V.20})$$

Jos kävely  $\mathbf{X}$  on itseään välttävä, niin taitetun kävelyn  $\mathbf{X}'$  ensimmäiset  $T$  ja viimeiset  $N - T$  askelta ovat itseään välttäviä, mutta on mahdollista, että  $\mathbf{X}'(s) = \mathbf{X}'(u)$  joillakin  $s < T < u$ . Huomataan lisäksi, että pari  $(\mathbf{X}, \mathbf{X}')$  ei aina määrää paria  $(T, R)$

yksikäsitteisesti, vaan sama taitettu kävely voidaan saada useammilla taitoskohdan  $T$  ja symmetrian  $R$  valinnoilla.

Eksplisiittisesti taitosalgoritmin siirtymätodennäköisyydet  $P \in \mathbb{R}^{\mathcal{S} \times \mathcal{S}}$  ovat

$$P_{\mathbf{X}, \mathbf{X}'} = \frac{\#\{(T, R) \mid M_{T,R}(\mathbf{X}) = \mathbf{X}'\}}{N d! 2^d} \quad \text{jos } \mathbf{X}, \mathbf{X}' \in \mathcal{C}_N \text{ ja } \mathbf{X} \neq \mathbf{X}' \quad (\text{V.21})$$

$$P_{\mathbf{X}, \mathbf{X}} = 1 - \sum_{\mathbf{X}' \in \mathcal{C}_N} \frac{\#\{(T, R) \mid M_{T,R}(\mathbf{X}) = \mathbf{X}'\}}{N d! 2^d}. \quad (\text{V.22})$$

**Lause V.36.** *Taitosalgoritmi on redusoitumaton ja aperiodinen Markov-ketju itseään välttävien  $N$  askeleen kävelyjen joukolla  $\mathcal{S} = \mathcal{C}_N$ , ja sen yksikäsitteinen stationaarinen jakauma on tasainen todennäköisyysmitta  $\nu$  joukolla  $\mathcal{C}_N$ .*

Lauseen V.28 perusteella saamme seurauksena taitosalgoritmin konvergenssin kohti itseään välttävää satunnaiskävelyä.

**Seuraus V.37.** *Jos  $X = (X(t))_{t \in \mathbb{Z}_{\geq 0}}$  on taitosalgoritmin määrittelemä Markov-ketju millä tahansa alkujakaumalla  $\mathbb{P}[X(0) = \mathbf{X}] = \underline{\nu}_{\mathbf{X}}$ , niin  $X(t)$  suppenee kohti tasaista jakaumaa  $\nu$  kun  $t \rightarrow \infty$ , eli kaikilla  $\mathbf{X} \in \mathcal{C}_N$  pätee*

$$\mathbb{P}[X(t) = \mathbf{X}] \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{1}{c_N}.$$

*Lauseen V.36 todistus.* Todistamme stationaarisuuden käyttäen Lemman V.19 “detailed balance” ehtoa. Haluamme siis osoittaa, että kaikilla  $\mathbf{X}, \mathbf{X}' \in \mathcal{S}$  pätee

$$\nu[\{\mathbf{X}\}] P_{\mathbf{X}, \mathbf{X}'} = \nu[\{\mathbf{X}'\}] P_{\mathbf{X}', \mathbf{X}}.$$

Kun muistetaan, että  $\nu$  on tasainen mitta, siirtymätodennäköisyyksien kaavan (V.21) perusteella tämä “detailed balance” ehto seuraa, jos

$$\#\{(T, R) \mid M_{T,R}(\mathbf{X}) = \mathbf{X}'\} = \#\{(T', R') \mid M_{T',R'}(\mathbf{X}') = \mathbf{X}\}.$$

Näiden kahden joukon välillä on ilmeinen bijektio,  $(T, R) \mapsto (T, R^{-1})$ , joten alkiodien lukumäärät ovat samat ja siten “detailed balance” ehto on tarkistettu tasaiselle todennäköisyysmitalle.

Huomataan, että kaikilla  $\mathbf{X}$  pätee  $P_{\mathbf{X}, \mathbf{X}} \geq \frac{1}{d! 2^d} > 0$ , koska valinta  $R = \mathbb{I}$  tuottaa aina saman kävelyn. Tästä seuraa, että taitosalgoritmi on aperiodinen.

Redusoitumattomuuden osoittamiseksi on näytettävä, että mikä tahansa itseään välttävä kävely  $\mathbf{X}$  voidaan äärellisen monella taitoksella muuntaa miksi tahansa toiseksi itseään välttäväksi kävelyksi. Selvästi riittää osoittaa, että  $\mathbf{X}$  voidaan muuntaa suoraksi kävelyksi  $\bar{\mathbf{X}}$  joka määritellään kaavalla  $\bar{\mathbf{X}}(t) = t \underline{e}_1$  kaikilla  $t$ . Nimittäin suorittamalla käänteiset muunnosaskleet käänteisessä järjestyksessä saadaan suora kävely sitten muutettua mielivaltaiseksi itseään välttäväksi kävelyksi.

Määrittelemme kävelyn  $\mathbf{X}$  ympärysmittan  $Y(\mathbf{X})$  ja suorien askelten lukumäärän  $S(\mathbf{X})$  seuraavasti:

$$Y(\mathbf{X}) = 2 \sum_{i=1}^d \left( \max_{0 \leq n \leq N} \mathbf{X}_i(n) - \min_{0 \leq n \leq N} \mathbf{X}_i(n) \right)$$

$$S(\mathbf{X}) = \#\left\{ n \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket \mid \mathbf{X}(n) = \frac{1}{2}(\mathbf{X}(n-1) + \mathbf{X}(n+1)) \right\}.$$

Selvästi pätee  $Y(\mathbf{X}) \leq 2N$  ja  $S(\mathbf{X}) \leq N-1$ . Lisäksi yhtäsuuruus pätee näistä molemmissa samanaikaisesti täsmälleen silloin, kun  $\mathbf{X}$  on jokin suora kävely, eli  $\mathbf{X}(t) = \pm t \underline{e}_i$  jollakin indeksillä  $i$  ja merkillä  $\pm$ . Tällaiset suorat kävelyt saadaan muutettua kävelyksi  $\bar{\mathbf{X}}$  yhdellä taitoksella kohdasta  $T = 0$ .

Jätämme harjoitustehtäväksi osoittaa, että jos  $\mathbf{X}$  ei ole mikään suorista kävelyistä, niin on olemassa taitos, joka kasvattaa aidosti joko ympärysmittaa tai suorien askelten lukumäärää vähentämättä kumpaakaan. Äärellisen monen tällaisen taitoksen jälkeen ympärysmitan maksimaalinen arvo  $2N$  ja suorien askelten lukumäärän maksimaalinen arvo  $N - 1$  saavutetaan, jolloin kävely on saatu muunnettua suoraksi. Tämä todistaa taitosalgoritmin määrittelemän Markov-ketjun redusoitumattomuuden.  $\square$

**Tehtävä V.6.** Olkoon  $\mathbf{X}$  itseään välttävä kävely, ja  $Y(\mathbf{X})$  ja  $S(\mathbf{X})$  sen ympärysmitta ja suorien askelten lukumäärä, kuten edellisessä todistuksessa.

(a) Oletetaan, että on olemassa indeksi  $i \in \llbracket 1, d \rrbracket$  siten, että  $i$ :nnen koordinaatin arvo ei ole maksimaalinen (tai vastaavasti minimaalinen) kävelyn kummassakaan päätepisteessä — toisin sanoen joko  $\mathbf{X}_i(0), \mathbf{X}_i(N) < \max \{\mathbf{X}_i(t)\}$  (tai vastaavasti  $\mathbf{X}_i(0), \mathbf{X}_i(N) > \min \{\mathbf{X}_i(t)\}$ ). Osoita, että valitsemalla  $T$  siten, että  $\mathbf{X}_i(T) = \max \{\mathbf{X}_i(t)\}$  (tai vastaavasti  $\mathbf{X}_i(T) = \min \{\mathbf{X}_i(t)\}$ ) ja  $R$  siten, että  $R(\underline{e}_j) = \underline{e}_j$  kaikilla  $j \neq i$  ja  $R(\underline{e}_i) = -\underline{e}_i$ , saadaan taitettu kävely  $\mathbf{X}' = M_{T,R}(\mathbf{X})$ , jolle  $Y(\mathbf{X}') > Y(\mathbf{X})$  ja  $S(\mathbf{X}') \geq S(\mathbf{X})$ .

(b) Oletetaan, että kohdan (a) ehto ei ole voimassa, eli että kaikilla indekseillä  $i \in \llbracket 1, d \rrbracket$  pätee  $\{\min \{\mathbf{X}_i(t)\}, \max \{\mathbf{X}_i(t)\}\} = \{\mathbf{X}_i(0), \mathbf{X}_i(N)\}$ . Olkoon  $T'$  suurin sellainen ajanhetki, jolle pisteen  $\mathbf{X}(T')$  kahden koordinaatin arvot eroavat päätepisteen  $\mathbf{X}(N)$  vastaavista. Olkoon  $T = T' + 1$ , ja olkoon  $i$  se indeksi, jolle  $\mathbf{X}_i(T') \neq \mathbf{X}_i(N)$  ja olkoon  $k$  se toinen indeksi, jolle  $\mathbf{X}_k(T') \neq \mathbf{X}_k(N)$ . Osoita, että valitsemalla  $T$  näin, ja  $R$  siten, että  $R(\underline{e}_k) = \pm \underline{e}_i$  sopivasti valitulla etumerkillä, saadaan taitettu kävely  $\mathbf{X}' = M_{T,R}(\mathbf{X})$ , jolle  $Y(\mathbf{X}') \geq Y(\mathbf{X})$  ja  $S(\mathbf{X}') > S(\mathbf{X})$ .