

Simulation seltener Ereignisse mittels Importance Sampling
unter besonderer Berücksichtigung Markovscher Modelle

Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades (Dr. rer. nat.)

der

Mathematisch–Naturwissenschaftlichen Fakultät

der

Rheinischen Friedrich–Wilhelms–Universität Bonn

vorgelegt von

Werner Sandmann

aus

Bonn

Bonn 2004

Angefertigt mit Genehmigung der Mathematisch–Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Rheinischen Friedrich–Wilhelms–Universität Bonn

1. Referent:
2. Referentin:

Prof. Dr. Johann Christoph Strelen
Prof. Dr. Christel Baier

Tag der Promotion: 24. Juni 2004

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Übersicht und Beiträge dieser Arbeit	6
2	Große Abweichungen – Theorie seltener Ereignisse	10
2.1	Summen unabhängiger identisch verteilter Zufallsvariablen	13
2.2	Allgemeine Prinzipien	20
2.3	Empirische Verteilungen – Zusammenhang mit Entropie	23
2.4	Diskrete Markovketten mit endlichem Zustandsraum	26
2.4.1	Prinzip großer Abweichungen für additive Funktionale	29
2.4.2	Prinzip großer Abweichungen für empirische Verteilungen	32
3	Simulation seltener Ereignisse	35
3.1	Statistische Schätzung asymptotisch kleiner Wahrscheinlichkeiten	37
3.2	Schätzer und Konfidenzintervalle aus Simulationsdaten	39
3.2.1	Simulation transienter Leistungsmaße	40
3.2.2	Simulation stationärer Leistungsmaße	42
3.2.3	Implementierungsfragen	48
3.3	Importance Sampling	50
3.3.1	Einführendes Anwendungsbeispiel	53
3.3.2	Formale Grundlagen	54
3.3.3	Optimale Schätzer	58
3.3.4	Effizienzkriterien	61
3.3.5	Klassische Maßwechselstrategien	69
3.3.5.1	Skalierung und Translation	72
3.3.5.2	Exponentieller Maßwechsel	72
3.4	Das RESTART-Verfahren	80

4	Importance Sampling für Markovmodelle	84
4.1	Formale Grundlagen für Markovketten	87
4.1.1	Anwendung auf Markovsche Warteschlangennetze	92
4.1.2	Anwendung auf Markovsche Reward-Modelle	93
4.2	Optimale Schätzer	95
4.2.1	Das M/M/1-Modell	97
4.2.2	Ein Markovkettenbeispiel	102
4.2.3	Bernoulli-Experimente	109
4.2.4	Absorptionswahrscheinlichkeiten und Arbeitsphasenparameter . . .	114
4.2.4.1	Bernoulli-Experimente als absorbierende Markovkette . .	119
4.2.5	Leistungsmaße über endlichem Horizont	122
4.2.6	Stationäre Leistungsmaße	127
4.3	Effiziente Schätzer	130
4.3.1	Zyklischer Ansatz	130
4.3.2	Heuristiken für Zuverlässigkeitsmodelle	131
4.3.3	Zum Einfluß der Simulationsmethode	137
4.4	Transitionsklassenmodelle	142
4.4.1	Maßwechsel und Likelihood-Quotient	148
4.4.2	Dynamischer Maßwechsel	149
4.4.3	Komponentenbasierter Maßwechsel	153
4.5	Tandemwarteschlangennetze	155
4.5.1	Neue zustandsunabhängige Maßwechselstrategien	158
4.5.2	Numerische Ergebnisse	165
4.5.3	Potentielle Verallgemeinerungen	173
5	Adaptives Importance Sampling	175
5.1	Einfache heuristische Verfahren	178
5.2	Einheitliche Parametrisierung	181

5.3	Direkte Varianzminimierung	182
5.4	Die Cross-Entropy-Methode	185
5.4.1	Anwendung auf Markovketten	188
5.4.2	Anwendung auf Transitionsklassenmodelle	193
5.4.3	Charakterisierung über große Abweichungen	197
5.5	Adaptive Optimierung unseres dynamischen Maßwechsels	198
6	Zusammenfassung und Ausblick	202
A	Anhang	206
A.1	Konvergenzbegriffe und Grenzwertsätze	206
A.2	Markovketten	209
A.2.1	Diskrete Markovketten	211
A.2.2	Stetige Markovketten	218
A.2.3	Lösungsverfahren, Einbettung, Randomisierung	223
	Literatur	227

1 Einleitung

Die vorliegende Arbeit behandelt die simulative Analyse seltener Ereignisse, wobei ein besonderes Augenmerk auf Markovmodelle gelegt wird. Bei der modellbasierten Leistungsanalyse realer Systeme spielen in zahlreichen Anwendungsbereichen Markovmodelle eine wichtige Rolle, so etwa im Finanz- und Versicherungswesen, in der Fabrikation, der Lagerhaltung, bei fehlertoleranten Systemen, Zuverlässigkeitssystemen und insbesondere auch bei der Leistungsbewertung von Computer- und Kommunikationssystemen. Häufig erfolgt dabei die Beschreibung des abstrakten Modells nicht direkt als Markovkette, sondern auf einer höheren Abstraktionsstufe in Form von Warteschlangennetzen, stochastischen Petrinetzen, stochastischen Automaten oder stochastischen Prozeßalgebren, woraus dann die zugrundeliegende Markovkette generiert wird. Aufgrund der schnell wachsenden Anforderungen an reale Systeme resultieren dabei immer größere und komplexere Modelle. Die Größe des Zustandsraums der Markovkette wächst im allgemeinen exponentiell mit der Anzahl der Systemkomponenten, und man spricht in diesem Zusammenhang von der *Zustandsraumexplosion*. Daraus ergeben sich für die numerische Analyse sowohl Speicherplatz- als auch Rechenzeitprobleme.

Die Leistung vieler Systeme wird zudem entscheidend beeinflusst durch seltene Ereignisse. Dies sind Ereignisse, die nur mit einer sehr kleinen Wahrscheinlichkeit auftreten, dann jedoch unter Umständen ernsthafte und zum Teil katastrophale Auswirkungen haben. Zahlreiche Beispiele verdeutlichen die Notwendigkeit zur Analyse solcher seltenen Ereignisse: ein Super-GAU in einem Atomreaktor, der Ruin von Versicherungen oder Banken, Ausfälle ganzer Fabrikationsanlagen, Lieferausfälle aufgrund leerer oder teilweise leerer Lager, Fehlalarme in Sicherheitsanlagen wie Radar oder ähnlichen Warnsystemen, Schäden in technischen Systemen aufgrund von Materialermüdung oder Rissen (man denke an die Explosionen der Raumfähren Challenger und Columbia), Überschreitung gefährlicher Schranken in ökologischen Systemen wie beispielsweise bei Flutkatastrophen.

Auch und gerade im Bereich von Computer- und Kommunikationssystemen gibt es eine ganze Reihe von Beispielen für die Bedeutung seltener Ereignisse in Bezug auf die Leistung eines Systems. So erfordern beispielsweise die Standards für ATM-Netze üblicherweise Wahrscheinlichkeiten für Paketverluste von höchstens 10^{-9} . Weitere Beispiele sind kleine Bitfehlerraten im Bereich von 10^{-10} in digitalen Datenübertragungssystemen, Computersysteme mit hohen Zuverlässigkeitsanforderungen, deren Ausfall ernsthafte Folgen haben können, also fehlertolerante Systeme, sowohl solche mit hohen Redundanzen als auch solche, bei denen schon der Ausfall einzelner Komponenten nur mit einer sehr kleinen Wahrscheinlichkeit auftreten darf. Neben kleinen Fehlerwahrscheinlichkeiten spielen bei den genannten Beispielen oft auch Lebensdauern, Zeiten bis zu Systemfehlern, eine Rolle, und man interessiert sich für den Erwartungswert der Zeitdauer, bis ein Systemfehler auftritt oder ein gesamtes System ausfällt (*Mean Time To Failure, MTTF*).

Bei der Untersuchung von Systemen mit seltenen Ereignissen kann man zunächst unterscheiden, ob die Wahrscheinlichkeiten der seltenen Ereignisse bekannt oder unbekannt sind.

Sind die Wahrscheinlichkeiten unbekannt, besteht die Aufgabe meist gerade darin, diese Wahrscheinlichkeiten zu bestimmen. Dabei handelt es sich oft um sehr kleine Wahrscheinlichkeiten von Zuständen oder Mengen von Zuständen, die gerade bei der Untersuchung von Paketverlusten, extrem gefüllten Puffern oder Warteschlangen, sehr langen Warte- oder Lieferzeiten, Überschreitung kritischer Schranken, leeren Lagern, Ausfällen ganzer Systeme oder dem Ruin von Bedeutung sind. Diese Ereignisse kennzeichnet oft, daß für ihr Eintreten verhältnismäßig viele nicht seltene Ereignisse eintreten müssen. Das Überlaufen eines großen Puffers in einem Warteschlangensystem beispielsweise geschieht aufgrund einer hohen Anzahl von Ankünften während einer Bedienung. Eine einzelne Ankunft ist dabei nicht besonders selten oder unwahrscheinlich, erst das Zusammenkommen sehr vieler solcher Ankünfte und gleichzeitig sehr weniger Bedienungen lassen den Puffer überlaufen. Anhand der Struktur des Systems, z.B. anhand der Übergangsmatrix einer zugrundeliegenden Markovkette, lassen sich solche seltenen Ereignisse in der Regel nicht identifizieren. Ein bekanntes Beispiel, auf das sich einige Probleme zurückführen lassen, ist die Wahrscheinlichkeit für das Erreichen oder Überschreiten kritischer Schranken in einer Irrfahrt (*Random Walk*), die *Level Crossing Probability*. So stellt beispielsweise auch die Kundenzahl in einem elementaren Warteschlangensystem einen (eindimensionalen) Random Walk dar, wobei dann eine sehr große Anzahl von Kunden oder der Überlauf von Puffern dem Erreichen der kritischen Schranke entspricht. Ebenso wird häufig die Kapitalentwicklung in finanz- und versicherungsmathematischen Modellen als Random Walk interpretiert, und besagte Schranke entspricht dem Ruin.

Auch seltene Ereignisse, deren Wahrscheinlichkeiten bekannt sind, können erhebliche Probleme bei der Systemanalyse hervorrufen. Diese Klasse seltener Ereignisse führt auf sogenannte steife Systeme, etwa steife Differentialgleichungen, und ist in Markovmodellen charakterisiert durch das Vorliegen steifer oder starrer Markovketten (*stiff Markov chains*), die grob so beschrieben werden können, daß sich die Wahrscheinlichkeiten oder Raten von Zustandsübergängen um mehrere Größenordnungen unterscheiden. Dies bedeutet, daß gewisse Übergänge im Vergleich zur Mehrheit der Übergänge sehr unwahrscheinlich sind, also seltene Ereignisse darstellen. Die eigentlich gesuchten Größen sind dabei häufig Wahrscheinlichkeiten von Zuständen oder Zustandsmengen, die selbst keine seltenen Ereignisse sind, beispielsweise Zustandswahrscheinlichkeiten in steifen Markovketten.

Eine Art Mischform der beschriebenen Arten seltener Ereignisse tritt bei der Untersuchung vieler Zuverlässigkeitsmodelle auf. In Systemen, bei denen Komponenten ausfallen können und repariert werden, sind die (bekannten) Fehlerraten deutlich, d.h. um Größenordnungen kleiner als die entsprechenden Reparaturraten oder als Raten von Übergängen, die weder mit Fehlern noch mit Reparaturen assoziiert sind. Somit liegen in der Mar-

kovschen Welt steife Ketten vor. Ein häufig interessierendes Leistungsmaß ist dann die unbekannte Wahrscheinlichkeit des Ausfalls eines gesamten Systems, der durch den Ausfall einer gewissen Anzahl einzelner Komponenten hervorgerufen wird. Somit müssen also mehrere Ereignisse zusammenkommen, die in diesen Fällen jedoch selbst wiederum relativ selten sind, um ein seltenes Ereignis mit unbekannter Wahrscheinlichkeit hervorzurufen.

Klassische analytische oder numerische Lösungsverfahren für Markovketten [Ste94] versagen typischerweise, wenn der Zustandsraum der Markovkette sehr groß ist und/oder sehr kleine Wahrscheinlichkeiten involviert sind. Gerade diese beiden Probleme ergeben sich jedoch in vielen realistischen Modellen. Häufig werden zur Umgehung dieser Probleme Dekompositions- bzw. Aggregationsverfahren vorgeschlagen. Dabei wird eine Partitionierung des Zustandsraums in Makrozustände (Aggregate) gebildet, die meist auf dem Konzept verschiedener Varianten von Zusammenfaßbarkeit (*Lumpability*) [KS69, Nic89, Buc94] basieren. Die Eigenschaft der Zusammenfaßbarkeit beschreibt dabei eine bestimmte Regelmäßigkeit in der Struktur der Markovkette und kann sowohl auf der Ebene des stochastischen Prozesses als auch auf Matrixebene, also anhand der Übergangsmatrix, beschrieben werden. Zusammenfaßbarkeit muß zur Rechtfertigung bestimmter Aggregationsmethoden jedoch theoretisch nachgewiesen oder zumindest heuristisch überprüft werden, was oftmals schon einen enormen Aufwand darstellt. Zudem ist die Anwendbarkeit einiger Verfahren abhängig von der Numerierung der Zustände oder die geforderte Regelmäßigkeit in der Struktur schlicht nicht gegeben.

Falls für Aggregationsverfahren die Kriterien für ihre Anwendbarkeit zumindest annähernd erfüllt sind, bieten sie häufig eine Lösung für das Zustandsraumproblem, die Problematik seltener Ereignisse wird jedoch, wenn überhaupt, nur für den speziellen Fall steifer Markovketten in manchen Situationen befriedigend gelöst. Hierfür liefern die bekannten Aggregationsverfahren von Courtois [Cou77] für stationäres Verhalten und von Bobbio und Trivedi [BT86] für transientes Verhalten meist gute Approximationen, falls sie anwendbar sind. In beiden Fällen müssen jedoch vor Anwendung die Zustände der Markovkette geeignet numeriert werden. Bei Courtois geschieht dies in der Regel anhand der Struktur des Warteschlangennetzes, aus dem die Markovkette generiert wurde, für fast vollständig zerlegbare (*nearly completely decomposable, NCD*) Modelle, und das Verfahren ist exakt, wenn die zugrundeliegende Markovkette zusammenfaßbar ist. Bei Bobbio und Trivedi wird die Menge aller Zustände in „schnelle“ und „langsame“ Zustände klassifiziert. Die bereits genannten Probleme bei der Überprüfung der Anwendbarkeit bleiben für beide Verfahren bestehen. Insgesamt läßt sich zusammenfassen, daß allgemein bei Dekompositionsverfahren, auch bei iterativen Aggregations-/Disaggregationsverfahren wie etwa dem Verfahren von Takahashi (siehe z.B. [BGdMT98]) oder dem DAI-Verfahren von Strelen [Str97a, Str97b, Str97c] die Approximationsgüte signifikant von der Systemstruktur abhängt, und darüberhinaus die Partitionierung des Zustandsraums ein wesentliches Problem darstellt, das die Anwendung oftmals unmöglich macht.

Seltene Ereignisse, die nicht einfach über die Wahrscheinlichkeiten oder Raten von einzelnen Zustandsübergängen charakterisiert werden können, bleiben bei Aggregationsverfahren unberücksichtigt, d.h. die Bestimmung unbekannter Wahrscheinlichkeiten von seltenen Ereignissen, die durch das Zusammenkommen einer großen Anzahl nicht seltener Ereignisse eintreten, läßt sich weder mit klassischen analytischen oder numerischen Verfahren noch mit Aggregationsverfahren effizient durchführen. Daher sind für diese wichtige Klasse von Leistungsgrößen spezielle Verfahren erforderlich. Solch ein Verfahren ist die stochastische Simulation unter Verwendung spezieller Methoden für seltene Ereignisse.

Simulation besteht darin, Experimente in einem Modell durchzuführen und Informationen über mögliche Aktionen und Ereignisse zu beobachten und auszuwerten. Sie wird häufig in der Systemanalyse eingesetzt, wenn Experimente und Messungen am realen System zu aufwendig, zu teuer oder zu gefährlich sind und insbesondere auch dann, wenn man analytisch oder numerisch keine Lösung findet, sei es aus Aufwandsgründen oder mangels geeigneter mathematischer Verfahren. Beispiele für physikalische Simulationsmodelle sind etwa Windkanäle oder Flugsimulatoren zur Pilotenausbildung. Eine Computersimulation ist ein Experiment mit dem Computer auf einem mathematischen Modell, um statistische Schlüsse zu erhalten, die auf den experimentellen Beobachtungen basieren. Stochastische Simulationen enthalten zufällige Größen, die mit Hilfe von Pseudozufallszahlen bestimmt werden. Die Erzeugung „guter“ Pseudozufallszahlen stellt dabei wiederum ein eigenes Forschungsgebiet dar und ist in der einschlägigen Literatur ausführlich beschrieben, siehe z.B. [Knu69, Rub81, Ecu90b, LK00].

Die Simulation bietet gegenüber analytisch/numerischen Verfahren den Vorteil, daß sie geringe Speicheranforderungen hat, prinzipiell immer anwendbar und auf nahezu beliebigem Detaillierungsgrad durchführbar ist. Oft stellt sie zudem die einzige effektive Möglichkeit zur Untersuchung komplexer Systeme dar. Simulationen liefern jedoch nur statistische Schätzungen und keine exakten Lösungen und sind zudem oft sehr zeitaufwendig. Es ist also notwendig, effiziente statistische Verfahren zum Entwurf und zur Auswertung von Simulationsexperimenten einzusetzen, und zusätzlich neue Verfahren zur Beschleunigung von Simulationen (*simulation speed-up*) zu kreieren, insbesondere solche, die für die Simulation seltener Ereignisse (*Rare Event Simulation, RESIM*) geeignet sind. Unter Simulation seltener Ereignisse versteht man dabei sowohl die simulative Bestimmung unbekannter sehr kleiner Wahrscheinlichkeiten als auch die Simulation von Systemen oder Modellen mit seltenen Ereignissen, deren Wahrscheinlichkeiten bekannt sind, also etwa zur transienten oder stationären Analyse steifer Markovketten.

Bei der Simulation von Markovketten stellt die Größe des Zustandsraums im allgemeinen kein Problem dar, allenfalls bei der Anwendung fortgeschrittener Verfahren wie der regenerativen Methode. Seltene Ereignisse jedoch treten auch in Simulationen, nicht nur von Markovmodellen, nur selten auf. Da aber für zuverlässige statistische Aussagen ausreichend viele Beobachtungen dieser Ereignisse erforderlich sind, erfordern klassische Si-

mulationsverfahren einen enorm hohen, effektiv nicht mehr durchführbaren Zeitaufwand, für einige der genannten Beispiele im Bereich von mehreren Jahren. Die Simulation seltener Ereignisse ist also eine Erweiterung der Simulationstechnik auf die spezielle Problematik von seltenen Ereignissen, die geeignete Methoden zur Simulationsbeschleunigung erfordert. Dabei ist Simulationsbeschleunigung so zu verstehen, daß der Zeitaufwand zur Bestimmung von statistischen Schätzungen auf eine vorgegebene Genauigkeit, also für vorgegebene Konfidenzniveaus und Breiten von Konfidenzintervallen, reduziert wird.

Dieses Ziel läßt sich grundsätzlich auf zwei Arten erreichen: mehr Experimente in gleicher Zeit durchzuführen oder weniger Experimente für verlässliche statistische Aussagen zu benötigen. Schon aufgrund der technischen Entwicklung gibt es also eine „natürliche“ Simulationsbeschleunigung durch Verringerung der Rechenzeit bei Verwendung leistungsfähigerer schnellerer Rechner. Die Anforderungen an die Simulation seltener Ereignisse lassen sich jedoch selbst mit heutigen Rechnern nicht erfüllen. Einen ähnlichen Ansatz – schlicht über den Einsatz von mehr Ressourcen – stellen parallele und verteilte Methoden [Fuj90] dar, die jedoch ebenfalls für seltene Ereignisse unzureichend sind, da selbst im Idealfall der Faktor der Beschleunigung durch die Anzahl der eingesetzten Prozessoren begrenzt ist, und zudem dieser Faktor durch oft erheblichen zusätzlichen Synchronisationsaufwand gemindert wird. Beachtet man, daß die Anzahl der Prozessoren dabei meist kleiner als 100 ist und der Synchronisationsaufwand typischerweise mit der Anzahl von Prozessoren wächst, im Extremfall gar den Hauptaufwand der Simulation ausmacht, so wird klar, daß diese Art der Simulationsbeschleunigung eng begrenzt und noch dazu ausgesprochen teuer ist. Für die Simulation seltener Ereignisse verbleibt damit als einziger erfolgversprechender Ansatz, statistische Verfahren einzusetzen, die mit weniger Experimenten auskommen. Simulationsbeschleunigung in diesem Sinne ist dann gleichbedeutend mit Varianzreduktion für die verwendeten Schätzer. Solche Varianzreduktionsverfahren werden in der Simulationsliteratur [Ban98, BFS87, LK00, Rip87, Ros02, Rub81, RM98] zwar ausführlich beschrieben, zumeist jedoch ohne speziell die Anwendungsmöglichkeit für seltene Ereignisse zu diskutieren.

Es zeigt sich, daß zur Simulation seltener Ereignisse im wesentlichen zwei Varianzreduktionsverfahren geeignet sind, *Splitting* bzw. dessen Ausprägung *RESTART** und *Importance Sampling*. Beide Verfahren haben gemeinsam, daß sie das Ziel verfolgen, in einem Simulationsexperiment das seltene Ereignis häufiger hervorzurufen. In der englischsprachigen Literatur wird diese Technik häufig mit *Rare Event Provoking* bezeichnet. Unterschiedlich ist die Art, auf die dies erreicht werden soll. Während beim RESTART/Splitting das Ziel über das Aufspalten und Weiterverfolgen „vielversprechender“ Simulationsläufe erreicht werden soll, wird beim Importance Sampling die zugrundeliegende stochastische Gesetzmäßigkeit, das Wahrscheinlichkeitsmaß, verändert. In der Praxis zeigt sich sehr deutlich, daß die Art, wie die Aufteilung der Simulationsläufe bzw. die Veränderung des

*REpetitive Simulation Trials After Reaching Thresholds

Wahrscheinlichkeitsmaßes erfolgt, entscheidenden Einfluß auf die Effizienz des jeweiligen Verfahrens hat. Die Kunst bei der Anwendung beider Verfahren besteht dann darin, diese prinzipiell sehr einfachen Ideen so umzusetzen, daß tatsächlich eine Varianzreduktion und damit eine effiziente Simulation resultiert. Gelingt diese Umsetzung gut, so lassen sich dramatische Simulationsbeschleunigungen um viele Größenordnungen erreichen. Insbesondere beim Importance Sampling ist prinzipiell eine unbeschränkte Varianzreduktion möglich.

1.1 Übersicht und Beiträge dieser Arbeit

Während Übersichtsartikel zumeist nur sehr speziell auf Teilaspekte eingehen, bietet diese Arbeit zunächst eine umfassende ausführliche Darstellung der Simulation seltener Ereignisse in Computer- und Kommunikationssystemen mittels Importance Sampling beginnend in Kapitel 2 mit einer grundlegenden anwendungsorientierten Einführung in die Theorie großer Abweichungen, die sowohl bei der analytischen Untersuchung seltener Ereignisse als auch bei der Simulation eine wichtige Rolle einnimmt. Die bisher existierende Literatur zur Theorie großer Abweichungen und zu Importance Sampling ist nahezu ausschließlich in englischer Sprache, sodaß die Behandlung dieser beiden Themen in deutscher Sprache durchaus als ein Beitrag der vorliegenden Arbeit angesehen werden kann. Beim Importance Sampling ist zudem auch in der englischsprachigen Literatur jede Darstellung auf eine verhältnismäßig spezielle Problematik oder Anwendung ausgerichtet. Unsere Darstellung ist zunächst ganz allgemein und wird dann auf Markovmodelle spezialisiert.

In Kapitel 3 geben wir zunächst einen kurzen Überblick über die Simulation seltener Ereignisse, demonstrieren in 3.1 die Probleme bei der statistischen Auswertung und beschreiben in 3.2 die gängigsten Verfahren zur statistischen Auswertung von Simulationsexperimenten sowie deren Implementierung. In Abschnitt 3.3 führen wir das Varianzreduktionsverfahren Importance Sampling ein. Nach einem allgemeinen informellen Überblick und einem Anwendungsbeispiel geben wir in 3.3.2 die formalen Grundlagen des Verfahrens an und folgern als Korollar aus den allgemeinen Formeln, daß die durch den Satz von Radon–Nikodym geforderte absolute Stetigkeit von Wahrscheinlichkeitsmaßen auf eine Spur- σ -Algebra eingeschränkt werden kann. In 3.3.3 geben wir zunächst die Formeln für eine optimale Importance–Sampling–Dichte an, die auf einen optimalen Importance–Sampling–Schätzer führt. Diese optimale Dichte enthält die unbekannte zu schätzende Größe. Wir zeigen, daß diese optimale Dichte eindeutig durch die Form bestimmt ist, ohne die Voraussetzung, daß dort die gesuchte Größe vorkommt. In Abschnitt 3.3.4 stellen wir zunächst zwei häufig verwendete Effizienzkriterien vor, beschränkten relativen Fehler und asymptotische Optimalität von Importance–Sampling–Schätzern. Wir geben dann einen formalen Beweis, daß ein beschränkter relativer Fehler ein echt stärkeres Kriterium ist und präsentieren eine neue Charakterisierung asymptotischer Optimalität über die Größenordnung des relativen Fehlers, auch wenn dieser nicht beschränkt ist. Diese Charak-

terisierung erfolgt mittels o -Notation. Wir geben weiterhin in 3.3.5 einen Überblick über klassische Strategien für den Maßwechsel, Skalierung, Translation und den exponentiellen Maßwechsel, wobei wir beim exponentiellen Maßwechsel in 3.3.5.2 auch auf Summen von Zufallsvariablen und die Anwendung auf Warteschlangensysteme eingehen. Einer gewissen Vollständigkeit halber beschreiben wir schließlich in 3.4 das zweite bedeutende Verfahren zur Simulation seltener Ereignisse, RESTART, und begründen, warum wir uns in dieser Arbeit auf Importance Sampling beschränken.

Kapitel 4 behandelt Importance Sampling für Markovmodelle. Nach einer kurzen Darstellung der Simulation von Markovketten geben wir in 4.1 die formalen Grundlagen des Importance Sampling bei der Anwendung auf Markovketten an, also in der für Markovketten üblichen Notation, und beschreiben einige spezifische Effekte beim Importance Sampling für Markovketten. Nach der Einführung gängiger Sprechweisen für Markovsche Warteschlangennetze formulieren wir in 4.1.2 Importance Sampling für Markovsche Reward-Modelle, wozu wir schlicht Rewards als Funktionen interpretieren.

Auch für Markovmodelle untersuchen wir optimale Schätzer (Abschnitt 4.2) und berechnen zunächst optimale Maßwechsel für Beispiele. In 4.2.1 leiten wir den optimalen Maßwechsel für Arbeitsphasenparameter in $M/M/1$ -Modellen her und argumentieren, daß dieser Maßwechsel zur Schätzung stationärer Zustandswahrscheinlichkeiten nicht optimal ist. Wir diskutieren dann in 4.2.2 ein Markovkettenbeispiel aus der Literatur und machen dabei insbesondere auch die Bedeutung der Simulationsmethode für den optimalen Maßwechsel deutlich. Durch Ausnutzung der speziellen Struktur der Markovkette in diesem Beispiel berechnen wir den optimalen Maßwechsel, der in diesem Fall auf eine Markovkette führt, und wir zeigen darüberhinaus, daß dies mit klassischer regenerativer Simulation nicht möglich ist. In 4.2.3 untersuchen wir die Schätzung der Wahrscheinlichkeit für eine vorgegebene Mindestzahl von Erfolgen in einer endlichen Anzahl unabhängiger Bernoulli-Experimente. Wir demonstrieren dabei durch schrittweise Verbesserung der Modellierung auch die Vorgehensweise bei der Suche nach Maßwechseln. Wir zeigen, daß optimales Importance Sampling weder mittels unabhängiger Bernoulli-Experimente mit gleichbleibender Erfolgswahrscheinlichkeit noch mittels zeitabhängiger, von der Nummer des Experimentes abhängiger Erfolgswahrscheinlichkeiten möglich ist. Wir leiten dann Gleichungen für den optimalen Maßwechsel mit zeit- und zustandsabhängigen Erfolgswahrscheinlichkeiten her, wobei der Zustand die Anzahl bereits erzielter Erfolge ist. Es bleibt zunächst die Lösbarkeit dieser Gleichungen offen. Jedoch nutzen wir in 4.2.4 beschriebene bekannte Ergebnisse für absorbierende Markovketten, indem wir in 4.2.4.1 unabhängige Bernoulli-Experimente als absorbierende Markovkette beschreiben. Damit wird bewiesen, daß die zuvor entwickelten Gleichungen eindeutig lösbar sind und damit der optimale Maßwechsel tatsächlich auf zeit- und zustandsabhängige Erfolgswahrscheinlichkeiten führt, womit also die Form des optimalen Maßwechsels durch geeignete Modellierung gezeigt wird. In den Abschnitten 4.2.5 und 4.2.6 leiten wir allgemeiner die Form des optimalen Maßwechsels für Leistungsmaße über endlichem Horizont und stationäre Leistungsmaße her.

Dabei zeigen wir insbesondere, daß optimales Importance Sampling für Leistungsmaße von Markovketten im allgemeinen nicht mittels Markovketten realisierbar ist.

In 4.3 geben wir einen Überblick über existierende Methoden, die gelegentlich, je nach Struktur des Problems, zu effizienten Schätzern führen und präsentieren in 4.3.3 eine Fallstudie zum Einfluß der Simulationemethode auf die Effizienz von Importance-Sampling-Schätzern, wobei wir insbesondere auch die Bedeutung des Likelihood-Quotienten deutlich machen.

Abschnitt 4.4 behandelt die kompakte und strukturierte Beschreibung von Markovmodellen mittels Transitionsklassen, die dem Problem der Zustandsraumexplosion entgegenwirkt. Wir geben hier zunächst analog zu verhältnismäßig informellen Beschreibungen in der Literatur eine formale Definition von Transitionsklassenmodellen und zeigen auch anhand dieser Definition die Äquivalenz zu Markovketten. Wir zeigen dann in 4.4.1, wie Importance Sampling auf Transitionsklassenmodelle angewandt werden kann und führen eine geeignete Formulierung ein. In 4.4.2 schlagen wir einen dynamischen Maßwechsel vor, der abhängig sein kann vom Zustand, von der Zeit, d.h. der bisherigen Simulationslaufänge, von der Anzahl beobachteter seltener Ereignisse, z.B. Besuche in Zuständen der zugrundeliegenden Markovkette, und vom aktuellen Wert des Likelihood-Quotienten. Insbesondere sehen wir dabei auch, daß dieser Maßwechsel bei Anwendung unabhängiger Replikationen von Simulationsläufen fester Länge weniger empfindlich für die Vergrößerung der Laufänge ist als bekannte statische Verfahren, die Importance Sampling mittels einer fest gewählten alternativen homogenen Markovkette durchführen. Schließlich formulieren wir in 4.4.3 komponentenbasierte Maßwechsel für Transitionsklassenmodelle, also Maßwechsel, die nicht vom gesamten Systemzustand sondern nur vom Zustand bestimmter Systemkomponenten abhängig sind.

Nach einem kurzen Überblick über die wichtigsten Ergebnisse zu Importance Sampling für Markovsche Tandemwarteschlangennetze zu Beginn von Abschnitt 4.5, diskutieren wir in 4.5.1 Strategien für zustandsunabhängige Maßwechsel, wobei wir uns auf Parameterregionen konzentrieren, in denen der bekannteste und meist verwendete Maßwechsel nach Parekh und Walrand versagt. Dabei zeigen wir auf, wie man Maßwechsel heuristisch herleiten kann und führen dabei auch erfolglose Versuche vor, um zu demonstrieren, daß scheinbar plausible Ideen auf Irrwege führen können. Die Untersuchung dieser Irrwege führt jedoch zu Einsichten, die zur Herleitung effizienter Maßwechsel beitragen. Wir schlagen schließlich zwei neue zustandsunabhängige Maßwechsel vor, die insbesondere für konkrete Werte in den erwähnten kritischen Parameterregionen gute Ergebnisse liefern. Dies und insbesondere die Effizienz unserer Maßwechsel belegen wir in 4.5.2 durch numerische Ergebnisse und Vergleiche unserer beiden Maßwechselstrategien mit der von Parekh und Walrand sowie unserer effizientesten Maßwechselstrategie mit der zustandsunabhängigen Variante der Cross-Entropy-Methode, deren detaillierte theoretische Beschreibung dann im nächsten Kapitel erfolgt. Mögliche Verallgemeinerungen werden in 4.5.3 erläutert.

Kapitel 5 behandelt adaptives Importance Sampling, das sukzessive „Lernen“ eines guten Maßwechsels. Wir beschreiben zunächst historisch interessante einfache Heuristiken, eine einheitliche Parametrisierung, die den Maßwechsel bestimmt und den klassischen Ansatz der direkten Varianzminimierung, bei dem sukzessive basierend auf den Schätzungen der Maßwechsel verbessert wird, um die geschätzte Varianz, die Stichprobenvarianz, zu minimieren. In 5.4 beschreiben wir zunächst die Grundlagen der in jüngster Zeit sehr prominenten Cross-Entropy-Methode, deren Idee im wesentlichen darin besteht, nicht die Varianz sondern die relative Entropie, die Cross-Entropy, zwischen der jeweils aktuell verwendeten und der optimalen Importance-Sampling-Dichte zu minimieren. Nach der Beschreibung der Anwendung auf Markovketten nach de Boer formulieren wir in 5.4.2 die Anwendung der Cross-Entropy-Methode auf Transitionsklassenmodelle und zeigen in 5.4.3 den Zusammenhang zur Theorie großer Abweichungen auf. Schließlich zeigen wir in 5.5 die Möglichkeit der adaptiven Optimierung unseres dynamischen Maßwechsels, wobei wir auch einen kurzen Ausblick auf die Idee zur Parameteroptimierung mittels genetischer Algorithmen geben. Adaptives Importance Sampling kann dazu als spezielles Optimierungsverfahren angesehen werden.

Kapitel 6 faßt die Arbeit zusammen und gibt einen Ausblick auf zukünftige Forschungsgegenstände. Der Anhang enthält die Zusammenstellung wichtiger Konvergenzbegriffe und Grenzwertsätze sowie einen Überblick über Definitionen, unsere Notationen und wichtige Sätze und Verfahren für Markovketten.

2 Große Abweichungen – Theorie seltener Ereignisse

Seltene Ereignisse sind informell dadurch charakterisiert, daß sie mit sehr kleiner Wahrscheinlichkeit auftreten. Diese Charakterisierung wirft jedoch sofort verschiedene Fragen auf. Was ist unter einer sehr kleinen Wahrscheinlichkeit zu verstehen? Gibt es eine Wahrscheinlichkeitsschranke so, daß alle Ereignisse mit geringerer Wahrscheinlichkeit als selten bezeichnet werden können? Beschreibt allein die Wahrscheinlichkeit eines Ereignisses dessen praktische Bedeutung? Sind alle Ereignisse mit sehr kleiner Wahrscheinlichkeit von praktischem Interesse? Lassen sich seltene Ereignisse von praktischem Interesse mathematisch formal charakterisieren? Die Antworten darauf kann man zusammenfassen, indem man feststellt, daß es keine feste Wahrscheinlichkeitsschranke für die Charakterisierung von Seltenheit gibt, daß seltene Ereignisse von praktischer Bedeutung häufig von Systemparametern abhängen, wobei ihre Wahrscheinlichkeit mit entsprechender Veränderung dieser Parameter asymptotisch klein wird, und daß seltene Ereignisse häufig auf den Enden (*Tails*) von Verteilungen definiert sind.

Betrachtet man beispielsweise ein elementares Warteschlangensystem, so konvergiert für ein stabiles System die Wahrscheinlichkeit, daß mehr als $n \in \mathbb{N}$ Aufträge (Kunden) im System sind, für $n \rightarrow \infty$ gegen Null. Ebenso konvergiert die Wahrscheinlichkeit, daß die Wartezeit eine Schranke $q \in \mathbb{R}^+$ überschreitet, für $q \rightarrow \infty$ gegen Null. Die Geschwindigkeit der Konvergenz ist dabei abhängig von der Auslastung des Systems. Man kann seltene Ereignisse also informell auch als untypische oder unerwartete Ereignisse beschreiben, als große Abweichung vom Normalfall. Die mathematische Theorie, die sich damit beschäftigt, heißt demzufolge auch gerade Theorie großer Abweichungen (*Large Deviations Theory*).

Die Theorie großer Abweichungen ist im Bereich der Wahrscheinlichkeitstheorie ein sehr aktives Forschungsgebiet. Sie behandelt die asymptotische Berechnung kleiner Wahrscheinlichkeiten, unter anderem auch der Tails von Wahrscheinlichkeitsverteilungen und untersucht zudem auch, auf welche Weise seltene Ereignisse eintreten, d.h. welche Kette von anderen Ereignissen ablaufen muß, welche Wege (Pfade) zu seltenen Ereignissen führen, und insbesondere auch, welche dieser Pfade am typischsten (wahrscheinlichsten) sind. Dies ist gerade in Bezug auf die Simulation sehr hilfreich. Als asymptotische Methode bezieht sie ihre Effektivität aus der relativen Einfachheit, mit der Systeme analysierbar sind, deren Größe mit dem asymptotischen Parameter wächst oder deren Leistung sich mit diesem Parameter verschlechtert.

Zunehmend erfolgt die Anwendung der Theorie großer Abweichungen auch auf die Analyse seltener Ereignisse in komplexen Systemen wie Computer- und Kommunikationssystemen, jedoch von einer verhältnismäßig kleinen Anzahl von Forschern. Die Theorie erweist sich als schwer zugänglich. Ein Grund dafür besteht darin, daß, wie Deuschel und Stroock [DS89] in ihrer Einleitung schreiben, keine echte (einheitliche) Theorie großer Abweichungen existiert, sondern vielmehr neben grundlegenden Definitionen und Sätzen, die heute

als Standard angesehen werden, eine Vielzahl verschiedener Methoden und Techniken bekannt sind, deren Gesamtheit die Theorie großer Abweichungen bildet. Oftmals findet man identische Ergebnisse auf unterschiedliche Arten, die scheinbar keinerlei Bezug zueinander haben. Allerdings muß man anmerken, daß dies oft auch auf andere Gebiete zutrifft, ohne daß es sich als echtes Hindernis für eine Anwendung erweist.

Ein weiterer Grund für die eher geringe Verbreitung der Theorie großer Abweichungen im Bereich der Leistungsbewertung oder allgemeiner der Analyse komplexer realer System ist sicherlich die Tatsache, daß die Theorie und ihre Methoden ausgesprochen technisch und mathematisch sehr anspruchsvoll sind. Häufig werden schwierige Wahrscheinlichkeitstheoretische Problemstellungen für kleine Wahrscheinlichkeiten in analytische Probleme übertragen. Oft resultieren schwer oder gar nicht lösbare Variationsprobleme [Cle70, Col90, Vel76], Optimierungsprobleme für Integralgleichungen, und zudem müssen die mathematischen Ergebnisse in allgemein verständliche Aussagen über das untersuchte System übersetzt werden. Shwartz und Weiss [SW95] fassen diese Problematik wie folgt zusammen:

Large deviations is useful.
Large deviations is formidably technical.

Eine besondere Bedeutung hat die Theorie großer Abweichungen auch in der Simulation seltener Ereignisse erlangt. Selbst wenn sie keine direkten Ergebnisse über die Wahrscheinlichkeiten der zu untersuchenden Ereignisse liefert, kann sie hilfreiche Einsichten bieten, die bei der Simulation genutzt werden können. So dienen für die Verfahren RESTART und Importance Sampling Formulierungen über große Abweichungen oftmals als Richtlinie für eine geeignete Wahl der dort verwendeten Parameter. Während diese Erkenntnis der Nützlichkeit großer Abweichungen für das RESTART-Verfahren relativ neu ist, war sie beim Importance Sampling gerade ausschlaggebend für den Beginn der Anwendung des Verfahrens auf die Simulation seltener Ereignisse. Zudem läßt sich die in jüngster Zeit geradezu boomende *Cross-Entropy-Methode* [Rub97, LR00, Kro02], eine adaptive Variante des Importance Sampling, auch als ein adaptiver Ansatz über große Abweichungen charakterisieren, wie wir an späterer Stelle sehen werden. Allerdings stellt die Kompliziertheit der Theorie auch im Zusammenhang mit der Simulation für die praktische Anwendbarkeit auf komplexe Systeme eine wesentliche Einschränkung dar, jedoch wurden für einige einfache elementare Warteschlangensysteme asymptotisch optimale Verfahren gefunden und heuristische Erweiterungen für größere Systeme vorgeschlagen.

Wir geben hier eine anwendungsorientierte Einführung in die Theorie großer Abweichungen. Unsere Behandlung des Stoffes beschränkt sich dabei hauptsächlich auf die Motivation und Angabe einiger wichtiger Ergebnisse und Sätze sowie daraus resultierender Folgerungen, insbesondere im Hinblick auf Methoden im Bereich der Simulation seltener Ereignisse mittels Importance Sampling. Auf ausführliche Beweise wird bis auf weni-

ge Ausnahmen, die in der praktischen Bedeutung der verwendeten Beweistechniken begründet sind, verzichtet. Detaillierte Darstellungen findet man in den Büchern von Bucklew [Buc90], Dembo und Zeitouni [DZ98], Deuschel und Stroock [DS89] sowie Shwartz und Weiss [SW95]. Arbeiten mit einführendem Charakter oder Schwerpunkten auf speziellen Aspekten sind [LR96, O’C99, Stu98]. Für Einführungen in Grundlagen der Wahrscheinlichkeitstheorie verweisen wir auf die zahlreichen Bücher in diesem Gebiet, insbesondere auf die klassischen Werke von Feller [Fel68, Fel71] und Bauer [Bau91, Bau92]. In A.1 haben wir die wichtigsten Konvergenzbegriffe und Grenzwertsätze zusammengestellt, in A.2 grundlegende Begriffe und Ergebnisse zu Markovketten.

Wir wollen kurz auf einige Spechweisen eingehen, die wir in dieser Arbeit in Bezug auf Wahrscheinlichkeitsräume verwenden. Jedes Wahrscheinlichkeitsmaß (jede Wahrscheinlichkeitsverteilung) ist auf einer σ -Algebra \mathcal{A} definiert, die ihrerseits wiederum bezüglich einer Menge Ω definiert ist. Daher sprechen wir auch von Wahrscheinlichkeitsmaßen oder -verteilungen auf dem Meßraum (Ω, \mathcal{A}) . Typischerweise ist die σ -Algebra die Borelsche σ -Algebra. In der Theorie großer Abweichungen werden Aussagen häufig für offene und abgeschlossene Mengen getroffen. Wir setzen daher immer voraus, daß die entsprechende σ -Algebra die Borelsche (oder eine Obermenge davon) ist, da sie gerade von den offenen Mengen oder den abgeschlossenen Mengen als Komplemente der offenen Mengen erzeugt wird. Sie enthält also insbesondere alle offenen und abgeschlossenen Mengen. Wir sprechen bei einem Wahrscheinlichkeitsmaß oder einer Wahrscheinlichkeitsverteilung auf der Borelschen σ -Algebra einer Menge Ω dann auch von einem Wahrscheinlichkeitsmaß oder einer Wahrscheinlichkeitsverteilung auf Ω .

Trotz der Komplexität der Theorie kann die grundlegende Fragestellung relativ einfach dargestellt werden. Man betrachte eine Folge Z_1, Z_2, \dots von Zufallsvariablen, die stochastisch gegen eine Konstante $c \in \mathbb{R}$ konvergiert, also $\lim_{n \rightarrow \infty} P\{|Z_n - c| \geq \epsilon\} = 0$ für alle $\epsilon > 0$. Dabei kann Z_n wiederum aus Zufallsvariablen zusammengesetzt sein, etwa das Mittel aus n Zufallsvariablen X_1, X_2, \dots, X_n , die unabhängig und identisch verteilt, oder auch die Realisierung einer Markovkette sein können. Nach den Gesetzen großer Zahlen konvergiert dann Z_n gerade gegen den Erwartungswert der X_i , falls dieser existiert. Diese Konvergenz ist häufig exponentiell schnell, d.h. $P\{|Z_n - c| \geq \epsilon\} \approx K(\epsilon, c, n)e^{-nI(\epsilon, c)}$, wobei K eine in Bezug zur Exponentialverteilung langsam variierende Funktion und I eine nichtnegative Funktion ist, die die Rate der exponentiellen Konvergenz bestimmt und daher gerade *Ratenfunktion der großen Abweichungen* genannt wird. Vereinfacht gesprochen, erfüllt dann eine solche Folge (Z_n) ein *Prinzip der großen Abweichungen*. Die Theorie befaßt sich dann hauptsächlich mit der Bestimmung der Ratenfunktion I und (in geringem Maße) mit der Bestimmung von K . Sie kann also auch als Erweiterung der Gesetze großer Zahlen auf die Untersuchung der Konvergenzgeschwindigkeit angesehen werden.

2.1 Summen unabhängiger identisch verteilter Zufallsvariablen

Ein klassisches Gebiet der Wahrscheinlichkeitstheorie, dem auch die ersten Resultate für große Abweichungen entstammen, ist die Untersuchung des Mittelwertes von unabhängigen identisch verteilten Zufallsvariablen. Diese grundlegenden Ergebnisse sind für das Verständnis fortgeschrittener und allgemeinerer Methoden wesentlich.

Sei (Ω, \mathcal{A}, P) ein Wahrscheinlichkeitsraum, X_1, X_2, \dots eine Folge unabhängiger identisch verteilter reeller Zufallsvariablen mit Erwartungswert μ und Varianz σ^2 , und sei

$$S_n = \sum_{i=1}^n X_i.$$

Falls die Varianz existiert, so folgt mit der Ungleichung von Tschebyscheff für alle $\epsilon > 0$ und alle $n \in \mathbb{N}^+$

$$P \left\{ \left| \frac{1}{n} S_n - \mu \right| \geq \epsilon \right\} \leq \frac{\sigma^2}{n\epsilon^2}.$$

Damit ist eine Konvergenz in der Größenordnung von n^{-1} garantiert, in der Realität ist diese Konvergenz jedoch wesentlich schneller. Unter gewissen Voraussetzungen läßt sich zeigen, daß die Wahrscheinlichkeit großer Abweichungen exponentiell klein ist, d.h.

$$P \left\{ \left| \frac{1}{n} S_n - \mu \right| \geq \epsilon \right\} \sim e^{-nI(\epsilon)} \quad \text{für } n \rightarrow \infty,$$

wobei $I : \mathbb{R} \rightarrow [0, \infty]$ eine von der Verteilung der X_i abhängige Funktion, die sogenannte Ratenfunktion der großen Abweichungen, ist.

Bei der Berechnung geeigneter Ratenfunktionen spielen Transformierte von Zufallsgrößen eine wesentliche Rolle. In der Literatur, die aufgrund des technischen Charakters des Stoffes oft mathematisch sehr streng aufgebaut ist*, fehlt dabei häufig eine Motivation. Stattdessen werden die benötigten Transformaten eingeführt, zahlreiche Eigenschaften bewiesen, und erst dann ein Bezug zu Wahrscheinlichkeiten großer Abweichungen hergestellt, indem Sätze unter Verwendung von Transformaten formuliert und bewiesen werden.

Wir wollen hier exemplarisch eine Herleitung der für die Theorie bedeutenden sogenannten *Chernoff-Schranke* so angeben, daß sich die benötigten Transformaten daraus gewissermaßen automatisch ergeben. Zudem wird dabei auch die exponentielle Form der Wahrscheinlichkeiten deutlich. Dazu betrachten wir zunächst die Wahrscheinlichkeit, daß das Mittel von unabhängigen identisch verteilten reellen Zufallsvariablen größer bzw. kleiner als ein vorgegebener Wert ist und spezialisieren dann auf Werte, die größer/kleiner als der Erwartungswert sind.

*Diese Tatsache wird beispielsweise im Vorwort des Buches von Dembo und Zeitouni [DZ98] deutlich: "This book is an attempt to provide a rigorous exposition of the theory... We believe that a field as technical as ours calls for a rigorous presentation."

Mittels Parametrisierung, einigen elementaren Umformungen und einer Anwendung der Tschebyscheff-Markovschen Ungleichung,

$$P\{|X| \geq \alpha\} \leq \frac{1}{g(\alpha)} E[g(X)]$$

für alle reelle Zufallsvariable X , $\alpha \in \mathbf{R}$ und nichtnegative isotone Funktionen $g : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$ mit $g(\alpha) \geq 0$, ergibt sich für alle Parameter $\vartheta > 0$ eine obere Schranke:

$$P\left\{\frac{1}{n}S_n \geq x\right\} = P\{S_n \geq nx\} \quad (2.1)$$

$$= P\{\vartheta S_n \geq \vartheta nx\} \quad (2.2)$$

$$= P\{e^{\vartheta S_n} \geq e^{\vartheta nx}\} \quad (2.3)$$

$$\leq e^{-\vartheta nx} E[e^{\vartheta S_n}] \quad (2.4)$$

$$= e^{-\vartheta nx} E[e^{\vartheta(X_1 + \dots + X_n)}] \quad (2.5)$$

$$= e^{-\vartheta nx} (E[e^{\vartheta X_i}])^n. \quad (2.6)$$

Man sieht sofort, daß die Ungleichung für $\vartheta = 0$ ebenfalls erfüllt ist und somit für alle $\vartheta \geq 0$ gilt. Es ist bemerkenswert, daß diese Schranke für alle $n \in \mathbf{N}^+$ und nicht nur für hinreichend große n , also nicht nur asymptotisch, gilt. Zudem haben wir aus obiger Abschätzung „automatisch“ eine der häufig verwendeten Transformaten erhalten. Man nennt $M(\vartheta) := E[e^{\vartheta X_i}]$ für $\vartheta \in \mathbf{R}$ die *verallgemeinerte Laplace-Transformierte* oder *momentenerzeugende Funktion*. Aufgrund der Identität

$$M(\vartheta)^n = (E[e^{\vartheta X_i}])^n = e^{\ln((E[e^{\vartheta X_i}])^n)} = e^{n \ln(E[e^{\vartheta X_i}])} = e^{n \ln M(\vartheta)}$$

läßt sich die n -te Potenz der Laplace-Transformierten in den Exponenten schreiben, also

$$P\left\{\frac{1}{n}S_n \geq x\right\} \leq e^{-\vartheta nx} (E[e^{\vartheta X_i}])^n = e^{-\vartheta nx} e^{n \ln M(\vartheta)} = e^{-n(\vartheta x - \ln M(\vartheta))}.$$

Da dies für alle $\vartheta \geq 0$ gilt, kann man die Schranke verschärfen, indem man über $\vartheta \geq 0$ optimiert, und man erhält zunächst

$$P\left\{\frac{1}{n}S_n \geq x\right\} \leq \inf_{\vartheta \geq 0} e^{-n(\vartheta x - \ln M(\vartheta))} = e^{-n \sup_{\vartheta \geq 0} [\vartheta x - \ln M(\vartheta)]}.$$

Diese obere Schranke ist vor allem auch im Bereich der Informationstheorie in zahlreichen spezialisierten Varianten als *Chernoff-Schranke* bekannt. Mittels einer Parametrisierung mit $\vartheta < 0$ erhält man analog die obere Schranke

$$P\left\{\frac{1}{n}S_n \leq x\right\} \leq e^{-n \sup_{\vartheta \leq 0} [\vartheta x - \ln M(\vartheta)]}.$$

Bei der Herleitung auf Seite 14 dreht sich dabei im Schritt von (2.1) nach (2.2) durch die Parametrisierung mit $\vartheta < 0$ das Vorzeichen „innerhalb von P “ herum, alle weiteren Überlegungen sind analog zu vorher. Wir wollen nun untersuchen, inwieweit das Vorzeichen von ϑ bedeutend ist, wenn man Abweichungen um mehr als den Erwartungswert μ betrachtet. Offensichtlich gilt $M(\vartheta) > 0$ für alle $\vartheta \in \mathbb{R}$ und $M(0) = 1 \Rightarrow \sup_{\vartheta \in \mathbb{R}} [\vartheta x - \ln M(\vartheta)] \geq 0$ für alle $x \in \mathbb{R}$. Wegen der Konvexität von $e^{\vartheta x}$ folgt aus der Jensen-Ungleichung für alle $\vartheta \in \mathbb{R}$

$$M(\vartheta) = E [e^{\vartheta X_i}] \geq e^{\vartheta E[X_i]} = e^{\vartheta \mu}, \quad \vartheta \mu - \ln M(\vartheta) \leq 0$$

und somit

$$\sup_{\vartheta \in \mathbb{R}} [\vartheta \mu - \ln M(\vartheta)] = 0.$$

Damit erhalten wir die Folgerungen

$$\begin{aligned} x > \mu \wedge \vartheta < 0 &\Rightarrow \vartheta x - \ln M(\vartheta) < 0 \Rightarrow \sup_{\vartheta \geq 0} [\vartheta x - \ln M(\vartheta)] = \sup_{\vartheta \in \mathbb{R}} [\vartheta x - \ln M(\vartheta)] \\ x < \mu \wedge \vartheta > 0 &\Rightarrow \vartheta x - \ln M(\vartheta) < 0 \Rightarrow \sup_{\vartheta \leq 0} [\vartheta x - \ln M(\vartheta)] = \sup_{\vartheta \in \mathbb{R}} [\vartheta x - \ln M(\vartheta)]. \end{aligned}$$

Das Supremum in den obigen Schranken spielt gerade die Rolle der Ratenfunktion, und wir haben den Grund für die häufige Verwendung einer weiteren Transformaten hergeleitet, denn dieses Supremum ist gerade die sogenannte *Legendre-Transformierte* von $\ln E[e^{\vartheta X_i}]$ bzw. die *Cramér-Transformierte* der Verteilung der X_i , und für die Ratenfunktion erhält man also

$$I(x) := \sup_{\vartheta \in \mathbb{R}} [\vartheta x - \ln M(\vartheta)]$$

mit

$$M(\vartheta) := E [e^{\vartheta X_i}], \quad \vartheta \in \mathbb{R},$$

und es gilt $I(x) \geq 0$ für alle $x \in \mathbb{R}$ und $I(\mu) = 0$. Mit diesen Bezeichnungen haben wir nun für den eindimensionalen Fall, also für unabhängige identisch verteilte reelle Zufallsvariablen, einen klassischen Satz zu großen Abweichungen.

Satz 2.1 (Cramér-Chernoff) Für alle $n \in \mathbb{N}^+$

$$\forall x \geq \mu : P \left\{ \frac{1}{n} S_n \geq x \right\} \leq e^{-nI(x)},$$

$$\forall x \leq \mu : P \left\{ \frac{1}{n} S_n \leq x \right\} \leq e^{-nI(x)}.$$

Insbesondere konvergieren also die betrachteten Wahrscheinlichkeiten für $I(x) > 0$ mindestens exponentiell gegen Null, und sie sind für $I(x) = \infty$ gleich Null. Historisch gesehen war die Chernoff-Schranke die Verschärfung der asymptotischen oberen Schranke in dem vielleicht ersten Ergebnis bezüglich großer Abweichungen, dem berühmten Satz von Cramér, den wir in der für die Theorie großer Abweichungen typischen Form angeben.

Satz 2.2 (Cramér) Sei $M(\vartheta) < \infty$ für alle $\vartheta \in \mathbf{R}$. Dann gilt für alle abgeschlossenen Mengen $F \subseteq \mathbf{R}$

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P \left\{ \frac{1}{n} S_n \in F \right\} \leq - \inf_{x \in F} I(x)$$

und für alle offenen Mengen $G \subseteq \mathbf{R}$

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P \left\{ \frac{1}{n} S_n \in G \right\} \geq - \inf_{x \in G} I(x).$$

Der Satz von Cramér gilt insbesondere für alle Intervalle auf den reellen Zahlen. Eine Besonderheit des reellen eindimensionalen Falls ist, daß die obere Schranke auch für offene Mengen gilt. Die Kernaussage des Satzes besteht darin, daß asymptotische Schranken für die Wahrscheinlichkeit, daß das Mittel von unabhängigen identisch verteilten reellen Zufallsvariablen in einer bestimmten Menge enthalten ist, durch den minimalen Wert bestimmt ist, den die Ratenfunktion I auf dieser Menge annimmt. Die Ratenfunktion ist für diesen Fall die Cramér-Transformierte, im allgemeinen Fall werden wir auch andere Ratenfunktionen kennenlernen. Es wird also unmittelbar deutlich, daß die Minimierung von Ratenfunktionen eine wesentliche Rolle spielt, wobei für nichttriviale Beispiele die Ratenfunktion häufig durch eine komplizierte Integralgleichung, oft nicht einmal in geschlossener Form, gegeben ist. Dies ist gerade der Hauptgrund für die Schwierigkeit bei der Anwendung der Theorie auf komplexe Systeme.

Beispiel 2.1 (Ratenfunktion der Exponentialverteilung) Seien die Zufallsvariablen X_i unabhängig und identisch exponentiell verteilt mit Parameter $\lambda > 0$. Dann erhält man die verallgemeinerte Laplace-Transformierte oder momenterzeugende Funktion

$$M(\vartheta) = E [e^{\vartheta X_i}] = \int_0^{\infty} e^{\vartheta x} \lambda e^{-\lambda x} dx = \lambda \int_0^{\infty} e^{(\vartheta - \lambda)x} dx = \begin{cases} \frac{\lambda}{\lambda - \vartheta}, & \text{falls } \vartheta < \lambda, \\ +\infty, & \text{falls } \vartheta \geq \lambda \end{cases}$$

und die Ratenfunktion

$$I(x) = \sup_{\vartheta \in \mathbf{R}} [\vartheta x - \ln M(\vartheta)] = \sup_{\vartheta < \lambda} \left[\vartheta x - \ln \frac{\lambda}{\lambda - \vartheta} \right] = \sup_{\vartheta < \lambda} \left[\vartheta x + \ln \frac{\lambda - \vartheta}{\lambda} \right].$$

Man berechnet das Supremum durch Nullsetzen der Ableitung nach ϑ :

$$\left[\vartheta x + \ln \frac{\lambda - \vartheta}{\lambda} \right]' = x - \frac{1}{\lambda - \vartheta} \stackrel{!}{=} 0 \quad \Rightarrow \quad \vartheta = \lambda - \frac{1}{x}.$$

Nach Einsetzen erhält man also die Ratenfunktion

$$I(x) = \begin{cases} \lambda x - 1 - \ln(\lambda x), & \text{falls } x > 0 \\ +\infty, & \text{falls } x \leq 0. \end{cases}$$

Beispiel 2.2 (Ratenfunktion der Standard-Normalverteilung) Seien die Zufallsvariablen X_i unabhängig und identisch normalverteilt mit Erwartungswert 0 und Varianz 1. Dann erhält man für die momenterzeugende Funktion und die Ratenfunktion

$$M(\vartheta) = E[e^{\vartheta X_i}] = e^{\vartheta^2/2}, \quad I(x) = \sup_{\vartheta \in \mathbb{R}} [\vartheta x - \ln M(\vartheta)] = \sup_{\vartheta \in \mathbb{R}} \left[\vartheta x - \frac{\vartheta^2}{2} \right],$$

Nullsetzen der Ableitung nach ϑ ergibt

$$\left[\vartheta x - \frac{\vartheta^2}{2} \right]' = x - \vartheta \stackrel{!}{=} 0 \quad \Rightarrow \vartheta = x,$$

und man erhält die Ratenfunktion

$$I(x) = \frac{x^2}{2}.$$

Zum Beweis der unteren Schranke

Beim Beweis von unteren Schranken für große Abweichungen und insbesondere auch beim Beweis der unteren Schranke des Satzes von Cramér wird die Technik des Maßwechsels verwendet, die gerade auch bei der Simulation seltener Ereignisse mittels Importance Sampling eine zentrale Bedeutung hat. Daher wollen wir hier die untere Schranke im Satz von Cramér für den Spezialfall reeller Intervalle vorführen, um den engen Bezug der Theorie großer Abweichungen zur Simulation seltener Ereignisse zu verdeutlichen. Den Beweis für beliebige offene Mengen, auf den wir hier verzichten, da es uns nur auf den Bezug zum Importance Sampling ankommt, findet man etwa in [DS89, DZ98]. Wir zeigen im folgenden also

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P \left\{ \frac{1}{n} S_n \in (a, b) \right\} \geq - \inf_{x \in (a, b)} I(x).$$

Sei $y \in (a, b)$ und $\delta > 0$ so, daß $(y - \delta, y + \delta) \subseteq (a, b)$. Es genügt dann,

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P \left\{ \frac{1}{n} S_n \in (y - \delta, y + \delta) \right\} \geq -I(y),$$

zu zeigen, denn

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P \left\{ \frac{1}{n} S_n \in (a, b) \right\} \geq \liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P \left\{ \frac{1}{n} S_n \in (y - \delta, y + \delta) \right\}.$$

Es bezeichne nun P_X das Wahrscheinlichkeitsmaß der unabhängigen identisch verteilten Zufallsvariablen X_i , deren Mittelwert $\frac{1}{n}S_n$ betrachtet wird.

Zunächst stellen wir fest, daß die untere Schranke für $\mu \in (a, b)$ direkt aus dem Gesetz der großen Zahlen und $I(\mu) = 0$ folgt. Damit verbleiben die Fälle $\mu \leq a$ und $\mu \geq b$. Für $\mu \leq a$ muß offensichtlich $y > \mu$ gelten. Für $\mu \geq b$ gilt analog $y < \mu$. Alle folgenden Berechnungen für $\mu \leq a, y > \mu$ ergeben sich analog für $\mu \geq b, y < \mu$ durch Betrachtung der Zufallsvariablen $-X_i$, denn

$$P \left\{ \frac{1}{n}S_n \in (a, b) \right\} = P \left\{ -\frac{1}{n}S_n \in (-b, -a) \right\}.$$

Somit reicht es aus, $y > \mu$ zu betrachten. Sei also OBdA $y > \mu$ und $\vartheta \in \mathbb{R}$ so, daß $I(y) = \vartheta y - \ln M(\vartheta)$.

Wir definieren nun eine Zufallsvariable X_ϑ mit Verteilungsfunktion

$$F_{X_\vartheta}(z) = \frac{1}{M(\vartheta)} \int_{-\infty}^z e^{\vartheta x} dP_X(x), \quad x \in \mathbb{R}. \quad (2.7)$$

Hat P_X bzw. haben die X_i eine Dichte f_X , so hat dann also X_ϑ die Dichte

$$f_{X_\vartheta}(x) = \frac{1}{M(\vartheta)} e^{\vartheta x} f_X(x), \quad x \in \mathbb{R}. \quad (2.8)$$

Für den Erwartungswert folgt

$$E[X_\vartheta] = \frac{1}{M(\vartheta)} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{\vartheta x} f_X(x) dx = \frac{1}{M(\vartheta)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{d\vartheta} e^{\vartheta x} f_X(x) dx = \frac{M'(\vartheta)}{M(\vartheta)} = y.$$

Nach dem Gesetz der großen Zahlen gilt für alle $\epsilon > 0$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\left| \frac{x_1 + \dots + x_n}{n} - y \right| < \epsilon} dP_{X_\vartheta}(x_1) dP_{X_\vartheta}(x_2) \cdots dP_{X_\vartheta}(x_n) = 1.$$

Für $\epsilon < \delta$ erhalten wir nun

$$\begin{aligned}
& P \left\{ \frac{1}{n} S_n \in (y - \delta, y + \delta) \right\} \\
&= \int_{\left| \frac{x_1 + \dots + x_n}{n} - y \right| < \delta} dP_X(x_1) dP_X(x_2) \cdots dP_X(x_n) \\
&\geq \int_{\left| \frac{x_1 + \dots + x_n}{n} - y \right| < \epsilon} dP_X(x_1) dP_X(x_2) \cdots dP_X(x_n) \\
&\geq e^{(-ny - n\epsilon)} \int_{\left| \frac{x_1 + \dots + x_n}{n} - y \right| < \epsilon} e^{\vartheta(x_1 + \dots + x_n)} dP_X(x_1) dP_X(x_2) \cdots dP_X(x_n) \\
&\geq e^{(-ny - n\epsilon)} M(\vartheta)^n \int_{\left| \frac{x_1 + \dots + x_n}{n} - y \right| < \epsilon} e^{\vartheta(x_1 + \dots + x_n)} dP_{X_\vartheta}(x_1) dP_{X_\vartheta}(x_2) \cdots dP_{X_\vartheta}(x_n).
\end{aligned}$$

Also gilt

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P \left\{ \frac{1}{n} S_n \in (y - \delta, y + \delta) \right\} \geq (-y - \epsilon)\vartheta + \ln M(\vartheta) = -I(y) - \vartheta\epsilon.$$

Da ϵ beliebig klein ist, folgt die untere Schranke.

Beim Beweis wurde eine Zufallsvariable X_ϑ mit Verteilungsfunktion F_{X_ϑ} definiert. Der wesentliche Grund dafür ist, die Wahrscheinlichkeitsmasse der Originalzufallsvariablen so zu verschieben, daß sie einen spezifizierten Erwartungswert beim dominierenden Punkt der betrachteten Menge haben. Man spricht dabei von einem Maßwechsel, und die Verteilung und im Fall der Existenz auch die Dichte werden die getwistete oder getiltete Verteilung oder Dichte genannt (*twisted/tilted distribution/density*). Ein solcher Maßwechsel, ein Wechsel des Wahrscheinlichkeitsmaßes, ist gerade die Grundlage des Importance Sampling, und bei der Anwendung des Verfahren stellt das Auffinden eines geeigneten Maßwechsels, der die Varianz resultierender Schätzer reduziert, die Hauptschwierigkeit dar. Der spezielle hier im Beweis der unteren Schranke des Satzes von Cramér verwendete Maßwechsel, also die Transformation der Verteilungsfunktion bzw. der Dichte gemäß (2.7) und (2.8) wird exponentieller Maßwechsel (*exponential change of measure*) genannt und hat beim Importance Sampling große Bedeutung erlangt. Wir gehen daher darauf in Abschnitt 3.3.5.2 nochmals detaillierter ein.

Die Technik des Maßwechsels, und zwar nicht nur des exponentiellen Maßwechsels, kann häufig zum Beweis unterer Schranken für große Abweichungen eingesetzt werden, sie ist

also nicht auf den hier vorgeführten einfachen Fall beschränkt. Ebenso ist der exponentielle Maßwechsel beim Importance Sampling nur eine von vielen möglichen Ausprägungen. Näheres zu Maßwechseln im Rahmen von Beweisen unterer Schranken für große Abweichungen behandeln wir hier nicht. Es sei einmal mehr auf die einschlägige Literatur, insbesondere auf [Buc90, DS89, DZ98, SW95] hingewiesen. Im Kontext des Importance Sampling werden wir Maßwechsel selbstverständlich intensiv untersuchen und diskutieren.

2.2 Allgemeine Prinzipien

Wir haben bereits mehrfach von einem Prinzip großer Abweichungen gesprochen, ohne diesen Begriff allgemein formal zu definieren. Eine axiomatische Einführung in die Theorie stellt diese Definition typischerweise an den Anfang, ist damit jedoch wenig anschaulich. Nachdem wir im vorherigen Abschnitt den Satz von Cramér–Chernoff hergeleitet und den Satz von Cramér angegeben haben, wollen wir nun zeigen, wie die dort vorgestellten Methoden und Begriffe in einem allgemeineren Rahmen aussehen. Desweiteren geben wir einige nützliche allgemeine Ergebnisse an.

Wir betrachten eine Menge \mathcal{X} , die mit einer Metrik ausgestattet sei.

Definition 2.1 (Ratenfunktion) Eine Funktion $I : \mathcal{X} \rightarrow [0, \infty]$ auf der Menge \mathcal{X} heißt Ratenfunktion, wenn sie halbstetig nach unten ist, d.h. für alle konvergenten Folgen y_1, y_2, \dots mit Grenzwert y gilt

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} I(y_n) \geq I(y).$$

Dies ist äquivalent dazu, daß für alle $a \in \mathbb{R}$ die Niveaumenge $\{x \in \mathcal{X} : I(x) \leq a\}$ abgeschlossen ist. Ist diese Menge für alle $a \in \mathbb{R}$ auch kompakt, dann nennt man I eine *gute Ratenfunktion*.

Bemerkung: Man kann leicht zeigen, daß die Cramér–Transformierte eine solche gute Ratenfunktion ist.

Häufig wird in der Literatur der Begriff der Ratenfunktion nur für gute Ratenfunktionen verwendet. Wir wollen uns dem anschließen und damit nun formale Definitionen des Prinzips großer Abweichungen geben. Wir beginnen mit dem Spezialfall für Zufallsvektoren.

Definition 2.2 (Prinzip der großen Abweichungen für Zufallsvektoren) Seien Z_1, Z_2, \dots Zufallsvektoren mit Werten in \mathbb{R}^d , $d \in \mathbb{N}^+$ und I eine Ratenfunktion auf \mathbb{R}^d . Die Folge (Z_n) erfüllt ein Prinzip großer Abweichungen, genau dann, wenn für alle abgeschlossenen Mengen $F \subseteq \mathbb{R}^d$

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P\{Z_n \in F\} \leq - \inf_{x \in F} I(x),$$

und für alle offenen Mengen $G \subseteq \mathbb{R}^d$

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P\{Z_n \in G\} \geq - \inf_{x \in G} I(x).$$

Mit den Bezeichnungen aus dem vorherigen Abschnitt besagt der Satz von Cramér somit, daß die Folge $(\frac{1}{n}S_n)$ ein Prinzip großer Abweichungen mit der Cramér–Transformierten als Ratenfunktion erfüllt. Gelegentlich läßt man die „Folgenklammern“ auch weg. Ebenso ist es verbreitet, Folgen in geschweiften Klammern zu notieren.

Definition 2.3 (Prinzip der großen Abweichungen) Sei $I : \mathcal{X} \rightarrow [0, \infty]$ eine Ratenfunktion auf \mathcal{X} . Eine Folge (P_n) von Wahrscheinlichkeitsmaßen erfüllt ein Prinzip großer Abweichungen mit Ratenfunktion I , genau dann, wenn für alle abgeschlossenen Mengen $F \subseteq \mathcal{X}$

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P_n\{F\} \leq - \inf_{x \in F} I(x),$$

und für alle offenen Mengen $G \subseteq \mathcal{X}$

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P_n\{G\} \geq - \inf_{x \in G} I(x).$$

Mit $P_n\{A\} = P\{Z_n \in A\}$ erhält man aus der Definition für Wahrscheinlichkeitsmaße eine Definition für allgemeine Zufallsgrößen und sagt dann auch, die Folge (Z_n) erfüllt ein Prinzip großer Abweichungen mit Ratenfunktion I . Mit $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$ erhält man die Definition für Zufallsvektoren.

Wir geben nun zunächst eines der berühmtesten Resultate zu großen Abweichungen an, das Integrallemma von Varadhan.

Lemma 2.1 (Varadhan) Falls eine Folge (Z_n) von Zufallsgrößen mit Werten in \mathcal{X} oder – äquivalent – die Folge (P_n) der assoziierten Wahrscheinlichkeitsmaße auf $(\mathcal{X}, \mathcal{A})$ ein Prinzip großer Abweichungen mit einer Ratenfunktion I erfüllt, dann gilt für alle beschränkten stetigen Funktionen g auf \mathcal{X}

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln E [e^{ng(Z_n)}] = \sup_{x \in \mathcal{X}} [g(x) - I(x)].$$

Die Definition des Erwartungswertes

$$E [e^{ng(Z_n)}] = \int e^{ng(x)} dP_n(x)$$

erklärt die Bezeichnung „Integrallemma“.

In vielen Anwendungen werden dynamische Vorgänge als stochastische Prozesse, Folgen oder Familien (X_n) von Zufallsvariablen, modelliert. Dabei interessieren oft nur gewisse Teilmengen der Eigenschaften des Prozesses oder bestimmte Funktionen f der Werte

der X_n . Zudem ist es teilweise leichter, ein Prinzip großer Abweichungen für eine Folge (Y_n) mit $Y_n = f(X_n)$ herzuleiten als für die ursprüngliche Folge (X_n) . Es ist also erstrebenswert, Funktionen von Zufallsvariablen, die wiederum Zufallsvariablen sind, zu untersuchen. Es zeigt sich, daß ein Prinzip großer Abweichungen nach Anwendung stetiger Funktionen erhalten bleibt. Dies ist ein elementares Ergebnis der Theorie und soll nun formal angegeben werden.

Sei (P_n) eine Folge von Wahrscheinlichkeitsmaßen auf $(\mathcal{X}, \mathcal{A})$, $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ eine Funktion von \mathcal{X} in eine mit einer Metrik ausgestatteten Menge \mathcal{Y} und \mathcal{B} eine σ -Algebra in \mathcal{Y} . Für alle $n \in \mathbb{N}^+$ induzieren f und P_n ein Wahrscheinlichkeitsmaß Q_n auf $(\mathcal{Y}, \mathcal{B})$, das gegeben ist durch

$$Q_n\{A\} = P_n\{f^{-1}(A)\}, \quad A \subseteq \mathcal{B} \quad \text{mit } f^{-1}(A) = \{x \in \mathcal{X} : f(x) \in A\}.$$

Damit gilt

Satz 2.3 (Kontraktionsprinzip) Falls eine Folge (Z_n) von Zufallsgrößen mit Werten in \mathcal{X} oder – äquivalent – die Folge (P_n) der assoziierten Wahrscheinlichkeitsmaße auf \mathcal{A} ein Prinzip großer Abweichungen mit einer Ratenfunktion I erfüllt und die Funktion $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ stetig ist, dann erfüllen die Folge $(f(Z_n))$ und die Folge (Q_n) der assoziierten Wahrscheinlichkeitsmaße auf \mathcal{B} ein Prinzip großer Abweichungen mit Ratenfunktion

$$J(y) = \begin{cases} \inf_{x \in \mathcal{X} : f(x)=y} I(x), & \text{falls } f^{-1}(\{y\}) \neq \emptyset, \\ \infty, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Die Bezeichnung „Kontraktionsprinzip“ läßt sich damit erklären, daß typischerweise f eine Kontraktion in dem Sinne ist, daß Details vernachlässigt werden, indem vielen verschiedenen Werten von x der gleiche Funktionswert $f(x)$ zugeordnet wird. Es hat weitreichende Anwendungsfelder, sowohl in der Weiterentwicklung der Theorie als auch in der praktischen Berechnung von Ergebnissen für große Abweichungen. Eine Verallgemeinerung besteht darin, daß eine Folge (f_n) stetiger Funktionen von \mathcal{X} nach \mathcal{Y} gegeben ist, die auf kompakten Mengen gleichmäßig gegen eine stetige Funktion f konvergiert. Das Kontraktionsprinzip dient in der Regel dazu, ein Prinzip großer Abweichungen in einen einfacheren Raum zu transformieren, es kann aber auch im umgekehrten Fall nützlich sein. So kann beispielsweise ein Prinzip für unendlichdimensionale Räume hergeleitet werden, indem das Prinzip für jede endlichdimensionale Projektion in Verbindung mit Kompaktheitseigenschaften gezeigt wird. Man nennt dies die Methode der projektiven Grenzwerte. Wir gehen darauf nicht weiter ein, Näheres dazu findet man in [DS89, DZ98].

Beispiel 2.3 Wir betrachten die Summe $S_n = X_1 + \dots + X_n$ von n unabhängigen identisch normalverteilten Zufallsvariablen X_1, \dots, X_n mit Erwartungswert $\mu = 0$ und Varianz $\sigma^2 = 1$ und untersuchen das Grenzverhalten von $P\{\frac{1}{n^2}S_n^2 \in (a, b)\}$, $a, b \in \mathbb{R}$, $a < b$. Wir wissen, daß $\frac{1}{n}S_n$ ein Prinzip großer Abweichungen mit Ratenfunktion $I(x) = \frac{x^2}{2}$ erfüllt. Nach dem Kontraktionsprinzip mit $f(x) = x^2$ erfüllt dann $\frac{1}{n^2}S_n^2$ ein Prinzip großer

Abweichungen mit der Ratenfunktion

$$J(y) = \inf_{x:x^2=y} \frac{x^2}{2} = \frac{y}{2}, \quad y \geq 0,$$

also

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P \left\{ \frac{1}{n^2} S_n^2 \in (a, b) \right\} = - \inf_{y \in (a, b)} \frac{y}{2} = -\frac{a}{2}.$$

2.3 Empirische Verteilungen – Zusammenhang mit Entropie

Nachdem wir nun in sehr abstraktem Rahmen einige allgemeine Prinzipien und Sätze vorgestellt haben, wollen wir wieder konkreter werden und einen Zusammenhang zwischen der Ratenfunktion großer Abweichungen für empirische Verteilungen und dem Entropiebegriff herstellen. Bei der Untersuchung empirischer Verteilungen von Zufallsvariablen und -vektoren oder stochastischen Prozessen ist es häufig möglich, ein Prinzip großer Abweichungen unter schwächeren und weniger technischen Voraussetzungen als in der allgemeinen Theorie zu finden, in der üblicherweise obere Schranken für abgeschlossene Mengen und untere Schranken für offene Mengen resultieren. Stattdessen erhalten wir hier Konvergenzraten in einem Raum von Wahrscheinlichkeitsmaßen[†].

Das Konzept der Entropie als ein Maß für den Informationsgehalt zufälliger Größen ist lange bekannt und wird in verschiedenen Disziplinen angewandt. Das Prinzip maximaler und minimaler Entropien [SJ80] hat sich bei der Untersuchung zahlreicher Probleme aus verschiedenen Anwendungsbereichen als sehr nützlich erwiesen, insbesondere auch bei der Untersuchung von Warteschlangensystemen (siehe z.B. [Str89, San98]). Auch bei der Untersuchung seltener Ereignisse zeigt sich die Bedeutung von Entropien. Wir haben bereits darauf hingewiesen, daß die sogenannte Cross-Entropy-Methode [Rub97, LR00, Kro02] im Bereich der Simulation seltener Ereignisse sehr populär ist. In der Theorie großer Abweichungen spielt die relative Entropie (*Cross-Entropy*) bei der Untersuchung empirischer Verteilungen in vielen Fällen die Rolle der Ratenfunktion. Diesen Zusammenhang beschreibt der bedeutende Satz von Sanov, der in diesem Abschnitt angegeben werden soll. An späterer Stelle werden wir dies nutzen, um eine neue Sicht auf die erwähnte Cross-Entropy-Methode aufzuzeigen.

Die Aussagen der Sätze von Chernoff und Cramér beantworten die Frage, wie oft ein seltenes Ereignis passiert. Der Satz von Sanov gibt darüberhinaus Hinweise darauf, auf welche Weise ein seltenes Ereignis passiert, wenn es eintritt. Es zeigt sich, daß oft mit überwältigender Wahrscheinlichkeit seltene Ereignisse auf ganz bestimmten Pfaden, manchmal auf

[†]Für die Definition offener und abgeschlossener Mengen und von Konvergenz ist eine Metrik Voraussetzung. Es gibt zahlreiche gängige Metriken auf Räumen von Wahrscheinlichkeitsmaßen, die wir im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht diskutieren wollen, als ein Beispiel sei die Prohorov-Metrik genannt. Das Wissen um die Existenz solcher Metriken reicht hier aus.

einem einzigen Pfad[‡], eintreten. Die Untersuchung solcher Pfade ist gerade im Hinblick auf die Simulation von großer Bedeutung. Man betrachte etwa das Ereignis, daß bei 10000-fachem Wurf einer fairen Münze genau 8000 Treffer beobachtet werden. Es gibt zwar sehr viele mögliche Wege, wie dies zustandekommen kann, aber der wahrscheinlichste Weg ist, daß sich während des gesamten Experimentes die Münze verhält als habe sie eine Trefferwahrscheinlichkeit von 0.8, d.h. man beobachtet ungefähr 80 Treffer in den ersten 100 Würfeln, ungefähr 80 Treffer in den nächsten 100 Würfeln und so fort. Eine Präzisierung dieser Tatsache ist auf verschiedene Arten möglich, eine dieser Arten ist gerade der Satz von Sanov.

Definition 2.4 (absolut stetig, dominierend) Seien μ, ν zwei Maße auf einem Meßraum (Ω, \mathcal{A}) . Das Maß ν heißt absolut stetig bezüglich μ , kurz geschrieben als $\nu \ll \mu$, genau dann, wenn

$$\forall A \in \mathcal{A} : \mu(A) = 0 \Rightarrow \nu(A) = 0.$$

Man sagt auch, μ dominiert ν .

Für zwei Maße μ, ν mit $\nu \ll \mu$ existiert nach dem Satz von Radon–Nikodym (vgl. [Bau92]) die sogenannte Radon–Nikodym–Derivierte $\frac{d\nu}{d\mu}$. Insbesondere existiert für zwei Wahrscheinlichkeitsmaße P und Q auf (Ω, \mathcal{A}) mit $P \ll Q$ die Radon–Nikodym–Derivierte $\frac{dP}{dQ}$ und wird Likelihood–Quotient[§] (*Likelihood Ratio*) von P und Q genannt. Mit Hilfe des Likelihood–Quotienten geben wir nun folgende

Definition 2.5 (Relative Entropie, Cross–Entropy) Für zwei Wahrscheinlichkeitsmaße P und Q auf einem Meßraum (Ω, \mathcal{A}) heißt

$$H(P|Q) := \begin{cases} \int \ln \frac{dP}{dQ} dP, & \text{falls } P \ll Q, \\ \infty, & \text{sonst,} \end{cases}$$

die relative Entropie (*Cross–Entropy*) von P bezüglich Q .

Die relative Entropie wurde von Kullback und Leibler [KL51] als Maß für den Abstand – oder eigentlich besser die Abweichung (*divergence*) – zwischen Wahrscheinlichkeitsverteilungen vorgeschlagen und wird oft auch als Kullback–Leibler–Abstand bezeichnet. Man zeigt leicht als Eigenschaften der relativen Entropie die Gibbs–Ungleichung $H(P|Q) \geq 0$ und $H(P|Q) = 0 \Leftrightarrow P = Q$. Es gilt jedoch im allgemeinen, daß dieser „Abstand“ nicht symmetrisch ist, also $H(P|Q) \neq H(Q|P)$. Die relative Entropie ist also keine Metrik auf der Menge der Wahrscheinlichkeitsverteilungen.

[‡]In der englischsprachigen Literatur wird häufig der Begriff *most likely path* verwendet.

[§]Dieser Likelihood–Quotient spielt auch beim Importance–Sampling–Verfahren zur Simulation seltener Ereignisse eine zentrale Rolle. Man sieht also erneut den engen Bezug zwischen der Simulation seltener Ereignisse und den Grundlagen der Theorie großer Abweichungen.

Zwar haben Kullback und Leibler den Begriff der relativen Entropie in die Informationstheorie eingeführt, in der Physik war diese Größe jedoch bereits früher bekannt. Ellis [Ell99] weist darauf hin, daß bereits Boltzmann im Jahre 1877 im Rahmen einer probabilistischen Interpretation des zweiten Gesetzes der Thermodynamik die relative Entropie verwendet hat, um das asymptotische Verhalten von Wahrscheinlichkeiten auszudrücken. Ellis spricht von der ersten Berechnung von Wahrscheinlichkeiten großer Abweichungen in der Wissenschaft und bezeichnet dies sehr pathetisch als “revolutionary moment in human culture during which both statistical mechanics and the theory of large deviations were born“. Auch Gibbs hat die relative Entropie in der Physik angewandt. Die Berechnungen von Boltzmann werden dann, so Ellis, im Satz von Sanov verallgemeinert zum Prinzip großer Abweichungen für Folgen empirischer Verteilungen unabhängiger identisch verteilter Zufallsvariablen.

Man sieht leicht, daß man die relative Entropie auch als den Erwartungswert des logarithmierten Likelihood-Quotienten bezüglich P interpretieren kann. Insbesondere ist die relative Entropie für zwei diskrete Verteilungen p und q definiert durch

$$H(p|q) := \sum_{x \in \Omega} p(x) \ln \frac{p(x)}{q(x)} = E_p \left[\ln \frac{p(X)}{q(X)} \right],$$

und die relative Entropie zweier Dichten f und g ist definiert durch

$$H(f|g) := \int_{\Omega} f(x) \ln \frac{f(x)}{g(x)} dx = E_f \left[\ln \frac{f(X)}{g(X)} \right].$$

Mit Hilfe der relativen Entropie können wir nun Aussagen über empirische Verteilungen treffen und insbesondere den Satz von Sanov formulieren.

Gegeben sei ein Wahrscheinlichkeitsraum (Ω, \mathcal{A}, P) und eine Folge (X_n) unabhängiger identisch verteilter reeller Zufallsvektoren mit Verteilung $\mu = P_{X_i}$. Es bezeichne $\mathcal{M}_1(\mathbb{R}^d)$ die Menge aller Wahrscheinlichkeitsmaße auf der Borelschen σ -Algebra auf \mathbb{R}^d , und sei $L_n : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$ mit

$$L_n := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \delta_{X_i}$$

die empirische Verteilung, wobei δ die Dirac-Funktion bezeichnet. Es ist klar, daß die empirische Verteilung eine zufällige Verteilung ist, da sie von den Zufallsvariablen X_1, \dots, X_n abhängt. Ein Kandidat für eine Ratenfunktion großer Abweichungen im Bereich von Verteilungen ist gerade die relative Entropie.

Satz 2.4 (Sanov für reelle Zufallsvektoren)

Für alle abgeschlossenen Mengen $F \subseteq \mathcal{M}_1(\mathbb{R}^d)$ gilt

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P\{L_n \in F\} \leq - \inf_{\nu \in F} [H(\nu|\mu)],$$

und für alle offenen Mengen $G \subseteq \mathcal{M}_1(\mathbb{R}^d)$ gilt

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P\{L_n \in G\} \geq - \inf_{\nu \in G} [H(\nu|\mu)].$$

Das bedeutet, die empirische Verteilung erfüllt ein Prinzip der großen Abweichungen mit der relativen Entropie als Ratenfunktion. Somit ist auch klar, daß der Satz von Sanov Aussagen über die Art, wie seltene Ereignisse passieren, gibt, in dem Sinne, daß er eine Aussage über empirische Verteilungen macht.

Wir stellen in Abschnitt 5.4.3 einen direkten Bezug des Satzes von Sanov zur oben bereits erwähnten Cross-Entropy-Methode her, woraus sich eine neue Sicht oder Interpretation der Cross-Entropy-Methode ergibt. Sie kann nämlich gerade auch angesehen werden als adaptives Verfahren zur Bestimmung obiger Ratenfunktion.

2.4 Diskrete Markovketten mit endlichem Zustandsraum

Wir betrachten in diesem Abschnitt große Abweichungen für Markovketten, genauer für Summen von Funktionen auf Markovketten und für empirische Verteilungen von Markovketten, jeweils für den diskreten endlichen Fall. Dazu ist es zunächst erforderlich, Erweiterungen des Satzes von Cramér vorzunehmen. Aus der Annahme von unabhängigen identisch verteilten Zufallsvariablen X_1, X_2, \dots folgt, daß die momenterzeugende Funktion des Mittelwertes sich aus der momenterzeugenden Funktion der X_i ergibt:

$$M_{S_n/n}(\vartheta) = E [e^{\vartheta S_n/n}] = E [e^{\vartheta(X_1 + \dots + X_n)/n}] = (E [e^{\vartheta X_i/n}])^n = \left(M_{X_i} \left(\frac{\vartheta}{n} \right) \right)^n,$$

also

$$\ln M_{S_n/n}(\vartheta) = n \ln M_{X_i} \left(\frac{\vartheta}{n} \right).$$

Eine genauere Betrachtung der Beweise für die obere und untere Schranke zeigt (siehe [Buc90, DS89, DZ98, SW95]), daß Annahmen über das Grenzverhalten der logarithmierten momenterzeugenden Funktionen ausreichen. Dies ist die Grundlage für den Satz von Gärtner–Ellis, den wir ohne Beweis angeben, und mit dessen Hilfe wir später die Ratenfunktion für die Summe von Funktionen auf Markovketten herleiten.

Es gibt einige verschiedene Wege zur Herleitung von Prinzipien großer Abweichungen für Markovketten, die sich alle als ausgesprochen lang und sehr technisch erweisen. Der Satz von Gärtner–Ellis stellt dabei noch eine der „leichtesten“ Möglichkeiten dar. Zudem ist der Satz auch für viele weitere fortgeschrittene Themen im Bereich großer Abweichungen eine wichtige Grundlage. Wir wollen ihn daher zumindest angeben, auch wenn die erwähnten weiteren Themen im Rahmen dieser Arbeit nicht behandelt werden können und die Gründe für viele Voraussetzungen und Annahmen erst bei genauem Studium der

Beweise deutlich werden. Dazu sei erneut auf die Bücher [Buc90, DS89, DZ98, SW95] verwiesen.

Es ist an dieser Stelle unvermeidlich, einige technische Annahmen und Definitionen zu machen, die die Voraussetzungen für den Satz von Gärtner–Ellis bilden. Diese Annahmen sind notwendig, um den Satz vollständig und korrekt allgemein zu formulieren. Auf intuitive Veranschaulichungen muß dabei verzichtet werden. Es reicht jedoch aus, zu wissen, daß für unsere praktischen Anwendungen diese Annahmen erfüllt sind, insbesondere im Hinblick auf die Untersuchung von Markovketten.

Gegeben sei eine Folge Y_1, Y_2, \dots von Zufallsvariablen ohne (direkte) Annahmen über Abhängigkeiten. Sei für $\vartheta \in \mathbb{R}$

$$\phi_n(\vartheta) := \frac{1}{n} \ln E [e^{\vartheta Y_n}].$$

Annahme 2.1 Für alle $\vartheta \in \mathbb{R}$ existiert

$$\phi(\vartheta) := \lim_{n \rightarrow \infty} \phi_n(\vartheta),$$

wobei ∞ als Grenzwert und als Element der Folge $(\phi_n(\vartheta))$ erlaubt ist, also der Grenzwert existiert und ist für alle $\vartheta \in \mathbb{R}$ definiert.

Wir betrachten nun die Menge $D_\phi := \{\vartheta \in \mathbb{R} : \phi(\vartheta) < \infty\}$. Diese Menge ist konvex, und damit ist $\phi(\vartheta)$ als Grenzwert konvexer Funktionen auf einer konvexen Menge ebenfalls konvex.

Annahme 2.2 ϕ ist differenzierbar im Inneren von D_ϕ .

Wir definieren nun

$$I(x) := \sup_{\vartheta \in \mathbb{R}} [\vartheta x - \phi(\vartheta)], \quad \phi'(D_\phi) := \{\phi'(\vartheta) : \vartheta \in D_\phi\}$$

und formulieren mit den eingeführten Bezeichnungen den

Satz 2.5 (Gärtner–Ellis für reelle Intervalle) Gegeben seien $a, b \in \mathbb{R}$ mit $a < b$. Falls die Annahme 2.1 erfüllt ist und $[a, b] \cap D_I \neq \emptyset$, dann gilt

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P \left\{ \frac{1}{n} Y_n \in [a, b] \right\} \leq - \inf_{x \in [a, b]} I(x).$$

Falls die Annahmen 2.1 und 2.2 erfüllt sind und $(a, b) \subseteq \phi'(D_\phi)$, dann gilt

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P \left\{ \frac{1}{n} Y_n \in (a, b) \right\} \geq - \inf_{x \in (a, b)} I(x).$$

Im Hinblick auf mehrdimensionale Zustandsräume ist eine Verallgemeinerung auf reelle Zufallsvektoren wünschenswert. Eine solche Verallgemeinerung existiert auch für den Satz

von Cramér für Summen von unabhängigen identisch verteilten Zufallsvektoren, an entsprechender Stelle haben wir auf die explizite Angabe verzichtet, da die Verallgemeinerung des Satzes von Gärtner–Ellis diesen Fall abdeckt und von größerer praktischer Bedeutung ist. Die Formulierung dieser Verallgemeinerung ist nahezu identisch zum eindimensionalen Fall für Intervalle, es müssen lediglich die Voraussetzungen und Annahmen angepaßt werden, und an die Stelle von reellen Intervallen treten offene bzw. abgeschlossene Mengen.

Sei Y_1, Y_2, \dots eine Folge von d -dimensionalen reellen Zufallsvektoren und für $\vartheta \in \mathbb{R}^d$

$$\phi_n(\vartheta) := \frac{1}{n} \ln E [e^{\langle \vartheta, Y_n \rangle}],$$

wobei $\langle \cdot, \cdot \rangle$ das übliche Skalarprodukt für Vektoren bezeichnet. Zunächst machen wir eine zur Annahme 2.1 korrespondierende Annahme mit einem Zusatz. Analog zum eindimensionalen Fall sei $D_\phi := \{\vartheta \in \mathbb{R}^d : \phi(\vartheta) < \infty\}$.

Annahme 2.3 Der Grenzwert

$$\phi(\vartheta) := \lim_{n \rightarrow \infty} \phi_n(\vartheta)$$

existiert für alle $\vartheta \in \mathbb{R}^d$, wobei ∞ als Grenzwert und als Element der Folge $(\phi_n(\vartheta))$ erlaubt ist. Außerdem ist die Funktion $\phi(\vartheta)$ halbstetig nach unten, d.h. für jede gegen $\vartheta \in D_\phi$ konvergierende Folge (ϑ_n) gilt $\liminf_{n \rightarrow \infty} \phi(\vartheta_n) \geq \phi(\vartheta)$.

Wir definieren $I : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ durch

$$I(x) := \sup_{\vartheta \in \mathbb{R}^d} [\langle \vartheta, x \rangle - \phi(\vartheta)].$$

Es bezeichne nun ∂D_ϕ den Rand von D_ϕ und ∇ den Nabla-Operator, also den vektorwertigen Differentialoperator für den Gradienten.

Annahme 2.4 $\lim_{\vartheta \rightarrow \cdot \in \partial D_\phi} |\nabla \phi(\vartheta)| = \infty$.

Bemerkung: Wenn die in obiger Annahme geforderte Eigenschaft erfüllt ist, sagt man auch, ϕ ist steil auf D_ϕ . Diese Eigenschaft garantiert, daß für alle $x \in D_I := \{x \in \mathbb{R}^d : I(x) < \infty\}$ das Supremum in der Definition von $I(x)$ existiert.

Satz 2.6 (Gärtner–Ellis) Falls die Annahme 2.3 erfüllt ist, dann gilt für alle kompakten Mengen $F \subseteq \mathbb{R}^d$

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P \left\{ \frac{1}{n} Y_n \in F \right\} \leq - \inf_{x \in F} I(x).$$

Ist zusätzlich $0 \in \mathbb{R}^d$ im Inneren von D_ϕ enthalten, d.h. $0 \in \mathbb{R}^d$ liegt in der größten offenen Menge, die in D_ϕ enthalten ist, so gilt die Aussage für alle abgeschlossenen Mengen $F \subseteq \mathbb{R}^d$.

Falls die Annahmen 2.3 und 2.4 erfüllt sind, dann gilt für alle offenen Mengen $G \subseteq \mathbb{R}^d$

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P \left\{ \frac{1}{n} Y_n \in G \right\} \geq - \inf_{x \in G} I(x).$$

Damit sind wir nun in der Lage, große Abweichungen für Summen von Funktionen auf Markovketten zu untersuchen.

2.4.1 Prinzip großer Abweichungen für additive Funktionale

Sei (X_n) eine ergodische homogene zeitdiskrete Markovkette mit endlichem Zustandsraum $\mathcal{S} = \{s_1, s_2, \dots, s_S\}$, Übergangsmatrix \mathbf{P} und stationärer Verteilung π , und sei $f : \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{R}$ so, daß

$$\sum_{s \in \mathcal{S}} |f(s)| \pi_s < \infty,$$

also der Erwartungswert bezüglich π existiert. Weiterhin sei $Y_k := f(X_k)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ und

$$Z_n := \sum_{k=1}^n Y_k.$$

Nach dem Ergodensatz für Markovketten konvergiert das empirische Mittel für jede Anfangsverteilung fast sicher gegen obigen Erwartungswert, also

$$P \left\{ \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} Z_n = \sum_{s \in \mathcal{S}} |f(s)| \pi_s \right\} = 1.$$

Unter diesen Voraussetzungen erfüllt $\frac{1}{n} Z_n$ ein Prinzip großer Abweichungen, und wir wollen nun die Ratenfunktion herleiten. Wenn die X_k unabhängig sind und damit auch die Y_k , dann besagt der Satz von Cramér, daß die Legendre–Transformierte der logarithmierten momenterzeugenden Funktion die Ratenfunktion für ein Prinzip großer Abweichungen für $\frac{1}{n} Z_n$ ist. Der Satz von Gärtner–Ellis gibt einen Hinweis darauf, daß eine ähnliche Ratenfunktion (in Form einer Legendre–Transformierten) für ein Prinzip großer Abweichungen existiert, auch wenn die X_k Markov–Abhängigkeiten aufweisen.

Es bezeichne $p(x_1, \dots, x_n) := P\{X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n\}$ die Wahrscheinlichkeit eines Pfadsegmentes der Länge n , also

$$p(x_1, \dots, x_n) = \pi_{x_1}^{(1)} \prod_{i=1}^{n-1} p_{x_i, x_{i+1}}, \quad x_1, \dots, x_n \in \mathcal{S}.$$

Wir definieren zunächst

$$\phi_n(\vartheta) := \frac{1}{n} \ln E [e^{\vartheta Z_n}]$$

und berechnen

$$\begin{aligned}
E [e^{\vartheta Z_n}] &= \sum_{x_1, \dots, x_n} e^{\vartheta z_n} p(x_1, \dots, x_n) \\
&= \sum_{x_1, \dots, x_n} e^{\vartheta f(x_1) + \dots + \vartheta f(x_n)} p(x_1, \dots, x_n) \\
&= \sum_{x_1, \dots, x_n} e^{\vartheta f(x_1) + \dots + \vartheta f(x_n)} \pi_{x_1}^{(1)} \prod_{i=1}^{n-1} p_{x_i, x_{i+1}} \\
&= \sum_{x_1, \dots, x_n} \pi_{x_1}^{(1)} e^{\vartheta f(x_1)} p_{x_1, x_2} e^{\vartheta f(x_2)} \dots p_{x_{n-1}, x_n} e^{\vartheta f(x_n)}.
\end{aligned}$$

Für eine alternative Beschreibung der logarithmierten momenterzeugenden Funktion ϕ_n definieren wir nun für jedes $\vartheta \in \mathbf{R}$ eine nichtnegative Matrix $\mathbf{P}_\vartheta = (p_{\vartheta, i, j})_{i, j \in \mathcal{S}}$ mit Elementen

$$p_{\vartheta, i, j} := p_{ij} e^{\vartheta f(j)} \quad \text{für alle } i, j \in \mathcal{S}$$

und erhalten

$$\begin{aligned}
E [e^{\vartheta Z_n}] &= \sum_{x_1, \dots, x_n} \pi_{x_1}^{(1)} e^{\vartheta f(x_1)} \prod_{i=1}^{n-1} p_{\vartheta, x_i, x_{i+1}} \\
&= \sum_{x_1} \pi_{x_1}^{(1)} e^{\vartheta f(x_1)} p_{\vartheta, x_1, x_n}^{(n-1)}.
\end{aligned}$$

Da die $e^{\vartheta f(j)}$ positiv sind und \mathbf{P} irreduzibel ist, ist auch \mathbf{P}_ϑ irreduzibel. Sei $\lambda(\mathbf{P}_\vartheta)$ der betragsmäßig größte reelle Eigenwert[¶] von \mathbf{P}_ϑ . Man kann zeigen, daß

$$\phi(\vartheta) := \lim_{n \rightarrow \infty} \phi_n(\vartheta) = \ln \lambda(\mathbf{P}_\vartheta), \quad \vartheta \in \mathbf{R},$$

und damit spielt $\ln \lambda(\mathbf{P}_\vartheta)$ die Rolle der logarithmierten momenterzeugenden Funktion. Mit $I : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$,

$$I(x) := \sup_{\vartheta \in \mathbf{R}} [\vartheta x - \ln \lambda(\mathbf{P}_\vartheta)]$$

sind alle Annahmen für den Satz von Gärtner–Ellis erfüllt, und es gilt

Satz 2.7 (Miller) Das empirische Mittel $\frac{1}{n} Z_n$ erfüllt ein Prinzip großer Abweichungen mit Ratenfunktion I , d.h. für $a, b \in \mathbf{R}$ mit $a < b$ gilt

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P \left\{ \frac{1}{n} Z_n \in [a, b] \right\} \leq - \inf_{x \in [a, b]} I(x)$$

[¶]Dies ist der sogenannte Perron–Frobenius–Eigenwert.

und

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P \left\{ \frac{1}{n} Z_n \in (a, b) \right\} \geq - \inf_{x \in (a, b)} I(x).$$

Wie für den Satz von Gärtner–Ellis gilt auch hier eine Verallgemeinerung für abgeschlossene bzw. offene Mengen in \mathbb{R} , auf die explizite Formulierung verzichten wir. Stattdessen geben wir die Verallgemeinerungen auf \mathbb{R}^d . Dabei sind alle Überlegungen analog zum eindimensionalen Fall. Sei nun also $f : \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{R}^d$ und sei $I : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$,

$$I(x) := \sup_{\vartheta \in \mathbb{R}^d} [\langle \vartheta, x \rangle - \ln \lambda(\mathbf{P}_\vartheta)].$$

Dann gilt

Satz 2.8 Das empirische Mittel $\frac{1}{n} Z_n$ erfüllt ein Prinzip großer Abweichungen mit Ratenfunktion I , d.h. für alle abgeschlossenen Mengen $F \subseteq \mathbb{R}^d$ gilt

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P \left\{ \frac{1}{n} Z_n \in F \right\} \leq - \inf_{x \in F} I(x),$$

und für alle offenen Mengen $G \subseteq \mathbb{R}^d$ gilt

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P \left\{ \frac{1}{n} Z_n \in G \right\} \geq - \inf_{x \in G} I(x).$$

Ein ähnliches Ergebnis gilt für Summen der Form

$$\tilde{Z}_n = \sum_{k=1}^{n-1} f(X_k, X_{k+1}).$$

Für Funktionen, die von mehr als zwei Werten der Markovkette abhängen, sind dagegen keine derartigen Aussagen bekannt.

Wir wollen nun die Schwierigkeiten, die sich häufig bei der Berechnung der Ratenfunktion selbst für kleine Zustandsräume und einfache Funktionen f ergeben, verdeutlichen.

Beispiel 2.4 Betrachte die Markovkette mit Zustandsraum $\mathcal{S} = \{0, 1\}$ und Übergangsmatrix

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} p & q \\ q & p \end{pmatrix}, \quad 0 \leq p \leq \frac{1}{2}, \quad q = 1 - p$$

und die Funktion $f(s) = 1 - s$. Damit ergibt sich

$$\mathbf{P}_\vartheta = \begin{pmatrix} e^\vartheta p & q \\ e^\vartheta q & p \end{pmatrix}.$$

Zur Berechnung der Eigenwerte von \mathbf{P}_ϑ setzen wir

$$\begin{vmatrix} e^\vartheta p - \lambda & q \\ e^\vartheta q & p - \lambda \end{vmatrix} = 0,$$

$$\lambda^2 - \lambda(pe^\vartheta + p) + e^\vartheta(p^2 - q^2) = 0.$$

Als größten Eigenwert erhält man daraus

$$\lambda(\vartheta) = \frac{1}{2} \left(pe^{\vartheta+1} + \sqrt{p^2 (e^{\vartheta+1})^2 + 4e^\vartheta(1-2p)} \right).$$

Die Berechnung der Ratenfunktion $I(x) = \sup_{\vartheta \in \mathbb{R}} [\vartheta x - \ln \lambda(\vartheta)]$ erfordert nun numerische Verfahren. Wir verzichten darauf, da die sich ergebenden Schwierigkeiten damit hinreichend demonstriert sind.

2.4.2 Prinzip großer Abweichungen für empirische Verteilungen

Eine wichtige Anwendung des Prinzips großer Abweichungen für $\frac{1}{n}Z_n$ liefert direkt ein Prinzip großer Abweichungen für empirische Verteilungen $L_n = (L_n(1), \dots, L_n(S))$,

$$L_n(i) := \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n I_{\{X_k=s_i\}}, \quad i = 1, \dots, S$$

in der Menge $\mathcal{M}_1(\mathcal{S})$ der Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf \mathcal{S} . Dabei bezeichnet $L_n(i)$ die relative Häufigkeit der Besuche im Zustand s_i , und für endliche Zustandsräume \mathcal{S} der Kardinalität S ist $\mathcal{M}_1(\mathcal{S})$ gerade die Menge aller S -dimensionalen reellen Vektoren mit nichtnegativen Komponenten, die sich zu Eins summieren (Wahrscheinlichkeitssimplex). Mit $f : \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{R}^S$,

$$f(s) := (I_{\{s=s_1\}}, \dots, I_{\{s=s_S\}})$$

paßt die Folge L_1, L_2, \dots in den Rahmen des vorherigen Abschnittes und erfüllt ein Prinzip großer Abweichungen mit Ratenfunktion $I : \mathbb{R}^S \rightarrow \mathbb{R}$,

$$I(q) = \sup_{\vartheta \in \mathbb{R}^S} [\langle \vartheta, q \rangle - \ln \lambda(\mathbf{P}_\vartheta)].$$

Häufig ist für den Fall empirischer Verteilungen eine andere Charakterisierung der Ratenfunktion nützlicher. Für Vektoren $u \in \mathbb{R}^S$ sei $u > 0 : \Leftrightarrow u_j > 0$ für alle $j = 1, \dots, S$, d.h. alle Komponenten sind strikt positiv. Man kann zeigen

Satz 2.9 (Donsker–Varadhan)

$$I(q) = \begin{cases} \sup_{u \in \mathbb{R}^S, u > 0} \sum_{j=1}^S q_j \ln \frac{u_j}{(u\mathbf{P})_j}, & q \in \mathcal{M}_1(\mathcal{S}), \\ \infty, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Wir sehen also, daß die Ratenfunktion für empirische Verteilungen von Markovketten in Form eines Optimierungsproblems gegeben ist. Sind die X_k unabhängig und identisch verteilt, dann sind alle Zeilen der Übergangsmatrix \mathbf{P} identisch, und die Ratenfunktion ist gerade wie im Satz von Sanov eine relative Entropie, hier $I(q) = H(q|p(s_1, \cdot))$. Für abhängige Zufallsvariablen ist diese elegante Interpretation der Ratenfunktion als relative Entropie verlorengegangen. Es ist jedoch möglich, für eine aus Paaren der Zufallsvariablen zusammengesetzten Markovkette eine relative Entropie als Ratenfunktion zu erhalten, und daraus große Abweichungen für die empirische Verteilung der originalen Markovkette zu berechnen. Wir betrachten die durch X_1, X_2, \dots, X_n gebildeten Paare $(X_0, X_1), (X_1, X_2), (X_2, X_3), \dots, (X_{n-1}, X_n)$. Damit konstruieren wir eine neue Markovkette mit Zustandsraum $\mathcal{S}^2 = \mathcal{S} \times \mathcal{S}$ und Übergangsmatrix \mathbf{P}_2 mit Elementen

$$p_2(k \times \ell, i \times j) = I_{\{i=\ell\}} p_{ij}, \quad i, j, k, \ell \in \mathcal{S}.$$

Beispiel 2.5 Betrachte eine Markovkette mit zwei Zuständen, also $|\mathcal{S}| = 2$ und Übergangsmatrix

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix}.$$

Dann hat die konstruierte Markovkette die Übergangsmatrix

$$\mathbf{P}_2 = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix}.$$

Die empirische Verteilung $L_{n,2} = (L_{n,2}(1), \dots, L_{n,2}(|\mathcal{S}^2|))$ derart konstruierter Markovketten ist definiert durch

$$L_{n,2}(i) := \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n I_{\{(X_{k-1}, X_k)=i\}}, \quad i \in \mathcal{S}^2,$$

und nach den zuvor präsentierten Aussagen erfüllt diese empirische Verteilung ein Prinzip großer Abweichungen mit einer Ratenfunktion I_2 . Da $L_{n,2}$ eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf \mathcal{S}^2 ist, ist I_2 eine Ratenfunktion auf der Menge aller solcher Verteilungen. Wir wollen nun eine Charakterisierung von I_2 durch relative Entropien geben und den Zusammenhang mit der empirischen Verteilung L_n der Markovkette (X_n) beschreiben. Für jede Wahrscheinlichkeitsverteilung q auf \mathcal{S}^2 seien

$$q_1(i) := \sum_{j=1}^S q(i, j) \quad \text{und} \quad q_2(i) := \sum_{j=1}^S q(j, i)$$

die Randverteilungen, und falls $q_1(i) > 0$, dann sei

$$q_f(j|i) := \frac{q(i, j)}{q_1(i)}.$$

Satz 2.10 Wenn die Übergangsmatrix \mathbf{P} strikt positiv ist, dann hat für alle Wahrscheinlichkeitsverteilungen q auf \mathcal{S}^2 die Ratenfunktion I_2 die Form

$$I_2(q) = \begin{cases} \sum_{i=1}^S q_1(i) H(q_f(\cdot|i)|p(i, \cdot)), & q_1 = q_2, \\ \infty, & \text{sonst} \end{cases}$$

mit der relativen Entropie

$$H(q_f(\cdot|i)|p(i, \cdot)) = \sum_{j=1}^S q_f(j|i) \ln \frac{q_f(j|i)}{p(i, j)},$$

und für die Ratenfunktion I im Satz von Donsker–Varadhan für die empirische Verteilung L_n gilt

$$I(q) = \inf_{\tilde{q} \in \mathcal{M}_1(\mathcal{S}^2): \tilde{q}_2 = q} I_2(\tilde{q}).$$

Ist \mathbf{P} nicht strikt positiv, so gilt der Satz nach Ersetzung von \mathcal{S}^2 durch $\{(i, j) : p(i, j) > 0\}$.

Einen Zusammenhang mit den Pfadwahrscheinlichkeiten liefert der

Satz 2.11 Für alle Pfadsegmente $(x_1, \dots, x_n) \in \mathcal{S}^n$ mit $p(x_1, \dots, x_n) > 0$ gilt

$$\frac{1}{n} \ln p(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^S \sum_{j=1}^S L_{n,2}((i, j)) \ln p(i, j).$$

Damit wollen wir den Abschnitt über große Abweichungen für Markovketten beenden. Abschließend sei noch darauf hingewiesen, daß ähnliche Ergebnisse wie die hier vorgestellten auch für zeitstetige Markovketten, für Markovketten mit unendlichen Zustandsräumen und auch für einige nicht–Markovsche Prozesse existieren.

3 Simulation seltener Ereignisse

Die analytische Untersuchung seltener Ereignisse mittels der Theorie großer Abweichungen ist aufgrund der Komplexität der bei der Bestimmung von Ratenfunktionen auftretenden Variationsprobleme für realistisch dimensionierte Systeme meist unmöglich. Auch numerische Verfahren versagen im allgemeinen, wenn seltene Ereignisse involviert sind. Damit ist die Motivation für die Simulation seltener Ereignisse gegeben. Es stellt sich jedoch heraus, daß bei der Anwendung klassischer Verfahren, aufgrund der zur angemessenen statistischen Analyse notwendigen Daten, der Aufwand solcher Simulationen so enorm groß ist, daß sie praktisch nicht durchführbar sind. Seltene Ereignisse stellen also ein wesentliches Problem bei der Simulation dar. Dies ist darin begründet, daß seltene Ereignisse auch in Simulationen selten auftreten. Um jedoch zuverlässige Aussagen über ein System und speziell über Ereignisse, die innerhalb eines Systems eintreten können, zu treffen, muß man ausreichend viele Beobachtungen solcher Ereignisse machen. Dabei verbleibt, zu konkretisieren, was man unter „ausreichend vielen“ Beobachtungen versteht. Treten nun gewisse Ereignisse nur mit einer kleinen Wahrscheinlichkeit auf, so dauert es entsprechend lange, bis man ausreichend viele dieser Ereignisse beobachtet hat, d.h. der Simulationsaufwand wächst (im allgemeinen exponentiell) mit der Seltenheit solcher Ereignisse.

Wie in der Einleitung bereits erwähnt sind daher Verfahren notwendig, die die Effizienz der Simulation steigern, also eine Simulationsbeschleunigung herbeiführen, wobei parallele und verteilte Methoden aufgrund des begrenzten Beschleunigungsfaktors für die Simulation seltener Ereignisse nicht geeignet sind. Damit verbleiben Varianzreduktionsverfahren als einzige adäquate Möglichkeit zur effizienten Simulation seltener Ereignisse. Eine kleinere Varianz bedeutet größere Genauigkeit im Sinne von kleineren Konfidenzintervallen bei gleicher Datenmenge bzw. einen geringeren Simulationsaufwand zur Bestimmung von Konfidenzintervallen mit vorgegebener Breite. Varianzreduktion ist also gleichbedeutend mit Simulationsbeschleunigung. Historisch wurden viele Varianzreduktionsverfahren bereits in den frühen Tagen der Simulation im Rahmen der Monte-Carlo-Integration entwickelt, siehe z.B. [HH64, Hal70]. Es hat sich jedoch herausgestellt, daß viele davon auch nützlich für die Simulation komplexer dynamischer Systeme sind.

Die Grundidee aller Varianzreduktionsverfahren besteht im wesentlichen darin, das zugrundeliegende Simulationsmodell in ein verwandtes Modell zu transformieren, das die genauere bzw. schnellere Schätzung der interessierenden Parameter und Leistungsmaße ermöglicht. Dabei ist die Art der Anwendung des Varianzreduktionsverfahrens im allgemeinen abhängig vom Modell*. Damit ist zumindest eine rudimentäre Kenntnis über das Verhalten des Modells erforderlich, und je mehr Informationen über das Modell vorhanden sind, desto leichter und erfolgreicher ist die Varianzreduktion. Eine Möglichkeit,

*Diese inhärente Modellabhängigkeit veranlaßt viele Autoren im Zusammenhang von Varianzreduktionsverfahren von Kunst zu sprechen.

solche Informationen zu erhalten, kann etwa in einer kurzen „Vorsimulation“ bestehen, deren Ergebnisse dann in die Anwendung der Methode zur Varianzreduktion einfließen können. Es ist typischerweise vorab nicht möglich, eine Varianzreduktion zu garantieren, und falls eine Varianzreduktion erreicht wird, den Faktor vorherzusagen. Wie auch in der Einleitung schon erwähnt, sind die meisten der bekannten Verfahren zur Varianzreduktion für die Simulation seltener Ereignisse ungeeignet. Dies liegt im wesentlichen daran, daß der Faktor, um den die Varianz der Schätzer reduziert wird, konstant und zu klein ist. Ausnahmen stellen die RESTART/Splitting-Methode und das Importance Sampling dar. Insbesondere ist beim Importance Sampling potentiell eine unendliche Varianzreduktion möglich. Allerdings ist auch die Anwendung dieser Verfahren schwierig und als eine Kunst anzusehen. Für eine ausführlichere Behandlung allgemeiner Varianzreduktionsverfahren verweisen wir erneut auf die einschlägige Simulationsliteratur [Ban98, BFS87, LK00, Rip87, Ros02, Rub81, RM98] und die weiteren Verweise darin.

Unabhängig davon, welche Methode zur Simulation seltener Ereignisse eingesetzt wird, erfordert die Anwendung Kenntnisse sowohl des zu untersuchenden Systems oder Modells als auch der Methode selbst. Dies ist jedoch in den meisten Fällen in der Praxis von Systemanalytikern oder Entwicklern komplexer realistisch dimensionierter Systeme nicht zu erwarten. Erstrebenswert sind daher Werkzeuge und Methoden, die verhältnismäßig leicht auf eine große Klasse von Modellen angewandt werden können. Dies umfaßt eine benutzerfreundliche Spezifikation des Modells und der Leistungsmaße und eine Unterstützung in der Anwendung der Simulationsmethode für seltene Ereignisse, ohne daß sich der Benutzer um die Details der Methode kümmern muß. Für die Forschung im Bereich der Simulation seltener Ereignisse ergibt sich damit neben der Weiterentwicklung der Methode als solche die Erweiterung der Klasse von Modellen, auf die sie anwendbar sind und die Integration in Simulations- oder allgemeiner Leistungsbewertungspakete so, daß sie nicht nur von Experten genutzt werden können.

Um die Probleme, die bei der Simulation seltener Ereignisse und der Integration von Methoden in allgemeine Analysewerkzeuge auftreten zu unterstreichen und einen ersten Eindruck über die Schwierigkeiten und den Stand der Forschung zu vermitteln, zitieren wir Prof. J. Keith Townsend [Tow00]:

After decades of research in rare event simulation (RES) techniques, it is still not practical to apply these techniques to models of large networks which include realistic protocols. Being able to apply RES techniques to such systems – the “holy grail“ of RES – would be very valuable to the communication network industry. The ideal situation would be a “bolt-on accelerator“ that would give production simulation packages huge speedup with virtually no interaction from the user. And yet, the best RES techniques still require the user to incorporate a considerable amount of detailed knowledge of systems being simulated. In addition, the techniques are only applicable to crude models of the underlying system with many restrictive assumptions, i.e., the model must represent the system at a rather high

level of abstraction. On the other hand, the decades of research in rare event simulation have resulted in many advances which have yielded solutions to a number of unsolvable problems. Many times, however, new techniques and advances seem to hold the promise of generality which, unfortunately, ultimately remains elusive.

3.1 Statistische Schätzung asymptotisch kleiner Wahrscheinlichkeiten

Wir wollen nun die bei der Simulation seltener Ereignisse auftretenden Probleme im Hinblick auf die statistische Auswertung formal beschreiben. Sei X Zufallsvariable auf einem Wahrscheinlichkeitsraum (Ω, \mathcal{A}, P) . Gesucht sei die Wahrscheinlichkeit $\gamma := P\{A\}$ eines Ereignisses $A \in \mathcal{A}$, also

$$\gamma = \int_{\Omega} I_A(\omega) dP = E_P [I_A],$$

wobei I_A die Indikatorfunktion des Ereignisses A bezeichnet. Will man die Wahrscheinlichkeit γ schätzen, beispielsweise per Simulation, so erzeugt man gemäß P Realisierungen einer Stichprobe X_1, X_2, \dots, X_N und bildet als erwartungstreuen Schätzer das Stichprobenmittel

$$\hat{\gamma} := \hat{\gamma}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N I_A(x_i) \quad (3.1)$$

mit der Varianz

$$\sigma^2(\hat{\gamma}) = \text{VAR} [\hat{\gamma}] = \frac{\gamma(1-\gamma)}{N}, \quad (3.2)$$

und nach dem Zentralen Grenzwertsatz[†] ergibt sich das $(1-\alpha)$ -Konfidenzintervall

$$\left[\hat{\gamma} - z_{1-\alpha/2} \sqrt{\frac{\gamma(1-\gamma)}{N}}, \hat{\gamma} + z_{1-\alpha/2} \sqrt{\frac{\gamma(1-\gamma)}{N}} \right], \quad (3.3)$$

wobei $z_{1-\alpha/2}$ das $1-\alpha/2$ -Quantil der standardisierten Normalverteilung bezeichnet. Für kleine Werte von γ ist dabei die relative halbe Breite des Konfidenzintervalls ganz offensichtlich ein geeigneteres Gütekriterium für die Schätzung als die absolute halbe Breite.

[†]Wir gehen hier von großem Stichprobenumfang aus. Für kleine N ersetze man im Konfidenzintervall das Quantil der Normalverteilung durch das Quantil $t_{N-1, 1-\alpha/2}$ der Student- t -Verteilung. An der weiteren Argumentation ändert sich nichts. Insbesondere konvergiert für $N \rightarrow \infty$ das Quantil der Student- t -Verteilung gegen das der standardisierten Normalverteilung.

So erscheint ein Konfidenzintervall mit einer halben Breite von etwa 10^{-3} im allgemeinen als sehr klein, enthält jedoch z.B. für $\gamma < 10^{-9}$ Werte, die um Größenordnungen von γ verschieden sind. Direkt proportional zur relativen halben Konfidenzintervallbreite ist der Variationskoeffizient oder relative Fehler, der somit ein geeignetes Maß für die Güte des Schätzers darstellt. Hierfür ergibt sich

$$\delta_{rel}(\hat{\gamma}) = \frac{\sigma(\hat{\gamma})}{\gamma} = \sqrt{\frac{1-\gamma}{\gamma N}} \xrightarrow{\gamma \rightarrow 0} \infty, \quad (3.4)$$

woraus die Problematik bei der Schätzung sehr kleiner Wahrscheinlichkeiten ersichtlich wird. Berechnet man nun zum Konfidenzniveau $1 - \alpha$ und vorgegebenem maximalen relativen Fehler β die hierfür notwendige Stichprobengröße N , so folgt

$$z_{1-\alpha/2} \sqrt{\frac{1-\gamma}{\gamma N}} \leq \beta \Rightarrow N \geq \frac{z_{1-\alpha/2}^2}{\beta^2} \cdot \frac{1-\gamma}{\gamma} \xrightarrow{\gamma \rightarrow 0} \infty. \quad (3.5)$$

Für die in praktischen Anwendungen durchaus realistischen Vorgaben, ein Konfidenzintervall zum Niveau 0.99 und einen maximalen relativen Fehler von 10%, gilt also

$$\alpha = 0.01, \quad z_{1-\alpha/2} = 2.576, \quad \beta = 0.1, \quad N \geq 100 \cdot 2.576^2 \frac{1-\gamma}{\gamma},$$

und für $\gamma = 10^{-9}$ erhält man $N \geq 6.64 \cdot 10^{11}$. Tabelle 3.1 zeigt eine Übersicht über die jeweils benötigte Stichprobengröße für einige gängige Konfidenzniveaus. Die Stichprobengröße N entspricht in Simulationen der Anzahl benötigter Simulationsläufe, wobei jeder Simulationslauf wiederum aus mehreren Zufallsexperimenten bestehen kann.

Beispiel 3.1 Gesucht sei die Wahrscheinlichkeit γ für mindestens 80 Treffer in 100 Würfeln mit einer fairen Münze. Mit Hilfe der Binomialverteilung können wir leicht analytisch exakt $\gamma = 5.5 \cdot 10^{-10}$ berechnen. Mittels Simulation kann diese Wahrscheinlichkeit durch unabhängige Experimente (Simulationsläufe), die jeweils aus 100 simulierten Münzwürfen bestehen, unter Verwendung eines Zufallszahlengenerators geschätzt werden. Also müssen für jeden Simulationslauf 100 Zufallszahlen generiert werden[‡]. In jedem Simulationslauf erhalte eine Indikatorfunktion für „Erfolg“ den Wert 1, falls mindestens 80 Treffer beobachtet werden und den Wert 0 sonst. Aus der Wahrscheinlichkeit γ ergibt sich, daß im Mittel $1.8 \cdot 10^{11}$ Simulationsläufe notwendig sind, um einen Erfolg zu beobachten. Es ist klar, daß für zuverlässige Aussagen ausreichend viele Erfolge beobachtet werden müssen, wobei sich die konkrete Bedeutung von ausreichend vielen Erfolgen aus den oben angegebenen Formeln ergibt. So folgt für ein Konfidenzniveau von 99% und einen maximalen relativen Fehler von 10% eine benötigte Stichprobengröße – also eine benötigte

[‡]Für die Simulationsläufe, in denen mindestens 80 Treffer auftreten, kann man natürlich nach dem 80. Treffer den Lauf abbrechen. Die Anzahl dieser Läufe ist aber so gering, daß dieser kleine Unterschied hier unwesentlich ist und lediglich das Beispiel verkomplizieren würde.

γ	β	$1 - \alpha = 99\%$	$1 - \alpha = 95\%$	$1 - \alpha = 90\%$
10^{-3}	10%	$6.63 \cdot 10^5$	$3.83 \cdot 10^5$	$2.71 \cdot 10^5$
	5%	$2.65 \cdot 10^6$	$1.53 \cdot 10^6$	$1.10 \cdot 10^6$
	1%	$6.63 \cdot 10^7$	$3.83 \cdot 10^7$	$2.71 \cdot 10^7$
10^{-6}	10%	$6.63 \cdot 10^8$	$3.83 \cdot 10^8$	$2.71 \cdot 10^8$
	5%	$2.65 \cdot 10^9$	$1.53 \cdot 10^9$	$1.10 \cdot 10^9$
	1%	$6.63 \cdot 10^{10}$	$3.83 \cdot 10^{10}$	$2.71 \cdot 10^{10}$
10^{-9}	10%	$6.63 \cdot 10^{11}$	$3.83 \cdot 10^{11}$	$2.71 \cdot 10^{11}$
	5%	$2.65 \cdot 10^{12}$	$1.53 \cdot 10^{12}$	$1.10 \cdot 10^{12}$
	1%	$6.63 \cdot 10^{13}$	$3.83 \cdot 10^{13}$	$2.71 \cdot 10^{13}$
10^{-12}	10%	$6.63 \cdot 10^{14}$	$3.83 \cdot 10^{14}$	$2.71 \cdot 10^{14}$
	5%	$2.65 \cdot 10^{15}$	$1.53 \cdot 10^{15}$	$1.10 \cdot 10^{15}$
	1%	$6.63 \cdot 10^{16}$	$3.83 \cdot 10^{16}$	$2.71 \cdot 10^{16}$

Tabelle 3.1: Benötigte Stichprobengröße N für verschiedene Konfidenzniveaus $1 - \alpha$ und maximale relative Fehler β .

Anzahl von Simulationsläufen – von $N \geq 1.19 \cdot 10^{12}$. Es müssen also insgesamt $1.19 \cdot 10^{14}$ Zufallszahlen generiert werden.

Es ist klar, daß in realistischen Simulationen die einzelnen Simulationsläufe noch deutlich komplexer sind als in obigem Beispiel. Somit wird deutlich, daß bei Wahrscheinlichkeiten, die in Größenordnungen seltener Ereignisse liegen, ein erheblicher Simulationsaufwand zur Bestimmung dieser Wahrscheinlichkeiten auf eine vorgegebene Genauigkeit erforderlich ist. Dies zeigt deutlich die Notwendigkeit von Verfahren zur effizienteren – schnellen – Simulation von Systemen oder Modellen, in denen seltene Ereignisse auftreten. Wir wollen im nächsten Abschnitt die zusätzlichen Probleme, die sich aus der Struktur von Simulationsläufen für die statistische Auswertung ergeben und Verfahren zur Umgehung dieser Probleme beschreiben.

3.2 Schätzer und Konfidenzintervalle aus Simulationsdaten

Eine Simulation ist ein statistisches Experiment mit Hilfe von Computern, wobei Simulation in der Regel den gesamten Vorgang beginnend mit der Modellbildung bezeichnet. Da wir davon ausgehen, daß die ersten Schritte bereits erledigt sind, also daß ein adäquates Modell vorliegt, konzentrieren wir uns auf die statistische Auswertung der Ausgabedaten. Sind im Modell stochastische Größen enthalten, so sind die Ausgabedaten ebenfalls sto-

chastisch, und die Ausgabeanalyse liefert dann Schätzungen im Sinne der mathematischen Statistik. Die für ein Leistungsmaß relevanten Ausgabedaten eines einzelnen Simulationslaufes formen einen stochastischen Prozeß, wobei die Zufallsvariablen des Prozesses typischerweise weder unabhängig noch identisch verteilt sind. Somit sind klassische Verfahren, die dies voraussetzen, nicht direkt anwendbar. Insbesondere können aus einem einzelnen Simulationslauf zwar Erwartungswerte jedoch keine Konfidenzintervalle berechnet werden. Wir wollen hier kurz die gängigsten Verfahren zur Konstruktion von Konfidenzintervallen für Erwartungswerte beschreiben. Die Beschränkung auf Erwartungswerte stellt dabei im Hinblick auf Wahrscheinlichkeiten keine Einschränkung dar, da sich Wahrscheinlichkeiten als Erwartungswerte von Indikatorfunktionen ausdrücken lassen.

In Bezug auf die statistische Auswertung werden zwei Arten von Simulationen unterschieden: Simulationen von endlichem Horizont (*finite-horizon simulations*) und stationäre Simulationen (*steady-state simulations*). Häufig werden Simulationen von endlichem Horizont auch als terminierende und stationäre Simulationen als nichtterminierende Simulationen bezeichnet. Selbstverständlich muß aber jede Simulation, auch jede stationäre Simulation, terminieren, die Bezeichnungen sollen lediglich verdeutlichen, daß es bei Simulationen mit endlichem Horizont ein vorab definiertes terminierendes Ereignis gibt, während bei stationären Simulationen das Grenzverhalten eines Systems über einen potentiell unendlichen Zeitraum untersucht wird. In Bezug auf Leistungsmaße kann man diese Unterscheidung ansehen als die Unterscheidung zwischen transienten und stationären Leistungsmaßen.

3.2.1 Simulation transienter Leistungsmaße

Bei der Schätzung transienter Leistungsmaße startet ein Simulationslauf in einem bestimmten Anfangszustand bzw. unter bestimmten Anfangsbedingungen und endet, wenn ein vorab spezifiziertes Ereignis A eintritt, welches zufällig sein kann. Dabei ist der Ausgabeprozess nicht stationär, und die Ergebnisse der Simulation sind von den Anfangsbedingungen beeinflusst. Die Leistungsmaße sind definiert über einem endlichen Horizont, also bezüglich eines endlichen Intervalls $[0, T]$, dem Beobachtungszeitraum, wobei T die Zeit des Auftretens von A ist. Dabei kann T ein konstanter Wert oder eine Zufallsvariable sein. Im Beobachtungszeitraum finden Ereignisse statt, und für Leistungsmaße fallen K Beobachtungsdaten an, wobei auch K konstant oder eine Zufallsvariable sein kann. Wir wollen dies an einigen Beispielen erläutern.

Interessiert man sich für die Wartezeiten der ersten K Kunden in einem Warteschlangensystem, so ist die Anzahl der Beobachtungsdaten konstant und die Zeit T zufällig. Untersucht man dagegen Wartezeiten von Kunden in einem festen Beobachtungszeitraum, so ist die Anzahl der Kunden und damit die Anzahl der Beobachtungsdaten K zufällig. Betrachtet man die ersten K Übergänge in einer diskreten Markovkette, so sind sowohl

die Anzahl der Beobachtungen als auch der Beobachtungszeitraum konstant. Bei einer stetigen Markovkette hingegen wäre der Beobachtungszeitraum zufällig. Betrachtet man eine Markovkette, bis ein vorgegebener Zustand erreicht wird, so sind sowohl K als auch T zufällig.

Unabhängige Simulationsläufe von endlichem Horizont

Eine einfache und naheliegende Methode, um die Unabhängigkeit der Ausgabedaten von Simulationen zu gewährleisten, besteht darin, unabhängige Simulationsläufe von endlichem Horizont durchzuführen. Das bedeutet, daß mehrere Simulationsläufe, die voneinander (stochastisch) unabhängig sind, mit gleichen Anfangs- und Abbruchbedingungen durchgeführt und daraus Schätzer und Konfidenzintervalle konstruiert werden. Die Unabhängigkeit der einzelnen Simulationsläufe wird dabei typischerweise dadurch erreicht, daß für jeden Simulationslauf ein anderer Startwert des verwendeten Zufallszahlengenerators gewählt wird. In unserem Beispiel 3.1 wurden unabhängig jeweils 100 Münzwürfe durchgeführt. Eine Variante für die Bestimmung der Wahrscheinlichkeit von mindestens 80 Treffern besteht dabei darin, einen Simulationslauf abzubrechen, sobald 80 Treffer beobachtet wurden (jedoch spätestens nach 100 Würfeln).

Ein einzelner Simulationslauf liefert eine Information über ein Leistungsmaß. Diese Information kann eine Funktion auf den Ausgabedaten sein bzw. der Ausgabeprozess des Simulationslaufes ist bereits als Funktion auf den Ausgabedaten definiert. Mehrere unabhängige Simulationsläufe liefern also unabhängige Werte für ein Leistungsmaß, aus denen Konfidenzintervalle konstruiert werden können. Ist etwa die mittlere Zeit bis zum Überlauf eines beschränkten Puffers in einem anfangs leeren Warteschlangensystem gesucht, so beginnt ein Simulationslauf mit einem leeren System, simuliert Ankünfte und Bedienungen und endet, wenn ein Überlauf eintritt. Führt man mehrere solcher Simulationsläufe unabhängig aus, so erhält man aus jedem Lauf eine Zeit bis zum Überlauf und kann daraus Erwartungswerte und Konfidenzintervalle für die mittlere Zeit mit den klassischen statistischen Verfahren berechnen. Wir wollen dies nun allgemein und formal darstellen.

Ein Simulationslauf erzeugt Ausgabedaten X_1, \dots, X_K . Diese Ausgabedaten liefern eine Information $Y = f(X_1, \dots, X_K)$ für ein Leistungsmaß. Werden N unabhängige Simulationsläufe durchgeführt, so erhält man also für $i = 1, \dots, N$ die Ausgabedaten X_{i1}, \dots, X_{iK_i} und die Informationen $Y_i = f_i(X_{i1}, \dots, X_{iK_i})$. Dabei sind Y_1, \dots, Y_N unabhängige identisch verteilte Zufallsvariablen, d.h. sie stellen eine mathematische Stichprobe für das gesuchte Leistungsmaß dar. Damit ist das Stichprobenmittel

$$\bar{Y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Y_i$$

erwartungstreuer Schätzer für den Erwartungswert der Y_i und die Stichprobenvarianz

$$S^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (Y_i - \bar{Y})^2$$

erwartungstreuer Schätzer für die Varianz des Stichprobenmittels. Für genügend große N ergibt sich damit das $(1 - \alpha)$ -Konfidenzintervall

$$C = \left[\bar{Y} - t_{N-1, 1-\alpha/2} \sqrt{\frac{S^2}{N}}, \bar{Y} + t_{N-1, 1-\alpha/2} \sqrt{\frac{S^2}{N}} \right],$$

wobei $t_{N-1, 1-\alpha/2}$ das $1 - \alpha/2$ -Quantil der Studentschen t -Verteilung mit $N - 1$ Freiheitsgraden bezeichnet. Für große N ersetze man das Quantil der Student- t -Verteilung mit dem $1 - \alpha/2$ -Quantil $z_{1-\alpha/2}$ der standardisierten Normalverteilung.

Beispiel 3.2 Sei X_j die Wartezeit des j -ten Kunden in einem Warteschlangensystem, und sei die mittlere Wartezeit der ersten K Kunden gesucht. Dann ist die relevante Information $f(X_1, \dots, X_K) = (X_1 + \dots + X_K)/K$. Der i -te von N unabhängigen Simulationsläufen liefert die Ausgabedaten X_{i1}, \dots, X_{iK} , und die relevante Information aus dem i -ten Lauf ist $Y_i = f(X_{i1}, \dots, X_{iK}) = (X_{i1} + \dots + X_{iK})/K$. Daraus bildet man dann obiges Konfidenzintervall C .

Beispiel 3.3 Seien $0 < t_1 < t_2 < \dots$ die Ankunftszeiten neuer Kunden in einem Warteschlangensystem, und sei X_j die Anzahl der Kunden in der Warteschlange zur Zeit t_j . Gesucht sei die mittlere Zeit, bis eine anfangs, zur Zeit $t_0 = 0$, leere Warteschlange der Größe ν gefüllt ist. Dann liefert der i -te von N unabhängigen Simulationsläufen die Ausgabedaten X_{i1}, \dots, X_{iT_i} mit $T_i = \inf_j [X_{ij} = \nu]$, und die relevante Information aus dem i -ten Lauf ist gerade $Y_i = f_i(X_{i1}, \dots, X_{iT_i}) = T_i$, woraus man wiederum das Konfidenzintervall C bildet.

Analog zu diesem Beispiel 3.3 ist die Simulation einer Markovkette bis zum Erreichen eines vorgegebenen Zustandes. Häufig werden dabei Systemfehlerzustände untersucht, und das gesuchte Leistungsmaß ist dann die mittlere Zeit bis zum Systemfehler (*Mean Time To Failure, MTTF*).

3.2.2 Simulation stationärer Leistungsmaße

Bei der Schätzung stationärer Leistungsmaße interessiert das Grenzverhalten, wobei man bei der Simulation berücksichtigen muß, daß ein System oder dessen Modell anfangs eine von den Anfangsbedingungen abhängige transiente Phase durchläuft. Eines der wesentlichen Probleme bei der Simulation stationärer Größen ist die Beseitigung des Einflusses der Anfangsbedingungen, der Eingangsverzerrung (*initial bias*). Im allgemeinen sind die

Anfangsbedingungen untypisch für das Systemverhalten im Gleichgewichtszustand, beeinflussen aber die Simulation, sodaß verzerrte Schätzer resultieren. So ist etwa in Warteschlangensystemen die Wartezeit des ersten Kunden immer gleich Null. Da stationäre Systemzustände über Grenzwerte gegen unendlich definiert sind, gibt es im Prinzip keine erwartungstreuen sondern bestenfalls stark konsistente Schätzer für stationäre Größen. Eine übliche Methode zur Beseitigung bzw. Verringerung der Eingangsverzerrung besteht darin, für jeden Simulationslauf eine sogenannte Einschwingphase zu durchlaufen und erst danach mit dem „Sammeln“ der Daten zu beginnen. Eines der bekanntesten und gängigsten Verfahren zur Bestimmung der Länge der transienten Einschwingphase ist eine graphische Methode nach Welch [Wel83], es gibt aber auch zahlreiche weitere Methoden. Wir wollen darauf nicht näher eingehen und verweisen auf die Literatur [Ban98, BFS87, LK00, Rip87, Ros02, Rub81, RM98].

Unabhängige Simulationsläufe von endlichem Horizont

Die einfachste und wohl am häufigsten benutzte Methode zur Simulation stationärer Leistungsmaße erzeugt analog zum transienten Fall unabhängige Simulationsläufe von endlichem Horizont. Anders als im transienten Fall ist dieser Horizont, d.h. die Simulationslauflänge, konstant und für alle Läufe gleich. Außerdem wird die Einschwingphase beachtet, indem ein Index ℓ mit $0 < \ell < K$ gewählt wird, der aus den Verfahren zur Bestimmung der transienten Phase resultiert, und dann die Beobachtungen $X_{i1}, \dots, X_{i\ell}$ verworfen werden. Dann ist

$$Y_i = \frac{1}{K - \ell} \sum_{j=\ell+1}^K X_{ij}$$

die Information für den Erwartungswert aus dem i -ten Simulationslauf und die Schätzer \bar{Y} und S^2 sowie das Konfidenzintervall C können wie im transienten Fall konstruiert werden. Vergrößert man die Länge ℓ der Einschwingphase bei festem K , so verringert sich der durch die Anfangsbedingungen hervorgerufene systematische Fehler, die statistischen Aussagen basieren jedoch auf einer kleineren Anzahl von Daten. Vergrößert man umgekehrt für festes ℓ die Länge K der einzelnen Simulationsläufe, so verringert sich der systematische Fehler, da die Anfangsbedingungen weniger ins Gewicht fallen, und zudem wächst die Anzahl der gesammelten Daten. In der Praxis wählt man selbstverständlich nicht zuerst die Simulationslauflänge K und bestimmt danach die Länge der Einschwingphase ℓ . Vielmehr beginnt man mit der Bestimmung von ℓ und wählt dann K deutlich größer als ℓ , oft als ein Vielfaches. Die Anzahl N der unabhängigen Simulationsläufe hat keinen Einfluß auf den systematischen Fehler, sondern vergrößert lediglich die Anzahl der Ausgabedaten.

Die Methode der unabhängigen Simulationsläufe von endlichem Horizont hat sicherlich den Vorteil, daß sie sehr einfach ist, woraus sich auch die weite Verbreitung erklärt. Sie kann jedoch in der Variante für stationäre Leistungsmaße einen erheblichen Aufwand

zur Bestimmung „guter“ Werte für K und ℓ erfordern. Zudem ist oft selbst bei sehr langen Simulationsläufen eine große Anzahl von Läufen notwendig, um Konfidenzintervalle mit vorgegebener Genauigkeit zu erhalten, und in jedem dieser Läufe muß die unter Umständen sehr lange Einschwingphase durchlaufen werden. Es wird also eine große Menge von generierten Daten nicht genutzt. Wir wollen nun zwei Ansätze zur Umgehung dieser Problematik vorstellen, die stationäre Leistungsmaße aus nur einem einzigen Simulationslauf schätzen.

Gruppenmittelwerte

Um Punktschätzer und Konfidenzintervalle für stationäre Größen aus einem einzigen Simulationslauf zu bestimmen wird häufig die Methode der Gruppenmittelwerte (*Batch Means*) angewandt. Dabei wird zunächst wie bei unabhängigen Simulationsläufen von endlichem Horizont eine Einschwingphase durchlaufen, um den Einfluß der Anfangsbedingungen zu beseitigen oder zu verringern. Dann werden die weiteren Ausgabedaten in gleich große Gruppen aufgeteilt und behandelt wie unabhängige Läufe. Ein Simulationslauf der Länge K liefert Ausgabedaten X_1, X_2, \dots, X_K . Die Länge der Einschwingphase sei wieder $0 < \ell < K$. Die verbleibenden X_i mit $i > \ell$ werden in N Gruppen der Größe $k = \frac{K-\ell}{N}$ aufgeteilt[§], und mit den Gruppenmittelwerten

$$Y_i = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k X_{(i-1)k+\ell+j}, \quad i = 1, \dots, N$$

bildet man dann für genügend große k und N wieder die Punktschätzer \bar{Y} und S^2 sowie das Konfidenzintervall C .

Die Methode der Gruppenmittelwerte bietet den Vorteil, daß die Einschwingphase nur ein einziges Mal durchlaufen werden muß. Die aus dieser Methode resultierenden Schätzer sind jedoch – auch bei vollständiger Beseitigung der Eingangsverzerrung – im allgemeinen nicht erwartungstreu, da die Gruppenmittelwerte abhängig sind. Mit wachsender Gruppengröße k nimmt diese Abhängigkeit jedoch ab, sodaß man für genügend große k nahezu unabhängige Gruppenmittelwerte erhält. Es gibt zahlreiche Vorschläge zur Wahl der Parameter ℓ, N, k sowie diverse Varianten zur hier vorgestellten Methode. Für weiterführende Informationen sei auf [Ban98, BFS87, LK00, Rip87, Ros02, Rub81, RM98] und die zahlreichen dort enthaltenen Literaturhinweise sowie auf [SW99, YS00] verwiesen.

Regenerative Simulation

Ein weiterer verbreiteter Ansatz zur Schätzung stationärer Leistungsmaße aus einem einzigen Simulationslauf ist die regenerative Simulation, die aus mathematischer Sicht vielleicht die eleganteste Variante ist. Sie wurde unabhängig von Crane und Iglehart [CI74a, CI74b, CI75] sowie Fishman [Fis73, Fis74] vorgeschlagen. Wir stellen hier die Grundlagen

[§]Dabei sind die Parameter K, ℓ, N so zu wählen, daß k ganzzahlig ist.

vor, ausführliche Darstellungen findet man etwa in [CL77, IS80, She93, Gly94, GH01]. Erfüllt das zu simulierende System bzw. der Ausgabeprozess der Simulation spezielle Eigenschaften, so kann man Punktschätzer und Konfidenzintervalle für stationäre Größen mit Hilfe der Methode der regenerativen Simulation aus einem einzigen Simulationslauf ohne Einschwingphase bestimmen.

Die Idee besteht darin, den Simulationslauf so in Blöcke aufzuteilen, daß die Blöcke nicht nur identisch verteilt sondern auch unabhängig sind. Dabei wird die Eigenschaft vieler Systeme ausgenutzt, daß es Systemzustände gibt, zu denen die weitere Entwicklung des Systems unabhängig von der vorherigen Entwicklung ist. Das System nimmt diese sogenannten Regenerationszustände zu zufälligen Regenerationszeitpunkten, die endlich weit auseinander liegen, unendlich oft an. Die Regenerationszeitpunkte bilden dann die Zerlegung des Simulationslaufes in unabhängige identisch verteilte Blöcke. Im Gegensatz zur Methode der Gruppennittelwerte haben diese Blöcke jedoch unterschiedliche Längen.

Die Anwendbarkeit des Verfahrens hängt davon ab, ob das zu simulierende System oder Modell regenerativ ist, also regenerative Zustände hat, und ob diese regenerativen Zustände identifizierbar sind. Falls dies zutrifft, ist die regenerative Simulation ein mächtiges Verfahren für stationäre Leistungsmaße. Insbesondere ist in irreduziblen positiv rekurrenten Markovketten jeder Zustand regenerativ.

Informell ist ein regenerativer Prozeß ein Prozeß mit der Eigenschaft, daß zufällige Zeitpunkte, Regenerationspunkte, existieren, zu denen der Prozeß probabilistisch neu startet. Typischerweise sind dies Rückkehrzeiten zu einem bestimmten Zustand des Prozesses. Wesentlich ist, daß zwischen zwei aufeinanderfolgenden Regenerationspunkten die Entwicklung des Prozesses eine probabilistische Replikation des Prozesses zwischen jedem anderen Paar von Regenerationspunkten ist. Wir wollen nun formal den Begriff des regenerativen Prozesses definieren. Dazu benötigen wir zunächst

Definition 3.1 (Stoppzeit) Eine ganzzahlige positive Zufallsvariable N heißt Stoppzeit für einen diskreten stochastischen Prozeß $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$, falls für alle $n \in \mathbb{N}$ das Ereignis $\{N = n\}$ unabhängig von X_{n+1}, X_{n+2}, \dots ist, d.h. aus der Geschichte des Prozesses bis zur Zeit n bestimmt werden kann. Eine reelle Zufallsvariable T mit Werten in $[0, \infty)$ heißt Stoppzeit für einen stetigen stochastischen Prozeß $(X_t)_{t \geq 0}$, falls für alle endlichen $t \geq 0$ das Ereignis $\{T \leq t\}$ unabhängig von $(X_u)_{u > t}$ ist, also aus der Geschichte des Prozesses bis zur Zeit t bestimmt werden kann.

Intuitiv wird also, wenn $N = n$ gilt, nach Beobachtung von X_1, \dots, X_n bzw. wenn $T \leq t$ gilt, nach Beobachtung von $(X_u)_{u \leq t}$ gestoppt.

Beispiel 3.4 Seien X_1, X_2, \dots unabhängig mit $P\{X_i = 0\} = P\{X_i = 1\} = \frac{1}{2}$. Dann ist

$$N = \min\{n : X_1 + \dots + X_n = 10\}$$

eine Stoppzeit.

Definition 3.2 (Regenerativer Prozeß) Ein stochastischer Prozeß $(X_t)_{t \geq 0}$ heißt regenerativ, falls

- (i) eine Folge $(T_n)_{n \in \mathbb{N}}$ von Stoppzeiten existiert, die einen Erneuerungsprozeß bildet, d.h. die Zufallsvariablen $\tau_n := T_n - T_{n-1}$, $n \geq 1$ sind unabhängig und identisch verteilt, und
- (ii) für jede Folge $0 \leq t_1 < t_2 < \dots < t_m$, $m \geq 1$ und $n \geq 0$ sind $(X_{t_1}, \dots, X_{t_m})$ und $(X_{T_n+t_1}, \dots, X_{T_n+t_m})$ identisch verteilt, und die Prozesse $(X_t)_{0 \leq t < T_n}$ und $(X_{T_n+t})_{t \geq 0}$ sind unabhängig.

Die zufälligen Stoppzeiten T_n heißen dann Regenerationspunkte oder Regenerationszeiten und $(X_t)_{T_{n-1} < t \leq T_n}$ heißt n -ter Regenerationszyklus des regenerativen Prozesses $(X_t)_{t \geq 0}$. Die Länge des n -ten Regenerationszyklus ist durch die Zufallsvariable τ_n gegeben. Ein Zustand des Prozesses zu einer Regenerationszeit heißt Regenerationszustand.

Bemerkung: Obige Definition ist zwar in der Variante für stetige Prozesse formuliert, deckt aber den Fall diskreter Prozesse mit ab.

Es ist leicht zu prüfen, daß irreduzible positiv rekurrente Markovketten, diskret oder stetig, sowie Semi-Markovprozesse mit endlichem oder abzählbarem Zustandsraum regenerativ sind, wobei jeder Zustand Regenerationszustand ist. Ebenso sind für stabile $GI/GI/1$ -Warteschlangensysteme die Prozesse der Anzahl von Kunden und der Wartezeiten von Kunden regenerativ. Dabei sind die Regenerationspunkte jeweils die Zeiten, zu denen ein Bediener zu arbeiten beginnt, nachdem er eine gewisse Zeit untätig war, also jeweils der Beginn einer Beschäftigungszeit (*busy period*). Regenerationszustand ist also das leere System. Für die Simulation sind einige Eigenschaften regenerativer Prozesse wesentlich, die wir ohne Beweis angeben wollen. Wir beginnen mit der Feststellung, daß für regenerative Prozesse (X_n) , diskret oder stetig, und reelle meßbare Funktionen f auch der Prozeß $(f(X_n))$ regenerativ ist, und geben nun die fundamentale Aussage für die regenerative Simulation.

Seien über dem i -ten Regenerationszyklus für diskrete Prozesse die Summe und für stetige Prozesse das Integral

$$Y_i := \sum_{n=T_{i-1}+1}^{T_i} f(X_n), \quad Y_i := \int_{T_{i-1}}^{T_i} f(X_n) dn$$

definiert, so ist $((Y_i, \tau_i))$ eine Folge unabhängiger identisch verteilter Zufallsvektoren, sowohl die Y_i als auch die τ_i sind unabhängig und identisch verteilt, und man kann den Erwartungswert darstellen als

$$\mu = \frac{E[Y_1]}{E[\tau_1]}. \quad (3.6)$$

Simuliert man nun den Prozeß (X_i) über N Zyklen, so erhält man Y_1, \dots, Y_N und τ_1, \dots, τ_N . Dann ist nach dem starken Gesetz der großen Zahlen

$$\hat{\mu} = \frac{\bar{Y}}{\bar{\tau}}, \quad (3.7)$$

wobei \bar{Y} und $\bar{\tau}$ die jeweiligen Stichprobenmittel bezeichnen, ein stark konsistenter Schätzer für μ . Die Konstruktion von Konfidenzintervallen erfolgt nun mit Hilfe der Zufallsvariablen $Z_i := Y_i - \mu\tau_i, i = 1, \dots, N$ und Anwendung des Zentralen Grenzwertsatzes. Da die (Y_i, τ_i) unabhängig und identisch verteilt sind, folgt leicht, daß die Z_i unabhängige identisch verteilte Zufallsvariablen sind, und für die Varianz gilt

$$\sigma^2(Z_i) = \sigma^2(Y_i) - 2\mu \operatorname{cov}(Y_i, \tau_i) + \mu^2 \sigma^2(\tau_i).$$

Mit dem Zentralen Grenzwertsatz erhält man für den Erwartungswert μ das $(1 - \alpha)$ - Konfidenzintervall

$$\left[\hat{\mu} - \frac{z_{1-\alpha/2}}{\bar{\tau}} \sqrt{\frac{S^2}{N}}, \hat{\mu} + \frac{z_{1-\alpha/2}}{\bar{\tau}} \sqrt{\frac{S^2}{N}} \right],$$

wobei S^2 der erwartungstreue Schätzer für die Varianz der Z_i ist, also

$$S^2 = S_{11} - 2\bar{\mu}S_{12} + \bar{\mu}^2 S_{22}$$

mit den Stichprobenvarianzen

$$S_{11} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (Y_i - \bar{Y})^2, \quad S_{22} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\tau_i - \bar{\tau})^2$$

und der Stichprobenkovarianz

$$S_{12} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (Y_i - \bar{Y})(\tau_i - \bar{\tau}).$$

Die regenerative Simulation bietet den Vorteil, daß keine transiente Phase zu durchlaufen ist, und daß die Simulationslaufängen nicht angegeben werden müssen. Sie ist asymptotisch exakt und zudem verhältnismäßig leicht verständlich und implementierbar. Problematisch kann sein, daß ein zu untersuchendes System nicht regenerativ ist oder die Regenerationspunkte schwer zu bestimmen sind. Für regenerative Prozesse mit großem Zustandsraum können zudem die Regenerationszyklen sehr lang sein, wenn man einen einzelnen Regenerationszustand wählt. Diese Problematik wird jedoch häufig umgangen, indem man regenerative oder annähernd regenerative Mengen von Zuständen wählt. Gerade zur Simulation stationärer Größen in Markovketten, wie etwa Zustandswahrscheinlichkeiten, wird die regenerative Simulation häufig angewandt. Insbesondere bei Anwendung des

Importance–Sampling–Verfahrens bietet sie oft große Vorteile, wie wir an späterer Stelle sehen werden.

Abschließend wollen wir noch darauf hinweisen, daß bei der regenerativen Simulation auch andere Schätzer und daraus resultierende Konfidenzintervalle üblich sind, wie etwa als bekanntestes Beispiel die sogenannten Jackknife–Konfidenzintervalle. Der Grund für die Verwendung auch anderer als das beschriebene klassische Konfidenzintervall besteht darin, daß für die bei der regenerativen Simulation notwendige Bestimmung von Schätzern für Quotienten von Erwartungswerten in einigen Fällen mit kleinen Stichprobengrößen alternative Konfidenzintervalle besser sind, in dem Sinne, daß sie eine höhere Überdeckungswahrscheinlichkeit besitzen, d.h. daß das theoretische Konfidenzniveau und die tatsächliche Wahrscheinlichkeit für das Enthaltensein im konstruierten Konfidenzintervall näher beieinander liegen. Für wachsende Stichprobengrößen vermindert sich jedoch dieser Effekt, und zudem erfordern alle gebräuchlichen alternativen Ansätze einen Verwaltungsmehraufwand der mindestens quadratisch in der Anzahl der Simulationsläufe ist. Einen ausführlichen Vergleich von Schätzern und Konfidenzintervallen für den Quotienten von Erwartungswerten findet man in [Igl75].

3.2.3 Implementierungsfragen

In den meisten Fällen wird man nicht eine vorab fest gewählte Anzahl von Simulationsläufen oder Regenerationszyklen bzw. eine Simulation mit einer festen Anzahl von Batches durchführen und sich mit dem resultierenden Konfidenzintervall zufriedengeben. Vielmehr simuliert man, bis eine vorgegebene Genauigkeit erreicht ist, also so lange, bis die absolute oder relative halbe Breite des Konfidenzintervalls kleiner als eine vorgegebene Schranke ist. Dazu existieren im wesentlichen zwei Varianten, zweistufige und sequentielle Verfahren.

Bei zweistufigen Verfahren wird zunächst eine relativ kleine Anzahl von Simulationsläufen durchgeführt, und dann aus den daraus erhaltenen Konfidenzintervallen die Anzahl benötigter Simulationsläufe für die vorgegebene Genauigkeit berechnet. Genaueres dazu findet man etwa in [Ban98, BFS87, LK00]. Bei sequentiellen Verfahren wird sukzessive nach jedem Simulationslauf ein Konfidenzintervall berechnet und die Abbruchbedingung geprüft.

Bei der Implementierung der Verfahren zur statistischen Auswertung von Simulationsdaten ist sicher sofort klar, daß Erwartungswerte oder Stichprobenmittel mit geringem Speicheraufwand berechnet werden können. Es sind lediglich alle beteiligten Werte in einer Variablen sukzessive zu addieren und schließlich durch die Stichprobengröße zu dividieren. Bei der Berechnung von Stichprobenvarianzen und -kovarianzen stellt sich jedoch ein Problem. Führt man diese Berechnung direkt gemäß der Definitionen durch, so müssen alle beteiligten Zwischenergebnisse gespeichert werden. Dies kann, insbesondere

bei der gleichzeitigen Schätzung mehrerer Leistungsmaße, einen hohen Speicheraufwand erfordern. Daher ist es erstrebenswert, auch die Berechnung der Stichprobenvarianz und der Stichprobenkovarianz effizient durchzuführen. Ebenso ist es für sequentielle Verfahren hilfreich, die aktuellen Werte der Stichprobenmittel, -varianzen und -kovarianzen aus den jeweils vorherigen Werten iterativ zu berechnen. Wir wollen nun zeigen, wie dies erreicht werden kann. Es bezeichne \bar{Y}_n das Stichprobenmittel nach n Simulationsläufen bzw. Batches oder Regenerationszyklen, also das Stichprobenmittel einer Stichprobe der Größe n . Dann kann man \bar{Y}_n aus \bar{Y}_{n-1} berechnen durch

$$\bar{Y}_n = \bar{Y}_{n-1} + \frac{1}{n}(Y_n - \bar{Y}_{n-1}),$$

denn

$$\begin{aligned} \bar{Y}_n &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n-1} Y_i + \frac{1}{n} Y_n = \frac{n-1}{n} \cdot \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n-1} Y_i + \frac{1}{n} Y_n \\ &= \frac{n-1}{n} \cdot \bar{Y}_{n-1} + \frac{1}{n} Y_n \\ &= \frac{1}{n} ((n-1) \bar{Y}_{n-1} + Y_n) = \frac{1}{n} (n \bar{Y}_{n-1} - \bar{Y}_{n-1} + Y_n) \\ &= \bar{Y}_{n-1} + \frac{1}{n} (Y_n - \bar{Y}_{n-1}). \end{aligned}$$

Analog kann man die Stichprobenvarianz S_n^2 für Stichproben der Größe n berechnen. Dazu sei

$$Q_n^2 := (n-1)S_n^2.$$

Es gilt

$$Q_n^2 = Q_{n-1}^2 + \frac{n-1}{n} \cdot (Y_n - \bar{Y}_{n-1})^2,$$

und damit folgt

$$\begin{aligned} S_n^2 &= \frac{1}{n-1} Q_n^2 = \frac{1}{n-1} \left(Q_{n-1}^2 + \frac{n-1}{n} \cdot (Y_n - \bar{Y}_{n-1})^2 \right) \\ &= \frac{1}{n-1} \left((n-2)S_{n-1}^2 + \frac{n-1}{n} \cdot (Y_n - \bar{Y}_{n-1})^2 \right). \end{aligned}$$

Auch die bei regenerativer Simulation notwendige Berechnung von Kovarianzen kann iterativ durchgeführt werden. Es seien $S_{12}^{(n)}$ die Stichprobenkovarianz und $\bar{\tau}_n$ das Stichprobenmittel der Zyklenlänge nach n Regenerationszyklen. Dann gilt

$$S_{12}^{(n)} = \frac{1}{n-1} \left(S_{12}^{(n-1)} + \frac{\bar{Y}_{n-1} - (n-1)Y_n}{n-1} \cdot \frac{\bar{\tau}_{n-1} - (n-1)\tau_n}{n} \right).$$

Damit schließen wir den Abschnitt über allgemeine Methoden zur statistischen Analyse von Simulationsdaten und kommen zu speziellen Verfahren für die Simulation seltener Ereignisse.

3.3 Importance Sampling

Das am weitesten verbreitete und am häufigsten angewandte Verfahren zur Simulation seltener Ereignisse ist das Importance-Sampling-Verfahren, das gelegentlich auch als Verfahren der wesentlichen Stichproben bezeichnet wird. Importance Sampling ist eine allgemeine, also nicht nur für die Simulation seltener Ereignisse geeignete, Methode zur Varianzreduktion, die darauf basiert, das zugrundeliegende Wahrscheinlichkeitsmaß so zu verändern, daß die zu untersuchenden Ereignisse häufiger auftreten. Um die auf diese Weise systematisch verfälschten Ergebnisse auf das Originalmaß zurückzurechnen, werden sie mit einem Korrekturfaktor, dem sogenannten Likelihood-Quotienten (*likelihood ratio*), multipliziert. Die daraus resultierenden Schätzer für die gesuchten Größen sind dabei ohne zusätzliche Annahmen erwartungstreu. Leider gibt es keine allgemeine Form des Importance Sampling, die in jedem Fall eine Varianzreduktion garantiert. Es existieren jedoch zahlreiche Strategien zur Durchführung der Veränderung des Wahrscheinlichkeitsmaßes, des sogenannten Maßwechsels (*change of measure*), die für bestimmte Modelle zur Varianzreduktion führen. Häufig werden dabei Modellparameter, die die Seltenheit beeinflussen, verändert, und man spricht auch von Parameter-Biasing.

Importance Sampling wurde bereits in den 40er Jahren im Rahmen von Untersuchungen in der Nuklearphysik von Forschern wie u.a. Fermi, Kahn, Metropolis, von Neumann und Ulam angewendet [KM53], hauptsächlich zur Bestimmung komplizierter mehrdimensionaler Integrale. Bis zum Beginn der 80er Jahre blieben effiziente Monte-Carlo-Verfahren für statische Systeme in der Nuklear- und Quantenphysik die Hauptanwendungsgebiete für Importance Sampling. Ausführliche Beschreibungen zahlreicher früher Anwendungen findet man in [HH64] und [Hal70]. Eine Arbeit von Siegmund [Sie76] bildet die Grundlage für die Anwendbarkeit des Verfahrens auf zahlreiche weitere Gebiete. Ein Zusammenhang zwischen Importance Sampling und der Theorie großer Abweichungen wird erstmals in [CFM83] hergestellt. Diese Arbeit enthält zudem die erste Anwendung von Importance Sampling auf die Simulation seltener Ereignisse in Warteschlangenmodellen für Kommunikationssysteme.

Parallel dazu wurde Importance Sampling auch im Bereich der Nuklearphysik im Zusammenhang mit Zuverlässigkeitsuntersuchungen weiterentwickelt. So wurde in [LB84] mit dem Failure Biasing eine wichtige Heuristik eingeführt, die später auch in vielen Arbeiten aus dem Bereich der Computer- und Kommunikationssysteme modifiziert und erweitert wurde (siehe 4.3.2). Den mathematischen Rahmen für Markovprozesse und verallgemeinerte Semi-Markovprozesse (*generalized semi-Markov processes, GSMP*) liefert

eine Arbeit von Glynn und Iglehart [GI89], die somit eine wichtige Grundlage für die Anwendung von Importance Sampling insbesondere auf zahlreiche Modelle im Bereich von Computer- und Kommunikationssystemen, Finanz- und Versicherungsmathematik, aber auch in diversen weiteren Gebieten, in denen Markovmodelle üblich sind, darstellt.

Im Bereich der Zuverlässigkeitsmodelle für Computer- und Kommunikationssysteme, fehlertoleranter Systeme, wurde die erwähnte Heuristik aus dem Bereich der Nuklearphysik verallgemeinert und weiterentwickelt. Dabei wurde Importance Sampling insbesondere für eine eingeschränkte Klasse von Markovschen Zuverlässigkeitssystemen erfolgreich angewandt, und vielfach konnten dafür unter gewissen Voraussetzungen Effizienzergebnisse bewiesen werden. Die wichtigsten Arbeiten seien hier in chronologischer Reihenfolge genannt, [GHS87, Sha90, Car92, GSH⁺92, HNS92, JS92, NHS92, GHNS93, NSHG93, HSN94, Nak94, Sha94a, Sha94b, Nak95, Nak96, AS98]. Allerdings erweist sich die Verallgemeinerung auf weniger eingeschränkte Markovmodelle oder gar nicht-Markovsche Modelle als außerordentlich schwierig.

Gleichzeitig wurde im Bereich der Warteschlangenmodelle seit Ende der 80er Jahre eine Vielzahl von Arbeiten zur Entwicklung neuer Heuristiken für Warteschlangennetze und zu Beweisen und Widerlegungen von Effizienzeigenschaften in einfachen Einbediener- oder Tandemsystemen veröffentlicht, als wichtigste zu nennen sind in chronologischer Reihenfolge [Fre89, PW89, FLA91, Sad91, Tso92, DT93b, KW93, Sad93, WF93, GK95, LR97, Hee98b, Rid98, KN99b, dBNR00, Rid00, KN02], sowie die Dissertationen [Yan95, Hsi97, Hee98a, dB00]. Eine Verbindung zu effektiven Bandbreiten in Kommunikationsnetzen stellen die Arbeiten [CHJS94] und [VCW94] her. Daraus resultieren Verfahren speziell für ATM-Netze. Weitere Arbeiten in diesem Bereich sind [Man98, FDL99, KN99a, DGPT00, TPD00]. Dennoch ist bis heute die Entwicklung effizienter Verfahren für Warteschlangennetze, selbst für Markovsche Tandemsysteme, ein offenes Problem.

Einen detaillierten Überblick über die Anwendung von Importance Sampling auf Warteschlangen- und Zuverlässigkeitsmodelle für Computer- und Kommunikationssysteme mit dem Stand der Forschung bis zum Jahre 1995 und einem ausführlichen Literaturverzeichnis findet man in [Hei95]. Weitere Übersichtsartikel sind [AR95, Sha95, Jun03, NSN01].

Ein weiteres wichtiges Anwendungsgebiet für Importance Sampling im Bereich der Kommunikationssysteme ist die Bestimmung kleiner Bitfehlerraten und -wahrscheinlichkeiten in digitalen Kommunikationskanälen, erstmals in [SB80] beschrieben. Auch dazu existiert eine Reihe von Arbeiten mit Vorschlägen zu Heuristiken und Effizienzbeweisen, etwa [Jer84, LY88, JHSR89, LY91, OA92, ADT93, CLSY93, Sch93]. Eine Übersicht bieten hier [JBS92, SSG97, Sri02]. Darüberhinaus spielt Importance Sampling auch eine wichtige Rolle in der Finanz- und Versicherungsmathematik, etwa bei der Bestimmung von Ruinwahrscheinlichkeiten oder der Optionsbewertung [LN92, GHS99a, GHS99b, JSC99, SF00].

In zunehmendem Maße gewinnen sowohl in der Versicherungs- und Finanzmathematik als auch im Bereich von Computer- und Kommunikationssystemen sogenannte endlastige Wahrscheinlichkeitsverteilungen (*heavy-tailed distributions*) und insbesondere eine Teilklasse, die subexponentiellen Verteilungen [GK98b, GJK99, Sig99], immer mehr an Bedeutung, beispielsweise bei der Modellierung von Katastrophen, von Datenverkehr oder Benutzerverhalten in Rechnernetzen oder von Bedienzeiten. Da die analytische Behandlung solcher Verteilungen, etwa mittels der Theorie großer Abweichungen, meist nicht möglich ist, wird auch hier in letzter Zeit immer häufiger auf stochastische Simulation und im Falle seltener Ereignisse insbesondere auf Importance Sampling zurückgegriffen, siehe [JSC99, ABH00, BM00, BS00, GHS00, JS02]. Jedoch erweist sich das Vorliegen endlastiger Verteilungen auch bei der Simulation als zusätzliche Schwierigkeit.

Eine häufig von Anwendern gestellte Forderung ist die nach Softwareunterstützung oder Tool Support, also die Integration von Verfahren zur Simulation seltener Ereignisse, insbesondere Importance Sampling, in Softwarepakete. Es gibt bisher nur wenige Softwarepakete zur Leistungsbewertung, die Techniken der Simulation seltener Ereignisse nutzen. Zu nennen sind hier für Markovsche Zuverlässigkeitssysteme das System SAVE[¶], das eine Modellierungssprache zur Spezifikation des Modells enthält, woraus die zugrundeliegende Markovkette erzeugt wird, die dann numerisch oder simulativ gelöst werden kann. SAVE beinhaltet eine Implementierung der Balanced-Failure-Biasing-Heuristik (siehe 4.3.2) für Importance Sampling. Im Softwarepaket UltraSAN^{||} wird ebenfalls aus einer gegebenen Spezifikation die Markovkette erzeugt, die dann numerisch oder simulativ gelöst werden kann. Im Gegensatz zu SAVE ist hier keine spezielle Heuristik oder Strategie für Importance Sampling vorgegeben, sondern der Benutzer kann bzw. muß den Maßwechsel selbst angeben. Dies erschwert natürlich die Benutzung von UltraSAN durch Laien auf dem Gebiet des Importance Sampling.

Wünschenswert ist eine Unterstützung, die auch Benutzern ohne Kenntnisse von Importance Sampling die Simulation seltener Ereignisse ermöglicht. Die Schwierigkeit dabei besteht jedoch gerade darin, daß es keine allgemeine oder zumindest für eine große Klasse von Modellen zur Leistungsbewertung geeignete Maßwechselstrategie gibt. Dies unterstreicht also auch aus Anwendersicht die Notwendigkeit neuer möglichst allgemeiner und automatischer Methoden zur Bestimmung von Maßwechseln. Die Integration von Importance-Sampling-Techniken in das objektorientierte, auf der Sprache C++ basierende Simulationspaket OMNeT++ [Var02], an dessen Weiterentwicklung wir aktiv mitwirken, ist in Planung. Hierfür wurden bereits erste Voraussetzungen für eine Benutzerunterstützung geschaffen. Dies beinhaltet die für dieses System zunächst notwendige Erweiterung in Bezug auf die Generierung zufälliger Größen [SVM03b, SVM03a], die Möglichkeit angemessener statistischer Auswertungen sowie erste Ansätze zur Integration von Importance-Sampling-Methoden.

[¶]System Availability Estimator, [GCD⁺86]

^{||}Ultra Stochastic Activity Network, [CFJ⁺91, OS94, SOQW95]

3.3.1 Einführendes Anwendungsbeispiel

Wir haben nun bereits mehrfach erwähnt, daß die Idee beim Importance Sampling darin besteht, das zugrundeliegende Wahrscheinlichkeitsmaß so zu verändern, daß seltene Ereignisse häufiger auftreten, und dann die Ergebnisse auf das Originalmaß zurückzurechnen. Wir wollen, bevor wir das Verfahren formal beschreiben, zunächst die praktische Durchführung demonstrieren.

Gegeben sei eine mit Parameter $\lambda > 0$ exponentiell verteilte Zufallsvariable X mit Dichte f , also mit

$$f(x) = \lambda e^{-\lambda x}, \quad x > 0, \quad E_f[X] = \frac{1}{\lambda}.$$

Zu schätzen sei die Wahrscheinlichkeit

$$\gamma := P\{X > c\} = E[I_{\{X > c\}}],$$

daß X einen vorgegebenen Wert c überschreitet, also eine sogenannte Tail-Wahrscheinlichkeit. Eine Standard-Simulation für eine Stichprobe der Größe N arbeitet nach dem folgenden Algorithmus:

```

p := 0;
for i = 1 to N do
    Erzeuge exp( $\lambda$ )-verteilte Zufallszahl x;
    if x > c then p := p + 1; fi;
od;
p := p/N.

```

Damit ist p Schätzung für γ . Ist der Wert c jedoch wesentlich größer als der Erwartungswert $E[X]$, so ist $\{X > c\}$ ein seltenes Ereignis. Eine Möglichkeit, Importance Sampling auf diesen Fall anzuwenden, um das seltene Ereignis häufiger zu erzeugen, besteht darin, eine mit Parameter μ , $0 < \mu < \lambda$, exponentiell verteilte Zufallsvariable mit Dichte f^* zu simulieren, also mit

$$f^*(x) = \mu e^{-\mu x}, \quad x > 0, \quad E_{f^*}[X] = \frac{1}{\mu},$$

wobei $E_{f^*}[X] > E_f[X]$ gilt, und dann die so erhaltenen Beobachtungen auf die $\exp(\lambda)$ -verteilte Zufallsvariable X umzurechnen. Als Korrekturfaktor für diese Umrechnung dient der Likelihood-Quotient

$$L(x) := \frac{f(x)}{f^*(x)} = \frac{\lambda}{\mu} e^{(\mu-\lambda)x}.$$

Eine solche Importance-Sampling-Simulation für eine Stichprobe der Größe N arbeitet

dann nach dem folgenden Algorithmus:

```

p := 0;
for i = 1 to N do
    Erzeuge exp( $\mu$ )-verteilte Zufallszahl x;
    if x > c then p := p + 1 ·  $\frac{f(x)}{f^*(x)}$ ; fi;
od;
p := p/N.

```

Es ist dann p wieder Schätzung für γ . Das Beispiel verdeutlicht die Funktionsweise von Importance Sampling und gleichzeitig die Problematik bei der Anwendung des Verfahrens. So könnte beispielsweise die Wahl einer nicht exponentiell verteilten Zufallsvariable für die Importance-Sampling-Simulation bessere Ergebnisse liefern als die Wahl einer exponentiell verteilten Zufallsvariablen. Zudem bleibt unabhängig von der Wahl der Verteilungsfamilie offen, wie die jeweiligen Parameter der Verteilung zu wählen sind. So kann es etwa passieren, daß eine ungünstige Wahl des Parameters μ nicht zu einer Reduktion sondern zur Vergrößerung der Varianz führt. Das Hauptproblem beim Importance Sampling ist also das Auffinden eines neuen Wahrscheinlichkeitsmaßes, so, daß eine Simulationsbeschleunigung erreicht wird. Die Schwierigkeiten, die dies häufig bereitet, beschreibt Kleijnen [Kle78] wie folgt:

Unfortunately, my own experience with this technique, applied to a complicated practical situation (a telephone exchange) turned out to be very disappointing: much mental energy was spent and variance didn't decrease at all.

3.3.2 Formale Grundlagen

Die formale Grundlage für Importance Sampling in allgemeiner Form basiert auf einer Anwendung des Satzes von Radon–Nikodym (siehe auch 2.3 und [Bau92]), und die Radon–Nikodym–Derivierte, also der Likelihood–Quotient, erfüllt die Rolle des Korrekturfaktors. Wir wollen wegen der zentralen Bedeutung an dieser Stelle die Voraussetzungen für Wahrscheinlichkeitsmaße nochmals angeben. Für zwei Wahrscheinlichkeitsmaße P, Q auf einem Maßraum (Ω, \mathcal{A}) gelte

$$\forall A \in \mathcal{A}: Q\{A\} = 0 \Rightarrow P\{A\} = 0,$$

das bedeutet, P ist auf \mathcal{A} absolut stetig bezüglich Q . Dann existiert nach dem Satz von Radon–Nikodym die Radon–Nikodym–Derivierte $\frac{dP}{dQ}$, und es gilt

$$\forall A \in \mathcal{A}: P\{A\} = \int_A \frac{dP}{dQ} dQ.$$

Man nennt die Radon–Nikodym–Derivierte auch den Likelihood–Quotienten von P und Q . Die Bedingung der absoluten Stetigkeit in der angegebenen Form ist äquivalent zu der Bedingung

$$\forall A \in \mathcal{A} : P\{A\} > 0 \Rightarrow Q\{A\} > 0.$$

Es ist also auch $Q\{A\} > 0$ möglich, wenn $P\{A\} = 0$ gilt. Das bedeutet, daß das Wahrscheinlichkeitsmaß Q Ereignissen, die unter dem Wahrscheinlichkeitsmaß P unmöglich sind, eine positive Wahrscheinlichkeit zuordnen kann. Diese Tatsache kann sich insbesondere bei der Suche nach Maßwechseln für das Importance–Sampling–Verfahren als nützlich erweisen.

Die für Importance Sampling grundlegende Eigenschaft ist die Identität von Erwartungswerten gemäß P und von mit dem Likelihood–Quotienten gewichteten Erwartungswerten gemäß Q . Sei nun also L eine Version des Likelihood–Quotienten und H eine Zufallsvariable auf (Ω, \mathcal{A}) . Dann gilt

$$E_P[H] = \int H(\omega) dP = \int H(\omega) L(\omega) dQ = E_Q[HL]. \quad (3.8)$$

Insbesondere ist die Wahrscheinlichkeit eines Ereignisses der Erwartungswert seiner Indikatorfunktion. Definiert man also $H(\omega) := I_A(\omega)$, so erhält man für die Wahrscheinlichkeit jedes Ereignisses $A \in \mathcal{A}$

$$P\{A\} = E_P[I_A] = \int I_A(\omega) dP = \int I_A(\omega) L(\omega) dQ = E_Q[I_A L]. \quad (3.9)$$

Man nennt bei Anwendung von Importance Sampling das Wahrscheinlichkeitsmaß Q auch das Importance–Sampling–Maß, abgekürzt IS–Maß, und die korrespondierende Dichte die Importance–Sampling–Dichte oder kurz IS–Dichte.

Häufig werden in der Literatur die Gleichungen (3.8) und (3.9) mit den obigen Voraussetzungen als die Grundlagen von Importance Sampling angegeben. Die genannten Voraussetzungen stellen in dieser Form jedoch unnötige Einschränkungen an die Wahl der IS–Dichte dar. Wir sehen leicht, daß zur Berechnung des Erwartungswertes in (3.8) nur solche Integranden etwas beitragen, für die $H(\omega) \neq 0$ gilt. Somit reicht es aus, die absolute Stetigkeit von P bezüglich Q nur auf $\{A \in \mathcal{A} : (\exists \omega \in A : H(\omega) \neq 0)\}$ vorzusetzen. Ebenso reicht bei der Berechnung der Wahrscheinlichkeit nach (3.9) aus, die absolute Stetigkeit auf den Mengen, deren Schnitt mit A nicht leer ist, vorzusetzen, also auf $A \cap \tilde{\mathcal{A}} := \{A \cap \tilde{A} : \tilde{A} \in \mathcal{A}\}$, der Spur– σ –Algebra von \mathcal{A} in A . Da $A \in \mathcal{A}$ gilt, besteht $A \cap \tilde{\mathcal{A}}$ gerade aus allen zu \mathcal{A} gehörenden Teilmengen von A , also aus allen Ereignissen, die A umfaßt. Damit ist dann für Ereignisse $\tilde{A} \in \mathcal{A}$ mit $A \cap \tilde{A} = \emptyset$ auch dann $Q\{\tilde{A}\} = 0$ erlaubt, wenn $P\{\tilde{A}\} > 0$ ist. Diese Tatsache erweist sich für Importance Sampling als sehr nützlich, und wir werden bei der Diskussion eines optimalen IS–Schätzers

sogar sehen, daß sie für dessen Existenz notwendig ist. Da wir Obiges aus den allgemeinen Importance–Sampling–Formeln gefolgert haben, formulieren wir dies als

Korollar 3.1 Zur Berechnung des Erwartungswertes in (3.8) bzw. zur Berechnung der Wahrscheinlichkeit in (3.9) reicht es aus, die absolute Stetigkeit von P bezüglich Q auf der Menge

$$\{A \in \mathcal{A} : (\exists \omega \in A : H(\omega) \neq 0)\}$$

bzw. auf der Menge

$$A \cap \mathcal{A} := \{A \cap \tilde{A} : \tilde{A} \in \mathcal{A}\}$$

vorauszusetzen.

Im weiteren Verlauf dieser Arbeit wollen wir auf die eher maßtheoretisch orientierte Notation verzichten. Die Darstellung in allgemeiner Form ermöglicht uns, die konkreten Anwendungsfälle als Spezialfall abzuleiten, und wir müssen dann lediglich jeweils die zur absoluten Stetigkeit korrespondierende Bedingung sowie die spezielle Form des Likelihood–Quotienten angeben, wobei wir uns jeweils der im betrachteten Anwendungsbereich gebräuchlicheren Notationen bedienen können.

Sei X eine stetige reelle Zufallsvariable mit Dichte f , und seien g eine reelle Funktion und f^* eine weitere Dichte mit $f^*(x) = 0 \Rightarrow g(x)f(x) = 0$ für alle $x \in \mathbb{R}$ und

$$L(x) := \begin{cases} \frac{f(x)}{f^*(x)}, & \text{falls } f^*(x) \neq 0, \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

der Likelihood–Quotient von f und f^* . Dann ist

$$\gamma := E_f[g(X)] = \int_{-\infty}^{\infty} g(x)f(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} g(x)L(x)f^*(x)dx = E_{f^*}[g(X)L(X)].$$

Es ist dabei zu beachten, daß für $f^*(x) = 0$ nur $g(x)f(x) = 0$ und damit die absolute Stetigkeit von f bezüglich f^* nicht für alle $x \in \mathbb{R}$, sondern nur für solche mit $g(x) \neq 0$ gefordert wird. Insbesondere ist also $f^*(x) = 0$ und $f(x) \neq 0$ erlaubt, falls $g(x) = 0$ gilt.

Durch Ersetzen der Integrationen durch Summationen in der Herleitung erhält man die entsprechende Identität für diskrete Zufallsvariablen X mit Wahrscheinlichkeitsverteilungen P und P^* , wenn man $f(x) := p(x) = P\{X = x\}$ und $f^*(x) := p^*(x) = P^*\{X = x\}$ setzt, wobei wiederum P^* die Bedingung der absoluten Stetigkeit erfüllen muß. Für Zufallsvektoren gelten die selben Gleichungen, wobei f und f^* jeweils mehrdimensionale Dichten oder – im diskreten Fall – mehrdimensionale Verteilungen und die Argumente x entsprechende Vektoren sind. Für diskrete und stetige Markovketten entspricht f

der Wahrscheinlichkeitsverteilung für Pfade der originalen Kette, die eindeutig durch die Übergangs- bzw. Generatormatrix und eine Anfangsverteilung bestimmt ist, und f^* ist Dichte eines absolut stetigen Maßes für die Pfadwahrscheinlichkeiten eines nicht notwendigerweise Markovschen Prozesses, wobei die klassische Variante des Importance Sampling für Markovketten als IS-Maß wiederum eine Markovkette wählt. Genauer hierzu diskutieren wir im Rahmen der ausführlichen Behandlung von Importance Sampling für Markovketten in Abschnitt 4. Wir beschreiben hier zunächst allgemein die Schätzer und wichtige Eigenschaften für Importance Sampling. Dabei ist es wichtig, daran zu denken, daß die Bezeichnungen f, f^* und L für die Originaldichte, die IS-Dichte und den Likelihood-Quotienten für jeden der genannten Fälle, also Zufallsvariablen und -vektoren sowie Markovketten, und darüberhinaus für weitere stochastische Prozesse, wie etwa verallgemeinerte Semi-Markovprozesse, gewählt sein können, jeweils mit der entsprechenden oben diskutierten Bedeutung. Die Formeln und Ergebnisse gelten also in allgemeinem Rahmen, es ist lediglich die Interpretation der Dichten unterschiedlich.

Für eine Stichprobe X_1, X_2, \dots, X_N bildet man den aufgrund der Erwartungstreue des Stichprobenmittels für Erwartungswerte und obigen Überlegungen erwartungstreuen Importance-Sampling-Schätzer (IS-Schätzer)

$$\hat{\gamma}_{IS} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(X_i)L(X_i) \quad (3.10)$$

für γ , und für die Varianz des IS-Schätzers ergibt sich

$$\begin{aligned} \sigma^2(\hat{\gamma}_{IS}) &= \text{VAR}[\hat{\gamma}_{IS}] = \text{VAR}\left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(X_i)L(X_i)\right]. \quad (3.11) \\ &= \frac{1}{N^2} \text{VAR}\left[\sum_{i=1}^N g(X_i)L(X_i)\right] = \frac{1}{N} \text{VAR}[g(X)L(X)] \\ &= \frac{1}{N} E_{f^*}[(g(X)L(X) - \gamma)^2] \\ &= \frac{1}{N} E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2 - 2g(X)L(X)\gamma + \gamma^2] \\ &= \frac{1}{N} (E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] - 2\gamma E_{f^*}[g(X)L(X)] + \gamma^2) \\ &= \frac{1}{N} (E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] - 2\gamma^2 + \gamma^2) \\ &= \frac{1}{N} (E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] - \gamma^2). \quad (3.12) \end{aligned}$$

3.3.3 Optimale Schätzer

Da Varianzen nichtnegativ sind, kann ein Schätzer minimale Varianz von Null haben, und man folgert für einen optimalen IS-Schätzer

$$\frac{1}{N} E_{f^*} [(g(X)L(X) - \gamma)^2] \stackrel{!}{=} 0 \implies f_{opt}^*(x) = \frac{g(x)f(x)}{\gamma},$$

und die optimale IS-Dichte hat die Form einer bedingten Dichte. Damit ist der optimale IS-Schätzer jedoch von der gesuchten Größe γ abhängig und somit nicht verfügbar. Zudem wäre es, selbst wenn die optimale IS-Dichte bekannt wäre, im allgemeinen schwierig, in der Simulation Zufallszahlen gemäß dieser bedingten Dichte zu erzeugen.

Eine äquivalente ausführlichere Darstellung des optimalen IS-Schätzers ist gegeben durch

$$f_{opt}^*(x) = \begin{cases} \frac{g(x)f(x)}{\gamma}, & \text{falls } g(x) \neq 0, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.13)$$

Wir sehen also, daß die Existenz des optimalen IS-Schätzers nicht garantiert ist, wenn man die absolute Stetigkeit von f bezüglich f^* auf dem gesamten Definitionsbereich voraussetzt, sondern nur genau dann, wenn man sie nur für solche Argumente mit $g(x) \neq 0$ fordert.

Im Eingangsbeispiel zur Simulation seltener Ereignis war speziell g die Indikatorfunktion eines Ereignisses A . Für diesen zur Schätzung von Wahrscheinlichkeiten wichtigen Spezialfall erhält man

$$\sigma^2(\hat{\gamma}_{IS}) = \text{VAR}[\hat{\gamma}_{IS}] = \frac{1}{N} (E_{f^*}[I_A(X)L(X)^2] - \gamma^2)$$

und die optimale IS-Dichte

$$f_{opt}^*(x) = \frac{I_A(x)f(x)}{\gamma} = \begin{cases} \frac{f(x)}{\gamma}, & \text{falls } x \in A, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.14)$$

Es ist also die bedingte Verteilung mit der Bedingung, daß das seltene Ereignis auftritt, optimal. Wieder sehen wir, daß die Existenz des optimalen IS-Schätzers nur garantiert ist durch die Einschränkung der absoluten Stetigkeit, in diesem Fall auf die Spur- σ -Algebra $A \cap \mathcal{A}$, also man fordert $f^*(x) = 0 \implies I_A(x)f(x) = 0$. Verwendet man einen Schätzer mit Varianz Null, so bedeutet das in der Praxis, daß in Simulationen immer die gleiche Ausgabe produziert wird. Auch dies impliziert insbesondere, daß kein Simulationslauf generiert wird, in dem das seltene Ereignis nicht auftritt.

Beispiel 3.5 (Optimale IS-Dichte für Tail-Wahrscheinlichkeiten von Exponentialverteilungen) Für unser Beispiel, die Berechnung von $\gamma := P\{X > c\}$ mit X exponentiell verteilt mit Parameter $\lambda > 0$ und einem $c > 0$, erhalten wir aus der Kenntnis der exakten Wahrscheinlichkeit $\gamma = 1 - P\{X \leq c\} = 1 - F(x) = e^{-\lambda c}$ die optimale IS-Dichte

$$f_{opt}^*(x) = \frac{f(x)}{\gamma} = \frac{\lambda e^{-\lambda x}}{e^{-\lambda c}} = \frac{\lambda}{e^{-\lambda c}} e^{-\lambda x} = \lambda e^{\lambda c} e^{-\lambda x}, \quad x > c.$$

Man überprüft leicht, daß dies tatsächlich eine Dichte ist:

$$\int_c^\infty \lambda e^{-\lambda c} e^{-\lambda x} dx = \lambda e^{\lambda c} \int_c^\infty e^{-\lambda x} dx = \lambda e^{\lambda c} \left[-\frac{1}{\lambda} e^{-\lambda x} \right]_c^\infty = \lambda e^{\lambda c} \frac{1}{\lambda} e^{-\lambda c} = 1.$$

Im allgemeinen, insbesondere für kompliziertere Dichten, ist auch f_{opt}^* komplizierter, und es ist klar, daß selbst bei Kenntnis von f_{opt}^* die Erzeugung entsprechender Zufallszahlen ein erhebliches Problem darstellen kann. Ist die exakte Wahrscheinlichkeit unbekannt, wie in praktischen Anwendungen gegeben, so ist die direkte Berechnung selbstverständlich nicht möglich. Das Beispiel zeigt jedoch, daß selbst in einem so einfachen Fall wie der Exponentialverteilung die optimale IS-Dichte nicht mehr zur selben Klasse von Verteilungen korrespondiert. Sie ist verschoben und skaliert.

Mit unseren Voraussetzungen existiert also immer ein optimaler IS-Schätzer mit Varianz Null, der jedoch von der gesuchten Größe abhängig ist. Da es sicherlich nicht erforderlich wäre, diese Größe per Simulation zu bestimmen, wenn sie bekannt wäre, ist also der optimale Schätzer im allgemeinen nicht verfügbar. Damit muß es also das Ziel sein, möglichst gute Maßwechsel zu finden, die eine große Varianzreduktion ermöglichen, oder, den optimalen Schätzer ohne Kenntnis der gesuchten Größe zu bestimmen.

Eine naheliegende und zunächst plausibel erscheinende Idee besteht darin, ausgehend von einer Anfangsschätzung ϵ für γ anhand der Form der Dichte, die dem optimalen IS-Schätzer zugrundeliegt, die IS-Dichte iterativ anzunähern. Dieser Ansatz, Maßwechsel oder IS-Dichten direkt über die spezielle Form der optimalen IS-Dichte zu finden, scheidet jedoch, wie wir nun formal darlegen.

Sei X Zufallsvariable auf einem Wahrscheinlichkeitsraum (Ω, \mathcal{A}, P) mit Dichte f und g eine Funktion auf X . Es gelte für ein $\epsilon \neq 0$

$$f^*(x) = \begin{cases} \frac{g(x)f(x)}{\epsilon}, & \text{falls } g(x) \neq 0, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.15)$$

Da f^* eine Dichte sein muß, also

$$\int_{\Omega} f^*(x) dx = 1$$

gilt, folgt

$$\int_{\Omega} f^*(x) dx = \int_{\Omega} \frac{g(x)f(x)}{\epsilon} dx = \frac{1}{\epsilon} \int_{\Omega} g(x)f(x) dx = \frac{1}{\epsilon} E_f[g(X)] = 1$$

$$\Rightarrow \epsilon = E_f[g(X)] = \gamma \Rightarrow f^* = f_{opt}^*.$$

Wir haben damit also gezeigt

Lemma 3.1 Die optimale IS-Dichte ist die einzige Dichte der Form (3.15) und durch diese Form eindeutig bestimmt.

Aussichtsreicher als der beschriebene Ansatz ist die Ausnutzung der Form des Likelihood-Quotienten. Betrachten wir für den optimalen IS-Schätzer den Likelihood-Quotienten, so ergibt sich

$$\forall x \in \{x \in \mathcal{A} : g(x) \neq 0\} : L(x) = \frac{f(x)}{f_{opt}^*(x)} = \frac{\gamma}{g(x)} \quad (3.16)$$

und speziell für den Fall, daß g Indikatorfunktion eines Ereignisses $A \in \mathcal{A}$ ist

$$\forall x \in A : L(x) = \frac{f(x)}{f_{opt}^*(x)} = \gamma. \quad (3.17)$$

Zwar können auch diese Gleichungen nicht direkt ausgenutzt werden, um den optimalen IS-Schätzer zu bestimmen oder anzunähern, sie liefern jedoch die Information, daß für gleiche Werte von g auch die Likelihood-Quotienten gleich sind, also

$$\forall x, x' \in \{x \in \mathcal{A} : g(x) \neq 0\} \text{ mit } g(x) = g(x') : L(x) = L(x') = \frac{\gamma}{g(x)} \quad (3.18)$$

und wieder speziell für Indikatorfunktionen

$$\forall x, x' \in A : L(x) = L(x') = \gamma. \quad (3.19)$$

Diese Identitäten, die wir sowohl für den Fall nicht näher spezifizierter Funktionen g als auch für Indikatorfunktionen die *Likelihood-Quotienten-Bedingung* oder kurz die *LQ-Bedingung* nennen, erweisen sich als nützliche Richtlinie für gute Maßwechsel, also beim Auffinden guter IS-Dichten. Es lassen sich zudem daraus sogar optimale Maßwechsel ohne Kenntnis von γ berechnen, wie wir später für einige Beispiele von Markovketten zeigen werden. Es reicht dabei, zu wissen, daß die betreffenden Likelihood-Quotienten gleich sind. Selbst, falls diese Berechnung nicht möglich oder, besser gesagt, ebenso aufwendig wie die Berechnung von γ ist, liefert die LQ-Bedingung Richtlinien für gute Maßwechsel, da sie auch ohne Kenntnis von γ , allein anhand der Struktur der Funktion g , etwa für

Indikatorfunktionen aufgrunddessen, daß γ eine Wahrscheinlichkeit ist, zumindest Schranken für die Likelihood-Quotienten vorgibt. Wir wollen nun klären und formalisieren, was unter einem guten Maßwechsel zu verstehen ist und welche Eigenschaften für IS-Schätzer erstrebenswert sind.

3.3.4 Effizienzkriterien

Zur Beurteilung der Güte von IS-Schätzern verwendet man im wesentlichen zwei Effizienzkriterien, beschränkte relative Fehler und asymptotische Optimalität oder asymptotische Effizienz. Bei der direkten Simulation seltener Ereignisse konvergiert der Simulationsaufwand gegen unendlich, wenn die zu bestimmende Wahrscheinlichkeit gegen Null konvergiert, vgl. Formel (3.5). In vielen Fällen konvergiert der Aufwand sogar exponentiell schnell gegen unendlich, da die betreffende Wahrscheinlichkeit exponentiell schnell als Funktion eines „Seltenheitsparameters“ gegen Null konvergiert, wie wir im Abschnitt 2 über die Theorie großer Abweichungen gesehen haben. Insbesondere trifft dies auf Überlauf- und Verlustwahrscheinlichkeiten sowie Wahrscheinlichkeiten für exzessive Warte- und Verweilzeiten in Warteschlangenmodellen zu, und allgemeiner für Tail-Wahrscheinlichkeiten von Verteilungen.

Hat ein Schätzer beschränkten relativen Fehler, so bleibt der Aufwand unabhängig von der Seltenheit des Ereignisses beschränkt. Ist ein Schätzer asymptotisch optimal oder asymptotisch effizient, so wächst der Simulationsaufwand nur mit subexponentieller Rate. Die Definition von Schätzern mit beschränkten relativen Fehlern gilt dabei nicht nur für IS-Schätzer, sondern läßt sich allgemein für den relativen Fehler von Schätzern mit einer entsprechenden Parametrisierung formulieren, ist jedoch für uns irrelevant. Ebenso gibt es allgemeine Definitionen für asymptotische Optimalität oder Effizienz von Schätzern. Wir definieren diese Kriterien im folgenden speziell für IS-Schätzer.

In Abschnitt 3.1 haben wir gesehen, daß bei direkter Simulation, die einer Importance-Sampling-Simulation mit dem Originalmaß als IS-Maß und einem Likelihood-Quotienten mit Wert Eins entspricht, der relative Fehler (Variationskoeffizient) des Schätzers gegen unendlich konvergiert, wenn die gesuchte Größe γ gegen Null konvergiert, siehe (3.4). Für den relativen Fehler von IS-Schätzern gilt

$$\begin{aligned} \delta_{rel}(\hat{\gamma}_{IS}) &= \frac{\sqrt{\text{VAR}[\hat{\gamma}_{IS}]}}{E[\hat{\gamma}_{IS}]} = \frac{\sqrt{\text{VAR}[\hat{\gamma}_{IS}]}}{\gamma} = \frac{\sqrt{\frac{1}{N} \text{VAR}[g(X)L(X)]}}{\gamma} \\ &= \frac{\sqrt{\text{VAR}[g(X)L(X)]}}{\gamma\sqrt{N}} = \frac{\sqrt{E_{f^*}[g(X)^2L(X)^2] - \gamma^2}}{\gamma\sqrt{N}} \\ &\leq \frac{\sqrt{E_{f^*}[g(X)^2L(X)^2]}}{\gamma\sqrt{N}}. \end{aligned}$$

Die zu schätzende Größe γ hänge nun von einem Seltenheitsparameter m ab, so, daß je größer m , desto kleiner γ , also $\gamma = \gamma(m)$ mit

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \gamma(m) = 0. \quad (3.20)$$

Mit dieser Parametrisierung gilt für den relativen Fehler des IS-Schätzers für $\gamma(m)$

$$\delta_{rel}(\hat{\gamma}_{IS}(m)) = \frac{\sqrt{E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] - \gamma(m)^2}}{\gamma(m)\sqrt{N}}.$$

Formaler ausgedrückt betrachtet man also eine monoton fallende Folge $(\gamma(m))$, etwa für die Wahrscheinlichkeit von Ereignissen eine Familie von Ereignissen A_m mit Wahrscheinlichkeiten $\gamma(m) = P\{A_m\} = E[I_{A_m}]$ und $m_1 \leq m_2 \Rightarrow \gamma(m_1) \geq \gamma(m_2)$ sowie der Eigenschaft (3.20). Dazu ist eine Familie von IS-Schätzern $\hat{\gamma}_{IS}(m)$ definiert, so daß $E_{f^*}[\hat{\gamma}_{IS}(m)] = \gamma(m)$ gilt, wobei die IS-Dichte f^* auch von m abhängen kann, in der Regel aber für alle m gleich ist.

Definition 3.3 (Beschränkter relativer Fehler) Existiert eine Konstante $c > 0$, und gilt mit obigen Bezeichnungen

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \delta_{rel}(\hat{\gamma}_{IS}(m)) \leq c < \infty, \quad (3.21)$$

dann hat die Familie $\hat{\gamma}_{IS}(m)$ von Schätzern oder kürzer der Schätzer $\hat{\gamma}_{IS}$ beschränkten relativen Fehler.

Man sieht leicht, daß für Schätzer mit beschränktem relativen Fehler der Aufwand zur Bestimmung eines Konfidenzintervalls für $\gamma(m)$ mit vorgegebener relativen halben Breite unabhängig von der Größe von $\gamma(m)$ beschränkt ist.

Es wird oft auch derart parametrisiert, daß die zu schätzende Größe mit gegen Null konvergierendem Seltenheitsparameter ebenfalls gegen Null konvergiert. Wir haben obige Form gewählt, um zu den Notationen der Theorie großer Abweichungen konsistent zu sein. Es ist aber klar, daß beide Definitionsmöglichkeiten äquivalent sind, da man einfach alternativ den Kehrwert des Seltenheitsparameters verwenden kann.

Beispiel 3.6 Gegeben seien Ereignisse A_1, A_2, \dots mit $A_{m+1} \subseteq A_m$, also mit Wahrscheinlichkeiten $P\{A_{m+1}\} \leq P\{A_m\}$. Ein solches Ereignis A_m könnte etwa der Überlauf eines Puffers der Größe m sein. Sei $\gamma(m) := P\{A_m\}$. Dann ist $\gamma(m)$ die Wahrscheinlichkeit für den Überlauf eines Puffers der Größe m oder die Wahrscheinlichkeit für den Verlust eines Auftrags, also etwa in ATM-Netzen die kritische Paketverlustwahrscheinlichkeit in einem Switch.

Beispiel 3.7 Betrachte ein fehlertolerantes System mit Redundanzen, wobei Komponenten mit einer kleinen Fehlerrate λ ausfallen können. Der Systemfehler tritt ein, wenn

eine gewisse Anzahl K der Komponenten ausgefallen ist. Ist die Fehlerrate fest gewählt, so ist die Anzahl der Komponenten unser Seltenheitsparameter nach obiger Definition, also $m = K$. Ist dagegen die Anzahl der Komponenten, die ausfallen müssen, um einen Systemfehler hervorzurufen, fest gewählt, so konvergiert die Wahrscheinlichkeit für einen Systemausfall gegen Null, wenn die Fehlerrate für die einzelnen Komponenten gegen Null konvergiert. Als Seltenheitsparameter nach obiger Definition ergibt sich dann $m = \lambda^{-1}$ oder eine Parametrisierung der Fehlerrate mit einem $\epsilon = m^{-1}$, so, daß $\lambda(\epsilon) \rightarrow 0$ für $\epsilon \rightarrow 0$ bzw. $m \rightarrow \infty$. Eine natürliche Erweiterung besteht darin, verschiedene Komponententypen mit verschiedenen Fehlerraten zu betrachten. Eine übliche Parametrisierung ist dabei die Darstellung der Fehlerrate einer Komponente vom Typ i durch $\lambda_i(\epsilon) = c_i \epsilon^{r_i}$ mit Konstanten c_i, r_i . Die Wahrscheinlichkeit des Systemfehlers hängt dann ebenfalls von ϵ ab und paßt in den beschriebenen Rahmen.

Ein, wie wir später sehen werden, schwächeres aber dennoch im Vergleich zur Standard-simulation seltener Ereignisse erstrebenswertes Kriterium ist asymptotische Optimalität oder asymptotische Effizienz. Da Varianzen nichtnegativ sind, folgt aus der Varianz des IS-Schätzers (3.12)

$$E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] \geq \gamma(m)^2,$$

also

$$\ln E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] \geq 2 \ln \gamma(m).$$

Da $\ln \gamma(m) < 0$ gilt**, folgt

$$\frac{\ln E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2]}{\ln \gamma(m)} \leq 2.$$

Definition 3.4 (Asymptotische Optimalität/Effizienz) Gilt mit obigen Bezeichnungen

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{\ln E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2]}{\ln \gamma(m)} = 2, \quad (3.22)$$

so nennt man die Familie $\hat{\gamma}_{IS}(m)$ von Schätzern oder kürzer $\hat{\gamma}_{IS}$ asymptotisch optimal oder asymptotisch effizient und den Wechsel von f nach f^* asymptotisch optimalen Maßwechsel.

**Dies ist für Wahrscheinlichkeiten klar. Importance Sampling kann allgemeiner auf Erwartungswerte $\gamma = E[g(X)]$ angewendet werden. Die Definitionen des beschränkten relativen Fehlers und der asymptotischen Optimalität gehen dabei von Größen aus, die mit einem Seltenheitsparameter gegen Null konvergieren. Somit ist für hinreichend großen Seltenheitsparameter garantiert, daß $\gamma(m) < 1$ gilt. Aber auch ohne diese Voraussetzung sind die weiteren Ausführungen korrekt, es dreht sich an entsprechender Stelle jeweils das Ungleichheitszeichen herum, die Grenzwertbildung und die Argumentationen werden davon nicht beeinflusst.

Beispiel 3.8 Es konvergiere $\gamma(m)$ exponentiell schnell gegen Null mit $\gamma(m) = e^{-d \cdot m}$ für ein $d > 1$. Dann folgt $\ln \gamma(m) = -d \cdot m$ und

$$\frac{\ln E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2]}{\ln \gamma(m)} = \frac{\ln E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2]}{-dm} \leq 2$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{m} \ln E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] \geq -2d.$$

Gilt

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{m} \ln E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] = -2d,$$

so liegt asymptotische Effizienz vor.

Beschränkte relative Fehler und asymptotische Optimalität sind häufig verwendete Effizienzkriterien. Der Zusammenhang wird allerdings in der Literatur nicht oder nur unzureichend behandelt. Dies mag daran liegen, daß im allgemeinen beschränkte relative Fehler im Bereich der Zuverlässigkeitsmodelle und asymptotische Optimalität im Bereich der Warteschlangenmodelle und einigen weiteren Anwendungsfeldern auftreten, wobei der Begriff asymptotischer Optimalität seit relativ langer Zeit gebräuchlich ist, siehe etwa [Sie76], während der Begriff oder das Kriterium des beschränkten relativen Fehlers erst in [Sha90] eingeführt wurde. In Arbeiten, die beide Kriterien zumindest erwähnen, ist daher auch typischerweise die Rede von einem Kriterium für Zuverlässigkeitsmodelle und einem Kriterium für Warteschlangenmodelle. Mehrfach tritt dabei die Redewendung „somewhat weaker“ für asymptotische Optimalität auf. Es scheint also prinzipiell Einigkeit darin zu bestehen, daß asymptotische Optimalität eine schwächere Eigenschaft ist, wie wir auch selbst bei der Überleitung zwischen beiden Definitionen behauptet haben. Erstaunlicherweise existieren jedoch keine klaren formalen eindeutigen Aussagen dazu, in welchem Sinne dies gilt.

Wir werden im folgenden den Zusammenhang der beiden Kriterien näher untersuchen und dabei insbesondere zunächst den Beweis liefern, daß asymptotische Optimalität in strengem Sinne schwächer ist als die Eigenschaft des beschränkten relativen Fehlers, also daß ein beschränkter relativer Fehler asymptotische Optimalität impliziert und die Umkehrung nicht gilt. Weiterhin geben wir Bedingungen für asymptotische Optimalität in Fällen, in denen der relative Fehler unbeschränkt ist. Dies führt zu einer neuen Charakterisierung asymptotischer Optimalität über das Verhältnis der Größenordnungen des relativen Fehlers und der gesuchten Größe, wobei die in der Informatik geläufige o -Notation verwendet wird. Die folgenden Ergebnisse dieses Abschnitts sind auch in unserer Arbeit [San04] enthalten.

Satz 3.1 Jeder Importance-Sampling-Schätzer mit beschränktem relativen Fehler ist asymptotisch optimal.

Beweis Sei $\hat{\gamma}_{IS}(m)$ Importance-Sampling-Schätzer mit beschränktem relativen Fehler. Dann gilt für alle $m \geq 0$: $\delta_{rel}(\hat{\gamma}_{IS}(m)) \leq c$. Wir berechnen nun

$$\begin{aligned} \frac{\sqrt{E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] - \gamma(m)^2}}{\gamma(m)\sqrt{N}} &\leq c, \\ \frac{E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] - \gamma(m)^2}{\gamma(m)^2} &\leq c^2 N, \\ \frac{E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2]}{\gamma(m)^2} - 1 &\leq c^2 N, \\ E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] &\leq \gamma(m)^2 (1 + c^2 N), \\ \ln E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] &\leq 2 \ln \gamma(m) + \ln(1 + c^2 N), \\ \frac{\ln E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2]}{\ln \gamma(m)} &\geq 2 + \frac{\ln(1 + c^2 N)}{\ln \gamma(m)}. \end{aligned}$$

Wegen $\lim_{m \rightarrow \infty} \gamma(m) = 0$ gilt

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{\ln(1 + c^2 N)}{\ln \gamma(m)} = 0$$

und damit

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{\ln E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2]}{\ln \gamma(m)} \geq 2 + \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{\ln(1 + c^2 N)}{\ln \gamma(m)} = 2.$$

Wegen

$$\frac{\ln E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2]}{\ln \gamma(m)} \leq 2$$

folgt also

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{\ln E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2]}{\gamma(m)} = 2 \quad \square$$

Als Nächstes zeigen wir, daß die Umkehrung des Satzes nicht gilt, also

Satz 3.2 Es existieren asymptotisch optimale Importance-Sampling-Schätzer, die keinen beschränkten relativen Fehler haben.

Beweis Wir betrachten die Situation des vorangegangenen Beispiels, also eine mit dem Seltenheitsparameter exponentiell schnell gegen Null konvergierende Wahrscheinlichkeit

$\gamma(m) = e^{-dm}$, $d > 1$. Hierfür sei ein IS-Schätzer mit polynomiell gegen unendlich konvergierendem relativen Fehler gegeben, also

$$\frac{\sqrt{E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] - \gamma(m)^2}}{\gamma(m)\sqrt{N}} \leq m^k, \quad k > 1.$$

Damit folgt

$$\frac{\sqrt{E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] - \gamma(m)^2}}{\gamma(m)\sqrt{N}} = \frac{\sqrt{E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] - e^{-2dm}}}{e^{-dm}\sqrt{N}} \leq m^k,$$

$$\frac{E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] - e^{-2dm}}{e^{-dm}N} \leq m^{2k},$$

$$E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] \leq e^{-2dm} N m^{2k} + e^{-2dm} = e^{-2dm} (N m^{2k} + 1),$$

$$\ln E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] \leq -2dm + \ln(N m^{2k} + 1),$$

$$\frac{1}{m} \ln E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] \leq -2d + \frac{1}{m} \ln(N m^{2k} + 1)$$

und mit

$$\frac{1}{m} \ln E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] = -2d$$

folgt

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{m} \ln E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] = -2d,$$

also ist der IS-Schätzer asymptotisch optimal \square

Wir untersuchen nun genauer, in welchen Fällen IS-Schätzer mit nicht beschränktem relativen Fehler asymptotisch optimal sind. Genauer gesagt geben wir Bedingungen für den relativen Fehler und die gesuchte Größe, unter denen ein IS-Schätzer asymptotisch optimal ist. Bereits aus der im obigen Beweis verwendeten Situation einer beliebigen exponentiell schnell gegen Null konvergierenden Wahrscheinlichkeit und eines beliebigen IS-Schätzers mit polynomiell gegen unendlich konvergierendem relativen Fehler erhalten wir

Korollar 3.2 Konvergiert die Wahrscheinlichkeit $\gamma(m)$ für $m \rightarrow \infty$ exponentiell schnell gegen Null und hat ein Importance-Sampling-Schätzer polynomiell gegen unendlich konvergierendem relativen Fehler, so ist dieser Schätzer asymptotisch optimal.

Es liegt nun nahe, zu untersuchen, inwieweit sich die Aussage des Korollars verallgemeinern läßt. Wir sind daran interessiert, einen allgemeinen Zusammenhang zwischen den

Größenordnungen der zu bestimmenden Größe und des relativen Fehlers des IS-Schätzers mit asymptotischer Optimalität herzustellen. Dazu vergleichen wir die Konvergenzgeschwindigkeiten von $\gamma(m)$ und $\delta_{rel}(\hat{\gamma}_{IS}(m))$, um ein Kriterium und eine Charakterisierung von asymptotischer Optimalität herzuleiten, so, daß diese Charakterisierung ausschließlich auf dem Verhältnis der Konvergenzgeschwindigkeiten beruht. Informell können wir unsere Charakterisierung damit beschreiben, daß die zu bestimmende Größe schneller gegen Null konvergiert als der relative Fehler des korrespondierenden IS-Schätzers gegen unendlich. Formal beschreiben wir dies im

Satz 3.3 Ein Importance-Sampling-Schätzer für $\gamma(m)$ ist asymptotisch optimal, wenn der relative Fehler in $o\left(\frac{1}{\gamma(m)}\right)$ ist.

Beweis

$$\delta_{rel}(\hat{\gamma}_{IS}(m)) = o\left(\frac{1}{\gamma(m)}\right),$$

also

$$\forall c > 0 \exists m_0 > 0 : \delta_{rel}(\hat{\gamma}_{IS}(m)) \leq \frac{c}{\gamma(m)} \text{ für alle } m \geq m_0.$$

Informell bedeutet dies gerade, daß $\gamma(m)$ schneller gegen 0 konvergiert als $\delta(m)$ gegen ∞ . Es gilt insbesondere

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{\delta_{rel}(\hat{\gamma}_{IS}(m))}{\frac{1}{\gamma(m)}} = \lim_{m \rightarrow \infty} \delta_{rel}(\hat{\gamma}_{IS}(m))\gamma(m) = 0.$$

Im folgenden sei $m \geq m_0$. Wir berechnen

$$\frac{\sqrt{E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] - \gamma(m)^2}}{\gamma(m)\sqrt{N}} \leq \frac{c}{\gamma(m)}, \quad (3.23)$$

$$\frac{E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] - \gamma(m)^2}{\gamma(m)^2} \leq \frac{c^2 N}{\gamma(m)^2}, \quad (3.24)$$

$$\frac{E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2]}{\gamma(m)^2} - 1 \leq \frac{c^2 N}{\gamma(m)^2}, \quad (3.25)$$

$$E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] \leq \gamma(m)^2 \left(1 + \frac{c^2 N}{\gamma(m)^2}\right), \quad (3.26)$$

$$\ln E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2] \leq 2 \ln \gamma(m) + \ln \left(1 + \frac{c^2 N}{\gamma(m)^2}\right), \quad (3.27)$$

$$\frac{\ln E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2]}{\ln \gamma(m)} \geq 2 + \frac{\ln \left(1 + \frac{c^2 N}{\gamma(m)^2}\right)}{\ln \gamma(m)}. \quad (3.28)$$

Im Bruch auf der rechten Seite konvergiert für $m \rightarrow \infty$ der Zähler gegen 0, der Nenner gegen $-\infty$, der gesamte Bruch also gegen 0. Damit gilt also

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{\ln E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2]}{\ln \gamma(m)} \geq 2.$$

Wegen der bekannten Beziehung

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{\ln E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2]}{\ln \gamma(m)} \leq 2$$

gilt

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{\ln E_{f^*}[g(X)^2 L(X)^2]}{\ln \gamma(m)} = 2 \quad \square$$

Nach der Untersuchung des Zusammenhangs der Größenordnungen des relativen Fehlers und der zu bestimmenden Größe mit dem Kriterium der asymptotischen Optimalität und der daraus resultierenden Charakterisierung asymptotischer Optimalität wollen wir nun abschließend kurz die Bedeutung beschränkter relativer Fehler und asymptotischer Optimalität von IS-Schätzern für die Praxis diskutieren.

Bei asymptotischer Optimalität wächst der für vorgegebene Genauigkeit benötigte Aufwand langsamer als exponentiell in m . Dies ist aber, wie wir gesehen haben, ein schwächeres Kriterium als ein beschränkter relativer Fehler.

Die Varianz wird in beiden Fällen nicht minimiert, kann aber häufig um viele Größenordnungen reduziert werden. Das Hauptproblem in der Praxis besteht darin, daß beide Eigenschaften für gegebene Maßwechsel analytisch bewiesen werden müssen. Dies ist meist sehr schwierig und häufig sogar unmöglich. So kann man die Eigenschaft des beschränkten relativen Fehlers für einige Strategien des Maßwechsels bei der Untersuchung von Markovschen Zuverlässigkeitsmodellen beweisen. Dabei liefern einige der im Abschnitt 4.3.2 kurz beschriebenen Heuristiken unter bestimmten Voraussetzungen IS-Schätzer mit beschränktem relativen Fehler. Asymptotische Optimalität von IS-Schätzern kann für einige Warteschlangenmodelle, die jedoch starken Einschränkungen, insbesondere in Bezug auf ihre Größe und damit der Beschreibung realistischer Systeme, unterliegen, gezeigt werden. Häufig muß man sich mit der meist auf empirischen Untersuchungen basierenden Vermutung der Güte von IS-Schätzern zufriedengeben, was sich oft in Aussagen wie "We believe our change of measure has the bounded relative error property" oder "We are quite sure our change of measure is asymptotically optimal" dokumentiert.

Beide Effizienzkriterien sind asymptotische Eigenschaften, und in der Praxis kann der Simulationsaufwand, auch wenn eines oder beide Kriterien erfüllt sind, sehr groß sein. Es können für feste Seltenheitsparameter, also für einen festen unbekanntem Wert der gesuchten Größe γ , Maßwechsel existieren, die IS-Schätzer mit kleinerer Varianz liefern als

eventuell bekannte Schätzer mit beschränktem relativen Fehler oder asymptotisch optimale IS-Schätzer. Trivialerweise erfüllt dies immer der optimale IS-Schätzer mit Varianz Null. Für konkrete Simulationen sind also selbst gemäß dieser Kriterien erwiesenermaßen effiziente Schätzer mit einer gewissen Vorsicht zu betrachten, denn es ist für beliebige Parameter nicht garantiert, daß eine Varianzreduktion erzielt wird. Dennoch sind beide Kriterien erstrebenswert, da für Wahrscheinlichkeiten seltener Ereignisse in der Regel die Varianzreduktion enorm ist, wenn der IS-Schätzer beschränktem relativen Fehler hat oder asymptotisch optimal ist.

In der Praxis ist, wie bereits erwähnt, häufig nicht möglich, wenigstens asymptotische Optimalität nachzuweisen, und daher ist es bereits ein Erfolg, wenn man empirisch feststellt, daß die Varianz und die entsprechenden Konfidenzintervalle zumindest deutlich kleiner als bei direkter Simulation sind, auch wenn man keine Effizienzeigenschaften analytisch nachweisen kann. In solchen Fällen wird häufig das Verhältnis der Varianzen unter Verwendung direkter Simulation und unter Verwendung von Importance Sampling betrachtet, der sogenannte Varianzreduktionsquotient (*Variance Reduction Ratio, VRR*) oder Varianzreduktionsfaktor. Ist der Varianzreduktionsfaktor größer als Eins, so bedeutet dies also die angestrebte Simulationsbeschleunigung (*simulation speed-up*), und man spricht auch vom Beschleunigungsfaktor.

3.3.5 Klassische Maßwechselstrategien

Das Hauptproblem bei der Anwendung von Importance Sampling besteht im Wechsel des zugrundeliegenden Wahrscheinlichkeitsmaßes. Ein optimaler Maßwechsel bedeutet Varianzminimierung, hängt jedoch von der gesuchten Größe ab, ein guter Maßwechsel bedeutet – zum Teil erhebliche – Varianzreduktion, leider führt ein schlechter Maßwechsel zu einer größeren Varianz. Die Kunst bei der Anwendung von Importance Sampling besteht also in der Wahl des „neuen“ Wahrscheinlichkeitsmaßes, der IS-Verteilung oder der IS-Dichte. Dies stellt insbesondere für realistisch dimensionierte Modelle komplexer realer Systeme große Schwierigkeiten dar, und die Aussage von Asmussen und Rubinstein [AR95],

No general satisfying method exists,

trifft auch heute noch uneingeschränkt zu. Es gibt nicht nur keine allgemeine zufriedenstellende Methode, sondern nur für einige wenige Modelle oder Klassen von Modellen effiziente Verfahren. Für die meisten Modelle dagegen existiert bis heute kein auch nur asymptotisch effizientes Verfahren. Diese Feststellung soll dabei nicht derart mißverstanden werden, daß sie nur für Importance Sampling zutrifft. Vielmehr gilt Importance Sampling als das geeignetste und vielversprechendste Verfahren zur Simulation seltener Ereignisse.

Im Hinblick auf Computer- und Kommunikationssysteme sei zunächst nochmals darauf hingewiesen, daß seltene Ereignisse je nach Art des zu untersuchenden Systems auf sehr

unterschiedliche Weise charakterisiert sind. Es ist klar, daß dies auch Auswirkungen auf die Art des Maßwechsels hat. Die im Bereich von Computer- und Kommunikationssystemen sicherlich wichtigste Unterscheidung von System- bzw. Modelltypen ist die Unterteilung in Zuverlässigkeitsmodelle (*reliability/dependability models*) und in Warteschlangenmodelle (*queueing models*). Gemeinsamkeiten beider Modellarten bestehen in der Verwendung der im vorherigen Abschnitt beschriebenen Effizienzkriterien und darin, daß Markovsche Modelle, also exponentiell verteilte Zeiten, die Untersuchung häufig vereinfachen.

Ein wesentlicher Unterschied läßt sich ganz allgemein über die Art des Auftretens der interessierenden seltenen Ereignisse beschreiben. In Warteschlangenmodellen geschieht ein seltenes Ereignis aufgrund der Kombination einer großen Anzahl nicht seltener Ereignisse, während in Zuverlässigkeitsmodellen ein seltenes Ereignis aufgrund einiger weniger, ebenfalls relativ seltener, Ereignisse geschieht. Außerdem konvergiert in Warteschlangenmodellen die Wahrscheinlichkeit eines seltenen Ereignisses in der Regel exponentiell schnell in Abhängigkeit von Seltenheitsparametern, während diese Konvergenz in Zuverlässigkeitsmodellen meist polynomiell ist. Weiterhin hat sich gezeigt, daß, falls ein asymptotisch optimaler Maßwechsel für Warteschlangenmodelle bekannt ist, dieser eine deutlich größere Varianzreduktion liefert als ein asymptotisch optimaler Maßwechsel für Zuverlässigkeitsmodelle, wenn man Wahrscheinlichkeiten gleicher Größenordnung schätzt. Wir wollen zunächst noch einmal einige typische Beispiele nennen.

In Zuverlässigkeitsmodellen für fehlertolerante Systeme werden Systemfehler durch den Ausfall einzelner Systemkomponenten hervorgerufen. Das System kann mehrere Komponenten des gleichen Typs haben, und für jeden Komponententyp gibt es Fehler- und Reparaturraten bzw. -wahrscheinlichkeiten. Dabei sind die Reparaturraten relativ groß und die Fehlerraten relativ klein, jedoch liegen die Wahrscheinlichkeiten für Komponentenfehler noch deutlich über den Wahrscheinlichkeiten eines Systemfehlers. Es gibt aber einen signifikanten Unterschied in den Größenordnungen der Raten oder Wahrscheinlichkeiten. Das seltene Ereignis des Systemfehlers in Zuverlässigkeitsmodellen wird also hervorgerufen durch einige (verhältnismäßig wenige) Komponentenfehler mit kleiner aber nicht „sehr kleiner“ Wahrscheinlichkeit. In Markovmodellen führt dies auf steife Markovketten (*stiff Markov chains*).

In Warteschlangenmodellen sind seltene Ereignisse, „Systemfehler“, beispielsweise Blockierungen von Bedienern, Überläufe von Puffern oder aus stark gefüllten Puffern resultierende inakzeptabel lange Wartezeiten. Solche Ereignisse werden bei großen Pufferkapazitäten durch eine sehr große Anzahl von Ankünften während einer einzelnen Bedienung hervorgerufen. Die einzelnen Ankünfte sind dabei jedoch keine seltenen Ereignisse und ihre Raten oder Wahrscheinlichkeiten unterscheiden sich in der Größenordnung nicht von denen der Bedienungen. Im Fall exponentiell verteilter Zeiten liegen in den zugehörigen Markovmodellen also keine steifen Markovketten vor, man kann der Generatormatrix oder der Übergangsmatrix nicht „ansehen“, daß seltene Ereignisse involviert sind.

Aufgrund der Unterschiede in der Art der seltenen Ereignisse ist es plausibel, daß für Zuverlässigkeitsmodelle und Warteschlangenmodelle verschiedene Importance-Sampling-Ansätze notwendig sind. Tatsächlich stellt sich heraus, daß die Wahl eines geeigneten Maßwechsels für Zuverlässigkeits- und Warteschlangenmodelle sehr unterschiedliche Strategien erfordert, wobei sich die Problematik für Warteschlangenmodelle meist als sehr viel schwieriger erweist, insbesondere in Bezug auf die Verallgemeinerbarkeit solcher Strategien. Die Anwendung von Importance Sampling auf Warteschlangenmodelle erfordert im allgemeinen ein größeres Verständnis der Struktur des Problems als die Anwendung auf Zuverlässigkeitsmodelle. Daher ist auch die Klasse von Warteschlangenmodellen, für die asymptotisch optimale IS-Schätzer bekannt sind, deutlich begrenzter.

Ein großer Teil der Forschung über Importance Sampling beschäftigt sich mit der Suche nach guten IS-Dichten oder solchen, die die optimale Dichte annähern. Die meisten vorgeschlagenen Methoden sind ursprünglich motiviert durch die simulative Bestimmung von Tail-Wahrscheinlichkeiten und die Erfordernis, daß hierbei die IS-Dichte eine höhere Wahrscheinlichkeit des seltenen Ereignisses hervorrufen soll, also eine größere Wahrscheinlichkeitsmasse in den betreffenden Tails erzeugen soll. Dabei läßt sich Importance Sampling auch anwenden auf Wahrscheinlichkeiten von Zufallsvariablen, die Funktionen von anderen Zufallsvariablen sind. Der übliche Ansatz wählt eine Familie oder Klasse von Dichten, die durch einen oder mehrere Parameter indiziert ist. Dann verbleibt die Bestimmung der optimalen Parameterwerte für diese Klasse von Dichten. Die Klassen können erhalten bleiben durch Transformation der originalen Zufallsvariable oder der originalen Dichte, wie es bei den klassischen Strategien, der Skalierung und der Translation der Fall ist, siehe Abschnitt 3.3.5.1. Alternativ könnten Dichten gewählt werden, die unter Umständen nicht augenscheinlich in Beziehung mit den Originalen stehen, jedoch gewünschte Eigenschaften haben.

Ein häufig gewählter Ansatz für Warteschlangenmodelle ist begründet in der exponentiellen Konvergenz der dort interessierenden Wahrscheinlichkeiten. Dies erfüllt die Rahmenbedingungen der Theorie großer Abweichungen, die daher häufig zur Bestimmung von Maßwechseln eingesetzt wird. Wir beschreiben in Abschnitt 3.3.5.2 den exponentiellen Maßwechsel, den Ansatz, der bis heute sicher am häufigsten auf Warteschlangenmodelle angewandt wurde, und der engen Bezug zur Theorie großer Abweichungen hat. Für Zuverlässigkeitsmodelle werden meist Varianten der Idee des Failure Biasing angewandt, und in einigen Fällen lassen sich asymptotisch optimale IS-Schätzer oder IS-Schätzer mit beschränktem relativen Fehler finden. Die gebräuchlichsten dieser Varianten sind in Abschnitt 4.3.2 beschrieben. Ein weiterer Ansatz sowohl für Warteschlangen- als auch Zuverlässigkeitsmodelle, der erst in jüngster Zeit zunehmend verfolgt wird, ist die Suche oder Approximation der optimalen IS-Dichte oder einer guten IS-Dichte durch adaptive Verfahren, die wir in Abschnitt 5 beschreiben.

3.3.5.1 Skalierung und Translation

Historisch gesehen war die Bestimmung von Tail-Wahrscheinlichkeiten eines der ersten Anwendungsgebiete für Importance Sampling. Aus diesem Gebiet stammen auch die Verfahren der Skalierung und der Translation als frühe Maßwechselstrategien. Auch wenn ihre praktische Bedeutung für Computer- und Kommunikationssysteme hauptsächlich aus Problemstellungen im Bereich von kleinen Bitfehlerraten bei digitalen Übertragungssystemen resultiert, wollen wir sie zumindest ganz kurz vorstellen. Ausführlicher werden sie etwa in [SSG97, Sri02] behandelt.

Die erste Technik zur Bestimmung von IS-Dichten, die im Bereich von Kommunikationssystemen angewandt wurde, war die Skalierung [SB80] von Dichten, um mehr Wahrscheinlichkeitsmasse in den Tails zu erzeugen und damit mehr Fehler hervorzurufen. Als IS-Dichte zu einer Originaldichte f ergibt sich damit also

$$f^*(x) = \frac{1}{\alpha} f\left(\frac{x}{\alpha}\right), \quad \alpha \in \mathbb{R}.$$

Für komplexere Systeme mit höherer Dimensionalität erfolgt dabei diese Skalierung in jeder Dimension. Der Vorteil dieses Verfahrens liegt nahe, er besteht in der Einfachheit. Für mehrdimensionale Räume bedeutet jedoch die Skalierung, daß in jeder Dimension „fettere“ Tails entstehen. Da meist die Fehlerregion relativ begrenzt ist, ist diese Skalierung in den meisten Richtungen überflüssig oder sogar hinderlich, da sie keine Fehlerereignisse erzeugt. Für solche Systeme wurde die Translation in [LY88] als “improved Importance Sampling“ eingeführt. Dabei wird der Erwartungswert direkt in die Fehlerregion verschoben, und als IS-Dichte erhält man

$$f^*(x) = f(x - T), \quad T \in \mathbb{R}.$$

Die Translation ist allerdings systemabhängiger und schwieriger anzuwenden als die Skalierung. Dennoch gibt es eine offensichtliche Wahl von T , für α dagegen nicht. Diese Wahl von T ist ausgerichtet am wahrscheinlichsten Fehlerpfad. Dies korrespondiert häufig zum Verschieben der Dichte und ist eine zentrale Idee von Importance Sampling. Es kann für Normalverteilungen als äquivalent zum Ansatz über große Abweichungen, dem exponentiellen Maßwechsel, angesehen werden.

3.3.5.2 Exponentieller Maßwechsel

Eine Möglichkeit, varianzreduzierende Maßwechsel zu finden, basiert auf der Idee, die Klasse von Wahrscheinlichkeitsmaßen für das neue Maß einzuschränken, und einen innerhalb dieser eingeschränkten Klasse optimalen Maßwechsel zu finden. Die Einschränkung besteht dabei darin, einen optimalen Maßwechsel innerhalb der selben parametrischen Familie von Wahrscheinlichkeitsmaßen zu finden. Eine solche Methode ist der *exponentielle Maßwechsel* (*Exponential Change of Measure, ECM; auch Exponential Twisting/Tilting*),

und der optimale exponentielle Maßwechsel ist dann der, der den IS-Schätzer mit kleinster Varianz liefert. Ursprünglich motiviert ist der exponentielle Maßwechsel aus der Bestimmung von Tail-Wahrscheinlichkeiten analog zu den Überlegungen, die zum Satz von Cramér–Chernoff führen, und wir haben ihn bereits in 2.1 beim Beweis der unteren Schranke des Satzes von Cramér kennengelernt. Er wurde erstmals für Importance-Sampling-Simulationen von Siegmund [Sie76] vorgeschlagen und später in zahlreichen Arbeiten, insbesondere auch für Warteschlangenmodelle, aufgegriffen. In den meisten Arbeiten, die eine erfolgreiche Anwendung von Importance Sampling auf Warteschlangenmodelle beinhalten, wird ein exponentieller Maßwechsel und die Theorie großer Abweichungen benutzt [CFM83, PW89, Fre89, BNS90, FLA91, Sad91, LN92, Tso92, Sad93, CHJS94, GK95, Man96, Man98, KN99a, FDL99].

Sei M die momenterzeugende Funktion einer eindimensionalen reellen Zufallsvariablen X mit Dichte f , also $M(\vartheta) = E_f[e^{\vartheta X}]$ mit $\vartheta \in \mathbb{R}$. Der exponentielle Maßwechsel ersetzt die Dichte f durch f^* mit

$$f^*(x) := \frac{1}{M(\vartheta)} e^{\vartheta x} f(x). \quad (3.29)$$

Die Dichte f^* ist also vom Parameter ϑ abhängig. Wir wollen dies hier in der Notation nicht ausdrücken, sondern immer von einem *Twisting-Parameter* ϑ ausgehen. Für die momenterzeugende Funktion von X gemäß der Dichte f^* berechnet man

$$\begin{aligned} M^*(\eta) &= E_{f^*}[e^{\eta X}] = \int_{-\infty}^{\infty} e^{\eta x} \frac{1}{M(\vartheta)} e^{\vartheta x} f(x) dx = \frac{1}{M(\vartheta)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{(\eta+\vartheta)x} f(x) dx \\ &= \frac{1}{M(\vartheta)} E_f[e^{(\eta+\vartheta)X}] = \frac{M(\eta + \vartheta)}{M(\vartheta)}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Wählt man nun die Dichte f^* als IS-Dichte, so erhält man den Likelihood-Quotienten

$$L(x) = \frac{f(x)}{f^*(x)} = \frac{f(x)}{\frac{1}{M(\vartheta)} e^{\vartheta x} f(x)} = \frac{M(\vartheta)}{e^{\vartheta x}} = M(\vartheta) e^{-\vartheta x}. \quad (3.31)$$

Beispiel 3.9 (Twisting der Exponentialverteilung) Sei X exponentiell verteilt mit Parameter $\lambda > 0$, also $f(x) = \lambda e^{-\lambda x}$. Wir kennen bereits aus Abschnitt 2.1 die momenterzeugende Funktion, nämlich

$$M(\vartheta) = \begin{cases} \frac{\lambda}{\lambda - \vartheta}, & \text{falls } \vartheta < \lambda, \\ +\infty, & \text{falls } \vartheta \geq \lambda. \end{cases}$$

Somit erhalten wir

$$M^*(\eta) = \frac{M(\eta + \vartheta)}{M(\vartheta)} = \frac{\frac{\lambda}{\lambda - \eta - \vartheta}}{\frac{\lambda}{\lambda - \vartheta}} = \frac{\lambda}{\lambda - \vartheta - \eta} \cdot \frac{\lambda - \vartheta}{\lambda} = \frac{\lambda - \vartheta}{\lambda - \vartheta - \eta}. \quad (3.32)$$

Dies ist gerade die momenterzeugende Funktion einer mit Parameter $\lambda - \vartheta$ exponentiell verteilten Zufallsvariablen. Der Likelihood-Quotient ist dabei

$$L(x) = M(\vartheta)e^{-\vartheta x} = \frac{\lambda}{\lambda - \vartheta} e^{-\vartheta x}. \quad (3.33)$$

In unserer Beschreibung der praktischen Durchführung von Importance Sampling auf Seite 53 hatten wir heuristisch als IS-Dichte die Dichte einer mit Parameter $\mu < \lambda$ exponentiell verteilten Zufallsvariablen vorgeschlagen, also wie wir nun wissen, einen exponentiellen Maßwechsel mit $\mu = \lambda - \vartheta$, also mit Twisting-Parameter $\vartheta = \lambda - \mu$.

Als einige weitere Beispiele konkreter exponentieller Maßwechsel für bekannte Verteilungen erhält man analog zu den Berechnungen für die Exponentialverteilung unter anderem $\Gamma(\lambda, \beta) \rightsquigarrow \Gamma(\lambda - \vartheta, \beta)$, $N(\mu, \sigma^2) \rightsquigarrow N(\mu + \vartheta, \sigma^2)$, $\text{Geo}(p) \rightsquigarrow \text{Geo}(1 - (1 - p)e^\vartheta)$.

Wir wollen nun die Technik des exponentiellen Maßwechsel auf Summen von Zufallsvariablen erweitern und zeigen, wie man für konkrete Problemstellungen dafür gute IS-Schätzer erhalten kann. Insbesondere erhält man für einfache Warteschlangenmodelle häufig genau dann einen asymptotisch optimalen IS-Schätzer, wenn man einen exponentiellen Maßwechsel mit bestimmten Nebenbedingungen durchführt, wie wir später sehen werden.

Seien X_1, \dots, X_n unabhängige identisch verteilte eindimensionale reelle Zufallsvariablen und $S_n := X_1 + \dots + X_n$ die Summe dieser Zufallsvariablen. Man erhält die momenterzeugende Funktion M_{S_n} der Summe aus der momenterzeugenden Funktion M_X der X_i mittels

$$M_{S_n}(\vartheta) = E[e^{\vartheta S_n}] = E[e^{\vartheta(X_1 + \dots + X_n)}] = (E[e^{\vartheta X}])^n = (M_X(\vartheta))^n. \quad (3.34)$$

Analog zum Fall „einfacher“ Zufallsvariablen wird die Dichte der Summe gemäß (3.29) ersetzt, und der exponentielle Maßwechsel führt zu der momenterzeugenden Funktion

$$M_{S_n}^*(\eta) = M_X^*(\eta)^n = \left(\frac{M_X(\eta + \vartheta)}{M_X(\vartheta)} \right)^n \quad (3.35)$$

für die Summe der X_i , und man erhält den Likelihood-Quotienten

$$L(x_1, \dots, x_n) = M_{S_n}(\vartheta)e^{-\vartheta s_n} = M_X(\vartheta)^n e^{-\vartheta s_n}. \quad (3.36)$$

Die besondere Bedeutung des exponentiellen Maßwechsels für einfache Warteschlangenmodelle erklärt sich daraus, daß viele der dort interessierenden Größen als Summen von Zufallsvariablen dargestellt werden können und der entsprechende stochastische Prozeß einen einfachen Random Walk darstellt. Wir wollen daher nun die Folge (S_n) als einen Random Walk mit Inkrementen X_i interpretieren, wobei $\mu = E[X_i] < 0$ gilt, und die Wahrscheinlichkeit untersuchen, daß dieser Random Walk eine Schranke $m > 0$ überschreitet. Sei $\tau(m) = \inf_{n>0}[S_n > m]$ die Zeit des ersten Überschreitens (*first passage time*) der Schranke m . Dann beschreibt das Ereignis $\{\tau(m) < \infty\}$ das Überschreiten der Schranke m , und die gesuchte Wahrscheinlichkeit ist

$$\gamma(m) = P\{\tau(m) < \infty\}.$$

Für große m ist dies wegen $\mu < 0$ ein seltenes Ereignis, und direkte Simulation ist nicht effektiv anwendbar. Somit ist also die Notwendigkeit der Anwendung von Importance Sampling gegeben. Dafür ergibt sich der Likelihood-Quotient

$$\begin{aligned} L(x_1, \dots, x_{\tau(m)}) &= M_X(\vartheta)^{\tau(m)} e^{-\vartheta s_{\tau(m)}} \\ &= e^{\tau(m) \ln M_X(\vartheta)} e^{-\vartheta s_{\tau(m)}} \\ &= e^{-\vartheta S_{\tau(m)} + \tau(m) \ln M_X(\vartheta)} \\ &= e^{-\vartheta m} e^{-\vartheta S_{\tau(m)} + \vartheta m + \tau(m) \ln M_X(\vartheta)} \\ &= e^{-\vartheta m} e^{-\vartheta (s_{\tau(m)} - m) + \tau(m) \ln M_X(\vartheta)}. \end{aligned}$$

Es stellt sich nun die Frage, mit welchem Parameter der exponentielle Maßwechsel durchgeführt werden sollte, um einen IS-Schätzer mit deutlich geringerer Varianz zu erhalten. Für unsere Situation des einfachen Random Walks ist der in diesem Fall eindeutig bestimmte asymptotisch optimale Maßwechsel bekannt. Es gilt

Satz 3.4 Ein IS-Schätzer für die Wahrscheinlichkeit $\gamma(m)$ ist genau dann asymptotisch optimal, wenn er nach dem exponentiellen Maßwechsel mit Twisting-Parameter $\vartheta^* > 0$ gebildet wird mit

$$M_X(\vartheta^*) = 1, \quad \ln M_X(\vartheta^*) = 0. \quad (3.37)$$

Wir wollen nun vorführen, daß obige Bedingung (3.37) hinreichend für asymptotische Optimalität des IS-Schätzer für die Wahrscheinlichkeit $\gamma(m)$ ist.

Sei ϑ^* so, daß $M_X(\vartheta^*) = 1$. Dann gilt

$$\begin{aligned} L(x_1, \dots, x_{\tau(m)}) &= e^{-\vartheta^* m} e^{-\vartheta^* (s_{\tau(m)} - m)}, \\ L^2(x_1, \dots, x_{\tau(m)}) &= e^{-2\vartheta^* m} e^{-2\vartheta^* (s_{\tau(m)} - m)}. \end{aligned}$$

Damit folgt für die durch den Likelihood-Quotienten bestimmte Zufallsvariable $L_{\tau(m)}$ das zweite Moment

$$\begin{aligned} E[L_{\tau(m)}^2] &= E[e^{-2\vartheta^*m} e^{-2\vartheta^*(S_{\tau(m)}-m)}] \\ &= e^{-2\vartheta^*m} E[e^{-2\vartheta^*(S_{\tau(m)}-m)}]. \end{aligned}$$

Es ist zudem bekannt, daß $\lim_{m \rightarrow \infty} \gamma(m) = ce^{-\vartheta^*m}$ mit $c = \lim_{m \rightarrow \infty} E[e^{-\vartheta^*(S_{\tau(m)}-m)}]$ gilt. Somit erhalten wir

$$\begin{aligned} \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{\ln E[I_{\{\tau(m) < \infty\}} L_{\tau(m)}^2]}{\ln \gamma(m)} &= \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{\ln(e^{-2\vartheta^*m} E[e^{-2\vartheta^*(S_{\tau(m)}-m)}])}{\ln \gamma(m)} \\ &= \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{-2\vartheta^*m + \ln E[e^{-2\vartheta^*(S_{\tau(m)}-m)}]}{\ln \gamma(m)} \\ &= \frac{-2\vartheta^*m + \ln c^2}{\ln(ce^{-\vartheta^*m})} \\ &= \frac{-2\vartheta^*m + 2 \ln c}{\ln c - \vartheta^*m} = 2. \end{aligned}$$

Dies ist gerade die Definition der asymptotischen Optimalität, und es ist damit gezeigt, daß obige Bedingung hinreichend dafür ist. Ebenso läßt sich zeigen, daß die Bedingung auch notwendig ist. Den Beweis, daß ϑ^* einen eindeutig bestimmten asymptotisch optimalen exponentiellen Maßwechsel liefert, führte bereits Siegmund [Sie76]. In [LN92] wurde bewiesen, daß dies der eindeutig bestimmte asymptotisch optimale Maßwechsel innerhalb der Klasse aller Verteilungen mit unabhängigen identisch verteilten Inkrementen ist. Dies bedeutet, daß die Bedingung (3.37) auch notwendig ist.

Wir demonstrieren nun, wie die Ergebnisse für Random Walks direkt auf elementare Warteschlangenmodelle angewandt werden können. Diese Anwendung basiert auf der Tatsache, daß die stationäre Wartezeit in einem stabilen $G/G/1$ -Modell die gleiche Verteilung hat, wie ein Random Walk mit negativem Drift, also mit unabhängigen Inkrementen, deren Erwartungswert negativ ist. Seien $(A_n), (B_n)$ unabhängige Folgen unabhängiger identisch verteilter Zufallsvariablen, die jeweils wie eine Zufallsvariable A bzw. B verteilt sind mit $E[B] < E[A]$. Mit A und B werden die Zwischenankunfts- und Bedienzeiten in einem $G/G/1$ -Modell beschrieben. Die momenterzeugende Funktion der Differenz $B - A$ ist gegeben durch

$$M_{B-A}(\vartheta) = M_B(\vartheta)M_{-A}(\vartheta) = M_B(\vartheta)M_A(-\vartheta).$$

Der exponentielle Maßwechsel führt zu

$$M_{B-A}^*(\eta) = \frac{M_B(\eta + \vartheta)M_A(-\eta - \vartheta)}{M_B(\vartheta)M_A(-\vartheta)} = M_B^*(\eta)M_{-A}^*(\eta).$$

Mit Bedingung (3.37) erhält man daraus Gleichungen für den asymptotisch optimalen Maßwechsel.

Beispiel 3.10 ($M/M/1$ -Modell) Gegeben sei ein $M/M/1$ -Warteschlangenmodell mit $\exp(\lambda)$ -verteilten Zwischenankunftszeiten und $\exp(\mu)$ -verteilten Bedienzeiten. Beschreiben die Zufallsvariable A die Zwischenankunftszeiten und die Zufallsvariable B die Bedienzeiten, so führt (3.37) zu

$$M_B^*(\vartheta^*)M_{-A}^*(\vartheta^*) = \frac{\mu}{\mu - \vartheta^*} \cdot \frac{\lambda}{\lambda + \vartheta^*} \stackrel{!}{=} 1.$$

Daraus berechnet man den Parameter ϑ^* für den exponentiellen Maßwechsel:

$$\mu\lambda = (\mu - \vartheta^*)(\lambda + \vartheta^*) = \mu\lambda + \mu\vartheta^* - \lambda\vartheta^* - \vartheta^{*2} \quad (3.38)$$

$$\Leftrightarrow \vartheta^{*2} + (\lambda - \mu)\vartheta^* = 0 \quad (3.39)$$

$$\Leftrightarrow \vartheta^* = \mu - \lambda. \quad (3.40)$$

Damit ergibt sich also unter dem asymptotisch optimalen Maßwechsel eine Vertauschung der Parameter von Zwischenankunfts- und Bedienzeitverteilung.

Leider ist die Anwendbarkeit obiger Ergebnisse stark eingeschränkt. Die einzigen Warteschlangenmodelle neben dem $M/M/1$ -Modell, für die man die aus der Bedingung (3.37) resultierende Gleichung explizit lösen kann, sind die Modelle $M/E_2/1$ und $E_2/M/1$. Hierfür führt (3.37) jeweils auf eine quadratische Gleichung. Für alle anderen Modelle existiert keine explizite Lösung. Wir wollen dies kurz anhand zweier Modelle verdeutlichen.

Beispiel 3.11 ($M/D/1$ -Modell) Hierbei ist B degeneriert, wir nehmen der Einfachheit halber OBdA an, an der Stelle 1, und A ist exponentiell verteilt mit Parameter $\lambda < 1$. Man sieht leicht, daß (3.37) dann äquivalent ist zu

$$M_B^*(\vartheta^*)M_{-A}^*(\vartheta^*) = e^{\vartheta^*} \cdot \frac{\lambda}{\lambda + \vartheta^*} = 1,$$

einer transzendenten Gleichung ohne explizite Lösung, die daher numerisch gelöst werden muß.

Beispiel 3.12 ($D/M/1$ -Modell) Hierbei ist A degeneriert, wieder OBdA an der Stelle 1, und B ist exponentiell verteilt mit Parameter $\mu > 1$. Dann ist (3.37) äquivalent zu

$$M_B^*(\vartheta^*)M_{-A}^*(\vartheta^*) = \frac{\mu}{\mu - \vartheta^*} \cdot e^{-\vartheta^*} = 1,$$

einer weiteren transzendenten Gleichung.

Bei der präsentierten Anwendung des exponentiellen Maßwechsels wird der Zusammenhang zwischen der Wartezeitverteilung in elementaren Warteschlangenmodellen und des

Überschreitens einer Schranke in Random Walks ausgenutzt. Dieser Zusammenhang besteht jedoch in allgemeineren Modellen, wie etwa in Modellen mit mehreren Bedienern oder beschränkten Kapazitäten und in Warteschlangennetzen, nicht. Daher ist es wünschenswert, Techniken des exponentiellen Maßwechsels direkt auf Warteschlangenprozesse anzuwenden, etwa unter Einbeziehung der Theorie großer Abweichungen.

Tatsächlich haben Parekh und Walrand [PW89] auf diesem Wege heuristisch mit dem Satz von Cramér argumentiert, daß obiger asymptotisch optimaler Maßwechsel für $G/G/1$ -Modelle auch asymptotisch optimal ist zur Bestimmung der mittleren Zeit, bis eine Warteschlange einen vorgegebenen Füllstand erreicht, ebenso für die Wahrscheinlichkeit, daß ein vorgegebener Füllstand erreicht wird und die Wahrscheinlichkeit, daß eine Warteschlange oder ein Puffer beschränkter Kapazität überläuft. Für das $M/M/1$ -Modell wird dies bereits in [CFM83] mit Hilfe Markovscher Random Walks bewiesen. Einen formalen Beweis für $G/G/1$ -Modelle liefert Sadowsky [Sad91]. Er beweist zudem, daß für $G/G/1$ -Modelle der exponentielle Maßwechsel mit Parameter ϑ^* der eindeutig bestimmte exponentielle Maßwechsel innerhalb aller Simulationen mit unabhängigen und identisch verteilten Zwischenankunfts- und Bedienzeiten ist, also ein analoges Ergebnis zum Fall des Random Walks. In [Sad93] werden darüberhinaus Resultate für höhere Momente der Schätzer bewiesen. Weiteres zur Effizienz des exponentiellen Maßwechsels für elementare Warteschlangenmodelle, insbesondere zur Robustheit, wenn der Twisting-Parameter von ϑ^* abweicht, diskutieren Asmussen und Rubinstein [AR95] und findet sich auch in [RM98]. So wird dort empirisch gezeigt, daß Abweichungen von bis zu 20% vom optimalen Parameter meist immer noch sehr gute Ergebnisse in Form von erheblicher Varianzreduktion liefern. In [CHJS94] wird ein asymptotisch optimaler Maßwechsel für Pufferüberlaufwahrscheinlichkeiten in Warteschlangenmodellen, deren Ankunftsprozeß Markov-moduliert oder autoregressiv ist, über die Theorie großer Abweichungen und effektive Bandbreiten hergeleitet. Mandjes [Man96] beschreibt asymptotisch optimale Maßwechsel für elementare Warteschlangensysteme mit Gruppenankünften (*batch arrivals*). Kroese und Nicola [KN99a] bestimmen den optimalen exponentiellen Maßwechsel für Warteschlangenmodelle mit Bedienerausfällen (*server breakdowns*), die gemäß einer stetigen Markovkette auftreten, und präsentieren empirische Untersuchungen zur Güte dieses Maßwechsels für Überlaufwahrscheinlichkeiten.

Wir haben gesehen, daß für sehr einfache Warteschlangensysteme der exponentielle Maßwechsel, der sehr eng verknüpft ist mit der Theorie großer Abweichungen, häufig gute Ergebnisse im Sinne asymptotisch optimaler IS-Schätzer liefert. Eine Verallgemeinerung auf allgemeinere (größere) Systeme ist jedoch bisher nicht gelungen. Ebensowenig existieren für komplexere Modelle Bedingungen, unter denen der optimale exponentielle Maßwechsel in einem allgemeineren Sinne optimal ist, also etwa einen asymptotisch optimalen Maßwechsel darstellt. Ein weiterer Nachteil des exponentiellen Maßwechsels neben der Schwierigkeit, einen optimalen exponentiellen Maßwechsel zu finden, besteht also darin, daß selbst bei Lösung dieses Problems keine Garantie für asymptotische Effizienz besteht,

da keine allgemeinen Bedingungen bekannt sind, wann ein optimaler exponentieller Maßwechsel asymptotisch optimal ist. Somit läßt sich sagen, daß dieser Ansatz für Modelle im Bereich von Computer- und Kommunikationssystemen nach heutigem Stand der Forschung nur schwer auf komplexe Modelle anwendbar ist. Ein Vorteil des Ansatzes über exponentielle Maßwechsel unter Einbeziehung der Theorie großer Abweichungen besteht sicherlich darin, daß dieser Ansatz im Prinzip sehr allgemein ist und eine fortgeschrittene (aber schwierige) mathematische Theorie zur Verfügung steht. Daher besteht die Hoffnung, daß weitere Fortschritte im Rahmen der Theorie großer Abweichungen direkt eine Anwendbarkeit auf komplexere Modelle bedeuten. Für realistische Modelle führt dieser Ansatz jedoch oft auf komplexe Variationsprobleme, deren Formulierung häufig schon schwierig bzw. unmöglich ist, und die keine explizite Lösung besitzen. Daher müssen auch hier häufig viele heuristische Annahmen gemacht werden.

So haben Parekh und Walrand [PW89] eine Verallgemeinerung des asymptotisch optimalen Maßwechsels für $M/M/1$ -Modelle auf Markovsche Tandemsysteme vorgeschlagen. Dabei werden die Parameter der Zwischenankunftszeit und des langsamsten Bedieners vertauscht, und alle anderen Bedienzeitverteilungen bleiben unverändert. Jedoch haben Glasserman und Kou [GK95] gezeigt, daß selbst für Markovsche Tandemsysteme aus nur zwei Bedienern dieser Maßwechsel in gewissen Parameterregionen zu IS-Schätzern mit unendlicher Varianz führt. Insgesamt läßt sich sagen, daß dies für Tandemnetze nur dann effizient ist, wenn der Füllstand des Systems signifikant von einer Warteschlange, der sogenannten *bottleneck queue* dominiert wird. Ebenso ist für allgemeinere Jackson-Netze erforderlich, daß die Leistung im wesentlichen durch eine einzelne Station bestimmt wird. Auch in [CHJS94] werden die Ergebnisse für Warteschlangenmodelle mit Markov-modulierten und autoregressiven Ankunftsprozessen erweitert, und zwar auf Netze, deren Knoten baumartig strukturiert sind, wobei Ankünfte an den Blättern erfolgen (*intree networks*). Dazu werden Beispiele gegeben, in denen wesentliche Varianzreduktionen beobachtet wurden. In [Man98] wird die asymptotische Optimalität für Tandemnetze mit zwei Knoten und Markov-modulierten Ankünften bewiesen. Eine Variante des Ansatzes für weitere Netztopologien schlagen [FDL99] vor.

Alle genannten Erweiterungen beziehen sich, wie auch für das $M/M/1$ -Modell, auf Überlauf- oder Verlustwahrscheinlichkeiten innerhalb einer Arbeitsphase (busy period) des zu untersuchenden Systems. Dies ist jedoch kein spezielles Phänomen beim exponentiellen Maßwechsel. Vielmehr konzentriert sich die Forschung zur Herleitung effizienter Maßwechsel insgesamt fast ausschließlich auf die Untersuchung solcher Leistungsmaße der Form, daß ein seltenes Ereignis während einer Arbeitsphase auftritt. Dies erleichtert die Simulation erheblich, da die allgemeine Funktion g dann immer die Indikatorfunktion dieses Ereignisses ist und nicht etwa die Summe von Indikatorfunktionen oder noch allgemeiner. Das seltene Ereignis dient dann als ein terminierendes Ereignis der Simulation, und ein Simulationslauf endet, wenn das seltene Ereignis eintritt oder ein gegebener Anfangszustand wie das leere System bzw. der Zustand nach Eintritt des ersten Kunden in

das System wieder erreicht wird. Auch für Markovmodelle konzentriert sich die Forschung bis auf wenige Ausnahmen auf diese Leistungsmaße, was auch dort erhebliche Vereinfachungen zur Folge hat, wie wir in Kapitel 4 genauer sehen werden. Es liegt auf der Hand, daß, wenn selbst für die deutlich einfacher zu handhabenden Arbeitsphasen keine allgemeinen Maßwechselstrategien bekannt sind, dies auch für allgemeinere Leistungsmaße und insbesondere für Leistungsmaße über endlichem Horizont und für allgemeine stationäre Leistungsmaße, auch stationäre Wahrscheinlichkeiten, gilt.

3.4 Das RESTART–Verfahren

Wir wollen nun kurz das zweite gängige Verfahren zur Simulation seltener Ereignisse informell vorstellen, ohne Formeln für die Schätzer, Varianzen oder andere relevante Größen anzugeben. RESTART* ist eine Variante einer klassischen Idee zur Varianzreduktion, dem *Splitting* [KM53, HH64, Bay70][†]. Die Grundidee beim Splitting besteht darin, den Zustandsraum in eine Folge verschachtelter Untermengen zu partitionieren und das zu simulierende Ereignis als Schnitt einer solchen Folge anzusehen. Erfolgversprechende Simulationsläufe, etwa solche, die bereits in die Nähe eines interessierenden Zustands gelangt sind, werden dann in mehrere Subläufe aufgeteilt (*split*), um verstärkt Stichproben in den relevanten Regionen zu generieren. Diese Idee wurde speziell für seltene Ereignisse von den Brüdern Villen-Altamirano zur Simulationsmethode RESTART entwickelt und im Jahre 1991 in der ersten Version [VAVA91] präsentiert.

Beim RESTART–Verfahren wird zu einem seltenen Ereignis A ein Ereignis $C \supseteq A$ definiert, dessen Wahrscheinlichkeit zwar klein aber deutlich größer als die von A ist, und die Wahrscheinlichkeit des seltenen Ereignisses A wird dann als Produkt der Wahrscheinlichkeit des weniger seltenen Ereignisses C und der bedingten Wahrscheinlichkeit von A unter der Bedingung, daß C eingetreten ist, dargestellt. Gelegentlich spricht man, um den Unterschied der Größenordnungen der Wahrscheinlichkeiten deutlich zu machen, von A als sehr seltenem Ereignis und von C als seltenem Ereignis. Wir bevorzugen jedoch, A als selten und C als weniger selten zu bezeichnen, da auch dies ausreichend deutlich macht, daß die Wahrscheinlichkeit des Ereignisses C noch nicht in einer „normalen“ Größenordnung liegt.

Es gilt also $P\{A\} = P\{C\} \cdot P\{A|C\}$, wobei die „Grenze“ zwischen A und C als Schranke (*threshold*) bezeichnet wird. Die Wahrscheinlichkeit $P\{C\}$ kann mittels Standardsimulation, $P\{A|C\}$ jedoch nur aus dem kleinen Anteil der Simulation bestimmt werden, in dem C auftritt. Bei RESTART wird die Schätzung von $P\{A|C\}$ durch wiederholte Simulation dieses Anteils verbessert. Tritt während eines Simulationslaufes das Ereignis C auf, so wird der Lauf in R Subläufe aufgeteilt. Zusätzlich zu dem ursprünglichen Lauf, der die

*Repetitive Simulation Trials After Reaching Thresholds

[†]Im Konflikt zur Standardterminologie nannte Bayes seine Variante Importance Sampling.

Schranke erreicht hat, werden also $R - 1$ weitere Läufe, die sogenannten *Retrials*[‡], durchgeführt, wobei der „Eintrittspunkt“ in die Menge C als Anfangszustand der Subläufe dient. Ziel des Verfahrens ist also wie beim Importance Sampling eine Varianzreduktion aufgrund einer größeren Anzahl von Beobachtungen des seltenen Ereignisses.

In [VAMGF94] wurde die Methode durch die Definition mehrerer Mengen C_i , $i = 1, \dots, M$ mit $C_1 \supseteq C_2 \supseteq \dots \supseteq C_M \supseteq A$ auf die heute gebräuchliche Version erweitert, siehe auch [VAVA94]. Jeder Simulationslauf, der eine Schranke T_i erreicht, wird in R_i Subläufe aufgeteilt, den ursprünglichen Lauf, der die Schranke T_i erreicht hat, und $R_i - 1$ Retrials. Jeder der Subläufe kann die nächste Schranke erreichen und dann seinerseits aufgeteilt werden. Durch geeignete Wahl der Schranken kann der gesamte Pfad zum seltenen Ereignis in viele nicht seltene Ereignisse aufgeteilt werden, nämlich Ereignisse der Art „Erreichen der nächsten Schranke nach Aufteilung“. Damit zerfällt die Schätzung der Wahrscheinlichkeit eines seltenen Ereignisses in mehrere Schätzungen von Wahrscheinlichkeiten, die mittels Standardsimulation durchgeführt werden können, und eine Berechnung (Multiplikation) zur Kombination dieser Schätzungen.

Eine der Fragen, die sich dabei stellen, ist, wie zu verfahren ist, wenn ein Retrial die Schranke, an der er gestartet wurde, wieder unterschreitet. Dazu existieren zwei Varianten. Bei RESTART werden solche Retrials abgebrochen. Gelegentlich wird aber auch die Variante benutzt, sie fortzuführen, was dann aber meist nicht mit RESTART sondern mit Splitting bezeichnet wird. RESTART als Variante des Splitting zeichnet sich also gerade durch das Abbrechen von Retrials aus, die ihre „Anfangsschranke“ wieder unterschreiten. Dies hat selbstverständlich Auswirkungen auf die resultierenden Schätzer, und hierbei ist dann auch wichtig, zwischen dem ursprünglichen Pfad, der die Schranke erreicht hat, und den Retrials zu unterscheiden. In keiner Variante wird ein Sublauf abgebrochen, bevor er die Schranke, an der er gestartet wurde, wieder unterschreitet oder ein terminierendes Ereignis der Simulation eintritt. Für den anfangs gestarteten Lauf, den Hauptlauf oder auch Hauptpfad, bedeutet das insbesondere, daß er in jedem Fall bis zum terminierenden Ereignis der Simulation fortgeführt wird, da er nicht aufgrund des Erreichens einer Schranke gestartet wird.

Die Abbildungen 3.1 und 3.2 zeigen für eindimensionalen Zustandsraum einen charakteristischen Simulationslauf mit und ohne Anwendung des RESTART-Verfahrens. Dabei ist $S(t)$ der Zustand zur Zeit t . Um ein Mindestmaß an Übersichtlichkeit zu gewährleisten haben wir uns dabei auf drei Schranken und jeweils zwei Retrials bei jedem Erreichen einer Schranke beschränkt. Die Punkte, an denen die Schranken T_i überschritten oder unterschritten werden, sind mit dickeren Punkten markiert. Die Retrials auf verschiedenen Ebenen sind in unterschiedlichen Linienarten dargestellt; der Hauptpfad mit einer dicken Linie, die Retrials an der ersten Schranke T_1 mit dünnen Linien, die Retrials an der zweiten Schranke T_2 gestrichelt und die Retrials an der Schranke T_3 gepunktet.

[‡]In manchen Arbeiten werden alle R Subläufe Retrials genannt.

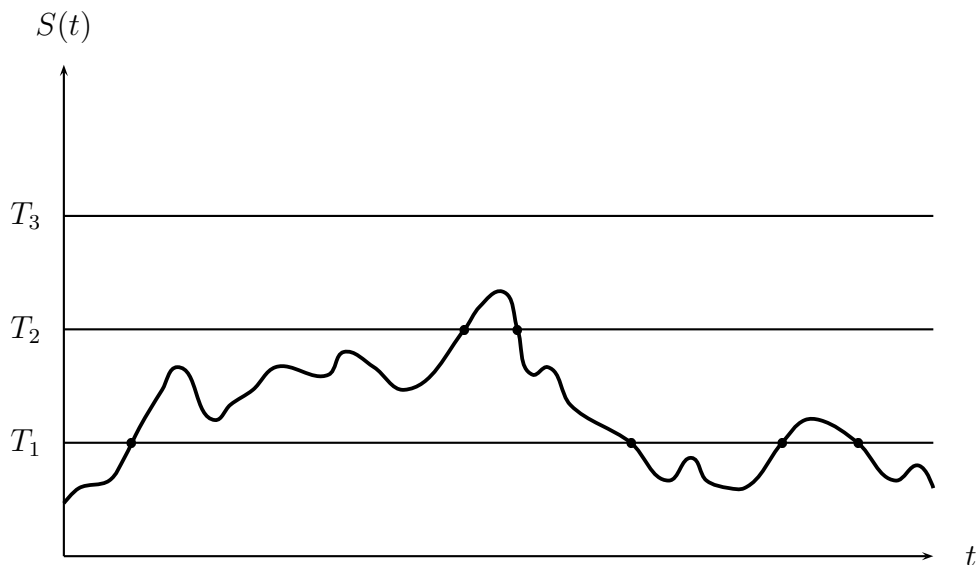


Abbildung 3.1: Simulationslauf ohne RESTART

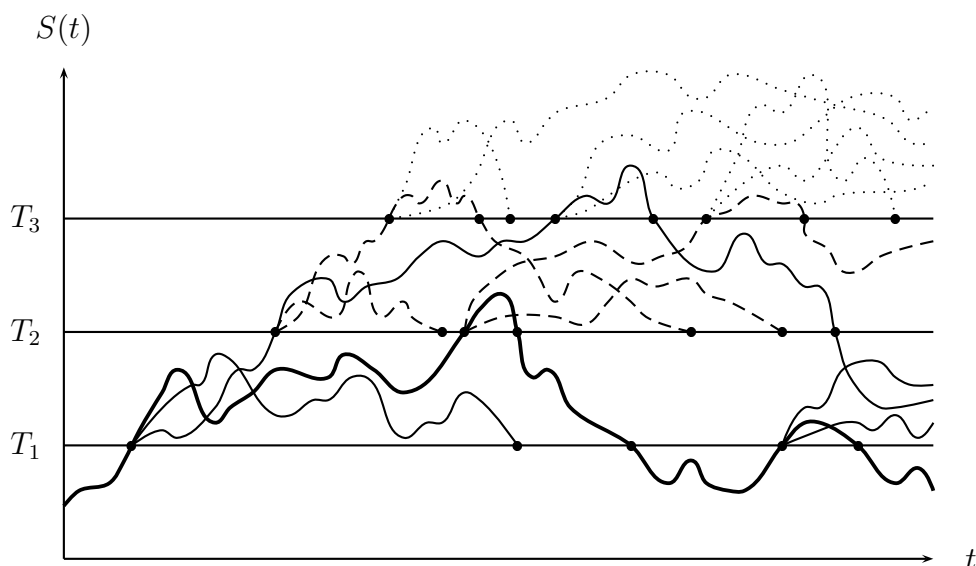


Abbildung 3.2: Simulationslauf mit RESTART

Die Güte von RESTART-Simulationen hängt wesentlich von der durch die Festlegung der Schranken definierten C_i sowie der Anzahlen R_i von Retrials beim Erreichen der Schranken ab. Heuristiken für kleine Modelle und Untersuchungen zur Empfindlichkeit des Verfahrens gegenüber der Wahl der C_i und R_i findet man in [VA98, VAVA99, VAVA00], weitere Untersuchungen zur optimalen Wahl der Retrials in [PLG02, VAVA02]. Eine geeignete Wahl dieser Parameter, also eine Parameterwahl, die zu einer Varianzreduktion und damit Simulationsbeschleunigung führt, erweist sich jedoch insbesondere für große Modelle und Modelle mit mehrdimensionalen Zustandsräumen, also etwa Warteschlangennetze mit mehr als einem Knoten, als sehr schwierig [GHSZ96a, GHSZ96b, GHSZ98, GHSZ99, GK98a, Hee98a, KK98]. Diese Schwierigkeit resultiert vor allem daraus, daß die Wahl der Schranken hierbei wesentlich komplizierter ist als für Modelle mit eindimensionalem

Zustandsraum. In [GHSZ98] wird vorgeschlagen, solche Parameter mit Hilfe der Theorie großer Abweichungen zu bestimmen, da die optimalen Parameter vom „Abweichungsverhalten“ des zu simulierenden Systems abhängen. Als Schlüssel zu einer guten Wahl erweist sich dabei die Wichtigkeitsfunktion (*Importance Function*, [VAMGF94]). Sie stellt ein Maß für die Wahrscheinlichkeit, von einer aktuellen Position aus das seltene Ereignis zu erreichen, dar. In [GKvO00] wird gezeigt, daß nur eine optimale Wahl dieser Funktion eine asymptotisch optimale RESTART-Simulation garantiert. Eine solche optimale Wahl hängt dabei von (unbekannten) bedingten Wahrscheinlichkeiten und der Wahrscheinlichkeit des seltenen Ereignisses ab, so daß diese optimale Wahl nicht möglich ist bzw. ebenso schwierig wie das eigentliche Problem, die simulative Schätzung der Wahrscheinlichkeit des seltenen Ereignisses. Es ist bemerkenswert, daß sich also das gleiche Problem wie beim Importance Sampling ergibt, und so wird auch in [GKvO00] auf diesen Bezug hingewiesen. Eine weitere enge Beziehung zwischen RESTART und Importance Sampling wird in [GK99] deutlich. Hier wird die Eintrittsverteilung (*Entrance Distribution*), die bedingte Verteilung des Systemzustands beim Erreichen eines seltenen Ereignisses, definiert und ein Bezug zum optimalen exponentiellen Maßwechsel bei Importance Sampling hergestellt, der dort häufig ebenfalls mit Hilfe der Theorie großer Abweichungen gesucht wird.

Ein weiteres wesentliches Problem bei der Anwendung des RESTART-Verfahrens besteht darin, daß die Berechnung der Varianz der resultierenden Schätzer – anders als bei Importance Sampling – nicht immer klar ist und von den Details der gewählten Aufteilungsmethode abhängt. In [Hee98a] wird weiterhin darauf hingewiesen, daß Implementierungen des Verfahrens häufig die Speicherung von und einen schnellen Zugriff auf zahlreiche Zusatzinformationen erfordern. Zudem ist, wie allgemein bei Simulationen, die Länge der Simulationsläufe bedeutend. Eine Kombination des RESTART-Verfahrens mit einem Algorithmus zur Kontrolle der Simulationslauflänge wird in [GS96, GF98, GLFH01] beschrieben.

Eine Einschränkung der Anwendbarkeit des Verfahrens auf eine wichtige Klasse von Modellen ergibt sich aufgrund einer Eigenschaft des Verfahrens, die von einigen Autoren häufig als Vorteil angesehen wird, nämlich, daß, anders als beim Importance Sampling, das zugrundeliegende Wahrscheinlichkeitsmaß nicht verändert wird, also etwa für Markovmodelle die Übergangswahrscheinlichkeiten und damit die gesamte Übergangsmatrix unverändert bleiben. Für Modelle, bei denen seltene Ereignisse aufgrund verhältnismäßig weniger Übergänge mit bekannten kleinen Wahrscheinlichkeiten auftreten und für Modelle, bei denen die involvierten seltenen Ereignisse selbst Zustandsübergänge mit bekannten Wahrscheinlichkeit sind, lassen sich mit dem RESTART-Verfahren diese seltenen Ereignisse nicht häufiger hervorrufen. Damit ist RESTART also für Zuverlässigkeitssysteme nur wenig nützlich und für steife Systeme ungeeignet. Wir betrachten RESTART im weiteren Verlauf dieser Arbeit nicht weiter. Für einen ausführlicheren Überblick sei auf [Gar00, GLFH01] verwiesen.

4 Importance Sampling für Markovmodelle

Bevor wir die Anwendung von Importance Sampling auf Markovmodelle, also auf solche Modelle, die sich als Markovkette modellieren lassen, beschreiben, wollen wir kurz die allgemeine Vorgehensweise bei der Simulation von Markovketten erläutern.

Bei der Simulation eines stochastischen Prozesses wird beobachtet, wie sich der Zustand des Prozesses mit fortschreitender Zeit verändert, und in einem Simulationsexperiment werden Pfade (Trajektorien) des stochastischen Prozesses erzeugt. Zur Simulation von Markovketten ist also im wesentlichen erforderlich, Pfade der Kette zu erzeugen. Jeder dieser Pfade liefert eine Information über die gesuchte Größe, und es können dann die in Abschnitt 3.2 beschriebenen Verfahren zur statistischen Analyse angewendet werden. Ziel der meisten Simulationen ist dabei die Schätzung von Verteilungen oder einzelner Zustandswahrscheinlichkeiten oder Funktionen wie etwa Erwartungswerte.

Zur Erzeugung von Pfaden wird ausgehend von einem Startzustand der Simulation das dynamische Verhalten der Markovkette nachgespielt, wobei die Wahl des Startzustands von der gewählten Auswertungsmethode und der Art der gesuchten Größe abhängen kann. Sollen transiente Größen geschätzt werden, so ist in der Regel der Startzustand durch die Anfangsbedingungen des modellierten Systems festgelegt, und es werden unabhängige Pfade erzeugt, deren Länge sich aus dem terminierenden Ereignis ergibt. Für die Schätzung stationärer Größen mittels unabhängiger Wiederholungen oder Gruppenmittelwerten muß zunächst eine Einschwingphase durchlaufen werden, deren Startzustand beispielsweise gemäß der Anfangsverteilung der Markovkette gewählt werden kann. Nach Ablauf der Einschwingphase ist dann der Startzustand für die „eigentliche Simulation“ erreicht. In der Regel ist dieser nicht für jeden der unabhängigen Läufe identisch. Bei der regenerativen Simulation kann aufgrund der Tatsache, daß jeder Zustand einer Markovkette regenerativ ist, in einem beliebigen Startzustand begonnen werden. Hier wählt man üblicherweise jedoch einen für das System ausgezeichneten Zustand, etwa für Warteschlangenmodelle den Zustand, der das leere System beschreibt oder für Zuverlässigkeitsmodelle den fehlerfreien Zustand. Es verbleibt nun, zu erläutern, wie das dynamische Verhalten der Markovkette simuliert wird.

Sei (X_n) eine homogene diskrete Markovkette mit Zustandsraum \mathcal{S} , Übergangsmatrix $\mathbf{P} = (p_{ij})$ und Anfangsverteilung μ . Zur Erzeugung von Pfaden werden die einzelnen Zustandsübergänge simuliert. Dazu ist es lediglich erforderlich, jeweils eine auf dem Intervall $[0, 1]$ gleichverteilte Zufallszahl zu erzeugen und in Abhängigkeit von deren Wert in einen der möglichen Folgezustände überzugehen. Wir wollen dies nun formalisieren. Es bezeichne $E(i)$ für einen beliebigen Zustand $i \in \mathcal{S}$ die Menge aller möglichen Folgezustände, also

$$E(i) = \{j \in \mathcal{S} : p_{ij} > 0\} =: \{e_1, \dots, e_{|E(i)|}\}.$$

Weiterhin seien u eine auf $[0, 1]$ gleichverteilte Zufallszahl und

$$I_1 := [0, p_{ie_1}], I_2 := (p_{ie_1}, p_{ie_1} + p_{ie_2}], \dots, I_{|E(i)|} := \left(\sum_{j=1}^{|E(i)|-1} p_{ie_j}, 1 \right].$$

Ist $u \in I_j$, $j \in \{1, \dots, |E(i)|\}$, dann wähle e_j als Folgezustand. Dies wird beginnend im Startzustand der Simulation so lange ausgeführt bis die gewünschte Anzahl von Übergängen erzeugt ist oder ein vorgegebenes terminierendes Ereignis eintritt, also zum Beispiel ein bestimmter Zustand oder eine Zustandsmenge erreicht wird. Abbildung 4.1 zeigt einen entsprechenden Algorithmus für einen Simulationslauf. Dabei bezeichnet $x_0 \in \mathcal{S}$ den Startzustand der Simulation.

```

i :=  $x_0$  = Initial State;
repeat
  Generate  $E(i)$ ;
   $j := 1$ ; Sum :=  $p_{ie_1}$ ; RandomNumber := Uniform(0,1);
  while Sum < RandomNumber do
     $j := j + 1$ ; Sum := Sum +  $p_{ie_j}$ ;
  od;
   $i := j$ ; (* next state *)
  Collect data;
until Last Simulation Step;

```

Abbildung 4.1: Simulation homogener diskreter Markovketten

Die konkrete Spezifikation von „Collect data“ und „Last Simulation Step“ wird dabei durch die Art der gesuchten Größe und die gewählte Methode zur Ausgabeanalyse (transient/stationär, unabhängige Wiederholungen, Gruppenmittelwerte, regenerative Simulation) bestimmt. Man sieht leicht, daß mit der while-Schleife im Algorithmus eine sequentielle Suche des Intervalls, in dem die Zufallszahl liegt, umgesetzt wird. Selbstverständlich kann dies durch effizientere Suchverfahren verbessert werden. Ein solcher Simulationslauf generiert einen Pfad x_0, x_1, \dots, x_K der Markovkette mit $x_i \in \mathcal{S}, i = 0, \dots, K$, wobei K von der Auswertemethode abhängt und auch zufällig sein kann. Ein solcher Pfad hat die Wahrscheinlichkeit

$$p(x_0, x_1, \dots, x_K) = P\{X_0 = x_0\} \prod_{i=0}^{K-1} p_{x_i, x_{i+1}}.$$

Wird der Startzustand gemäß der Anfangsverteilung gewählt, so gilt $P\{X_0 = x_0\} = \mu(x_0)$, startet man die Simulation in einem fest gewählten Zustand, so gilt $P\{X_0 = x_0\} = 1$.

Auch inhomogene Markovketten können auf diese Art simuliert werden, wenn die zeitunabhängigen Übergangswahrscheinlichkeiten jeweils durch die zeitabhängigen Übergangs-

wahrscheinlichkeiten der inhomogenen Markovkette ersetzt werden. Die Pfadwahrscheinlichkeiten ergeben sich dann aus dem Produkt der zeitabhängigen Übergangswahrscheinlichkeiten und der Wahrscheinlichkeit $P\{X_0 = x_0\}$.

Einen Sonderfall in dem Sinne, daß sie nicht ergodisch sind, stellen absorbierende Markovketten dar, die häufig zur Modellierung verwendet werden. Dabei interessieren etwa Absorptionswahrscheinlichkeiten in bestimmten absorbierenden Zuständen oder mittlere Zeiten bis zur Absorption. Die Simulation endet dann, sobald ein absorbierender Zustand erreicht wird. Eine Besonderheit stellen Wahrscheinlichkeiten des Erreichens bestimmter ausgezeichnete Zustände wie etwa seltener Zustände vor Rückkehr in den Anfangszustand dar. Diese Wahrscheinlichkeiten korrespondieren oft zu stationären Wahrscheinlichkeiten der ausgezeichneten Zustände, die daher oft als absorbierende Zustände modelliert werden. Die Simulation, also die Generierung von Pfaden, ist für absorbierende Markovketten analog zu nicht absorbierenden Markovketten.

Ebenso wie diskrete kann man auch stetige Markovketten simulieren, indem man das dynamische Verhalten nachspielt. Eine sehr anschauliche Beschreibung verschiedener äquivalenter Interpretationen des dynamischen Verhaltens stetiger Markovketten findet man in [Hav98]. Wir geben hier die wohl gängigste und für die Simulation geeignetste davon an. Es bezeichne $\mathbf{Q} = (q_{ij})$ die Generatormatrix, wobei q_{ij} , $i, j \in \mathcal{S}$, $i \neq j$ positive Übergangsraten bezeichnen, und für alle $i \in \mathcal{S}$ gilt $q_{ii} := -\sum_{j \in \mathcal{S}} q_{ij}$. Die Markovkette verweilt eine mit Parameter $|q_{ii}|$ exponentiell verteilte Zeitdauer im Zustand i und wechselt dann gemäß der Übergangswahrscheinlichkeit $p_{ij} = \frac{q_{ij}}{|q_{ii}|}$ in einen Folgezustand $j \neq i$ aus \mathcal{S} .

Zur Simulation von Zustandsübergängen in stetigen Markovketten muß also zunächst eine exponentiell verteilte Verweildauer erzeugt werden, und dann wird analog zum diskreten Fall eine auf $[0, 1]$ gleichverteilte Zufallszahl erzeugt und gemäß der Übergangswahrscheinlichkeiten in einen Folgezustand gewechselt. Anders als im diskreten Fall ist dieser Folgezustand immer ein vom aktuellen verschiedener Zustand. Dies ist jedoch nur durch unsere gewählte Definition der Generatormatrix und die Interpretation des dynamischen Verhaltens gegeben. Es lassen sich äquivalent stetige Markovketten definieren, in denen sogenannte self-loops möglich sind, siehe [Hav98, BHHK00, BHHK02, BKHH02]. Dies ist allerdings im allgemeinen eher unüblich, und wir wollen hier darauf nicht weiter eingehen.

Ein Simulationslauf generiert also einen Pfad $((x_0, r_0), (x_1, r_1), \dots, (x_K, r_K))$, wobei die r_i die generierten Verweildauern in den einzelnen Zuständen bezeichnen. Ein solcher Pfad hat die Dichte

$$p((x_0, r_0), (x_1, r_1), \dots, (x_K, r_K)) = P\{X_0 = x_0\} \prod_{i=0}^{K-1} (q_{x_i, x_{i+1}} e^{q_{x_i, x_i} r_i}).$$

Ein zum diskreten Fall analoger Algorithmus kann leicht formuliert werden, indem die Erzeugung der exponentiell verteilten Verweildauern ergänzt wird.

In der Praxis wird an Stelle der stetigen Markovkette meist eine diskrete Markovkette simuliert. Bei der Untersuchung des stationären Verhaltens bietet sich dazu die eingebettete Markovkette an, deren stationäre Zustandswahrscheinlichkeiten durch eine einfache Renormalisierung mittels der Verweildauern in den Zuständen auf die stationären Zustandswahrscheinlichkeiten der diskreten Markovkette umgerechnet werden können, siehe A.2. Eine Alternative ist die Randomisierung (*Randomization, Uniformization*, [Gra77, Gra91, GM84]), die sich darüberhinaus auch sehr gut für die Untersuchung des transienten Verhaltens eignet, siehe auch hierzu A.2. Eine ausführliche Übersicht über die Randomisierung und ihre Anwendung bietet [vM93].

Es wird ein wesentlicher Vorteil der Simulation gegenüber numerischen Verfahren deutlich. Es muß nicht a priori der gesamte Zustandsraum oder die Übergangsmatrix generiert werden, sondern lediglich zum aktuellen Zustand die Menge der möglichen Folgezustände und die entsprechenden Übergangswahrscheinlichkeiten. Dies wirkt also dem Problem der Zustandsraumexplosion entgegen und macht es möglich, auch Markovketten mit sehr großem oder unendlichem Zustandsraum zu simulieren. Man muß diesen offensichtlichen Vorteil jedoch auch kritisch betrachten, denn er wirkt sich nur dann aus, wenn die Menge der Folgezustände für jeden Zustand in einem effektiv handhabbaren Bereich liegt. Es wird also vorausgesetzt, daß die Markovkette bzw. deren Übergangs- oder Generatormatrix strukturiert ist. Dies ist jedoch insbesondere für Markovketten, die reale Systeme modellieren oder anderen Paradigmen wie Warteschlangenmodellen zugrundeliegen, nahezu immer erfüllt. Eine besonders geeignete kompakte Beschreibungsmethode für strukturierte Markovketten, Transitionsklassenmodelle, deren Simulation und insbesondere auch die Anwendung von Importance Sampling werden wir in Abschnitt 4.4 vorstellen.

4.1 Formale Grundlagen für Markovketten

In einer weit verbreiteten Variante wird Importance Sampling für Markovketten so durchgeführt, daß das IS-Maß zu einer neuen Generator- bzw. Übergangsmatrix korrespondiert und der Zustandsraum der Markovkette unverändert bleibt. Importance Sampling wird dann also mit einer modifizierten, aber weiterhin homogenen und diskreten Markovkette durchgeführt. Es werden Pfade der Markovkette gemäß der neuen Übergangs- oder Generatormatrix generiert und die Ergebnisse mit dem entsprechenden Likelihood-Quotienten gewichtet. Formal ist diese Art des Maßwechsels gerade der exponentielle Maßwechsel für Markovketten [Buc90]. Wir wollen hier zunächst diese klassische Variante beschreiben und erst danach den allgemeinen Rahmen des Importance Sampling für Markovketten und allgemeinere Verfahren zur Wahl von IS-Maßen vorstellen.

Für diskrete Markovketten mit Zustandsraum \mathcal{S} , Übergangsmatrix $\mathbf{P} = (p_{ij})$ und Anfangsverteilung μ wählt man dabei eine Übergangsmatrix $\mathbf{P}^* = (p_{ij}^*)$ und eine Anfangsverteilung ν so, daß für alle $i, j \in \mathcal{S}$: $p_{ij} > 0 \Rightarrow p_{ij}^* > 0$, $\mu(j) > 0 \Rightarrow \nu(j) > 0$. Der

Likelihood-Quotient für einen Pfad x_0, x_1, \dots, x_K ist dann

$$L(x_0, \dots, x_K) = \frac{\mu(x_0)}{\nu(x_0)} \prod_{i=0}^{K-1} \frac{p_{x_i, x_{i+1}}}{p_{x_i, x_{i+1}}^*}. \quad (4.1)$$

Für stetige Markovketten mit Generatormatrix $\mathbf{Q} = (q_{ij})$ wählt man analog eine Generatormatrix $\mathbf{Q}^* = (q_{ij}^*)$ mit $q_{ij} > 0 \Rightarrow q_{ij}^* > 0$, $i \neq j$ und $q_{ii}^* = -\sum_{j \in \mathcal{S}} q_{ij}^*$, $i \in \mathcal{S}$ sowie eine Anfangsverteilung ν mit $\mu(j) > 0 \Rightarrow \nu(j) > 0$. Als Likelihood-Quotient eines Pfades $((x_0, r_0), \dots, (x_K, r_K))$ ergibt sich

$$L((x_0, r_0), \dots, (x_K, r_K)) = \frac{\mu(x_0)}{\nu(x_0)} \prod_{i=0}^{K-1} \frac{q_{x_i, x_{i+1}} e^{q_{x_i, x_i} r_i}}{q_{x_i, x_{i+1}}^* e^{q_{x_i, x_i}^* r_i}}. \quad (4.2)$$

In der Regel werden die Anfangsverteilungen identisch gewählt oder der Startzustand für die Simulation wird fest und nicht gemäß der Anfangsverteilung gewählt, und in obigen Gleichungen für die Likelihood-Quotienten entfällt jeweils der Faktor $\frac{\mu(x_0)}{\nu(x_0)}$. Wie eingangs bereits erwähnt ist dies eine klassische Variante des Maßwechsels für Markovketten, die einen Spezialfall des allgemeinen Rahmens darstellt, den wir nun vorstellen wollen.

Sei (X_n) eine homogene diskrete Markovkette mit Zustandsraum \mathcal{S} , Übergangsmatrix $\mathbf{P} = (p_{ij})$ und Anfangsverteilung μ . Dann gilt für reelle Funktionen g und Zustände $x_0, \dots, x_K \in \mathcal{S}$

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{P}}[g(X_0, \dots, X_K)] &= \sum_{x_0, \dots, x_K} g(x_0, \dots, x_K) \mu(x_0) \prod_{i=0}^{K-1} p_{x_i, x_{i+1}} \\ &= \sum_{x_0, \dots, x_K} g(x_0, \dots, x_K) p(x_0, \dots, x_K) \end{aligned}$$

wobei $E_{\mathbf{P}}$ den Erwartungswert bezüglich \mathbf{P} und μ auf dem Raum der Pfade von (X_n) bezeichnet und wie zuvor $p(x_0, \dots, x_K)$ die Pfadwahrscheinlichkeit der Markovkette und K eine Stoppzeit ist, also insbesondere auch den deterministischen Fall konstanter Pfadlängen abdeckt.

Sei nun $f^* : \mathcal{S}^{K+1} \rightarrow [0, 1]$ eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf \mathcal{S}^{K+1} , also

$$f^*(x_0, \dots, x_K) = P\{X_0 = x_0, \dots, X_K = x_K\}, \quad x_0, \dots, x_K \in \mathcal{S},$$

und gelte

$$g(x_0, \dots, x_K) p(x_0, \dots, x_K) > 0 \Rightarrow f^*(x_0, \dots, x_K) > 0 \quad (4.3)$$

oder ausführlicher

$$g(x_0, \dots, x_K) \mu(x_0) \prod_{i=0}^{K-1} p_{x_i, x_{i+1}} > 0 \Rightarrow f^*(x_0, \dots, x_K) > 0. \quad (4.4)$$

Dann ist analog zur allgemeinen Schreibweise mit Dichten

$$\gamma := E_{\mathbf{P}}[g(X_0, \dots, X_K)] \quad (4.5)$$

$$= \sum_{x_0, \dots, x_K} g(x_0, \dots, x_K) \frac{\mu(x_0) \prod_{i=0}^{K-1} p_{x_i, x_{i+1}}}{f^*(x_0, \dots, x_K)} f^*(x_0, \dots, x_K) \quad (4.6)$$

$$= E_{f^*} \left[g(X_0, \dots, X_K) \frac{\mu(X_0) \prod_{i=0}^{K-1} p_{X_i, X_{i+1}}}{f^*(X_0, \dots, X_K)} \right] \quad (4.7)$$

$$= E_{f^*} \left[g(X_0, \dots, X_K) \frac{p(X_0, \dots, X_K)}{f^*(X_0, \dots, X_K)} \right], \quad (4.8)$$

wobei E_{f^*} den Erwartungswert über Pfaden mit Wahrscheinlichkeitsverteilung f^* bezeichnet. Wir haben damit also für homogene diskrete Markovketten das Analogon zur allgemeinen Formel, und der Erwartungswert kann geschätzt werden durch wiederholtes Erzeugen von (X_0, \dots, X_K) gemäß f^* , Bildung des Stichprobenmittels und Korrektur mittels des Likelihood-Quotienten

$$L(x_0, \dots, x_K) = \frac{\mu(x_0) \prod_{i=0}^{K-1} p_{x_i, x_{i+1}}}{f^*(x_0, \dots, x_K)} = \frac{p(x_0, \dots, x_K)}{f^*(x_0, \dots, x_K)}. \quad (4.9)$$

Mit $f^*(x_0, \dots, x_K) = \mu(x_0) \prod_{i=0}^{K-1} p_{x_i, x_{i+1}}$ resultiert also der Standard-Schätzer.

Wir sehen insbesondere, daß für f^* beliebige Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf \mathcal{S}^{K+1} mit (4.4) erlaubt sind. Es werden keine expliziten Bedingungen für die einzelnen Übergangswahrscheinlichkeiten, sondern lediglich für Pfadwahrscheinlichkeiten gestellt, und die IS-Verteilung darf auch nicht-Markovsch sein. Das Erzeugen entsprechender Zufallsgrößen kann dabei je nach Wahl der IS-Verteilung sehr viel komplizierter als für homogene diskrete Markovketten sein und einen erheblichen Mehraufwand bedeuten. Eine Möglichkeit, dies geschickt zu behandeln, besteht darin, diese Verteilung auszudrücken in der

Form

$$f^*(x_0, \dots, x_K) = \prod_{\ell=0}^{K-1} f_\ell^*(x_\ell | x_0, \dots, x_{\ell-1}) \quad (4.10)$$

mit

$$f_\ell^*(x_\ell | x_0, \dots, x_{\ell-1}) = P_{f^*} \{X_\ell = x_\ell | X_0 = x_0, \dots, X_{\ell-1} = x_{\ell-1}\}. \quad (4.11)$$

Haben die bedingten Wahrscheinlichkeiten f_ℓ^* eine einfache Form, dann kann dies effizient sein, um entsprechende Zufallsgrößen zu erzeugen.

Als ein Spezialfall folgt die Verwendung einer diskreten Markovkette mit identischem Zustandsraum \mathcal{S} als IS-Verteilung, wobei diese auch inhomogen sein kann. Hierfür ist mit Anfangsverteilung ν und Übergangsmatrizen $\mathbf{P}^*(0), \dots, \mathbf{P}^*(K-1)$

$$f^*(x_0, \dots, x_K) = \nu(x_0) \prod_{i=0}^{K-1} p_{x_i, x_{i+1}}^*(i), \quad (4.12)$$

$$L(x_0, \dots, x_K) = \frac{\mu(x_0)}{\nu(x_0)} \prod_{i=0}^{K-1} \frac{p_{x_i, x_{i+1}}}{p_{x_i, x_{i+1}}^*(i)}. \quad (4.13)$$

Für homogene diskrete Markovketten mit Anfangsverteilung ν und Übergangsmatrix \mathbf{P}^* als IS-Dichte gilt schließlich

$$f^*(x_0, \dots, x_K) = \nu(x_0) \prod_{i=0}^{K-1} p_{x_i, x_{i+1}}^*, \quad (4.14)$$

$$L(x_0, \dots, x_K) = \frac{\mu(x_0)}{\nu(x_0)} \prod_{i=0}^{K-1} \frac{p_{x_i, x_{i+1}}}{p_{x_i, x_{i+1}}^*}. \quad (4.15)$$

Wir erhalten also die selbe Form wie in der eingangs vorgestellten klassischen Variante, jedoch ohne die dort gemachten einschränkenden Bedingungen bezüglich der Anfangsverteilung und der einzelnen Übergangswahrscheinlichkeiten. In beiden Fällen, homogen und inhomogen, ist $\mu(i) > 0 \Rightarrow \nu(i) > 0$ und $p_{ij} \Rightarrow p_{ij}^*(n)$ bzw. $p_{ij} \Rightarrow p_{ij}^*$ für alle $i, j \in \mathcal{S}$ im allgemeinen nicht notwendig, um (4.4) zu erfüllen, da solche Pfade, für die $g(x_0, \dots, x_K) = 0$ gilt, keine positive Wahrscheinlichkeit unter Importance Sampling erhalten müssen, selbst wenn dies in der originalen Markovkette der Fall ist.

Insbesondere gilt für den optimalen IS-Schätzer für homogene diskrete Markovketten

$$f^*(x_0, \dots, x_K) = \begin{cases} \frac{g(x_0, \dots, x_K)p(x_0, \dots, x_K)}{\gamma}, & \text{falls } g(x_0, \dots, x_K) \neq 0, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.16)$$

Die optimale IS-Verteilung ist also in der Regel keine homogene diskrete Markovkette, wie wir in Abschnitt 4.2 genauer untersuchen. Wir sehen zudem, daß jeder Pfad, der das seltene Ereignis enthält, eine echt positive Wahrscheinlichkeit erhält.

Ein wesentlicher Vorteil der Verwendung einer diskreten Markovkette als IS-Verteilung besteht darin, daß der Aufwand zur Erzeugung von Pfaden nicht größer als für die originale Markovkette wird. Zudem ermöglicht die Form des Likelihood-Quotienten dessen sukzessive Aktualisierung innerhalb eines Simulationslaufes nach jedem simulierten Zustandsübergang. Historisch ist diese Form des Maßwechsels zudem darin begründet, daß sie, wie bereits erwähnt, den exponentiellen Maßwechsel für Markovketten darstellt [Buc90] und somit einer der klassischen Maßwechselstrategien entspricht. Diese ist dann auch mit der Theorie großer Abweichungen behandelbar, wobei sich jedoch auch hier die Anwendung der Theorie zur Bestimmung effizienter, asymptotisch optimaler, exponentieller Maßwechsel als ausgesprochen schwierig und oft unmöglich erweist. Ein wesentlicher Nachteil bei der praktischen Durchführung von Simulationen ergibt sich für große Zeithorizonte oder stationäre Größen, also allgemein für sehr lange Simulationsläufe, wie wir nun darlegen werden.

Wir betrachten die Schätzung einer stationären Größe $\gamma = E_{\mathbf{P}}[g(X_0, X_1, \dots)]$ mit

$$g(X_0, X_1, \dots) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} h(X_i)$$

für eine reelle Funktion h , d.h. $g(X_0, X_1, \dots)$ ist das stationäre Mittel einer Folge $(h(X_n))$. Es existiert hierbei also keine Konstante, so, daß die Geschichte der Markovkette nur bis zu dieser konstanten Zeit zu betrachten ist. Vielmehr hängt g von der unendlichen Geschichte der Markovkette ab. Dies ist natürlich ein allgemeines Problem bei der Simulation, und es gibt verschiedene Varianten, damit umzugehen, vgl. 3.2.

Häufig wird die Methode unabhängiger Wiederholungen mit hinreichend großem Zeithorizont verwendet. Bei zusätzlicher Anwendung von Importance Sampling ergibt sich jedoch ein Problem, denn der Likelihood-Quotient konvergiert für $\mathbf{P} \neq \mathbf{P}^*$ mit gegen unendlich konvergierender Simulationslauflänge fast sicher gegen Null (siehe [GI89]), also

$$P \left\{ \lim_{n \rightarrow \infty} L(X_0, \dots, X_n) = 0 \right\} = 1.$$

Somit konvergiert auch

$$\gamma = E_{\mathbf{P}^*} \left[\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} h(X_i) L(X_0, \dots, X_n) \right]$$

fast sicher gegen Null, und daher ist bei Verwendung einer Markovkette als IS-Verteilung die Methode unabhängiger Wiederholungen mit sehr langen Simulationsläufen ungeeignet.

Einen Ausweg kann hier die regenerative Simulation darstellen. Der wesentliche prinzipielle Vorteil dabei ist die Reduzierung des stationären Verhaltens über unendlichem

Horizont auf das Verhalten über regenerativen Zyklen, und die Anwendung von Importance Sampling ist möglich, da diese Zyklen durch Stoppzeiten definiert werden. Leider ergeben sich jedoch auch bei regenerativer Simulation einige Probleme. Neben dem allgemeinen, von Importance Sampling unabhängigen, Problem, daß eine ungeschickte Wahl eines (einzelnen) Regenerationszustands zu sehr langen Zyklen führen kann, kann beim Importance Sampling ein für die originale Markovkette häufig besuchter Regenerationszustand selten werden. Ein klassisches Beispiel hierfür ist der bereits mehrfach erwähnte asymptotisch optimale Maßwechsel für die Schätzung von Überlaufwahrscheinlichkeiten im M/M/1/K-Modell. Dabei werden Ankunfts- und Bedienraten vertauscht, was zu einem instabilen System führt, und der typische Regenerationszustand, das leere System, wird selten besucht. Damit werden dann zwar weniger Zyklen zur Bestimmung eines Konfidenzintervalls vorgegebener Genauigkeit benötigt, diese Zyklen sind jedoch extrem lang und der Aufwand insgesamt hoch.

Eine übliche Behandlung dieses Effekts besteht darin, Importance Sampling nach Auftreten des seltenen Ereignisses „abzuschalten“ und die originale Markovkette weiter zu simulieren, um in den Regenerationszustand zurückzukehren. Dabei verändert sich also auch nach Auftreten des seltenen Ereignisses der Likelihood-Quotient für diesen Zyklus nicht mehr, und erst zu Beginn des nächsten Zyklus wird Importance Sampling wieder eingeschaltet. Man spricht auch von *switching regenerative importance sampling*.

4.1.1 Anwendung auf Markovsche Warteschlangennetze

Die Grundlagen des Importance Sampling für Markovsche Warteschlangennetze sind prinzipiell identisch mit denen für Markovketten, da jedem Markovschen Warteschlangennetz eine stetige Markovkette zugrundeliegt, deren Zustände die Anzahl der Kunden in den einzelnen Knoten beschreiben. Simuliert wird dann typischerweise die eingebettete oder die randomisierte diskrete Markovkette. Der Zustandsraum \mathcal{S} einer einem Markovschen Warteschlangennetz mit n Knoten zugrundeliegenden Markovkette ist eine Teilmenge von \mathbb{N}^n , wobei $\mathcal{S} = \mathbb{N}^n$ gilt, falls alle Knoten von unbeschränkter Kapazität sind. Für Netze mit n (beliebig nummerierten) Knoten und den Kapazitäten $\kappa_1, \kappa_2, \dots, \kappa_n$ ist der Zustandsraum $\mathcal{S} = \{0, \dots, \kappa_1\} \times \{0, \dots, \kappa_2\} \times \dots \times \{0, \dots, \kappa_n\}$.

Die abstrakte Beschreibung als Warteschlangennetz ermöglicht häufig jedoch eine intuitivere Wahl eines Maßwechsels durch Veränderung der Raten auf der Netzebene, die sich dann entsprechend für die zugrundeliegende Markovkette ergibt. Es werden also die charakteristischen stochastischen Elemente wie Ankunftsprozesse oder Bedienzeitverteilungen verändert. Eine Konsequenz, die sich direkt daraus ergibt, daß die Veränderung der Raten zu einem modifizierten Markovschen Warteschlangennetz führt, ist, daß auch die IS-Verteilung zu einer Markovkette korrespondiert, also bei der Simulation eingebetteter oder randomisierter Markovketten eine modifizierte diskrete Markovkette simuliert

wird. Eine Schwierigkeit dieses Ansatzes liegt in der oft indirekten und nicht offensichtlichen Beziehung zwischen den veränderbaren Elementen und dem Verhalten des Systems insbesondere in Bezug auf seltene Ereignisse. Man unterscheidet bei Warteschlangenmodellen zwischen zustandsabhängigen und zustandsunabhängigen Maßwechseln, also solchen, bei denen die Raten von Ankunftsprozessen oder Parameter von Bedienzeitverteilungen einheitlich verändert werden, und solchen, bei denen die Veränderung der Raten in Abhängigkeit vom Systemzustand, also von der Anzahl der Kunden in einzelnen Knoten durchgeführt wird, und wobei somit Raten oder Parameter je nach Systemzustand unterschiedlich sein können. Zwar ist ein zustandsunabhängiger Maßwechsel einfacher und intuitiver, wir werden jedoch später noch sehen, daß Vieles für zustandsabhängige Maßwechsel spricht, insbesondere vor dem Hintergrund, daß der optimale Maßwechsel nahezu immer zustandsabhängig ist. Daneben gibt es Techniken, die den Maßwechsel gemäß der allgemeinen Formeln direkt auf die Generatormatrix der stetigen Markovkette oder die Übergangsmatrix der eingebetteten bzw. randomisierten Markovkette anwenden. Diese Maßwechsel sind dann in der Regel zustandsabhängig, da nicht alle Übergangswahrscheinlichkeiten oder -raten, die in der originalen Markovkette gleich sind, auf die gleiche Art verändert werden. Es ist klar, daß dies die größte Flexibilität aber auch die größte „Qual der Wahl“ bietet.

4.1.2 Anwendung auf Markovsche Reward-Modelle

Wir wollen nun zeigen, daß auch die Anwendung von Importance Sampling auf die Simulation Markovscher Reward-Modelle analog zu dem Fall von Markovketten erfolgen kann. Markovsche Reward-Modelle sind Erweiterungen von Markovketten, wobei sowohl für stetige als auch diskrete Markovketten eine Bewertung von Zuständen oder Zustandsübergängen mit sogenannten Rewards erfolgt, etwa zu interpretieren als Kosten oder Nutzen, die bei Besuchen in Zuständen oder bei Zustandsübergängen anfallen. Dies liefert einen einheitlichen Rahmen für die integrierte Spezifikation von Modellstruktur und Systemanforderungen, d.h. die Spezifikation der Systemanforderungen ist Teil des Berechnungsmodells. Aus Rewards zu bestimmten Zeiten, aus mittleren Rewards oder aus akkumulierten Rewards können dann diverse Leistungsmaße berechnet werden, wie etwa die sogenannte Performability, die Verteilung des akkumulierten Rewards, oder zumindest deren Erwartungswert. Auch Größen wie die mittlere Absorptionszeit, interpretiert etwa als mittlere Zeit bis zum Systemfehler (*Mean Time To Failure, MTTF*), können mittels Markovscher Reward-Modelle elegant bestimmt werden.

Markovsche Reward-Modelle werden seit langem im Bereich der Entscheidungstheorie eingesetzt, etwa um in Markovschen Entscheidungsprozessen Kosten zuzuordnen, die dann optimiert werden sollen [Ros70, How71b, Put94]. In den Bereich der Leistungs- und Zuverlässigkeitsbewertung von Computer- und Kommunikationssystemen wurden sie von Meyer [Mey80] eingeführt, der insbesondere den Begriff der Performability, der Vertei-

lung des akkumulierten Rewards, geprägt hat. Heute werden Markovsche Reward-Modelle häufig in der Leistungs- und Zuverlässigkeitsbewertung eingesetzt, und es existieren dazu auch diverse Analysemethoden [STR88, RST89, Nic89, MMT96, BGdMT98, TCMS99, GT00]. Es liegt auf der Hand, daß auch hierbei seltene Ereignisse mit klassischen analytischen und numerischen Verfahren und auch mit direkter Simulation nicht effizient analysiert werden können. Solche seltenen Ereignisse können etwa besonders hohe Kosten, große Werte akkumulierter Rewards, oder ähnliches sein. Auch für Markovsche Reward-Modelle ist dann also eine Simulationsbeschleunigung erforderlich, und Importance Sampling kann dazu eingesetzt werden.

Formal ist ein Markovsches Reward-Modell definiert durch eine Markovkette mit Zustandsraum \mathcal{S} und Übergangsmatrix \mathbf{P} sowie eine Menge von Rewards, die bei Modellen mit Zustandsrewards durch einen Vektor $r = (r_i)_{i \in \mathcal{S}}$ und bei Modellen mit Übergangsrwards durch eine Matrix $\mathbf{R} = (r_{ij})_{i,j \in \mathcal{S}}$ beschrieben sind. Oft werden auch Zustandsrewards in einer Diagonalmatrix zusammengefaßt. Anstatt diese separat zu betrachten, kann man sie auch als Spezialfall von Übergangsrwards ansehen, indem für jeden Zustand $j \in \mathcal{S}$ die Übergangsrwards $r_{ij} = r_j, i \in \mathcal{S}$ definiert werden und somit immer, wenn ein Zustand besucht wird, also ein Übergang in diesen Zustand erfolgt, dessen Zustandsreward durch diesen Übergang zugeordnet wird. Wir betrachten daher hier nur die allgemeineren Übergangsrwards.

Die Anwendung von Importance Sampling erfolgt nun analog zu Markovketten. Wir betrachten exemplarisch die Wahrscheinlichkeit, daß der bis zu einer Zeit K akkumulierte Reward eine vorgegebene Schranke c überschreitet, also

$$P \left\{ \sum_{i=0}^{K-1} r_{x_i x_{i+1}} \geq c \right\} = E \left[I_{\left\{ \sum_{i=0}^{K-1} r_{x_i x_{i+1}} \geq c \right\}} \right].$$

Ist nun diese Wahrscheinlichkeit sehr klein, so bietet sich eine Importance-Sampling-Simulation an, wobei gerade solche Zustandsübergänge mit großen Rewards häufiger als im Originalmodell auftreten sollten. Dazu kann also eine alternative Markovkette mit modifizierten Übergangswahrscheinlichkeiten nach klassischer Variante simuliert werden oder allgemein eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf \mathcal{S}^{K+1} verwendet werden. Da die Übergangswahrscheinlichkeiten der originalen Markovkette unabhängig von den Rewards sind, bleiben alle Formeln für Markovketten gültig, und die obige Indikatorfunktion ist hier die konkrete Ausprägung der allgemeinen Funktion g . Auch die Zeit K ist wieder als Stoppzeit zu interpretieren, und damit lassen sich auch stationäre Größen auf diese Weise simulieren.

Auch wenn Markovsche Reward-Modelle im allgemeinen als Erweiterung von Markovketten angesehen werden, können wir doch durch eine andere Sichtweise oder Interpretation Rewards in den klassischen Rahmen von Markovketten einfügen. Zustandsrewards sind Funktionen $r : \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{R}$ auf den Zuständen der Markovkette und Übergangsrwards Funk-

tionen $r : \mathcal{S} \times \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{R}$ auf Zustandspaaren. Die akkumulierten Rewards etwa ergeben sich dann als additive Funktionale

$$g : \mathcal{S}^{K+1} \rightarrow \mathbb{R}, \quad g(x_0, \dots, x_K) = \sum_{i=0}^K r(x_i)$$

für Zustandsrewards und

$$g : \mathcal{S}^{K+1} \rightarrow \mathbb{R}, \quad g(x_0, \dots, x_K) = \sum_{i=0}^K r(x_i, x_{i+1})$$

für Übergangsrwards.

Solche additiven Funktionale sind keine Erweiterung des Konzepts der Markovketten, wir haben sie beispielsweise schon in Abschnitt 2.4.1 kennengelernt. Für die Anwendung von Importance Sampling bevorzugen wir diese Interpretation und Darstellung als Funktionen auf Zuständen oder Zustandspaaren. Insbesondere haben wir hier bereits durch die Wahl des Funktionsbezeichners g verdeutlicht, welche Rolle sie in den allgemeinen Importance-Sampling-Formeln spielen.

Zustandswahrscheinlichkeiten von Markovketten stellen in beiden Interpretationen einen Spezialfall dar. Will man etwa die Anzahl von Besuchen in bestimmten Zuständen oder Mengen von Zuständen ermitteln, wie es zur Bestimmung von Zustandswahrscheinlichkeiten notwendig ist, so kann man alle Übergangsrwards für Übergänge in die betreffenden Zustände auf den Wert Eins setzen, alle anderen Rewards auf den Wert Null, und der akkumulierte Reward ist dann gerade die gesuchte Anzahl von Besuchen.

4.2 Optimale Schätzer

Wir untersuchen in diesem Abschnitt optimale Schätzer und berechnen zunächst einige optimale Maßwechsel für kleinere Beispiele. Die Form solcher optimalen Schätzer und die Art der korrespondierenden optimalen Maßwechsel kann wichtige Einsichten für allgemeinere und komplexere Modelle liefern. Insbesondere werden wir zeigen, daß der optimale Maßwechsel häufig auf ein Wahrscheinlichkeitsmaß führt, daß nicht zur selben „Klasse“ wie das Originalmaß gehört, etwa in dem Sinne, daß es für ein Warteschlangenmodell auf zustandsabhängige Raten führt oder für homogene Markovketten auf inhomogene Markovketten. Wir haben bereits in Abschnitt 3.3.3 gesehen, daß dies selbst für ein so einfaches Beispiel wie die Bestimmung von Tail-Wahrscheinlichkeiten von exponentiell verteilten Zufallsvariablen gilt. Hierbei war die optimale IS-Verteilung keine Exponentialverteilung, sondern eine Kombination von Skalierung und Translation der Originalverteilung. Wir weisen insbesondere darauf hin, daß der exponentielle Maßwechsel in diesem Fall eine Exponentialverteilung liefert und somit durch die Wahl dieser Maßwechselstrategie der optimale Schätzer ausgeschlossen wird.

Da der optimale Schätzer bzw. Maßwechsel jeweils abhängig von der gesuchten Größe ist, kann dieser bei deren Kenntnis mit Hilfe eben dieser Größe berechnet werden, wie wir es für das Beispiel der Tail-Wahrscheinlichkeiten von Exponentialverteilungen gemacht haben. Dieser Ansatz ist jedoch selbstverständlich in der Praxis nicht hilfreich, da hier gerade solche Modelle untersucht werden, für die die betreffenden Größen unbekannt sind, da ansonsten sicherlich keine Simulation erforderlich wäre. Unser Ziel ist also die Berechnung des optimalen Maßwechsels ohne die Kenntnis der gesuchten Größe, und wir berechnen daher im folgenden unsere optimalen Maßwechsel auch für die Beispiele, die exakt analysierbar sind, ohne Verwendung der exakten Ergebnisse, um zu demonstrieren, daß dabei die Likelihood-Quotienten-Bedingung (LQ-Bedingung, siehe Abschnitt 3.3.3) hilfreich ist. Wir nutzen also die Bedingungen, daß unter dem optimalen Maßwechsel nur solche und alle Pfade generiert werden können, in denen das seltene Ereignis auftritt, und daß der Likelihood-Quotient für alle solche Pfade, die zusätzlich identische Werte der gesuchten Größe liefern, ebenfalls identisch ist. Dazu ist nicht erforderlich, das Wissen einzusetzen, daß die betreffenden Werte in diesem Likelihood-Quotienten enthalten sind.

Die grobe Vorgehensweise bei dieser Art der Berechnung optimaler Maßwechsel besteht darin, zuerst die LQ-Bedingung „herzustellen“, also Bedingungen für den Maßwechsel herzuleiten, die aus der Identität von Likelihood-Quotienten folgen, und dann zu gewährleisten, daß zusätzlich genau alle Pfade, die das seltene Ereignis enthalten, unter diesem Maßwechsel generiert werden können. Die Aussage, der optimale IS-Schätzer sei wegen der Abhängigkeit von der gesuchten Größe nicht verfügbar, trifft also so pauschal nicht zu. Es ist sicherlich häufig aufwendig, für komplexe Modelle oft zu aufwendig, aber dennoch möglich und in einigen Fällen auch effizient, den optimalen IS-Schätzer wie beschrieben zu bestimmen. Das oft schwierigere Problem besteht, wie wir sehen werden, vielmehr darin, zunächst eine geeignete Modellklasse für das Importance Sampling zu finden, so, daß der optimale IS-Schätzer darin enthalten ist. Wir wollen auch dies demonstrieren und für die Beispiele jeweils zeigen, wie man durch experimentelle Veränderungen oder sukzessive Verallgemeinerungen Ideen für eine solche Modellklasse entwickelt, zum Teil wieder verwerfen muß und schließlich doch den optimalen IS-Schätzer finden kann. Man kann dabei durch adäquate allgemeinere Modellierung des Originalsystems oft die Modellklasse erhalten. So sind natürlich Warteschlangenmodelle mit zustandsunabhängigen Raten Spezialfälle von Warteschlangenmodellen mit zustandsabhängigen Raten, ebenso wie homogene Markovketten als Spezialfall inhomogener Markovketten angesehen werden können. Die Art der Modellierung spielt also eine Rolle dabei, ob die Klasse erhalten bleibt. Es ist jedoch auch klar, daß mit allgemeineren Modellen auch die Anzahl veränderbarer Parameter und damit der Aufwand zur Bestimmung des optimalen IS-Schätzers steigt. Dies ist sicher der Hauptgrund dafür, daß optimale Maßwechsel in der Literatur eher selten untersucht werden und meist schnell die Beschränkung auf die Eigenschaften des beschränkten relativen Fehlers oder der asymptotischen Optimalität – die selbstverständlich erstrebenswert sind, wenn der optimale Maßwechsel nicht effizient berechenbar ist – erfolgt oder eben

erfolgen muß. Es erscheint trotzdem sinnvoll, zumindest für kleinere Modelle optimale IS-Schätzer zu betrachten, da sie die erwähnten Einsichten in die Art des Maßwechsels liefern, so oft auch für größere Modelle gewisse Ansätze als ungeeignet verworfen werden können, andererseits aber auch bestimmte Arten des Maßwechsels als erfolgversprechend für komplexe Modelle suggeriert werden und damit als Maßwechselstrategien in Betracht gezogen werden können.

4.2.1 Das M/M/1-Modell

Das M/M/1-Modell, also ein elementares Warteschlangensystem mit einem Bediener, Poissonschem Ankunftsprozeß und exponentiell verteilten Bedienzeiten, gilt als klassisches Referenzsystem für Maßwechselstrategien. Meist interessiert dabei die Wahrscheinlichkeit eines hohen Füllstands, also einer großen Anzahl von Kunden im System oder bei beschränkter Warteschlangenkapazität die Wahrscheinlichkeit einer vollen Warteschlange oder eines Warteschlangenüberlaufs. Das große Interesse ist dabei darin begründet, daß einerseits das M/M/1-Modell mit beschränkten Kapazitäten ein adäquates Modell für Teile realer Systeme mit beschränkten Puffern sein kann und andererseits ein einfacher asymptotisch optimaler Maßwechsel bekannt ist, das Vertauschen der Ankunfts- und der Bedienrate. Erstaunlicherweise wird aber auch für das M/M/1-Modell die Untersuchung des optimalen Maßwechsels vernachlässigt. Wir betrachten hier die Wahrscheinlichkeit, daß in einem stabilen M/M/1-Modell während einer Arbeitsphase des Systems ein vorgegebener sehr hoher Füllstand erreicht wird, bevor das System wieder leer wird. Dies entspricht in einem Modell mit beschränkter Kapazität der Wahrscheinlichkeit für einen Pufferüberlauf oder einen Kundenverlust während einer Arbeitsphase, wobei der zu untersuchende Füllstand gerade um Eins größer als die Systemkapazität zu wählen ist. Wir haben bereits mehrfach den bekannten asymptotisch optimalen Maßwechsel erwähnt, der darin besteht, die Ankunfts- und die Bedienrate des Systems zu vertauschen. Das resultierende Modell ist also ein instabiles M/M/1-Modell, dessen Auslastung gerade der Kehrwert der Auslastung des Ausgangsmodells ist. Die Raten bleiben dabei unabhängig vom Systemzustand, also von der Anzahl der im System befindlichen Kunden. Dieser asymptotisch optimale Maßwechsel ist also zustandsunabhängig. Hier wollen wir nun mittels der LQ-Bedingung den eindeutig bestimmten optimalen Maßwechsel berechnen, und wir zeigen damit, daß das optimale Importance-Sampling-Modell zu einem M/M/1-Modell mit zustandsabhängigen Ankunfts- und Bedienraten korrespondiert. Dies bedeutet einerseits, daß dem Modell weiterhin eine Markovkette zugrundeliegt, andererseits werden aber anders als bei einem zustandsunabhängigen Maßwechsel die Übergangswahrscheinlichkeiten der dem Originalmodell zugrundeliegenden Markovkette, die gleich sind, nicht alle auf die selbe Weise verändert. Betrachten wir nur die Markovkettenebene, so führt hier der optimale Maßwechsel wieder auf eine Markovkette. Auf der Warteschlangenebene wird durch den Maßwechsel die Modellklasse verallgemeinert auf zustandsabhängige Raten.

Selbstverständlich ist das Originalmodell aber ein Spezialfall innerhalb dieser Verallgemeinerung, die Raten sind dabei gerade für alle Zustände gleich.

Der Zustand des Systems ist durch die Anzahl der im System befindlichen Kunden beschrieben, der Zustandsraum der Markovkette also $\mathcal{S} = \mathbb{N}$ oder bei beschränkter Kapazität $\mathcal{S} = \{0, 1, \dots, \kappa\}$, wobei dann der Füllstand κ gerade dem Überlauf eines Systems der Kapazität $\kappa - 1$ entspricht, also einem Kundenverlust in einem M/M/1/(\(\kappa - 1\))-Modell. Da wir auch für unbeschränkte Kapazitäten nur am Erreichen eines Füllstandes κ interessiert sind, genügt also die zweite Variante. Für die folgenden Berechnungen spielt der Zustandsraum jedoch keine wesentliche Rolle. Wir bezeichnen wie üblich mit $\lambda > 0$ die Ankunftsrate und mit $\mu > 0$ die Bedienrate des M/M/1-Modells, und es gelte OBdA $\lambda + \mu = 1$. Dann sind λ und μ gerade die Wahrscheinlichkeiten für eine Ankunft bzw. eine Bedienung. Für das Importance-Sampling-Modell bezeichnen λ_j, μ_j entsprechend die Wahrscheinlichkeiten für Ankünfte bzw. Bedienungen im Zustand j , also wenn j Kunden im System sind. Wir betrachten nun Pfade, die das seltene Ereignis enthalten, also Pfade vom Zustand 0 in den Zustand κ ohne Rückkehr in den Zustand 0, und unterscheiden dabei zunächst nach der Länge dieser Pfade. Die Wahrscheinlichkeit eines Pfades $(x_0, x_1, \dots, x_\ell)$ sei für das Originalmodell mit $p(x_0, x_1, \dots, x_\ell)$ und für das Importance-Sampling-Modell mit zustandsabhängigen Raten mit $p^*(x_0, x_1, \dots, x_\ell)$ bezeichnet.

Es gibt nur einen direkten Pfad vom leeren System zum Überlauf, nämlich $(0, 1, \dots, \kappa)$, den wir erhalten, wenn ausschließlich Ankünfte passieren. Für die Wahrscheinlichkeiten dieses Pfades in den beiden Modellen gilt

$$p(0, 1, \dots, \kappa) = \lambda^\kappa, \quad p^*(0, 1, \dots, \kappa) = \prod_{i=0}^{\kappa-1} \lambda_i.$$

Damit folgt für den Likelihood-Quotienten

$$L(0, 1, \dots, \kappa) = \frac{\lambda^\kappa}{\prod_{i=0}^{\kappa-1} \lambda_i}.$$

Betrachten wir nun alle Pfade, in denen genau eine Bedienung und somit auch eine zusätzliche Ankunft stattgefunden hat. Die Bedienung sei erfolgt, als j Kunden im System waren. Dann erhalten wir die Wahrscheinlichkeiten

$$p(0, 1, \dots, j, j-1, j, j+1, \dots, \kappa) = \lambda^{\kappa+1} \mu,$$

$$p^*(0, 1, \dots, j, j-1, j, j+1, \dots, \kappa) = \mu_j \lambda_{j-1} \prod_{i=0}^{\kappa-1} \lambda_i$$

und den Likelihood-Quotienten

$$L(0, 1, \dots, j, j-1, j, j+1, \dots, \kappa) = \frac{\lambda^{\kappa+1} \mu}{\mu_j \lambda_{j-1} \prod_{i=0}^{\kappa-1} \lambda_i}.$$

Nach der LQ-Bedingung gilt $L(0, 1, \dots, \kappa) = L(0, 1, \dots, j, j-1, j, j+1, \dots, \kappa)$, also für $j > 1$

$$\frac{\lambda^\kappa}{\prod_{i=0}^{\kappa-1} \lambda_i} = \frac{\lambda^{\kappa+1} \mu}{\mu_j \lambda_{j-1} \prod_{i=0}^{\kappa-1} \lambda_i}, \quad (4.17)$$

$$1 = \frac{\lambda \mu}{\mu_j \lambda_{j-1}}, \quad (4.18)$$

$$\mu_j = \frac{\lambda \mu}{\lambda_{j-1}}, \quad (4.19)$$

und für die Ankunfts-wahrscheinlichkeit folgt

$$\lambda_j = 1 - \mu_j = 1 - \frac{\lambda \mu}{\lambda_{j-1}}. \quad (4.20)$$

Damit haben wir also eine rekursive Formel für die zustandsabhängigen Raten bzw. Wahrscheinlichkeiten, die aus der Anwendung der LQ-Bedingung auf den Pfad ohne Bedienung und einen Pfad mit genau einer Bedienung resultiert. Es muß die LQ-Bedingung aber für alle Pfade zum seltenen Ereignis gelten, zunächst also insbesondere für alle Pfade mit genau einer Bedienung. Dies bedeutet, daß alle diese Pfade unter Importance Sampling die gleiche Wahrscheinlichkeit haben müssen. Betrachten wir nun zwei solche Pfade mit einer Bedienung im Zustand j bzw. im Zustand $j+1$, dann erhalten wir

$$\begin{aligned} \mu_j \lambda_{j-1} \prod_{i=0}^{\kappa-1} \lambda_i &= \mu_{j+1} \lambda_j \prod_{i=0}^{\kappa-1} \lambda_i, \\ \frac{\mu_j}{\mu_{j+1}} &= \frac{\lambda_j}{\lambda_{j-1}}. \end{aligned}$$

Setzen wir nun (4.19) ein, erhalten wir gerade

$$\frac{\mu_j}{\mu_{j+1}} = \frac{\lambda \mu}{\lambda_{j-1}} \cdot \frac{\lambda_j}{\lambda \mu} = \frac{\lambda_j}{\lambda_{j-1}}.$$

Die Rekursion erfüllt also auch die LQ-Bedingung für alle Pfade mit genau einer Bedienung.

Betrachten wir nun Pfade mit ℓ Bedienungen und dementsprechend auch ℓ zusätzlichen Ankünften. Die Wahrscheinlichkeit solcher Pfade im M/M/1-Modell ist $\lambda^\kappa (\lambda\mu)^\ell$, unabhängig von den Zuständen, in denen die Bedienungen erfolgen. Diese Zustände müssen nun beim Importance-Sampling-Modell berücksichtigt werden, es seien Zustände j_1, \dots, j_ℓ . Die Wahrscheinlichkeit eines solchen Pfades unter dem zustandsabhängigen Modell ist

$$\mu_{j_1} \lambda_{j_1-1} \mu_{j_2} \lambda_{j_2-1} \cdots \mu_{j_\ell} \lambda_{j_\ell-1} \prod_{i=0}^{\kappa-1} \lambda_i = \left(\prod_{i=1}^{\ell} \mu_{j_i} \lambda_{j_i-1} \right) \left(\prod_{i=0}^{\kappa-1} \lambda_i \right).$$

Die Likelihood-Quotienten müssen für alle ℓ und alle Zustände j_1, \dots, j_ℓ gleich sein. Mit $\mu_j \lambda_{j-1} = \lambda\mu$ folgt zunächst für die Wahrscheinlichkeit unter Importance Sampling

$$\left(\prod_{i=1}^{\ell} \mu_{j_i} \lambda_{j_i-1} \right) \left(\prod_{i=0}^{\kappa-1} \lambda_i \right) = (\lambda\mu)^\ell \prod_{i=0}^{\kappa-1} \lambda_i$$

und damit für die Likelihood-Quotienten

$$\frac{\lambda^\kappa (\lambda\mu)^\ell}{(\lambda\mu)^\ell \prod_{i=0}^{\kappa-1} \lambda_i} = \frac{\lambda^\kappa}{\prod_{i=0}^{\kappa-1} \lambda_i}.$$

Somit erfüllt die Rekursion (4.19) also die LQ-Bedingung für alle Pfade. Es verbleibt die Wahl der Rekursionsverankerung. Es ist klar, daß $\mu_0 = 0$ und $\lambda_0 = 1$ gilt, und da unter optimalem Importance Sampling nur Pfade zum seltenen Ereignis generiert werden, folgt zudem $\mu_1 = 0, \lambda_1 = 1$. Insgesamt haben wir also gezeigt, daß der optimale Maßwechsel auf ein M/M/1-Modell mit zustandsabhängigen Raten führt, die durch die Rekursion (4.19), (4.20) mit obigen Anfangswerten eindeutig bestimmt sind.

Die Frage liegt nahe, ob der optimale Maßwechsel für die Arbeitsphasen auch optimal zur Bestimmung stationärer Zustandswahrscheinlichkeiten ist. Wir werden sehen, daß dies nicht der Fall ist und können somit feststellen, daß erstens die Einschränkung auf Arbeitsphasen eine Vereinfachung darstellt und zweitens optimale Maßwechsel nicht allein vom untersuchten System, sondern auch vom untersuchten Leistungsmaß abhängen. Die Wahrscheinlichkeit eines Zustands κ kann mit den in Abschnitt 3.2 beschriebenen Verfahren simulativ geschätzt werden. Wir wollen hier die Methode unabhängiger Wiederholungen von Simulationsläufen fester Länge und die regenerative Methode betrachten. Für die Methode der Gruppenmittelwerte ist die Argumentation analog zu den unabhängigen Wiederholungen.

Für Simulationsläufe mit fester Länge, also mit zwar beliebig langem aber dennoch festem Horizont, sieht man leicht ein, daß unter dem beschriebenen Maßwechsel für keine Simulationslauflänge garantiert ist, daß das seltene Ereignis in jedem Lauf eintritt. Es ist klar, daß bei Start der Simulation im Zustand des leeren Systems für die Schätzung

der Wahrscheinlichkeit eines Zustands κ die Simulationslauflänge mindestens κ sein muß, um überhaupt das seltene Ereignis simulieren zu können. Eine Wahl der Lauflänge, die wesentlich größer ist, erhöht zwar die Wahrscheinlichkeit, daß der seltene Zustand erreicht wird, da hohe Füllstände unter dem optimalen Importance Sampling nicht selten sind, aber dennoch bleibt es möglich, daß ein zu untersuchender Füllstand nicht erreicht wird.

Für die regenerative Methode wird häufig der Zustand des leeren Systems als Regenerationszustand gewählt. Hier sehen wir sofort, daß unter dem für die Arbeitsphasen optimalen Importance Sampling dieser Zustand nie wieder erreicht wird. Dieses Problem kann durch die Wahl eines anderen Regenerationszustands gelöst werden. Dann ist jedoch wie im Fall unabhängiger Wiederholungen nicht mehr garantiert, daß das seltene Ereignis, also der zu untersuchende Zustand, in jedem Regenerationszyklus erreicht wird. Ein ähnliches Problem stellt sich ganz allgemein beim Importance Sampling unter Verwendung der regenerativen Methode. Durch den Maßwechsel wird gerade ein seltener Zustand wahrscheinlicher und potentielle Regenerationszustände, die im Originalmodell ausreichend häufig besucht werden, werden selten. Daraus resultieren dann extrem lange Regenerationszyklen. Um dies zu verhindern, wird häufig die Technik des switching angewendet, d.h. Importance Sampling wird nach Auftreten des seltenen Ereignisses abgeschaltet, und unter dem ursprünglichen Wahrscheinlichkeitsmaß wird der Regenerationszyklus zu Ende geführt. Betrachten wir nun diese Technik für das vorliegende Problem und den optimalen Maßwechsel für die Arbeitsphasen. Für das leere System als Regenerationszustand garantiert der Maßwechsel das Erreichen des seltenen Ereignisses in jedem Regenerationszyklus. Zudem sind bei Erreichen des betreffenden Zustands die Likelihood-Quotienten aller Pfade bis zu diesem Zustand gleich. Nun werde Importance Sampling abgeschaltet und unter dem Originalmaß simuliert, bis der Regenerationszustand wieder erreicht wird. Damit wird also der Likelihood-Quotient nicht mehr verändert und ist somit für alle Regenerationszyklen gleich. Die Regenerationszyklen haben jedoch unter Umständen unterschiedliche Längen. Falls nun etwa in unterschiedlich langen Zyklen das seltene Ereignis gleich häufig eingetreten ist, so ist also für diese Regenerationszyklen unterschiedlicher Länge die Anzahl der Beobachtungen des seltenen Ereignisses gleich. Unter optimalem Importance Sampling muß aber jeder Simulationslauf, hier jeder Regenerationszyklus, eine exakte Schätzung der gesuchten Größe liefern. Der regenerative Schätzer für stationäre Zustandswahrscheinlichkeiten, der Quotient aus dem Erwartungswert der Anzahl von Besuchen im betreffenden Zustand und dem Erwartungswert der Länge eines Regenerationszyklus, degeneriert also in dem Sinne, daß für jeden Zyklus der Quotient aus der Anzahl der Besuche und der Zyklenlänge gleich sein muß. Dies ist aber, wie oben beschrieben, nicht gegeben.

Somit ist also der optimale Maßwechsel für das Erreichen eines Zustands innerhalb einer Arbeitsphase selbst in einem so einfachen Modell wie dem M/M/1-Modell nicht identisch mit dem für stationäre Zustandswahrscheinlichkeiten, weder für die Methode unabhängiger Wiederholungen noch für regenerative Simulationen. Wir untersuchen in den

Abschnitten 4.2.4–4.2.6 optimale Maßwechsel für verschiedene Arten von Leistungsmaßen von Markovmodellen in allgemeinerem Kontext und zeigen insbesondere, daß nur für Wahrscheinlichkeiten in Bezug auf Arbeitsphasen der optimale Maßwechsel immer auf Markovsche Modelle führt, während für endlichen Horizont und stationäre Größen die Gedächtnislosigkeit im allgemeinen verloren geht.

4.2.2 Ein Markovkettenbeispiel

Die meisten Anwendungen von Importance Sampling auf Markovmodelle setzen ein Warteschlangenmodell oder zumindest ein Modell voraus, das gewisse Strukturen aufweist und dem die Markovkette zugrundeliegt. Zu den wenigen Fällen, in denen Importance Sampling direkt auf Markovketten angewendet wird, zählt eine Arbeit von Andradottir, Heyman und Ott [AHO95], die bemerkenswert große, insbesondere auch kritische Resonanz hervorgerufen hat. Wir wollen diese Arbeit nun genauer betrachten und diskutieren, da dabei einige Effekte und auch Irrwege deutlich werden. Insbesondere verdeutlicht ein Beispiel aus dieser Arbeit die große Bedeutung des Likelihood-Quotienten für die Effizienz sowie den Einfluß der gewählten Simulationsmethode auf die Erfolgsaussichten der Importance-Sampling-Simulation. Letzteres diskutieren wir auch in Abschnitt 4.3.3.

Wir wollen zunächst die kritische Rolle des Likelihood-Quotienten demonstrieren und betrachten dazu das konkrete Zahlenbeispiel aus [AHO95]. Gegeben sei eine Markovkette (X_n) mit Zustandsraum $\mathcal{S} = \{1, 2\}$ und Übergangsmatrix

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0.99 & 0.01 \\ 0.99 & 0.01 \end{pmatrix}.$$

Die stationäre Zustandswahrscheinlichkeit des Zustands 2 sei simulativ zu bestimmen. In diesem Fall sieht man leicht, daß diese Wahrscheinlichkeit 0.01 beträgt. Dies fällt auch eigentlich nicht in die Größenordnung, um von einem seltenen Ereignis zu sprechen. In [AHO95] ist dieses Beispiel dennoch herangezogen worden, um einige Effekte zu verdeutlichen, da sie dabei schon sehr gut zu beobachten sind. Zudem ist Importance Sampling ja eine allgemeine, nicht auf seltene Ereignisse eingeschränkte Varianzreduktionsmethode. Wir wollen daher dieses Beispiel aufgreifen und auch einige der Annahmen und Folgerungen in [AHO95] kritisch untersuchen.

Andradottir et. al. wählen als Simulationsansatz die Methode unabhängiger Replikationen von Simulationsläufen fester Länge. Als Startzustand jedes Laufs wird der Zustand 1 festgelegt. Der Grund ist die dahinterstehende Intuition, daß dieser Zustand ein fehlerfreies System repräsentiert, von dem anfangs ausgegangen wird, und entsprechend der Zustand 2 einen Fehlerzustand repräsentiert. Mit dieser Festlegung des Startzustands und dem Verzicht auf eine Einschwingphase untersuchen Andradottir et. al. also formal eigentlich transiente Zustandswahrscheinlichkeiten. Man mag argumentieren, daß bei nur zwei

Zuständen für einen ausreichend großen Zeithorizont der Startzustand keine wesentliche Rolle spielt. Andererseits muß man anmerken, daß gerade bei der Untersuchung eines so kleinen Modells diese Ungenauigkeit vermeidbar und kaum nachvollziehbar ist. Für die Simulation mittels Importance Sampling ist vorgegeben, daß das IS-Maß wiederum eine homogene diskrete Markovkette mit Zustandsraum \mathcal{S} ist und alle positiven Übergangswahrscheinlichkeiten in positive Übergangswahrscheinlichkeiten verändert werden müssen, also alle original möglichen Übergänge auch beim Importance Sampling möglich sein müssen. Wir haben auf die Unnötigkeit dieser Annahme bereits mehrfach hingewiesen und werden hier einmal mehr sehen, daß sie den optimalen Maßwechsel ausschließt. Andradottir et. al. berechnen für die Simulationslaufängen 10 und 100 die „optimalen“ – optimal in dem Sinne, daß sie für die gewählte Art des Maßwechsels, der Simulationsmethode der unabhängigen Replikationen und der jeweiligen Simulationslaufänge die kleinste Varianz liefern – modifizierten Übergangsmatrizen*

$$\mathbf{P}_{10}^* = \begin{pmatrix} 0.9 & 0.1 \\ 0.9 & 0.1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{P}_{100}^* = \begin{pmatrix} 0.98 & 0.02 \\ 0.98 & 0.02 \end{pmatrix}.$$

Wir stellen zunächst gemäß [AHO95] fest:

- Die Übergangsmatrix hängt von der Simulationslaufänge ab.
- Für andere Simulationslaufängen sind die Ergebnisse schlecht.
- Die Übergangsmatrix ist für größere Zustandsräume nur schwer oder gar nicht zu bestimmen.

Die Tatsache, daß die Übergangsmatrix von der Simulationslaufänge abhängt, schließt Ansätze, bei denen durch sukzessive Verlängerung der Läufe eine größere Genauigkeit erzielt werden soll, aus. Warum die modifizierte Übergangsmatrix, die für eine bestimmte Simulationslaufänge optimiert ist, im allgemeinen schlechte Ergebnisse für andere Simulationslaufängen liefert, verdeutlicht eine genauere Untersuchung des Likelihood-Quotienten für das Beispiel, die wir detaillierter als in [AHO95] vornehmen. Wir wählen \mathbf{P}_{10}^* für die Simulationslaufänge 100. Sei V die Anzahl der Besuche im Zustand 2,

$$p_v := P\{V = v\} = \binom{100}{v} \cdot 0.9^{100-v} \cdot 0.1^v$$

und L_v der Wert des Likelihood-Quotienten, wenn genau v Besuche in 2 stattfinden. Die Tabellen in Abbildung 4.2 auf Seite 104 zeigen die Werte für $v = 0, \dots, 10$ sowie jeweils den Wert $L_{v,opt}$ des „optimalen Likelihood-Quotienten“, also den Wert des Likelihood-Quotienten unter optimalem Importance Sampling.

Die Varianz des Schätzers für die stationäre Wahrscheinlichkeit des Zustands 2 ist in diesem Fall 558 mal so groß wie bei direkter Simulation. Der Grund dafür ist informell gesprochen eine zu große Simulationsbeschleunigung. Obwohl der Erwartungswert des Likelihood-Quotienten 1 beträgt, ist die Wahrscheinlichkeit für einen Wert des

*In [AHO95] jeweils mit Q bezeichnet.

v	0	1	2	3	4	5	6
L_v	$1.4 \cdot 10^4$	$1.3 \cdot 10^3$	$1.1 \cdot 10^2$	10	0.94	$8.6 \cdot 10^{-2}$	$7.8 \cdot 10^{-3}$
$L_{v,opt}$	–	$1.0 \cdot 10^{-2}$	$5.0 \cdot 10^{-3}$	$3.3 \cdot 10^{-3}$	$2.5 \cdot 10^{-3}$	$2.0 \cdot 10^{-3}$	$1.7 \cdot 10^{-3}$
p_v^*	$2.7 \cdot 10^{-5}$	$3.0 \cdot 10^{-4}$	$1.6 \cdot 10^{-3}$	$5.9 \cdot 10^{-3}$	$1.6 \cdot 10^{-2}$	$3.4 \cdot 10^{-2}$	$6.0 \cdot 10^{-2}$
$P\{L_v \geq 1\}$	$7.8 \cdot 10^{-3}$						
$P\{L_v \geq L_{v,opt}\}$	$1.2 \cdot 10^{-1}$						

v	7	8	9	10
L_v	$7.1 \cdot 10^{-4}$	$6.4 \cdot 10^{-5}$	$5.9 \cdot 10^{-6}$	$5.3 \cdot 10^{-7}$
$L_{v,opt}$	$1.4 \cdot 10^{-3}$	$1.3 \cdot 10^{-3}$	$1.1 \cdot 10^{-3}$	$1.0 \cdot 10^{-3}$
p_v^*	$8.9 \cdot 10^{-2}$	$1.1 \cdot 10^{-1}$	$1.3 \cdot 10^{-1}$	$1.3 \cdot 10^{-1}$

Abbildung 4.2: Likelihood–Quotienten und Wahrscheinlichkeiten

Likelihood–Quotienten von mehr als 1 in diesem Fall sehr viel kleiner als für Werte kleiner als 1, wobei aber dann der Likelihood–Quotient sehr viel größer als 1 ist, maximal mehr als 10000 mal so groß. Einen Likelihood–Quotienten von mehr als 1 erhält man dabei nur für $v \leq 3$ Besuche im seltenen Zustand. Andererseits ist die Wahrscheinlichkeit für extrem kleine Werte des Likelihood–Quotienten verhältnismäßig groß. Wir erinnern uns daran, daß beim optimalen Maßwechsel der Wert dieses Likelihood–Quotienten etwa in der Größenordnung der gesuchten Wahrscheinlichkeit liegt, genauer in diesem Fall der Quotient aus dieser Wahrscheinlichkeit und der Anzahl der Besuche ist. Schon für sieben Besuche im seltenen Zustand unterschreitet der Wert L_v diesen optimalen Wert. Für 100 Besuche ergibt sich ein Likelihood–Quotient von $1.1 \cdot 10^{-100}$, wogegen der optimale Likelihood–Quotient, der in diesem Fall sein Minimum annimmt, den Wert $1.0 \cdot 10^{-4}$ hat. Insgesamt führt dies also zu einer großen Varianz des Likelihood–Quotienten und damit des IS–Schätzers.

Das Problem extrem kleiner Likelihood–Quotienten stellt sich allgemein bei der Methode unabhängiger Replikationen von Simulationsläufen fester Länge mit einer fest gewählten modifizierten Übergangsmatrix, insbesondere für sehr lange Läufe, wie sie für realistische Modelle notwendig sind. Tatsächlich konvergiert ja der Likelihood–Quotient fast sicher gegen 0, wenn die Simulationslaufänge gegen unendlich konvergiert, vgl. [GI89], wie wir im Abschnitt 4.1 bereits festgestellt haben. Die Schlußfolgerung von [AHO95] besteht darin, daß für wachsende Simulationslaufängen die modifizierte Übergangsmatrix immer näher bei der ursprünglichen Übergangsmatrix liegen soll. Wir halten dies nicht für sonderlich überraschend, da bei potentiell unendlicher Simulationslaufänge eine Simulation seltener Ereignisse auch ohne Importance Sampling möglich ist. Leider bedeutet dies jedoch auch eine potentiell unendlich lange Laufzeit der Simulation. Es macht also wenig Sinn, über solche unendlichen oder beliebig langen Simulationsläufe unter Verwendung einer festen

Übergangsmatrix zu diskutieren. Letztendlich läßt sich die Folgerung einfach zusammenfassen in der Feststellung, daß bei unbegrenzter Zeit Importance Sampling nicht nötig ist.

Eine Folgerung sollte aber viel eher sein, daß offensichtlich zur Simulation stationärer Zustandswahrscheinlichkeiten mittels Importance Sampling entweder die Methode unabhängiger Replikationen fester Länge ungeeignet ist, worauf auch unsere Diskussion im vorherigen Abschnitt und unsere Fallstudie zum M/M/1-Modell, die wir in 4.3.3 vorstellen, hindeuten, oder daß eine homogene Markovkette als Importance-Sampling-Maß für eine homogene Markovkette eine zu starke Einschränkung darstellt, noch dazu mit der zusätzlichen Bedingung, daß positive Übergangswahrscheinlichkeiten positiv bleiben müssen. Die Beobachtung von Andradottir et. al. motiviert damit unter anderem auch unseren Ansatz des dynamischen Importance Sampling, den wir in Abschnitt 4.4.2 allgemein vorstellen, bei dem während eines Simulationslaufes die Übergangswahrscheinlichkeiten verändert werden, und zwar gerade so, daß sich zu Beginn des Laufes diese Übergangswahrscheinlichkeiten verhältnismäßig stark von denen der originalen Markovkette unterscheiden und sich dann mit fortschreitender Zeit diesen annähern. Dabei kann man erweiternd auch während der Simulation auftretende Werte des Likelihood-Quotienten und die bereits beobachteten seltenen Ereignisse, etwa Besuche in gewissen Zielzuständen, einbeziehen.

Es sei noch erwähnt, daß die drei Autoren in [AHO96] unter den identischen Voraussetzungen und Einschränkungen wie in [AHO95] eine numerische Methode zur Bestimmung der optimalen Übergangsmatrix für eine vorgegebene feste Simulationslauflänge vorschlagen. Es ist klar, daß prinzipiell immer eine Minimierung der Varianz unter vorgegebenen Nebenbedingungen durchgeführt werden kann. In diesem Fall sind die Parameter, die optimiert werden sollen, alle Übergangswahrscheinlichkeiten der Markovkette, also insgesamt $|\mathcal{S}|^2$ Parameter für einen Zustandsraum \mathcal{S} . Alle diese Parameter müssen zwischen 0 und 1 liegen und zudem die Bedingung erfüllen, daß sie eine stochastische Matrix bilden. Der Aufwand hierfür ist jedoch enorm und für realistisch dimensionierte Systeme nicht durchführbar. Neben dem erheblichen Aufwand dieser numerischen Methode ergibt sich dabei gerade auch das Problem, daß für gegebene Markovketten unter Umständen die vorgegebene Simulationslauflänge nie zu einer effizienten Importance-Sampling-Simulation führen kann, da keine modifizierte Übergangsmatrix bestimmt werden kann, die zu IS-Schätzern mit kleinerer Varianz als für den Standard-Schätzer mit der Originalmatrix korrespondiert, was schlicht daran liegt, daß eine solche Übergangsmatrix in vielen Fällen nicht existiert. Wir wollen bereits hier darauf hinweisen, daß auch beim adaptiven Importance Sampling, das wir in Abschnitt 5 beschreiben, eine Optimierung von Parametern durchgeführt wird, wobei jedoch diese Optimierung im Verlauf der Simulation basierend auf der Stichprobenvarianz erfolgt. Auch hier ist jedoch die Parametrisierung und insbesondere die Größe des Parameterraums ein wesentliches Kriterium für Güte und Komplexität der Optimierung.

Sigrun Andradottir teilte in einer Email mit, daß sie sich später nicht weiter mit der Simulation seltener Ereignisse, insbesondere auch nicht mit Importance Sampling für Markovketten, beschäftigt hat und keine weiterführenden oder alternativen Überlegungen zu den beiden genannten Arbeiten seitens der Autoren existieren. Unsere kritische Meinung zu diesen Arbeiten wird auch von führenden Wissenschaftlern geteilt, wie wir aus einem Gespräch mit Perwez Shahabuddin wissen. Dennoch halten wir es für wichtig und lehrreich, die Probleme zu diskutieren und insbesondere verwertbare Schlüsse daraus zu ziehen, vor allem da nicht auf den ersten Blick ersichtlich ist, daß und warum der Ansatz so, wie ihn Andradottir et. al. verfolgen, nicht zum Erfolg führen kann.

Wir betrachten nun zunächst eine Verallgemeinerung des Beispiels aus [AHO95] und wollen dafür den optimalen Maßwechsel berechnen, wobei wir insbesondere auch den Einfluß der Simulationsmethode demonstrieren. Sei (X_n) eine homogene diskrete Markovkette mit Zustandsraum $\mathcal{S} = \{1, 2\}$ und Übergangsmatrix

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} p & 1-p \\ p & 1-p \end{pmatrix}.$$

Man berechnet hier wieder leicht die stationäre Verteilung $\pi = (p, 1-p)$.

Wir sehen sofort, daß, wie bereits erwähnt, in [AHO95] unnötige und unbegründete Annahmen gemacht wurden, die in diesem Fall verhindern, daß die vorgegebene Art des Maßwechsels zum optimalen Maßwechsel führen kann. Es ist klar, daß gemäß einer Übergangsmatrix \mathbf{P}^* mit der Bedingung, daß positive Übergangswahrscheinlichkeiten positiv bleiben müssen und mit fester endlicher Simulationslauflänge die Wahrscheinlichkeit für Pfade, die den Zustand 2 nicht enthalten, immer positiv ist. Wir geben hier für das Beispiel eine einfache Alternative an, um den optimalen Maßwechsel zu erhalten, wobei das IS-Maß ebenfalls eine homogene diskrete Markovkette ist. Wiederum gehen wir dabei natürlich nicht davon aus, daß uns die gesuchte Wahrscheinlichkeit bereits bekannt ist. Zunächst vermeiden wir die Einschränkung, daß alle ursprünglich möglichen Übergänge auch für die modifizierte Markovkette möglich sein müssen. Außerdem wählen wir als Simulationsansatz die regenerative Methode mit Regenerationszustand 1 und nutzen die spezielle Struktur des Beispiels aus. Die stationäre Wahrscheinlichkeit des Zustands 2 ist hierbei gerade identisch zur Wahrscheinlichkeit, den Zustand 2 während eines regenerativen Zyklus zu besuchen, was ermöglicht, durch die simulative Schätzung dieser Wahrscheinlichkeit auch die stationäre Zustandswahrscheinlichkeit zu erhalten. Dies zeigt aber auch, daß das Beispiel in [AHO95] zu einfach und klein bzw. zu speziell ist, um allgemeine Schlüsse für „Positivergebnisse“ abzuleiten. Wir werden in 4.2.4–4.2.6 sehen, daß gerade die Möglichkeit der Beschränkung auf die Betrachtung, ob ein Besuch während eines Regenerationszyklus stattfindet, der Grund für die Existenz des optimalen Maßwechsels in der Familie der homogenen diskreten Markovketten ist. Im allgemeinen ist die Wahrscheinlichkeit für den Besuch eines Zustands während eines Regenerationszyklus verschieden von der stationären Zustandswahrscheinlichkeit, und für stationäre Zustands-

wahrscheinlichkeiten führt der optimale Maßwechsel im allgemeinen aus der Familie der Markovketten heraus. Das Beispiel ermöglicht also lediglich das Verwerfen von Methoden und Ansätzen, die selbst hierfür nicht zum Erfolg führen. Wir zeigen auch, daß Andradottir et. al. einen selbst für dieses Beispiel falschen Ansatz wählen, da es ja effizient und sogar optimal mittels Importance Sampling analysierbar ist.

Beim optimalen Importance Sampling werden nur Pfade generiert, die das seltene Ereignis, also den Zustand 2, enthalten. Damit folgt direkt $p_{11}^* = 0$, $p_{12}^* = 1$. Zusätzlich müssen alle Pfade, die den Zustand 2 enthalten, gleiche Likelihood-Quotienten liefern. Wir betrachten zunächst den (bei regenerativer Simulation) kürzesten dieser Pfade, also 1,2,1. Dieser Pfad hat die Wahrscheinlichkeit $p(1-p)$, und bei Anwendung von Importance Sampling folgt für den Likelihood-Quotienten

$$L(1, 2, 1) = \frac{p(1-p)}{p_{12}^* p_{21}^*} = \frac{p(1-p)}{p_{21}^*}.$$

Jeder Pfad, der das seltene Ereignis enthält, hat bei regenerativer Simulation mit Regenerationszustand 1 die Form $1, 2, \dots, 2, 1$, und damit folgt für die Wahrscheinlichkeiten die Form $p(1-p)^n$, $n \in \mathbb{N}^+$, und für den Likelihood-Quotienten beim Importance Sampling folgt

$$L(1, 2, \dots, 2, 1) = \frac{p(1-p)^n}{p_{21}^* p_{22}^{*n-1}}.$$

Da der Likelihood-Quotient für alle $n \in \mathbb{N}^+$ und insbesondere für $n = 1$ gleich sein muß, folgt

$$\begin{aligned} \frac{p(1-p)}{p_{21}^*} &= \frac{p(1-p)^n}{p_{21}^* p_{22}^{*n-1}}, \\ 1 &= \frac{(1-p)^{n-1}}{p_{22}^{*n-1}}, \\ p_{22}^* &= 1-p. \end{aligned}$$

Schließlich folgt $p_{21}^* = 1 - p_{22}^* = 1 - (1-p) = p$. Insgesamt erhalten wir also

$$\mathbf{P}^* = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ p & 1-p \end{pmatrix},$$

die Übergangsmatrix einer homogenen diskreten Markovkette, die den optimalen Maßwechsel für Importance Sampling repräsentiert.

Wir zeigen nun, daß für klassische regenerative Simulation, also mit dem Quotient aus den Erwartungswerten der Anzahl von Besuchen und der Zykluslänge als Schätzung, kein

optimales Importance Sampling unter Verwendung einer fest gewählten Übergangsmatrix einer homogenen Markovkette möglich ist. Der Regenerationszustand sei der Zustand 1. Unter optimalem Importance Sampling muß das seltene Ereignis in jedem Regenerationszyklus auftreten, also der Zustand 2 besucht werden. Um dies zu garantieren muß also wieder $p_{11}^* = 0, p_{12}^* = 1$ gesetzt werden, und es verbleibt die Bestimmung der Übergangswahrscheinlichkeiten p_{21}^*, p_{22}^* . Da unter optimalem Importance Sampling jeder Lauf, jeder Regenerationszyklus, eine perfekte Schätzung der gesuchten Größe liefert, genügt es, als Schätzung jeweils den Quotienten aus der Anzahl der Besuche und der Zyklenlänge zu betrachten. Sei r die Zyklenlänge und v die Anzahl der Besuche im Zustand 2 während eines Zyklus. Dabei ist klar, daß nur Zyklen der Form $1, 2, \dots, 2, 1$ generiert werden, also gilt $v = r - 1$. Wir betrachten nun Zyklen mit v und mit $v + 1$ Besuchen im Zustand 2. Dafür erhalten wir die Schätzungen

$$g(1, 2^v, 1) = \frac{v}{v+1}, \quad g(1, 2^{v+1}, 1) = \frac{v+1}{v+2}$$

sowie die Likelihood-Quotienten

$$L(1, 2^v, 1) = \frac{p(1-p)^v}{p_{12}^* p_{22}^{*v-1} p_{21}^*} = \frac{p(1-p)^v}{p_{22}^{*v-1} p_{21}^*}$$

und

$$L(1, 2^{v+1}, 1) = \frac{p(1-p)^{v+1}}{p_{12}^* p_{22}^{*v} p_{21}^*} = \frac{p(1-p)^{v+1}}{p_{22}^{*v} p_{21}^*}.$$

Unter optimalem Importance Sampling gilt jeweils $L(\dots)g(\dots) = \gamma$, wobei γ wie üblich die gesuchte Größe bezeichnet, vgl. (3.16). Insbesondere folgt die Identität des Produktes aus Likelihood-Quotient und Schätzung für alle regenerativen Zyklen, also mit obigen Bezeichnungen

$$\begin{aligned} L(1, 2^v, 1) \cdot \frac{v}{v+1} &= L(1, 2^{v+1}, 1) \cdot \frac{v+1}{v+2}, \\ \frac{p(1-p)^v}{p_{22}^{*v-1} p_{21}^*} \cdot \frac{v}{v+1} &= \frac{p(1-p)^{v+1}}{p_{22}^{*v} p_{21}^*} \cdot \frac{v+1}{v+2}, \\ \frac{v}{v+1} &= \frac{1-p}{p_{22}^*} \cdot \frac{v+1}{v+2}, \\ p_{22}^* &= (1-p) \cdot \frac{v+1}{v+2} \cdot \frac{v+1}{v}. \end{aligned}$$

Wir sehen also, daß die Übergangswahrscheinlichkeiten von der Länge des Regenerationszyklus abhängen. Diese ist jedoch a priori unbekannt, und somit ist es unmöglich, optimales Importance Sampling unter Verwendung einer vorab fest zu wählenden Übergangsmatrix, also mit einer homogenen Markovkette als IS-Maß, durchzuführen.

Abschließend sei noch erwähnt, daß auch mit der Methode unabhängiger Simulationsläufe optimales Importance Sampling nicht möglich ist. Dies läßt sich hierfür sehr leicht einsehen, da bei einer fest gewählten Simulationslauflänge ein Besuch im Zustand 2 nur genau dann garantiert ist, wenn, wie bei regenerativer Simulation, die Übergangswahrscheinlichkeiten $p_{11}^* = 0, p_{12}^* = 1$ gesetzt werden. Während bei regenerativer Simulation mit diesen Festlegungen noch möglich bleibt, jeden möglichen regenerativen Zyklus zum seltenen Ereignis zu generieren, scheitert die Methode unabhängiger Simulationsläufe bereits an dieser Stelle, da keine Läufe generiert werden können, die mehrere aufeinanderfolgende Besuche im Zustand 1 enthalten.

4.2.3 Bernoulli-Experimente

Wir betrachten nun erneut das Münzwurf-Beispiel, verallgemeinern jedoch die Anzahl von Würfeln und die Trefferwahrscheinlichkeit der Münze. Wir untersuchen also unabhängige Bernoulli-Experimente mit Erfolgswahrscheinlichkeit p . Gesucht sei die Wahrscheinlichkeit für mindestens k Treffer in n Experimenten. Der Grund, daß wir dieses Beispiel im Kapitel über Markovketten erneut betrachten, liegt darin, daß wir später sehen, daß bei geeigneter Modellierung der unabhängigen Bernoulli-Experimente als Markovkette beim optimalen Maßwechsel die Modellklasse erhalten bleibt.

In [Jun03] wird der Spezialfall unseres Beispiels mit $p = 0.5$ gerade dazu angeführt, zu zeigen, daß der optimale IS-Schätzer typischerweise nicht implementierbar sei. Es wird dann nicht weiterverfolgt, sondern die Bestimmung von Maßwechseln mit Hilfe der Theorie großer Abweichungen diskutiert. Wir wollen nun gerade zeigen, wie der optimale Maßwechsel aussieht und insbesondere, wie man ihn durch sukzessive Erweiterung des Modells für die Importance-Sampling-Simulation erhalten kann.

Der naheliegende natürliche Ansatz für die Anwendung von Importance Sampling ist die Simulation unabhängiger Bernoulli-Experimente mit modifizierter Erfolgswahrscheinlichkeit p^* . Es ist jedoch sofort ersichtlich, daß kein $p^* \in [0, 1]$ existiert, so, daß der resultierende Schätzer optimal ist, denn für jedes $p^* < 1$ ist die Wahrscheinlichkeit für weniger als k Erfolge immer strikt positiv, und für $p^* = 1$ werden immer nur genau n Erfolge erzielt. Somit ist sofort klar, daß der optimale Maßwechsel aus der Klasse der unabhängigen Bernoulli-Experimente herausführt. Wir zeigen im folgenden auch formal, daß keine modifizierte Erfolgswahrscheinlichkeit $p^* \neq p$ für unabhängige Bernoulli-Experimente existiert, so, daß die LQ-Bedingung erfüllt ist.

Seien $x_1, \dots, x_n, x_i \in \{0, 1\}, i = 1, \dots, n$ die Ergebnisse der unabhängigen Bernoulli-Experimente, diese bilden einen Bernoulli-Pfad. Die Wahrscheinlichkeit jedes Bernoulli-Pfades der Länge n ist gegeben durch

$$p(x_1, \dots, x_n) = p^m (1 - p)^{n-m}, \quad m \leq n,$$

wobei m gerade die Anzahl der Erfolge ist und für Pfade zum seltenen Ereignis $m \geq k$ gilt. Für Importance Sampling mit Erfolgswahrscheinlichkeit p^* ergibt sich also der Likelihood-Quotient

$$L(x_1, \dots, x_n) = \frac{p^m (1-p)^{n-m}}{p^{*m} (1-p^*)^{n-m}},$$

der für alle Pfade mit $m \geq k$ identisch sein soll. Wir wählen $m = k$ und $m = k + 1$ und erhalten als LQ-Bedingung

$$\begin{aligned} \frac{p^k (1-p)^{n-k}}{p^{*k} (1-p^*)^{n-k}} &= \frac{p^{k+1} (1-p)^{n-k-1}}{p^{*k+1} (1-p^*)^{n-k-1}}, \\ \frac{1-p}{1-p^*} &= \frac{p}{p^*}, \\ (1-p)p^* &= (1-p^*)p \\ \frac{1-p^*}{p^*} &= \frac{1-p}{p} \\ p^* &= p. \end{aligned}$$

Wir sehen also, daß im Falle unabhängiger Bernoulli-Experimente die LQ-Bedingung nur genau dann erfüllt ist, wenn die Erfolgswahrscheinlichkeit nicht modifiziert wird, und der optimale Maßwechsel ist demzufolge nicht in der Klasse unabhängiger Bernoulli-Experimente.

Unsere erste Erweiterung ist die Modifikation so, daß die Erfolgswahrscheinlichkeiten in jedem Wurf verschieden sein können, korrespondierend zu zeitabhängigen Erfolgswahrscheinlichkeiten. Wir zeigen, daß auch eine solche Modifikation allein die LQ-Bedingung nicht erfüllt. Dazu betrachten wir lediglich den Spezialfall $n = 2, k = 1$. Die Bernoulli-Pfade, die das seltene Ereignis enthalten, sind dafür $(0, 1)$, $(1, 0)$ und $(1, 1)$ mit den Wahrscheinlichkeiten $p(0, 1) = p(1, 0) = p(1-p)$, $p(1, 1) = p^2$. Es bezeichnen für das modifizierte Modell $p^{(1)}, p^{(2)}$ die Erfolgswahrscheinlichkeiten im ersten bzw. im zweiten Experiment. Damit ergeben sich die Likelihood-Quotienten

$$L(0, 1) = \frac{p(1-p)}{(1-p^{(1)})p^{(2)}}, \quad L(1, 0) = \frac{p(1-p)}{p^{(1)}(1-p^{(2)})}, \quad L(1, 1) = \frac{p^2}{p^{(1)}p^{(2)}}.$$

Da diese identisch sein müssen, folgt

$$\begin{aligned} \frac{p(1-p)}{p^{(1)}(1-p^{(2)})} &= \frac{p^2}{p^{(1)}p^{(2)}}, \\ \frac{(1-p)}{(1-p^{(2)})} &= \frac{p}{p^{(2)}}, \\ p^{(2)} &= p \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}\frac{p(1-p)}{(1-p^{(1)})p^{(2)}} &= \frac{p(1-p)}{p^{(1)}(1-p^{(2)})}, \\ (1-p^{(1)})p^{(2)} &= p^{(1)}(1-p^{(2)}), \\ (1-p^{(1)})p &= p^{(1)}(1-p), \\ p^{(1)} &= p.\end{aligned}$$

Wir stellen also fest, daß die bisher untersuchten Arten des Maßwechsels nicht zum optimalen IS-Schätzer führen, da sie nicht einmal die LQ-Bedingung erfüllen.

Als nächste Variante modifizieren wir nun das Modell weiter so, daß die Erfolgswahrscheinlichkeit sowohl von der Anzahl der bereits durchgeführten Experimente als auch von der Anzahl der bisherigen Erfolge abhängen kann, also sowohl von der Zeit als auch vom Zustand, wobei gerade die Anzahl der Erfolge als Zustand interpretiert wird. Es bezeichne $p^{(i)}(m)$ die Erfolgswahrscheinlichkeit im i -ten Experiment, wenn bereits m Erfolge aufgetreten sind. Auch hier betrachten wir zunächst den Spezialfall $n = 2, k = 1$.

Das erste Experiment stellt einen Sonderfall dar, der Zustand ist in jedem Fall 0. Unsere Art des Maßwechsel ermöglicht uns nun zunächst, zu garantieren, daß nur Pfade generiert werden, die das seltene Ereignis enthalten. Wir können den Pfad (0,0) ausschließen, indem wir die Erfolgswahrscheinlichkeit im zweiten Experiment auf 1 setzen, falls im ersten Experiment kein Erfolg eingetreten ist, also $p^{(2)}(0) = 1$. Für die anderen Pfade erhalten wir nun die Likelihood-Quotienten

$$\begin{aligned}L(0,1) &= \frac{(1-p)p}{(1-p^{(1)}(0))p^{(2)}(0)} = \frac{(1-p)p}{1-p^{(1)}(0)}, \\ L(1,0) &= \frac{p(1-p)}{p^{(1)}(0)(1-p^{(2)}(1))}, \\ L(1,1) &= \frac{p^2}{p^{(1)}(0)p^{(2)}(1)}.\end{aligned}$$

Um den optimalen Maßwechsel zu berechnen, verbleibt, $p^{(1)}(0)$ und $p^{(2)}(1)$ so zu bestimmen, daß die LQ-Bedingung erfüllt ist.

Wir erhalten

$$\begin{aligned}\frac{p(1-p)}{p^{(1)}(0)(1-p^{(2)}(1))} &= \frac{p^2}{p^{(1)}(0)p^{(2)}(1)}, \\ \frac{1-p}{1-p^{(2)}(1)} &= \frac{p}{p^{(2)}(1)}, \\ (1-p)p^{(2)}(1) &= p(1-p^{(2)}(1)), \\ p^{(2)}(1) - pp^{(2)}(1) &= p - pp^{(2)}(1), \\ p^{(2)}(1) &= p\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}\frac{(1-p)p}{1-p^{(1)}(0)} &= \frac{p^2}{p^{(1)}(0)p^{(2)}(1)}, \\ 1-p^{(1)}(0) &= p^{(1)}(0)(1-p^{(2)}(1)) = p^{(1)}(0)(1-p) = p^{(1)}(0) - pp^{(1)}(0), \\ 1 &= 2p^{(1)}(0) - pp^{(1)}(0) = p^{(1)}(0)(2-p), \\ p^{(1)}(0) &= \frac{1}{2-p}.\end{aligned}$$

Wir sehen also, daß für den optimalen Maßwechsel zur Bestimmung der Wahrscheinlichkeit von mindestens einer vorgegebenen Anzahl von Erfolgen in unabhängigen Bernoulli-Experimenten schon für den Spezialfall von mindestens einem Erfolg in zwei Experimenten die optimalen Erfolgswahrscheinlichkeiten sowohl abhängig von der Anzahl von Experimenten als auch von den bereits erzielten Erfolgen ist. Der optimale Maßwechsel führt aus der Klasse unabhängiger Bernoulli-Experimente heraus. Es stellt sich nun die Frage, ob im allgemeinen der optimale Maßwechsel auf solche zustands- und zeitabhängigen Erfolgswahrscheinlichkeiten führt oder ob dann die jeweiligen Wahrscheinlichkeiten sogar abhängig von dem Verlauf aller oder mehrerer bereits durchgeführter Experimente sind. Für $n = 3$ und $n = 4$ haben wir dies geprüft und dabei festgestellt, daß auch hier der optimale Maßwechsel auf Erfolgswahrscheinlichkeiten führt, die von der Anzahl der Experimente und lediglich der Anzahl von Erfolgen, nicht dem gesamten Bernoulli-Teilpfad, abhängig sind. Wir wollen nun untersuchen, wie dies im allgemeinen Fall aussieht. Dazu betrachten wir die Anzahl zu bestimmender Erfolgswahrscheinlichkeiten und die Anzahl von Gleichungen, die aus der LQ-Bedingung resultieren.

Wir beginnen mit der Anzahl der Gleichungen, die die LQ-Bedingung liefert. Prinzipiell müssen dazu alle Bernoulli-Pfade der Länge n mit mindestens k Erfolgen betrachtet werden. Da jedoch nach dem k -ten Erfolg abgebrochen werden kann, reicht es aus, nur

solche Teilpfade der Länge höchstens n zu betrachten, bei denen der k -te Erfolg im letzten Experiment des Teilpfades auftritt. Dies kann frühestens nach dem k -ten Experiment passieren. Es gibt genau einen Pfad der Länge k mit k Erfolgen. Für Pfade der Länge $k + 1$ ist der Erfolg im $(k + 1)$ -ten Experiment festgelegt, und die restlichen $k - 1$ Erfolge können in den ersten k Experimenten auftreten. Es gibt gerade $\binom{k}{k-1}$ solcher Pfade. Analog wird für Pfade der Länge $k + 2, k + 3, \dots$ argumentiert, bis schließlich für Pfade der Länge n , bei denen der k -te Erfolg im n -ten Experiment auftritt und $k - 1$ Erfolge in den $n - 1$ Experimenten zuvor, also $\binom{n-1}{k-1}$ Pfade der Länge n mit dem k -ten Erfolg im n -ten Experiment. Insgesamt folgt also für die Anzahl zu betrachtender Pfade

$$\sum_{m=k-1}^{n-1} \binom{m}{k-1} = \binom{n}{k}.$$

Somit liefert uns die LQ-Bedingung also $\binom{n}{k} - 1$ Gleichungen. Obige Größe ist gerade auch die Anzahl der Pfade der Länge n mit genau k Erfolgen, denn Pfade mit mehr als k Erfolgen sind bis zum k -ten Erfolg identisch mit einem Pfad mit genau k Erfolgen.

Überlegen wir uns nun, wieviele unbekannte Wahrscheinlichkeiten zu bestimmen sind. Im i -ten Experiment sind dies gerade die Wahrscheinlichkeiten $p^{(i)}(0), \dots, p^{(i)}(i - 1)$, also i Wahrscheinlichkeiten, und somit insgesamt für n Experimente

$$\sum_{i=1}^n i = \frac{n(n+1)}{2}$$

Wahrscheinlichkeiten, von denen einige jedoch redundant sind. Da nach k Erfolgen abgebrochen wird, müssen die Wahrscheinlichkeiten für die Zustände, die k oder mehr Erfolge repräsentieren, nicht bestimmt werden. Dies ist wieder frühestens nach dem k -ten Experiment möglich. Es ist also dann die Wahrscheinlichkeit $p^{(k+1)}(k)$ redundant, ebenso die Wahrscheinlichkeiten $p^{(k+2)}(k), p^{(k+2)}(k + 1)$ und entsprechend weiter bis nach dem $(n - 1)$ -ten Experiment die Wahrscheinlichkeiten $p^{(n)}(k), \dots, p^{(n)}(n - 1)$. Insgesamt sind dies

$$\sum_{i=1}^{n-k} i = \frac{(n-k)(n-k+1)}{2}$$

redundante Wahrscheinlichkeiten. Außerdem muß beim optimalen Importance Sampling in jedem Experiment das seltene Ereignis, also mindestens k Erfolge, auftreten. Daraus folgt, daß einige der Wahrscheinlichkeiten den Wert 1 erhalten müssen, nämlich genau dann, wenn von einem Zustand aus k Erfolge nur noch dann möglich sind, wenn alle verbleibenden Experimente Erfolge sind. Dies ist im k -letzten Experiment für den Zustand 0 der Fall, im $(k - 1)$ -letzten Experiment für den Zustand 1, außerdem ist der Zustand 0 im $(k - 1)$ -letzten Experiment unter optimalem Importance Sampling nicht möglich und somit die Erfolgswahrscheinlichkeit redundant. Analog argumentieren wir weiter bis

zum letzten Experiment, bei dem im Zustand $k - 1$ die Erfolgswahrscheinlichkeit auf den Wert 1 gesetzt werden muß und die Zustände $0, \dots, k - 2$ unter optimalem Importance Sampling unmöglich sind. Insgesamt erhalten also daher

$$\sum_{i=1}^k i = \frac{k(k+1)}{2}$$

Wahrscheinlichkeiten den Wert 1 oder sind aufgrund der Unmöglichkeit des Zustands unter optimalem Importance Sampling redundant, sind also keine zu bestimmenden Unbekannten. Somit haben wir als verbleibende Anzahl von Unbekannten

$$\frac{n(n+1)}{2} - \frac{k(k+1)}{2} - \frac{(n-k)(n-k+1)}{2} = k(n-k).$$

Vergleichen wir dies mit der Anzahl von $\binom{n}{k} - 1$ Gleichungen, die nach LQ-Bedingung folgen, so stellen wir fest, daß nicht sicher ist, daß diese Gleichungen immer eine eindeutige Lösung liefern, also eindeutige zustands- und zeitabhängige Erfolgswahrscheinlichkeiten. Es ist also erforderlich, dies näher zu untersuchen. Wir wollen dies an dieser Stelle nicht tun, sondern in 4.2.4.1 als Anwendung von Ergebnissen für Absorptionswahrscheinlichkeiten in homogenen diskreten Markovketten, da dies zeigt, daß eine adäquate Modellierung eines Problems zumindest die Fragestellung nach der Art des optimalen Maßwechsels besser klären kann als eine zu eingeschränkte Sichtweise. Zudem erscheint die Herleitung der Zeitabhängigkeit eines optimalen Maßwechsels über homogene Markovketten sowohl überraschend als auch lehrreich.

4.2.4 Absorptionswahrscheinlichkeiten und Arbeitsphasenparameter

Die Analyse von seltenen Ereignissen während einer Arbeitsphase des zu untersuchenden zugrundeliegenden Systems kann mittels homogener diskreter Markovketten mit absorbierenden seltenen Zuständen erfolgen. Juneja beschreibt in seiner Dissertation [Jun93] einen allgemeinen Rahmen auf der Markovkettenebene. Gesucht ist dabei jeweils die Wahrscheinlichkeit, eine Menge interessierender seltener Zustände vor einer Menge häufig besuchter Zustände zu erreichen. Auch in den Arbeiten [JS00, JS01, JS02, JN02, Jun01, Jun03] wird dieser Rahmen betrachtet und dafür die Bezeichnung *Attractor - Rare Set Framework* verwendet. Kuruganti und Strickland [KS97] wählen zwar andere Notationen und Begriffe als Juneja und die sich direkt auf dessen Rahmen beziehenden Arbeiten, beschreiben aber ebenfalls diesen Rahmen für homogene diskrete Markovketten mit endlichem Zustandsraum und geben dafür eine, wie sie sagen neue, Charakterisierung des optimalen IS-Schätzers an. Insgesamt passen prinzipiell alle in der Literatur untersuchten Markovmodelle, die sich mit Leistungsmaßen bezüglich Arbeitsphasen beschäftigen, auch wenn sie von einer abstrakteren Beschreibung des Modells, etwa als Warteschlangennetz, ausgehen, in diesen allgemeinen Rahmen, insbesondere auch diverse Untersuchungen von

Zuverlässigkeitsmodellen wie etwa [Sha90, Car92, Sha94b, Nak96, AS98, NSN01]. Wir wollen nun den Attractor – Rare Set Framework formal beschreiben, wobei wir uns im wesentlichen an den Notationen aus [Jun01, Jun03] orientieren.

Gegeben sei eine homogene diskrete Markovkette (X_n) mit Zustandsraum \mathcal{S} , Übergangsmatrix \mathbf{P} und Anfangsverteilung $\pi^{(0)}$. Es sei $A \subseteq \mathcal{S}$ eine Menge von Zuständen der Markovkette, die häufig besucht wird (*attractor set*) und $R \subseteq \mathcal{S}$, $A \cap R = \emptyset$ eine Menge seltener Zustände, die selten besucht wird (*rare set*). Weiterhin ist $U = \mathcal{S} \setminus A \setminus R$ eine Menge von sogenannten Zwischenzuständen (*set of interior states, interior set*). Für jede Menge $C \subseteq \mathcal{S}$ sei $T_C = \inf\{n \geq 1 : X_n \in C\}$. Gesucht ist dann die Wahrscheinlichkeit $P_{\pi^{(0)}}\{T_R < T_A\}$, also gerade die Wahrscheinlichkeit, daß die Menge R der seltenen Zustände vor der Menge A der häufig besuchten Attraktorzustände erreicht wird. Startet die Simulation in einem Zwischenzustand so können sowohl A als auch R als absorbierende Klasse modelliert werden, wobei unter dem optimalen Maßwechsel eine Absorption in A nicht möglich ist. Startet die Simulation in einem der Zustände aus A , so kann A selbstverständlich nicht als absorbierende Klasse modelliert werden bzw. „wird“ erst nach Verlassen absorbierend. Für den optimalen Maßwechsel spielt dies jedoch aus dem oben genannten Grund keine Rolle.

Eine Rechtfertigung, daß dieser Rahmen für viele Untersuchungen ausreicht, läßt sich anhand von Zuverlässigkeitsmaßen geben. Die mittlere Zeit bis zu einem Systemfehler (Mean Time To Failure, MTTF) und die Unverfügbarkeit (Unavailability) lassen sich für regenerative Systeme im wesentlichen auf die Wahrscheinlichkeit $P\{T_F < T_1\}$ reduzieren, wobei F den Fehlerzustand bezeichnet und der Menge R entspricht, und 1 den Zustand des fehlerfreien Systems bezeichnet, der Attraktorzustand ist. Für die mittlere Zeit bis zum Systemfehler T_F ist bekannt, daß

$$E[T_F] = \frac{E[\min(T_1, T_F)]}{P\{T_F < T_1\}}$$

gilt, und die Argumentation ist dann so, daß $E[\min(T_1, T_F)]$ leicht mittels Standard-Simulation geschätzt oder, da in den meisten Fällen gerade T_1 dieses Minimum ist, durch $E[\min(T_1, T_F)] \approx T_1$ approximiert werden kann. Das verbleibende Problem ist also die effiziente Simulation von $P\{T_F < T_1\}$. Ähnlich wird für die Unverfügbarkeit U des Systems argumentiert. Es gilt

$$E[U] = \frac{E[D]}{E[T_1]},$$

wobei D die Zeit im Fehlerzustand während einer Arbeitsphase ist. Die Schätzung von $E[T_1]$ kann dabei mittels Standard-Simulation erfolgen, da eine Rückkehr in den fehlerfreien Zustand nicht selten ist.

Obige Argumentation und der Ansatz, für Leistungsmaße, die sich aus verschiedenen separat zu schätzenden Größen zusammensetzen, verschiedene Simulationsmethoden an-

zuwenden, also einige Größen per Standard-Simulation und andere Größen per Importance Sampling zu schätzen, wird erstmals in [GSH⁺92] beschrieben und mit maßspezifischem Importance Sampling (*Measure Specific Importance Sampling, MSIS*) bezeichnet. In Kombination mit dynamischen Importance-Sampling-Verfahren spricht man dann entsprechend vom maßspezifischen dynamischen Importance Sampling (*Measure Specific Dynamic Importance Sampling, MSDIS*). Beides läßt sich auch bei der Schätzung stationärer Größen mittels regenerativer Simulation anwenden, wobei der Schätzer ja gerade der Quotient zweier Erwartungswerte ist. Hier kann etwa der Zähler, der Erwartungswert einer interessierenden Größe über einem regenerativen Zyklus, mittels Importance Sampling und der Nenner, der Erwartungswert der Länge eines regenerativen Zyklus, mittels Standard-Simulation geschätzt werden. Bei der Schätzung stationärer Zustandswahrscheinlichkeiten in Markovmodellen ist der Zähler speziell der Erwartungswert von Zustandsbesuchen während eines regenerativen Zyklus. Anders als im hier beschriebenen Attractor – Rare Set Framework ist der Zähler im allgemeinen aber der Erwartungswert einer prinzipiell beliebigen Funktion, für stationäre Zustandswahrscheinlichkeiten einer Summe von Indikatorfunktionen, und nicht nur eine einzelne Indikatorfunktion eines Ereignisses. Daher ist klar, daß der Attractor – Rare Set Framework eine wesentliche Vereinfachung gegenüber allgemeineren Situationen darstellt.

Aus den allgemeinen Importance-Sampling-Formeln folgt mit $g(x_0, \dots, x_K) = I_{\{T_R < T_A\}}$ und $\gamma = P\{T_R < T_A\}$ für den optimalen IS-Schätzer (4.16) auf Seite 90

$$\begin{aligned} f^*(x_0, \dots, x_K) &= \begin{cases} \frac{I_{\{T_R < T_A\}} p(x_0, \dots, x_K)}{P\{T_R < T_A\}}, & \text{falls } T_R < T_A, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \\ &= \begin{cases} \frac{p(x_0, \dots, x_K)}{P\{T_R < T_A\}}, & \text{falls } T_R < T_A, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \end{aligned}$$

wobei K hier eine Stoppzeit ist, nämlich die Zeit, zu der erstmals A oder R erreicht wird. Es sind also insbesondere nur Pfade erlaubt, in denen das seltene Ereignis auftritt, hier speziell Pfade, in denen ein seltener Zustand vor einem der Attraktorzustände erreicht wird. Für den Likelihood-Quotienten gilt dann

$$L(x_0, \dots, x_K) = \frac{p(x_0, \dots, x_K)}{f_{opt}^*(x_0, \dots, x_K)} = P\{T_R < T_A\} = \gamma.$$

Wie allgemein bei der Schätzung von Erwartungswerten von Indikatorfunktionen (vgl. 3.3.3) ist dieser Likelihood-Quotient also konstant und für alle Pfade identisch zu der gesuchten Wahrscheinlichkeit. Im hier beschriebenen Attractor – Rare Set Framework für Markovketten stellt sich zudem heraus, daß das optimale IS-Maß eine homogene diskrete Markovkette mit dem gleichen Zustandsraum wie die originale Markovkette ist.

Juneja [Jun93] zeigt dies für Absorptionswahrscheinlichkeiten in homogenen diskreten Markovketten mit Zustandsraum $\mathcal{S} = \mathbb{Z}$, bei denen sich in jedem Übergang der Zustand nur um ± 1 verändert (*skipfree Markov chains*) und mit absorbierenden Zuständen $-a, b$, $a, b \in \mathbb{N}$, also für spezielle Markovsche Random Walks auf den ganzen Zahlen mit absorbierenden Rändern. Kuruganti und Strickland [KS97] zeigen allgemeiner für den Attractor – Rare Set Framework mit einem Anfangszustand x_0 und einer Menge von absorbierenden Zuständen F , $x_0 \notin F$, die als eine absorbierende Klasse modelliert und wie ein einzelner absorbierender Zustand behandelt werden kann, daß das optimale IS-Maß für die Wahrscheinlichkeit $P\{T_F < T_{x_0}\}$ eine homogene diskrete Markovkette ist. Es ist klar, daß dieses Modell den Attractor – Rare Set Framework erfüllt, wobei F der Menge R entspricht und ein einzelner Attraktorzustand x_0 auch als Startzustand gewählt wird, also $\pi_{x_0}^{(0)} = 1$. Kuruganti und Strickland zeigen weiter, daß für die Übergangswahrscheinlichkeiten der optimalen IS-Markovkette

$$p_{ij}^* = \frac{p_{ij}\gamma(j)}{\gamma(i)},$$

gilt, wobei $\gamma(s)$ für jeden Zustand $s \in \mathcal{S}$ die Wahrscheinlichkeit bezeichnet, daß von s aus die Menge F erreicht wird, ohne den Zustand x_0 zu besuchen, oder anders ausgedrückt, daß F von s aus auf einem Pfad ohne x_0 erreicht wird, also ist insbesondere $\gamma(x_0) = 0$. Diese Übergangswahrscheinlichkeiten definieren dann für das beschriebene Problem den eindeutig bestimmten optimalen Maßwechsel bzw. das eindeutig bestimmte optimale IS-Maß und somit den optimalen IS-Schätzer. Wir sehen hier sofort, daß alle in der originalen Markovkette unmöglichen Übergänge unmöglich bleiben und daß alle Übergänge nach x_0 die Wahrscheinlichkeit 0 erhalten. Für den beschriebenen Rahmen bedeutet dies, daß obwohl im Originalmodell alle Zustände in $\mathcal{S} \setminus F$ kommunizieren, dies unter dem optimalen IS-Maß nur für Zustände in $\mathcal{S} \setminus F \setminus \{x_0\}$ der Fall ist. Leider sehen wir ebenfalls, daß die obige Gleichung für die Übergangswahrscheinlichkeiten in der Praxis wenig hilfreich ist, da die Wahrscheinlichkeiten $\gamma(i), \gamma(j)$ im allgemeinen unbekannt sind.

Kuruganti und Strickland geben daher eine „neue Charakterisierung“ des optimalen Maßwechsels für den beschriebenen Rahmen. Dazu stellen sie vier Bedingungen (C1)–(C4) für die Optimalität auf, die aber im Grunde keine wirklich neue Charakterisierung darstellen, sondern vielmehr direkt aus den allgemeinen Optimalitätsbedingungen folgen und eine spezialisierte Formulierung für homogene diskrete Markovketten im betrachteten Rahmen sind. Kuruganti und Strickland formulieren ihre Bedingungen in einem Satz, der aussagt, daß diese Bedingungen notwendig und hinreichend zur Bestimmung der Übergangsmatrix \mathbf{P}^* der optimalen Importance-Sampling-Markovkette sind. Wir wollen die Bedingungen kurz beschreiben und kommentieren.

(C1) *Infeasibility conditions*, die Unzulässigkeitsbedingungen besagen, daß Übergänge, die unter \mathbf{P} unmöglich sind und Übergänge, die unter \mathbf{P} nicht zur Konstruktion von Pfaden, die das seltene Ereignis enthalten, benutzt werden, unter \mathbf{P}^* unzulässig sind. Dies bedeutet nichts anderes als, daß unter optimalem Importance Sampling nur solche Stichproben

generiert werden, die das seltene Ereignis enthalten und ist schon im ganz allgemeinen Fall klar, benötigt also nicht einmal die spezielle Anwendung auf Markovketten. Die Tatsache, daß keine in der originalen Markovkette unmöglichen Übergänge möglich werden (ihnen keine positive Wahrscheinlichkeit zugeordnet wird) korrespondiert dabei dazu, daß unter optimalem Importance Sampling die Originalwahrscheinlichkeit mit der gesuchten Größe gewichtet wird, also insbesondere auch eine Wahrscheinlichkeit von 0 durch diese Gewichtung keinen positiven Wert erhält. Da alle Pfade, die einen Übergang von i nach j mit $p_{ij} = 0$ enthalten, die Pfadwahrscheinlichkeit 0 haben, folgt insbesondere für alle Pfade, die nur genau einen solchen Übergang haben, daß sie auch unter optimalem Importance Sampling unmöglich bleiben. Da alle anderen Übergänge positive Wahrscheinlichkeiten haben, muß also der im Originalmodell unmögliche Übergang die Wahrscheinlichkeit 0 behalten. Der zweite Teil der Bedingungen, folgt gerade daraus, daß ausschließlich Stichproben, hier Pfade, generiert werden dürfen, die das seltene Ereignis enthalten.

Bedingung (C2) *Stochastic matrix condition* besagt schlicht, daß die Übergangsmatrix \mathbf{P}^* eine stochastische Matrix sein muß. Dies bedarf wohl keines Kommentars, da bekannt ist, daß das optimale IS-Maß eine homogene diskrete Markovkette ist. Daß deren Übergangsmatrix stochastisch ist, sollte nicht überraschen.

(C3) *Loop conditions*, die Schleifenbedingungen (oder auch Zyklenbedingungen), besagen, daß einfache Schleifen (s_1, \dots, s_C) aus Zuständen in $\mathcal{S} \setminus F \setminus \{x_0\}$, d.h. Pfadsegmente mit $s_1 = s_C$ und $s_2, \dots, s_{C-1} \neq s_1$, die alle verschieden sind, also Zyklen ohne innere Zyklen, unter optimalem Importance Sampling die gleiche Wahrscheinlichkeit wie in der Originalmarkovkette haben müssen. Dies bedeutet schlicht, daß der Likelihood-Quotient solcher Schleifen oder Zyklen den Wert Eins hat und folgt direkt aus der allgemeinen LQ-Bedingung mit der Überlegung, daß mehrfaches Durchlaufen solcher Zyklen den Likelihood-Quotienten des gesamten Pfades verändert, wenn der Likelihood-Quotient der Zyklen ungleich Eins ist. Da aber die LQ-Bedingung gerade bedeutet, daß die Likelihood-Quotienten aller Pfade, die das seltene Ereignis enthalten, gleich sind, ist klar, daß die Schleifenbedingungen folgen.

Schließlich (C4) *Tree conditions*, die Baumbedingungen, besagen, daß für direkte (schleifenfreie) Pfade von einem Zustand, von dem aus F in einem Schritt erreicht werden kann, nach F (diese bilden eine baumartige Struktur) das Verhältnis der Wahrscheinlichkeiten je zweier solcher Pfade unter optimalem Importance Sampling gleich dem Verhältnis dieser Wahrscheinlichkeiten in der Originalmarkovkette ist. Dies ist nichts anderes als eine Umformung der LQ-Bedingung und Formulierung für die beschriebenen Pfade. Kuruganti und Strickland merken noch an, daß alternativ auch Pfade von x_0 in einen Zustand, der von x_0 in einem Schritt erreicht werden kann, betrachtet werden können.

Kuruganti und Strickland benutzen ihre Bedingungen (C1)–(C4), um optimale Maßwechsel für Markovsche Tandemwarteschlangennetze mit zwei Knoten aus jeweils einem Bediener und einer Warteschlange beschränkter Kapazität zu untersuchen. Dazu leiten sie

sukzessive anhand der einzelnen Bedingungen Gleichungen her und erhalten schließlich mit einigem Aufwand ein Gleichungssystem zur Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten der Markovkette unter optimalem Importance Sampling, das sie dann für ein Beispiel mit Kapazitäten von jeweils zwei Kunden pro Station numerisch lösen. Leider ist das allgemeine Gleichungssystem von der gleichen Komplexität wie das zur Lösung der originalen Markovkette und enthält entsprechende Koeffizienten. Es ist also ebenso schwer wie das eigentliche Problem und somit nicht effizient lösbar. Kuruganti und Strickland argumentieren jedoch, daß die Kenntnis optimaler Maßwechsel für kleine Modelle Einsichten für größere Modelle liefern können, und daß ihre Bedingungen Richtlinien zum Auffinden guter Maßwechsel sind. Dies gilt jedoch in allgemeinerem Sinne, nicht nur für den hier beschriebenen Rahmen, für die LQ-Bedingung. Zudem wäre das Gleichungssystem von Kuruganti und Strickland unter direkter Verwendung der LQ-Bedingung leichter herzuleiten gewesen. Wir sehen jedoch auch, da die Bedingungen von Kuruganti und Strickland der LQ-Bedingung entsprechen, daß diese nicht immer zu einer effizienten Berechnung des optimalen Maßwechsels führt, was aber auch nicht zu erwarten ist, da sie ansonsten eine allgemeine Methode zum Auffinden des optimalen Maßwechsels in beliebigen Modellen darstellen würden. Eine solche allgemeine Methode ist aber, wie bereits mehrfach erwähnt, selbst für asymptotisch optimale Maßwechsel oder auch nur varianzreduzierende Maßwechsel, auch im Falle kleiner und eingeschränkter Modelle nicht bekannt.

4.2.4.1 Bernoulli-Experimente als absorbierende Markovkette

Es mag überraschen, daß wir mit Hilfe des Rahmens für absorbierende homogene diskrete Markovketten, in denen die Wahrscheinlichkeit des Erreichens einer Menge von Zuständen vor dem Erreichen einer anderen Menge von Zuständen bzw. vor der Rückkehr in den Startzustand bestimmt werden soll, den optimalen Maßwechsel für Bernoulli-Experimente untersuchen. Wir zeigen, daß wir durch geeignete Modellierung das Modell der Bernoulli-Experimente in den Rahmen einfügen können, und folgern mittels der für den Rahmen bekannten Ergebnisse und unserer Art der Modellierung, daß der optimale Maßwechsel zur Schätzung der Wahrscheinlichkeit von mindestens k Erfolgen in n unabhängigen Bernoulli-Experimenten tatsächlich durch Bernoulli-Experimente mit zustands- und zeitabhängigen Erfolgswahrscheinlichkeiten wie in 4.2.3 vermutet, realisiert wird. Zudem folgt dies auch für die Wahrscheinlichkeit von genau k Erfolgen in n Experimenten.

Wir geben zunächst ein geeignetes allgemeines Modell der unabhängigen Bernoulli-Experimente als Markovkette. Eine Folge von n unabhängigen Bernoulli-Experimenten kann als homogene diskrete Markovkette modelliert werden, wobei ein Zustand der Markovkette ein Tupel ist, das aus der Anzahl der Erfolge und der Anzahl der Experimente besteht. Der Zustandsraum ist also eine Teilmenge von $\{0, \dots, n\}^2$, der Startzustand ist $(0, 0)$. Da nicht mehr Erfolge als Experimente möglich sind, gilt für jeden Zustand (i, m)

zudem $i \leq m$, wobei gerade die erste Komponente i die Anzahl der Erfolge und die zweite Komponente m die Anzahl der Experimente bezeichnet. Wir sind an mindestens k Erfolgen in n Experimenten interessiert, nicht an der exakten Anzahl von Erfolgen, also kann nach k Erfolgen abgebrochen werden. Damit ergibt sich als Zustandsraum

$$\mathcal{S} = \{(i, m) \in \{0, \dots, k\} \times \{0, \dots, n\} : i \leq m\}.$$

Die Zustände, in denen k Erfolge aufgetreten sind, können dabei als absorbierende Klasse modelliert werden, also

$$F = \{(i, m) \in \mathcal{S} : i = k\}.$$

Zudem gibt es Zustände, von denen aus keine k Erfolge mehr erreicht werden können, nämlich solche, für die die Anzahl der noch verbleibenden Experimente geringer ist als die Anzahl der noch benötigten Erfolge, oder anders ausgedrückt, Zustände, für die die Anzahl von Mißerfolgen bereits größer als die maximal erlaubte Anzahl von Mißerfolgen im Gesamtexperiment ist, also Zustände in

$$A = \{(i, m) \in \mathcal{S} : n - m < k - i\} = \{(i, m) \in \mathcal{S} : m - i > n - k\}.$$

Dies ist gerade die Menge der Zustände, die unter optimalem Importance Sampling nicht erreicht werden darf.

In der Ausprägung des Attractor – Rare Set Framework nach Kuruganti und Strickland ist die Wahrscheinlichkeit gesucht, den Startzustand vor dem Erreichen einer Menge seltener Zustände, hier der Zustände mit k Erfolgen, wieder zu erreichen. Nach unserem bisherigen Modell ist eine Rückkehr in den Startzustand jedoch unmöglich. Daher benötigen wir für unsere Problemstellung noch die Modifikation, daß der Startzustand genau dann wieder erreicht wird, wenn kein Erfolg mehr möglich ist, also wenn in unserem bisherigen Modell in einen Zustand aus A übergegangen wird, so wird nun stattdessen in den Startzustand übergegangen. Wir benötigen die Zustände in A also nicht und können sie aus dem Zustandsraum entfernen. Eine mögliche Interpretation unserer nun modellierten Markovkette ist etwa ein Neubeginn, wenn der Mißerfolg des Gesamtexperimentes feststeht. Für die Simulation und unseren optimalen Schätzer spielt das keine Rolle, da die Simulation nach Erreichen von F oder dem Wiedererreichen des Startzustandes abgebrochen wird und insbesondere unter optimalem Importance Sampling der Startzustand nicht wieder erreicht wird. Die von uns gesuchte Wahrscheinlichkeit für mindestens k Erfolge in n Experimenten ist also nun gerade die Wahrscheinlichkeit in der beschriebenen Markovkette die Menge F zu erreichen bevor in den Startzustand $(0, 0)$ zurückgekehrt wird.

Insgesamt haben wir also eine homogene diskrete Markovkette (X_n) mit Zustandsraum

$$\mathcal{S} = \{(i, m) \in \{0, \dots, k\} \times \{0, \dots, n\} : i \leq m\} \setminus A,$$

Anfangsverteilung $\pi^{(0)}$ mit

$$\pi_{(0,0)}^{(0)} = 1, \quad \forall s \in \mathcal{S} \setminus \{(0, 0)\} : \pi_s^{(0)} = 0$$

und Übergangsmatrix \mathbf{P} mit Übergangswahrscheinlichkeiten

$$\begin{aligned} p_{(i,m),(i,m)} &= 1, & \text{falls } (i,m) \in F, \\ p_{(i,m),(i+1,m+1)} &= p, & \text{falls } (i,m) \in \mathcal{S} \setminus F, \\ p_{(i,m),(i,m+1)} &= 1 - p, & \text{falls } (i,m) \in \mathcal{S} \setminus F \wedge (i,m+1) \in \mathcal{S}, \\ p_{(i,m),(0,0)} &= 1 - p, & \text{falls } (i,m) \in \mathcal{S} \setminus F \wedge (i,m+1) \notin \mathcal{S}, \end{aligned}$$

und gesucht ist die Wahrscheinlichkeit $P\{T_F < T_{(0,0)}\}$.

Diese Markovkette erfüllt alle Voraussetzungen von Kuruganti und Strickland, und die gesuchte Wahrscheinlichkeit ist genau von der dort spezifizierten Form. Damit folgt also, daß der optimale Maßwechsel zur Schätzung dieser Wahrscheinlichkeit auf eine homogene diskrete Markovkette mit dem angegebenen Zustandsraum führt. Es verbleibt, zu zeigen, daß diese durch zustands- und zeitabhängige Bernoulli-Experimente realisiert werden kann.

Um eine Rücktransformation unserer Markovkette in Bernoulli-Experimente durchzuführen, stellen wir zunächst fest, daß die zweite Komponente eines Zustands der Markovkette die Anzahl der bereits durchgeführten Bernoulli-Experimente beschreibt. Dies ist für die Bernoulli-Experimente gerade die Zeitkomponente. Als Zustand nach mehreren Bernoulli-Experimenten ist die Anzahl von Erfolgen anzusehen. Es ist also insbesondere nicht notwendig, den gesamten Verlauf aller Bernoulli-Experimente zu berücksichtigen. Mit den Notationen aus 4.2.3 ergibt sich für die zustands- und zeitabhängigen Erfolgswahrscheinlichkeiten

$$p^{(m)}(i) = p_{(i,m-1)(i+1,m)}^*.$$

Da aus den Ergebnissen von Kuruganti und Strickland folgt, daß die Übergangsmatrix \mathbf{P}^* eindeutig bestimmt ist, folgt insbesondere für unser Gleichungssystem aus 4.2.3 für die $p^{(m)}(i)$, daß dieses eindeutig lösbar ist und somit, daß der optimale Maßwechsel in diesem Fall auf Bernoulli-Experimente mit zustands- und zeitabhängigen Erfolgswahrscheinlichkeiten führt, wobei ein Zustand durch die Anzahl bereits beobachteter Erfolge charakterisiert ist. Es ist durchaus bemerkenswert, daß die Form eines solchen zeitabhängigen Modells mit Hilfe von homogenen, also zeitunabhängigen, Markovketten nachgewiesen werden kann. Wesentlich dafür ist im beschriebenen Fall die zeitliche Endlichkeit des zu untersuchenden Experimentes. Dadurch war es möglich, die Zeit im zu untersuchenden Modell als Komponente von Markovkettenzuständen zu beschreiben und einen endlichen Zustandsraum zu erhalten. Der zweite entscheidende Punkt war die Abstraktion von der tatsächlichen Bedeutung des Startzustandes im Bernoulli-Modell, um die Ergebnisse von Kuruganti und Strickland für den Attractor – Rare Set Framework anzuwenden.

Wir wollen weiter anmerken, daß sich auch der optimale Maßwechsel zur Schätzung der Wahrscheinlichkeit von genau k Erfolgen in n Experimenten durch zustands- und

zeitabhängige Bernoulli-Experimente realisieren läßt. Dies kann anhand einer leichten Modifikation der obigen Markovkette gezeigt werden, mit der diese Variante der Bernoulli-Experimente modelliert wird. Dazu sei nun

$$F = \{(k, n)\},$$

die Menge von Zuständen, deren Wahrscheinlichkeit gesucht ist, hier also nur genau ein Zustand, und wir erhalten nach analogen Überlegungen zur vorherigen Situation eine homogene diskrete Markovkette mit Zustandsraum

$$\mathcal{S} = \{(i, m) \in \{0, \dots, k\} \times \{0, \dots, n\} : i \leq m\} \setminus A,$$

Anfangsverteilung $\pi^{(0)}$ mit

$$\pi_{(0,0)}^{(0)} = 1, \quad \forall s \in \mathcal{S} \setminus \{(0, 0)\} : \pi_s^{(0)} = 0$$

und Übergangsmatrix \mathbf{P} mit Übergangswahrscheinlichkeiten

$$\begin{aligned} p_{(i,m),(i,m)} &= 1, & \text{falls } (i, m) \in F, \\ p_{(i,m),(i+1,m+1)} &= p, & \text{falls } (i, m) \in \mathcal{S} \setminus F \wedge i < k, \\ p_{(i,m),(0,0)} &= p, & \text{falls } (i, m) \in \mathcal{S} \setminus F \wedge i = k, \\ p_{(i,m),(i,m+1)} &= 1 - p, & \text{falls } (i, m) \in \mathcal{S} \setminus F \wedge (i, m + 1) \in \mathcal{S}, \\ p_{(i,m),(0,0)} &= 1 - p, & \text{falls } (i, m) \in \mathcal{S} \setminus F \wedge (i, m + 1) \notin \mathcal{S}. \end{aligned}$$

Daraus kann wie zuvor ein Modell für Bernoulli-Experimente mit zustands- und zeitabhängigen Erfolgswahrscheinlichkeiten konstruiert werden. Wir können die Ergebnisse des Abschnitts zusammenfassen im

Satz 4.1 Die optimalen Maßwechsel zur Schätzung der Wahrscheinlichkeit von genau k Erfolgen in n unabhängigen Bernoulli-Experimenten und der Wahrscheinlichkeit von mindestens k Erfolgen in n unabhängigen Bernoulli-Experimenten führen auf Bernoulli-Experimente mit zustands- und zeitabhängigen Erfolgswahrscheinlichkeiten, wobei der Zustand die Anzahl der bereits erzielten Erfolge und die Zeit die Nummer des Experiments ist.

4.2.5 Leistungsmaße über endlichem Horizont

Wir betrachten die Schätzung der Wahrscheinlichkeit eines (seltenen) Zustands $r \in \mathcal{S}$ über endlichem Horizont $K \in \mathbb{N}^+$, startend in einem beliebigen festen Zustand $x_0 \in \mathcal{S}$. Diese Wahrscheinlichkeit läßt sich schätzen über die relative Besuchshäufigkeit im Zustand r und ergibt sich als $E[\frac{1}{K} \sum_{i=1}^K I_{\{X_i=r\}}]$, also mit einer Spezialisierung der allgemeinen Notation $E[g(X_0, \dots, X_K)]$ ist für die Schätzung der gesuchten Wahrscheinlichkeit gerade

$$g(X_0, \dots, X_K) = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K I_{\{X_i=r\}}.$$

Für den optimalen IS-Schätzer folgt

$$\begin{aligned}
p_{opt}^*(x_0, \dots, x_K) &= \frac{g(x_0, \dots, x_K)p(x_0, \dots, x_K)}{E[g(X_0, \dots, X_K)]} \\
&= \frac{\left(\frac{1}{K} \sum_{i=1}^K I_{\{x_i=r\}}\right) p(x_0, \dots, x_K)}{E\left[\frac{1}{K} \sum_{i=1}^K I_{\{X_i=r\}}\right]} \\
&= \frac{\frac{1}{K} \left(\sum_{i=1}^K I_{\{x_i=r\}}\right) p(x_0, \dots, x_K)}{\frac{1}{K} E\left[\sum_{i=1}^K I_{\{X_i=r\}}\right]} \\
&= \frac{\left(\sum_{i=1}^K I_{\{x_i=r\}}\right) p(x_0, \dots, x_K)}{E\left[\sum_{i=1}^K I_{\{X_i=r\}}\right]}
\end{aligned}$$

für alle Pfade $(x_0, \dots, x_K) \in \mathcal{S}^{K+1}$, die mindestens einmal den Zustand r enthalten, und $p_{opt}^*(x_0, \dots, x_K) = 0$ für alle Pfade, die den Zustand r nicht enthalten. Wir sehen also, daß der optimale Schätzer für die gesuchte Wahrscheinlichkeit identisch zum optimalen Schätzer für die Anzahl von Besuchen im Zustand r ist. Wir können uns also auf die optimale Schätzung dieser Besuchshäufigkeit beschränken mit

$$g(X_0, \dots, X_K) = \sum_{i=1}^K I_{\{X_i=r\}}$$

und

$$\gamma^{(K)} = E[g(X_0, \dots, X_K)] = E\left[\sum_{i=1}^K I_{\{X_i=r\}}\right] = \sum_{i=1}^K E[I_{\{X_i=r\}}].$$

Sei nun der optimale IS-Schätzer für die Besuchshäufigkeit über dem Horizont $K - 1$ bekannt. Für diesen muß insbesondere die LQ-Bedingung erfüllt sein, und wir betrachten im folgenden einen weiteren Übergang, wobei wir unterscheiden, ob dabei der seltene Zustand besucht wird oder nicht. Die Wahrscheinlichkeit eines Pfades der Länge K unter dem optimalen IS-Schätzer sei $p^{(K-1)}(x_0, \dots, x_{K-1}) \cdot p_{x_{K-1}x_K}^{(K)}$, wobei $p^{(K-1)}(x_0, \dots, x_{K-1})$ das optimale IS-Maß für den Horizont $K - 1$ und $p_{x_{K-1}x_K}^{(K)}$ die Übergangswahrscheinlichkeit von einem Zustand x_{K-1} in einen Zustand x_K im letzten, K -ten, Schritt beim optimalen

IS-Maß für den Horizont K bezeichnet[†] Es gilt also

$$\frac{p(x_0, \dots, x_{K-1})}{p^{(K-1)}(x_0, \dots, x_{K-1})} = \frac{\gamma^{(K-1)}}{g(x_0, \dots, x_{K-1})} = \frac{\gamma^{(K-1)}}{\sum_{i=1}^{K-1} I_{\{x_i=r\}}}$$

für alle $(x_0, \dots, x_{K-1}) \in \mathcal{S}^K$, die mindestens einmal den Zustand r enthalten. Wir betrachten nun Pfade der Länge K , also mit Originalwahrscheinlichkeit $p(x_0, \dots, x_K)$.

1. Fall: $x_K \neq r$.

Hier gilt

$$g(x_0, \dots, x_K) = g(x_0, \dots, x_{K-1}),$$

und der Likelihood-Quotient ist gegeben durch

$$L(x_0, \dots, x_K) = \frac{p(x_0, \dots, x_{K-1})p_{x_{K-1}x_K}}{p^{(K-1)}(x_0, \dots, x_{K-1})p_{x_{K-1}x_K}^{(K)}} = \frac{\gamma^{(K-1)}}{g(x_0, \dots, x_{K-1})} \cdot \frac{p_{x_{K-1}x_K}}{p_{x_{K-1}x_K}^{(K)}}$$

und für ein optimales Maß muß gelten

$$\frac{\gamma^{(K-1)}}{g(x_0, \dots, x_{K-1})} \cdot \frac{p_{x_{K-1}x_K}}{p_{x_{K-1}x_K}^{(K)}} \stackrel{!}{=} \frac{\gamma^{(K)}}{g(x_0, \dots, x_K)},$$

also folgt

$$\frac{p_{x_{K-1}x_K}}{p_{x_{K-1}x_K}^{(K)}} = \frac{\gamma^{(K)}}{\gamma^{(K-1)}}, \quad (4.21)$$

$$p_{x_{K-1}x_K}^{(K)} = \frac{\gamma^{(K-1)}}{\gamma^{(K)}} \cdot p_{x_{K-1}x_K}. \quad (4.22)$$

Da offensichtlich $\gamma^{(K-1)} \leq \gamma^{(K)}$ gilt, wird also in diesem Fall die Originalwahrscheinlichkeit durch den Faktor $\frac{\gamma^{(K-1)}}{\gamma^{(K)}} \leq 1$ verkleinert. Eine Verkleinerung war für diesen Fall sicherlich auch intuitiv zu erwarten. Wir haben nun also den Faktor bestimmt. Wir haben vorausgesetzt, daß wir $(x_0, \dots, x_{K-1}) \in \mathcal{S}^K$ betrachten, die mindestens einmal den Zustand r enthalten. Damit ist $\gamma^{(K-1)}$ immer echt positiv.

2. Fall: $x_K = r$.

Hier gilt

$$g(x_0, \dots, x_K) = g(x_0, \dots, x_{K-1}) + 1,$$

[†]Wir verzichten hier auf den Stern zur Symbolisierung eines IS-Maßes und den Index *opt* für ein optimales IS-Maß, um die Notation nicht unnötig unübersichtlich werden zu lassen.

und der Likelihood-Quotient ist wie im 1. Fall gegeben. Nun folgt für ein optimales IS-Maß

$$\frac{p_{x_{K-1}x_K}}{p_{x_{K-1}x_K}^{(K)}} = \frac{\gamma^{(K)}}{g(x_0, \dots, x_K)} \cdot \frac{g(x_0, \dots, x_{K-1})}{\gamma^{(K-1)}} \quad (4.23)$$

$$= \frac{\gamma^{(K)}}{\gamma^{(K-1)}} \cdot \frac{g(x_0, \dots, x_{K-1})}{g(x_0, \dots, x_{K-1}) + 1} \quad (4.24)$$

$$p_{x_{K-1}x_K}^{(K)} = \frac{\gamma^{(K-1)}}{\gamma^{(K)}} \cdot \frac{g(x_0, \dots, x_{K-1}) + 1}{g(x_0, \dots, x_{K-1})} \cdot p_{x_{K-1}x_K} \quad (4.25)$$

$$= \frac{\gamma^{(K-1)}}{\gamma^{(K)}} \cdot \left(1 + \frac{1}{g(x_0, \dots, x_{K-1})} \right) \cdot p_{x_{K-1}x_K} \quad (4.26)$$

Wieder erhält also die Originalübergangswahrscheinlichkeit zunächst den verkleinernden Faktor $\frac{\gamma^{(K-1)}}{\gamma^{(K)}} \leq 1$, zusätzlich aber den vergrößernden Faktor $1 + \frac{1}{g(x_0, \dots, x_{K-1})}$. Auch hier ist $\gamma^{(K-1)} > 0$, da wir $(x_0, \dots, x_{K-1}) \in \mathcal{S}^K$ betrachten, die mindestens einmal r enthalten. Ebenso ist dann $g(x_0, \dots, x_{K-1}) > 0$, also $g(x_0, \dots, x_{K-1}) \geq 1$ garantiert.

Als eine Schwierigkeit bei der Form des optimalen Importance-Sampling-Maßes ergibt sich der jeweils unbekannte Faktor $\frac{\gamma^{(K-1)}}{\gamma^{(K)}}$. Die praktische Anwendung und Implementierung erweist sich also einmal mehr als außerordentlich schwierig. Wir haben insbesondere auch gezeigt, daß die Übergangswahrscheinlichkeiten unter optimalem Importance Sampling im allgemeinen von der Anzahl der im bisherigen Simulationsteillauf bereits aufgetretenen Besuche im seltenen Zustand abhängig sind. Damit folgt also aus der hergeleiteten Form

Korollar 4.1 Zur Bestimmung von $\gamma^{(K)}$ ist optimales Importance Sampling im allgemeinen nicht mittels einer Markovkette realisierbar.

Um unsere rekursive Form für beliebige K zu verankern, müssen wir nun noch einen Spezialfall betrachten. Wir sind bisher von optimalem Importance Sampling für den Horizont $K-1$ ausgegangen und haben damit als Voraussetzung, daß die von uns betrachteten Pfade $(x_0, \dots, x_{K-1}) \in \mathcal{S}^K$ mindestens einmal den Zustand r enthalten. Damit war gewährleistet, daß $\gamma^{(K-1)} > 0$ und $g(x_0, \dots, x_{K-1}) > 0$ gelten. Diese rekursive Betrachtung benötigt nun eine Verankerung. Ist der seltene Zustand r nicht in höchstens $K-1$ Schritten vom Startzustand x_0 erreichbar, so ist die Wahrscheinlichkeit $\gamma^{(K-1)} = 0$, und es gilt für alle Pfade $g(x_0, \dots, x_{K-1}) = 0$. Unsere gesuchte Wahrscheinlichkeit sei nun aber echt positiv, also $\gamma^{(K)} > 0$. Dann existiert mindestens ein kürzester Pfad der Länge K von x_0 in den seltenen Zustand. Für kürzeste Pfade gilt, daß diese keine Zyklen enthalten, insbesondere auch keine self-loops. Jeder dieser kürzesten Pfade startet in x_0 und endet in $x_K = r$. Die Summe $g(x_0, \dots, x_K)$ der Indikatorfunktionen beträgt jeweils 1, da genau ein Besuch im seltenen Zustand r stattfindet. Existiert nur genau ein solcher Pfad, so erhält dieser

die Wahrscheinlichkeit 1, also alle Übergangswahrscheinlichkeiten für die Übergänge auf diesem Pfad erhalten die Wahrscheinlichkeit 1. Allgemein gilt für alle kürzesten Pfade der Länge K

$$\frac{p(x_0, \dots, x_K)}{p^{(K)}(x_0, \dots, x_K)} = \gamma^{(K)} = E[g(X_0, \dots, X_K)],$$

also sind hier alle Likelihood-Quotienten gleich.

Kürzeste Pfade können gemeinsame Zustände enthalten. Spätestens ab dem Punkt, wo alle Pfade in verschiedenen Zuständen sind und sich nicht mehr „kreuzen“, muß der jeweilige Pfad auf genau einem Restpfad in den seltenen Zustand führen. Somit haben die Übergangswahrscheinlichkeiten für alle Übergänge auf solchen Restpfaden den Wert 1. Betrachten wir nun exemplarisch zwei Pfade, die nur die Zustände x_0 und $x_K = r$ gemeinsam haben. Für solche Pfade müssen dann also alle Übergangswahrscheinlichkeiten außer der des jeweils ersten Übergangs den Wert 1 erhalten. Betrachten wir die Pfade $x_0, x_1, \dots, x_{K-1}, x_K$ und $x_0, y_1, \dots, y_{K-1}, x_K$, wobei alle $x_i, y_j, 0 < i, j < K$ verschieden sind. Dann folgt

$$\frac{p_{x_0 x_1}}{p_{x_0 x_1}^{(K)}} = \frac{p_{x_0 y_1}}{p_{x_0 y_1}^{(K)}}.$$

Zusammen mit der Normierungsbedingung $p_{x_0 x_1}^{(K)} + p_{x_0 y_1}^{(K)} = 1$ für die Übergangswahrscheinlichkeiten erhalten wir

$$\begin{aligned} p_{x_0 x_1}^{(K)} &= p_{x_0 y_1}^{(K)} \cdot \frac{p_{x_0 x_1}}{p_{x_0 y_1}} \\ &= (1 - p_{x_0 x_1}^{(K)}) \frac{p_{x_0 x_1}}{p_{x_0 y_1}} \\ &= \frac{p_{x_0 x_1}}{p_{x_0 y_1}} - p_{x_0 x_1}^{(K)} \cdot \frac{p_{x_0 x_1}}{p_{x_0 y_1}} \end{aligned}$$

also

$$p_{x_0 x_1}^{(K)} \cdot \left(1 + \frac{p_{x_0 x_1}}{p_{x_0 y_1}}\right) = \frac{p_{x_0 x_1}}{p_{x_0 y_1}}$$

und damit

$$\begin{aligned} p_{x_0 x_1}^{(K)} &= \frac{p_{x_0 x_1}}{p_{x_0 y_1}} \cdot \left(1 + \frac{p_{x_0 x_1}}{p_{x_0 y_1}}\right)^{-1} \\ &= \frac{p_{x_0 x_1}}{p_{x_0 y_1}} \cdot \frac{p_{x_0 y_1}}{p_{x_0 y_1} + p_{x_0 x_1}} \\ &= \frac{p_{x_0 x_1}}{p_{x_0 y_1} + p_{x_0 x_1}} \end{aligned}$$

und entsprechend

$$p_{x_0y_1}^{(K)} = 1 - p_{x_0x_1}^{(K)} = 1 - \frac{p_{x_0x_1}}{p_{x_0y_1} + p_{x_0x_1}}.$$

Analog zu dieser Herleitung kann ein beliebiger Kreuzungspunkt betrachtet werden. Nur an diesem Kreuzungspunkt müssen die Übergangswahrscheinlichkeiten in verschiedene Folgezustände berücksichtigt werden. Ebenso folgt leicht die Erweiterung auf mehr als zwei Pfade, die sich an einem Punkt kreuzen. Jeder weitere Pfad liefert gemäß der LQ-Bedingung eine weitere Gleichung, und es ist eine zusätzliche Übergangswahrscheinlichkeit zu betrachten. Mit der Normierungsbedingung lassen sich diese wie oben bestimmen. Die rekursive Formulierung des optimalen IS-Maßes ist damit also komplett.

4.2.6 Stationäre Leistungsmaße

Wir betrachten nun optimale Maßwechsel für stationäre Zustandswahrscheinlichkeiten. Dabei ist zunächst zu entscheiden, auf welche Art die simulative Bestimmung erfolgen soll, also welche Technik zur Bestimmung von Schätzern und Konfidenzintervallen Anwendung findet.

Die Methode unabhängiger Simulationsläufe von endlichem Horizont haben wir im vorherigen Abschnitt für transiente Leistungsmaße untersucht. Die Anwendung auf stationäre Größen funktioniert analog, wobei der Horizont, also die Länge der Läufe, sehr groß ist und zusätzlich eine Einschwingphase durchlaufen wird. Alternativ könnte man bei extrem langen Läufen auch die Einschwingphase vernachlässigen, da dann der Einfluß der Anfangsbedingungen kaum noch ins Gewicht fällt. In Bezug auf optimale Maßwechsel beim Importance Sampling ändert sich im Vergleich zu Leistungsmaßen, die über endlichem Horizont definiert sind nichts Wesentliches, außer daß nach Ablauf der Einschwingphase im allgemeinen für jeden Lauf ein unterschiedlicher Zustand erreicht wird, aus dem dann die eigentliche Simulation, also die Phase, in der Daten gesammelt und ausgewertet werden, gestartet wird. Da unter optimalem Importance Sampling jeder Lauf eine perfekte Schätzung der gesuchten Größe liefert, ergibt sich unabhängig von diesem Startzustand die Form des optimalen Maßwechsels wie im vorherigen Abschnitt für Leistungsmaße über endlichem Horizont. Ähnlich können wir für die Methode der Gruppenmittelwerte (Batch Means) argumentieren, da hierbei in jeder Gruppe, jedem Batch, unter optimalem Importance Sampling eine perfekte Schätzung resultiert.

Wir betrachten daher hier die regenerative Methode, da im Gegensatz zu den beiden anderen Verfahren dabei Simulationsläufe, Regenerationszyklen, unterschiedlicher Länge auftreten. Zunächst ist die Wahl eines Regenerationszustandes erforderlich. In Markovketten ist jeder Zustand regenerativ, und aus probabilistischer Sicht beeinflußt der Regenerationszustand die Genauigkeit einer Schätzung nicht, lediglich der Aufwand kann sehr unterschiedlich sein, je nachdem wie groß die Wahrscheinlichkeit des Regenerationszustands

ist, d.h. wie häufig er besucht wird und wie lang daraus resultierend die Regenerationszyklen im Mittel sind. Für die Form optimaler Maßwechsel ist dies jedoch unbedeutend, zumal die Veränderung des Wahrscheinlichkeitsmaßes auch die Zustandswahrscheinlichkeiten ändert. Insbesondere kann ein seltener Zustand als Regenerationszustand gewählt werden, auch wenn dies ungewöhnlich erscheinen mag. In diesem Fall ist aber gerade die stationäre Wahrscheinlichkeit des Regenerationszustandes gesucht, die identisch zur mittleren Rückkehrzeit für diesen Zustand ist.

Gesucht ist also nun der Erwartungswert der Rückkehrzeit in den seltenen Zustand r , der als Regenerationszustand gewählt wird. Es ist also für einen Pfad $(x_0, \dots, x_t) \in \mathcal{S}^{t+1}$ mit $x_0 = x_t = r$ und $x_i \neq r, 0 < i < t$ gerade $g(x_0, \dots, x_t) = t$ und

$$p_{opt}^*(x_0, \dots, x_t) = \frac{g(x_0, \dots, x_t)p(x_0, \dots, x_t)}{\gamma} = \frac{tp_{x_0x_1}p_{x_1x_2} \cdots p_{x_{t-1}x_t}}{\gamma}$$

Unter optimalem Importance Sampling muß jeder Regenerationszyklus eine perfekte Schätzung für die mittlere Rückkehrzeit liefern. Für zwei Zyklen der Längen t_1 und t_2 mit den Likelihood-Quotienten L_1 und L_2 gilt unter optimalem Importance Sampling insbesondere

$$t_1 \cdot L_1 = t_2 \cdot L_2 = \gamma.$$

Betrachten wir nun einen Zyklus der Länge t_1 , der mindestens einen Zustand enthält, in dem ein self-loop möglich ist. Dann gibt es einen Zyklus der Länge $t_2 = t_1 + 1$ so, daß im Vergleich zum Zyklus der Länge t_1 ein solcher self-loop aufgetreten ist. Dieser sei oBdA im Zustand x_i erfolgt. Damit ergibt sich für den Likelihood-Quotienten des zweiten Zyklus

$$L_2 = L_1 \cdot \frac{p_{x_i x_i}}{p_{x_i x_i}^*},$$

und es folgt

$$t_1 \cdot L_1 = (t_1 + 1) \cdot L_1 \cdot \frac{p_{x_i x_i}}{p_{x_i x_i}^*},$$

$$t_1 = (t_1 + 1) \cdot \frac{p_{x_i x_i}}{p_{x_i x_i}^*},$$

$$\begin{aligned} p_{x_i x_i}^* &= \frac{t_1 + 1}{t_1} \cdot p_{x_i x_i} \\ &= \left(1 + \frac{1}{t_1}\right) \cdot p_{x_i x_i}. \end{aligned}$$

Wir sehen also, daß schon für diesen einfachen Fall das optimale IS-Maß abhängig von der Zyklenlänge ist. Diese ist jedoch weder vorab noch während des Laufes bekannt, sodaß die Rückkehrzeit nicht mittels einer Markovkette optimal geschätzt werden kann.

Betrachten wir nun einen beliebigen anderen Regenerationszustand. Dann muß unter optimalem Importance Sampling der seltene Zustand in jedem Zyklus erreicht werden, es müssen alle Regenerationszyklen, die den seltenen Zustand enthalten möglich sein, und es muß jeder Regenerationszyklus eine perfekte Schätzung der gesuchten Wahrscheinlichkeit liefern. Für zwei Regenerationszyklen der Längen t_1 und t_2 , die gleich oft, v mal den seltenen Zustand enthalten, sind diese Schätzungen $\frac{v}{t_1}$ und $\frac{v}{t_2}$. Bezeichnen wieder L_1 und L_2 die Likelihood-Quotienten für die beiden Zyklen, dann gilt unter optimalem Importance Sampling

$$\frac{v}{t_1} \cdot L_1 = \frac{v}{t_2} \cdot L_2,$$

$$t_1 \cdot L_2 = t_2 \cdot L_1.$$

Betrachten wir nun wieder zwei Zyklen der Längen t_1 und $t_2 = t_1 + 1$, die sich nur um einen self-loop unterscheiden, also mit

$$L_2 = L_1 \cdot \frac{p_{x_i x_i}}{p_{x_i x_i}^*},$$

so folgt

$$L_1 \cdot (t_1 + 1) = L_1 \cdot \frac{p_{x_i x_i}}{p_{x_i x_i}^*} \cdot t_1,$$

$$t_1 + 1 = \frac{p_{x_i x_i}}{p_{x_i x_i}^*} \cdot t_1,$$

$$p_{x_i x_i}^* = \frac{t_1}{t_1 + 1} \cdot p_{x_i x_i}.$$

Also auch für jeden anderen Regenerationszustand als den seltenen Zustand hängt das optimale IS-Maß von der Länge des Regenerationszyklus ab, und somit ist die optimale Schätzung einer stationären Zustandswahrscheinlichkeit per regenerativer Simulation mittels einer Markovkette als IS-Maß nicht möglich. Wir können also Ergebnisse dieses Abschnitts zusammenfassen im

Satz 4.2 Das optimale Importance-Sampling-Maß zur Schätzung stationärer Zustandswahrscheinlichkeiten von Markovketten ist im allgemeinen keine Markovkette.

Anders formuliert

Korollar 4.2 Die optimale Importance-Sampling-Schätzung stationärer Zustandswahrscheinlichkeiten von Markovketten ist mittels einer Markovkette als Importance-Sampling-Maß im allgemeinen nicht möglich.

4.3 Effiziente Schätzer

Wir haben gesehen, daß der optimale Maßwechsel von der Art des gesuchten Leistungsmaßes abhängt und insbesondere für Leistungsmaße über endlichem Horizont und stationäre Größen nicht als Markovkette realisierbar ist. Dennoch gibt es Fälle, in denen Maßwechsel existieren, die als Markovkette realisiert werden können und die, wenn auch nicht optimale, so doch effiziente Schätzer liefern. Dabei existieren Effizienzkriterien wie asymptotische Optimalität, beschränkte relative Fehler und Charakterisierungen bzw. Voraussetzungen für diese Effizienzkriterien. Sind diese Kriterien formal nicht nachweisbar, so wird Effizienz oft auch nur im Sinne von (meistens) varianzreduzierend betrachtet, belegt etwa durch empirische Untersuchungen. Es ist klar, daß auch nichtoptimale aber effiziente Maßwechsel sehr problemspezifisch und schwer verallgemeinerbar sind. So führt etwa die Verallgemeinerung des bekannten asymptotisch optimalen Schätzers für das Erreichen eines hohen Füllstands in einem M/M/1-Modell selbst für Tandemnetze mit nur zwei Knoten für gewisse Parameter auf IS-Schätzer mit unendlicher Varianz. Darüberhinaus spielt auch die Simulationsmethode eine wesentliche Rolle.

4.3.1 Zyklischer Ansatz

Für den in Abschnitt 4.2.4 vorgestellten Attractor – Rare Set Framework beschreibt Juneja [Jun93, Jun03] einen zyklischen Ansatz zur Bestimmung effizienter, varianzreduzierender Maßwechsel, die durch homogene Markovketten realisiert werden können und gibt Bedingungen für die asymptotische Optimalität derart hergeleiteter Maßwechsel an. Basis und Motivation für Junejas Ansatz ist, daß der optimale Maßwechsel konstante Likelihood-Quotienten liefert. Das Ziel besteht daher darin, neben dem allgemeinen Ziel des häufigeren Hervorrufens des seltenen Ereignisses zumindest annähernd konstante Likelihood-Quotienten auf Pfaden zum seltenen Ereignis zu erhalten. Wir sprechen hier bewußt von Pfaden zum seltenen Ereignis und nicht allgemeiner von Pfaden, die das seltene Ereignis enthalten, da die Vereinfachung durch die Einschränkung auf den Attractor – Rare Set Framework gerade im wesentlichen darin besteht, daß für Absorptionswahrscheinlichkeiten und Arbeitsphasenparameter ein Simulationslauf endet, wenn das seltene Ereignis auftritt.

Juneja zeigt, daß eine Varianzreduktion garantiert ist, wenn der Likelihood-Quotient auf allen Pfaden zum seltenen Ereignis durch eine kleine Konstante beschränkt ist und leitet notwendige Bedingungen für beschränkte Likelihood-Quotienten her. Dabei spielt hauptsächlich das Verhalten des Likelihood-Quotienten auf Zyklen eine Rolle, woraus sich der Name des Ansatzes erklärt. Grob und informell ausgedrückt ist ein Maßwechsel im Attractor – Rare Set Framework asymptotisch optimal, wenn der Likelihood-Quotient auf Pfaden zum seltenen Ereignis konstant ist und das seltene Ereignis unter diesem Maßwechsel nicht mehr selten ist. Letzteres wollen wir im folgenden präzisieren.

Sei B_m ein von einem Seltenheitsparameter m abhängiges Ereignis mit

$$\lim_{m \rightarrow \infty} P\{B_m\} = 0,$$

und sei das Importance-Sampling-Maß mit P^* bezeichnet.

Proposition (Juneja) Falls der Likelihood-Quotient auf der Menge B_m konstant ist und

$$\exists \beta > 0 : \inf_m P^*\{B_m\} \geq \beta,$$

dann ist der Maßwechsel asymptotisch optimal und der resultierende Importance-Sampling-Schätzer hat beschränkten relativen Fehler.

Erstrebenswert sind also konstante Likelihood-Quotienten. Juneja gibt dafür als Bedingung an, daß der Likelihood-Quotient für Pfade zum seltenen Ereignis auf allen Zyklen den Wert 1 hat. Dies ist analog zur Schleifenbedingung von Kuruganti und Strickland (vgl. Abschnitt 4.2.4), wobei historisch die Arbeit von Juneja früher erschien, er jedoch anders als Kuruganti und Strickland keine Bedingungen für optimale Maßwechsel untersucht hat. Daß die Schleifenbedingung notwendig für konstante Likelihood-Quotienten ist, sieht man leicht, indem man sich überlegt, daß mehrfaches Durchlaufen von Zyklen/Schleifen möglich ist und bei einem Wert des Likelihood-Quotienten ungleich 1 zu unterschiedlichen Likelihood-Quotienten für den gesamten Pfad führt. Leider ist es insbesondere für komplexe Systeme ausgesprochen schwierig und meist unmöglich, einen Maßwechsel zu finden, der diese Bedingung erfüllt. Juneja argumentiert daher, daß auch die schwächere Bedingung beschränkter Likelihood-Quotienten erstrebenswert ist. Hierfür ist eine notwendige Bedingung, daß der Likelihood-Quotient auf allen Zyklen durch 1 beschränkt ist. Unter gewissen Voraussetzungen garantiert ein beschränkter Likelihood-Quotient zumindest eine Varianzreduktion.

Die Bedingungen von Juneja sind zwar als Richtlinie zum Auffinden effizienter Maßwechsel erdacht worden, lassen sich aber selbstverständlich auch nutzen, um zu zeigen, daß bestimmte Maßwechsel nicht asymptotisch optimal sind. Insbesondere beweisen wir so in Abschnitt 4.5 für Tandemsysteme, daß kein zustandsunabhängiger asymptotisch optimaler Maßwechsel existiert. Eine der wesentlichen Erkenntnisse der Arbeiten von Juneja besteht darin, daß das Verhalten des Likelihood-Quotienten wesentlich durch seine Eigenschaften auf Zyklen bestimmt ist. Dies gilt nicht nur für Markovsche Modelle, sondern auch in allgemeinerem Rahmen für komplexere stochastische Prozesse, ist jedoch dabei noch schwieriger praktisch auszunutzen als im Markovschen Fall.

4.3.2 Heuristiken für Zuverlässigkeitsmodelle

Für die Simulation von Zuverlässigkeitssystemen mittels Importance Sampling existieren zahlreiche Heuristiken, insbesondere für Markovsche Modelle, wobei für stationäre Leistungsmaße zumeist regenerative Simulation angewandt wird. Die besondere Bedeutung

der Markovschen Annahme ist darin begründet, daß diese die Modelle wesentlich vereinfachen kann und häufig ermöglicht, Effizienzkriterien, meist beschränkten relativen Fehler, nachzuweisen. Die den Heuristiken zugrundeliegenden Ideen und auch deren praktische Durchführung ist jedoch nicht auf Markovsche Modelle beschränkt, sondern in allgemeinerem Rahmen zu verstehen, allerdings ist die Umsetzung für nicht-Markovsche Modelle erheblich schwieriger. Wir diskutieren diese Heuristiken daher auch erst an dieser Stelle, da sie einerseits für Markovsche Modelle entwickelt wurden und im wesentlichen auch darauf angewendet werden und andererseits zudem das intuitive Verständnis der Ideen nach den bisherigen Ausführungen über Importance Sampling für Markovmodelle leichter fällt. Wir beschreiben zunächst die Klasse von Zuverlässigkeitsmodellen, für die die Heuristiken geeignet sind, also die Annahmen, die bezüglich der Modelle gemacht werden.

Betrachtet werden Systeme bestehend aus Komponenten, die ausfallen können, und dann repariert werden. Die Komponenten müssen dabei nicht unabhängig sein, sie können gemeinsame Reparaturressourcen haben, und Fehlerpropagation ist erlaubt, also Fehler einer Komponente können Fehler anderer Komponenten hervorrufen. Im mathematischen Modell sind Fehlerraten einer Komponente i durch $\lambda_i \epsilon^{r_i}$ repräsentiert, wobei ϵ einen Seltenheitsparameter darstellt, und die Wahrscheinlichkeit für Systemfehler für $\epsilon \rightarrow 0$ gegen Null konvergiert (vgl. Abschnitt 3.3.4). Für sogenannte unbalancierte Systeme können die Exponenten r_i verschieden sein. Da die Reparaturraten vergleichsweise groß sind, werden sie durch Konstanten repräsentiert. Eine wesentliche Annahme ist, daß in allen Zuständen außer dem fehlerfreien Zustand mindestens ein Reparaturübergang möglich ist. Gilt dies nicht, so können die unten beschriebenen Failure-Biasing-Strategien eine unendliche Varianz des IS-Schätzers zur Folge haben.

Unter der Annahme exponentieller Zeitdauern kann man solche Systeme als stetige Markovkette modellieren, und zur Bestimmung stationärer Größen kann eine eingebettete diskrete Markovkette simuliert werden. Die unten beschriebenen Maßwechsel korrespondieren dabei zur Simulation einer Markovkette mit gleichem Zustandsraum und anderer Übergangsmatrix, in der alle ursprünglich möglichen Übergänge weiter möglich sind und keine ursprünglich unmöglichen Übergänge möglich sind. Einzelheiten zu den Nachteilen dieser Einschränkung haben wir bereits diskutiert. Wir weisen aber erneut darauf hin, daß diese Einschränkung in den allgemeinen Importance-Sampling-Gleichungen der Forderung der absoluten Stetigkeit auf dem gesamten zugrundeliegenden Ereignisraum oder der σ -Algebra entspricht, und damit unter Umständen der optimale IS-Schätzer ausgeschlossen wird.

Im folgenden stellen wir die wichtigsten und bekanntesten Heuristiken für die beschriebene Klasse von Modellen vor. Dabei beschränken wir uns auf informelle Beschreibungen, die die grundlegenden Ideen vermitteln sollen. Für einen ausführlicheren und formaleren Überblick sei auf [NSN01] verwiesen. Eine detaillierte Behandlung der Bedingungen für Markovsche Systeme, unter denen die Heuristiken IS-Schätzer mit beschränkten relativen

Fehlern liefern, findet man in [Nak96]. Die Anwendung dieser Ergebnisse in der Praxis erweist sich jedoch leider als außerordentlich schwierig, da es außer in sehr einfachen Fällen schwierig ist, diese Bedingungen zu prüfen. Die intuitive Idee, die allen Strategien zugrundeliegt ist einfach, Fehlerübergänge sollen häufiger auftreten.

Failure Biasing

Die Methode des Failure Biasing, heute oft *Simple Failure Biasing* genannt, wurde in [LB84] im Zusammenhang mit Zuverlässigkeitsuntersuchungen in der Nuklearphysik vorgeschlagen. Eine erste mathematische Analyse für Markovsche Modelle wird in [Sha90] vorgenommen. Die Grundidee beim Failure Biasing besteht darin, das System häufiger auf typischen Pfaden zum Fehler zu führen. In allen Systemzuständen außer dem fehlerfreien Zustand ist die Gesamtwahrscheinlichkeit für einen Komponentenfeler, also die Summe der Fehlerwahrscheinlichkeiten jedes Komponententyps, klein, für eine Reparatur groß. Beim Simple Failure Biasing wird die Gesamtfehlerwahrscheinlichkeit auf einen festen Wert p , den *Failure-Biasing-Parameter*, vergrößert und alle einzelnen Fehlerwahrscheinlichkeiten dementsprechend mit dem selben Faktor multipliziert. Dabei ist es meist unmöglich, den optimalen Wert von p analytisch oder numerisch zu bestimmen, und daher muß dieser Wert heuristisch oder experimentell gefunden werden. Die zunächst plausibel erscheinende Idee, p so groß oder annähernd so groß wie möglich zu wählen, also $p \approx 1$, erweist sich als unbrauchbar, vielmehr legen ausführliche empirische Untersuchungen nahe, $0.5 \leq p \leq 0.9$ zu wählen, da p zu dicht bei Eins häufig zu Varianzvergrößerung, teilweise gar zu unendlicher Varianz führt.

Es wird deutlich, daß es nicht ausreicht, lediglich das seltene Ereignis häufiger zu generieren, sondern daß es eine wichtige Rolle spielt, wie, also auf welchen Pfaden, das seltene Ereignis provoziert wird. Grob gesprochen müssen zunächst alle im Sinne der Größenordnung ihrer Wahrscheinlichkeit typischsten Pfade zum seltenen Ereignis eine höhere Wahrscheinlichkeit erhalten. Weniger typische Pfade müssen zwar ebenfalls „wahrscheinlicher gemacht“ werden, jedoch nicht so stark wie die typischsten Pfade. Beim Simple Failure Biasing bleiben die Verhältnisse der Wahrscheinlichkeiten unterschiedlicher Fehlerübergänge zueinander gleich. In unbalancierten Systemen mit Fehlerwahrscheinlichkeiten unterschiedlicher Größenordnungen kann dies Pfade mit „ausreichend großer“ Wahrscheinlichkeit ausschließen in dem Sinne, daß die Fehlerübergänge mit Wahrscheinlichkeiten kleiner Größenordnung auch nach dem Failure Biasing noch sehr selten sind. Dann ist Importance Sampling ineffizient. Dieses Problem führt zur Idee des *Balanced Failure Biasing*.

Balanced Failure Biasing

Die Variante des Balanced Failure Biasing wurde von Perwez Shahabuddin in seiner Dissertation [Sha90] vorgeschlagen, siehe auch [Sha94b]. Er hat gezeigt, daß damit beschränk-

te relative Fehler für die Schätzung der stationären Unverfügbarkeit und die mittlere Zeit zum Systemfehler erreicht werden können. Für balancierte Systeme liefert dennoch das Simple Failure Biasing häufig für konkrete Modelle bessere Ergebnisse. Das oben angesprochene Problem für unbalancierte Systeme wird gelöst, indem allen Komponentenfehlern die gleiche Wahrscheinlichkeit zugeordnet wird, d.h. es wird weiterhin der Failure-Biasing-Parameter wie oben gewählt, die Verhältnisse der Fehlerwahrscheinlichkeiten jedoch nicht erhalten. Dies gewährleistet zwar, daß alle Pfade zum Systemfehler ausreichend wahrscheinlich sind, es wird jedoch „Wahrscheinlichkeit verschwendet“, da manche Pfade stärker als notwendig gewichtet werden. Dadurch können die Simulationsergebnisse verschlechtert werden, insbesondere, wenn im fehlertoleranten System hohe Redundanzen vorhanden sind. Dies stellt gewissermaßen einen Bezug zu Warteschlangenmodellen her, da hohe Redundanzen eine größere Anzahl von Komponentenfehlern bis zum Systemfehler bedeuten.

Bei beiden beschriebenen Strategien besteht das Problem in der Bestimmung des Parameters p , die in den meisten Fällen schlicht durch Experimente heuristisch durchgeführt wird. In [DT93b] wird ein adaptiver Ansatz (siehe Abschnitt 5) über eine Reihe von Vor-simulationen vorgeschlagen, der auch zur Bestimmung von p anwendbar ist. Der dabei beobachtete relative Fehler für verschiedene Werte von p wird protokolliert, und der optimale Wert von p ist der, für den der relative Fehler am kleinsten ist. Eine Optimierung basierend auf Simulated Annealing wird dann auf die Reihe der Ergebnisse angewendet, um aus den experimentellen Daten das optimale p zu bestimmen.

Failure Distance Biasing

Das von Carrasco [Car92] vorgeschlagene Failure Distance Biasing verfolgt das Ziel, hauptsächlich typische Pfade zum seltenen Ereignis zu generieren, um die beschriebene Verschwendung von Wahrscheinlichkeit zu vermeiden. Auch hier wird die Gesamtfehlerwahrscheinlichkeit auf p erhöht. Wie diese Wahrscheinlichkeit auf die einzelnen Fehlerübergänge aufgeteilt wird, hängt dann von den *Fehlerdistanzen* ab, den minimalen Anzahlen von Komponentenfehlern, die noch eintreten müssen bis ein Systemfehler auftritt. Die Grundidee ist, die Fehlerraten so zu verändern, daß das meiste Gewicht auf die Komponenten entfällt, die an einem Systemfehler beteiligt sind, der am nächsten am aktuellen Zustand liegt, wobei „am nächsten“ in dem Sinne gemeint ist, daß die Fehlerdistanz minimal ist. Dazu muß also diese Fehlerdistanz für alle Zustände berechnet werden. Zudem wird ein Parameter *Criticality* definiert, der die Differenz der Fehlerdistanzen zweier Zustände bezeichnet. Bei der Simulation wird für den jeweils aktuellen Zustand die Menge der Fehlerübergänge entsprechend der Criticality partitioniert, indem alle Fehlerübergänge mit gleicher Criticality in die selbe Teilmenge eingeteilt werden. Dann wird p so auf die Teilmengen aufgeteilt, daß mit größerer Criticality größere Wahrscheinlichkeiten für die korrespondierenden Übergänge gewählt werden. Innerhalb der Teilmengen wird diese Wahrscheinlichkeit wiederum auf die einzelnen Fehlerübergänge aufgeteilt. Dies

kann unter Erhaltung der Verhältnisse der Wahrscheinlichkeiten wie beim Simple Failure Biasing oder mit jeweils gleichen Wahrscheinlichkeiten wie beim Balanced Failure Biasing erfolgen.

Im Gegensatz zu den Failure-Biasing-Strategien wird der Maßwechsel nicht vorab fest gewählt, sondern kann sich während der Simulation dynamisch verändern. Für Markovmodelle bedeutet dies, daß nach jedem Zustandsübergang eine neue Übergangsmatrix bestimmt wird.

Die Beispiele in [Car92] deuten darauf hin, daß Failure Distance Biasing bessere Ergebnisse als Simple Failure Biasing und Balanced Failure Biasing liefert. Das Problem ist jedoch die Berechnung der Fehlerdistanzen. Die Anwendung des Failure Distance Biasing erfordert die Berechnung der Fehlerdistanzen des aktuellen Zustands und aller Zustände, die vom aktuellen Zustand durch Fehlerübergänge erreicht werden können. Die exakte Berechnung, auf die wir hier nicht im Detail eingehen, setzt eine Beschreibung des Systems durch eine *Strukturfunktion* voraus und erfordert die Bestimmung der Mengen minimaler Cuts (*minimal cut sets*) dieser Strukturfunktion[‡]. Dies ist im allgemeinen ein NP-hartes Problem [GJ79], und daher müssen Einschränkungen gemacht werden, und diese Fehlerdistanzen können nur approximativ berechnet werden. Die Simulationsbeschleunigung beim Failure Distance Biasing hängt jedoch sehr stark gerade von der Güte der berechneten Fehlerdistanzen ab.

Balanced Likelihood Ratio

Ein weiteres Verfahren zur Vermeidung der Probleme, die sich bei hoher Redundanz ergeben, ist die Methode der balancierten Likelihood-Quotienten, Balanced Likelihood Ratio [AS98]. Die Idee dabei ist, daß sich die Anteile von Fehler- und korrespondierenden Reparaturübergängen am Likelihood-Quotienten gegenseitig aufheben sollen, d.h. das Produkt dieser beiden „Einzel-Likelihood-Quotienten“ (Einzel-LQ) soll Eins ergeben. Die Komponententypen werden entsprechend der Größenordnungen der Ausfallraten partitioniert, und bei der Simulation werden die Einzel-LQ für jede der Teilmengen gespeichert. Im Gegensatz zu den bisher beschriebenen Strategien wird kein fester Failure-Biasing-Parameter p gewählt, sondern in jedem Simulationsschritt ein neues p in Abhängigkeit vom aktuellen Zustand und den Einzel-LQ berechnet, um so zu garantieren, daß sich die Einzel-LQ von Fehler- und Reparaturraten aufheben. Somit ist der Likelihood-Quotient über einem regenerativen Zyklus durch Eins beschränkt und die Varianz unter dem neuen Maß niemals größer als unter dem Originalmaß. Die Idee ist also eng verwandt mit dem im vorherigen

[‡]Ein cut set ist eine Menge von Ereignissen, die einen Systemfehler produzieren, wenn sie gemeinsam auftreten. Dementsprechend enthält ein min cut set die mindestens für einen Systemfehler notwendigen Ereignisse. Im Bereich von Sicherheits- und Risikoanalysen ist die Fehlerbaumanalyse (*fault-tree analysis*) eine gängige Technik. Der erste Schritt dabei produziert Listen von min cut sets für jedes sogenannte TOP-Ereignis. Diese Liste beschreibt die Kombination von Komponentengefehlern, die das jeweilige TOP-Ereignis hervorrufen. Min-cut-set-Listen können durch Techniken Boolescher Algebra erhalten werden.

Abschnitt beschriebenen zyklischen Ansatz von Juneja. Eine Einschränkung der Methode, die sich aus der Entwicklung für Zuverlässigkeitsmodelle erklärt, besteht darin, daß nur jeweils Paare von Fehler- und Reparaturübergängen betrachtet werden.

Für die Simulation transienter Leistungsmaße sind die beschriebenen Strategien allein oft nicht ausreichend, da sie sich auf Zustandsübergänge, nicht auf Verweildauern in Zuständen beziehen, d.h. es wird lediglich das Verhältnis zwischen Fehler- und Reparaturraten verändert. So ist für einen kleinen Zeithorizont t die Verweildauer im Anfangszustand meist größer als t . Zudem sind für transiente Größen rein regenerative Simulationen ungeeignet. Somit sind also hierfür weitere Verfahren erforderlich. Es muß sichergestellt sein, daß der erste Übergang vor der Zeit t stattfindet.

Forcing

Die in [LB84] eingeführte Methode des Forcing basiert auf einer Modifikation der Verweildauern in den Zuständen. Die Zeit bis zum ersten Komponentenfeler wird dabei gemäß der bedingten Verteilung, daß diese Zeit kleiner als der Zeithorizont t ist, erzeugt. Die Methode kann dann mit anderen Strategien kombiniert werden. Es hat sich dabei für die Failure-Biasing-Strategien herausgestellt, daß für einen kleinen Zeithorizont t oft IS-Schätzer mit beschränkten relativen Fehlern resultieren, für große Zeithorizonte jedoch der relative Fehler des IS-Schätzers in der Regel gegen unendlich konvergiert.

Conditioning

Eine weitere Methode, transiente Zuverlässigkeitsmaße bei kleinem Zeithorizont zu simulieren ist das Conditioning [GSH⁺92]. Dabei wird die eingebettete diskrete Markovkette unter Verwendung von Failure Biasing simuliert bis ein Systemfehler auftritt, und für alle besuchten Zustände werden die Verweildauern generiert. Dann wird aus dem gegebenen Pfad der diskreten Markovkette und der Summe der generierten Verweildauern analytisch die bedingte Wahrscheinlichkeit für einen Systemfehler berechnet. Zwar garantiert diese Methode eine Varianzreduktion, dies jedoch auf Kosten eines oft erheblich größeren Aufwands, der sich aus der notwendigen Berechnung von Faltungen ergibt.

Die vorgestellten Methoden zur Bestimmung eines Maßwechsels für Importance Sampling eignen sich für stationäre Zuverlässigkeitsmaße unter Verwendung der regenerativen Simulationsmethode (Simple/Balanced Failure Biasing, Failure Distance Biasing, Balanced Likelihood Ratio) bzw. für transiente Zuverlässigkeitsmaße bei kleinem Zeithorizont (Forcing, Conditioning). Unter einem kleinen Zeithorizont ist dabei zu verstehen, daß dieser Zeithorizont größenordnungsmäßig kleiner als die (erwartete) Zeit bis zum ersten Komponentenfeler ist. Wesentlich schwieriger gestaltet sich das Problem des Maßwechsels für nichtregenerative Simulationen mit großem Zeithorizont. Für Zeithorizonte in der Größenordnung der Zeit bis zum ersten Komponentenfeler gelingt gelegentlich mit Hilfe der Failure-Biasing-Strategien eine effiziente Simulation. Dies basiert dann jedoch jeweils

im Einzelfall auf Experimenten mit dem Failure-Biasing-Parameter, und es gibt keine allgemeine Richtlinie, wie dieser Parameter zu wählen ist ([NSN01]: „but it is difficult to provide guidelines for how p should be set in general“). Für Zeithorizonte, deren Größenordnung höher als die der Zeit bis zum ersten Komponentenfehler ist, also für solche Zeithorizonte, die ggf. auch zur Bestimmung stationärer Leistungsmaße geeignet sind, liefern Simulationen unter Verwendung der beschriebenen Methoden immer schlechte Ergebnisse. Der Grund dafür liegt darin, daß die Varianz des IS-Schätzers mit der Varianz des Likelihood-Quotienten wächst. Je größer der Zeithorizont t ist, desto mehr Übergänge finden im Intervall $[0, t]$ statt, und es ist bekannt, daß die Varianz des Likelihood-Quotienten exponentiell mit der Anzahl von Übergängen wächst [Gly95, AHO95, AHO96].

Ein weiteres Problem besteht darin, daß eine Voraussetzung für die beschriebenen Verfahren ist, daß es in jedem Fehlerzustand mindestens einen Reparaturübergang gibt. Die Verfahren brechen zusammen, falls diese Annahme verletzt ist, z.B. bei Systemen mit komplizierten Reparaturstrategien wie etwa verzögerten Reparaturen oder Gruppenreparaturen. Für solche Systeme gibt es bisher lediglich erste Ansätze [JS92, JS01, JS00]. Zudem erweist sich die Anwendung auf nicht-Markovsche Zuverlässigkeitsmodelle als schwierig [HNS92, NHS92, GHNS93, NSHG93, HSN94], insbesondere ist die Anwendung auf nicht-Markovsche Modelle mit allgemeinen Reparaturstrategien oder mit hohen Redundanzen ein offenes Problem.

4.3.3 Zum Einfluß der Simulationsmethode

Wir diskutieren in diesem Abschnitt den Einfluß der Simulationsmethode auf die Effizienz von IS-Schätzern, also die Güte der Simulationsergebnisse für ein Leistungsmaß unter Verwendung einer bestimmten Maßwechselstrategie bei Anwendung unterschiedlicher Techniken zur Bestimmung von Schätzern und Konfidenzintervallen. Für Absorptionswahrscheinlichkeiten, Arbeitsphasenparameter und transiente Größen ist die Freiheit bei der Wahl einer Simulationsmethode stark beschränkt, da sie sich meist im wesentlichen aus der Art des Leistungsmaßes ergibt. Wir betrachten daher hier stationäre Größen und deren Schätzung mittels unabhängiger Simulationsläufe und mittels regenerativer Simulation. Dazu beschreiben wir eine Fallstudie, die wir zur Simulation von $M/M/1/\kappa$ -Modellen durchgeführt haben, präsentieren die wichtigsten Ergebnisse und erläutern die beobachteten Effekte.

Untersucht wurde die stationäre Wahrscheinlichkeit für ein volles System, also die Wahrscheinlichkeit des Zustands κ . Diese ist identisch zur Überlauf- oder Verlustwahrscheinlichkeit bei einer Systemkapazität von $\kappa - 1$, also einem Puffer der Kapazität $\kappa - 2$. Unter Verwendung des bekannten asymptotisch optimalen Maßwechsels für die entsprechende Größe innerhalb einer Arbeitsphase eines $M/M/1$ -Modells, des Erreichens eines vorgegebenen hohen Füllstands, also dem Maßwechsel, bei dem Ankunfts- und Bedienrate

vertauscht werden, haben wir eine Vielzahl von Simulationsexperimenten für verschiedene Auslastungen $\rho = \lambda/\mu$ und Kapazitäten κ durchgeführt. Sowohl für die Methode unabhängiger Simulationsläufe als auch für die regenerative Simulation wurde dabei keine Genauigkeit vorgegeben, sondern die Anzahl der Läufe bzw. Zyklen fest gewählt mit Werten von bis zu 10^{10} und jeweils der IS-Schätzer und dessen relativer Fehler bestimmt. Für die unabhängigen Simulationsläufe wurden verschiedene Lauflängen von bis zu 10^{12} gewählt, sowohl ohne als auch mit Einschwingphase von bis zu 10^6 . Bei der regenerativen Simulation war jeweils der Zustand des leeren Systems Regenerationszustand. Für beide Methoden wurde auch die Technik des Switching untersucht, also das Abschalten von Importance Sampling nach dem ersten Auftreten des seltenen Ereignisses, dem ersten Besuch im Zustand κ .

Es wäre wenig hilfreich und sinnvoll, nun an dieser Stelle riesige Zahlenkolonnen oder Tabellen aufzuführen. Diese sind weder übersichtlich noch für sich genommen aussagekräftig oder aufschlußreich. Daher beschränken wir uns auf die Zusammenfassung der wesentlichen Ergebnisse und beobachteten Effekte, zumal dies durch recht pauschale Aussagen möglich ist. Die Methode unabhängiger Simulationsläufe liefert in allen Varianten bis auf sehr wenige Ausnahmen unbrauchbare Ergebnisse. Die gesuchte Wahrscheinlichkeit wird in der Regel um viele Größenordnungen unterschätzt, und der relative Fehler wird nahezu beliebig groß. Regenerative Simulation dagegen liefert in beiden untersuchten Varianten, mit oder ohne Switching, sehr gute Ergebnisse, die nahe beim exakten Wert liegen und kleine relative Fehler aufweisen. Die Variante ohne Switching führt jedoch selbst bei wenigen regenerativen Zyklen insbesondere für sehr große Kapazitäten und sehr kleine Auslastungen zu enormen Laufzeiten, teilweise endeten die Simulationsexperimente nach mehreren Tagen nicht. Ganz eindeutig belegt unsere Studie also, daß hier regenerative Simulation mit Switching die „Methode der Wahl“ ist.

Als eine zusätzliche Schwierigkeit im Vergleich zum Problem hoher Füllstände in Systemen unbeschränkter Kapazitäten oder zum Problem des Erreichens des vollen Systems erweisen sich bei der von uns hier betrachteten Bestimmung stationärer Wahrscheinlichkeiten die Randzustände, also der Zustand κ und bei der Methode unabhängiger Simulationsläufe auch der Zustand des leeren Systems. Diese schon beim simplen M/M/1/ κ -Modell auftretende Schwierigkeit tritt bei komplexeren Modellen mit hochdimensionalen Zustandsräumen noch wesentlich stärker auf, da es dabei mehr solcher Randzustände gibt. Das Problem wird dabei hier jeweils hervorgerufen durch mögliche Übergänge von einem Zustand in sich selbst (self-loops). Wir wollen dies nun anhand der jeweiligen Likelihood-Quotienten erläutern. Es ist plausibel, daß die Varianz eines IS-Schätzers und damit die Effizienz der Simulation wesentlich durch den Likelihood-Quotienten und dessen Varianz bestimmt ist. Um die resultierenden Likelihood-Quotienten für die verschiedenen Simulationmethoden zu untersuchen, ist zunächst eine Eigenschaft des betrachteten Maßwechsels festzustellen, die allgemein erstrebenswert ist. Für eine Ankunft ergibt sich als Teil-Likelihood-Quotient gerade ρ und für eine Bedienung ρ^{-1} . Diese Teil-Likelihood-Quotienten heben sich also

sozusagen gegenseitig auf, ihr Produkt ergibt sich zu 1. Gäbe es nun keine self-loops, so hätte damit der Likelihood-Quotient auf allen Zyklen den Wert 1. Diese Eigenschaft ist insbesondere erfüllt bei optimalen Maßwechseln mit den dabei resultierenden konstanten Likelihood-Quotienten.

Für das M/M/1/ κ -Modell sind die exakten Zustandswahrscheinlichkeiten bekannt, siehe z.B. [All90, Hav98]. Für die Wahrscheinlichkeit, daß das System voll ist, also die Wahrscheinlichkeit des Zustands κ , gilt

$$\pi_\kappa = \frac{1 - \rho}{1 - \rho^{\kappa+1}} \cdot \rho^\kappa = \pi_0 \cdot \rho^\kappa.$$

Gehen wir nun zunächst davon aus, daß die Simulation im Zustand 0 startet, wir vernachlässigen also insbesondere zunächst die Einschwingphase bei der Methode unabhängiger Simulationsläufe. Wenn anfangs keine self-loops in den Zustand 0 auftreten, hat nach dem ersten Erreichen des seltenen Zustands κ der Likelihood-Quotient für alle Methoden und Varianten den Wert ρ^κ , denn es müssen genau κ Ankünfte mehr als Bedienungen stattfinden. Jede Ankunft steuert einen Faktor ρ zum Likelihood-Quotienten bei, jede Bedienung einen Faktor ρ^{-1} . Simuliert man die randomisierte diskrete Markovkette, so sind self-loops im Zustand 0 möglich, die jedoch leicht zu verhindern sind, indem wir den Maßwechsel analog zum optimalen Maßwechsel so verändern, daß die Wahrscheinlichkeit für einen solchen self-loop zu Beginn verschwindet, der erste Übergang unter Importance Sampling also in jedem Fall eine Ankunft ist. Dies verändert den Likelihood-Quotienten nur geringfügig. Beim ersten Erreichen des seltenen Zustand hat der Likelihood-Quotient dann den Wert $\lambda\rho^{\kappa-1}$. Wichtig ist, daß dieser Wert jeweils konstant ist.[§] Für den Anfang unserer weiteren Erläuterungen wollen wir davon ausgehen, daß solche self-loops nicht auftreten, auch weil gerade dadurch deutlich wird, daß diese ein wesentlicher Grund für das Versagen der Methode unabhängiger Simulationsläufe sind. Ebenso wollen wir zunächst self-loops im Zustand κ außer Acht lassen.

Betrachten wir nun regenerative Simulation mit Regenerationszustand 0. Wie bereits gesagt, hat ohne Auftreten von self-loops der Likelihood-Quotienten auf allen Zyklen den Wert 1, insbesondere also auf jedem Regenerationszyklus. Es werden durch den Maßwechsel gewissermaßen die Anzahl der Besuche und die Länge der Zyklen auf gleiche Weise vergrößert, das Verhältnis der Erwartungswerte entspricht der gesuchten Wahrscheinlichkeit. Während bei der Standard-Simulation das Problem darin besteht, daß innerhalb relativ kurzer Regenerationszyklen meist kein Besuch im seltenen Zustand stattfindet, ergibt sich beim Importance Sampling das Problem, daß der Regenerationszustand selten besucht wird und damit die Regenerationszyklen extrem lang werden. Im Grunde haben wir nun das ursprüngliche Problem „herumgedreht“, wir warten auf Besuche im seltenen Regenerationszustand. Es ist tatsächlich so, daß wir quasi ein duales Problem haben, was

[§]Selbstverständlich ist unter dem betrachteten Maßwechsel auch mit der leichten Modifikation, anders als beim optimalen, möglich, daß kein Besuch im seltenen Zustand stattfindet.

wir uns klarmachen können, indem wir überlegen, daß unter dem betrachteten Maßwechsel nach Erreichen des Zustands κ die Rückkehr in den Zustand 0 äquivalent ist zum Erreichen des Zustands κ beim Start in 0 ohne Importance Sampling. Somit ist einerseits klar, daß, falls die Laufzeit noch im vertretbaren Bereich liegt, die Ergebnisse gut sind, im allgemeinen aber gerade die Laufzeit für eine vorgegebene ausreichend große Anzahl von Regenerationszyklen nicht mehr im Bereich des Machbaren liegt. Dies ist gerade die Motivation für die Technik des Switching.

Wird Importance Sampling nach Erreichen des Zustands κ abgeschaltet, so ist eine schnellere Rückkehr in den Regenerationszustand gewährleistet. Da sich nach dem Switching der Likelihood-Quotient nicht mehr ändert, hat dieser also für jeden Regenerationszyklus den Wert ρ^κ . Er ist also auch bei dieser Variante konstant und hat somit eine Varianz von 0. Überlegen wir nun weiter, daß nach Abschalten von Importance Sampling weitere Besuche des seltenen Zustands verhältnismäßig unwahrscheinlich sind, so können wir feststellen, daß typische Regenerationszyklen genau einen Besuch im seltenen Zustand enthalten. Betrachten wir nun solche Zyklen mit genau einem Besuch im seltenen Zustand, so ist die daraus resultierende Schätzung für dessen Wahrscheinlichkeit gerade der Kehrwert des Erwartungswertes der Zyklenlänge, also für den Zustand 0 der Kehrwert der Rückkehrzeit. Dies ist aber gerade identisch zur Wahrscheinlichkeit π_0 des Zustands 0. Gewichten wir nun mit dem Likelihood-Quotienten ρ^κ , erhalten wir genau die exakte Wahrscheinlichkeit π_κ . Damit haben wir also gezeigt, daß bei Betrachtung nur solcher Regenerationszyklen, die keine self-loops und genau einen Besuch im Zustand κ enthalten, die gesuchte Wahrscheinlichkeit bis auf Schwankungen bei der Schätzung des Erwartungswertes der Zyklenlänge genau ist. Diese ist äquivalent zur Schätzung der Wahrscheinlichkeit des Zustands 0 im originalen Modell, und dies ist keine Wahrscheinlichkeit eines seltenen Ereignisses und somit effizient simulierbar. Weitere Ungenauigkeiten bei der tatsächlichen Importance-Sampling-Simulation werden lediglich durch Mehrfachbesuche in κ hervorgerufen. Da diese durch das Switching verhältnismäßig unwahrscheinlich sind, ist plausibel, daß die regenerative Simulation mit Switching sehr gute Ergebnisse liefert.

Kommen wir nun zur Methode unabhängiger Simulationsläufe, vorerst ohne Berücksichtigung der Einschwingphase. Der Startzustand der Simulationsläufe sei jeweils der Zustand 0. Es ist klar, daß neben der Einschwingphase auch die Länge der Simulationsläufe für die Beobachtungs-/Auswertungsphase geeignet gewählt und festgelegt werden muß, eine zusätzliche Bürde im Vergleich zur regenerativen Simulation. Bei Start im Zustand des leeren System beispielsweise, auch im Fall einer Einschwingphase, nach der gerade auch dieser Zustand erreicht worden sein kann, muß ein Simulationslauf mindestens die Länge κ haben, um überhaupt den seltenen Zustand erreichen zu können. Dies ist dabei nur für einen einzigen Lauf der Länge κ möglich, nämlich den, in dem ausschließlich Ankünfte auftreten. Die Lauflänge sollte also deutlich größer als κ gewählt werden. Bei der Standard-Simulation stellt dies kein großes Problem dar, da die Lauflänge ohne daraus resultierende Probleme sehr groß gewählt werden kann. Beim Importance Sampling besteht

das Problem gerade darin, daß der Likelihood-Quotient für sehr lange Läufe extrem klein wird (vgl. 4.1, 4.2.2).

Da die Technik des Switching bei der regenerativen Simulation zum Erfolg führt, erscheint es begründet, diese auch für die Methode unabhängiger Simulationsläufe anzuwenden. Wie für die regenerative Simulation können wir nun feststellen, daß nach dem ersten Erreichen des Zustands κ der Likelihood-Quotient den Wert ρ^κ hat, nach dem Switching weitere Besuche in diesem seltenen Zustand unwahrscheinlich sind und typische Läufe selbst für großen Horizont genau einen Besuch im Zustand κ enthalten. Nach dem Switching verändert sich der Likelihood-Quotient nicht mehr, das Problem der gegen 0 konvergierenden Likelihood-Quotienten scheint also gelöst. Betrachten wir nun solche Läufe mit genau einem Besuch in diesem seltenen Zustand, so wird daraus jeweils die Wahrscheinlichkeit als Kehrwert der Lauflänge geschätzt und mit dem Likelihood-Quotienten ρ^κ gewichtet, also für eine Simulationslauflänge von K wird ρ^κ/K geschätzt. Da aber in der Tat auch für sehr lange Läufe meist nur genau ein Besuch, oder zumindest nur sehr wenige Besuche im seltenen Zustand auftreten, wird mit wachsendem Horizont die Schätzung der Wahrscheinlichkeit immer kleiner. Somit ist auch ersichtlich, daß diese Wahrscheinlichkeit nahezu immer unterschätzt wird. Ein Vergleich der Schätzung ρ^κ/K mit der exakten Wahrscheinlichkeit verdeutlicht dies. Einerseits muß also die Simulationslauflänge groß genug gewählt werden, um zu gewährleisten, daß in den meisten Läufen das seltene Ereignis auftritt, andererseits bewirkt dies aber gerade die Unterschätzung der Wahrscheinlichkeit. Die Technik des Switching ist also für die Methode unabhängiger Simulationsläufe ungeeignet.

Das durch das Switching hervorgerufene Problem ist in diesem Fall gerade der konstante Likelihood-Quotient und damit die Unterschätzung für lange Simulationsläufe. Betrachten wir die Methode nun ohne Switching, so bleibt zunächst die Eigenschaft erhalten, daß beim ersten Erreichen des seltenen Zustands κ der Likelihood-Quotient den Wert ρ^κ hat. Durch die Art des verwendeten Maßwechsel, der einen Likelihood-Quotienten von 1 auf allen Zyklen garantiert, folgt zudem, daß auch ohne Switching bei jedem weiteren Besuch im Zustand κ der Likelihood-Quotient den Wert ρ^κ behält. Anders als beim Switching sind solche weiteren Besuche nicht mehr unwahrscheinlich, und somit wächst mit der Länge des Simulationslaufes auch die Anzahl der Besuche. Dies wirkt also bei weiterhin konstantem Likelihood-Quotienten der Unterschätzung entgegen. Ohne Switching sind jedoch nicht nur allgemein weitere Besuche nach zwischenzeitlichen Besuchen in anderen Zuständen wahrscheinlich, sondern es treten mit Wahrscheinlichkeit $\frac{\mu}{\lambda+\mu}$ self-loops im Zustand κ auf. Da wir von stabilen Modellen ausgehen, ist diese Wahrscheinlichkeit größer als 0.5 und insbesondere für schwach ausgelastete Systeme nahe bei 1. Bei jedem self-loop wird der Likelihood-Quotient mit einem Faktor ρ multipliziert, und aufgrund der großen Wahrscheinlichkeit der self-loops wird er sehr schnell extrem klein. Während dies bei der regenerativen Simulation ohne Switching in gewisser Weise durch extrem lange Zyklen ausgeglichen wird, bleibt bei der Methode unabhängiger Simulationläufe die

Lauf­länge gerade konstant. Da die Schätzung der Wahrscheinlichkeit durch den Quotienten aus der Anzahl der Besuche und der konstanten Simulations­lauf­länge erfolgt, die dann mit dem Likelihood–Quotienten gewichtet wird, wird die tatsächliche Wahrscheinlichkeit um Größenordnungen unterschätzt.

Wir haben bisher die Einschwingphase nicht berücksichtigt. Für die obige Argumentation spielt diese auch keine Rolle. Es ist lediglich für jeden Zustand, der nach der Einschwingphase erreicht werden kann und von dem die Auswertungsphase des Simulationslaufes startet, der Likelihood–Quotient bei erstem Erreichen des seltenen Zustands verschieden, nur für den Zustand 0 hat er den Wert ρ^k . Der Effekt der Unterschätzung ändert sich dadurch nicht.

4.4 Transitions­klassenmodelle

Bei der Modellierung von Computer– und Kommunikationssystemen im allgemeinen und insbesondere bei der Modellierung mit Markovketten stellt sich das Problem der Größe des Zustandsraums. Diese wächst häufig exponentiell mit der Anzahl von Modellkomponenten. Man spricht dabei von Zustandsraumexplosion.

Eine Möglichkeit, dieses Problem zu vermeiden, bieten Transitions­klassenmodelle als kompakte und strukturierte Beschreibung von Markovketten. Diese Beschreibung beruht darauf, daß zwar der Zustandsraum der zu untersuchenden Markovkette sehr groß ist, jedoch nur verhältnismäßig wenige Übergänge zwischen Zuständen möglich sind. Für die Übergangs- oder Generatormatrix einer solchen Markovkette bedeutet dies, daß sie nur dünn besetzt (*sparse*) ist. Zudem sind viele der Zustandsübergänge ähnlich, d.h. ihre Wahrscheinlichkeiten bzw. Raten sind gleich, so etwa für Ankünfte oder Bedienungen. Zahlreiche Analysemethoden können direkt auf Transitions­klassenmodelle angewendet werden. Es ist nicht notwendig – aber möglich – den Zustandsraum sowie die Übergangs- bzw. Generatormatrix der zugrundeliegenden Markovkette aus ihrer Transitions­klassen­darstellung zu berechnen.

Transitions­klassenmodelle und ihre approximative Lösung mit einem Dekompositionsverfahren, der Disaggregations-Aggregations-Iteration (DAI), werden in [Str97b] beschrieben. Es ist möglich, Transitions­klassenmodelle auch auf nicht-Markovsche Modelle zu erweitern [Str97a]. In [Str98] wird ein hybrider Dekomposition-Simulation-Ansatz für Markovketten mit speziellen seltenen Ereignissen, nämlich sehr kleinen Übergangswahrscheinlichkeiten oder -raten (starre/steife Markovketten, *stiff Markov chains*) angewendet. Zudem existieren Algorithmen zur automatischen Erzeugung von Transitions­klassenmodellen aus formalen Beschreibungen von verallgemeinerten stochastischen Petrinetzen und Warteschlangennetzen [Sie00, Str00].

Wir haben die Anwendung von Importance Sampling auf Transitions­klassenmodelle erst-

mals in [San00] präsentiert. An der Darstellung in dieser Arbeit angelehnt, geben wir nun eine formale Beschreibung von Transitionsklassenmodellen, und in den weiteren Unterabschnitten zeigen wir die Anwendung von Importance Sampling auf Transitionsklassenmodelle. Dazu präsentieren wir Maßwechsel, die Form des Likelihood-Quotienten sowie ein Verfahren zum dynamischen Maßwechsel mit numerischen Ergebnisse und die Möglichkeit sogenannter komponentenbasierter Maßwechsel.

Definition 4.1 (Transitionsklasse) Sei \mathcal{S} eine endliche Menge. Eine Transitionsklasse (bezüglich \mathcal{S}) ist ein Tripel $\tau = (\mathcal{U}, u, \alpha)$ mit

- einer Menge \mathcal{U} ,
- einer Funktion $u : \mathcal{U} \cap \mathcal{S} \rightarrow \mathcal{S}$, wobei $\forall x \in \mathcal{U} \cap \mathcal{S} : u(x) \neq x$,
- $\begin{cases} \text{einer Funktion } \alpha : \mathcal{U} \cap \mathcal{S} \rightarrow (0, 1] & \text{im diskreten Fall,} \\ \text{einer Funktion } \alpha : \mathcal{U} \cap \mathcal{S} \rightarrow (0, \infty) & \text{im stetigen Fall.} \end{cases}$

Im diskreten Fall sprechen wir von einer *diskreten Transitionsklasse* (*discrete-time transition class, DTC*), im stetigen Fall von einer *stetigen Transitionsklasse* (*continuous-time transition class, CTC*).

Wir geben nun eine Interpretation dafür, was durch ein solches Transitionsklassenmodell beschrieben wird und führen eine entsprechende Terminologie ein.

Die Menge \mathcal{U} enthält Zustände, die ein durch ein Modell, z.B. ein Petrinetz oder ein Warteschlangennetz, repräsentiertes System beschreiben. Der Zustand eines Systems kann sich ändern, wenn bestimmte Ereignisse (Zustandsübergänge) auftreten. \mathcal{U} enthält dabei alle Zustände, von denen aufgrund von einer bestimmten Art von Ereignissen – nämlich genau den von der Transitionsklasse zu beschreibenden – der Übergang in einen neuen Zustand möglich ist. Daher wird \mathcal{U} als *Quellzustandsmenge* von τ bezeichnet. Dabei ist $\mathcal{U} \setminus \mathcal{S} \neq \emptyset$ erlaubt, d.h. \mathcal{U} kann zusätzlich redundante (nicht erreichbare, nicht im System vorkommende) Zustände enthalten. Dies vereinfacht vielfach die Beschreibung der Transitionsklassen. Es sei an dieser Stelle betont, daß man bei der Definition konkreter Transitionsklassen die Menge \mathcal{S} nicht explizit spezifizieren muß. Auch die Elemente der Quellzustandsmenge müssen nicht vollständig aufgezählt und gespeichert werden, sondern können anhand ihrer Eigenschaften beschrieben werden.

Die Funktion u liefert den neuen Zustand, wenn ein Ereignis auftritt, das einen Übergang aus einem in \mathcal{U} enthaltenen Zustand in einen anderen (ggf. nicht in \mathcal{U} enthaltenen) Systemzustand bewirkt. Daher heißt u die *Zielzustandsfunktion* von τ .

Schließlich bezeichnet $\alpha(x)$ für diskrete Transitionsklassen die Wahrscheinlichkeit und für stetige Transitionsklassen die Rate eines Übergangs vom Zustand x in den Zustand $u(x)$. Für diskrete Transitionsklassen heißt α *Übergangswahrscheinlichkeitsfunktion* und für stetige Transitionsklassen *Übergangsratenfunktion*. In vielen Fällen ist α eine konstante Funktion, d.h. α hängt nicht vom Zustand ab.

Bemerkung: Aus der Definition der Zielzustandsfunktion folgt direkt, daß die Quellzustandsmenge einer Transitionsklasse keine absorbierenden Zustände enthält. Ebenso folgt aus dieser Definition für diskrete Modelle, daß Zustandsübergänge von einem Zustand in den selben Zustand – in der diskreten Markovkette durch Übergangswahrscheinlichkeiten $p_{ii} > 0$, also positive Diagonalelemente in der Übergangsmatrix, gekennzeichnet – nicht explizit als Transitionsklasse modelliert werden.

Definition 4.2 (Transitionsklassenmodell) Sei $\mathcal{T} := (\{\tau_1, \dots, \tau_k\}, y)$ ein Paar aus einer Menge von Transitionsklassen und einem Zustand aus einer der Quellzustandsmengen, also

$$\tau_i = (\mathcal{U}_i, u_i, \alpha_i), \quad 1 \leq i \leq k,$$

$$y \in \mathcal{S} \cap \bigcup_{i=1}^k \mathcal{U}_i.$$

\mathcal{T} heißt

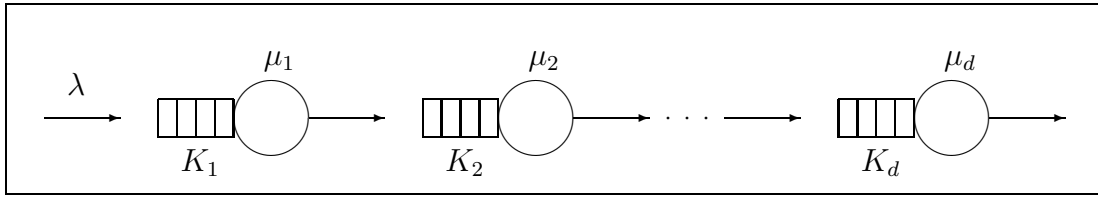
- stetiges Transitionsklassenmodell (*continuous-time transition class model, CTCM*), falls alle $\tau_i, 1 \leq i \leq k$ stetige Transitionsklassen sind;
- diskretes Transitionsklassenmodell (*discrete-time transition class model, DTCM*), falls alle $\tau_i, 1 \leq i \leq k$ diskrete Transitionsklassen sind und

$$\forall x \in \mathcal{S} \cap \bigcup_{i=1}^k \mathcal{U}_i : \sum_{i=1}^k I_{\{x \in \mathcal{U}_i\}} \alpha_i(x) \leq 1.$$

Für Zustände x , bei denen in obiger Ungleichung für diskrete Transitionsklassenmodelle echt kleiner gilt, bedeutet dies, daß es Übergänge von x nach x mit positiver Wahrscheinlichkeit gibt. Diese Wahrscheinlichkeit ergibt sich dann gerade aus der Differenz zu Eins. Solche Übergänge sind in diskreten Transitionsklassenmodellen also implizit enthalten.

Zur Veranschaulichung geben wir ein Beispiel für ein Transitionsklassenmodell eines einfachen Warteschlangennetzes.

Beispiel 4.1 Wir betrachten ein Tandemwarteschlangennetz mit d Bedienstationen (Abbildung 4.3). Jede Bedienstation $i \in \{1, \dots, d\}$ besteht aus einer FIFO-Warteschlange mit endlicher Kapazität K_i . Die Bedienzeiten sind exponentiell verteilt mit Parameter μ_i , und ankommende Kunden treten an der ersten Station gemäß eines Poissonprozesses mit Parameter λ in das System ein. Nach Fertigstellung einer Bedienung an einer Station wechseln die Kunden in die nächste Station, wenn der Warteraum nicht voll ist. Nach erfolgter Bedienung in der letzten Station verlassen die Kunden das System. Modelliert man ein Warteschlangennetz als Markovkette, so wird ein Systemzustand durch die Anzahl der Kunden in den einzelnen Stationen beschrieben. Für das beschriebene Tandemwarteschlangennetz ist der Zustandsraum also $\{0, \dots, K_1\} \times \dots \times \{0, \dots, K_d\}$, und die

Abbildung 4.3: Tandemwarteschlangennetz mit d Bedienstationen

Anwendung von Lösungsverfahren auf ein realistisch dimensioniertes System ist wegen der Zustandsraumexplosion nahezu unmöglich. In einem Transitionsklassenmodell wird die Beschreibung gemäß der verschiedenen Zustandsübergänge strukturiert: Ankünfte an der ersten Station, Übergänge der Kunden von Station i nach $i + 1$, $0 < i < d$ und Abgänge aus der Station d . Damit benötigen wir $d + 1$ Transitionsklassen τ_0, \dots, τ_d .

Sei $n = (n_1, \dots, n_d) \in \mathbb{N}^d$. Das Tandemwarteschlangennetz wird dann beschrieben durch die Transitionsklassen τ_0, \dots, τ_d mit

- $\mathcal{U}_0 = \{n \in \mathbb{N}^d : n_1 < K_1\}$,
 $u_0(n) = (n_1 + 1, n_2, \dots, n_d)$,
 $\alpha_0 \equiv \lambda$;
- $\mathcal{U}_i = \{n \in \mathbb{N}^d : n_i > 0 \wedge n_{i+1} < K_{i+1}\}$,
 $u_i(n) = (n_1, \dots, n_{i-1}, n_i - 1, n_{i+1} + 1, n_{i+2}, \dots, n_d)$,
 $\alpha_i \equiv \mu_i$
für $i \in \{1, \dots, d - 1\}$;
- $\mathcal{U}_d = \{n \in \mathbb{N}^d : n_d > 0\}$,
 $u_d(n) = (n_1, \dots, n_{d-1}, n_d - 1)$,
 $\alpha_d \equiv \mu_d$.

Zusammen mit einem Systemzustand, etwa $y = (0, \dots, 0)$, erhalten wir ein Transitionsklassenmodell für das beschriebene Tandemwarteschlangennetz. Es ist offensichtlich, daß die Quellzustandsmengen nicht vollständig gespeichert werden müssen, sondern durch einige wenige Eigenschaften ihrer Komponenten beschrieben werden können, und daß es leicht ist, zu prüfen, ob ein gegebenes d -Tupel enthalten ist. Wie bereits erwähnt ist der Zustandsraum der korrespondierenden Markovkette nicht explizit definiert. Die Warteschlangenkapazitäten beeinflussen die Anzahl der Transitionsklassen nicht, und die Anzahl der Transitionsklassen wächst nur linear mit der Anzahl der Bedienstationen, wohingegen der Zustandsraum der korrespondierenden Markovkette exponentiell wächst.

Lemma 4.1 Jede irreduzible Markovkette mit endlichem Zustandsraum kann durch ein Transitionsklassenmodell beschrieben werden.

Beweis Der Beweis ist konstruktiv, d.h. eine allgemeine Methode zur Konstruktion eines Transitionsklassenmodells aus einer gegebenen Markovkette mit endlichem Zustandsraum $\mathcal{S} = \{s_1, \dots, s_n\}$ und Übergangs- oder Generatormatrix P . Grob gesprochen wird für jeden möglichen Übergang in der Markovkette von einem in einen anderen Zustand eine Transitionsklasse konstruiert. Formal, definiere für jeden positiven Matrixkoeffizienten $p_{ij} > 0, i \neq j$ (entweder Wahrscheinlichkeit oder Rate) eine Transitionsklasse (\mathcal{U}, u, α) , mit $\mathcal{U} = \{s_i\}, u(s_i) = s_j, \alpha(s_i) = p_{ij}$. Diese Transitionsklassen zusammen mit einem beliebigen Zustand aus einer der Quellzustandsmengen bilden ein Transitionsklassenmodell, das die gegebene Markovkette beschreibt. In diesem sehr speziellen Fall gilt für alle Transitionsklassen $\mathcal{U} \subseteq \mathcal{S}$. Es ist offensichtlich, daß alle Bedingungen für Transitionsklassenmodelle erfüllt sind, d.h. alle Übergänge führen in einen neuen Zustand, Raten sind positiv, Wahrscheinlichkeiten darüberhinaus nicht größer als 1, und im diskreten Fall ist die Summe der Wahrscheinlichkeiten aller Übergänge, die aus einem Zustand herausführen, durch 1 beschränkt.

Wir wollen anmerken, daß selbst diese naive Konstruktion höchstens so viele Transitionsklassen liefert wie die Anzahl positiver Einträge der Übergangs- bzw. Generatormatrix der Markovkette. In der Praxis ist es jedoch nicht zu empfehlen, diese Methode zur Konstruktion von Transitionsklassenmodellen zu benutzen, da keinerlei Information über Eigenschaften der Struktur der Markovkette berücksichtigt werden. Zudem sind im Bereich der Computer- und Kommunikationssysteme häufig Modelle als Petri- oder Warteschlangennetz gegeben, aus denen automatisch Transitionsklassenmodelle ohne den „Umweg“ über Markovketten generiert werden können [Sie00, Str00].

Formal ist ein Transitionsklassenmodell schlicht eine abstrakte mathematische Konstruktion, die erst durch die Interpretation der einzelnen Komponenten eine praktische Bedeutung bzw. eine Beziehung zu anderen Modellen bekommt. Die Interpretation als Markovkette liefert also in diesem Sinne eine Semantik von Transitionsklassenmodellen.

Lemma 4.2 (Semantik von Transitionsklassenmodellen) Jedes Transitionsklassenmodell beschreibt eine irreduzible Markovkette mit endlichem Zustandsraum.

Beweis Sei $\mathcal{T} := (\{\tau_1, \dots, \tau_k\}, y)$ ein Transitionsklassenmodell. Definiere den Zustandsraum \mathcal{S}^* der Markovkette rekursiv durch

$$\mathcal{S}_1 := \{y\}, \mathcal{S}_{n+1} := \mathcal{S}_n \cup \bigcup_{i=1}^k \{u_i(y) : y \in \mathcal{S}_n\} \text{ für } n > 1, \mathcal{S}^* := \lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{S}_n.$$

Dann sind für $s_i, s_j \in \mathcal{S}^*, i \neq j$ die Übergangswahrscheinlichkeiten bzw. -raten

$$p_{ij} = \sum_{\ell=1}^k I_{\{s_i \in \mathcal{U}_\ell\}} I_{\{u_\ell(s_i) = s_j\}} \alpha_\ell(s_i).$$

Im diskreten Fall ist für $s_i \in \mathcal{S}^*$

$$p_{ii} = 1 - \sum_{\ell=1}^k I_{\{s_i \in \mathcal{U}_\ell\}} \alpha_\ell(s_i) = 1 - \sum_{\ell=1, \ell \neq i}^{|\mathcal{S}^*|} p_{i\ell},$$

womit man eine stochastische Matrix, d.h. die Übergangsmatrix einer diskreten Markovkette erhält, und im stetigen Fall ist für $s_i \in \mathcal{S}^*$

$$p_{ii} = - \sum_{\ell=1}^k I_{\{s_i \in \mathcal{U}_\ell\}} \alpha_\ell(s_i) = - \sum_{\ell=1, \ell \neq i}^{|\mathcal{S}^*|} p_{i\ell},$$

womit man die Generatormatrix einer stetigen Markovkette erhält.

Wir stellen fest, daß jedes τ_i eine Transitionsklasse bezüglich \mathcal{S}^* ist, ohne daß \mathcal{S}^* explizit in der Definition angegeben ist. Dies zeigt, daß Transitionsklassenmodelle den Zustandsraum der korrespondierenden Markovkette implizit beinhalten. Transitionsklassenmodelle erfordern keine Numerierung von Zuständen und können sehr effizient gespeichert werden.

Gemäß dieses Beweises ist es möglich, Markovketten algorithmisch aus der Beschreibung als Transitionsklasse zu erzeugen, aber selbstverständlich ist dies in der Praxis nicht empfehlenswert.

Simulation von Transitionsklassenmodellen

Wir geben nun den allgemeine Rahmen für die direkte Simulation von Transitionsklassenmodellen. Diese Simulation ist sehr ähnlich zur Simulation von Markovketten und kann für den diskreten Fall durch den in Abbildung 4.4 angegebenen einfachen Algorithmus beschrieben werden (vgl. auch [Str98]).

```

s := Initial State;
repeat
  i := 0; Sum := 0;
  RandomNumber := Uniform(0,1);
  while i < Number of transition classes and Sum < RandomNumber do
    i := i + 1;
    if s ∈  $\mathcal{U}_i$  then
      Sum := Sum +  $\alpha_i(s)$ ;
      if Sum ≥ RandomNumber then s :=  $u_i(s)$ ; Collect data;
    if i = Number of transition classes and Sum < RandomNumber then
      Collect data; (* transition from state to itself *)
until Last Simulation Step;

```

Abbildung 4.4: Simulationsalgorithmus für Transitionsklassenmodelle

Die konkrete Spezifikation von „Collect data“ und „Last Simulation Step“ wird dann durch die Art der Simulation und die gewählte Methode zur Ausgabeanalyse (transient/stationär, unabhängige Wiederholungen, Gruppenmittelwerte, regenerative Simulation etc.) bestimmt. Für die Simulation stetiger Transitionsklassenmodelle kann leicht ein analoger Algorithmus formuliert werden.

4.4.1 Maßwechsel und Likelihood–Quotient

Die Anwendung von Importance Sampling auf Transitionsklassenmodelle bedeutet, die Übergangswahrscheinlichkeiten oder -raten innerhalb der Transitionsklassen zu verändern. Dies kann erreicht werden, indem ein modifiziertes Transitionsklassenmodell definiert wird, für das alle Quellzustandsmengen und Zielzustandsfunktionen identisch zum Originalmodell sind. Es folgt dann aus der Definition der Zielzustandsfunktion sowie der Übergangswahrscheinlichkeitsfunktion bzw. der Übergangsratenfunktion, daß alle möglichen Zustandsübergänge des Originalmodells im modifizierten Modell möglich bleiben. Damit erhalten auch alle möglichen Pfade des Originalmodells positive Wahrscheinlichkeiten im modifizierten Modell.

Sei $\mathcal{T} = (\{\tau_1, \dots, \tau_k\}, y)$ ein diskretes Transitionsklassenmodell. Dann erfüllt jedes modifizierte diskrete Transitionsklassenmodell $\tilde{\mathcal{T}} = (\{\tilde{\tau}_1, \dots, \tilde{\tau}_k\}, y)$ mit $\tilde{\mathcal{U}}_i = \mathcal{U}_i$ und $\tilde{u}_i = u_i$ für $i = 1, \dots, k$ und mit beliebig veränderten Übergangswahrscheinlichkeitsfunktionen $\tilde{\alpha}_i : \mathcal{U} \cap \mathcal{S} \rightarrow (0, 1]$ mit

$$\forall x \in \mathcal{S} \cap \bigcup_{i=1}^k \mathcal{U}_i : \left(\sum_{i=1}^k I_{\{x \in \mathcal{U}_i\}} \alpha_i(x) \right) \begin{cases} < 1 \\ = 1 \end{cases} \implies \sum_{i=1}^k I_{\{x \in \mathcal{U}_i\}} \tilde{\alpha}_i(x) \begin{cases} < 1 \\ = 1. \end{cases}$$

alle Voraussetzungen des Importance Sampling, und der korrespondierende Likelihood–Quotient ist das Produkt von Quotienten von Übergangswahrscheinlichkeiten. Zudem ist es möglich, in jedem Simulationsschritt, also für jeden zu simulierenden Zustandsübergang ein neues derartig modifiziertes Transitionsklassenmodell zu benutzen oder Übergangswahrscheinlichkeiten zu definieren, die etwa von der Anzahl bereits ausgeführter Simulationsschritte, also der aktuellen Länge des Simulationslaufes, oder von Informationen aus den vorherigen Simulationsschritten abhängen. Dies bedeutet, daß wir das Originalmodell mit einer beliebigen Wahrscheinlichkeitsverteilung ausstatten können, also etwa inhomogene Transitionsklassenmodelle oder sogar nicht–Markovsche Maße als Importance–Sampling–Maß verwenden dürfen. Eine alternative Interpretation ist die eines Markovprozesses, dessen Zustände Informationen aus der Geschichte des Simulationslaufes oder aus der Entwicklung der zugrundeliegenden Markovkette enthält, also dessen Zustandsraum potentiell mehrdimensional und überabzählbar ist. Wir geben nun eine Formalisierung obiger Erläuterungen.

Sei (x_0, \dots, x_n) der Pfad der zugrundeliegenden Markovkette nach $n \in \mathbb{N}$ Schritten, also nach n Übergängen im aktuellen Simulationslauf. Dann kann $\alpha_i(x_n)$ modifiziert werden zu $\beta_i^{(n)}(x_0, \dots, x_n)$, wobei für $i \in \{1, \dots, k\}, n \in \mathbb{N}$ die Bedingungen

$$\alpha_i(x_n) > 0 \implies \beta_i^{(n)}(x_0, \dots, x_n) > 0$$

und

$$\sum_{i=1}^k I_{\{x_n \in \mathcal{U}_i\}} \alpha_i(x_n) \begin{cases} < 1 \\ = 1 \end{cases} \implies \sum_{i=1}^k I_{\{x_n \in \mathcal{U}_i\}} \beta_i^{(n)}(x_0, \dots, x_n) \begin{cases} < 1 \\ = 1. \end{cases}$$

erfüllt seien. Zur Beschreibung des Likelihood-Quotienten erfolge der Übergang von Zustand x_j nach Zustand x_{j+1} gemäß der Transitionsklasse τ_{i_j} . Dann ist der Wert des korrespondierenden Likelihood-Quotienten gegeben durch

$$\begin{aligned} L(x_0, \dots, x_n) &= \frac{\mu(x_0)}{\nu(x_0)} \prod_{k=0}^{n-1} \frac{\alpha_{i_k}(x_k)}{\beta_{i_k}^{(k)}(x_0, \dots, x_k)} \\ &= \frac{\mu(x_0)}{\nu(x_0)} \cdot \frac{\alpha_{i_0}(x_0)}{\beta_{i_0}^{(0)}(x_0)} \cdot \frac{\alpha_{i_1}(x_1)}{\beta_{i_1}^{(1)}(x_0, x_1)} \dots \frac{\alpha_{i_{n-1}}(x_{n-1})}{\beta_{i_{n-1}}^{(n-1)}(x_0, \dots, x_{n-1})}. \end{aligned}$$

4.4.2 Dynamischer Maßwechsel

Wir beschreiben nun für die Methode unabhängiger Simulationsläufe einer festen Länge K ein Verfahren des dynamischen Maßwechsels. Die Idee ist dabei nicht auf Simulationsläufe fester Länge beschränkt, sondern kann analog für Regenerationszyklen angewendet werden. In diesem Fall interpretiere man K als zufällige Stoppzeit, die einen Regenerationspunkt bezeichnet. Gesucht sei die stationäre Wahrscheinlichkeit eines einzelnen seltenen Zustands, die wir mittels Importance Sampling schätzen wollen. Die Idee unseres dynamischen Maßwechsels kann dabei leicht auf Mengen von Zuständen erweitert werden. Die Information, die während eines Simulationslaufes die Modifikation der Übergangswahrscheinlichkeiten beeinflusst, basiert auf der Anzahl der simulierten Übergänge, indem sich die Abweichung der modifizierten und der originalen Wahrscheinlichkeit mit zunehmender Zeit verringert. Aus dem aktuellen Simulationslauf verwenden wir zwei weitere Informationen, den aktuellen Wert des Likelihood-Quotienten und die Anzahl der Besuche im seltenen Zustand. Diese Informationen folgen direkt aus der Geschichte des Laufes, und ihre Verwendung erhöht den Aufwand im Vergleich zu anderen Verfahren nicht, da die Sammlung dieser Informationen in allen Importance-Sampling-Simulationen für Zustandswahrscheinlichkeiten erforderlich ist.

Wir nehmen weiterhin an, daß wir eine Menge von Übergängen kennen, für die die Vergrößerung ihrer Wahrscheinlichkeiten zu mehr Besuchen im seltenen Zustand führt. Diese Annahme ist allgemein üblich, und in Transitionsklassenmodellen kann aufgrund der

strukturierten Beschreibung, die ähnliche Übergänge der selben Transitionsklasse zuordnet, die Vergrößerung dieser Wahrscheinlichkeiten und die damit verbundene notwendige Verkleinerung anderer Wahrscheinlichkeiten meist einfacher durchgeführt werden als in üblichen Markovkettenbeschreibungen. Für jede modifizierte Übergangswahrscheinlichkeit wählen wir eine maximale Vergrößerung, und für jeden Pfad, jeden Simulationslauf, ist klar, daß er nutzlos ist, wenn kein Besuch im seltenen Zustand erfolgt. Daher ist das Hervorrufen von Übergängen, die zum seltenen Zustand führen umso wichtiger, je weniger Besuche bereits beobachtet wurden.

Formal beschreiben wir für die Menge von zu vergrößernden Übergangswahrscheinlichkeiten die maximale Vergrößerung durch einen Faktor b_{max} und definieren die modifizierten Übergangswahrscheinlichkeiten durch

$$\beta_i^{(n)}(x_0, \dots, x_n) := b \cdot \alpha_i(x_n), \quad 1 < b \leq b_{max}.$$

Die Veränderung der Übergangswahrscheinlichkeit soll während des Simulationslaufes abnehmen und für $K \rightarrow \infty$ gegen die originale Übergangswahrscheinlichkeit konvergieren. Dies erreichen wir, indem der Vergrößerungsfaktor b verringert wird, wenn die aktuelle Simulationslauflänge wächst, ein seltenes Ereignis auftritt, also der seltene Zustand besucht wird, und wenn der Likelihood-Quotient sich verkleinert. Die restlichen Übergangswahrscheinlichkeiten müssen so verringert werden, daß sich die Wahrscheinlichkeiten für das Verlassen eines Zustands zu Eins summieren. Die Art dieser Verringerung ist dabei flexibel, als einfachste Möglichkeit schlagen wir die Verringerung aller Wahrscheinlichkeiten um den selben Faktor vor. Wir wollen dies nun formalisieren.

Sei r_n die Anzahl der seltenen Ereignisse, und sei $L(x_0, \dots, x_n)$ der Wert des Likelihood-Quotienten, jeweils nach n simulierten Zustandsübergängen. Wir definieren auf \mathbb{R}_+ positive Funktionen $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$\varphi_1, \varphi_2 \text{ monoton fallend mit } \varphi_1(0) = \varphi_2(1) = 1,$$

$$\varphi_3 \text{ monoton steigend mit } \forall x \geq 1 : \varphi_3(x) = 1.$$

Dann wählen wir

$$b = 1 + (b_{max} - 1) \cdot \varphi_1(r_n) \cdot \varphi_2(n) \cdot \varphi_3(L(x_0, \dots, x_n)), \quad n \geq 1.$$

Die konkrete Ordnung der Annäherung an die Originalübergangswahrscheinlichkeiten wird also durch $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ bestimmt. Es ist klar, daß $\beta_i^{(n)}(x_0, \dots, x_n) \leq 1$ gelten muß, woraus sich Bedingungen an b_{max} ergeben, und daß die restlichen Übergangswahrscheinlichkeiten geeignet verkleinert werden müssen, z.B. alle mit dem gleichen Faktor.

Es stellt sich die Frage, ob diese Art des Maßwechsels überhaupt erlaubt ist und in den formalen Rahmen des Importance Sampling paßt. Wir untersuchen dies anhand des zugrundeliegenden stochastischen Prozesses. Aufgrund der Verwendung der Information über

den aktuellen Wert des Likelihood-Quotienten und der Anzahl der bereits aufgetretenen seltenen Ereignisse ist dieser Prozeß nicht Markovsch. Die Übergangswahrscheinlichkeiten hängen von der Geschichte, dem Verlauf des gesamten Prozesses ab. Zudem können sich die Übergangswahrscheinlichkeiten mit der Zeit verändern, sind also zeitabhängig, und der Prozeß somit inhomogen. Wir betrachten nun im Einzelnen diese drei Kriterien, die den Maßwechsel mitbestimmen.

Die Abhängigkeit der Übergangswahrscheinlichkeiten von der Zeit läßt sich leicht mit Hilfe inhomogener Markovketten modellieren, falls die Übergangswahrscheinlichkeiten ansonsten nur vom aktuellen Zustand abhängen.

Mit folgender Konstruktion können wir auch die Abhängigkeit von der Anzahl der bereits aufgetretenen seltenen Ereignisse und des aktuellen Wertes des Likelihood-Quotienten in den Rahmen von Markovmodellen einpassen.

Wir beginnen mit der Anzahl der aufgetretenen seltenen Ereignisse. An Stelle der ursprünglichen Markovkette betrachten wir eine erweiterte Markovkette mit (abzählbar unendlichem) Zustandsraum $\mathcal{S} \times \mathbb{N}$. Es bezeichne $\mathcal{R} \subseteq \mathcal{S}$ die Menge der seltenen Zustände, also das seltene Ereignis. Wir definieren die Übergangswahrscheinlichkeiten der erweiterten Markovkette für alle $n \in \mathbb{N}$ durch

- $\forall i, j \in \mathcal{S} : p_{(i,n+1)(j,n)} := 0,$
- $\forall i \in \mathcal{S}, j \in \mathcal{S} \setminus \mathcal{R} : p_{(i,n)(j,n)} := p_{ij},$
- $\forall i \in \mathcal{S}, j \in \mathcal{R} : p_{(i,n)(j,n)} := 0 \wedge p_{(i,n)(j,n+1)} := p_{ij}.$

Analog können wir eine Erweiterung angeben, die die Information über den aktuellen Wert des Likelihood-Quotienten beinhaltet. Dabei ist der Zustandsraum $\mathcal{S} \times \mathbb{R}^+$, also überabzählbar. Mit analoger Definition der Übergangswahrscheinlichkeiten wie vorher erhalten wir also einen Markovprozeß.

Um den Vorteil unseres dynamischen Maßwechsels gegenüber statischen Maßwechseln, die eine a priori fest gewählte Übergangsmatrix für das Importance Sampling verwenden, zu demonstrieren, kann man Varianzreduktionsfaktoren betrachten. Dazu vergleichen wir hier die Varianzreduktionsfaktoren für eine konkrete Wahl unserer Parameter mit denen aus [AHO95] für das dort angegebene Beispiel (vgl. 4.2.2). Für unseren dynamischen Maßwechsel haben wir dabei nur die Zeit und keine weiteren Informationen, die während des Laufes erhältlich werden, benutzt. Die zu vergrößern Übergangswahrscheinlichkeiten sind ganz offensichtlich die der Übergänge in den seltenen Zustand 2. Wir haben als Parameter $b_{max} = 5, \varphi_2(n) = n^{-0.5}, \varphi_1 = \varphi_3 = 1$ gewählt. Die folgende Tabelle zeigt die Varianzreduktionsfaktoren für verschiedene Simulationslaufängen.

N	Varianzreduktionsfaktoren		
	IS mit \mathbf{P}_{10}^*	IS mit \mathbf{P}_{100}^*	IS dynamisch
10	9.09	2.27	2.69
20	3.08	2.48	2.46
30	1.06	2.74	2.37
40	0.38	3.02	2.37
50	0.15	3.36	2.40
100	–	4.22	2.56
150	–	2.77	2.63
200	–	1.31	2.54
300	–	0.39	2.32
400	–	0.14	1.68
500	–	0.06	1.27
1000	–	$< 10^{-2}$	0.45

Wir stellen fest, daß je größer die Veränderung der Übergangswahrscheinlichkeiten in den fest gewählten Matrizen aus [AHO95], desto schlechter sind die Ergebnisse des Importance Sampling für wachsende Simulationslaufängen. In vielen Fällen wird bei Verwendung dieser festen Matrizen die Varianz im Vergleich zu direkter Simulation enorm vergrößert, und in einigen Fällen bricht Importance Sampling mit diesen Matrizen sogar zusammen. Für dieses Beispiel kann die Qualität der Ergebnisse mit exakten Werten verglichen werden, es kann aber auch beobachtet werden, daß der Likelihood-Quotient für wachsende Simulationslaufängen bei fester Übergangsmatrix verschwindet. Dies ist konsistent mit den in 4.1 erwähnten Ergebnissen von Glynn und Iglehart [GI89]. Weiterhin zeigen die Ergebnisse, daß der Bereich guter Laufängen für eine feste Übergangsmatrix sehr klein ist, wogegen unsere dynamische Methode für einen großen Bereich der Laufänge eine Varianzreduktion liefert. Das heißt insbesondere, unsere Methode ist weniger empfindlich gegen die Vergrößerung der Laufänge und wirkt somit dem Problem verschwindender Likelihood-Quotienten entgegen. Sicherlich verschwendet unsere Methode für bestimmte kurze Laufängen eine mögliche größere Simulationsbeschleunigung, Varianzreduktion, aber in der Praxis sind kurze Simulationsläufe verhältnismäßig selten.

Die angegebenen Resultate wurden erreicht, indem lediglich die Anzahl der Übergänge im aktuellen Lauf als Information eingesetzt wurde, und die Wahl von b_{max} und $\varphi_2(n)$ erfolgte relativ unsystematisch. Daher erscheint es wahrscheinlich, die Methode erheblich zu verbessern, wenn die Parameterwahl systematischer erfolgt. Zur Bestimmung von b_{max} wollen wir kurz eine erste Idee erläutern. Sei eine Simulationslaufänge vorgegeben, die zu vergrößernden Übergangswahrscheinlichkeiten oder -raten bekannt, φ_2 bereits festgelegt,

und b_{max} ist nach oben beschränkt, da Wahrscheinlichkeiten höchstens den Wert 1 erhalten dürfen. Als Rahmen für die Bestimmung von b_{max} geben wir die folgenden Schritte an.

- Starte mit (zu) großem b_{max} , Vorsimulation.
- Beobachte den Likelihood-Quotienten; falls dieser zu klein wird, verkleinere b_{max} , erneute Vorsimulation.
- Weiter, bis Vorsimulationen Likelihood-Quotienten nahe bei 1 oder annähernd konstant liefern.

Es ergeben sich jedoch auch einige Probleme bzw. offene Fragen. So ist nicht garantiert, daß für eine vorgegebene Simulationslauflänge ein b_{max} existiert, so daß die Importance-Sampling-Simulation gute Ergebnisse liefert. Es muß also gegebenenfalls auch die Simulationslauflänge variiert werden. Für $\varphi_2(n)$ haben wir für das angegebene Beispiel nur $n^{-0.5}$ oder n^{-1} gewählt, auch hier gibt es also Variationsmöglichkeiten. Für φ_1, φ_3 gibt es bisher nur relativ unsystematische Versuche. Verwendet man φ_1, φ_2 und φ_3 so ergibt sich im Prinzip eine Optimierung bezüglich dieser drei Funktionen und b_{max} . Wir geben in Abschnitt 5.5 eine Idee und einen Ausblick, wie dies mittels adaptiver Verfahren machbar ist.

4.4.3 Komponentenbasierter Maßwechsel

Häufig sind die Zustände zu untersuchender Systeme mehrdimensional, aus mehreren Komponenten zusammengesetzt, wie wir etwa für Warteschlangennetze gesehen haben. Bei einer klassischen Beschreibung als Markovkette und der Anwendung von Lösungsverfahren ist dabei oft eine geeignete Numerierung von Zuständen notwendig. Liegt eine Markovkettenbeschreibung mit durchnumerierten Zuständen vor, so stellt sich nicht nur das Problem der Zustandsraumexplosion, sondern unter Umständen das Problem einer schnellen Reidentifizierung der eigentlichen Systemzustände. Beim Importance Sampling kann das für zustandsabhängige Maßwechsel von großer Bedeutung sein. Wir wollen hier nun zeigen, wie man für Transitionsklassenmodelle auch komponentenbasierte Maßwechsel formulieren kann, also Maßwechsel, die zwar zustandsabhängig sind, jedoch nicht vom gesamten Systemzustand, sondern nur von einigen Komponenten abhängen.

Wir betrachten ein Transitionsklassenmodell $\mathcal{T} = \{(\tau_1, \dots, \tau_k), y\}$ mit Transitionsklassen $\tau_i = (\mathcal{U}_i, u_i, \alpha_i), 1 \leq i \leq k$ und $y \in \mathcal{S} \cap \bigcup_{i=1}^k \mathcal{U}_i$. Dabei seien der Zustandsraum und die Quellzustandsmengen jeweils s -Tupel, also

$$\mathcal{S} = \mathcal{S}_1 \times \mathcal{S}_2 \times \dots \times \mathcal{S}_s, \quad \mathcal{U}_i \subseteq \mathcal{S}, \quad 1 \leq i \leq k.$$

Unsere allgemeinen Definitionen setzen jeweils Mengen voraus, ohne die spezielle Form oder Struktur der Mengen einzuschränken. Damit beinhalten sie also selbstverständlich

die Möglichkeit obiger Art von Zuständen. Für das Beispiel von Tandemwarteschlangennetzen etwa haben wir gesehen, daß alle Zustände d -Tupel aus natürlichen Zahlen und die Mengen \mathcal{S} und \mathcal{U}_i Teilmengen von \mathbb{N}^d sind. Wir erlauben sowohl diskrete als auch stetige Transitionsklassenmodelle, wobei alle Übergangswahrscheinlichkeiten oder -raten auch vom Zustand abhängig sein dürfen und definieren ein modifiziertes Transitionsklassenmodell.

Wir wollen nun für eine beliebige Transitionsklasse τ_i für jeden Zustand $x \in \mathcal{U}_i$ eine Modifikation von $\alpha_i(x)$ nach $\beta_i(\cdot)$ angeben, wobei β_i die Übergangswahrscheinlichkeitsfunktion oder die Übergangsratenfunktion im für Importance Sampling modifizierten Transitionsklassenmodell bezeichnet. Anders als zuvor soll dabei nun diese Funktion nicht von einem gesamten Zustand oder gar der Geschichte eines Simulationslaufes abhängen, sondern nur von bestimmten Komponenten des aktuellen Systemzustands. Im Vergleich zu klassischen zustandsabhängigen Maßwechseln ist dies also eine Vereinfachung in dem Sinne, daß die Abhängigkeit verringert wird. Oft sind gerade nur einige Komponenten für die Art des Maßwechsels von Bedeutung. Formal ist β_i eine Funktion auf einer Teilmenge von

$$\mathcal{S}' := \mathcal{S}_{i_1} \times \mathcal{S}_{i_2} \times \cdots \times \mathcal{S}_{i_\ell},$$

wobei i_1, i_2, \dots, i_ℓ gerade die Indizes der relevanten Komponenten bezeichnen. Damit ist die Formulierung komponentenbasierter Maßwechsel bereits komplett. Mit der Annahme, daß wir ein modifiziertes Transitionsklassenmodell erstellen, sind alle notwendigen Voraussetzungen, insbesondere die Konsistenz von Wahrscheinlichkeiten erfüllt.

Wir wollen abschließend anhand eines Tandemwarteschlangennetzes demonstrieren, wie ein solcher Maßwechsel konkret aussehen kann. Dazu betrachten wir erneut das Tandemnetz aus unserem Beispiel, modelliert als stetiges Transitionsklassenmodell. Die Dimension d ist prinzipiell beliebig, sie sei aber hier $d \geq 3$. Unser Maßwechsel soll vom Füllstand der ersten und der dritten Station abhängen, alle anderen Stationen sollen den Maßwechsel nicht beeinflussen. Ist die erste Station mindestens zur Hälfte gefüllt oder die dritte Station leer, so soll die Originalankunftsrate verdoppelt werden und die Bedienraten aller Stationen außer der dritten halbiert. Die Bedienrate der dritten Station soll geviertelt werden. Es sei dahingestellt, ob diese Maßwechselstrategie sinnvoll und erfolgversprechend ist. Dazu müßten wir insbesondere angeben, welche Größe überhaupt zu bestimmen ist. Wir wollen aber vielmehr ganz allgemein demonstrieren, wie komponentenbasierte Maßwechsel aussehen und insbesondere auch, daß zwar der Maßwechsel nur von einigen – in diesem Fall zwei – Komponenten abhängt, jedoch dennoch alle Raten beeinflusst werden können.

In unserem Beispiel haben wir einen Zustand des Tandemwarteschlangennetzes mit $n = (n_1, \dots, n^d) \in \mathbb{N}^d$ bezeichnet und wollen diese Notation beibehalten. Die Übergangsratenfunktion β_i ist für unseren Maßwechsel also eine Funktion auf $\mathcal{S}_1 \times \mathcal{S}_3 = \mathbb{N} \times \mathbb{N}$, die wir nun für alle Transitionsklassen definieren müssen. Da unser Maßwechsel den Zustandsraum des Tandemnetzes und die möglichen Übergänge nicht verändert, bleiben alle

Quellzustandsmengen und Zielzustandsfunktionen ebenfalls unverändert. Für die Übergangsratenfunktionen erhalten wir

$$\beta_0(n_1, n_3) = \begin{cases} 2\alpha_0, & \text{falls } n_1 \geq \frac{K_1}{2} \vee n_3 = 0, \\ \alpha_0, & \text{sonst;} \end{cases}$$

$$\beta_3(n_1, n_3) = \begin{cases} \frac{\alpha_3}{4}, & \text{falls } n_1 \geq \frac{K_1}{2} \vee n_3 = 0, \\ \alpha_3, & \text{sonst;} \end{cases}$$

und für $1 \leq i \leq k$, $i \neq k$

$$\beta_i(n_1, n_3) = \begin{cases} \frac{\alpha_i}{2}, & \text{falls } n_1 \geq \frac{K_1}{2} \vee n_3 = 0, \\ \alpha_3, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Wir sehen also, daß der beschriebene komponentenbasierte Maßwechsel kompakt für Transitionsklassenmodelle formulierbar ist. Insbesondere ist auch die effiziente Prüfung der jeweiligen Fallunterscheidung leicht. Es sind natürlich diverse Varianten zu unserem Beispiel denkbar. So könnten mehrere Fälle unterschieden werden, also die Abhängigkeit von Füllständen noch abgestuft werden, oder etwa die Veränderung der Raten für verschiedene Transitionsklassen auf verschiedene Weise erfolgen. Transitionsklassenmodelle stellen also nicht nur eine Erleichterung bei der Beschreibung von Modellen dar, sondern auch eine Möglichkeit, Maßwechsel für Importance Sampling formal und dabei dennoch kompakt zu definieren.

4.5 Tandemwarteschlangennetze

Wir haben bereits im vorherigen Abschnitt Tandemwarteschlangennetze als Beispiel herangezogen und wollen hier nun genauer darauf eingehen. Tandemwarteschlangennetze, oder kürzer Tandemsysteme, gehören zu den zuerst und sicher bis heute mit am häufigsten untersuchten Warteschlangennetzen. Dabei kommen Kunden an der ersten Station an, durchlaufen nacheinander in festgelegter Reihenfolge alle weiteren Stationen und verlassen schließlich das System. Eine besondere Bedeutung von Tandemsystemen besteht darin, daß sie einerseits verhältnismäßig einfach sind und andererseits ein Modell für reale fließbandähnliche Abläufe darstellen. Vorgänge, die nacheinander von verschiedenen Menschen oder Maschinen ausgeführt werden, sind also als Tandemsystem modellierbar, so etwa auch ein Ende-zu-Ende-Modell für ATM-Netze. Tandemsysteme sind also durchaus in der Praxis relevant und nicht nur von theoretischem Interesse.

Tandemsysteme können viele Ausprägungen haben. Je nach Ankunftsprozeß und Bedienzeitverteilungen oder beschränkten oder unbeschränkten Kapazitäten ist dabei die Analyse verschiedener Leistungsmaße mehr oder weniger schwierig. Wir haben etwa in [San98]

Approximationen von Wartezeitverteilungen in nicht nur Markovschen Tandemsystemen unbeschränkter Kapazität untersucht. Markovsche Tandemsysteme mit unbeschränkten Kapazitäten sind Produktformnetze. Sie können im Hinblick auf viele Leistungsmaße, die mittleres Verhalten beschreiben, durch separate Betrachtung der einzelnen Knoten untersucht werden, was die Analyse wesentlich vereinfacht. Nach dem Satz von Burke ist der Abgangsprozeß aus einem stabilen M/M/1-System ein Poissonprozeß mit gleicher Rate wie die des Ankunftsprozesses. Daraus folgt für Markovsche Tandemsysteme mit unbeschränkten Kapazitäten unter anderem, daß die Anordnung vertauscht werden kann, wie der Satz von Weber besagt.

Analytisch komplizierter zu untersuchen sind Markovsche Tandemsysteme mit beschränkten Kapazitäten oder bei unbeschränkten Kapazitäten Leistungsmaße, die nicht das mittlere Verhalten beschreiben, sondern etwa das Verhalten in Arbeitsphasen oder Leistungsmaße, die von bestimmten Anfangsbedingungen abhängen. Hierzu zählen gerade auch Überlaufwahrscheinlichkeiten einzelner Knoten oder des gesamten Netzes während der Arbeitsphasen. Dabei interessiert häufig die Wahrscheinlichkeit für einen Überlauf[¶] oder Kunden- bzw. Paketverlust oder die Wahrscheinlichkeit, daß die Population, die Anzahl von Kunden im gesamten System eine bestimmte Schranke überschreitet. Für Systeme, deren Komponenten nur gering ausgelastet sind oder deren Warteschlangen große Kapazitäten aufweisen, sind dies seltene Ereignisse. Daher sind Tandemsysteme auch häufig mittels Importance Sampling untersucht worden. Auch wenn sie noch verhältnismäßig einfache Warteschlangenmodelle sind, stoßen wir doch bereits für die Klasse der Tandemsysteme, auch der Markovschen, an die Grenzen der Forschung im Bereich der Simulation seltener Ereignisse.

Die erste Heuristik für Markovsche Tandemsysteme schlagen Parekh und Walrand [PW89] vor. Sie untersuchen für Markovsche Tandemsysteme aus zwei Knoten die Wahrscheinlichkeit, daß die Population eine vorgegebene Schranke überschreitet bevor das System wieder leer wird, also innerhalb einer Arbeitsphase (*busy period*). In Analogie zum asymptotisch optimalen Maßwechsel für die Wahrscheinlichkeit des Erreichens einer Populationsschranke beim M/M/1-Modell sollen Ankunfts- und Bedienraten vertauscht werden, und zwar so, daß die Ankunftsrate und die kleinere Bedienrate vertauscht werden, die größere Bedienrate bleibt unverändert. Die zugrundeliegende Idee dabei ist, daß das Systemverhalten in Bezug auf hohe Pufferfüllstände, also große Populationen, im wesentlichen von der Station mit dem langsameren Bediener beeinflusst wird, der sogenannten *bottleneck queue*.

[¶]Wir verwenden die Begriffe „Überlauf“ und „Erreichen eines hohen Füllstands“ in äquivalenter Bedeutung. Der Überlauf einer Warteschlange beschränkter Kapazität kann etwa als Erreichen einer Populationsgröße innerhalb einer Warteschlange unbeschränkter Kapazität angesehen werden, wobei diese Populationsgröße gerade um 1 größer ist als die Warteschlangenkapazität. Der Überlauf eines Systems entspricht dem Erreichen eines vorgegebenen hohen Populationsniveaus, also einer großen Anzahl von Kunden im gesamten System, ohne Differenzierung, wie sich die Kunden auf die einzelnen Stationen verteilen.

In [PW89] bleibt die asymptotische Optimalität unklar. Zudem gibt die Heuristik für identische Raten beider Bediener keine eindeutige Vorschrift an. Zur Herleitung ihrer Maßwechselstrategie stellen Parekh und Walrand mit heuristischer Argumentation ein Optimierungsproblem mit Nebenbedingung auf, das sie numerisch lösen, und anhand der Lösungen leiten sie dann die vorgeschlagenen Maßwechselstrategie ab. Frater, Lennon und Anderson [FLA91] geben eine explizite analytische Lösung des Optimierungsproblems und kommen zum gleichen Ergebnis, auch hier ohne Aussagen zur asymptotischen Optimalität. Tsoucas [Tso92] untersucht die gleiche Problemstellung und ermittelt per Theorie großer Abweichungen ebenfalls die gleiche Maßwechselstrategie. Die Idee bei seinem Ansatz ist, den *exit path*, den wahrscheinlichsten Pfad zum seltenen Ereignis zu finden. Erweiterungen der Heuristik auf Tandemsysteme mit mehr als zwei Knoten gehen ebenfalls jeweils von einer bottleneck queue aus, die die Populationsgröße wesentlich bestimmt. Es zeigt sich, daß die Heuristik tatsächlich nur für ganz bestimmte Parameter der Ankunfts- und Bedienraten asymptotisch optimale Schätzer liefern kann. Glasserman und Kou [GK95] zeigen mit Methoden der Theorie großer Abweichungen, daß diese Maßwechselstrategie selbst für Tandemsysteme aus nur zwei Knoten für gewisse Parameter nicht nur nicht asymptotisch optimal ist, sondern IS-Schätzer mit unendlicher Varianz liefert. Als Problem stellen sich grob gesprochen Unstetigkeiten der Raten an den Grenzen des Zustandsraums der zugrundeliegenden Markovkette dar. Trotz der nachgewiesenen Probleme ist die Heuristik von Parekh und Walrand, häufig PW-Maßwechsel genannt, weiterhin sehr populär, wohl deshalb, weil sie bis heute die einzige einfache Heuristik für Tandemsysteme darstellt und für gewisse Parameterregionen, also für Systeme, die tatsächlich sehr stark von einer bottleneck queue dominiert werden, asymptotisch optimale Schätzer liefert.

Eine Alternative schlagen Kroese und Nicola [KN99b, KN02] vor. Untersucht wird für Tandemsysteme aus zwei Knoten die Wahrscheinlichkeit für einen Überlauf der zweiten Warteschlange während einer Arbeitsphase dieser Station. Es wird weiter vorausgesetzt, daß die erste Warteschlange anfangs eine feste Anzahl von Kunden enthält. Kroese und Nicola geben einen zustandsabhängigen Maßwechsel an und zwar in Abhängigkeit des Füllstands der ersten Warteschlange. Dieser Maßwechsel ist asymptotisch optimal, wobei auffällt, daß dabei die erste Station stabil mit gleicher Bedienrate bleibt oder instabil wird. Eine ähnliche Problemstellung betrachten Juneja und Nicola [JN02]. Sie untersuchen zunächst allgemeiner Warteschlangennetze mit Zustandswechseln nach diskreten Intervallen und bestimmen die Überlaufwahrscheinlichkeit einer bestimmten Warteschlange (*target queue*) während deren Arbeitsphase. Mittels der Theorie großer Abweichungen wird ein Maßwechsel hergeleitet, der fast konstante Likelihood-Quotienten auf allen Pfaden zum seltenen Ereignis liefert. Es stellt sich heraus, daß für Jackson-Netze im Falle, daß die target queue gerade die bottleneck queue ist, dieser Maßwechsel identisch zum PW-Maßwechsel ist, wobei Parekh und Walrand jedoch die Gesamtpopulation betrachten. Juneja und Nicola folgern daraus, daß die Gesamtpopulation stark von der bottleneck queue abhängig ist. Dies erscheint nun aber nicht sehr überraschend, zumal es für Parekh

und Walrand gerade die heuristische Begründung für ihren Maßwechsel war. Juneja und Nicola zeigen weiter, daß ihr Maßwechsel asymptotisch optimal ist, der von Parekh und Walrand wie erwähnt für bestimmte Parameter nicht. Als Grund dafür geben Juneja und Nicola an, daß sie nur die Arbeitsphasen der target queue und nicht des gesamten Systems betrachten.

In [Shu02] und [SD03] wird die Idee der balancierten Likelihood-Quotienten (*Balanced Likelihood Ratios*, vgl. Abschnitt 4.3.2) auf Markovsche Tandemwarteschlangennetze mit zwei Knoten erweitert, wobei dies in [Shu02] erstmalig in einer zustandsunabhängigen Variante vorgeschlagen wird und schließlich in [SD03] modifiziert wird, so daß der Maßwechsel vom Füllstand der ersten Warteschlange abhängt. Betrachtet werden dabei sowohl Tandemnetze, bei denen die erste Station endliche Kapazität hat als auch solche mit unbeschränkter Kapazität der ersten Station. Die untersuchte Größe ist auch hier jeweils die Wahrscheinlichkeit, daß die zweite Station einen hohen Füllstand erreicht, bevor ihre Arbeitsphase endet. Numerische Ergebnisse in [SD03] deuten darauf hin, daß die dort beschriebene Variante für unendliche Kapazität der ersten Station besser ist als der zum Vergleich herangezogene Maßwechsel aus [KN02]. Andererseits wird deutlich, daß die Methode der balancierten Likelihood-Quotienten für endliche Kapazität der ersten Station schlechtere Ergebnisse als die Methode von Kroese und Nicola [KN02] liefert. Den Grund hierfür herauszufinden und detaillierte theoretische Untersuchungen der Eigenschaften der Methode der balancierten Likelihood-Quotienten, insbesondere auch asymptotische Eigenschaften, geben die Autoren als Ziele weiterer Forschung an.

Der obige Überblick über die Forschung speziell für Tandemsysteme, insbesondere auch die Aktualität der Arbeiten, macht deutlich, wie schwierig die Anwendung von Importance Sampling oder noch allgemeiner die Simulation seltener Ereignisse auch für verhältnismäßig einfache Modelle heute noch ist. Wir stellen insbesondere fest, daß man selbst Markovsche Tandemsysteme aus nur zwei Knoten, obwohl oft untersucht, bis heute noch nicht allgemein „im Griff“ hat. Insbesondere beschränken sich selbst für Tandemsysteme die Untersuchungen auf Arbeitsphasen des Systems oder gar nur einzelner Stationen. Diese Einschränkung vereinfacht die Anwendung von Importance Sampling wesentlich, und es ist klar, daß die simulative Bestimmung allgemeinerer Größen wie etwa stationärer Zustandswahrscheinlichkeiten oder stationärer Randwahrscheinlichkeiten noch deutlich schwieriger ist. Nicht-Markovsche Modelle erschweren die Analyse zusätzlich.

4.5.1 Neue zustandsunabhängige Maßwechselstrategien

Wir präsentieren in diesem Abschnitt neue zustandsunabhängige Maßwechsel für die Importance-Sampling-Simulation zur effizienten Schätzung der Wahrscheinlichkeit, daß die Gesamtpopulation eines anfangs leeren stabilen Tandemsystems mit zwei Stationen und Warteschlangen unendlicher Kapazität einen vorgegebenen Wert erreicht bevor sich

das System wieder leert, also die Wahrscheinlichkeit des Erreichens eines (hohen) Populationsniveaus während einer Arbeitsphase (*busy period*). Dabei führen wir auch Irrwege vor, die auf den ersten Blick erfolgversprechend und gut begründet erscheinen, und erläutern, warum diese nicht zum Erfolg führen. Daraus ziehen wir dann wichtige Schlüsse für Veränderungen und Verbesserungen. Wir legen dabei ein besonderes Augenmerk auf Parameterwerte, für die insbesondere auch der Maßwechsel von Parekh und Walrand [PW89], also das Vertauschen der Ankunftsrate mit der kleinsten Bedienrate, nicht asymptotisch optimal ist und mit zunehmendem Populationsniveau immer schlechtere und unzuverlässigere Ergebnisse liefert bis hin zu unendlichen Varianzen. Es reicht hier aus, informell zu wissen, daß dies für gleiche oder fast gleiche Bedienraten an beiden Stationen gilt, exakte Formeln für die kritischen Parameterbereiche findet man in [GK95]. Insbesondere sind alle Fälle mit gleichen Bedienraten an beiden Stationen in diesen Parameterbereichen enthalten.

Das wesentliche Problem beim Maßwechsel von Parekh und Walrand für Tandemsysteme mit gleichen oder fast gleichen Bedienraten besteht darin, daß durch den Maßwechsel eine Engpaßstation (*bottleneck queue*) erzeugt wird, nämlich gerade die, mit deren Bedienrate die Ankunftsrate vertauscht wird. Im Originalsystem dagegen existiert keine Engpaßstation. Das heißt insbesondere, daß eine große Gesamtpopulation im Originalsystem typischerweise nicht durch einen hohen Füllstand einer der beiden Stationen bei gleichzeitig niedrigem Füllstand der anderen Station hervorgerufen wird, sondern durch etwa gleiche Füllstände beider Stationen. Diese für das betrachtete seltene Ereignis typischen Situationen werden durch den Maßwechsel von Parekh und Walrand nahezu ausgeschlossen. Somit ist klar, daß das Auftreten einer großen Gesamtpopulation bei Parekh und Walrand zwar enorm beschleunigt wird, jedoch fast nur durch einen hohen Füllstand einer der beiden Stationen. Viele typische Pfade zum seltenen Ereignis mit verhältnismäßig großer Wahrscheinlichkeit werden also vernachlässigt, untypische Pfade mit extrem kleiner Wahrscheinlichkeit dagegen zu stark betont. Für gleiche Bedienraten an den beiden Stationen stellt sich außerdem das Problem, daß die Vertauschung der Ankunftsrate mit der kleinsten Bedienrate nicht eindeutig bestimmt ist. Parekh und Walrand haben für diesen Fall festgestellt, daß die Vertauschung der Ankunftsrate mit der zweiten Bedienrate bessere Ergebnisse liefert und schlagen daher diese Variante im Falle gleicher Bedienraten vor. Zudem gilt nach dem Satz von Weber [Web79], daß die Anordnung der Stationen insbesondere für die Gesamtpopulation keine Rolle spielt und man demnach allgemein davon ausgehen kann, daß original $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_d$ für Tandemsysteme mit d Stationen und speziell $\mu_1 \geq \mu_2$ für Tandemsysteme mit zwei Stationen gilt bzw. die Anordnung der Stationen entsprechend verändert werden kann, siehe auch [PW89, GK95, San98]. Damit kann man den Maßwechsel von Parekh und Walrand dann als Vertauschung der Ankunftsrate mit der Bedienrate der letzten Station ansehen.

Im folgenden bezeichnen wie üblich λ die Ankunftsrate, μ_1 die Bedienrate der ersten Station, μ_2 die Bedienrate der zweiten Station und $\rho_1 = \lambda/\mu_1 < 1$, $\rho_2 = \lambda/\mu_2 < 1$ die

Auslastungen. OBdA gelte $\lambda + \mu_1 + \mu_2 = 1$. Wir untersuchen die Wahrscheinlichkeit γ für das Erreichen eines vorgegebenen Populationsniveaus L während einer Arbeitsphase, also $\gamma = P\{T_L < T_0\}$, wobei T_L die Zeit des Erreichens des Populationsniveaus L und T_0 die Zeit des Wiederreichens des leeren Systems bezeichnen.

Beim Importance Sampling wird durch den Maßwechsel das Originalsystem transformiert, für Tandemsysteme typischerweise in ein instabiles System, wobei in der Regel beide Stationen instabil sind. Somit kann also die Auslastung der zweiten Station nicht mehr als Quotient aus der Ankunftsrate an der ersten Station und der Bedienrate der zweiten Station ausgedrückt werden. Vielmehr ist, da der Bediener der ersten Station fast nie untätig ist, der Ankunftsprozeß an der zweiten Station durch die Bedienrate an der ersten Station bestimmt. Wir gehen daher unter Importance Sampling von den Auslastungen $\rho_1^* = \lambda^*/\mu_1^*$ und $\rho_2^* = \mu_1^*/\mu_2^*$ aus. Für den Maßwechsel von Parekh und Walrand gilt dann (ggf. nach oben beschriebener Neuordnung der Stationen) $\rho_1^* = \mu_2/\mu_1$ und $\rho_2^* = \mu_1/\lambda = \rho_1^{-1}$, also speziell für gleiche Bedienraten an beiden Stationen $\rho_1^* = 1$ und $\rho_2^* = \rho_1^{-1}$. Wir sehen sofort, daß, während im Originalsystem mit gleichen Bedienraten die Auslastungen an beiden Stationen gleich sind, nun die zweite Station zum Engpaß wird, obwohl die erste Station zu 100 Prozent ausgelastet ist. Je kleiner die Auslastungen im Originalsystem sind, desto stärker wirkt sich dieser Effekt aus. Es scheint nahezuliegen, den Effekt beseitigen zu können, indem man gewährleistet, daß das Verhältnis der Auslastungen beider Stationen nach dem Maßwechsel gleich dem entsprechenden Verhältnis im Originalsystem ist. Wir wollen dies im folgenden zunächst formalisieren und dann die Probleme bei diesem Ansatz aufzeigen.

Der Maßwechsel von Parekh und Walrand vertauscht die Ankunftsrate und die Bedienrate an der zweiten Station. Nun soll zusätzlich die Bedienrate an der ersten Station modifiziert werden, und zwar so, daß das Verhältnis der Auslastungen wie im Originalsystem ist, also

$$\frac{\rho_1}{\rho_2} = \frac{\mu_2}{\mu_1} \stackrel{!}{=} \frac{\rho_1^*}{\rho_2^*} = \frac{\mu_2}{\mu_1^*} \cdot \frac{\lambda}{\mu_1^*} = \frac{\lambda\mu_2}{\mu_1^{*2}}.$$

Wir erhalten durch elementare Umformungen $\mu_1^* = \sqrt{\lambda\mu_1}$, also insgesamt den Parametersatz $(\lambda^*, \mu_1^*, \mu_2^*) = (\mu_2, \sqrt{\lambda\mu_1}, \lambda)$ und speziell für gleiche Bedienraten $\mu_1 = \mu_2 =: \mu$ den Parametersatz $(\lambda^*, \mu_1^*, \mu_2^*) = (\mu, \sqrt{\lambda\mu}, \lambda)$. Die Raten können dann jeweils normiert werden, also

$$\lambda^* = \frac{\mu_2}{\mu_2 + \sqrt{\lambda\mu_1} + \lambda}, \quad \mu_1^* = \frac{\sqrt{\lambda\mu_1}}{\mu_2 + \sqrt{\lambda\mu_1} + \lambda}, \quad \mu_2^* = \frac{\lambda}{\mu_2 + \sqrt{\lambda\mu_1} + \lambda}$$

und wieder speziell für gleiche Bedienraten $\mu_1 = \mu_2 =: \mu$

$$\lambda^* = \frac{\mu}{\mu + \sqrt{\lambda\mu} + \lambda}, \quad \mu_1^* = \frac{\sqrt{\lambda\mu}}{\mu + \sqrt{\lambda\mu} + \lambda}, \quad \mu_2^* = \frac{\lambda}{\mu + \sqrt{\lambda\mu} + \lambda}.$$

Somit haben wir also ausgehend von der Vertauschung der Ankunftsrate mit der Bedienrate des langsameren (OBdA zweiten) Bedieners gemäß Parekh und Walrand die Bedienrate der ersten Station hergeleitet, so daß das Verhältnis der Auslastungen nach Transformation des Modells gleich bleibt. Für gleiche Bedienraten im Originalmodell sind im Originalmodell die Auslastungen beider Stationen gleich und damit auch die Auslastungen im Importance–Sampling–Modell. In diesem Fall gilt mit $\rho = \lambda/\mu$ gerade $\rho_1^* = \rho_2^* =: \rho^* = \sqrt{\rho^{-1}}$.

Bei der Implementierung und dem Testen des soeben hergeleiteten Maßwechsels stellen wir allerdings fest, daß er keine wesentliche Verbesserung gegenüber Parekh und Walrand darstellt. Bei der Analyse der Gründe stellt sich heraus, daß für die kritischen Parameterregionen der Effekt des Maßwechsels von Parekh und Walrand umgekehrt wird, in dem Sinne, daß nun nicht mehr die zweite sondern die erste Station einen Engpaß bildet. Wir erläutern dies anhand der Auslastungen und des typischen Verhaltens des Systems. Aus Gründen der Übersichtlichkeit und leichten Verständlichkeit wählen wir hier ganzzahlige nichtnormierte Raten, mit deren Hilfe der beschriebene Effekt erklärt werden kann.

Für ein Tandemsystem mit Raten $\lambda = 1, \mu_1 = \mu_2 = 9$ liefert der Maßwechsel die Raten $\lambda^* = 9, \mu_1^* = 3$ und $\mu_2^* = 1$. Betrachten wir nun einen typischen Verlauf bei der Entwicklung des Systemzustands. Von $9 + 3 + 1 = 13$ Ereignissen sind im Mittel neun Ankünfte, drei Bedienungen an der ersten Station, also Übergänge von Kunden aus der ersten in die zweite Station, und eine Bedienung an der zweiten Station, also ein Abgang aus dem System. Als typischen Zustand kann man dann nach den ersten 13 Ereignissen den Zustand (6,2) ansehen, nach weiteren 13 Ereignissen den Zustand (12,4) und so fort. Wir sehen also, daß ein typischer Verlauf dazu führt, daß die erste Station deutlich mehr Kunden enthält als die zweite Station. Somit kommt ein hohes Populationsniveau im gesamten System in der Regel durch einen hohen Füllstand der ersten Station bei gleichzeitig niedrigem Füllstand der zweiten Station zustande. Das ist gerade der selbe Effekt wie bei Parekh und Walrand mit umgekehrten Rollen der beiden Stationen, obwohl nun beide Stationen gleiche Auslastungen haben. Der Maßwechsel stellt also keine Verbesserung dar, und wir wollen nun mögliche Denkfehler und Ursachen diskutieren.

Prinzipiell gibt es zwei Möglichkeiten, warum der Maßwechsel keine Verbesserung darstellt. Entweder ist die Idee gleicher Verhältnisse der Auslastungen grundsätzlich ein Irrweg oder der Ansatz, zunächst gemäß Parekh und Walrand die Ankunftsrate und die Bedienrate des zweiten Bedieners zu vertauschen, ist problematisch. Betrachten wir dazu die Auslastungen unseres obigen Beispielsmodells mit den Raten $\lambda = 1, \mu_1 = \mu_2 = 9$. Die Auslastung beider Stationen beträgt hierbei $\rho = 1/9$, und die Auslastung beider Stationen im Importance–Sampling–Modell beträgt $\rho^* = 3$. Die Auslastungen an beiden Stationen sind also jeweils um den Faktor 27 vergrößert worden, und wir werden sehen, daß dieser Faktor offensichtlich zu groß ist und gerade das Problem hervorruft, daß sich die erste Station im Vergleich zur zweiten Station zu schnell füllt. Da die Auslastungen im insta-

bilen Importance–Sampling–Modell durch λ^*/μ_1^* bzw. μ_1^*/μ_2^* gegeben sind, folgt für einen typischen Verlauf, daß zwar ρ^* -mal so viele Bedienungen an der ersten Station wie an der zweiten Station stattfinden, jedoch zudem ρ^* -mal mehr Ankünfte als Bedienungen an der ersten Station. Analog zu unserer obigen Argumentation erhalten wir nach $\rho^{*2} + \rho^* + 1$ Ereignissen als typischen Systemzustand $(\rho^{*2} - \rho^*, \rho^* - 1)$, nach weiteren $\rho^{*2} + \rho^* + 1$ Ereignissen als typischen Zustand $(2(\rho^{*2} - \rho^*), 2(\rho^* - 1))$ und allgemeiner für $c \in \mathbb{N}$ als typischen Zustand $(c(\rho^{*2} - \rho^*), c(\rho^* - 1))$. Entscheidend für das Verhältnis oder die Differenz der Füllstände beider Stationen ist also die Differenz $(\rho^{*2} - \rho^*) - (\rho^* - 1) = \rho^{*2} - 2\rho^* + 1$. Für große ρ^* ist diese Differenz groß. Wir sehen sofort, daß etwa für $\rho^* = 2$ die Differenz $\rho^{*2} - 2\rho^* + 1 = 1$ ein ausgewogeneres Verhältnis der Füllstände liefert. Das durch unseren Maßwechsel resultierende ρ^* ist also offensichtlich zu groß. Fragen wir uns nun, wie bei unserem Maßwechsel dieses zu große ρ^* bestimmt wird, so stellen wir fest, daß es durch den Start mit der Vertauschung der Raten gemäß Parekh und Walrand festgelegt ist. Unsere Idee, das Verhältnis der Auslastungen nach Transformation zu erhalten, hat dann keinen Einfluß mehr auf den konkreten Wert der Auslastung ρ^* . Da aber gerade dieser konkrete Wert die Ursache für die Erzeugung eines Engpasses ist, folgern wir, daß der Beginn des Maßwechsels gemäß Parekh und Walrand der Grund dafür ist, daß gegenüber diesem keine Verbesserung erreicht wird.

Unser nächster Ansatz besteht demzufolge darin, den Maßwechsel unter Erhalt des Verhältnisses der Auslastungen zu definieren, ohne die Vertauschung der Raten gemäß Parekh und Walrand vorzunehmen. Als Verallgemeinerung ergibt sich analog zu vorher

$$\frac{\rho_1}{\rho_2} = \frac{\mu_2}{\mu_1} \stackrel{!}{=} \frac{\rho_1^*}{\rho_2^*} = \frac{\lambda^*}{\mu_1^*} \cdot \frac{\mu_2^*}{\mu_1^*} = \frac{\lambda^* \mu_2^*}{\mu_1^{*2}}$$

und umgeformt

$$\mu_1^* = \sqrt{\frac{\lambda^* \mu_2^* \mu_1}{\mu_2}}.$$

Anders als zuvor haben wir nun drei Unbekannte $\lambda^*, \mu_1^*, \mu_2^*$ in einer Gleichung und müssen daher im allgemeinen weitere Vorgaben an den Maßwechsel machen, um eine eindeutige Lösung zu bestimmen. Für gleiche Bedienraten und damit gleiche Auslastungen im Originalsystem erhält die Transformation durch den Maßwechsel die Eigenschaft gleicher Auslastungen an beiden Stationen, wobei der Wert der Auslastungen natürlich deutlich größer als für das Originalsystem sein soll, jedoch wie wir gesehen haben, nicht zu groß. Für $\mu_1 = \mu_2$ folgt

$$\mu_1^* = \sqrt{\lambda^* \mu_2^*},$$

also eine von den Originalraten unabhängige Bedingung. Konkrete Parameterwerte erhalten wir durch Vorgabe der gewünschten Auslastungen.

Mit $\rho_2^* = \rho_1^* := \rho$ ergibt sich $\mu_1^* = \rho\mu_2^*$ und $\lambda^* = \rho\mu_1^* = \rho^2\mu_2^*$. Normierung der Raten führt dann zu

$$\lambda^* = \frac{\rho^2\mu_2^*}{\rho^2\mu_2^* + \rho\mu_2^* + \mu_2^*} = \frac{\rho^2}{\rho^2 + \rho + 1}, \quad (4.27)$$

$$\mu_1^* = \frac{\rho}{\rho^2 + \rho + 1}, \quad (4.28)$$

$$\mu_2^* = \frac{1}{\rho^2 + \rho + 1}. \quad (4.29)$$

Der zuvor auf der Basis der Vertauschung der Raten λ und μ_2 hergeleitete Maßwechsel ist als Spezialfall enthalten. Wir sehen etwa sofort, daß für $\rho^* = 3$ ohne Normierung die Raten $\lambda^* = 9, \mu_1^* = 3, \mu_2^* = 1$ und nach Normierung die Raten $\lambda^* = 9/13, \mu_1^* = 3/13, \mu_2^* = 1/13$ resultieren. Wir haben aber nun Freiheit in der Wahl von ρ^* . Insbesondere können wir ρ^* kleiner als zuvor durch die Vertauschung der Raten festgelegt wählen. Beispielsweise für $\rho^* = 2$ ergeben sich also die normierten Raten $\lambda^* = 4/7, \mu_1^* = 2/7$ und $\mu_2^* = 1/7$. Es zeigt sich, daß dieser Maßwechsel im Vergleich zu Parekh und Walrand eine wesentliche Verbesserung darstellt. Wir belegen dies im folgenden Abschnitt durch numerische Ergebnisse, wobei wir den soeben beschriebenen Maßwechsel als unsere Strategie 1 bezeichnen.

Wir haben bei der Herleitung unseres Maßwechsels die Richtlinie verfolgt, vor allem typische Pfade zum seltenen Ereignis, dem Erreichen eines hohen Füllstands des Systems, zu erzeugen und daher für Systeme ohne Engpaß ausgewogene Füllstände an beiden Stationen angestrebt. Dabei haben wir auf das Verhältnis der Auslastungen beider Stationen geachtet, ohne bisher den Likelihood-Quotienten zu betrachten. Wir entwickeln nun eine weitere Maßwechselstrategie, die ebenfalls ausgewogene Füllstände gewährleisten soll und zusätzlich den Likelihood-Quotienten einbezieht, denn wir haben bereits mehrfach gesehen, daß der Likelihood-Quotient wesentlichen Einfluß auf die Güte von Maßwechseln hat. Insbesondere sollte dessen Wert auf Zyklen zumindest beschränkt und idealerweise gleich 1 sein, auch wenn dies keine hinreichende Bedingung für die Effizienz eines Maßwechsels ist. Betrachten wir also Likelihood-Quotienten auf Zyklen.

Ein kürzester Zyklus in einem Tandemsystem besteht aus jeweils genau einer Ankunft, genau einer Bedienung an der ersten Station und genau einer Bedienung an der zweiten Station. Jeder andere Zyklus kann nur durch mehrfaches Durchlaufen eines solchen kürzesten Zyklus entstehen. Somit impliziert also ein Likelihood-Quotient von 1 auf kürzesten Zyklen einen Likelihood-Quotienten von 1 auf allen Zyklen und ein durch 1 beschränkter Likelihood-Quotient auf kürzesten Zyklen einen durch 1 beschränkten Likelihood-Quotienten auf allen Zyklen. Allerdings bewirkt ein kleiner Likelihood-Quotient auf kürzesten Zyklen bei häufigem Durchlauf solcher Zyklen einen insgesamt sehr kleinen Likelihood-Quotienten, sodaß also ein Wert erstrebenswert ist, der – falls ungleich 1 – nur möglichst wenig kleiner als 1 ist. Mit normierten Raten gilt für den Likelihood-Quotienten

auf kürzesten Zyklen in einem Tandemsystem

$$L_Z = \frac{\lambda\mu_1\mu_2}{\lambda^*\mu_1^*\mu_2^*}.$$

Zur weiteren Motivation unserer nächsten Maßwechselstrategie betrachten wir zunächst wie zuvor einen typischen Verlauf bei der Entwicklung des Systemzustands, wobei wir nun keine Vorgaben an die Auslastungen machen. Die Überlegungen zum typischen Verlauf bleiben jedoch analog zu vorher. Von $n = n_0 + n_1 + n_2$ Ereignissen oder Zustandsübergängen mit $n_0 \geq n_1 \geq n_2$ seien n_0 Ankünfte, n_1 Bedienungen an der ersten Station, also Übergänge von Kunden aus der ersten in die zweite Station, und n_2 Bedienungen an der zweiten Station, also Abgänge aus dem System. Als typischen Zustand kann man dann nach den ersten n Ereignissen den Zustand $(n_0 - n_1, n_1 - n_2)$ ansehen, nach weiteren n Ereignissen den Zustand $(2(n_0 - n_1), 2(n_1 - n_2))$, und allgemein für $c \in \mathbb{N}$ ist $(c(n_0 - n_1), c(n_1 - n_2))$ ein typischer Zustand. Um im Mittel auch ohne Berücksichtigung der Auslastungen eine in etwa gleiche Anzahl von Kunden an beiden Stationen zu erhalten, wollen wir also erreichen, daß die Differenzen $n_0 - n_1$ und $n_1 - n_2$ gleich sind. Entsprechend können wir dies für normierte Raten formulieren, also $\lambda^* - \mu_1^* = \mu_1^* - \mu_2^*$ mit $\lambda^* + \mu_1^* + \mu_2^* = 1$. Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} \lambda^* - \mu_1^* &= \mu_1^* - \mu_2^*, \\ \lambda^* - 2\mu_1^* + \mu_2^* &= 0, \\ 1 - \mu_1^* - \mu_2^* - 2\mu_1^* + \mu_2^* &= 0, \\ 1 - 3\mu_1^* &= 0, \\ \mu_1^* &= \frac{1}{3} \quad \Rightarrow \quad \lambda^* = \frac{2}{3} - \mu_2^*. \end{aligned}$$

Unser nächstes Ziel besteht darin, einen Wert des Likelihood-Quotienten von 1 auf allen Zyklen zu erhalten, wie wir zuvor bereits begründet haben. Ein kürzester Zyklus in einem Tandemsystem besteht aus jeweils genau einer Ankunft, genau einer Bedienung an der ersten Station und genau einer Bedienung an der zweiten Station. Jeder andere Zyklus kann nur durch mehrfaches Durchlaufen eines solchen kürzesten Zyklus entstehen. Somit reicht es also aus, auf kürzesten Zyklen einen Likelihood-Quotienten mit Wert 1 zu garantieren. Mit normierten Raten muß also

$$\frac{\lambda\mu_1\mu_2}{\lambda^*\mu_1^*\mu_2^*} = 1$$

gelten.

Zunächst berechnen wir

$$\lambda^*\mu_1^*\mu_2^* = \left(\frac{2}{3} - \mu_2^*\right) \cdot \frac{1}{3} \cdot \mu_2^* = \frac{2}{9}\mu_2^* - \frac{1}{3}\mu_2^{*2}.$$

Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} -\frac{1}{3}\mu_2^{*2} + \frac{2}{9}\mu_2^* &= \lambda\mu_1\mu_2, \\ \mu_2^{*2} - \frac{2}{3}\mu_2^* &= -3\lambda\mu_1\mu_2, \\ \left(\mu_2^* - \frac{1}{3}\right)^2 &= \frac{1}{9} - 3\lambda\mu_1\mu_2, \\ \mu_2^* &= \frac{1}{3} \pm \sqrt{\frac{1}{9} - 3\lambda\mu_1\mu_2}. \end{aligned}$$

Der Radikand ist immer nichtnegativ, und da wir unter Importance Sampling ein instabiles System mit insbesondere $\lambda^* \geq \mu_1^* \geq \mu_2^*$ simulieren wollen, folgt insgesamt

$$\mu_1^* = \frac{1}{3}, \tag{4.30}$$

$$\mu_2^* = \frac{1}{3} - \sqrt{\frac{1}{9} - 3\lambda\mu_1\mu_2}, \tag{4.31}$$

$$\lambda^* = \frac{2}{3} - \mu_2^* = \frac{1}{3} + \sqrt{\frac{1}{9} - 3\lambda\mu_1\mu_2}, \tag{4.32}$$

und für den Fall $\mu_1 = \mu_2 =: \mu$ erhalten wir

$$\mu_1^* = \frac{1}{3}, \tag{4.33}$$

$$\mu_2^* = \frac{1}{3} - \sqrt{\frac{1}{9} - 3\lambda\mu^2}, \tag{4.34}$$

$$\lambda^* = \frac{2}{3} - \mu_2^* = \frac{1}{3} + \sqrt{\frac{1}{9} - 3\lambda\mu^2}. \tag{4.35}$$

Alle Raten sind dabei normiert. Der Maßwechsel erweist sich wie schon unsere zuvor entwickelte Strategie 1 als wesentliche Verbesserung gegenüber Parekh und Walrand. Wir belegen auch dies im folgenden Abschnitt durch numerische Ergebnisse, wobei wir den zuletzt hergeleiteten Maßwechsel als Strategie 2 bezeichnen.

4.5.2 Numerische Ergebnisse

Wir wollen nun die Güte unserer Maßwechselstrategien 1 und 2 anhand numerischer Ergebnisse demonstrieren. Dazu wählen wir Parameterwerte, in denen der mehrfach erwähnte Maßwechsel von Parekh und Walrand nicht asymptotisch optimal ist, teilweise gar gegen unendlich strebende Varianzen produziert und damit, wie wir sehen werden, für die

Wahrscheinlichkeit des Überschreitens eines hohen Populationsniveaus schlechte, nicht mehr akzeptable Ergebnisse liefert. Um einen Vergleich mit exakten Werten zu ermöglichen, sind dies gerade solche Parameterwerte, für die exakte Ergebnisse verfügbar sind, nämlich die Raten $\lambda_1 = 0.04$, $\mu_1 = \mu_2 = 0.48$ sowie die Populations-niveaus $L = 12$ und $L = 25$. Diese Werte stammen aus der Dissertation von Pieter-Tjerk de Boer [dB00], in deren Rahmen die Anwendung der Cross-Entropy-Methode auf Markovketten hergeleitet wird, siehe auch Abschnitt 5.4. Für unsere Maßwechselstrategie 1 ergeben sich gemäß (4.27)-(4.29) mit $\rho^* = 2$ die (hier auf vier Nachkommastellen gerundeten^{||}) Parameter $\lambda^* = 0.5714$, $\mu_1^* = 0.2857$, $\mu_2^* = 0.1429$, für Strategie 2 gemäß (4.33)-(4.35) die Parameter $\lambda^* = 0.6222$, $\mu_1^* = 0.3333$, $\mu_2^* = 0.0444$, und der Maßwechsel von Parekh und Walrand führt auf die Parameter $\lambda^* = 0.48$, $\mu_1^* = 0.48$, $\mu_2^* = 0.04$.

Bevor wir die numerischen Ergebnisse präsentieren, Vergleiche unserer Strategien mit dem Maßwechsel von Parekh und Walrand sowie von unserer effizientesten Strategie, als die sich Strategie 2 erweist, mit der Cross-Entropy-Methode, beschreiben wir nun die dazu durchgeführten Simulationen und die Bedeutung der in den jeweiligen Tabellen enthaltenen Größen. Ein Simulationslauf beginnt mit der Ankunft des ersten Kunden im System und endet, wenn entweder das System leer oder das Populationsniveau L erreicht wird. Ein Simulationsexperiment besteht aus N unabhängigen Replikationen solcher Simulationsläufe, und für die untersuchten Strategien haben wir jeweils 10 Simulationsexperimente durchgeführt. Alle Simulationsexperimente wurden gemäß einer Beschreibung des jeweiligen Tandemsystems als Transitionsklassenmodell implementiert.

Die aus den Simulationsexperimenten resultierenden Schätzungen sind in aufsteigender Sortierung mit $\hat{\gamma}_{(1)}, \dots, \hat{\gamma}_{(10)}$ bezeichnet, der Mittelwert dieser Schätzungen mit $\bar{\gamma}$ und die einzelnen Stichprobenvarianzen mit $S_{(1)}^2, \dots, S_{(10)}^2$, wobei die Stichprobenvarianzen nicht aufsteigend sortiert sind, sondern ihre Indizierung gemäß der zugehörigen Schätzung der Wahrscheinlichkeit gewählt ist, also $S_{(i)}^2$ bezeichnet die Stichprobenvarianz für $\hat{\gamma}_{(i)}$, $i = 1, \dots, 10$. Weiterhin bezeichnen

$$\delta_{rel}(\bar{\gamma}) := \frac{|\bar{\gamma} - \gamma|}{\gamma}$$

die relative Abweichung des Mittelwertes der Schätzungen von der exakten Wahrscheinlichkeit, also den tatsächlichen relativen Fehler des Mittelwertes der Schätzungen,

$$\delta_{rel}(\hat{\gamma}_{(i)}) := \frac{|\hat{\gamma}_{(i)} - \gamma|}{\gamma}, \quad i = 1, \dots, 10,$$

die relative Abweichung der einzelnen Schätzungen von der exakten Wahrscheinlichkeit, also den tatsächlichen relativen Fehler der einzelnen Schätzungen, sowie

$$\hat{\delta}_{rel}(\hat{\gamma}_{(i)}) := \frac{S_{(i)}}{\hat{\gamma}_{(i)}\sqrt{N}}, \quad i = 1, \dots, 10,$$

^{||}Die Simulationen wurden ohne Rundung der Parameter durchgeführt.

die aus den Simulationsläufen resultierenden mittels der Stichprobenvarianz geschätzten relativen Fehler, die proportional zur relativen Breite von Konfidenzintervallen mit entsprechenden vom gewünschten Konfidenzniveau abhängigen Quantilen als Proportionalitätsfaktor sind und \bar{K} die mittlere Anzahl von Übergängen je Lauf, also die mittlere Lauflänge.

Die Tabellen 4.1 und 4.2 zeigen einen Vergleich unserer Strategien mit dem Maßwechsel von Parekh und Walrand.

$L = 12, \gamma = 1.4693 \cdot 10^{-11}, N = 10^5$			
	Parekh/Walrand	Strategie 1	Strategie 2
$\hat{\gamma}_{(1)}/10^{-11}$	1.4112	1.4373	1.4567
$\hat{\gamma}_{(2)}/10^{-11}$	1.4151	1.4541	1.4589
$\hat{\gamma}_{(3)}/10^{-11}$	1.4286	1.4616	1.4682
$\hat{\gamma}_{(4)}/10^{-11}$	1.4309	1.4722	1.4709
$\hat{\gamma}_{(5)}/10^{-11}$	1.4341	1.4750	1.4766
$\hat{\gamma}_{(6)}/10^{-11}$	1.4639	1.4753	1.4806
$\hat{\gamma}_{(7)}/10^{-11}$	1.4805	1.4931	1.4813
$\hat{\gamma}_{(8)}/10^{-11}$	1.4884	1.4934	1.4844
$\hat{\gamma}_{(9)}/10^{-11}$	1.5180	1.4985	1.4897
$\hat{\gamma}_{(10)}/10^{-11}$	1.5478	1.5005	1.4956
$\bar{\hat{\gamma}}/10^{-11}$	1.4619	1.4761	1.4763
$\delta_{rel}(\bar{\hat{\gamma}})$	$5.0704 \cdot 10^{-3}$	$4.6281 \cdot 10^{-3}$	$4.7574 \cdot 10^{-3}$
$\max_i \delta_{rel}(\hat{\gamma}_{(i)})$	$5.3427 \cdot 10^{-2}$	$2.1779 \cdot 10^{-2}$	$1.7900 \cdot 10^{-2}$
$\max_i \hat{\delta}_{rel}(\hat{\gamma}_{(i)})$	$3.1960 \cdot 10^{-2}$	$1.3732 \cdot 10^{-2}$	$1.2746 \cdot 10^{-2}$
\bar{K}	20.693	20.349	17.572

Tabelle 4.1: Vergleich der Strategien für Populationsniveau 12 mit jeweils 10^5 Läufen je Simulationsexperiment

Wir entnehmen Tabelle 4.1, daß für das Populationsniveau $L = 12$ mit der Überlaufwahrscheinlichkeit $1.4693 \cdot 10^{-11}$, also einer noch verhältnismäßig großen oder vielleicht besser gesagt moderat kleinen Wahrscheinlichkeit, auch der Maßwechsel von Parekh und Walrand akzeptable Ergebnisse in angemessener Zeit liefert, bei 10^5 unabhängigen Läufen in jedem Simulationsexperiment. Wir stellen aber bereits hier fest, daß unsere beiden Strategien robuster als die von Parekh und Walrand sind. Während der relative Fehler des Mittelwertes aller Schätzwerte aus zehn Simulationsexperimenten bei Parekh und Walrand nur geringfügig größer als bei unseren Strategien ist, ist der maximale relative Fehler

$L = 25, \gamma = 2.8722 \cdot 10^{-25}, N = 10^6$			
	Parekh/Walrand	Strategie 1	Strategie 2
$\hat{\gamma}_{(1)}/10^{-25}$	2.4122	2.6836	2.7242
$\hat{\gamma}_{(2)}/10^{-25}$	2.4297	2.7228	2.7674
$\hat{\gamma}_{(3)}/10^{-25}$	2.4303	2.7650	2.7926
$\hat{\gamma}_{(4)}/10^{-25}$	2.5249	2.7730	2.8086
$\hat{\gamma}_{(5)}/10^{-25}$	2.8856	2.7783	2.8303
$\hat{\gamma}_{(6)}/10^{-25}$	3.0910	2.7885	2.8377
$\hat{\gamma}_{(7)}/10^{-25}$	3.4965	2.8157	2.8684
$\hat{\gamma}_{(8)}/10^{-25}$	4.1529	2.8397	2.8916
$\hat{\gamma}_{(9)}/10^{-25}$	4.8580	2.8638	2.9650
$\hat{\gamma}_{(10)}/10^{-25}$	25.811	3.0009	3.0043
$\bar{\gamma}/10^{-25}$	5.4092	2.8031	2.8490
$\delta_{rel}(\bar{\gamma})$	$8.8330 \cdot 10^{-1}$	$2.4048 \cdot 10^{-2}$	$8.0740 \cdot 10^{-3}$
$\max_i \delta_{rel}(\hat{\gamma}_{(i)})$	7.9865	$6.5664 \cdot 10^{-2}$	$5.1528 \cdot 10^{-2}$
$\max_i \hat{\delta}_{rel}(\hat{\gamma}_{(i)})$	$8.7567 \cdot 10^{-1}$	$4.4658 \cdot 10^{-2}$	$5.2176 \cdot 10^{-2}$
\bar{K}	47.232	47.724	39.462

Tabelle 4.2: Vergleich der Strategien für Populationsniveau 25 mit jeweils 10^6 Läufen je Simulationsexperiment

aller zehn Schätzwerte bei unseren Strategien um den Faktor 2.45 (Strategie 1) bzw. um den Faktor 2.98 (Strategie 2) kleiner als bei Parekh und Walrand. Zudem benötigt Strategie 2 etwas weniger Rechenaufwand, da die mittlere Anzahl \bar{K} von Übergängen in einem Lauf kleiner ist.

Tabelle 4.2 verdeutlicht, daß für Populationsniveau $L = 25$ bei entsprechend kleiner Überlaufwahrscheinlichkeit der Maßwechsel von Parekh und Walrand bei $N = 10^6$ unabhängigen Läufen keine verlässlichen Ergebnisse liefert, ein Effekt der auch bei Vergrößerung der Laufzahl auftritt. Der Mittelwert aller zehn Schätzungen weist einen relativen Fehler von mehr als 88% auf, der maximale relative Fehler beträgt gar mehr als 875%. Die Ergebnisse sind also unbrauchbar. Unsere Strategien liefern dagegen durchweg gute Ergebnisse mit relativen Fehlern von maximal etwa 6.6% (Strategie 1) bzw. 5.2% (Strategie 2). Darüberhinaus zeigt sich wieder, daß bei gleicher Anzahl unabhängiger Läufe unsere Strategie 1 in etwa den gleichen Rechenaufwand wie der Maßwechsel von Parekh und Walrand benötigt, während der Rechenaufwand bei der Strategie 2 kleiner ist.

Wir sehen also insgesamt, daß unsere beiden Strategien deutliche Verbesserungen gegenüber Parekh und Walrand sind, wobei Strategie 2 sogar mit weniger Rechenaufwand je Lauf auskommt und somit als die effizienteste Strategie anzusehen ist.

Einen weiteren Effekt, den wir beobachten können, ist die Tendenz zur Unterschätzung des relativen Fehlers in allen Verfahren. Da in realistischen Simulationen gerade der geschätzte relative Fehler ein Abbruchkriterium oder Gütekriterium ist und zur Konstruktion von Konfidenzintervallen dient, stellt diese Unterschätzung einen kritischen Punkt dar. Eine starke Unterschätzung des relativen Fehlers führt zur Konstruktion von zu optimistischen Konfidenzintervallen, und die tatsächliche Überdeckungswahrscheinlichkeit (*coverage*) ist dann kleiner als das angenommene oder vorgegebene Konfidenzniveau. Dieser Effekt tritt bei den Werten in Tabelle 1 noch nicht auf, beim Maßwechsel von Parekh und Walrand entnehmen wir jedoch Tabelle 2, daß der relative Fehler erheblich unterschätzt wird. Dazu wollen wir zusätzlich anmerken, daß gerade für den Schätzwert mit dem größten relativen Fehler ein sehr kleiner relativer Fehler geschätzt wurde. Das führt also in realistischen Situationen mit unbekanntem Wahrscheinlichkeiten dazu, daß irrtümlich eine vorgegebene Genauigkeit im Sinne etwa eines maximalen relativen Fehlers oder einer maximalen relativen Konfidenzintervallbreite angenommen wird. Für unsere Strategien wird der relative Fehler nur geringfügig oder gar nicht unterschätzt, und alle Konfidenzintervalle weisen tatsächlich die angenommene Überdeckung auf.

Das Problem der Unterschätzung relativer Fehler beim Maßwechsel von Parekh und Walrand zeigt deutlich, daß es erstrebenswert ist, bei der Erprobung neuer Strategien und bei Vergleichen von Strategien exakte Werte zur Verfügung zu haben. Eine empirische Demonstration der Güte eines Maßwechsels rein anhand geschätzter relativer Fehler oder damit konstruierter Konfidenzintervalle, wie leider häufig in der Literatur anzutreffen, ist also mit Skepsis zu betrachten. Selbstverständlich kann man aber nicht erwarten, jeweils exakte Werte zu kennen, da ansonsten keine Simulation notwendig wäre. Dennoch gibt es neben der Schätzung des relativen Fehlers Möglichkeiten zur Verifikation der Verlässlichkeit der Ergebnisse, etwa, wie wir es getan haben, die Durchführung mehrerer Simulationen und die Betrachtung der Schwankungen der gewonnenen Schätzwerte.

Im folgenden wollen wir unsere effizientere Strategie 2 noch mit der zustandsunabhängigen Variante der Cross-Entropy-Methode für Markovketten [dB00] vergleichen, bei der die Parameter λ^* , μ_1^* und μ_2^* durch adaptive Optimierung berechnet werden. Zwar stellen wir die Cross-Entropy-Methode erst in Abschnitt 5.4 detailliert vor und speziell die zustandsunabhängige Variante in 5.4.2, jedoch wollen wir sie bereits hier zum Vergleich heranziehen, um die Effizienz unserer Strategie zu demonstrieren. Dazu reicht es aus, zu wissen, daß bei der zustandsunabhängigen Variante der Cross-Entropy-Methode (sowohl bei Anwendung auf Markovketten als auch bei der Formulierung für Transitionsklassenmodelle) die Parameter λ^* , μ_1^* und μ_2^* durch mehrere Iterationen bestimmt werden, die jeweils aus unabhängigen Simulationsläufen bestehen. Um basierend auf einer Iteration die Parameter

für den nächsten Iterationsschritt zu bestimmen, ist dabei jeweils zusätzlich die Lösung eines linearen Gleichungssystems notwendig. Die eigentliche Simulation, die Schätzung der gesuchten Wahrscheinlichkeit, erfolgt dann in einem weiteren Schritt, nämlich der Durchführung unabhängiger Läufe unter Verwendung der optimierten Parameter. Für unsere Beispielmodelle haben wir aus [dB00] die optimierten Parameter entnommen, $\lambda^* = 0.577, \mu_1^* = 0.347, \mu_2^* = 0.076$ für $L = 12$ und $\lambda^* = 0.585, \mu_1^* = 0.340, \mu_2^* = 0.074$ für $L = 25$.

Die Tabellen 4.3 und 4.4 zeigen eine Gegenüberstellung unserer Strategie 2 mit der zustandsunabhängigen Variante der Cross-Entropy-Methode bei (annähernd) gleichem Simulationsaufwand für beide Verfahren.

$L = 12, \gamma = 1.4693 \cdot 10^{-11}$		
	Cross-Entropy optimiert	Strategie 2
	$N = 10^5$	$N = 372255$
$\hat{\gamma}_{(1)}/10^{-11}$	1.4522	1.4537
$\hat{\gamma}_{(2)}/10^{-11}$	1.4567	1.4621
$\hat{\gamma}_{(3)}/10^{-11}$	1.4622	1.4653
$\hat{\gamma}_{(4)}/10^{-11}$	1.4630	1.4673
$\hat{\gamma}_{(5)}/10^{-11}$	1.4632	1.4698
$\hat{\gamma}_{(6)}/10^{-11}$	1.4663	1.4701
$\hat{\gamma}_{(7)}/10^{-11}$	1.4692	1.4748
$\hat{\gamma}_{(8)}/10^{-11}$	1.4724	1.4758
$\hat{\gamma}_{(9)}/10^{-11}$	1.4803	1.4801
$\hat{\gamma}_{(10)}/10^{-11}$	1.4883	1.4875
$\bar{\gamma}/10^{-11}$	1.46738	1.47065
$\delta_{rel}(\bar{\gamma})$	$1.3068 \cdot 10^{-3}$	$9.1881 \cdot 10^{-4}$
$\max_i \delta_{rel}(\hat{\gamma}_{(i)})$	$1.2931 \cdot 10^{-2}$	$1.2387 \cdot 10^{-2}$
$\max_i \hat{\delta}_{rel}(\hat{\gamma}_{(i)})$	$9.7025 \cdot 10^{-2}$	$8.3141 \cdot 10^{-2}$

Tabelle 4.3: Vergleich mit der Cross-Entropy-Methode für Populationsniveau 12

Zur Gewährleistung eines vergleichbaren Simulationsaufwands für unsere Strategie und die Cross-Entropy-Methode haben wir den Aufwand, der bei der Cross-Entropy-Methode zur Bestimmung der optimierten Parameter, mit denen die eigentliche Simulation durchgeführt wird, gemäß der numerischen Ergebnisse aus [dB00] einbezogen und dementspre-

$L = 25, \gamma = 2.8722 \cdot 10^{-25}$		
	Cross-Entropy optimiert	Strategie 2
	$N = 10^6$	$N = 3779854$
$\hat{\gamma}_{(1)}/10^{-25}$	2.7813	2.7969
$\hat{\gamma}_{(2)}/10^{-25}$	2.7945	2.8235
$\hat{\gamma}_{(3)}/10^{-25}$	2.7994	2.8247
$\hat{\gamma}_{(4)}/10^{-25}$	2.8154	2.8437
$\hat{\gamma}_{(5)}/10^{-25}$	2.8180	2.8751
$\hat{\gamma}_{(6)}/10^{-25}$	2.8226	2.8883
$\hat{\gamma}_{(7)}/10^{-25}$	2.9122	2.8915
$\hat{\gamma}_{(8)}/10^{-25}$	2.9181	2.9236
$\hat{\gamma}_{(9)}/10^{-25}$	2.9198	2.9278
$\hat{\gamma}_{(10)}/10^{-25}$	3.0070	3.0605
$\bar{\hat{\gamma}}/10^{-25}$	2.85883	2.88556
$\delta_{rel}(\bar{\hat{\gamma}})$	$4.6550 \cdot 10^{-3}$	$4.6515 \cdot 10^{-3}$
$\max_i \delta_{rel}(\hat{\gamma}_{(i)})$	$4.6933 \cdot 10^{-2}$	$6.5560 \cdot 10^{-2}$
$\max_i \hat{\delta}_{rel}(\hat{\gamma}_{(i)})$	$4.0872 \cdot 10^{-2}$	$5.2355 \cdot 10^{-2}$

Tabelle 4.4: Vergleich mit der Cross-Entropy-Methode für Populationsniveau 25

chend die korrespondierende Anzahl unabhängiger Läufe für unsere Strategie berechnet. Das Lösen von Gleichungssystemen bei der Cross-Entropy-Methode bleibt dabei unberücksichtigt, sodaß unsere Strategie gegenüber der Cross-Entropy-Methode gerade den dafür benötigten Rechenaufwand spart.

Wie zuvor haben wir jeweils 10 Simulationsexperimente für jedes Verfahren durchgeführt. Für das Populationsniveau $L = 12$ wurden dabei jeweils 10^5 unabhängige Simulationsläufe der Cross-Entropy-Methode mit den optimierten Parametern aus [dB00] durchgeführt, wobei in [dB00] 240000 Läufe zur Optimierung benötigt wurden, also insgesamt 340000 Läufe. Eine Untersuchung für die Simulation mit den optimierten Parametern ergibt eine mittlere Lauflänge von 19.239, wobei die zur Optimierung benötigten Läufe mindestens ebenso lang sind. Daraus ergeben sich also insgesamt im Mittel mindestens 6541260 simulierte Zustandsübergänge. Unsere Strategie 2 benötigt im Mittel 17.572 Übergänge, und damit ergibt sich

$$N \approx \frac{6541260}{17.572} = 372254.7$$

für die Anzahl unabhängiger Simulationsläufe für unsere Strategie 2, um einen zur Cross-Entropy-Methode (annähernd) gleichen Simulationsaufwand zu erhalten. Wir kommen daher also auf die in Tabelle 4.3 angegebenen Werte von $N = 10^5$ für die Cross-Entropy-Methode mit optimierten Parametern und $N = 372255$ für unsere Strategie 2. Analog berechnet sich die Anzahl unabhängiger Läufe für das Populationsniveau 25 und 10^6 Läufe der Cross-Entropy-Methode mit optimierten Parametern. Die Cross-Entropy-Methode benötigt hier insgesamt 3460000 Läufe, die im Mittel 43.11 Zustandsübergänge enthalten. Bei 39.462 Übergängen im Mittel pro Lauf für unsere Strategie 2, folgt $N = 3779854$.

Die Tabellen zeigen, daß unser Maßwechsel ähnlich gute Ergebnisse liefert wie die Cross-Entropy-Methode, sogar etwas kleinere relative Fehler aufweist. Die Schätzungen der relativen Fehler sind ebenfalls gut, und die resultierenden Konfidenzintervalle weisen daher die gewünschte Überdeckung auf. Unsere Strategie kann als effizienter angesehen werden, denn sie spart die Lösung linearer Gleichungssysteme, die bei der Cross-Entropy-Methode zur Bestimmung der Parameter λ^* , μ_1^* und μ_2^* benötigt werden. Zudem muß die Bestimmung dieser Parameter auch bei gleichen Parametern λ , μ_1 und μ_2 des Originalmodells bei der Cross-Entropy-Methode für jedes Populationsniveau L neu durchgeführt werden und führt auch auf andere Parameterwerte, während unsere Strategie vom Populationsniveau unabhängig ist.

Wir wollen nun auf die Grenzen sowohl unserer Maßwechselstrategien als auch der zustandsunabhängigen Cross-Entropy-Methode eingehen. Für das Populationsniveau $L = 50$ mit einer Überlaufwahrscheinlichkeit von $6.0327 \cdot 10^{-52}$ liefern weder unsere Strategien noch die Cross-Entropy-Methode verlässliche Ergebnisse mit auch nur annähernd so geringen relativen Fehlern wie für die zuvor betrachteten kleineren Niveaus, selbst bei 10^9 unabhängigen Läufen nicht. Dabei tritt dann auch der für Parekh und Walrand bereits zuvor beschriebene Effekt der zu großen Unterschätzung des relativen Fehlers auf, woraus bei naiver Betrachtung falsche Schlüsse bezüglich der Güte der Schätzwerte für die Wahrscheinlichkeiten und zu kleine Konfidenzintervalle resultieren. Wir konnten diesen Effekt im vorliegenden Fall leicht durch Vergleich mit der exakten Wahrscheinlichkeit sehen, aber auch ohne die Kenntnis des exakten Wertes hätten wir dies anhand der Schwankungen der Schätzwerte aus den Simulationsexperimenten festgestellt.

Einen positiven Aspekt können wir jedoch auch für das Populationsniveau $L = 50$ festhalten: obwohl der relative Fehler der Schätzwerte bis zu 100% beträgt, sind die Größenordnungen der Schätzwerte jeweils im Bereich von 10^{-53} bis 10^{-51} , fast immer haben die Schätzwerte sogar die korrekte Größenordnung von 10^{-52} . Das stellt im Vergleich zu Parekh und Walrand und noch mehr im Vergleich zur direkten Simulation selbstverständlich eine enorme Verbesserung dar. Die Varianz ist also erheblich reduziert, wenn auch nicht bis auf einen Bereich der zumindest relative Fehler von weniger als 10% in vertretbarer Zeit liefert.

4.5.3 Potentielle Verallgemeinerungen

Abschließend erläutern wir für unsere Maßwechselstrategien nun denkbare Erweiterungen oder Verallgemeinerungen und beschreiben die Ziele weiterer Forschung. Einige Erweiterungen und Verallgemeinerungen liegen auf der Hand. Die Ideen, die zu den Maßwechselstrategien führen, können analog für unterschiedliche Bedienraten angewendet werden. Wir haben darauf verzichtet, da in diesem Fall der Maßwechsel von Parekh und Walrand asymptotisch optimal ist. Für konkrete Größenordnungen der betrachteten Wahrscheinlichkeiten können aber selbstverständlich Maßwechselstrategien existieren, die effizienter sind als asymptotisch optimale Maßwechsel. Simulationsexperimente mit unserer Maßwechselstrategie 2 haben ergeben, daß diese auch für unterschiedliche Bedienraten bei analoger Anwendung der zugrundeliegenden Ideen jedenfalls nicht schlechter zu sein scheint als der Maßwechsel von Parekh und Walrand. Hier sind jedoch weitere ausführlichere Untersuchungen notwendig. Eine Erweiterung auf Tandemsysteme mit mehr als zwei Knoten, prinzipiell mit beliebig vielen Knoten, ist ebenfalls möglich, ebenso auf Systeme mit Warteschlangen beschränkter Kapazität oder mit einigen Warteschlangen unbeschränkter und einigen Warteschlangen beschränkter Kapazität sowie auf allgemeinere Jackson-Netze wie etwa Systeme mit Rückkopplungen (*feedback*). Auch hierzu bedarf es in Zukunft jeweils weiterer ausführlicher Untersuchungen.

Wir vermuten außerdem, daß die zugrundeliegenden Ideen grundsätzlich auch auf nicht-Markovsche Tandemsysteme anwendbar sind, und die Herleitung entsprechender Maßwechsel ist ein weiterer Gegenstand zukünftiger Forschung. Hierbei sind verschiedene Varianten für die Verteilungen der Zwischenankunfts- und Bedienzeiten des nach dem Maßwechsel resultierenden modifizierten Modells zu bedenken. Eine Variante besteht darin, die Verteilungsfamilie beizubehalten und lediglich Parameter zu verändern, also etwa die Erwartungswerte oder höhere Momente der Verteilungen zu verändern. Denkbar erscheint jedoch auch, das Modell in ein Markovsches Modell zu transformieren, wobei dann bei der Bildung der Likelihood-Quotienten beachtet werden muß, daß die Originalverteilung und die Importance-Sampling-Verteilung jeweils unterschiedlichen Typs sind. Schließlich soll die Anwendbarkeit der Maßwechselstrategien oder zumindest der zugrundeliegenden Ideen auf andere Größen als die Gesamtpopulation untersucht werden, beispielsweise Überläufe einzelner Stationen oder verschiedene stationäre Wahrscheinlichkeiten. Dabei sollen sowohl Markovsche Tandemsysteme als auch die genannten Verallgemeinerungen betrachtet werden.

Sicherlich ist neben der Erweiterung und Verallgemeinerung der Maßwechselstrategien auch erstrebenswert, theoretische Analysen zur Güte der Maßwechselstrategien durchzuführen, also zu untersuchen, inwieweit sie auf asymptotisch optimale Schätzer führen oder zumindest für die in den numerischen Beispielen betrachteten Größenordnungen der Wahrscheinlichkeiten effiziente Schätzer liefern. Die empirisch gezeigte Verbesserung gegenüber dem Maßwechsel von Parekh und Walrand soll also insbesondere für die kri-

tischen Parameterregionen analytisch belegt werden. Dazu wird angestrebt, analog zur Untersuchung des Maßwechsels von Parekh und Walrand in Glasserman und Kou [GK95] unter Verwendung der Theorie großer Abweichungen Parameterregionen zu identifizieren, in denen unsere Maßwechsel asymptotisch optimal oder zumindest effizienter als der von Parekh und Walrand sind.

5 Adaptive Importance Sampling

Die Schwierigkeiten, den optimalen IS-Schätzer oder Maßwechsel, einen zumindest asymptotisch optimalen oder wenigstens einen solchen, der große Varianzreduktion liefert, zu finden, motivieren den Ansatz, den Maßwechsel während der Simulation adaptiv zu verbessern. Adaptiv bedeutet anpassend oder auch lernend*, und ein adaptives Verfahren ist ein iteratives Verfahren, das basierend auf Zwischenergebnissen angepaßte verbesserte Ergebnisse produziert. Beim Importance Sampling soll so – zumindest für eine gegebene Klasse von Strategien – der optimale Maßwechsel „gelernt“ oder angenähert werden. Adaptive Importance Sampling basiert dabei darauf, daß innerhalb der Simulation die gesuchte Größe, die Varianz und/oder weitere Größen, die in Bezug zur Güte des Schätzers stehen, geschätzt werden können. Der Maßwechsel wird während der Simulation basierend auf den bereits durchgeführten Simulationsschritten angepaßt, um so den korrespondierenden Schätzer zu verbessern.

Eine Maßwechselstrategie ist typischerweise dadurch charakterisiert, daß Parameter des zugrundeliegenden Wahrscheinlichkeitsmaßes verändert werden. Dieses Wahrscheinlichkeitsmaß ist, insbesondere für mehrdimensionale Zufallsgrößen oder stochastische Prozesse, nicht nur von einem einzelnen oder einigen wenigen Parametern abhängig, sondern beschrieben durch eine ganze Reihe, einen Satz von Parametern, die verändert werden können. Dies sind beispielsweise bei Markovketten alle Übergangswahrscheinlichkeiten oder -raten, wobei das IS-Maß sogar durch eine noch größere Anzahl von Parametern als das Originalmaß bestimmt sein kann, wenn man etwa eine inhomogene Markovkette zur Importance-Sampling-Simulation einer homogenen Markovkette verwendet.

Es ist klar, daß eine solche Parametrisierung prinzipiell eine Einschränkung des Maßwechsels darstellt, in dem Sinne, daß die in Frage kommenden IS-Maße oder -Dichten auf eine parametrisierte Familie eingeschränkt werden, wie etwa auch bei der Skalierung, der Translation und dem exponentiellen Maßwechsel, siehe Abschnitt 3.3.5. Je nach Art der Parametrisierung kann also der optimale Maßwechsel oder sogar jeder asymptotisch optimale Maßwechsel dadurch ausgeschlossen werden, wie es bei den in 3.3.5 beschriebenen Strategien auch leider häufig der Fall ist. Somit kann man also auch beim adaptiven Importance Sampling nicht von einem allgemeinen Verfahren sprechen, das immer zum Erfolg führt. Die Optimierung, nach welchem Verfahren sie auch immer durchgeführt wird, erfolgt nur im eingeschränkten Rahmen der gewählten Parametrisierung. Dies ist jedoch kein spezifisches Problem adaptiver Strategien, es stellt sich ebenso bei anderen Varianten, und zudem ist das Konzept der Parametrisierung sehr flexibel. Grob gesprochen, je größer die Anzahl der Parameter, desto geringer ist die Einschränkung des Maßwechsels. Man denke zum Beispiel an den Unterschied zwischen zustandsabhängigen und -unabhängigen

*Die Begriffe *Adaption* und *Lernen* sind vor allem in der künstlichen Intelligenz und bei neuronalen Netzen üblich und weit verbreitet. Auch bei der Mustererkennung sind Methoden des überwachten und des unüberwachten Lernens (*supervised/unsupervised learning*) von großer Bedeutung.

gen Maßwechseln bei Warteschlangenmodellen oder an die oben angeführte Möglichkeit inhomogener Markovketten als IS-Maß für homogene Markovketten. Auch im Kontext von Tail-Wahrscheinlichkeiten ist die Freiheit beim Maßwechsel groß. Betrachten wir als einfachen Fall exponentiell verteilte reelle Zufallsvariablen. Die naheliegendste Familie für die IS-Dichte ist sicherlich die Familie der exponentiell verteilten Zufallsvariablen, also schlicht die Veränderung des einen Parameters, der die Exponentialverteilung beschreibt, was in diesem Fall sowohl der Translation als auch dem exponentiellen Maßwechsel entspricht, jedoch, wie wir in Abschnitt 3.3.3 gesehen haben, den optimalen Maßwechsel ausschließt. Weniger eingeschränkte Maßwechsel können hier grundsätzlich jede reelle Dichte erlauben, insbesondere auch solche, die von mehr als einem Parameter abhängen. Wir sehen also, daß eine geschickte, ausreichend allgemeine, möglichst viele Möglichkeiten umfassende Parametrisierung das Problem der Einschränkung des Maßwechsels erheblich mindern kann, allerdings selbstverständlich auf Kosten eines erhöhten Aufwands.

Die Güte einer Maßwechselstrategie und damit die Güte des korrespondierenden Schätzers hängt dann wesentlich von den konkret gewählten Parameterwerten für das IS-Maß oder die IS-Dichte ab. Optimale Parameter für eine Strategie sind dabei solche, die die Varianz für diese Strategie minimieren und somit den bestmöglichen Schätzer liefern. Die Minimierung der Varianz kann dabei sowohl direkt erfolgen als auch indirekt, indem ein der Varianz verwandtes Gütekriterium optimiert wird. Im Bereich der Optimierung wird üblicherweise von einer zu optimierenden Kostenfunktion oder Zielfunktion gesprochen.

Ist diese Zielfunktion exakt verfügbar, so können Methoden der Variationsrechnung angewendet werden. Ebenso kann ein exponentieller Maßwechsel optimiert werden, wenn Ratenfunktionen großer Abweichungen für das zu untersuchende System bekannt sind. In der Regel sind aber weder die Varianz oder andere Gütekriterien für IS-Schätzer noch Ratenfunktionen bekannt, und selbst, falls dies der Fall ist, ist das resultierende Optimierungsproblem für realistische Systeme analytisch oder numerisch meist nur sehr schwer oder gar nicht lösbar. Ein Ausweg ist die Optimierung von Schätzungen des Gütekriteriums, also etwa die Minimierung der Stichprobenvarianz des IS-Schätzers. Das bedeutet, beim adaptiven Importance Sampling werden mehrere Iterationen durchgeführt, wobei jede Iteration aus einer (großen) Anzahl von Simulationsläufen – unabhängige Replikationen, Batches oder regenerative Zyklen – besteht. Aus diesen Simulationsläufen werden dann sowohl die zu bestimmende Größe als auch die Gütekriterien geschätzt, basierend auf den Schätzungen werden die Parameter verändert, so, daß sie die Schätzung des Gütekriteriums optimieren, und mit diesen Parametern wird die nächste Iteration durchgeführt.

Die Veränderung der Parameter erfordert dabei natürlich einen Algorithmus, der gemäß der Schätzungen aus einer Iteration die neuen Parameter für die nächste Iteration berechnet. Ein solcher Algorithmus kann eine einfache Heuristik sein, von der man annimmt, daß sie den Schätzer sukzessive verbessert, oder eine systematische Optimierung der Stichprobenvarianz oder des verwandten Gütekriteriums. Dies ist typischerweise ein

mehrdimensionales nichtlineares Optimierungsproblem, wofür häufig stochastische Algorithmen eingesetzt werden. Es existieren viele verschiedene Optimierungsalgorithmen, die auf statistischen Schätzungen operieren, so etwa die klassischen Verfahren von Robbins und Monro [RM51] sowie Kiefer und Wolfowitz [KW52] und andere stochastische Optimierungsverfahren wie Simulated Annealing, stochastische Gradientenabstiegs- und Newtonverfahren. Man kann diese auf verschiedene Arten klassifizieren. Eine Unterscheidung ist die nach globalen und lokalen Optimierungsverfahren, also danach, ob globale oder eventuell nur lokale Optima bestimmt werden. Eine weitere Unterscheidung ist die nach Verfahren, die Ableitungen bzw. Gradienten einbeziehen, und solchen, in denen dies nicht der Fall ist. Für ausführliche Darstellungen stochastischer Optimierungsverfahren und Optimierung mittels Simulation verweisen wir auf die zahlreiche Literatur, insbesondere auf [And98, Duf97, Fu94, Gly89, KC78, Rub86, RSU96, RS93, Rub97, RM98]. Verfahren zur Schätzung von Ableitungen und Gradienten, insbesondere unter Verwendung von Likelihood-Quotienten, wie sie etwa auch bei der Sensitivitätsanalyse eingesetzt werden, sind daneben unter anderem in [Ecu90a, Gly90, Nak95] beschrieben.

Adaptives Importance Sampling bietet den offensichtlichen Vorteil, daß nicht vorab ein Maßwechsel gewählt werden muß, unter dem dann die gesamte Importance-Sampling-Simulation durchgeführt wird. Es ist potentiell allgemeiner anwendbar und nicht etwa auf spezielle Typen stochastischer Prozesse oder auf bestimmte Dichtefamilien zugeschnitten, das Prinzip ist unabhängig von der konkreten Problemstellung, und es ist prinzipiell kein spezielles Wissen über das konkrete zu untersuchende System erforderlich. Die adaptive Verbesserung erleichtert insbesondere auch die Anwendung von Importance Sampling durch Nichtexperten, da der Anwender den Maßwechsel, unter dem schließlich die Schätzung erfolgt, nicht selbst angeben muß. Die Vorteile des adaptiven Importance Sampling gehen auf Kosten eines zum Teil erheblichen Mehraufwands für die Simulation, da die eigentliche Schätzung der gesuchten Größe erst mit den zuvor simulativ bestimmten Maßwechselparametern erfolgt. Wie ganz allgemein bei iterativen Verfahren stellt sich auch hier die Frage nach der Konvergenz, nach der Wahl geeigneter Startwerte und Abbruchkriterien. Diese Punkte können je nach Art des zu untersuchenden Systems, der Parametrisierung, der Gütekriterien zur Bewertung der iterativen Schätzwerte und des verwendeten Optimierungsverfahrens sehr unterschiedlich sein. Zudem sind die gefundenen Parameter aufgrunddessen, daß die Optimierung auf Simulationen beruht, nur annähernd optimale Schätzungen, was jedoch bei hinreichend guten Schätzungen in Kauf zu nehmen ist. Für realistische Systeme ist meist eine analytische oder numerische Bestimmung eines geeigneten Maßwechsels nicht möglich, auch die Theorie großer Abweichungen ist dann nicht anwendbar. Vor allem in solchen Fällen ist adaptives Importance Sampling eine gute Alternative und stellt oft die einzige praktikable Möglichkeit dar.

Adaptive Importance-Sampling-Strategien unter Verwendung einfacher Heuristiken wurden Ende der 80er Jahre im Bereich der Sicherheit physikalischer Systeme zur Bestimmung von Fehlerraten mechanischer Strukturen entwickelt und dann auch bei der Berech-

nung hochdimensionaler Integrale [OB92, OB93] sowie zur Bestimmung kleiner Bitfehlerwahrscheinlichkeiten in digitalen Kommunikationskanälen eingesetzt [SR93]. Aktuellere Verfahren zur Bestimmung von Bitfehlerwahrscheinlichkeiten und Verfahren zur Bestimmung von Überlauf- oder Verlustwahrscheinlichkeiten in Warteschlangenmodellen, die wir in Abschnitt 5.3 vorstellen, verfolgen in der Regel den Ansatz der Minimierung der Stichprobenvarianz des IS-Schätzers, wobei stochastische Suchverfahren, Simulated Annealing, stochastische Gradientenabstiegs- oder Newtonverfahren eingesetzt werden [ADT93, DT93a, DT93b, DAT93, DAFT93, FDT94, FDAT96, RSN⁺00, Sri98, Sri02]. Eine Alternative wird in [OA91] vorgeschlagen. Hier wird die IS-Dichte adaptiv basierend auf einem Abstandsmaß für Wahrscheinlichkeitsverteilungen, der sogenannten f -Divergenz oder Ali-Silvey-Distanz, bestimmt, wobei leider eine ungeschickte Parametrisierung zum Ausschluß der optimalen IS-Dichte führt. Dieser konkrete Ansatz wurde nach unserem Wissen nicht weiter verfolgt, ist aber dennoch bemerkenswert, da die Verwendung eines Abstandsmaßes gerade die zentrale Idee bei der Cross-Entropy-Methode [Rub97, LR00, Kro02] ist, die in jüngster Zeit in diversen Anwendungsbereichen große Bedeutung erlangt hat, und die wir in Abschnitt 5.4 genauer beschreiben. In [OK00] werden adaptive Importance-Sampling-Verfahren zur Analyse sogenannter Bayes-Netze präsentiert, wobei stochastische Gradientenabstiegsverfahren sowohl zur direkten Varianzminimierung als auch zur Minimierung von Abstandsmaßen angewendet werden. Diese Arbeit ist besonders bemerkenswert, da als ein solches Abstandsmaß die Kullback-Leibler-Divergenz, also die Cross-Entropy, vorgeschlagen wird, jedoch eben gerade unter einer anderen Bezeichnung und offensichtlich ohne Kenntnis der entsprechenden Arbeiten, die die Bezeichnung Cross-Entropy verwenden[†].

5.1 Einfache heuristische Verfahren

Die ersten einfachen heuristischen adaptiven Importance-Sampling-Strategien wurden wie bereits erwähnt Ende der 80er Jahre im Bereich der Sicherheit physikalischer Systeme zur Bestimmung von Fehlerraten mechanischer Strukturen entwickelt und eingesetzt. Stadler und Roy [SR93] beschreiben und analysieren vier solche frühen Algorithmen und ihre Anwendung auf die Schätzung kleiner Bitfehlerwahrscheinlichkeiten in digitalen Kommunikationskanälen. Die allgemeine Problemstellung in diesem Kontext ist, daß empfangene Signale verfälscht oder verrauscht (*noisy*) sind. Diese Verfälschung ist typischerweise gemäß einer mehrdimensionalen reellen Dichte verteilt, häufig wird eine

[†]Wir sehen hier einen häufig zu beobachtenden Effekt, der nicht nur beim Importance Sampling sondern viel allgemeiner in der Forschung auftritt: verschiedene Disziplinen oder Zweige mit unterschiedlichen Anwendungsgebieten verwenden ohne voneinander Notiz zu nehmen ähnliche oder gar identische Techniken, meist aufgrund traditioneller Festlegungen oder historischer Entwicklungen unter abweichenden Bezeichnungen und Notationen. Leider sind oft die Grenzen zwischen den Anwendungsfeldern und den dort tätigen Forschern so starr, daß die eine Seite nicht weiß, was auf der jeweils anderen vor sich geht, und daß Entwicklungen parallel ablaufen und analoge Arbeiten doppelt gemacht werden.

Gaußsche Verfälschung (*Gaussian noise*) angenommen. Beim Importance Sampling wird dann gerade diese Dichte modifiziert, ist also die IS-Dichte.

Bei den in [SR93] beschriebenen Strategien wird nicht ein Gütekriterium für den IS-Schätzer direkt optimiert, sondern der Ansatz verfolgt, den Maßwechsel zu optimieren, indem adaptiv die optimale IS-Dichte approximiert wird. Dazu wird die Tatsache ausgenutzt, daß die optimale IS-Dichte für die Schätzung von Wahrscheinlichkeiten mittels des Erwartungswertes der Indikatorfunktion des interessierenden Ereignisses gerade die bedingte Dichte unter der Bedingung, daß das Ereignis eintritt, ist, siehe Abschnitt 3.3.3. Neben zwei nichtparametrischen Ansätzen, bei denen das Ziel ist, die gesamte optimale IS-Dichte ohne die Voraussetzung einer vorgegebenen Dichtefamilie zu schätzen, beschreiben Stadler und Roy auch zwei parametrische Ansätze, die beide auf der Translation basieren. Wir wollen die parametrischen Strategien kurz skizzieren und diskutieren; für Details sei auf [SR93] und die dort zitierten Originalarbeiten verwiesen. Betrachtet werden dabei jeweils mehrdimensionale reelle Dichten für die Verfälschung, wobei keine Gaußsche Verfälschung vorausgesetzt wird, die Originaldichte also nicht die einer Normalverteilung sein muß.

Die erste Strategie besteht darin, in der Iteration den bedingten Erwartungswert und die bedingten Kovarianzen unter der Bedingung, daß ein Fehler auftritt, zu schätzen, und dann als IS-Dichte für den nächsten Iterationsschritt die Dichte einer Normalverteilung mit diesen Schätzungen als Parameter zu wählen. Als Algorithmus ergibt sich das Schema

- 1) Wähle Anfangsvektor μ_{init} .
- 2) Verschiebe die Originaldichte so, daß der Erwartungswert μ_{init} ist, und simulierte mit dieser Dichte als IS-Dichte.
- 3) Schätze mittels der Beobachtungen, in denen Fehler aufgetreten sind, den bedingten Erwartungswert $\hat{\mu}$ und die Matrix \hat{K} der bedingten Kovarianzen.
- 4) Wähle die Dichte einer Normalverteilung mit Erwartungswert $\hat{\mu}$ und Kovarianzmatrix \hat{K} als IS-Dichte, simulierte und schätze so die Fehlerwahrscheinlichkeit \hat{p} .
- 5) Wiederhole 3) und 4) bis ein Abbruchkriterium erfüllt ist.

Es fällt bei der Betrachtung des Algorithmus sofort auf, daß schon die Wahl eines Anfangsvektors einen kritischen Punkt darstellt. Es muß gewährleistet sein, daß die dadurch bestimmte IS-Dichte, die durch einfache Translation der Originaldichte resultiert, ausreichend viele Fehler hervorruft, um die Schätzung des bedingten Erwartungswertes und der Matrix der bedingten Kovarianzen zu ermöglichen. In [SR93] bzw. der dort zitierten Originalarbeit wird hierzu eine Sensitivitätsanalyse vorgesehen, also bereits zur Wahl eines Startwertes ein erheblicher Aufwand in Kauf genommen. Ein weiterer kritischer Punkt ist

dann die Schätzung der bedingten Größen selbst. Stadler und Roy zeigen, daß zu ungenaue Schätzungen zur Divergenz des gesamten Algorithmus oder zur Konvergenz gegen eine vom optimalen Wert deutlich abweichende Lösung führt. Ein wesentlicher Nachteil des Algorithmus im Hinblick auf eine Verallgemeinerung ist die Einschränkung auf Normalverteilungen für die IS-Dichten in der Iteration. Diese Einschränkung läßt sich auch nicht einfach dadurch beheben, daß schlicht eine beliebige andere Verteilungsfamilie erlaubt wird, vielmehr stellt sie eine Grundlage für die Effektivität des Algorithmus dar, denn Normalverteilungen sind direkt durch die Parameter Erwartungswert und Kovarianzmatrix gegeben, und die Dichten lassen sich somit daraus leicht bestimmen. In allgemeineren Fällen lassen sich Dichten zu vorgegebenem Erwartungswert und Kovarianzen oder etwa auch Varianzen oft nicht auf einfache Weise bestimmen. Für das genannte Anwendungsgebiet zeigt sich, daß in vielen Fällen Normalverteilungen adäquat sind, zumal häufig auch wie erwähnt von Gaußschen Verfälschungen ausgegangen wird. Für andere Anwendungsgebiete gilt dies jedoch im allgemeinen nicht, insbesondere nicht für eine Verallgemeinerung auf stochastische Prozesse.

Die zweite Strategie ist eine Modifikation des Algorithmus, bei der gerade keine Kovarianzen (und auch keine Varianzen) betrachtet werden und an Stelle des bedingten Erwartungswertes der Modalwert tritt. Die IS-Dichte wird dann auch nicht gemäß einer Normalverteilung oder einer anderen vorgegebenen Verteilungsfamilie gewählt sondern lediglich im Rahmen der Familie der Originaldichte jeweils so verschoben, daß ihr Erwartungswert diesem zuvor geschätzten Modalwert entspricht. Die Intuition dahinter ist, daß die IS-Dichte um den Punkt in der Fehlerregion herum zentriert ist, an dem ein Fehler am wahrscheinlichsten ist. Es wird vorausgesetzt, daß der Modalwert eindeutig ist, was für Normalverteilungen und auch andere Verteilungen zutrifft. Die Schätzung der bedingten Größen wird also vermieden, stattdessen muß hier ein Optimierungsproblem gelöst werden. Die verwendete simple Heuristik, die IS-Dichte in Richtung der optimalen IS-Dichte zu verschieben, entspricht der Translation und ist wesentlich von der Einfachheit der Verschiebung abhängig. Für Normalverteilungen entspricht das auch dem exponentiellen Maßwechsel. Der Algorithmus realisiert damit also die adaptive Bestimmung von optimalen Translationsparametern und für Normalverteilungen auch des optimalen exponentiellen Maßwechsels. Eine Verallgemeinerung auf komplexere dynamische Systeme und stochastische Prozesse ist aber auch hier kaum möglich.

Es sei abschließend angemerkt, daß für Normalverteilungen zwar der Erwartungswert und der Modalwert identisch sind, dies für die bedingten Größen jedoch nur asymptotisch gilt. Somit sind also die von beiden Algorithmen berechneten Verschiebungsparameter auch in diesem Fall nicht notwendigerweise identisch.

5.2 Einheitliche Parametrisierung

Um in den folgenden Abschnitten fortgeschrittenere allgemeine parametrische adaptive Importance–Sampling–Verfahren darstellen zu können, müssen wir zunächst eine formale Beschreibung der Parametrisierung einführen, die unabhängig von einer konkreten Problemstellung ist. Wir fassen dazu die Parameter, die eine Maßwechselstrategie bestimmen, in einem Vektor zusammen. Einen solchen Parametervektor nennen wir auch *Maßwechselvektor*. Beim adaptiven Importance Sampling wird dann also iterativ der für die jeweils gewählte Art der Parametrisierung optimale Maßwechselvektor angenähert.

Bereits in Abschnitt 3.3.5 haben wir Strategien kennengelernt, die von nur einem oder wenigen Parametern bestimmt sind, ohne diese Parametrisierung in der Notation ausdrücken, da dies der Einfachheit wegen dort nicht notwendig ist. Für die im vorherigen Abschnitt beschriebenen Algorithmen besteht der Maßwechselvektor aus dem bedingten Erwartungswert und den Kovarianzen bzw. aus dem Modalwert. Wir geben nun die aus Abschnitt 3.3 bekannten Importance–Sampling–Formeln in einer adäquaten Notation für die Parametrisierung mit Maßwechselvektor ϑ aus einem *Parameterraum* $\Theta \subseteq \mathbb{R}^d, d \in \mathbb{N}$ an.

Sei X eine allgemeine Zufallsgröße[‡] mit Dichte f , und sei $\gamma = E[g(X)]$ der Erwartungswert für eine reelle Funktion g , der simulativ geschätzt werden soll. Die durch $\vartheta \in \Theta$ gegebene IS–Dichte bezeichnen wir mit $f^*(\cdot, \vartheta)$ und den Likelihood–Quotienten, der ebenfalls von ϑ abhängt, mit $L(\cdot, \vartheta)$, also

$$L(x, \vartheta) = \frac{f(x)}{f^*(x, \vartheta)}.$$

Schließlich bezeichne E_ϑ den Erwartungswert gemäß der Dichte $f^*(\cdot, \vartheta)$. Damit sind der IS–Schätzer und dessen Varianz für eine Stichprobe X_1, \dots, X_N gemäß $f^*(\cdot, \vartheta)$ gegeben durch (vgl. (3.10), (3.12) in Abschnitt 3.3.2)

$$\hat{\gamma}_{IS} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(X_i) L(X_i, \vartheta), \quad (5.1)$$

$$\text{VAR}[\hat{\gamma}_{IS}] = \frac{1}{N} E_\vartheta[g(X)^2 L(X, \vartheta)^2] - \gamma^2, \quad (5.2)$$

wobei dann die unbekannte Varianz geschätzt werden kann durch

$$\widehat{\text{VAR}}[\hat{\gamma}_{IS}] = \frac{1}{N-1} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(X_i)^2 L(X_i, \vartheta)^2 - \hat{\gamma}_{IS}^2 \right). \quad (5.3)$$

[‡]Dies beinhaltet wieder, wie schon zuvor, reelle Zufallsvariablen und -vektoren sowie stochastische Prozesse, und der Begriff der Dichte ist damit ebenfalls entsprechend allgemein zu interpretieren.

Ziel aller adaptiven Importance–Sampling–Strategien ist nun die Minimierung der Varianz des IS–Schätzers, sei es direkt oder indirekt durch die Minimierung einer verwandten Größe wie etwa der Cross–Entropy, deren Minimierung auch eine erhebliche Reduktion der Varianz zur Folge hat. Es sei jedoch bereits hier darauf hingewiesen, daß die Minimierung der Varianz und der Cross–Entropy nicht äquivalent sind. Ebenso ist klar, daß die jeweils zu minimierenden Zielfunktionen im allgemeinen nicht exakt sondern lediglich geschätzt verfügbar sind.

5.3 Direkte Varianzminimierung

Eine naheliegende allgemeine Methode zur adaptiven Bestimmung eines Maßwechsels besteht darin, die Varianz des IS–Schätzers über den möglichen Parameterwerten, also den möglichen Maßwechselvektoren aus dem Parameterraum Θ , direkt zu minimieren. Gesucht wird dabei der Maßwechselvektor $\vartheta^* \in \Theta$, für den im Rahmen der gewählten, durch Θ bestimmten Parametrisierung der IS–Schätzer minimale Varianz hat. Die zu minimierende Zielfunktion ist also $h : \Theta \rightarrow \mathbb{R}_+$ mit

$$h(\vartheta) = E_{\vartheta}[g(X)^2 L(X, \vartheta)^2] \quad (5.4)$$

$$= E[g(X)^2 L(X, \vartheta)], \quad (5.5)$$

und gesucht wird

$$\vartheta^* = \arg \min_{\vartheta \in \Theta} E_{\vartheta}[g(X)^2 L(X, \vartheta)^2] \quad (5.6)$$

$$= \arg \min_{\vartheta \in \Theta} E[g(X)^2 L(X, \vartheta)]. \quad (5.7)$$

Der Erwartungswert kann dabei simulativ mittels einer Stichprobe X_1, \dots, X_N gemäß $f^*(\cdot, \vartheta)$ durch das Stichprobenmittel

$$\hat{h}(\vartheta) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(X_i)^2 L(X_i, \vartheta)^2, \quad (5.8)$$

geschätzt werden, und es ergibt sich

$$\vartheta^* = \arg \min_{\vartheta \in \Theta} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(X_i)^2 L(X_i, \vartheta)^2 = \arg \min_{\vartheta \in \Theta} \sum_{i=1}^N g(X_i)^2 L(X_i, \vartheta)^2. \quad (5.9)$$

Es ist klar, daß die Konvergenzgeschwindigkeit und die Genauigkeit von Optimierungsverfahren stark von der Güte der Schätzungen, also der Realisierungen von \hat{h} abhängen. Eine

Alternative zu den oben angegebenen Minimierungen und Schätzern ergibt sich aus der folgenden einfachen Überlegung: \hat{h} ist erwartungstreu aber kein echter IS-Schätzer, denn er ist Schätzer für die Erwartungswerte in (5.4) und (5.5) unter Verwendung der Simulationsdichte $f^*(\cdot, \vartheta)$, die aus der Anforderung der Minimierung resultiert, nicht daraus, daß die Erwartungswerte mittels Importance Sampling geschätzt werden. Der von dieser Dichte abhängige Likelihood-Quotient ist Bestandteil der Funktion, deren Erwartungswert zu schätzen ist. Somit ist die Simulation unter Verwendung von \hat{h} zu interpretieren als Standard-Simulation für diese Erwartungswerte. Sollen diese nun mittels Importance Sampling geschätzt werden, so ist eine IS-Dichte $f^*(\cdot, \vartheta^{(1)})$ erforderlich, und wir erhalten durch einfache Umformungen

$$\begin{aligned}
E_{\vartheta}[g(X)^2 L(X, \vartheta)^2] &= \int g(x)^2 L(x, \vartheta)^2 f^*(x, \vartheta) dx \\
&= \int g(x)^2 L(x, \vartheta)^2 \frac{f^*(x, \vartheta)}{f^*(x, \vartheta^{(1)})} f^*(x, \vartheta^{(1)}) dx \\
&= \int g(x)^2 \frac{f(x)^2}{f^*(x, \vartheta)^2} \frac{f^*(x, \vartheta)}{f^*(x, \vartheta^{(1)})} f^*(x, \vartheta^{(1)}) dx \\
&= \int g(x)^2 \frac{f(x)}{f^*(x, \vartheta)} \frac{f(x)}{f^*(x, \vartheta^{(1)})} f^*(x, \vartheta^{(1)}) dx \\
&= \int g(x)^2 L(x, \vartheta) L(x, \vartheta^{(1)}) f^*(x, \vartheta^{(1)}) dx \\
&= E_{\vartheta^{(1)}}[g(X)^2 L(X, \vartheta) L(X, \vartheta^{(1)})],
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E[g(X)^2 L(X, \vartheta)] &= \int g(x)^2 L(x, \vartheta) f(x) dx \\
&= \int g(x)^2 L(x, \vartheta)^2 \frac{f(x)}{f^*(x, \vartheta^{(1)})} f^*(x, \vartheta^{(1)}) dx \\
&= E_{\vartheta^{(1)}}[g(X)^2 L(X, \vartheta) L(X, \vartheta^{(1)})].
\end{aligned}$$

Somit kann die Varianzminimierung also umgeformt werden zu

$$\vartheta^* = \arg \min_{\vartheta \in \Theta} E_{\vartheta^{(1)}}[g(X)^2 L(X, \vartheta) L(X, \vartheta^{(1)})], \quad (5.10)$$

und mit dem Stichprobenmittel für X_1, \dots, X_N gemäß der IS-Dichte $f^*(\cdot, \vartheta^{(1)})$ ergibt sich

$$\vartheta^* = \arg \min_{\vartheta \in \Theta} \sum_{i=1}^N g(X_i) L(X_i, \vartheta) L(X_i, \vartheta^{(1)}). \quad (5.11)$$

Es sind dabei nun zwei Likelihood-Quotienten aus unterschiedlichen Gründen enthalten. Während $L(X_i, \vartheta^{(1)})$ den üblichen Korrekturfaktor beim Importance Sampling beschreibt, ist $L(X_i, \vartheta)$ Teil der zu minimierenden Zielfunktion.

In der Regel ist die beschriebene Minimierung extrem aufwendig. Da $L(X, \vartheta)$ im allgemeinen eine komplizierte Funktion ist, resultiert auch für einfache Funktionen g , selbst für Indikatorfunktionen, typischerweise ein nichtlineares Optimierungsproblem, das mit numerischen Verfahren gelöst werden muß. Dies kann zeitaufwendiger als die eigentliche Simulation, in gewissen Fällen jedoch erfolgversprechend sein. Wir wollen im folgenden einige bedeutende Ansätze für Warteschlangenmodelle beschreiben, die in diesem Bereich als Pionierarbeiten gelten.

Adaptives Importance Sampling ist noch verhältnismäßig jung und anfangs vor allem für die zuvor beschriebenen Problemstellungen entwickelt worden. Im Bereich der Analyse von Warteschlangenmodellen gibt es bisher relativ wenige Anwendungen adaptiver Methoden. Eine Serie von Arbeiten von Al-Qaq, Devetsikiotis, Freebersyser und Townsend [ADT93, DT93a, DT93b, DAT93, DAFT93, FDT94, FDAT96] beinhaltet neben weiteren Anwendungen für Bitfehlerwahrscheinlichkeiten die ersten adaptiven Importance-Sampling-Strategien zur Bestimmung kleiner Überlaufwahrscheinlichkeiten in Warteschlangenmodellen für Computer- und Kommunikationssysteme, wobei jeweils die geschätzte Varianz des IS-Schätzers minimiert wird.

In [DT93a] wird eine stochastische Suche entlang einer Richtung im Parameterraum beschrieben, um Überlaufwahrscheinlichkeiten zu bestimmen, wobei jedoch die Anwendungsmöglichkeiten sehr stark eingeschränkt sind. Die erste prinzipiell allgemeine Anwendung auf Warteschlangenmodelle wird in [DT93b] präsentiert. Dort wird eine Kombination mit einer dynamischen regenerativen Importance-Sampling-Simulation für Überlaufwahrscheinlichkeiten in elementaren Warteschlangenmodellen von ATM-Switches, konkret für die Modelle M/M/1/K, M/D/1/K, G/D/1/K, Geo/Geo/1/K sowie zwei Modelle mit Bernoullischen Ankunfts- bzw. Bedienprozessen, vorgeschlagen. Dabei ist jeder Simulationslauf ein regenerativer Zyklus mit dem leeren System als Regenerationszustand. Anfangs werden Parameter, in diesem Fall zustandsunabhängige Ankunfts- und Bedienraten, so gewählt, daß das System instabil wird, also eine Auslastung $\rho^* > 1$ hat. Wenn eine gewisse Anzahl von Überläufen aufgetreten ist, werden die Parameter erneut verändert, um eine schnelle Rückkehr in den Regenerationszustand zu gewährleisten, der unter den veränderten Parameterwerten selten ist. Anders als beim bereits früher erwähnten klassischen Switch wird dies hier im allgemeinen nicht durch einfaches „Abschalten“ des Importance Sampling, also Simulation des Originalmodells, erreicht, sondern durch eine Veränderung so, daß die Auslastung des Systems $\rho^* < \rho$ oder zumindest $\rho^* < 1$ ist, wobei ρ die Auslastung des Originalsystems bezeichnet. Ein weiterer Unterschied zum klassischen Switch besteht darin, daß nicht schon nach dem ersten Auftreten des seltenen Ereignisses umgeschaltet wird, sondern erst nach Auftreten einer größeren Anzahl. Die

Autoren sprechen von zwei Phasen des regenerativen Zyklus, der effizienten Schätzung (*efficient estimation*) und der beschleunigten Regeneration (*accelerated regeneration*). Die beschleunigte Regeneration bewirkt zwar kürzere Zyklen, erfordert aber auch weitere notwendige Festlegungen für die Parameter dieser Phase, und die Autoren experimentieren zusätzlich auch mit der klassischen Switch-Variante. Ebenso ist eine zusätzliche Entscheidung notwendig, nach wievielen Überläufen umgeschaltet wird. Dazu betrachten die Autoren den „Beitrag“ den ein neuer Überlauf noch zur Schätzung liefert, ob sich die Schätzung dadurch noch relevant verändert.

Jede Iteration der adaptiven Verbesserung der Parameter besteht nun also aus einer Reihe von solchen regenerativen Zyklen. Die Minimierung der so geschätzten Varianz erfolgt dann mittels einer Variante des Simulated Annealing [AK89], dem sogenannten Mean Field Annealing. Der Vorteil des Annealing besteht vor allem darin, daß es eine globale Optimierungsmethode ist, also das ungewünschte „Festgehaltenwerden“ in lokalen Optima vermieden wird. Andererseits konvergieren Annealing-Verfahren insbesondere für hohe Dimension des Parameterraums, also gerade auch für realistische Warteschlangennetze, potentiell sehr langsam. Eine Alternative kann dann eine „gerichtete“ Suche unter Verwendung von Ableitungen sein. Für elementare Einbedienersysteme ist in [DAFT93] eine Variante mittels stochastischen Gradientenabstiegs beschrieben. Die Anwendung der Methode auf Tandemsysteme schließlich ist in [FDT94] und [FDAT96] beschrieben, wobei in [FDT94] Tandemsysteme mit deterministischen Bedienzeiten und in [FDAT96] Tandemsysteme mit geometrisch verteilten Bedienzeiten untersucht werden. Das Umschalten während der regenerativen Zyklen wird jeweils wie zuvor beschrieben durchgeführt, die Minimierung der geschätzten Varianz erfolgt mittels stochastischen Gradientenabstiegs.

5.4 Die Cross-Entropy-Methode

Ein in den letzten Jahren immer häufiger angewendeter adaptiver Ansatz des Importance Sampling ist die Cross-Entropy-Methode. Die Idee dabei besteht darin, anstatt einen Maßwechselvektor ϑ so zu bestimmen, daß die Varianz explizit minimiert wird, ein Maß für den Abstand zwischen der optimalen IS-Verteilung und der durch ϑ gegebenen Verteilung zu minimieren. Als solches Maß wird gerade die Cross-Entropy gewählt.

Die Cross-Entropy Methode wurde von Rubinstein [Rub97] sowie Lieber und Rubinstein [LR97] als eine adaptive Importance-Sampling-Methode zur Schätzung von Wahrscheinlichkeiten seltener Ereignisse entwickelt, sie ist jedoch nicht auf diese Anwendung beschränkt. Es hat sich schnell herausgestellt, daß sie auch als Optimierungsverfahren eingesetzt werden kann, um schwierige kombinatorische Optimierungsprobleme zu lösen [Rub99a, Rub99b, Rub01a, Rub01b, Rub02]. Dabei wird gegebenenfalls ein deterministisches in ein verwandtes stochastisches Optimierungsproblem übersetzt und dann wie bei der Simulation seltener Ereignisse mittels Importance Sampling verfahren. In der Tat

ist in den letzten Jahren die Simulation seltener Ereignisse nur noch eine von vielen Anwendungen der Cross-Entropy-Methode und nicht zufällig hat der seit dem Jahr 1997 regelmäßig stattfindende Workshop zur Simulation seltener Ereignisse *RESIM* seit dem Jahr 2002 die Erweiterung um kombinatorische Optimierungsprobleme *RESIM/COP* erfahren, um die Anwendungen aus den unterschiedlichsten Bereichen auch hier präsentieren zu können. Wir wollen auf eine vollständige Aufzählung von Anwendungsbereichen und aktuellen Arbeiten verzichten, da sie den Rahmen der Arbeit sprengen würde, und verweisen auf ein regelmäßig aktualisiertes Tutorial [dBKMR03] und insbesondere darauf, daß für das Jahr 2004 die Erscheinung eines Buches [RK04] über die Cross-Entropy-Methode angekündigt ist.

Wie bereits erwähnt, wird bei der Cross-Entropy-Methode nicht direkt die Varianz von Schätzern minimiert, sondern die relative Entropie, also die Cross-Entropy, als Abstandsmaß für die Differenz der optimalen und der aktuell verwendeten Importance-Sampling-Verteilung. Es werden Iterationen durchgeführt, wobei jede Iteration in zwei Phasen zerlegt werden kann: die Erzeugung von zufälligen Realisierungen gemäß eines spezifizierten Verfahrens und die Aktualisierung der Parameter dieses Verfahrens basierend auf den zuvor erzeugten Daten, um in der nächsten Iteration „bessere“ Daten zu erhalten. Wir wollen die Methode im folgenden formal beschreiben, zunächst allgemein und in 5.4.1 die Anwendung auf Markovketten, wobei wir insbesondere auch kritisch die Einschränkungen und Probleme erläutern. Schließlich zeigen wir in 5.4.2, wie die Cross-Entropy-Methode auf Transitionsklassenmodelle angewandt werden kann.

Für die optimale IS-Dichte zur Schätzung von $\gamma = E[g(X)]$ gilt (vgl. (3.13) in Abschnitt 3.3.3)

$$f_{opt}^*(x) = \frac{g(x)f(x)}{\gamma}.$$

Sei nun wieder $f^*(\cdot, \vartheta)$ eine durch $\vartheta \in \Theta$ gegebene IS-Dichte. Dann ist die Cross-Entropy zwischen f_{opt}^* und $f(\cdot, \vartheta)$, also

$$\begin{aligned} H(f_{opt}^* | f(\cdot, \vartheta)) &= \int f_{opt}^*(x) \ln \frac{f_{opt}^*(x)}{f^*(x, \vartheta)} dx \\ &= E_{f_{opt}^*} \left[\ln \frac{f_{opt}^*(X)}{f^*(X, \vartheta)} \right] \\ &= E_{f_{opt}^*} \left[\ln \frac{g(X)f(X)}{\gamma f^*(X, \vartheta)} \right], \end{aligned}$$

die zu minimierende Zielfunktion. Es bezeichne $\vartheta^* \in \Theta$ den Maßwechselvektor, für den

die Cross-Entropy minimal ist. Dann ergibt sich das Minimierungsproblem

$$\vartheta^* = \arg \min_{\vartheta} \int \frac{1}{\gamma} g(x) f(x) \ln \frac{g(x) f(x)}{\gamma f^*(x, \vartheta)} dx \quad (5.12)$$

$$= \arg \max_{\vartheta} \int g(x) f(x) \ln f^*(x, \vartheta) dx \quad (5.13)$$

$$= \arg \max_{\vartheta} E_f [g(X) \ln f^*(X, \vartheta)] \quad (5.14)$$

$$= \arg \max_{\vartheta} E_{\vartheta^{(j)}} [g(X) L(X, \vartheta^{(j)}) \ln f^*(X, \vartheta)], \quad (5.15)$$

wobei $\vartheta^{(j)}$ ein im Rahmen der vorgegebenen Parametrisierung beliebiger fester Maßwechselfektor ist. Interpretiert man nun diesen Vektor $\vartheta^{(j)}$ als den j -ten Vektor in einer Iteration und schätzt den Erwartungswert, so erhält man zur Approximation von ϑ^* die Iteration

$$\vartheta^{(j+1)} = \arg \max_{\vartheta} \sum_{i=1}^N g(X_i) L(X_i, \vartheta^{(j)}) \ln f^*(X_i, \vartheta), \quad (5.16)$$

wobei die X_i Stichproben gemäß $f^*(\cdot, \vartheta^{(j)})$ sind. Damit ergibt sich ein iterativer Algorithmus (siehe Abbildung 5.1) zur Approximation von ϑ^* , so, daß die Cross-Entropy minimiert wird. Es sei darauf hingewiesen, daß im allgemeinen die Minimierung der Cross-Entropy nicht äquivalent zur Minimierung der Varianz des IS-Schätzers ist, auch wenn sich bei der praktischen Umsetzung häufig herausstellt, daß der Unterschied gering ist.

```

j := 1; (* Iteration counter *)
ϑ(1) := Initial vector;
repeat
  j := j + 1;
  Simulate N replications with ϑj;
  Compute x1, . . . , xN;
  Compute ϑ(j+1) according to (5.16);
until iteration has converged;

```

Abbildung 5.1: Algorithmus der Cross-Entropy-Methode

Wie allgemein bei Iterationen stellt sich natürlich auch hier die Frage nach der Konvergenz. In [dB00] sind Beispiele angegeben, in denen die Iteration offensichtlich gegen schlechte Parameterwerte konvergiert, also einen schlechten Maßwechsels liefert sowie Beispiele, in denen die Iteration gar nicht oder wenn, dann nur extrem langsam konvergiert. In vielen Fällen läßt sich jedoch empirisch feststellen, daß die Iteration verhältnismäßig

schnell gegen Parameter konvergiert, die erhebliche Varianzreduktion liefern, und daher erfreut sich die Cross-Entropy-Methode derzeit einer großen Beliebtheit. Genauere Untersuchungen der Konvergenzeigenschaften sind neben der Anwendung der Methode auf immer neue Problemstellungen Gegenstand der aktuellen Forschung. Einige Schwierigkeiten lassen sich anhand des angegebenen Algorithmus und der sich daraus ergebenden Probleme erläutern.

Ein Problem stellt hierbei die Wahl des Anfangs-Maßwechselvektors dar. Die naheliegendste Wahl, Start mit einer Simulation ohne Importance Sampling, führt in der Regel dazu, daß das seltene Ereignis nicht auftritt und (5.16) nicht durchführbar ist. Es muß also gewährleistet werden, daß bereits unter dem Anfangs-Maßwechsel das seltene Ereignis auftritt. In der Regel wird der Anfangsvektor heuristisch gewählt. Alternativ kann wie in [Rub99b] und [dB00] ein zusätzlicher Schritt im Algorithmus eingebaut werden, wobei das seltene Ereignis anfangs in ein weniger seltenes Ereignis transformiert wird. Für Überlaufwahrscheinlichkeiten in Warteschlangenmodellen kann dies etwa durch Verkleinerung der Puffer geschehen. Diese Vorgehensweise erfordert allerdings eine gute Kenntnis der Art des Auftretens des seltenen Ereignisses und bedeutet einen sehr speziellen Zuschnitt auf ein bestimmtes Problem.

Ein weiteres Problem stellt die Form des Maßwechselvektors ϑ dar. Je komplexer ϑ ist, also je mehr Komponenten ϑ hat, desto aufwendiger wird die Maximierung in (5.16). Allgemein bedeutet die Parametrisierung mit ϑ die Einschränkung des Maßwechsels auf eine bestimmte Familie von Verteilungen, ähnlich wie dies bei der Skalierung, der Translation, dem exponentiellen Maßwechsel und den in 5.1 beschriebenen Heuristiken sowie der direkten Varianzminimierung der Fall ist. Diese Einschränkung kann zum Teil erheblich sein. Somit ist also für viele Systeme ein weniger eingeschränkter Maßwechsel und damit ein komplexer Maßwechselvektor notwendig.

5.4.1 Anwendung auf Markovketten

Die Anwendung der Cross-Entropy-Methode auf homogene Markovketten formuliert erstmals Pieter-Tjerk de Boer in seiner Dissertation [dB00], siehe auch [dBNR00]. Er geht dabei davon aus, daß diese Markovkette einem Markovschen Warteschlangennetz zugrundeliegt und die eingebettete diskrete Markovkette der zu dem Warteschlangennetz korrespondierenden stetigen Markovkette ist. Simulativ zu schätzen ist jeweils die Wahrscheinlichkeit eines Überlaufs des Systems während eines *busy cycle*, also ausgehend vom Zustand nach der Ankunft des ersten Kunden, die Wahrscheinlichkeit eines Überlaufs bevor das System leer ist. Dabei startet jeder Simulationslauf im selben Zustand und endet, wenn einer der absorbierenden Zustände „Überlauf“ oder „System leer“ erreicht wird. Es ist klar, daß dies keine regenerative Simulation und keine Simulation stationärer Überlaufwahrscheinlichkeiten ist, vielmehr werden wieder einmal nur Arbeitsphasen und

Absorptionswahrscheinlichkeiten betrachtet, von denen wir bereits in den Abschnitten 4.2 und 4.3 gesehen haben, daß sie Importance Sampling wesentlich vereinfachen. Als Maßwechselstrategien betrachtet de Boer auf der Warteschlangenebene sowohl zustandsunabhängige als auch zustandsabhängige Maßwechsel.

Ein zustandsabhängiger Maßwechsel für Markovsche Warteschlangennetze entspricht auf der Markovkettenebene einem Maßwechsel, bei dem alle Übergangswahrscheinlichkeiten oder -raten auf verschiedene Art verändert werden können. Die Einschränkung, die hier durch die notwendige Parametrisierung gemacht wird, ist, daß das IS-Maß wiederum eine homogene diskrete Markovkette ist. Wir haben in 4.2.4 gesehen, daß dies für die betrachteten Absorptionswahrscheinlichkeiten den optimalen IS-Schätzer nicht ausschließt; für Leistungsmaße über endlichem Horizont, stationäre Zustandswahrscheinlichkeiten oder allgemeinere stationäre Leistungsmaße dagegen sehr wohl (vgl. 4.2.5 und 4.2.6). Selbst bei der Einschränkung auf homogene diskrete Markovketten als IS-Maß ist jedoch bei einem zustandsabhängigen Maßwechsel jede Übergangsrate bzw. -wahrscheinlichkeit ein Parameter, der den Maßwechsel bestimmt, und damit eine Komponente des Maßwechselvektors. Der Maßwechselvektor besteht also aus allen Übergangswahrscheinlichkeiten oder -raten der Markovkette. Es wird sofort klar, daß dies ein potentiell Problem darstellt, wie wir tatsächlich später sehen werden. Es liegt also auf der Hand, daß eine noch allgemeinere Anwendung der Cross-Entropy-Methode, die etwa inhomogene Markovketten oder nicht-Markovsche Prozesse als IS-Maß erlauben würde, nicht mehr praktikabel ist. Für Leistungsmaße über endlichem Horizont und stationäre Leistungsmaße kann also unter Umständen die Cross-Entropy wegen der angeführten Gründe nicht zu effizienten Schätzern führen.

Weniger aufwendig in Bezug auf die Anzahl der den Maßwechsel bestimmenden Parameter, also die Größe des Maßwechselvektors, sind zustandsunabhängige Maßwechsel. Für Warteschlangennetze werden dabei alle Raten, wie etwa Ankunfts- und Bedienraten, die gleich sind, auf die gleiche Weise verändert. Auch wenn für viele Probleme vermutlich kein asymptotisch optimaler zustandsunabhängiger Maßwechsel existiert und auch in [dB00] Beispiele präsentiert werden, in denen die Cross-Entropy-Methode bei zustandsunabhängigen Maßwechseln gar nicht oder gegen offensichtlich schlechte Parameter konvergiert, so gibt es doch diverse Fälle, in denen gute Ergebnisse erzielt werden. Es lohnt sich also sicher, auch zustandsunabhängige Maßwechsel zu betrachten. Um diese auf der Markovkettenebene zu formulieren, muß eine hochgradig strukturierte Form der Markovkette vorliegen, wie sie typischerweise aber bei Markovketten, die Warteschlangennetzen zugrundeliegen, gegeben ist. Dazu klassifiziert de Boer Übergänge der Markovkette gemäß der Art des Übergangs im Warteschlangennetz. Wir wollen dies hier nicht ausführen, sondern nur in 5.4.2 bei der Anwendung der Cross-Entropy-Methode auf Transitionsklassenmodelle, da die Formulierung zustandsunabhängiger Maßwechsel wesentlich einfacher und kompakter für Transitionsklassenmodelle erfolgen kann. Daher beschränken wir uns für Markovketten in der üblichen Darstellung auf zustandsabhängige Maßwechsel.

Wir orientieren uns an den Darstellungen in [dB00] und [dBNR00], weichen jedoch mit einigen Bezeichnern davon ab, um mit unserer durchgängig in dieser Arbeit verwendeten Notation konsistent zu bleiben.

Eine homogene diskrete Markovkette mit Zustandsraum \mathcal{S} ist vollständig beschrieben durch ihre Übergangsmatrix und eine Anfangsverteilung. Da viele diskrete Markovketten aus stetigen Markovketten abgeleitet werden, etwa auch für Warteschlangennetze mit exponentiell verteilten Zwischenankunfts- und Bedienzeiten, werden häufig auch die Übergangswahrscheinlichkeiten der zugrundeliegenden diskreten Markovkette aus den Übergangsraten der stetigen Markovkette berechnet. Für die Herleitung der Cross-Entropy-Formeln für Markovketten hat sich herausgestellt, daß es leichter ist, mit Übergangsraten zu arbeiten, da dies die permanente Berücksichtigung der Bedingung, daß sich Wahrscheinlichkeiten zu Eins summieren müssen, vermeidet. In den genannten Arbeiten werden daher zunächst Übergangsraten einer stetigen Markovkette betrachtet. Wenn tatsächlich Übergangswahrscheinlichkeiten benötigt werden, etwa um die Simulation durchzuführen, können diese leicht durch Normalisierung der Summe aller Raten aus einem Zustand zu Eins berechnet werden, siehe auch Anhang A.2. Ist $\mathbf{Q} = (q_{ij})_{i,j \in \mathcal{S}}$ die Generatormatrix einer homogenen stetigen Markovkette mit Zustandsraum \mathcal{S} , dann lassen sich die Wahrscheinlichkeiten von Pfaden der diskreten Markovkette mittels

$$P\{X_1 = x_1, X_2 = x_2, \dots, X_K = x_K\} = \prod_{i=1}^{K-1} \frac{q_{x_i x_{i+1}}}{\sum_{k \in \mathcal{S}, k \neq x_i} q_{x_i k}}$$

berechnen. Bei der Cross-Entropy-Methode wird nun, wie bereits erwähnt, aufgrund der allgemein notwendigen Einschränkung bei Parametrisierungen ein Importance-Sampling-Maß im Bereich der homogenen Markovketten gesucht. Der Maßwechselvektor ϑ besteht in diesem Fall aus allen Übergangsraten der Markovkette, wir können also auch von einer Maßwechselmatrix $\vartheta = (\vartheta_{ij})_{i,j \in \mathcal{S}}$ sprechen.

Sei $\vartheta^* = (\vartheta_{ij}^*)_{i,j \in \mathcal{S}}$ die optimale Generatormatrix, also die Generatormatrix, die die Cross-Entropy minimiert. Diese ist wie üblich nicht zu verwechseln mit dem optimalen, eine Varianz von Null liefernden IS-Maß, denn es werden hier mit dieser Parametrisierung nur Markovketten als IS-Maß betrachtet. Es bezeichne $I_{R(X)}$ die Indikatorfunktion des zu untersuchenden seltenen Ereignis in einem Pfad $X = (X_1, \dots, X_K)$ der Markovkette. Dann folgt für die optimale Generatormatrix analog zu den allgemeinen Formeln der Cross-Entropy-Methode

$$\vartheta^* = \arg \max_{\vartheta} E \left[I_{R(X)} \ln \prod_i \frac{\vartheta_{x_i x_{i+1}}}{\sum_{k \in \mathcal{S}, k \neq x_i} \vartheta_{x_i k}} \right] \quad (5.17)$$

$$= \arg \max_{\vartheta} E \left[I_{R(X)} \sum_i \left(\ln \vartheta_{x_i x_{i+1}} - \ln \sum_{k \in \mathcal{S}, k \neq x_i} \vartheta_{x_i k} \right) \right]. \quad (5.18)$$

Um das Maximum zu finden, wird die Ableitung bezüglich $\vartheta_{\ell m}$ für alle Zustände ℓ, m auf Null gesetzt, also

$$E \left[I_{R(X)} \sum_{i:x_i=\ell} \left(\frac{I_{\{x_{i+1}=m\}}}{\vartheta_{\ell m}} - \frac{1}{\sum_{k \neq \ell} \vartheta_{\ell k}} \right) \right] = 0, \quad (5.19)$$

also

$$\frac{1}{\vartheta_{\ell m}^*} E \left[I_{R(X)} \sum_{i:x_i=\ell} I_{\{x_{i+1}=m\}} \right] = \frac{1}{\sum_{k \neq \ell} \vartheta_{\ell k}^*} E \left[I_{R(X)} \sum_{i:x_i=\ell} 1 \right]. \quad (5.20)$$

Für die optimalen Übergangswahrscheinlichkeiten der eigentlich betrachteten diskreten Markovkette gilt somit

$$p_{\ell m}^* = \frac{\vartheta_{\ell m}^*}{\sum_{k \in \mathcal{S}, k \neq m} \vartheta_{\ell m}^*} \quad (5.21)$$

$$= \frac{E \left[I_{R(X)} \sum_{i:x_i=\ell} I_{\{x_{i+1}=m\}} \right]}{E \left[I_{R(X)} \sum_{i:x_i=\ell} 1 \right]}. \quad (5.22)$$

Die im allgemeinen unbekanntenen Erwartungswerte werden dann schließlich approximiert durch

$$p_{\ell m}^* = \frac{E_{\vartheta^{(j)}} \left[I_{R(X)} L(X, \vartheta^{(j)}) \sum_{i:x_i=\ell} I_{\{x_{i+1}=m\}} \right]}{E_{\vartheta^{(j)}} \left[I_{R(X)} L(X, \vartheta^{(j)}) \sum_{i:x_i=\ell} 1 \right]} \quad (5.23)$$

$$\approx \frac{\sum_{X=X_1}^{X_N} I_{R(X)} L(X, \vartheta^{(j)}) \sum_{i:x_i=\ell} I_{\{x_{i+1}=m\}}}{\sum_{X=X_1}^{X_N} I_{R(X)} L(X, \vartheta^{(j)}) \sum_{i:x_i=\ell} 1}. \quad (5.24)$$

Die beschriebene Anwendung der Cross-Entropy auf Markovketten, also die Verwendung von (5.24), erscheint auf den ersten Blick recht einfach, es ergeben sich jedoch erhebliche Probleme bei der praktischen Durchführung. Diese werden hervorgerufen durch den bekannten Effekt der Zustandsraumexplosion, also der enormen Anzahl von Zuständen etwa

eines realistisch dimensionierten Warteschlangennetzes, dem die Markovkette zugrundeliegt. Insbesondere kann der Zustandsraum unendlich sein, wenn Warteschlangen unendlicher Kapazität enthalten sind. Eine Folge davon ist, daß eine große Menge von Daten gespeichert werden muß und somit die Speicherkapazität selbst bei heutigen Rechnern zu gering sein kann. Zudem kann unter Umständen auch die Bearbeitung solch großer Datenmengen sehr rechenzeitaufwendig sein. Das Problem der Zustandsraumexplosion stellt sich nicht speziell bei der Cross-Entropy-Methode, sondern ist vielmehr ein allgemeines Problem, wie wir bereits in der Einleitung erläutert haben. Bei der Cross-Entropy-Methode treten jedoch aufgrund großer Zustandsräume weitere spezifische Schwierigkeiten auf. Im Gegensatz zum allgemeinen Vorteil der Simulation gegenüber analytischen und numerischen Verfahren, daß der Zustandsraum nicht a priori vollständig generiert und gespeichert werden muß, nutzt die Cross-Entropy-Methode gerade Informationen über alle Zustände aus.

Ein ernstes Problem stellt die Schätzung der Erwartungswerte dar. Die einzigen Pfade, die einen Beitrag zu den Summen in Zähler und Nenner von (5.24) liefern, sind, aufgrund der Indikatorfunktion als Faktor, die Pfade, die das seltene Ereignis enthalten, und, aufgrund der Summation über i mit $x_i = \ell$, die Pfade, die zusätzlich den Zustand ℓ enthalten. Das notwendige Auftreten des seltenen Ereignis wird dabei typischerweise gerade durch das Importance Sampling gelöst. Der Maßwechsel soll ja gerade so sein, daß das seltene Ereignis häufiger auftritt. Dies muß aber bereits zu Beginn durch einen geeigneten Anfangsmaßwechselvektor gewährleistet sein. Dessen Wahl ist also ein wesentlicher Bestandteil der Cross-Entropy-Methode und nicht etwa, wie in vielen Iterationsverfahren, lediglich in Bezug auf eine schnellere Konvergenz bedeutend. Auch bei einem Anfangsmaßwechsel, der das seltene Ereignis häufiger hervorruft, besteht ein weiteres Problem. Ein solcher Maßwechsel bewirkt nämlich üblicherweise keine häufigeren Besuche in Zuständen, die nicht gerade auf einem typischen Pfad zum seltenen Ereignis liegen. Insbesondere für mehrdimensionale Zustandsräume bedeutet dies, daß viele Zustände nur sehr selten oder gar nicht besucht werden, selbst unter einem Maßwechsel, der das zu untersuchende seltene Ereignis häufiger hervorruft. Zustände, die während der N Simulationsläufe nie besucht werden, liefern einen undefinierten Quotienten $0/0$ in der Approximation, und Zustände, die sehr selten besucht werden, bewirken, daß der Quotient der Summen eine schlechte Approximation des Quotienten der Erwartungswerte ist.

Hierbei besteht eine fundamentale Gefahr: wenn gemäß des Wahrscheinlichkeitsmaßes ein Übergang von einem Zustand ℓ in einen Zustand m nur nach einem kleinen Bruchteil der Besuche in ℓ stattfindet und der Zustand ℓ zudem während der Simulation nur selten besucht wird, so ist die Wahrscheinlichkeit relativ groß, daß bei keinem der wenigen Besuche in ℓ anschließend auch ein Übergang nach m generiert wird. Damit wird gemäß (5.24) die Übergangswahrscheinlichkeit $p_{\ell m}^* = 0$ gesetzt, der Übergang wird also in der nächsten Iteration unmöglich und bleibt in allen folgenden Iterationen unmöglich. Nach den allgemeinen Importance-Sampling-Formeln müssen jedoch alle Pfade, die das seltene

Ereignis enthalten, möglich bleiben, also insbesondere auch jeder Übergang auf solchen Pfaden. Wird dies verletzt, so ist die Eigenschaft der Erwartungstreue des IS-Schätzers nicht mehr gegeben. Der einzige Fall, in dem der beschriebene Effekt nicht zu verzerrten IS-Schätzern führt, ist der, wenn das seltene Ereignis nach einem Übergang von Zustand ℓ nach Zustand m nicht mehr eintreten kann. Der Effekt sorgt also dann dafür, daß nach der ersten Iteration Übergänge, nach denen daß seltene Ereignis nicht mehr erreicht werden kann, unmöglich werden und damit nach der ersten Iteration alle generierten Pfade das seltene Ereignis enthalten.

Die Zustandsraumexplosion ist ein allgemeines Problem, und de Boer et al argumentieren, daß es, außer für unendliche Zustandsräume, bei der Größe der von ihnen betrachteten Modelle nicht auftritt. Dennoch ist es selbstverständlich im allgemeinen unbefriedigend, große Zustandsräume nicht behandeln zu können. Sie schlagen daher einige Ansätze zur Handhabung größerer Zustandsräume vor, die jedoch alle einen zum Teil erheblichen Zusatzrechenaufwand erfordern und/oder einen zusätzlichen Approximationsfehler hervorrufen, da etwa in gewisser Form ähnliche Zustände zusammengefaßt werden und gleiche Übergangswahrscheinlichkeiten erhalten. Es erscheint uns angebracht, hier auf einen Zusammenhang zum Konzept der Lumpability hinzuweisen, das gerade auf der Zusammenfaßbarkeit von Zuständen basiert. Die Autoren nennen als zukünftige Forschungsgegenstände die Entwicklung effizienterer Methoden zur Handhabung großer Zustandsräume, die Erweiterung auf nicht-Markovsche Modelle, die Verbesserung der Konvergenz durch Kombination der Beobachtungen aus mehreren Iterationen, sowie solide mathematische Grundlagen wie etwa einen formalen Beweis der Konvergenz des Maßwechselvektors, die bisher nur experimentell verifiziert werden kann. Zur effizienteren Handhabung großer Zustandsräume können aus unserer Sicht formale strukturelle Eigenschaften von Markovketten wie die genannte Lumpability und ihre Varianten nützlich sein. Eine Beschreibung als Transitionsklassenmodell jedoch erscheint für zustandsabhängige Maßwechsel bei der Cross-Entropy-Methode wenig hilfreich, wie wir im folgenden Abschnitt diskutieren.

5.4.2 Anwendung auf Transitionsklassenmodelle

Es ist klar, daß die Cross-Entropy-Methode analog zur beschriebenen Anwendung auf Markovketten auch auf Transitionsklassenmodelle angewandt werden kann, da Transitionsklassenmodelle gerade eine kompakte und strukturierte Beschreibung Markovscher Modelle darstellen. Wir betrachten zunächst zustandsabhängige Maßwechsel, wie im vorherigen Abschnitt beschrieben.

Eine Schwierigkeit bei der Anwendung der Cross-Entropy-Methode auf Transitionsklassenmodelle ergibt sich daraus, daß bei der Cross-Entropy-Methode unter Umständen gewisse Zustandsübergänge unmöglich werden. Für eine Beschreibung als Transitionsklassenmodell bedeutet dies, daß Zustände aus Quellzustandsmengen entfernt werden müssen

und somit also nicht nur die Übergangsratenfunktionen oder die Übergangswahrscheinlichkeitsfunktionen verändert werden müssen, sondern eben auch die Quellzustandsmengen. Dies führt typischerweise auf eine erheblich aufwendigere Beschreibung der Quellzustandsmengen, etwa indem zahlreiche Fallunterscheidungen notwendig werden, und damit insbesondere für die Simulation zu erhöhtem Aufwand beim Test, ob ein Zustand in einer Quellzustandsmenge enthalten ist. Die beschriebene Schwierigkeit erhöht also den Aufwand zur Handhabung von Transitionsklassenmodellen, wäre aber eventuell in Kauf zu nehmen.

Wesentlich problematischer ist, daß die bei der Cross-Entropy-Methode durchzuführenden Manipulationen die Grundlage für die Idee von Transitionsklassen entziehen, da sie die Struktur der originalen Markovkette nicht erhält. Ein Vorteil von Transitionsklassenmodellen gegenüber konventioneller Darstellung von Markovketten, also durch Matrizen von Übergangsraten oder -wahrscheinlichkeiten, besteht gerade darin, daß die Struktur des Systems, dem die Markovkette zugrundeliegt, ausgenutzt wird. Selbstverständlich wird dieser Vorteil nur dann wirksam, wenn überhaupt eine Struktur vorliegt. Für unstrukturierte Markovketten dagegen wird kaum oder gar kein Gewinn in Bezug auf die Kompaktheit der Darstellung erzielt. Im Extremfall, daß alle Übergangsraten oder -wahrscheinlichkeiten verschieden sind, wird eine Transitionsklasse für jeden Zustandsübergang benötigt. Damit ist jedoch auch leicht ersichtlich, daß die Cross-Entropy-Methode in ihrer Form für zustandsabhängige Maßwechsel nicht geeignet ist, den beschriebenen Vorteil von Transitionsklassenmodellen für strukturierte Modelle zu nutzen. Vielmehr erfordert sie ja gerade die Verarbeitung von Informationen über alle Zustände der Markovkette, und die Veränderung der Übergangsraten oder -wahrscheinlichkeiten zerstört eine möglicherweise vorhandene Struktur.

Man könnte argumentieren, daß jeder zustandsabhängige Maßwechsel die Struktur zerstört und damit Transitionsklassenmodelle in diesem Fall ungeeignet sind. Wir haben aber in 4.4.2 und 4.4.3 gesehen, daß auch für Transitionsklassenmodelle dynamische Maßwechsel, die unter anderem auch vom Zustand abhängen können, sowie komponentenbasierte Maßwechsel kompakt formulierbar sind. Das Problem bei der Cross-Entropy-Methode besteht darin, daß hier tatsächlich jeder einzelne Zustandsübergang betrachtet wird, was für die direkte Anwendung auf Markovketten einen enormen, für realistisch dimensionierte Modelle nicht mehr durchführbaren Aufwand nach sich zieht, und was bei einer Anwendung auf Transitionsklassenmodelle gerade deren Vorteile zunichte macht und sie prinzipiell zur herkömmlichen Beschreibung von Markovketten mit entsprechendem Aufwand degenerieren läßt. Es erscheint uns demnach nicht sinnvoll, die Cross-Entropy mit zustandsabhängigen Maßwechseln auf Transitionsklassenmodelle anzuwenden, es ergibt sich kein Vorteil gegenüber der direkten Anwendung auf Markovketten, sondern eher noch ein erhöhter Aufwand. Anders sieht dies bei zustandsunabhängigen Maßwechseln aus, die wir im folgenden betrachten.

Wir haben die Cross-Entropy mit zustandsunabhängigen Maßwechseln für Markovketten gerade aus dem Grunde, daß hier eine kompaktere Beschreibung mit Transitionsklassenmodellen möglich ist, im vorherigen Abschnitt nicht präsentiert. Unsere Darstellung und Herleitung ist dabei eng angelehnt an die von de Boer [dB00] für Markovketten, wobei de Boer gerade auch eine Klassifizierung von Zustandsübergängen voraussetzt, diese aber nicht formal faßt und keine Form von Transitionsklassen verwendet.

Sei $\mathcal{T} = (\{\tau_1, \dots, \tau_c\}, y)$ mit $\tau_i = (\mathcal{U}_i, u_i, \alpha_i)$, $1 \leq i \leq c$ und $y \in \mathcal{S} \cap (\mathcal{U}_1 \cup \dots \cup \mathcal{U}_c)$ ein Transitionsklassenmodell mit konstanter Übergangsratenfunktion, also mit $\alpha_i(x) = \alpha_i$ für $1 \leq i \leq c$, $x \in \mathcal{U}_1 \cup \dots \cup \mathcal{U}_c$. Es bezeichne c_i die Nummer der Transitionsklasse, gemäß der der i -te Übergang auftritt.

Die Wahrscheinlichkeiten von Pfaden der diskreten Markovkette lassen sich dann mittels

$$P\{X_1 = x_1, X_2 = x_2, \dots, X_K = x_K\} = \prod_{i=1}^{K-1} \frac{\alpha_{c_i}}{\sum_{k=1}^c I_{\{x_i \in \mathcal{U}_k\}} \alpha_k}$$

berechnen. Das Ziel ist nun gerade, zustandsunabhängige Übergangsraten, also konstante Übergangsratenfunktionen α_i^* , zu finden, die die Cross-Entropy minimieren. Für diese Übergangsraten gilt

$$\alpha^* = \arg \max_{\alpha} E \left[I_{R(X)} \ln \prod_{i=1}^{K-1} \frac{\alpha_{c_i}}{\sum_{k=1}^c I_{\{x_i \in \mathcal{U}_k\}} \alpha_k} \right] \quad (5.25)$$

$$= \arg \max_{\alpha} E \left[I_{R(X)} \sum_{k=1}^{K-1} \left(\ln \alpha_{c_i} - \ln \sum_{k=1}^c I_{\{x_i \in \mathcal{U}_k\}} \alpha_k \right) \right]. \quad (5.26)$$

Bestimmung des Maximums durch Nullsetzen der Ableitung bezüglich α_ℓ liefert

$$0 = E \left[I_{R(X)} \sum_{i=1}^{K-1} \left(\frac{I_{\{c_i=\ell\}}}{\alpha_\ell^*} - \frac{I_{\{x_i \in \mathcal{U}_\ell\}}}{\sum_{k=1}^c I_{\{x_i \in \mathcal{U}_k\}} \alpha_k^*} \right) \right] \quad (5.27)$$

$$= E \left[I_{R(X)} \sum_{i=1}^{K-1} \frac{1}{\sum_{k=1}^c I_{\{x_i \in \mathcal{U}_k\}} \alpha_k^*} \left(I_{\{c_i=\ell\}} \sum_{k=1}^c I_{\{x_i \in \mathcal{U}_k\}} \alpha_k^* - \alpha_\ell^* I_{\{x_i \in \mathcal{U}_\ell\}} \right) \right]. \quad (5.28)$$

Dies wird approximiert durch

$$0 = E \left[I_{R(X)} \sum_{i=1}^{K-1} \left(I_{\{c_i=\ell\}} \sum_{k=1}^c I_{\{x_i \in \mathcal{U}_k\}} \alpha_k^* - \alpha_\ell^* I_{\{x_i \in \mathcal{U}_\ell\}} \right) \right] \quad (5.29)$$

$$= E \left[I_{R(X)} \sum_{i=1}^{K-1} \left(I_{\{c_i=\ell\}} \sum_{k=1, k \neq \ell}^c I_{\{x_i \in \mathcal{U}_k\}} \alpha_k^* - (1 - I_{\{x_i \in \mathcal{U}_\ell\}}) \alpha_\ell^* I_{\{x_i \in \mathcal{U}_\ell\}} \right) \right]. \quad (5.30)$$

Definiere nun

$$m_{\ell k} := E \left[I_{R(X)} \sum_{i=1}^{K-1} I_{\{c_i=\ell\}} I_{\{x_i \in \mathcal{U}_k\}} \right] \quad (5.31)$$

und

$$\bar{m}_\ell := \sum_{k=1, k \neq \ell}^c m_{k\ell} = E \left[I_{R(X)} \sum_{i=1}^{K-1} I_{\{x_i \in \mathcal{U}_\ell\}} \sum_{k=1, k \neq \ell}^c I_{\{c_i=k\}} \right] \quad (5.32)$$

$$= E \left[I_{R(X)} \sum_{i=1}^{K-1} I_{\{x_i \in \mathcal{U}_\ell\}} (1 - I_{\{c_i=\ell\}}) \right]. \quad (5.33)$$

Damit ergibt sich für alle ℓ aus (5.30) das Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} -\bar{m}_1 & m_{12} & m_{13} & \dots & m_{1c} \\ m_{21} & -\bar{m}_2 & m_{23} & \dots & m_{2c} \\ m_{31} & m_{32} & -\bar{m}_3 & \dots & m_{3c} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{c1} & m_{c2} & m_{c3} & \dots & -\bar{m}_c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1^* \\ \alpha_2^* \\ \alpha_3^* \\ \vdots \\ \alpha_c^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.34)$$

Die Erwartungswerte in $m_{k\ell}$ sind im allgemeinen unbekannt, und können per Simulation geschätzt werden durch

$$\hat{m}_{\ell k} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N I_{R(X)_j} L_j \sum_{i=1}^{K-1} I_{\{c_{ij}=\ell\}} I_{\{x_i \in \mathcal{U}_k\}}, \quad (5.35)$$

wobei der Index j jeweils die Größe aus dem j -ten Simulationslauf indiziert. Damit ist alles gegeben, um den Cross-Entropy-Algorithmus anzuwenden. Obiges Gleichungssystem in Verbindung mit den Schätzungen aus N Simulationsläufen wird gelöst, um den Maßwechselvektor, also die Übergangsraten für den nächsten Iterationsschritt zu bestimmen.

In einer Simulation diskreter Markovketten werden dabei die Raten so normalisiert, daß ihre Summe Eins beträgt.

Wir haben damit also die Cross-Entropy-Methode gemäß de Boer [dB00] hier für Transitionsklassenmodelle formuliert. Diskussionen zur praktischen Durchführung von Experimenten sowie numerische Ergebnisse findet man für Markovketten in [dB00]. Weiteres dazu wollen wir hier nicht ausführen, da die Beschreibung durch Transitionsklassenmodelle die Darstellung formalisiert und eine direkte Anwendung etwa auf ein gemäß [Str00] aus Warteschlangennetzen oder gemäß [Sie00] aus Petrinetzen generiertes Transitionsklassenmodell ermöglicht, die Prinzipien und konkreten Ergebnisse jedoch selbstverständlich nicht verändert.

5.4.3 Charakterisierung über große Abweichungen

Zum Abschluß unserer Behandlung der Cross-Entropy-Methode wollen wir eine neue Interpretation und Charakterisierung der Methode geben. Ursprünglich motiviert durch das Ziel, ein möglichst allgemeines und leicht anwendbares Verfahren zur Bestimmung von Maßwechseln für das Importance Sampling zu entwickeln, also insbesondere ohne detaillierte Kenntnisse des zugrundeliegenden Modells vorauszusetzen und ohne eine Anwendung der Theorie großer Abweichungen, kann doch die Cross-Entropy-Methode gerade als ein adaptiver Ansatz zur Bestimmung von Ratenfunktionen für große Abweichungen angesehen werden, was wir am Ende von Abschnitt 2.3 bereits angedeutet haben und nun kurz erläutern wollen.

Wir haben in Abschnitt 2.3 den Satz von Sanov für unabhängige identisch verteilte reelle Zufallsvektoren kennengelernt, der besagt, daß deren empirische Verteilung ein Prinzip großer Abweichungen mit einer Cross-Entropy als Ratenfunktion erfüllt; genauer gesagt mit dem über Wahrscheinlichkeitsmaßen auf der Borelschen σ -Algebra des \mathbb{R}^d gebildeten Infimum der relativen Entropie eines solchen Wahrscheinlichkeitsmaßes bezüglich der Verteilung der betrachteten Zufallsvektoren oder mit anderen Worten, die minimale Cross-Entropy. Demzufolge ist also die Cross-Entropy-Methode ein Verfahren zur adaptiven Berechnung der im Satz von Sanov garantierten Ratenfunktion großer Abweichungen für empirische Verteilungen von Zufallsvektoren.

Die Cross-Entropy ist nicht nur im Falle unabhängiger identisch verteilter Zufallsvektoren eine Ratenfunktion großer Abweichungen. Vielmehr kann häufig eine Cross-Entropy als Ratenfunktion angegeben werden. Insbesondere haben wir in Abschnitt 2.4.2 gesehen, daß für empirische Verteilungen von Markovketten mit endlichem Zustandsraum die dort aus Paaren konstruierte Markovkette ebenfalls ein Prinzip großer Abweichungen mit einer Ratenfunktion, die wesentlich von der Cross-Entropy abhängt, erfüllt. Das Infimum dieser Ratenfunktion wiederum ist dann eine Ratenfunktion im Satz von Donsker-Varadhan für empirische Verteilungen von Markovketten. Somit kann also die Cross-Entropy-Methode

auch in diesem Fall, wie für unabhängige identisch verteilte Zufallsvektoren, zur Bestimmung dieser Ratenfunktion eingesetzt werden.

Wir sehen also, daß die ursprünglich als adaptives Importance-Sampling-Verfahren zur simulativen Schätzung der Wahrscheinlichkeiten seltener Ereignisse entwickelte Cross-Entropy-Methode ebenso eine Methode zur Bestimmung von Ratenfunktionen großer Abweichungen ist, eine Tatsache, die einmal mehr den engen Zusammenhang zwischen Importance Sampling und der Theorie großer Abweichungen unterstreicht. Mit der Cross-Entropy-Methode werden Ratenfunktionen adaptiv mittels simulativer Schätzungen angenähert.

5.5 Adaptive Optimierung unseres dynamischen Maßwechsels

Wir zeigen in diesem Abschnitt die Perspektive der adaptiven Optimierung unseres dynamischen Maßwechsels aus 4.4.2 auf. Damit demonstrieren wir insbesondere, daß ein zustandsabhängiger Maßwechsel für Markovketten nicht von allen Übergangswahrscheinlichkeiten oder -raten abhängen muß. Unser dynamischer Maßwechsel ist nicht nur zustandsabhängig, sondern sogar zeitabhängig und in seiner allgemeinen Form darüberhinaus abhängig von der Anzahl bereits im Simulationslauf beobachteter seltener Ereignisse, etwa Besuche in bestimmten Zuständen, und vom aktuellen Wert des Likelihood-Quotienten. Die Abhängigkeiten werden dabei durch Funktionen gesteuert. Wählt man diese Funktionen hinreichend einfach, so ergeben sich nur verhältnismäßig wenige Parameter, die den Maßwechsel bestimmen. Eine Voraussetzung dabei ist gerade eine vorgegebene Form der steuernden Funktionen. Dies ist leicht erweiterbar, indem jeweils mehrere Formen erlaubt oder vorgegeben und in die Optimierung einbezogen werden. Das Ziel der adaptiven Optimierung ist die Minimierung oder zumindest eine erhebliche Reduktion der Varianz. Die Zielfunktion der Optimierung kann dabei wie in Abschnitt 5.3 die Varianz des Schätzers sein, wie in Abschnitt 5.4 die Cross-Entropy zwischen der aktuellen und der optimalen IS-Dichte oder auch eine andere mit der Varianz verwandte Größe, deren Minimierung oder eventuell auch Maximierung eine Varianzreduktion impliziert. Wir geben im folgenden den formalen Rahmen an, ohne auf ein spezielles Optimierungsverfahren einzugehen. Prinzipiell kann man jedes Optimierungsverfahren einsetzen, die konkrete Anwendung sowie Vergleiche verschiedener Verfahren verbleiben als Gegenstand zukünftiger Forschung.

Wir haben bei unserem dynamischen Maßwechsels vorausgesetzt, daß eine Menge von Übergangswahrscheinlichkeiten oder Übergangsraten, die zu vergrößern sind, gegeben ist. Dann wird ein Faktor b_{max} der maximalen Vergrößerung gewählt, und während der Simulation ist der dynamische Vergrößerungsfaktor b , $1 < b \leq b_{max}$, gegeben durch $b = 1 + (b_{max} - 1)\varphi_1(r_n)\varphi_2(n)\varphi_3(L(x_0, \dots, x_n))$ mit den in Abschnitt 4.4.2 näher spezifizierten Funktionen. Die Übergangswahrscheinlichkeitsfunktion eines Transitionsklassenmodells wird dann gemäß $\beta_i^{(n)}(x_0, \dots, x_n) = b \cdot \alpha_i(x_n) \leq 1$ verändert. Für unser Beispiel

in Abschnitt 4.4.2 hatten wir nur die Zeit, also die Anzahl der bereits durchgeführten Simulationsschritte innerhalb eines Laufes, betrachtet. Neben dem Faktor b_{max} wurde dort daher nur die Funktion φ_2 verwendet, deren Auswahl durch eher unsystematische Versuche erfolgte. Wir wollen nun zunächst eine Parametrisierung dieser Variante geben und dann auch die beiden Funktionen φ_1, φ_2 einbeziehen.

Es ist klar, daß $b_{max} > 1$ einer der Maßwechselfparameter ist. Schränken wir nun φ_2 auf die Form $\varphi_2(n) = n^{-c}, c \geq 0$ ein, so ergibt sich lediglich ein weiterer Parameter. Gemäß der Notationen aus 5.2 für die einheitliche Parametrisierung ist also der Maßwechselvektor $\vartheta = (\vartheta_1, \vartheta_2)$ spezifiziert durch $\vartheta_1 = b_{max}, \vartheta_2 = c$, und es ergibt sich ein zweidimensionales Optimierungsproblem mit $\vartheta_1 > 1, \vartheta_2 \geq 0$ und Nebenbedingung $1 + (\vartheta_1 - 1) \cdot n^{-\vartheta_2} \cdot \alpha_i(x_n) \leq 1$. Die Bereiche von ϑ_1 und ϑ_2 schränken den Parameterraum, also den Raum, über dem optimiert wird, ein. Für diesen ergibt sich $\Theta = (1, \infty) \times [0, \infty)$. Man kann auch die Nebenbedingung eliminieren, indem man Übergangsraten anstatt Übergangswahrscheinlichkeiten betrachtet und lediglich die zu vergrößernden Raten verändert, alle weiteren unverändert läßt und dann durch Normierung Übergangswahrscheinlichkeiten berechnet. Erweitern wir nun die Parametrisierung unseres Maßwechsels um die Abhängigkeit von der Anzahl von seltenen Ereignissen und vom Wert des Likelihood-Quotienten, so benötigen wir zusätzlich die Funktionen φ_1 und φ_3 . Hängen alle Funktionen nur von einem Parameter ab, so ergeben sich insgesamt also die Parameter $\vartheta_1, \dots, \vartheta_4$, und mit dieser Parametrisierung ergibt sich für unsere allgemeine Form

$$\beta_i^{(n)}(x_0, \dots, x_n) = 1 + (\vartheta_1 - 1)\varphi_{1,\vartheta_2}(r_n)\varphi_{2,\vartheta_3}(n)\varphi_{3,\vartheta_4}(L(x_0, \dots, x_n)), \quad n \geq 1.$$

Man beachte, daß nun ϑ_3 der Parameter ist, der die Funktion φ_2 bestimmt. Die Numerierung der Parameter ist jedoch unwesentlich.

Wir sind bisher von einer bestimmten Form für φ_2 ausgegangen. Selbstverständlich sind aber viele weitere Formen mit den geforderten Eigenschaften, positiv und monoton fallend auf \mathbb{R}_+ mit $\varphi_2(1) = 1$, erlaubt. Betrachten wir auf \mathbb{R}_+ positive und exponentiell schnell fallende Funktionen mit einer Basis von mindestens Eins und negativem Exponenten. Um $\varphi_2(1) = 1$ zu gewährleisten, können wir $\varphi_2(n) = d^{-(n-1)}, d \geq 1$ wählen. In diesem Fall erhalten wir also analog zur bisher gewählten Form von φ_2 wieder nur einen einzigen Parameter, der die Funktion φ_2 bestimmt. Wir können nun leicht erweitern auf Funktionen, die von mehreren Parametern abhängen. Die soeben beschriebene Form von φ_2 etwa kann verallgemeinert werden zu $\varphi_2(n) = d_1^{-d_2(n-1)}, d_1, d_2 \geq 1$, wobei nun zwei Parameter die Funktion φ_2 bestimmen und die Variante mit einem Parameter als Spezialfall mit $d_1 = 1$ enthalten ist. Auch die anfangs gewählte Form n^{-c} kann erweitert werden, wobei wir jedoch beachten müssen, daß für die naheliegende Variante $c_1 n^{-c_2}, c_1, c_2 \geq 0$ die Bedingung $\varphi_2(1) = 1$ nur genau dann erfüllt ist, wenn $c_1 = 1$ gilt. Wir können aber beispielsweise $\varphi_2(n) = c_1 n^{-c_2} (1 - c_1), c_1, c_2 \geq 0$ wählen und erhalten damit auch hier

nun zwei Parameter. Analog können φ_1 und φ_3 von zwei Parametern und allgemein alle Funktionen $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ jeweils auch von mehreren Parametern abhängen.

Ist j_i die Anzahl dieser Parameter für die Funktion φ_i , $1 \leq i \leq 3$, ergibt sich also ein Maßwechselvektor

$$\vartheta = (\vartheta_1, \vartheta_{2_1} \dots, \vartheta_{2_{j_1}}, \vartheta_{3_1} \dots, \vartheta_{3_{j_2}}, \vartheta_{4_1} \dots, \vartheta_{4_{j_3}})$$

und

$$\begin{aligned} \beta_i^{(n)}(x_0, \dots, x_n) = 1 + (\vartheta_1 - 1) \cdot \varphi_{1, \vartheta_{2_1} \dots, \vartheta_{2_{j_1}}}(r_n) \cdot \varphi_{2, \vartheta_{3_1} \dots, \vartheta_{3_{j_2}}}(n) \\ \cdot \varphi_{3, \vartheta_{4_1} \dots, \vartheta_{4_{j_3}}}(L(x_0, \dots, x_n)), \quad n \geq 1. \end{aligned}$$

Die Parametrisierung beschreibt so die allgemeine Form unseres dynamischen Maßwechsels. Sie schließt insbesondere die Möglichkeit verschiedener Formen einer Funktion φ_i ein. Exemplarisch haben wir bisher die Parametrisierung anhand verschiedener Formen von φ_2 erläutert. Allgemein sind $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ Funktionen, die die in 4.4.2 spezifizierten Bedingungen erfüllen müssen. Für eine Optimierung kann man die Form der Funktionen stark einschränken oder unterschiedliche Formen erlauben. Diese können im Rahmen obiger Parametrisierung gehandhabt werden, wie wir nun erläutern wollen. Will man sich bei der Optimierung nicht auf eine bestimmte Funktionsform festlegen, kann ein diskreter Parameter die Auswahl aus mehreren Optionen steuern und sozusagen als Schalter fungieren. Wir können das wieder an den Beispielen für φ_2 illustrieren. Die erste Funktionsform sei vom Typ $c_1 n^{-c_2} (1 - c_1)$, die zweite Form vom Typ $d_1^{-d_2(n-1)}$. Zusätzlich zu den Parametern c_1, c_2, d_1, d_2 kann man nun einen weiteren Parameter mit Werten in $\{1, 2\}$ einführen, von dem abhängt, welche der beiden Funktionsformen ausgewählt wird. Bei einer Optimierung kann dann also auch dieser Schalter verändert und optimiert werden. Wiederum ist klar, daß wir analog für mehr als zwei Funktionsformen verfahren können, etwa auch für zusammengesetzte Funktionen. Eine einfache Möglichkeit der Zusammensetzung von Funktionen besteht darin, mehrere im Rahmen der Bedingungen erlaubte Funktionen zu multiplizieren, da für das Produkt auch alle Bedingungen erfüllt sind.

Eine Variante zu unserem diskreten Schalter, die für einige Optimierungsverfahren möglicherweise geeigneter erscheint, ist eine additive Darstellung der φ_i mittels einer Art von Indikatorfunktionen. Für eine der Funktionen φ_i seien ξ_1, \dots, ξ_C verschiedene Funktionsformen, aus denen gewählt werden soll. Diese ξ_j hängen von Parametern ab, die wir, ebenso wie die Parameter von φ_i in der folgenden Notation aus Gründen der Übersichtlichkeit vernachlässigen. Nun soll eine dieser Funktionsformen ausgewählt werden. Dies geschieht mittels

$$\varphi_i = \chi_1 \xi_1 + \chi_2 \xi_2 + \dots, \chi_C \xi_C, \quad \chi_1, \dots, \chi_C \in \{0, 1\},$$

wobei $\chi_j = 1$ für genau ein χ_j , $1 \leq j \leq C$ und $\chi_k = 0$ für alle anderen χ_k , $1 \leq k \leq C$, $k \neq j$ gilt. Somit wird also genau eine der Funktionsformen zugeordnet.

Wir haben eingangs des Abschnittes bereits erwähnt, daß die konkrete Anwendung von Optimierungsverfahren Gegenstand zukünftiger Forschung ist, und daß prinzipiell jedes Optimierungsverfahren eingesetzt werden kann. Sicherlich ist die Eignung verschiedener Optimierungsverfahren jedoch fraglich, sodaß hier noch eine Reihe offener Fragen bleibt, insbesondere auch bei der Auswahl der Funktionsformen und deren Einbeziehung in die Optimierung. Aus unserer Sicht stellen dabei genetische Algorithmen [Dav91, Gol89, Mit01, Raw91] eine im Bereich des adaptiven Importance Sampling neue und speziell für die in diesem Abschnitt vorgestellte Parametrisierung unseren dynamischen Maßwechsels interessante Möglichkeit dar. Vor allem die Auswahl der Funktionsformen bereitet bei den meisten Optimierungsverfahren konzeptionelle Schwierigkeiten, da etwa beim Simulated Annealing oder bei stochastischen Gradienten- oder Newtonverfahren unklar ist, wie die diskreten Parameter behandelt werden können, denn die genannten Verfahren bestimmen grob gesprochen alle eine Richtung im Parameterraum, in der eine optimale Lösung gefunden werden soll. Auch wenn wir hier nicht auf die Details genetischer Algorithmen eingehen können, wollen wir doch anmerken, daß die grundlegenden Operationen *Selection*, *Crossover* und *Mutation* uns bei der beschriebenen Problemstellung erfolgversprechend erscheinen. Denkbar ist dabei auch eine Kombination mit anderen Optimierungsverfahren. Schließlich wollen wir zum Abschluß des Kapitels über adaptives Importance Sampling noch darauf hinweisen, daß nicht nur für unseren Maßwechsel, sondern allgemein die Anwendung genetischer Algorithmen zur Parameteroptimierung von Importance Sampling bisher in der Literatur nach unserem Wissen nicht untersucht worden ist. Adaptives Importance Sampling mittels genetischer Algorithmen sollte daher auch ein Gebiet zukünftiger Forschung sein.

6 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde die Simulation seltener Ereignisse unter Verwendung des Varianzreduktionsverfahrens „Importance Sampling“ behandelt, wobei ein besonderer Schwerpunkt auf Markovsche Modelle gelegt wurde.

Zunächst haben wir eine grundlegende Einführung in die Beschreibung und analytische Behandlung seltener Ereignisse mit Hilfe der Theorie großer Abweichungen gegeben, da viele der in der Literatur diskutierten Verfahren zur Simulation seltener Ereignisse und die Grenzen der Anwendbarkeit solcher Verfahren ohne Grundkenntnisse der Theorie großer Abweichungen kaum verständlich und nachvollziehbar sind. Dabei wurde auch die besonders in diesem Bereich der Wahrscheinlichkeitstheorie als Beweisverfahren bedeutende Maßwechseltechnik erläutert und damit ein unmittelbarer Bezug zur Simulation seltener Ereignisse und insbesondere zum Importance Sampling hergestellt.

Nach der Verdeutlichung der Probleme, die sich bei der zuverlässigen Schätzung der Wahrscheinlichkeiten seltener Ereignisse ergeben, und einer Übersicht über die wichtigsten Konzepte zur statistischen Auswertung von Simulationsdaten haben wir Importance Sampling zunächst informell und schließlich formal dargestellt. Wir haben optimale Schätzer angesprochen, Effizienzkriterien vorgestellt, deren Zusammenhang untersucht sowie klassische und häufig angewendete Maßwechselstrategien diskutiert und insbesondere deren Nachteile verdeutlicht. Auch das neben dem Importance Sampling zweite bedeutende Verfahren zur Simulation seltener Ereignisse, das RESTART-Verfahren, und die sich dabei ergebenden Schwierigkeiten wurden kurz erläutert.

Für Markovmodelle haben wir nach der Beschreibung formaler Grundlagen ausführlich optimale Schätzer hergeleitet und untersucht, zunächst für Beispiele, dann für verschiedene allgemeinere Klassen von Leistungsmaßen. Wir haben Maßwechselstrategien erläutert, die unter gewissen Voraussetzungen für bestimmte Modellklassen oder Leistungsmaße effiziente Schätzer liefern und den Einfluß der Simulationsmethode auf die Effizienz von Schätzern diskutiert. Importance Sampling wurde auf strukturiert durch Transitionsklassen beschriebene Modelle angewendet, Konzepte und Maßwechselstrategien präsentiert, speziell für Markovsche Tandemwarteschlangennetze Maßwechselstrategien entwickelt, die effiziente Schätzer für Überlaufwahrscheinlichkeiten liefern.

Nach der Vorstellung des Prinzips der adaptiven Optimierung von Importance-Sampling-Schätzern, der Beschreibung einiger klassischer Methoden und einer Formalisierung der notwendigen Parametrisierung haben wir die in jüngster Zeit immer mehr an Bedeutung gewinnende Cross-Entropy-Methode vorgestellt, deren Anwendungsbereiche auf Transitionsklassenmodelle erweitert und einen Zusammenhang mit der Theorie großer Abweichungen hergestellt. Schließlich wurde die Möglichkeit der adaptiven Optimierung dynamischer Maßwechsel für Transitionsklassenmodelle dargelegt.

Die Arbeit enthält eine Reihe neuer Ergebnisse, die im Hinblick auf eine fließende Darstellung und eine gute Lesbarkeit jeweils an den Stellen präsentiert wurden, die dafür am geeignetsten erscheinen. Im folgenden sind die wichtigsten Ergebnisse zusammengestellt.

Aus den allgemeinen Formeln, die die Grundlage des Importance Sampling bilden, wurde gefolgert, daß es ausreicht, die durch den Satz von Radon–Nikodym geforderte absolute Stetigkeit von Wahrscheinlichkeitsmaßen auf einer Spur– σ –Algebra zu fordern. Es wurde weiterhin gezeigt, daß die Form der optimalen Importance–Sampling–Dichte, der Dichte eines Importance–Sampling–Schätzers mit Varianz 0, diese Dichte eindeutig bestimmt. Die Information, daß die optimale Dichte explizit von der unbekanntem zu schätzenden Größe abhängt, ist somit nicht notwendig.

Bei der Untersuchung von Effizienzkriterien für Importance–Sampling–Schätzer wurde gezeigt, daß ein beschränkter relativer Fehler ein echt stärkeres Kriterium als asymptotische Optimalität ist, daß also ein beschränkter relativer Fehler asymptotische Optimalität impliziert, die Umkehrung im allgemeinen jedoch nicht gilt. Die Betrachtung von Importance–Sampling–Schätzern, deren relativer Fehler nicht beschränkt ist, führte auf eine neue Charakterisierung asymptotischer Optimalität über die Größenordnung des relativen Fehlers. Diese Charakterisierung wurde in Form der besonders auch in der Informatik geläufigen o–Notation gegeben.

Aus der Beschreibung der formalen Grundlagen des Importance Sampling für Markovketten wurde abgeleitet, daß die Anwendung von Importance Sampling auf Markovsche Reward–Modelle durch die Interpretation von Rewards als Funktionen möglich ist.

Der optimale Maßwechsel für Arbeitsphasenparameter in M/M/1–Modellen wurde hergeleitet und als im allgemeinen nicht optimal für die Schätzung stationärer Zustandswahrscheinlichkeiten identifiziert. Dies zeigt, daß für ein Modell in der Regel nicht ein optimaler Maßwechsel für diverse Leistungsmaße existiert, sondern daß der optimale Maßwechsel im allgemeinen vom Leistungsmaß abhängt. Er kann auch aus der Modellklasse des zu untersuchenden Modells herausführen oder einer allgemeineren Klasse angehören wie etwa der optimale Maßwechsel für Arbeitsphasenparameter, der auf ein verallgemeinertes M/M/1–Modell mit zustandsabhängigen Ankunfts– und Bedienraten führt.

Anhand eines Markovkettenbeispiels aus der Literatur wurde gezeigt, daß auch die Simulationsmethode wesentlichen Einfluß auf den optimalen Maßwechsel hat. Dazu wurde für das Beispiel der optimale Maßwechsel bestimmt. Bei Anwendung regenerativer Simulation und Ausnutzung der speziellen Struktur des Beispielmodells führt dieser auf eine homogene Markovkette als Importance–Sampling–Maß, was ohne Ausnutzung der Struktur oder unter Verwendung von Simulationsläufen mit endlichem Horizont nicht der Fall ist. Das bedeutet, daß eine ungeschickte Wahl der Simulationsmethode ebenso wie eine ungeschickte Modellierung dazu führen kann, daß der optimale Maßwechsel ausgeschlossen wird.

Für die Wahrscheinlichkeit einer vorgegebenen Anzahl bzw. Mindestanzahl von Erfolgen in unabhängigen Bernoulli-Experimenten wurde durch sukzessive Verbesserung der Modellierung sowohl eine mögliche Vorgehensweise bei der Suche nach Maßwechseln demonstriert, als auch gezeigt, daß der optimale Maßwechsel auf zeit- und zustandsabhängige Bernoulli-Experimente führt, also Bernoulli-Experimente, bei denen die Erfolgswahrscheinlichkeit von der Anzahl bereits durchgeführter Experimente und von der Anzahl bereits erzielter Erfolge abhängt. Auch hier gehört das Importance-Sampling-Maß also einer allgemeineren Klasse an.

Für Leistungsmaße über endlichem Horizont und stationäre Leistungsmaße von Markovketten wurde jeweils die Form des optimalen Maßwechsels hergeleitet und dabei insbesondere gezeigt, daß optimales Importance Sampling für Leistungsmaße von Markovketten im allgemeinen nicht mittels Markovketten realisierbar ist, also daß die Verwendung einer Markovkette als Importance-Sampling-Maß dabei im allgemeinen nicht zu optimalen Importance-Sampling-Schätzern führt.

Für Transitionsklassenmodellen wurden die eher informellen Beschreibungen in der Literatur formalisiert und anhand der formalen Definition die Äquivalenz von Transitionsklassenmodellen und Markovketten bewiesen. Importance Sampling wurde auf Transitionsklassenmodelle unter Einführung einer geeigneten Formulierung angewendet und ein dynamischer Maßwechsel vorgeschlagen, der abhängig sein kann vom Zustand des vom Modell beschriebenen Systems, von der Zeit, also der jeweils aktuellen Simulationslänge wie etwa der Anzahl bereits simulierter Zustandsübergänge, von der Anzahl der während des Laufes bereits beobachteten seltenen Ereignisse wie etwa Besuche in bestimmten Zuständen der zugrundeliegenden Markovkette und vom jeweils aktuellen Wert des Likelihood-Quotienten. Dieser Maßwechsel ist für die Methode unabhängiger Simulationsläufe fester Länge weniger empfindlich für die Vergrößerung der Lauflänge als bekannte statische Verfahren, die eine fest gewählte homogene Markovkette als Importance-Sampling-Maß verwenden. Weiterhin wurden für Transitionsklassenmodelle komponentenbasierte Maßwechsel präsentiert, also Maßwechsel, die nicht vom gesamten Systemzustand sondern nur vom Zustand bestimmter Systemkomponenten abhängig sind.

Für Markovsche Tandemsysteme wurden zur Bestimmung von Überlaufwahrscheinlichkeiten basierend auf Heuristiken und grundlegenden Richtlinien zwei neue Strategien für zustandsunabhängige Maßwechsel hergeleitet. Vergleiche mit existierenden Strategien belegen die Effizienz dieser Maßwechsel.

Im Rahmen der Behandlung adaptiver Verfahren mit dem Schwerpunkt auf der Cross-Entropy-Methode wurde die Anwendung dieser auf Transitionsklassenmodelle formuliert und der Zusammenhang zur Theorie großer Abweichungen durch Interpretation der Cross-Entropy-Methode als adaptives Verfahren zur Bestimmung von Ratenfunktionen hergestellt. Die Möglichkeit der adaptiven Optimierung des dynamischen Maßwechsels für Transitionsklassenmodelle wurde ebenfalls aufgezeigt.

Aus den durchgeführten Untersuchungen und den Ergebnissen der Arbeit ergeben sich einige Gegenstände zukünftiger Forschung. Selbstverständlich sind ganz allgemein weiterführende Untersuchungen zur Theorie des Importance Sampling nützlich. Vor allem ist die Anwendung von Importance Sampling auf breitere Modellklassen, als das nach aktuellem Stand der Forschung möglich ist, erstrebenswert. Hierbei sind auch weiterhin Markovsche Modelle von besonderer Bedeutung.

Dabei bieten die Ideen, die zu den Maßwechselstrategien für Tandemsysteme mit zwei Knoten und ohne Engpaß führten, die Perspektive der Erweiterung und Verallgemeinerung, wie wir im Abschnitt 4.5.3 ausführlich erläutert haben. Dies beinhaltet unter anderem Tandemsysteme mit Engpaßstation, mit mehr als zwei Knoten, mit beschränkten Warteschlangenkapazitäten, allgemeinere Jackson-Netze wie etwa Systeme mit Rückkopplungen und auch nicht-Markovsche Tandemsysteme.

Die Konzepte, die für Transitionsklassenmodelle entwickelt wurden, sollten konkretisiert werden. Komponentenbasierte Maßwechsel können für Modelle mit mehrdimensionalen Zustandsräumen zu effizienten Maßwechselstrategien führen, die eine Zwischenstufe zwischen zustandsunabhängigen Maßwechseln und zustandsabhängigen Maßwechseln im herkömmlichen Sinne darstellen. Eine weitere Alternative bietet das vorgestellte Konzept für dynamische Maßwechsel, das ermöglicht, den Maßwechsel während eines Simulationslaufes zu steuern. Die adaptive Optimierung solcher dynamischer Maßwechsel erscheint ebenfalls vielversprechend, wobei verschiedene Optimierungsverfahren erprobt und auch die Kombination von Optimierungsverfahren in Betracht gezogen werden sollte. Genetische Algorithmen erscheinen in diesem Zusammenhang als eine interessante und erfolgversprechende Möglichkeit.

A Anhang

A.1 Konvergenzbegriffe und Grenzwertsätze

Gegeben sei stets ein zugrundeliegender Wahrscheinlichkeitsraum (Ω, \mathcal{A}, P) oder eine Folge $((\Omega_n, \mathcal{A}_n, P_n))$ von Wahrscheinlichkeitsräumen. Der Begriff der Zufallsvariablen sei, wenn nicht explizit angegeben, allgemein verstanden, also nicht eingeschränkt auf den reellen eindimensionalen Fall, und entsprechend seien Metriken geeignet definiert.

Definition A.1 (Limes superior/inferior) Sei a_1, a_2, \dots eine Folge reeller Zahlen. Der Limes superior und der Limes inferior, in Kurzschreibweise \limsup und \liminf , sind definiert durch

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} a_n := \lim_{n \rightarrow \infty} (\sup\{a_i : i \geq n\}), \quad \liminf_{n \rightarrow \infty} a_n := \lim_{n \rightarrow \infty} (\inf\{a_i : i \geq n\}).$$

Analog ist die Definition für Mengen und damit Ereignisse aus einer σ -Algebra.

Definition A.2 (Mengentheoretischer Limes superior/inferior) Sei A_1, A_2, \dots eine Folge von Ereignissen (Mengen) mit $A_i \in \mathcal{A}, i \in \mathbb{N}^+$. Der Limes superior und der Limes inferior, in Kurzschreibweise \limsup und \liminf , sind definiert durch

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} A_n := \bigcap_{n=1}^{\infty} \bigcup_{i \geq n} A_i, \quad \liminf_{n \rightarrow \infty} A_n := \bigcup_{n=1}^{\infty} \bigcap_{i \geq n} A_i.$$

Dabei beschreibt der Limes Superior das Ereignis „es treten unendlich viele der A_i auf“, und der Limes Inferior beschreibt das Ereignis „es treten alle außer endlich vielen A_i auf“, und es gilt stets $\liminf A_n \subseteq \limsup A_n$.

Lemma A.1

$$P \left\{ \liminf_{n \rightarrow \infty} A_n \right\} \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} P\{A_n\} \leq \limsup_{n \rightarrow \infty} P\{A_n\} \leq P \left\{ \limsup_{n \rightarrow \infty} A_n \right\}.$$

Lemma A.2 (Borel–Cantelli) Sei A_1, A_2, \dots eine Folge von Ereignissen aus \mathcal{A} . Dann gilt

$$\sum_{i=1}^{\infty} P\{A_i\} < \infty \Rightarrow P \left\{ \limsup_{n \rightarrow \infty} A_n \right\} = 0 \Leftrightarrow P \left\{ \liminf_{n \rightarrow \infty} \bar{A}_n \right\} = 1.$$

Sind die A_i paarweise unabhängig, dann gilt auch die Umkehrung

$$\sum_{i=1}^{\infty} P\{A_i\} = \infty \Rightarrow P \left\{ \limsup_{n \rightarrow \infty} A_n \right\} = 1.$$

Definition A.3 (\mathcal{L}^p -Konvergenz) Eine Folge X_1, X_2, \dots von Zufallsvariablen heißt für $0 < p < \infty$ im p -ten Mittel konvergent oder \mathcal{L}^p -konvergent gegen eine Zufallsvariable X , genau dann, wenn

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E[|X_n - X|^p] = 0.$$

Die Bezeichnung \mathcal{L}^p -Konvergenz erklärt sich daraus, daß allgemein für Maße μ die Menge aller reellen p -fach μ -integrierbaren Funktionen auf Ω mit $\mathcal{L}^p(\mu)$ bezeichnet wird. Diese Menge $\mathcal{L}^p(\mu)$ ist ein Vektorraum über \mathbb{R} . Als Spezialfall ergibt sich die \mathcal{L}^1 -Konvergenz, d.h. die Konvergenz im Mittel.

Definition A.4 (Fast sichere Konvergenz) Eine Folge X_1, X_2, \dots von Zufallsvariablen heißt (P -) fast sicher konvergent gegen eine Zufallsvariable X , genau dann, wenn eine der folgenden äquivalenten Bedingungen erfüllt ist

- $P \left\{ \lim_{n \rightarrow \infty} X_n = X \right\} = 1,$
- $\forall \epsilon > 0 : \lim_{n \rightarrow \infty} P \left\{ \sup_{m \geq n} |X_m - X| > \epsilon \right\} = 0,$
- $\forall \epsilon > 0 : \lim_{n \rightarrow \infty} P \{ |X_m - X| \leq \epsilon \text{ für alle } m \geq n \} = 1,$
- $\forall \epsilon > 0 : P \left\{ \limsup_{n \rightarrow \infty} |X_n - X| > \epsilon \right\} = 0.$

Definition A.5 (Stochastische Konvergenz) Eine Folge X_1, X_2, \dots von Zufallsvariablen heißt stochastisch konvergent gegen eine Zufallsvariable X , genau dann, wenn

$$\forall \epsilon > 0 : \lim_{n \rightarrow \infty} P \{ |X_n - X| \geq \epsilon \} = 0$$

oder äquivalent dazu

$$\forall \epsilon > 0 : \lim_{n \rightarrow \infty} P \{ |X_n - X| > \epsilon \} = 0$$

Definition A.6 (Schwache Konvergenz) Eine Folge (P_n) von Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf der Borelschen σ -Algebra \mathcal{B}^d im \mathbb{R}^d heißt schwach konvergent gegen eine Wahrscheinlichkeitsverteilung P auf \mathcal{B}^d genau dann, wenn für alle beschränkten stetigen Funktionen f

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int f dP_n = \int f dP$$

oder äquivalent

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E_{P_n}[f] = E_P[f].$$

Man schreibt dann auch

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P_n = P.$$

Definition A.7 (Konvergenz in Verteilung) Eine Folge X_1, X_2, \dots von Zufallsvariablen heißt konvergent in Verteilung gegen eine Zufallsvariable X , genau dann, wenn die Folge (P_{X_n}) der Verteilungen schwach gegen die Verteilung P_X konvergiert.

Satz A.1 (Zusammenhang von Konvergenzbegriffen)

- \mathcal{L}^p -Konvergenz $\Rightarrow \mathcal{L}^1$ -Konvergenz \Rightarrow Stochastische Konvergenz.
- Fast sichere Konvergenz \Rightarrow Stochastische Konvergenz.
- Stochastische Konvergenz \Rightarrow Konvergenz in Verteilung.

Satz A.2 (Bernoullisches Gesetz der großen Zahlen) Sei ein Bernoulli-Experiment gegeben, also $|\Omega| = 2$, $\mathcal{A} = \text{pot}(\Omega)$, $A \in \mathcal{A}$ mit $P\{A\} = p \in [0, 1]$. Für die relative Häufigkeit $R_n(A)$ des Ereignisses A bei n -facher unabhängiger Wiederholung des Experimentes gilt

$$\forall \epsilon > 0 : \lim_{n \rightarrow \infty} P\{|R_n(A) - p| \leq \epsilon\} = 1.$$

Die relative Häufigkeit konvergiert also fast sicher gegen die Wahrscheinlichkeit.

Satz A.3 (Schwaches Gesetz der großen Zahlen) Seien X_1, \dots, X_n unabhängige Zufallsvariablen mit identischem Erwartungswert μ und existierender Varianz. Dann gilt

$$\forall \epsilon > 0 : \lim_{n \rightarrow \infty} P\left\{\left|\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i - \mu\right| \geq \epsilon\right\} = 0.$$

Also sagt das schwache Gesetz der großen Zahlen aus, daß für eine Folge unabhängiger Zufallsvariablen X_i mit identischem Erwartungswert μ und existierender Varianz die Folge $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$ stochastisch gegen (die konstante Zufallsvariable) μ konvergiert.

Satz A.4 (Starkes Gesetz der großen Zahlen) Seien X_1, \dots, X_n unabhängige identisch verteilte Zufallsvariablen mit Erwartungswert μ . Dann gilt

$$P\left\{\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i = \mu\right\} = 1.$$

Also sagt das starke Gesetz der großen Zahlen aus, daß für eine Folge unabhängiger identisch verteilter Zufallsvariablen X_i mit Erwartungswert μ die Folge $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$ fast sicher gegen (die konstante Zufallsvariable) μ konvergiert. Das bedeutet in der Sprache der Statistik, daß das Stichprobenmittel ein konsistenter Schätzer für μ ist.

Definition A.8 (Lindeberg-Bedingung) Seien X_1, \dots, X_n unabhängige reelle Zufallsvariablen mit Erwartungswerten μ_i und Varianzen σ_i^2 , $i = 1, \dots, n$, und seien $s_n^2 := \sigma_1^2 + \dots + \sigma_n^2$ und

$$L_n(\epsilon) := \frac{1}{s_n^2} \sum_{i=1}^n \int_{|x-\mu_i| \geq \epsilon s_n} (x - \mu_i)^2 P_{X_i}(dx).$$

Dann heißt die Aussage

$$\forall \epsilon > 0 : \lim_{n \rightarrow \infty} L_n(\epsilon) = 0$$

Lindeberg–Bedingung.

Satz A.5 (Zentraler Grenzwertsatz) Seien X_1, \dots, X_n unabhängige reelle Zufallsvariablen mit Erwartungswerten μ_i und Varianzen σ_i^2 , $i = 1, \dots, n$, und seien

$$S_n^* := \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \mu_i)}{\sqrt{\sum_{i=1}^n \sigma_i^2}} = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \mu_i)}{s_n}$$

die standardisierten Summen. Falls die Lindeberg–Bedingung erfüllt ist, gilt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P \{S_n^* \leq x\} = \phi(x),$$

wobei ϕ die Verteilungsfunktion der Standard–Normalverteilung $N(0, 1)$ bezeichnet. Der Zentrale Grenzwertsatz besagt, daß die Folge der Verteilungen der standardisierten Summen schwach gegen die standardisierte Normalverteilung $N(0, 1)$ konvergiert. Also ist S_n^* näherungsweise $N(0, 1)$ –verteilt, und $S_n = X_1 + \dots + X_n$ ist näherungsweise $N(\mu, \sigma^2)$ –verteilt mit $\mu = \mu_1 + \dots + \mu_n$ und $\sigma^2 = \sigma_1^2 + \dots + \sigma_n^2$.

Insbesondere ist die Lindeberg–Bedingung erfüllt, falls die X_i identisch verteilt sind mit Erwartungswert μ und Varianz σ^2 . Dann ist also S_n näherungsweise $N(n\mu, n\sigma)$ –verteilt. Dieser Spezialfall ist der

Satz A.6 (de Moivre–Laplace) Für jede Folge X_1, X_2, \dots unabhängiger identisch verteilter reeller Zufallsvariablen mit Erwartungswert μ und Varianz σ^2 gilt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P \left\{ \frac{1}{\sigma\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n (X_i - \mu) \leq x \right\} = \phi(x).$$

A.2 Markovketten

Es gibt zahlreiche Bücher, die stochastische Prozesse und insbesondere Markovketten ausführlich behandeln, etwa [All90, Beh00, Bre98, Chu78, Fel68, Fel71, Fis89, How71a, Kar69, Kei79, KS69]. Darüberhinaus enthalten viele Bücher zur modellbasierten Leistungsbewertung Einführungen in die Grundlagen von Markovketten, so unter anderem [Bol89, BGdMT98, BDMC⁺94, Hav98]. Dabei werden häufig jedoch sehr unterschiedliche Notationen und Konventionen vereinbart, und zudem erfolgt oft sehr früh eine Einschränkung auf homogene, also zeitunabhängige Markovketten, auf endliche Zustandsräume oder auf den zeitdiskreten Fall. Wir wollen daher an dieser Stelle die wichtigsten Grundlagen zusammenstellen, auch im Hinblick auf die Einführung unserer Notationen und Sprechweisen. Für weiterführende Details verweisen wir auf die genannte Literatur.

Markovketten sind spezielle stochastische Prozesse, die sich aufgrund der Einschränkung der Abhängigkeiten von Zufallsvariablen verhältnismäßig gut mathematisch untersuchen lassen. Der Begriff des stochastischen Prozesses spielt bei der Modellierung dynamischer Vorgänge eine zentrale Rolle. Anschaulich gesprochen modelliert ein stochastischer Prozeß den zeitlichen Verlauf eines zufallsabhängigen Geschehens. Daraus erklärt sich die Bedeutung bei der Analyse von Computer- und Kommunikationssystemen aber auch von ökonomischen Systemen und vielen Systemen in nahezu allen Naturwissenschaften wie der Biologie, Chemie oder Physik.

Definition A.9 (Stochastischer Prozeß) Ein stochastischer Prozeß ist eine Familie $(X_t)_{t \in T}$ von Zufallsvariablen auf einem Wahrscheinlichkeitsraum (Ω, \mathcal{A}, P) mit Werten in einer Menge \mathcal{S} . Die Menge T heißt Indexmenge, die Indizes $t \in T$ werden üblicherweise als Zeiten und die Werte der X_t als Zustände eines Systems interpretiert. Die Menge \mathcal{S} aller Zustände heißt Zustandsraum. Ist die Indexmenge T abzählbar, so heißt der Prozeß zeitdiskret oder kurz diskret, sonst zeitstetig oder kurz stetig. Ist der Zustandsraum abzählbar, so nennt man den Prozeß auch Kette und bei endlichem Zustandsraum endliche Kette.

Eine weitere Klassifizierung von stochastischen Prozessen erfolgt aufgrund der Abhängigkeiten der Zufallsvariablen X_t . Im einfachsten Fall sind diese unabhängig und identisch verteilt, also bildet eine Folge unabhängiger identisch verteilter Zufallsvariablen einen stochastischen Prozeß. Besteht die Abhängigkeit nur vom aktuellen Zustand, so heißt der Prozeß Markovprozeß.

Definition A.10 (Markovprozeß) Ein stochastischer Prozeß $(X_t)_{t \in T}$ heißt Markovprozeß, falls für alle $t_0 < t_1 < \dots < t_{n+1}, t_i \in T$ und $x_0, \dots, x_{n+1} \in \mathcal{S}$, $n \in \mathbb{N}$ gilt

$$P\{X_{t_{n+1}} = x_{n+1} | X_{t_n} = x_n, \dots, X_{t_0} = x_0\} = P\{X_{t_{n+1}} = x_{n+1} | X_{t_n} = x_n\}.$$

Diese Eigenschaft heißt Markoveigenschaft. Ein Markovprozeß mit endlichem oder abzählbarem Zustandsraum heißt Markovkette.

Wir betrachten im folgenden ausschließlich Markovketten. Da der Zustandsraum endlich oder abzählbar ist, identifiziert man oft OBdA $\mathcal{S} \subseteq \mathbb{N}$, typischerweise $\mathcal{S} = \{0, 1, \dots, S\}$ oder $\mathcal{S} = \{1, 2, \dots, S\}$ im endlichen Fall und $\mathcal{S} = \mathbb{N}$ oder $\mathcal{S} = \mathbb{N}^+$ im unendlichen Fall. Wir wählen dabei im folgenden die Variante, bei der jeweils die Null im Zustandsraum enthalten ist. Manchmal ist jedoch auch die Variante ohne die Null vorteilhaft.

Sprechweise: Ist $X_t = i$ für $t \in T, i \in \mathcal{S}$, so sagt man, die Markovkette ist zur Zeit t im Zustand i .

Definition A.11 (Zustandswahrscheinlichkeit, Verteilung) Die Wahrscheinlichkeit, daß eine Markovkette zur Zeit $t \in T$ in einem Zustand $j \in \mathcal{S}$ ist, heißt transiente Zustandswahrscheinlichkeit von j zur Zeit t und wird mit $\pi_j^{(t)}$ bezeichnet, also

$$\pi_j^{(t)} := P\{X_t = j\}, \quad j \in \mathcal{S}, t \in T.$$

Der Vektor $\pi^{(t)} = (\pi_0^{(t)}, \pi_1^{(t)}, \dots)$ der transienten Zustandswahrscheinlichkeiten heißt transiente Wahrscheinlichkeitsverteilung oder kürzer transiente Verteilung der Markovkette zur Zeit t .

Definition A.12 (Übergangswahrscheinlichkeiten) Für beliebige $t_1, t_2 \in T$ mit $t_1 < t_2$ heißen die Wahrscheinlichkeiten, daß die Markovkette zur Zeit t_1 in einem Zustand $i \in \mathcal{S}$ und zur Zeit t_2 in einem Zustand $j \in \mathcal{S}$ ist, transiente Übergangswahrscheinlichkeiten und werden mit $p_{ij}(t_1, t_2)$ bezeichnet, also

$$p_{ij}(t_1, t_2) := P\{X_{t_2} = j | X_{t_1} = i\}, \quad t_1, t_2 \in T, t_1 < t_2, i, j \in \mathcal{S}.$$

Es gilt für beliebige $t_1, t_2 \in T$ mit $t_1 < t_2$ und alle $i, j \in \mathcal{S}$

$$p_{ij}(t_1, t_2) \geq 0, \quad \sum_{j \in \mathcal{S}} p_{ij}(t_1, t_2) = 1.$$

Satz A.7 (Chapman–Kolmogorov–Gleichungen) Für beliebige $i, j \in \mathcal{S}$ und $t_1, s, t_2 \in T$ mit $t_1 < s < t_2$ gilt

$$p_{ij}(t_1, t_2) = \sum_{k \in \mathcal{S}} p_{ik}(t_1, s) p_{kj}(s, t_2).$$

Für beliebige $i, j \in \mathcal{S}$ und t_0, t_1, \dots, t_n , $n \in \mathbb{N}$ mit $t_0 < t_1 < \dots < t_n$ ergibt sich für die Wahrscheinlichkeit der Zufallsvariablen $(X_{t_0}, X_{t_1}, \dots, X_{t_n})$

$$\begin{aligned} P\{X_{t_0} = x_0, \dots, X_{t_n} = x_n\} &= P\{X_{t_0} = x_0\} p_{x_0 x_1}(t_0, t_1) p_{x_1 x_2}(t_1, t_2) \cdots p_{x_{n-1} x_n}(t_{n-1}, t_n) \\ &= \pi_{x_0}^{(0)} \prod_{k=0}^{n-1} p_{x_k, x_{k+1}}(t_k, t_{k+1}). \end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeit der Zufallsvariablen X_{t_0} und die Übergangswahrscheinlichkeiten bestimmen also die Wahrscheinlichkeit der $(n+1)$ -dimensionalen Zufallsvariablen $(X_{t_0}, X_{t_1}, \dots, X_{t_n})$. Man nennt Realisierungen dieser Zufallsvariablen auch Pfade oder Pfadsegmente der Markovkette.

A.2.1 Diskrete Markovketten

Im Fall abzählbarer Indexmengen identifiziert man üblicherweise $T = \mathbb{N}$ und bezeichnet allgemein den Zeitparameter mit $n \in \mathbb{N}$. Somit ergibt sich eine natürliche Definition diskreter Markovketten.

Definition A.13 (Diskrete Markovkette) Ein stochastischer Prozeß $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ mit endlichem oder abzählbarem Zustandsraum \mathcal{S} heißt zeitdiskrete Markovkette (*Discrete-Time Markov Chain, DTMC*) oder kurz diskrete Markovkette, falls für alle $n \in \mathbb{N}$ und

$x_0, \dots, x_{n+1} \in \mathcal{S}$ gilt

$$P\{X_{n+1} = x_{n+1} | X_n = x_n, \dots, X_0 = x_0\} = P\{X_{n+1} = x_{n+1} | X_n = x_n\}.$$

Analog zum allgemeinen Fall sind Zustandswahrscheinlichkeiten und Verteilungen definiert. Mit den Notationen für diskrete Markovketten heißt die Wahrscheinlichkeit

$$\pi_j^{(n)} := P\{X_n = j\},$$

daß die Markovkette zur Zeit n im Zustand j ist, die transiente Zustandswahrscheinlichkeit von j zur Zeit n . Der Vektor $\pi^{(n)} = (\pi_0^{(n)}, \pi_1^{(n)}, \dots)$ der transienten Zustandswahrscheinlichkeiten heißt transiente Verteilung der Markovkette zur Zeit n . Speziell heißen $\pi_0^{(0)}, \pi_1^{(0)}, \dots$ Anfangszustandswahrscheinlichkeiten und der Vektor $\pi^{(0)}$ Anfangsverteilung der Markovkette. Da Zustandsübergänge einer diskreten Markovkette zu diskreten Zeitpunkten stattfinden, ist also der Zustand der Kette zur Zeit $n \in \mathbb{N}$ der Zustand der Kette nach n Übergängen oder, wie man im diskreten Fall sagt, nach n Schritten.

Definition A.14 (Übergangswahrscheinlichkeiten) Für diskrete Markovketten mit Zustandsraum \mathcal{S} und $i, j \in \mathcal{S}, n, m \in \mathbb{N}$ heißen

$$p_{ij}^{(m)}(n) := p_{ij}(n, n+m) = P\{X_{n+m} = j | X_n = i\}$$

die m -Schritt-Übergangswahrscheinlichkeiten und speziell

$$p_{ij}(n) := p_{ij}^{(1)}(n) = P\{X_{n+1} = j | X_n = i\}$$

die 1-Schritt-Übergangswahrscheinlichkeiten oder kurz Übergangswahrscheinlichkeiten der Markovkette.

Definition A.15 (Homogene diskrete Markovkette) Eine diskrete Markovkette heißt homogen, falls die Übergangswahrscheinlichkeiten nicht von der Zeit n abhängen. Man spricht dann von stationären Übergangswahrscheinlichkeiten und schreibt kurz $p_{ij}^{(m)}$ bzw. p_{ij} .

Wir behandeln zunächst nur homogene diskrete Markovketten.

Hierfür ergibt sich zunächst direkt die Verteilung der Verweildauern in den Zuständen. Das Verweilen in einem Zustand $i \in \mathcal{S}$ läßt sich als Bernoulli-Experiment mit Erfolgswahrscheinlichkeit p_{ii} interpretieren. Damit ist die Verweildauer also geometrisch verteilt mit Parameter p_{ii} . Dies ist auch plausibel, da die Übergangswahrscheinlichkeiten nur vom aktuellen Zustand und nicht von der Vorgeschichte und insbesondere auch nicht von der bereits im Zustand verweilten Zeit abhängen. Die geometrische Verteilung ist die einzige diskrete Verteilung mit dieser Gedächtnislosigkeit.

Definition A.16 (Übergangsmatrix) Die Matrix $\mathbf{P}^{(m)} = (p_{ij}^{(m)})_{i,j \in \mathcal{S}}$ der m -Schritt-Übergangswahrscheinlichkeiten, also

$$\mathbf{P}^{(m)} = \begin{pmatrix} p_{00}^{(m)} & p_{01}^{(m)} & p_{02}^{(m)} & \cdots \\ p_{10}^{(m)} & p_{11}^{(m)} & p_{12}^{(m)} & \cdots \\ \vdots & \ddots & & \end{pmatrix},$$

heißt m -Schritt-Übergangsmatrix der homogenen Markovkette. Speziell heißt die Matrix $\mathbf{P} = (p_{ij})_{i,j \in \mathcal{S}}$ der 1-Schritt-Übergangswahrscheinlichkeiten, also

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} p_{00} & p_{01} & p_{02} & \cdots \\ p_{10} & p_{11} & p_{12} & \cdots \\ \vdots & \ddots & & \end{pmatrix},$$

1-Schritt-Übergangsmatrix oder kurz Übergangsmatrix der homogenen Markovkette. Für die Elemente der Übergangsmatrizen $\mathbf{P}^{(m)}$ gilt nach Definition der Übergangswahrscheinlichkeiten

$$p_{ij}^{(m)} \geq 0, \quad i, j \in \mathcal{S} \quad \text{und} \quad \sum_{j \in \mathcal{S}} p_{ij}^{(m)} = 1, \quad i \in \mathcal{S}$$

und wieder speziell für die Übergangsmatrix \mathbf{P} analog

$$p_{ij} \geq 0, \quad i, j \in \mathcal{S} \quad \text{und} \quad \sum_{j \in \mathcal{S}} p_{ij} = 1, \quad i \in \mathcal{S}.$$

Matrizen mit dieser Eigenschaft heißen auch stochastische Matrizen. Für unendliche Zustandsräume sind die Übergangsmatrizen unendlich, für endliche Zustandsräume sind sie endliche $|\mathcal{S}| \times |\mathcal{S}|$ -Matrizen. Übergangsmatrizen bilden eine Halbgruppe bezüglich der Matrixmultiplikation, d.h. das Produkt von Übergangsmatrizen ist wieder eine Übergangsmatrix.

Homogene DTMC können als gerichtete Graphen dargestellt werden, wobei die Zustände die Knoten sind und eine mit p_{ij} beschriftete Kante von $i \in \mathcal{S}$ nach $j \in \mathcal{S}$ führt, falls $p_{ij} > 0$ ist. Somit können homogene DTMC also auch mittels graphentheoretischer Methoden untersucht werden. Eine graphische Veranschaulichung erfolgt durch ein sogenanntes Zustandsübergangsdiagramm in der für Graphen üblichen Weise.

Als Chapman-Kolmogorov-Gleichungen für homogene DTMC ergeben sich mit den eingeführten Notationen

$$p_{ij}^{(\ell+m)} = \sum_{k \in \mathcal{S}} p_{ik}^{(\ell)} p_{kj}^{(m)}, \quad \ell, m \in \mathbb{N}$$

und als Spezialfall

$$p_{ij}^{(m)} = \sum_{k \in \mathcal{S}} p_{ik}^{(m-1)} p_{kj}, \quad m \in \mathbb{N}^+.$$

In Matrixschreibweise erhalten wir also

$$\mathbf{P}^{(\ell+m)} = \mathbf{P}^{(\ell)}\mathbf{P}^{(m)} \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{P}^{(m)} = \mathbf{P}^{(m-1)}\mathbf{P},$$

und somit ist die Matrix der m -Schritt-Übergangswahrscheinlichkeiten die m -te Potenz der 1-Schritt-Übergangsmatrix, und wir können daher \mathbf{P}^m schreiben. Es folgt direkt eine Vorschrift zur Berechnung der Verteilung von X_n , also der transienten Zustandswahrscheinlichkeiten $\pi^{(n)}$ zur Zeit n :

$$\pi^{(n)} = \pi^{(0)}\mathbf{P}^n = \pi^{(n-1)}\mathbf{P}.$$

Diese Vektoriteration wird häufig auch Potenzmethode genannt.

Die Wahrscheinlichkeit eines Pfadsegmentes einer homogenen DTMC ist gegeben durch

$$P\{X_i = x_i, \dots, X_n = x_n\} = P\{X_i = x_i\} \prod_{k=i}^{n-1} p_{x_k, x_{k+1}}, \quad 0 \leq i \leq n,$$

und für die Wahrscheinlichkeit eines zur Zeit 0 beginnenden Pfades der Länge n erhalten wir

$$P\{X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n\} = \pi_{x_0}^{(0)} \prod_{k=0}^{n-1} p_{x_k, x_{k+1}}.$$

Nach den vorangegangenen Ausführungen ist also insbesondere klar, daß zur Beschreibung einer homogenen DTMC die Angabe der Übergangswahrscheinlichkeiten und der Anfangsverteilung ausreichen. Somit gilt

Satz A.8 Eine homogene diskrete Markovkette ist eindeutig beschrieben durch eine Anfangsverteilung und eine Übergangsmatrix.

Zur Beschreibung und Untersuchung von Markovketten in einem Gleichgewichtszustand oder über einen langen, potentiell unendlichen Zeitraum sind die beiden folgenden Definitionen hilfreich.

Definition A.17 (Stationäre Verteilung) Eine homogene diskrete Markovkette mit Zustandsraum \mathcal{S} , Übergangsmatrix \mathbf{P} und beliebiger Anfangsverteilung hat eine stationäre Verteilung $\pi = (\pi_0, \pi_1, \dots)$, falls $\pi = \pi\mathbf{P}$, also

$$\forall j \in \mathcal{S} : \pi_j = \sum_{i \in \mathcal{S}} \pi_i p_{ij} \quad \text{und} \quad \sum_{i \in \mathcal{S}} \pi_i = 1.$$

Dann gilt also für die transienten Zustandswahrscheinlichkeiten

$$\pi_j^{(0)} = \pi_j, \quad j \in \mathcal{S} \implies \pi_j^{(n)} = \pi_j \quad \text{für alle } n \in \mathbb{N}.$$

Definition A.18 (Grenzverteilung) Die Markovkette hat eine Grenzverteilung $\pi = (\pi_0, \pi_1, \dots)$, falls

$$\forall j \in \mathcal{S} : \lim_{n \rightarrow \infty} \pi_j^{(n)} = \pi_j.$$

Eine Grenzverteilung ist immer stationär, die Umkehrung gilt im allgemeinen nicht. Stationäre Verteilungen sind im allgemeinen nicht eindeutig.

Bedingungen für die Existenz von Grenzverteilungen und die Eindeutigkeit stationärer Verteilungen können mit Hilfe von Eigenschaften der Markovkette angegeben werden. Homogene diskrete Markovketten (DTMC) werden dazu gemäß der Eigenschaften ihrer Zustände klassifiziert.

Definition A.19 (Erreichbarer Zustand) Ein Zustand $j \in \mathcal{S}$ heißt erreichbar von einem Zustand $i \in \mathcal{S}$, in Zeichen $i \rightarrow j$, falls es möglich ist, in einer endlichen Anzahl von Schritten vom Zustand i in den Zustand j zu gelangen, also

$$i \rightarrow j :\Leftrightarrow \exists n \in \mathbb{N} : p_{ij}^{(n)} > 0.$$

Die Relation \rightarrow ist offensichtlich transitiv.

Definition A.20 (Kommunizierende Zustände) Zwei Zustände $i, j \in \mathcal{S}$ kommunizieren, in Zeichen $i \leftrightarrow j$, falls sie wechselseitig voneinander erreichbar sind, also

$$i \leftrightarrow j :\Leftrightarrow i \rightarrow j \wedge j \rightarrow i.$$

Definition A.21 (Irreduzible Markovkette) Eine homogene DTMC heißt irreduzibel, falls alle Zustände kommunizieren, d.h. jeder Zustand von jedem anderen Zustand erreichbar ist, also

$$\forall (i, j) \in \mathcal{S}^2 \exists n \in \mathbb{N} : p_{ij}^{(n)} > 0.$$

Bemerkung: \leftrightarrow ist eine Äquivalenzrelation. Somit kann der Zustandsraum also in Äquivalenzklassen partitioniert werden. Eine alternative Definition irreduzibler Markovketten besteht dann darin, daß die Markovkette genau dann irreduzibel ist, wenn es genau eine Äquivalenzklasse bezüglich \leftrightarrow gibt.

Definition A.22 (Absorbierender Zustand, Absorbierende Markovkette) Ein Zustand $i \in \mathcal{S}$ heißt absorbierend, falls kein anderer Zustand von i aus erreicht werden kann, also $p_{ii} = 1$. Eine homogene DTMC heißt absorbierend, falls ihr Zustandsraum mindestens einen absorbierenden Zustand enthält.

Bemerkung: Es ist klar, daß eine absorbierende Markovkette nicht irreduzibel ist.

Definition A.23 (Rekurrenzwahrscheinlichkeiten) Für alle Zustände $i \in \mathcal{S}$ heißt die Wahrscheinlichkeit für die erste Rückkehr nach i in genau $n \in \mathbb{N}$ Schritten, also

$$f_i^{(n)} := P\{X_n = i | X_{n-1} \neq i, \dots, X_1 \neq i, X_0 = i\},$$

die n -Schritt-Rekurrenzwahrscheinlichkeit von i . Es gilt also $f_i^{(n)} = 1$ für alle $i \in \mathcal{S}$, und die Wahrscheinlichkeit, nach Verlassen eines Zustands i jemals wieder zurückzukehren,

heißt Rekurrenzwahrscheinlichkeit und ist gegeben durch

$$f_i := \sum_{n=1}^{\infty} f_i^{(n)}.$$

Definition A.24 (Transienter/Rekurrenter Zustand) Ein Zustand $i \in \mathcal{S}$ heißt transient, falls $f_i < 1$ und rekurrent, falls $f_i = 1$.

Definition A.25 (Mittlere Rekurrenzzeit) Für rekurrente Zustände $i \in \mathcal{S}$ heißt

$$m_i := \sum_{n=1}^{\infty} n f_i^{(n)}$$

die mittlere Rekurrenzzeit.

Definition A.26 (Positiv rekurrenter Zustand, Nullrekurrenter Zustand) Ein Zustand $i \in \mathcal{S}$ heißt positiv rekurrent, falls $m_i < \infty$ und nullrekurrent sonst.

Satz A.9 Für irreduzible homogene diskrete Markovketten gilt genau eine der Aussagen

- alle Zustände sind positiv rekurrent,
- alle Zustände sind nullrekurrent,
- alle Zustände sind transient.

Die Eigenschaften eines einzelnen Zustands charakterisieren also den gesamten Zustandsraum. Bei der Untersuchung von Rekurrenz und Transienz genügt es also, nur einen leicht handhabbaren Zustand zu betrachten. Man spricht daher auch von rekurrenten, positiv rekurrenten, nullrekurrenten und transienten Markovketten.

Definition A.27 (Periode eines Zustands) Für einen Zustand $i \in \mathcal{S}$ heißt

$$\text{ggT}(\{n \in \mathbb{N} : p_{ii}^{(n)} > 0\})$$

die Periode von i . Falls $\forall n \in \mathbb{N}^+ : p_{ii}^{(n)} = 0$, dann sei $d(i) := 0$. Der Zustand i ist dann transient.

Definition A.28 (Periodischer/Aperiodischer/Ergodischer Zustand) Ein rekurrenter Zustand $i \in \mathcal{S}$ heißt periodisch, falls $d(i) > 1$ und aperiodisch, falls $d(i) = 1$. Er heißt ergodisch, falls er aperiodisch und positiv rekurrent ist.

Bemerkung: Ein Zustand $i \in \mathcal{S}$ mit $p_{ii} > 0$ hat Periode 1, ist also aperiodisch.

Definition A.29 (Periodische/Aperiodische/Ergodische Markovkette) Eine homogene DTMC heißt aperiodisch, falls alle Zustände aperiodisch sind und periodisch, sonst. Sie heißt ergodisch, falls sie irreduzibel und aperiodisch ist und alle Zustände positiv rekurrent sind.

Bemerkung: Eine endliche irreduzible aperiodische homogene DTMC ist also immer ergodisch, da alle Zustände positiv rekurrent sind.

Die wichtigsten Ergebnisse für die Klassifizierung homogener diskreter Markovketten (DTMC) fassen wir nun zusammen im

Satz A.10

- Für jede aperiodische homogene DTMC existiert eine Grenzverteilung π .
- Für jede irreduzible aperiodische homogene DTMC ist die Grenzverteilung π unabhängig von der Anfangsverteilung.
- Für jede ergodische homogene DTMC ist die Grenzverteilung π eindeutige stationäre Verteilung. Diese eindeutige stationäre Verteilung kann mittels des Gleichungssystems $\pi = \pi \mathbf{P}$ mit Normierungsbedingung, also

$$\forall j \in \mathcal{S} : \pi_j = \sum_{i \in \mathcal{S}} \pi_i p_{ij}, \quad \text{und} \quad \sum_{i \in \mathcal{S}} \pi_i = 1$$

berechnet werden oder, falls die (endlichen) mittleren Rekurrenzzzeiten m_i bekannt sind, über die Beziehung

$$\forall j \in \mathcal{S} : \pi_j = \frac{1}{m_j}.$$

Wir gehen nun kurz auf inhomogene DTMC ein, also solche, bei denen die Übergangswahrscheinlichkeiten $p_{ij}(n)$ von der Zeit n abhängen können. Analog zum homogenen Fall heißt für alle $n \in \mathbb{N}$ die Matrix $\mathbf{P}(n) = (p_{ij}(n))_{i,j \in \mathcal{S}}$ die Übergangsmatrix zur Zeit n .

Sei

$$\mathbf{P}(m, k) := \mathbf{P}(m) \mathbf{P}(m+1) \cdots \mathbf{P}(k-1), \quad 0 \leq m < k.$$

Falls μ_m die Verteilung von X_m ist, dann ist $\mu_m \mathbf{P}(m, k)$ die Verteilung von X_k .

Sei $\mathcal{M}_1(\mathcal{S})$ die Menge aller Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf \mathcal{S} , und bezeichne d eine Metrik auf $\mathcal{M}_1(\mathcal{S})$.

Definition A.30 (Schwache Ergodizität) Eine inhomogene diskrete Markovkette heißt schwach ergodisch, falls für alle $m \in \mathbb{N}$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \sup_{\mu, \nu \in \mathcal{M}_1(\mathcal{S})} d(\mu \mathbf{P}(m, k), \nu \mathbf{P}(m, k)) = 0.$$

Definition A.31 (Starke Ergodizität) Eine inhomogene diskrete Markovkette heißt stark ergodisch, falls eine Wahrscheinlichkeitsverteilung π auf \mathcal{S} existiert, so daß für alle $m \in \mathbb{N}$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \sup_{\mu \in \mathcal{M}_1(\mathcal{S})} d(\mu \mathbf{P}(m, k), \pi) = 0.$$

Es gilt offensichtlich, daß starke Ergodizität schwache Ergodizität impliziert. Umgekehrt gilt

Satz A.11 Falls die Markovkette schwach ergodisch ist und für alle $n \in \mathbb{N}$ eine Wahrscheinlichkeitsverteilung $\mu(n)$ auf \mathcal{S} existiert mit

$$\mu(n) = \mu(n)\mathbf{P}(n), \quad \sum_{n=0}^{\infty} |\mu(n+1) - \mu(n)| < \infty,$$

dann ist die Markovkette stark ergodisch.

Bemerkung: Dabei ist nicht notwendig, daß $\mathbf{P}(n)$ Übergangsmatrix einer ergodischen Markovkette ist oder daß $\mu(n)$ eine eindeutige stationäre Verteilung von $\mathbf{P}(n)$ ist.

A.2.2 Stetige Markovketten

Wir betrachten nun stetige Markovketten. Dabei können Zustandsübergänge nicht nur zu diskreten sondern zu beliebigen Zeitpunkten auftreten, wie wir es in den allgemeinen Definitionen gesehen haben. Wir wollen uns hier auf homogene stetige Markovketten beschränken.

Definition A.32 (Homogene stetige Markovkette) Eine stetige Markovkette heißt homogen, falls die Übergangswahrscheinlichkeiten nicht von den Zeitpunkten t_1 und t_2 , sondern nur von der Zeitdifferenz $h := t_2 - t_1$ abhängen. Man schreibt dann

$$p_{ij}(h) := p_{ij}(t, t+h) = P\{X_{t+h} = j | X_t = i\}, \quad i, j \in \mathcal{S}, t, h \in \mathbb{R}^+.$$

Damit ist also $p_{ij}(h)$ die Wahrscheinlichkeit, in einem Zeitraum der Länge h vom Zustand i in den Zustand j zu gelangen. Analog zum diskreten Fall bilden diese Übergangswahrscheinlichkeiten die Übergangsmatrizen, also

$$\mathbf{P}(h) = \begin{pmatrix} p_{00}(h) & p_{01}(h) & p_{02}(h) & \dots \\ p_{10}(h) & p_{11}(h) & p_{12}(h) & \dots \\ \vdots & \ddots & & \end{pmatrix}.$$

Auch diese Übergangsmatrizen sind stochastisch, es gilt also

$$p_{ij}(h) \geq 0, \quad i, j \in \mathcal{S} \quad \text{und} \quad \sum_{j \in \mathcal{S}} p_{ij}(h) = 1, \quad i \in \mathcal{S}.$$

Als Chapman–Kolmogorov–Gleichungen ergeben sich für $h_1, h_2 \in \mathbb{R}^+$

$$p_{ij}(h_1 + h_2) = \sum_{k \in \mathcal{S}} p_{ik}(h_1)p_{kj}(h_2)$$

und in Matrixschreibweise

$$\mathbf{P}(h_1 + h_2) = \mathbf{P}(h_1)\mathbf{P}(h_2).$$

Definition A.33 (Stetige Halbgruppe) Eine Menge $\{\mathbf{P}(h) : h \geq 0\}$ von Übergangsmatrizen heißt stetige Halbgruppe von Übergangsmatrizen (*Transition Semigroup*), falls alle darin enthaltenen Matrizen die Chapman–Kolmogorov–Gleichungen erfüllen und

$$\lim_{h \rightarrow 0} \mathbf{P}(h) = \mathbf{P}(0) = Id.$$

Satz A.12 Ist $\{\mathbf{P}(h) : h \geq 0\}$ stetige Halbgruppe von Übergangsmatrizen einer stetigen Markovkette, dann existieren für alle Zustände $i, j \in \mathcal{S}$ die Grenzwerte

$$q_i := \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1 - p_{ii}(h)}{h} \in [0, \infty],$$

$$q_{ij} := \lim_{h \rightarrow 0} \frac{p_{ij}(h)}{h} \in [0, \infty), \quad i \neq j.$$

Mit $q_{ii} := -q_i$ heißen die q_{ij} auch *lokale Charakteristika* der Halbgruppe oder der CTMC.

Definition A.34 (Generatormatrix) Die Matrix $\mathbf{Q} = (q_{ij})_{i,j \in \mathcal{S}}$ heißt Generatormatrix, Ratenmatrix oder auch Intensitätsmatrix der stetigen Markovkette, also

$$\mathbf{Q} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\mathbf{P}(h) - \mathbf{P}(0)}{h} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h}(\mathbf{P}(h) - Id).$$

Die Generatormatrix ist somit also die Ableitung der Matrixfunktion $h \mapsto \mathbf{P}(h)$ an der Stelle 0. Sind alle Einträge von \mathbf{Q} endlich, dann heißt \mathbf{Q} *beschränkte* Generatormatrix, Ratenmatrix oder Intensitätsmatrix der Markovkette, und die zugrundeliegende Halbgruppe und die CTMC heißen *stabil*. Gilt für alle Zustände $i \in \mathcal{S}$

$$q_{ii} = -q_i = - \sum_{j \in \mathcal{S}, j \neq i} q_{ij},$$

dann heißen die Halbgruppe und die CTMC konservativ. Wir betrachten im folgenden nur stabile konservative CTMC.

Für \mathbf{Q} gilt $\exp((h_1 + h_2)\mathbf{Q}) = \exp(h_1\mathbf{Q}) \cdot \exp(h_2\mathbf{Q})$, also erfüllt eine stetige Halbgruppe von Übergangsmatrizen mit $\mathbf{P}(h) = \exp(h\mathbf{Q})$ und $h = h_1 + h_2$ die Chapman–Kolmogorov–Gleichungen. In diesem Sinne generiert \mathbf{Q} also die Übergangsmatrizen.

Im Gegensatz zum diskreten Fall ist die direkte Berechnung transienter Zustandswahrscheinlichkeiten aus den Chapman–Kolmogorov–Gleichungen schwierig. Stattdessen werden sie in ein lineares Differentialgleichungssystem (DGS) transformiert und unter Zuhilfenahme der Generatormatrix berechnet. Aus den Eigenschaften stetiger Halbgruppen von Übergangsmatrizen folgt zunächst für alle $t, h \geq 0$

$$\frac{\mathbf{P}(t+h) - \mathbf{P}(t)}{h} = \frac{\mathbf{P}(t)\mathbf{P}(h) - \mathbf{P}(t)}{h} = \mathbf{P}(t) \frac{\mathbf{P}(h) - Id}{h} = \frac{\mathbf{P}(t) - Id}{h} \mathbf{P}(t).$$

Nach Übergang zum Grenzwert für $h \rightarrow 0$ folgt also

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{P}(t) = \mathbf{P}(t) \mathbf{Q} \quad \text{bzw.} \quad \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{P}(t) = \mathbf{Q} \mathbf{P}(t),$$

das *Kolmogorov-Vorwärts-DGS* bzw. das *Kolmogorov-Rückwärts-DGS*.

In expliziter Form erhalten wir die *Kolmogorov-Vorwärts-Gleichungen*

$$\frac{\partial}{\partial t} p_{ij}(t) = \sum_{k \in \mathcal{S}} p_{ik}(t) q_{kj}$$

und die *Kolmogorov-Rückwärts-Gleichungen*

$$\frac{\partial}{\partial t} p_{ij}(t) = \sum_{k \in \mathcal{S}} p_{kj}(t) q_{ik}.$$

Damit folgt für die transienten Zustandswahrscheinlichkeiten das Differentialgleichungssystem

$$\forall j \in \mathcal{S} : \frac{\partial}{\partial t} \pi_j^{(t)} = \sum_{i \in \mathcal{S}} q_{ij} \pi_i^{(t)},$$

und in Vektor-Matrix-Schreibweise

$$\frac{\partial}{\partial t} \pi^{(t)} = \pi^{(t)} \mathbf{Q}.$$

Satz A.13 (Struktursatz für stetige Markovketten) Gegeben sei eine homogene stetige Markovkette mit Generatormatrix \mathbf{Q} . Seien X_0, X_1, X_2, \dots die Zustände, die nacheinander angenommen werden und $\tau_0, \tau_1, \tau_2, \dots$ die Verweildauern in den Zuständen. Dann gilt

- $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ ist eine homogene diskrete Markovkette mit den Übergangswahrscheinlichkeiten

$$p_{ij} = \begin{cases} -\frac{q_{ij}}{q_{ii}}, & \text{falls } i \neq j, q_{ii} < 0, \\ 0, & \text{falls } i \neq j, q_{ii} = 0 \text{ oder } i = j, q_{ii} < 0, \\ 1, & \text{falls } i = j, q_{ii} = 0. \end{cases}$$

- Die τ_i sind unabhängig, und τ_i hängt nur von X_i ab. Ist der erreichte Zustand j , also $X_i = j$, dann ist τ_i exponentiell verteilt mit Parameter $-q_{jj}$.

Man nennt $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ auch die der stetigen Markovkette eingebettete diskrete Markovkette. Die Übergangswahrscheinlichkeiten p_{ij} sind die Verzweigungswahrscheinlichkeiten in die möglichen Folgezustände, wenn in der CTMC ein Übergang aus einem Zustand i heraus stattfindet. Die zweite Aussage des Satzes besagt, daß die Verweildauern in den Zuständen einer stetigen Markovkette exponentiell verteilt sind mit der (in Grapheninterpretation

ausgedrückt) Summe der Beschriftungen der wegführenden Kanten. Die Exponentialverteilung als einzige stetige Verteilung mit der Eigenschaft der Gedächtnislosigkeit ist das Analogon zur geometrischen Verteilung im diskreten Fall. Die Einträge $q_{ij}, i \neq j$ können als Übergangsraten von Zustand i nach Zustand j interpretiert werden. Dies erklärt auch die alternative Bezeichnung der Generatormatrix als Ratenmatrix.

Satz A.14 Homogene CTMC mit identischen Generatormatrizen und identischen Anfangsverteilungen sind äquivalent. Eine homogene CTMC ist also eindeutig bestimmt durch eine Generatormatrix und eine Anfangsverteilung.

Zur Charakterisierung einer stetigen Markovkette genügt also die Angabe von \mathbf{Q} , und aus \mathbf{Q} kann für alle h die Matrix $\mathbf{P}(h)$ berechnet werden. Die stetige Halbgruppe von Übergangsmatrizen ist das stetige Analogon zu den Iterierten der Übergangsmatrix im diskreten Fall. Die Generatormatrix hat in dem Sinne kein direktes Analogon, sie ist eine stetige Notation, die Ableitungen enthält. Wie im diskreten Fall können auch homogene CTMC durch gerichtete Graphen dargestellt werden, wobei wiederum die Zustände die Knotenmenge bilden und eine mit q_{ij} beschriftete Kante von $i \in \mathcal{S}$ nach $j \in \mathcal{S}$ führt, falls $q_{ij} > 0$ ist. Anders als im diskreten Fall gibt es aufgrund der Definition der Generatormatrix mit $q_{ii} \leq 0$ für alle $i \in \mathcal{S}$ keine Kanten, die Schleifen von einem Zustand in sich selbst (*self-loops*) darstellen[§].

Stationäre Verteilungen und Grenzverteilungen homogener stetiger Markovketten sind analog zum diskreten Fall definiert, wobei die Stationaritätsbedingung bei stetigen Markovketten für alle h gelten muß. Eine stationäre Wahrscheinlichkeitsverteilung für stetige Markovketten ist also eine Wahrscheinlichkeitsverteilung $\pi = (\pi_0, \pi_1, \dots)$ so, daß $\pi \mathbf{P}(h) = \pi$ für alle h gilt. Dies macht die direkte Berechnung stationärer Verteilungen über die $\mathbf{P}(h)$ natürlich unmöglich. Eine äquivalente Formulierung ergibt sich aber unter Verwendung der Generatormatrix. Ist \mathbf{Q} Generatormatrix der Markovkette, so ist

$$\pi \mathbf{P}(h) = \pi \exp(h\mathbf{Q}) = \pi \left(Id + \frac{h}{1!} \mathbf{Q} + \frac{h^2}{2!} \mathbf{Q}^2 + \dots \right) = \pi + \frac{h}{1!} \pi \mathbf{Q} + \frac{h^2}{2!} \pi \mathbf{Q}^2 + \dots,$$

also gilt $\pi \mathbf{P}(h) = \pi \Leftrightarrow \pi \mathbf{Q} = 0$. Zusammen mit der Normierungsbedingung für Wahrscheinlichkeitsverteilungen ergibt sich also für stationäre Verteilungen von homogenen stetigen Markovketten

$$\forall j \in \mathcal{S} : \sum_{i \in \mathcal{S}} \pi_j q_{ij} = 0 \quad \text{und} \quad \sum_{i \in \mathcal{S}} \pi_i = 1.$$

Ähnlich wie im diskreten Fall kann man homogene stetige Markovketten und deren Zustände klassifizieren, um Bedingungen für die Existenz von Grenzverteilungen und die

[§]Gelegentlich wird alternativ die Generatormatrix so definiert, daß auch $q_{ii} > 0$ erlaubt ist und damit self-loops möglich sind, ohne daß sich das transiente oder das stationäre Verhalten der CTMC ändert. Im Bereich des Model-Checking etwa ist dies hilfreich, da es die übliche Interpretation linearer temporaler Operatoren erlaubt [BHHK00, BHHK02, BKHH02].

Eindeutigkeit stationärer Verteilungen zu beschreiben. Da die meisten Eigenschaften analog zum diskreten Fall definiert sind, wollen wir hier nur kurz informell darauf eingehen und dann die wichtigsten Ergebnisse zusammenfassen.

Periodizität ist im stetigen Fall nicht möglich. Erreichbare, kommunizierende und absorbierende Zustände sowie Rekurrenzbegriffe sind wie für DTMC definiert mit dem Unterschied, daß Zeitdauern anstatt Schrittzahlen betrachtet werden und für absorbierende Zustände $i \in \mathcal{S}$ für alle h die Gleichung $p_{ii}(h) = 1$ gilt. Für die Generatormatrix folgt damit für einen absorbierenden Zustand $i \in \mathcal{S}$, daß alle Einträge in der zum Zustand korrespondierenden Zeile Null sind, also $q_{ij} = 0$ für alle $j \in \mathcal{S}$. Ebenso ist die Definition irreduzibler und absorbierender homogener CTMC identisch. Eine homogene CTMC heißt also irreduzibel, falls jeder Zustand von jedem anderen Zustand erreichbar ist und absorbierend, falls es mindestens einen absorbierenden Zustand gibt. Es gilt zudem, daß eine CTMC irreduzibel ist oder Zustände rekurrent, wenn die entsprechende Eigenschaft für die eingebettete DTMC erfüllt ist. Dies ermöglicht auch die gelegentlich angegebene alternative Definition dieser Begriffe für CTMC über die eingebettete DTMC. Positive Rekurrenz dagegen ist für die beiden Markovketten unterschiedlich in dem Sinne, daß ein positiv rekurrenter Zustand der CTMC nicht notwendigerweise auch positiv rekurrent in der eingebetteten DTMC ist. Eine irreduzible homogene CTMC heißt ergodisch, wenn sie positiv rekurrent ist. Insbesondere ist also eine endliche irreduzible homogene CTMC ergodisch. Die einer ergodischen CTMC eingebettete DTMC ist nicht notwendigerweise ebenfalls ergodisch, nämlich dann nicht, wenn sie nullrekurrent oder periodisch ist. Häufig wird Ergodizität für homogene CTMC auch alternativ definiert durch die Existenz einer eindeutigen stationären Verteilung, da dies genau dann der Fall ist, wenn die CTMC irreduzibel und positiv rekurrent ist.

Satz A.15

- Für jede irreduzible homogene CTMC existiert eine von der Anfangsverteilung unabhängige Grenzverteilung π .
- Für jede ergodische homogene CTMC ist die Grenzverteilung π eindeutige stationäre Verteilung. Diese eindeutige stationäre Verteilung kann mittels des Gleichungssystems $\pi \mathbf{Q} = 0$ mit Normierungsbedingung, also

$$\forall j \in \mathcal{S} : \pi_j = \sum_{i \in \mathcal{S}} \pi_i q_{ij}, \quad \text{und} \quad \sum_{i \in \mathcal{S}} \pi_i = 1$$

berechnet werden oder, falls die (endlichen) mittleren Rekurrenzzeiten m_i bekannt sind, über die Beziehung

$$\forall j \in \mathcal{S} : \pi_j = -\frac{1}{m_j q_{jj}}.$$

A.2.3 Lösungsverfahren, Einbettung, Randomisierung

Unter der Lösung von Markovketten versteht man im allgemeinen die Berechnung transienter oder stationärer Verteilungen oder auch einzelner Zustandswahrscheinlichkeiten. Prinzipiell ist also jede endliche homogene Markovkette in diesem Sinne lösbar.

Stationäre Verteilungen ergeben sich, falls sie existieren, als Lösung eines linearen Gleichungssystems (LGS). Dabei ist zu beachten, daß sowohl stochastische $|\mathcal{S}| \times |\mathcal{S}|$ -Matrizen als auch $|\mathcal{S}| \times |\mathcal{S}|$ -Generatormatrizen den Rang $|\mathcal{S}| - 1$ haben und die Normierungsbedingung für Wahrscheinlichkeitsverteilungen die Eindeutigkeit der Lösung gewährleistet. Jedes Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme stellt also ein effektives Berechnungsverfahren für stationäre Verteilungen dar. Eine Klassifizierung solcher Verfahren kann in direkte und iterative Verfahren erfolgen.

Direkte Verfahren bestehen in der Regel aus einer äquivalenten Umformung des LGS auf Dreiecksform etwa durch zeilen- oder spaltenweise Elimination von Matrixelementen. Dabei kann es zum sogenannten *fill-in* kommen, es entstehen neue „Nicht-Null-Elemente“ in der Matrix. Direkte Verfahren liefern eine explizite Lösung, es gibt keinen Verfahrensfehler, jedoch können Rundungsfehler zum Teil erheblich sein und sich fortpflanzen. Es stellt sich das Problem der Auslöschung. Die bekanntesten direkten Verfahren sind die LR-Zerlegung oder Gauß-Elimination, die QR-Zerlegung nach Householder und die Cholesky-Zerlegung für symmetrische Matrizen. Die Platzkomplexität direkter Verfahren beträgt $O(|\mathcal{S}|^2)$ und die Zeitkomplexität typischerweise $O(|\mathcal{S}|^3)$. Für große Zustandsräume – oder allgemeiner ohne Bezug zu Markovketten für große Matrizen/LGS – sind direkte Verfahren daher im allgemeinen nicht anwendbar.

Iterative Verfahren dagegen liefern keine explizite Lösung, sondern es wird iteriert bis eine vorgegebene Genauigkeit erreicht ist. Neben Rundungsfehlern entstehen also Fehler durch das Abbruchkriterium. Zudem ist im allgemeinen a priori unklar, wieviele Iterationsschritte notwendig sind. Das Konvergenzverhalten hängt dabei stark von den Matrixeigenschaften ab. Dennoch sind iterative Verfahren oft vorteilhaft, insbesondere für große Dimensionen und dünn besetzte (*sparse*) Matrizen, da häufig eine effiziente Speicherung möglich ist. Die zugrundeliegende Matrix wird nicht verändert, es entsteht kein *fill-in*. Als gebräuchlichste iterative Verfahren sind das Einzelschrittverfahren (Gauß-Seidel), das Gesamtschrittverfahren (Jacobi) und Relaxationsverfahren wie SOR (*Successive Over Relaxation*) zu nennen. Die Potenzmethode (von-Mises-Iteration), die wir zur Berechnung transienter Verteilungen von homogenen DTMC kennengelernt haben, konvergiert für normierte Startvektoren gegen die stationäre Verteilung. Sie stellt also für homogene DTMC ein weiteres iteratives Verfahren für stationäre Lösungen dar. Allgemein ist sie eine Me-

[¶]Die Gauß-Elimination wird interpretiert als LR-Zerlegung in eine untere und eine obere Dreiecksmatrix, die aus Matrixmultiplikationen entstehen. Jeder Algorithmus zur schnellen Matrixmultiplikation verbessert daher die Zeitkomplexität der Lösung von LGS der Größe n , nach Strassen auf $O(n^{2.81})$, nach Coppersmith und Winograd auf $O(n^{2.39})$.

thode zur Berechnung des betragsmäßig größten Eigenvektors von Matrizen, wobei der zugehörige Eigenvektor als Beiprodukt abfällt. Für stochastische Matrizen hat der betragsmäßig größte Eigenwert den Wert 1, und die stationäre Verteilung ist gerade der zugehörige Eigenvektor.

Detaillierte Behandlungen der genannten und weiterer Verfahren findet man in Standardwerken zur numerischen Mathematik, etwa [HH94, Sto89, SB90].

Alternative Möglichkeiten, die stationäre Verteilung einer CTMC zu berechnen, liefern die aus dem Struktursatz bekannte eingebettete DTMC und die Methode der Randomisierung (*randomization*, [Gra77, Gra91, GM84]) oder Uniformisierung (*uniformization*). Dabei wird jeweils die CTMC in eine DTMC transformiert und die stationäre Verteilung dieser DTMC berechnet. Im Falle der eingebetteten DTMC erfolgt dann eine Normierung zur Berechnung der stationären Verteilung der CTMC, bei der Randomisierung sind die stationären Verteilungen der DTMC und der CTMC identisch.

Wir beschreiben zunächst die Berechnung mittels der eingebetteten DTMC. Die stationäre Verteilung der eingebetteten DTMC beschreibt die Wahrscheinlichkeiten für Besuche in den einzelnen Zuständen ohne Berücksichtigung der Verweildauern. Die mittlere Verweildauer in einem Zustand i einer CTMC mit Generatormatrix \mathbf{Q} ist exponentiell verteilt mit Parameter $-q_{ii}$, und damit erhält man eine Umrechnung der stationären Verteilung der eingebetteten DTMC auf die stationäre Verteilung der zugrundeliegenden CTMC.

Satz A.16 (Einbettung) Seien \mathbf{Q} Generatormatrix einer homogenen CTMC, \mathbf{P} die Übergangsmatrix und μ die stationäre Verteilung der eingebetteten DTMC. Dann sind die stationären Zustandswahrscheinlichkeiten der CTMC gegeben durch

$$\pi_i = \frac{\frac{\mu_i}{q_{ii}}}{\sum_{j \in \mathcal{S}} \frac{\mu_j}{q_{jj}}}.$$

Die Randomisierung besteht einfach in der Transformation der CTMC in eine DTMC, die sogenannte *randomisierte DTMC*, mit Übergangsmatrix

$$\mathbf{P} = \frac{1}{q} \mathbf{Q} + Id \quad \text{mit} \quad q \geq \max_{i \in \mathcal{S}} |q_{ii}|.$$

Satz A.17 (Randomisierung) Die stationären Verteilungen einer homogenen stetigen Markovkette und ihrer randomisierten homogenen diskreten Markovkette sind identisch.

Die besondere Bedeutung der randomisierten DTMC besteht darin, daß sie auch eine Möglichkeit darstellt, transiente Verteilungen homogener CTMC zu berechnen. Transiente Verteilungen von CTMC sind Lösungen eines linearen Differentialgleichungssystems (DGS). Damit sind prinzipiell alle Verfahren zur Lösung von DGS effektive Berechnungsverfahren für diese transienten Verteilungen. Im allgemeinen ist die praktische

Anwendung auf Markovketten mit großen Zustandsräumen schwierig. Die Berechnung über die allgemeine Lösung $\pi^{(t)} = \pi^{(0)} \exp(\mathbf{Q}t)$ enthält die unendliche Reihe zur Berechnung von $\exp(\mathbf{Q}t)$ und erweist sich als numerisch instabil. Häufig werden zur Lösung von Anfangswertproblemen in DGS Integrationsverfahren eingesetzt, klassifizierbar in implizite oder explizite Einschnitt- und Mehrschrittverfahren oder Extrapolationsverfahren. Die gebräuchlichsten davon sind Runge–Kutta–Verfahren. Auch hier ergeben sich jedoch oftmals numerische Probleme. Eine weitere Möglichkeit, die Lösung über Laplace–Transformationen, beinhaltet unter anderem die symbolische Lösung eines LGS und die Berechnung aller reellen Nullstellen eines Polynoms. Dies ist lediglich für CTMC mit kleinen Zustandsräumen oder sehr spezieller Struktur effizient durchführbar. Für detaillierte Beschreibungen von Verfahren für Differentialgleichungssysteme verweisen wir erneut auf [HH94, Sto89, SB90] und auf [Col90].

Wir beschreiben nun die Berechnung transienter Verteilungen homogener CTMC mittels Randomisierung. Für DTMC können transiente Verteilungen gemäß der Iterationsvorschrift der Potenzmethode, die gewissermaßen das Verhalten der Markovkette imitiert, berechnet werden. Die Randomisierung folgt dieser Idee für CTMC. Die transiente Verteilung $\pi^{(k)}$ der randomisierten DTMC nach k Schritten ist gegeben durch

$$\pi^{(k)} = \pi^{(k-1)}\mathbf{P} \quad \text{mit Anfangsverteilung } \pi^{(0)},$$

und es gilt für $i \in \mathcal{S}$

$$\pi_i^{(k)} = P\{X(t) = i \mid k \text{ Übergänge in } [0, t]\}.$$

Die Zeit zwischen zwei Übergängen ist exponentiell verteilt mit Parameter q , also formen die Übergänge einen Poisson-Prozess, und die Anzahl der Übergänge in $[0, t]$ ist Poissonverteilt mit Rate qt , also

$$P\{k \text{ Übergänge in } [0, t]\} = e^{-qt} \frac{(qt)^k}{k!}.$$

Also gilt für die transienten Zustandswahrscheinlichkeiten der CTMC

$$\begin{aligned} P\{X(t) = i\} &= \sum_{k=0}^{\infty} P\{X(t) = i \mid k \text{ Übergänge in } [0, t]\} \cdot P\{k \text{ Übergänge in } [0, t]\} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \pi_i^{(k)} \cdot e^{-qt} \frac{(qt)^k}{k!}. \end{aligned}$$

Bei der Implementierung muß die unendliche Reihe abgeschnitten werden. Dies bedeutet, daß solche Fälle nicht mehr betrachtet werden, bei denen sehr viele Übergänge der DTMC im Intervall $[0, t]$ passieren. Je größer qt , desto wahrscheinlicher ist es jedoch, daß viele

Übergänge in $[0, t]$ stattfinden, denn qt ist gerade die mittlere Anzahl der Übergänge in $[0, t]$. Dieses Problem tritt bei sogenannten steifen Markovketten auf bzw. charakterisiert gerade diese Eigenschaft.

A-priori-Fehlerabschätzung

Es bezeichne $\mu^{(t)}$ die transiente Verteilung der CTMC zur Zeit t . Wir berechnen mit der abgeschnittenen unendlichen Reihe für $i \in \mathcal{S}$

$$\mu_i^{(t)} \approx \tilde{\mu}_i^{(t)} := \sum_{k=0}^m \pi_i^{(k)} \cdot e^{-qt} \frac{(qt)^k}{k!}$$

Wegen $0 \leq \pi_i^{(k)} \leq 1$ und $e^{-qt} \frac{(qt)^k}{k!} \geq 0$ ist

$$\pi_i^{(k)} e^{-qt} \frac{(qt)^k}{k!} \leq e^{-qt} \frac{(qt)^k}{k!} \quad \text{und} \quad \tilde{\mu}_i^{(t)} \leq \mu_i^{(t)}.$$

Mit

$$\sum_{k=0}^{\infty} e^{-qt} \frac{(qt)^k}{k!} = 1$$

folgt

$$\begin{aligned} \mu_i^{(t)} - \tilde{\mu}_i^{(t)} &= \sum_{k=m+1}^{\infty} \pi_i^{(k)} \cdot e^{-qt} \frac{(qt)^k}{k!} \\ &\leq \sum_{k=m+1}^{\infty} e^{-qt} \frac{(qt)^k}{k!} = 1 - \sum_{k=0}^m e^{-qt} \frac{(qt)^k}{k!} =: \epsilon. \end{aligned}$$

Es läßt sich damit a priori feststellen, wieviele Terme berechnet werden müssen, um eine vorgegebene Genauigkeit zu erreichen. Eine solche Fehlerabschätzung ist für Integrationsverfahren nicht möglich, also ein Vorteil der Randomisierung. Zudem ist die Implementierung leicht. Allerdings kann die Berechnung der Terme $e^{-qt} \frac{(qt)^k}{k!}$ zu numerischen Problemen führen, insbesondere bei steifen Markovketten.

Eine ausführliche Behandlung weiterer Aspekte der Randomisierung findet man in [vM93]. Die für viele Verfahren wichtige strukturelle Eigenschaft der Zusammenfaßbarkeit (*Lumpability*) von Markovketten und einige Varianten sind in [KS69, Nic89, Buc94] beschrieben. Abschließend verweisen wir für spezielle numerische Verfahren für Markovketten, insbesondere auch Aggregationsverfahren für Markovketten mit sehr großen Zustandsräumen, auf [Cou77, BT86, Bol89, BDMC⁺94, Ste94, BGdMT98].

Literatur

- [ABH00] S. Asmussen, K. Binswanger, and B. Hojgaard. Rare events simulation for heavy-tailed distributions. *Bernoulli*, 6:303–322, 2000.
- [AD99] R. Atar and P. Dupuis. Large deviations and queueing networks: Methods for rate function identification. *Stochastic Processes and Their Applications*, 84:255–296, 1999.
- [ADT93] W.A. Al-Qaq, M. Devetsikiotis, and J.K. Townsend. Importance sampling methodologies for simulation of communication systems with adaptive equalizers and time varying channels. *IEEE Journal on Selected Areas in Communications*, 11:317–327, 1993.
- [AHO95] S. Andradottir, D.P. Heyman, and T.J. Ott. On the choice of alternative measures in importance sampling with Markov chains. *Operations Research*, 43(3):509–519, 1995.
- [AHO96] S. Andradottir, D.P. Heyman, and T.J. Ott. Potentially unlimited variance reduction in importance sampling of Markov chains. *Advances in Applied Probability*, 28:166–188, 1996.
- [AK89] E.H.L. Aarts and J.H.M. Korst. *Simulated Annealing and Boltzmann Machines*. Wiley & Sons, 1989.
- [All90] A.O. Allen. *Probability, Statistics and Queueing Theory with Computer Science Applications*. Academic Press, 2nd edition, 1990.
- [And98] S. Andradottir. Simulation optimization. In J. Banks, editor, *Handbook of Simulation: Principles, Methodology, Advances, Applications, and Practice*, pages 307–333. Wiley & Sons, 1998.
- [AR95] S. Asmussen and R.Y. Rubinstein. Steady state rare event simulation in queueing models and its complexity properties. In J.H. Dshalalow, editor, *Advances in Queueing: Theory, Methods and Open Problems*, pages 429–461. CRC Press, 1995.
- [AS98] C. Alexopoulos and B.C. Shultes. The balanced likelihood ratio method for estimating performance measures of highly reliable systems. In *Proceedings of the 1998 Winter Simulation Conference, WSC'98*, pages 1479–1486, 1998.
- [Ban98] J. Banks. *Handbook of Simulation: Principles, Methodology, Advances, Applications, and Practice*. Wiley & Sons, 1998.
- [Bau91] H. Bauer. *Wahrscheinlichkeitstheorie, 4. Auflage*. de Gruyter, 1991.

- [Bau92] H. Bauer. *Maß- und Integrationstheorie, 2. Auflage*. de Gruyter, 1992.
- [Bay70] A.J. Bayes. Statistical techniques for simulation models. *The Australian Computer Journal*, 2:180–184, 1970.
- [BDMC⁺94] P. Buchholz, J. Dunkel, B. Müller-Clostermann, M. Sczittnick, and S. Zäske. *Quantitative Systemanalyse mit Markovschen Ketten*. Teubner, 1994.
- [Beh00] E. Behrends. *Introduction to Markov Chains with Special Emphasis on Rapid Mixing*. Vieweg, 2000.
- [BFS87] P. Bratley, B.L. Fox, and L.E. Schrage. *A Guide to Simulation*. Springer, 1987.
- [BGdMT98] G. Bolch, S. Greiner, H. de Meer, and K.S. Trivedi. *Queueing Networks and Markov Chains*. Wiley & Sons, 1998.
- [BHHK00] C. Baier, B. Haverkort, H. Hermanns, and J.-P. Katoen. Model checking continuous-time Markov chains by transient analysis. In *Proc. CAV 2000, Springer LNCS 2421*, 2000.
- [BHHK02] C. Baier, B. Haverkort, H. Hermanns, and J.-P. Katoen. Automated performance and dependability evaluation using model checking. In *Tutorial Proc. PERFORMANCE, Springer LNCS 2459*, 2002.
- [BKHH02] C. Baier, J.-P. Katoen, H. Hermanns, and B. Haverkort. Simulation for continuous-time Markov chains. In *Proc. CONCUR 2002, Springer LNCS 2421*, 2002.
- [BM00] N.K. Boots and M. Mandjes. Fast simulation of a queue fed by a superposition of many heavy-tailed sources. In *Proceedings of the 3rd Workshop on Rare Event Simulation, RESIM2000*, 2000.
- [BNS90] J.A. Bucklew, P. Ney, and J.S. Sadowsky. Monte Carlo simulation and large deviations theory for uniformly recurrent Markov chains. *Journal of Applied Probability*, 27:44–99, 1990.
- [Bol89] G. Bolch. *Leistungsbewertung von Rechensystemen mittels analytischer Warteschlangenmodelle*. Teubner, 1989.
- [Bre98] P. Bremaud. *Markov Chains – Gibbs Fields, Monte Carlo Simulation, and Queues*. Springer, 1998.
- [BS00] N.K. Boots and P. Shahabuddin. Simulating GI/GI/1 queues and insurance risk processes with subexponential distributions. In *Proceedings of the 3rd Workshop on Rare Event Simulation, RESIM2000*, 2000.

- [BT86] A. Bobbio and K.S. Trivedi. An aggregation technique for the transient analysis of stiff Markov chains. *IEEE Transactions on Computers*, C-35(9), 1986.
- [Buc90] J.A. Bucklew. *Large Deviation Techniques in Decision, Simulation and Estimation*. Wiley & Sons, 1990.
- [Buc94] P. Buchholz. Exact and ordinary lumpability in finite Markov chains. *Journal of Applied Probability*, 31:59–74, 1994.
- [Car92] J.A. Carrasco. Failure distance based simulation of repairable fault-tolerant systems. In *Proceedings of the 5th International Conference on Modeling Techniques and Tools for Computer Performance Evaluation*, pages 337–351, 1992.
- [CFJ⁺91] J. Couvillion, R. Freire, R. Johnson, W.D. Obal II, M.A. Quereshi, M. Rai, W.H. Sanders, and J.E. Tvedt. Performability modeling with UltraSAN. *IEEE Software, Special Issue for Performance Analysis*, 1991.
- [CFM83] M. Cottrell, J.C. Fort, and G. Malgouyres. Large deviations and rare events in the study of stochastic algorithms. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 28:907–920, 1983.
- [CHJS94] C.S. Chang, P. Heidelberger, S. Juneja, and P. Shahabuddin. Effective bandwidth and fast simulation of ATMintree networks. *Performance Evaluation*, 20:45–65, 1994.
- [Chu78] K.L. Chung. *Elementare Wahrscheinlichkeitstheorie und stochastische Prozesse*. Springer, 1978.
- [CI74a] M.A. Crane and D.L. Iglehart. Simulating stable stochastic systems I: General multiserver queues. *Journal of the Association for Computing Machinery*, 21(1):103–113, 1974.
- [CI74b] M.A. Crane and D.L. Iglehart. Simulating stable stochastic systems II: Markov chains. *Journal of the Association for Computing Machinery*, 21(1):114–123, 1974.
- [CI75] M.A. Crane and D.L. Iglehart. Simulating stable stochastic systems III: Regenerative processes and discrete-event simulations. *Operations Research*, 23(1):33–45, 1975.
- [CL77] M.A. Crane and A.J. Lemoine. *An Introduction to the Regenerative Method for Simulation Analysis*. Springer, 1977.
- [Cle70] J.C. Clegg. *Variationsrechnung*. Teubner, 1970.

- [CLSY93] J.-C. Chen, D. Lu, J.S. Sadowsky, and K. Yao. On importance sampling in digital communications. *IEEE Journal on Selected Areas in Communications*, 11(3):289–299, 1993.
- [Col90] L. Collatz. *Differentialgleichungen, 7. Auflage*. Teubner, 1990.
- [Cou77] P.J. Courtois. *Decomposability, Queueing and Computer System Applications*. Academic Press, 1977.
- [DAFT93] M. Devetsikiotis, W.A. Al-Qaq, J.A. Freebersyser, and J.K. Townsend. Stochastic gradient techniques for the efficient simulation of high-speed networks using importance sampling. In *Proceedings of the IEEE Global Telecommunications Conference, GLOBECOM'93*, pages 751–756, 1993.
- [DAT93] M. Devetsikiotis, W.A. Al-Qaq, and J.K. Townsend. Simulation of digital communication systems using a stochastically optimized importance sampling technique. In *Proceedings of the IEEE Global Telecommunications Conference, GLOBECOM'93*, pages 1718–1722, 1993.
- [Dav91] L. Davis. *Handbook of Genetic Algorithms*. Van Nostrand Reinhold, 1991.
- [dB00] P.T de Boer. *Analysis and Efficient Simulation of Queueing Models of Telecommunication Systems*. PhD thesis, University of Twente, Enschede, The Netherlands, 2000.
- [dBKMR03] P.T. de Boer, D.P. Kroese, S. Mannor, and R.Y. Rubinstein. A tutorial on the cross-entropy method. <http://www.cs.utwente.nl/~ptdeboer/ce/>, 2003.
- [dBNR00] P.T de Boer, V.F. Nicola, and R.Y. Rubinstein. Adaptive importance sampling simulation of queueing networks. *Proceedings of the 2000 Winter Simulation Conference, WSC2000*, pages 646–655, 2000.
- [DGPT00] M. Devetsikiotis, S. Giordano, M. Pagano, and S. Tartarelli. Efficient estimation of the cell loss probability in a multi-buffer GPS scheduler. In *Proceedings of the 3rd International Workshop on Rare Event Simulation, RESIM 2000*, 2000.
- [dLF99] A. de La Fortelle and G. Fayolle. Large deviation principle for Markov chains in discrete time. Report de Recherche no 3791, Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique, INRIA Rocquencourt, 34 pages, 1999.
- [DS89] J.D. Deuschel and D.W. Stroock. *Large Deviations*. Academic Press, 1989.

- [DT93a] M. Devetsikiotis and J.K. Townsend. An algorithmic approach to the optimization of importance sampling parameters in digital communication system simulation. *IEEE Transactions on Communications*, 41(10):1464–1473, 1993.
- [DT93b] M. Devetsikiotis and J.K. Townsend. Statistical optimization of dynamic importance sampling parameters for efficient simulation of communication networks. *IEEE/ACM Transactions on Networking*, 1(3):293–305, 1993.
- [Duf97] M. Duflo. *Random Iterative Methods*. Springer, 1997.
- [DW02] P. Dupuis and H. Wang. Importance sampling, large deviations, and differential games. LCDS Technical Report Series 02, Lefschetz Center for Dynamical Systems, 2002.
- [DZ98] A. Dembo and O. Zeitouni. *Large Deviations Techniques and Applications*. Springer, 2nd edition, 1998.
- [Ecu90a] P. L' Ecuyer. An overview of derivative estimation. In *Proceedings of the 1990 Winter Simulation Conference, WSC'90*, pages 207–217, 1990.
- [Ecu90b] P. L' Ecuyer. Random numbers for simulation. *Communications of the ACM*, 33(10):85–97, 1990.
- [Ell99] R.S. Ellis. The theory of large deviations: From Boltzmann's 1877 calculation to equilibrium macrostates in 2D turbulence. *Physica D*, 133:106–136, 1999.
- [FDAT96] J.A. Freebersyser, M. Devetsikiotis, W.A. Al-Qaq, and J.K. Townsend. Fast simulation of tandem networks using importance sampling and stochastic gradient techniques. In *Proceedings of the International Conference on Communications, ICC'96*, 1996.
- [FDL99] M. Falkner, M. Devetsikiotis, and I. Lambadaris. Fast simulation of networks of queues with effective and decoupling bandwidths. *ACM Transaction on Modeling and Computer Simulation*, 9(1):45–58, 1999.
- [FDT94] J.A. Freebersyser, M. Devetsikiotis, and J.K. Townsend. Efficient simulation of high-speed networks using importance sampling and stochastic gradient techniques. In *Proceedings of the IEEE Global Telecommunications Conference, GLOBECOM'94*, pages 1095–1099, 1994.
- [Fel68] W. Feller. *An Introduction to Probability Theory and its Applications*, volume I. Wiley & Sons, 3rd edition, 1968.
- [Fel71] W. Feller. *An Introduction to Probability Theory and its Applications*, volume II. Wiley & Sons, 2nd edition, 1971.

- [Fis73] G.S. Fishman. Statistical analysis for queueing simulations. *Management Science*, 20:363–369, 1973.
- [Fis74] G.S. Fishman. Estimation of multiserver queueing simulations. *Operations Research*, 22:72–78, 1974.
- [Fis89] M. Fisz. *Wahrscheinlichkeitsrechnung und Mathematische Statistik*. VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, 11. Auflage, 1989.
- [FLA91] M.R. Frater, T.M. Lennon, and B.D.O. Anderson. Optimally efficient estimation of the statistics of rare events in queueing networks. *IEEE Journal on Automatic Control*, 36:1395–1405, 1991.
- [Fre89] R.D. Fresnedo. Quick simulation of rare events in networks. In *Proceedings of the 1989 Winter Simulation Conference, WSC'89*, pages 514–523, 1989.
- [Fu94] M.C. Fu. Optimization via simulation: A review. *Annals of Operations Research*, 53:199–247, 1994.
- [Fuj90] R.M. Fujimoto. Parallel discrete event simulation. *Communications of the ACM*, 33(10):30–53, 1990.
- [Gar00] M.J.J. Garvels. *The Splitting Method in Rare Event Simulation*. PhD thesis, University of Twente, Enschede, The Netherlands, 2000.
- [GCD⁺86] A. Goyal, W.C. Carter, E. De Souza e Silva, S.S. Lavenberg, and K.S. Trivedi. The system availability estimator. In *Proceedings of the 16th International Symposium on Fault-Tolerant Computing*, pages 311–316. IEEE Computer Society Press, 1986.
- [GF98] C. Görg and O. Fuß. Comparison and optimization of RESTART run time strategies. *AEÜ International Journal of Electronics and Communications, Special Issue on Rare Event Simulation*, 52(3):197–204, 1998.
- [GH01] P.W. Glynn and S.G. Henderson. Regenerative steady-state simulation of discrete-event systems. *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, 11:313–345, 2001.
- [GHNS93] P.W. Glynn, P. Heidelberger, V.F. Nicola, and P. Shahabuddin. Efficient estimation of the mean time between failures in non-regenerative dependability models. In *Proceedings of the 1993 Winter Simulation Conference, WSC '93*, pages 311–316. IEEE Computer Society Press, 1993.
- [GHS87] A. Goyal, P. Heidelberger, and P. Shahabuddin. Measure specific dynamic importance sampling for availability simulations. In *Proceedings of the 1987*

- Winter Simulation Conference, WSC '87*, pages 351–357. IEEE Computer Society Press, 1987.
- [GHS99a] P. Glasserman, P. Heidelberger, and P. Shahabuddin. Asymptotically optimal importance sampling and stratification for pricing path-dependent options. *Mathematical Finance*, 9(2):117–152, 1999.
- [GHS99b] P. Glasserman, P. Heidelberger, and P. Shahabuddin. Importance sampling in the Heath-Jarrow-Morton framework. *Journal of Derivatives*, 7(1):32–50, 1999.
- [GHS00] P. Glasserman, P. Heidelberger, and P. Shahabuddin. Portfolio value-at-risk with heavy-tailed risk factors. In *Proceedings of the 2000 Winter Simulation Conference, WSC2000*, 2000.
- [GHSZ96a] P. Glasserman, P. Heidelberger, P. Shahabuddin, and T. Zajic. Multilevel splitting for estimating rare event probabilities. *IBM Research Report, RC20478*, 1996.
- [GHSZ96b] P. Glasserman, P. Heidelberger, P. Shahabuddin, and T. Zajic. Splitting for rare event simulation: Analysis of simple cases. In *Proceedings of the 1996 Winter Simulation Conference, WSC '96*, pages 302–308, 1996.
- [GHSZ98] P. Glasserman, P. Heidelberger, P. Shahabuddin, and T. Zajic. A large deviations perspective on the efficiency of multilevel splitting. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 43(12):1666–1679, 1998.
- [GHSZ99] P. Glasserman, P. Heidelberger, P. Shahabuddin, and T. Zajic. Multilevel splitting for estimating rare event probabilities. *Operations Research*, 47(4):585–600, 1999.
- [GI89] P.W. Glynn and D.L. Iglehart. Importance sampling for stochastic simulations. *Management Science*, 35(11):1367–1392, 1989.
- [GJ79] M. Garey and D. Johnson. *Computers and Intractability*. Freeman, 1979.
- [GJK99] M. Greiner, M. Jobmann, and C. Klüppelberg. Telecommunication traffic, queueing models and subexponential distributions. *Queueing Systems*, 33:125–152, 1999.
- [GK95] P. Glasserman and S.-G. Kou. Analysis of an importance sampling estimator for tandem queues. *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, 5(1):22–42, 1995.

- [GK98a] M.J.J. Garvels and D.P. Kroese. A comparison of RESTART implementations. In *Proceedings of the 1998 Winter Simulation Conference, WSC'98*, pages 601–608, 1998.
- [GK98b] C.M. Goldie and C. Klüppelberg. Subexponential distributions. In R. Adler, R. Feldman, and M.S. Taqqu, editors, *A Practical Guide to Heavy Tails: Statistical Techniques for Analysing Heavy Tailed Distributions*, pages 435–459. Birkhäuser, 1998.
- [GK99] M.J.J. Garvels and D.P. Kroese. On the entrance distribution in RESTART simulation. In *Proceedings of the 2nd International Workshop on Rare Event Simulation, RESIM '99*, pages 65–88, 1999.
- [GKvO00] M.J.J. Garvels, D.P. Kroese, and J.K. van Ommeren. On the importance function in splitting simulation. In *Proceedings of the 3rd International Workshop on Rare Event Simulation, RESIM 2000*, 2000.
- [GLFH01] C. Görg, E. Lamers, O. Fuß, and P.E. Heegaard. Rare event simulation. *COST Report 257*, 2001.
- [Gly89] P.W. Glynn. Optimization of stochastic systems via simulation. In *Proceedings of the 1989 Winter Simulation Conference, WSC'89*, pages 90–105, 1989.
- [Gly90] P.W. Glynn. Likelihood ratio derivative estimation for stochastic systems. *Communications of the ACM*, 33:75–84, 1990.
- [Gly94] P.W. Glynn. Some topics in regenerative steady–state simulation. *Acta Applicandae Mathematicae*, 34:225–236, 1994.
- [Gly95] P.W. Glynn. Importance sampling for Markov chains: Asymptotics for the variance. *Stochastic Models*, 10:701–717, 1995.
- [GM84] D. Gross and D.R. Miller. The randomization technique as a modeling tool and solution procedure for transient Markov processes. *Operations Research*, 32:343–361, 1984.
- [Gol89] D.E. Goldberg. *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*. Addison–Wesley, 1989.
- [Gra77] W.K. Grassmann. Transient solutions in Markovian queueing systems. *Computers and Operations Research*, 4:47–53, 1977.
- [Gra91] W.K. Grassmann. Finding transient solutions in Markovian event systems through randomization. In W.J. Stewart, editor, *Numerical Solution of Markov Chains*, pages 357–371. Marcel Dekker, 1991.

- [GS96] C. Görg and F. Schreiber. The RESTART/LRE method for rare event simulation. In *Proceedings of the 1996 Winter Simulation Conference, WSC '96*, pages 390–397, 1996.
- [GSH⁺92] A. Goyal, P. Shahabuddin, P. Heidelberger, V.F. Nicola, and P.W. Glynn. A unified framework for simulating Markovian models of highly reliable systems. *IEEE Transactions on Computers*, 41:36–51, 1992.
- [GT00] K. Goseva–Popstojanova and K.S. Trivedi. Stochastic modeling formalisms for dependability, performance and performability. In G. Haring, C. Lindemann, and M. Reiser, editors, *Performance Evaluation – Origins and Directions, Lecture Notes in Computer Science*, pages 385–404. Springer, 2000.
- [GW97] P. Glasserman and Y. Wang. Counterexamples in importance sampling for large deviations probabilities. *The Annals of Applied Probability*, 7(3):731–746, 1997.
- [Hal70] J.H. Halton. A retrospective and prospective survey of the Monte Carlo method. *SIAM Review*, 12(1):1–63, 1970.
- [Hav98] B.R. Haverkort. *Performance of Computer Communication Systems – A Model-Based Approach*. Wiley & Sons, 1998.
- [Hee98a] P.E. Heegaard. *Efficient Simulation of Network Performance by Importance Sampling*. PhD thesis, Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, Norway, 1998.
- [Hee98b] P.E. Heegaard. A scheme for adaptive biasing in importance sampling. *AEÜ International Journal of Electronics and Communications, Special Issue on Rare Event Simulation*, 52(3):172–182, 1998.
- [Hei95] P. Heidelberger. Fast simulation of rare events in queueing and reliability models. *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, 5(1):43–85, 1995.
- [HH64] J.M. Hammersley and D.C. Handscomb. *Monte Carlo Methods*. Methuen, 1964.
- [HH94] G. Hämmerlin and K.-H. Hoffmann. *Numerische Matheamatik, 4. Auflage*. Springer, 1994.
- [HNS92] P. Heidelberger, V.F. Nicola, and P. Shahabuddin. Simultaneous and efficient simulation of highly dependable systems with different underlying distributions. In *Proceedings of the 1992 Winter Simulation Conference, WSC'92*, pages 458–465, 1992.

- [How71a] R.A. Howard. *Dynamic Probabilistic Systems, Volume I: Markov Models*. Wiley & Sons, 1971.
- [How71b] R.A. Howard. *Dynamic Probabilistic Systems, Volume II: Semi-Markov and Decision Processes*. Wiley & Sons, 1971.
- [Hsi97] M.-H. Hsieh. *Adaptive Importance Sampling for Rare Event Simulation of Queueing Networks*. PhD thesis, Department of Operations Research, Stanford University, California, USA, 1997.
- [HSN94] P. Heidelberger, P. Shahabuddin, and V.F. Nicola. Bounded relative error in estimating transient measures of highly dependable non-Markovian systems. *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, 4:137–164, 1994.
- [Igl75] D.L. Iglehart. Simulating stable stochastic systems V: Comparison of ratio estimators. *Naval Research Logistics Quart.*, 22:553–565, 1975.
- [IS80] D.L. Iglehart and G.S. Shedler. *Regenerative Simulation of Response Times in Networks of Queues*. Springer, 1980.
- [JBS92] M.C. Jeruchim, P. Balaban, and K.S. Shanmugan. *Simulation of Communications Systems*. Plenum Press, 1992.
- [Jer84] M.C. Jeruchim. Techniques for estimating the bit error rate in the simulation of digital communication systems. *IEEE Journal on Selected Areas in Communications*, 2:153–170, 1984.
- [JHSR89] M.C. Jeruchim, P.M. Hahn, K.P. Smyntek, and R.T. Ray. An experimental investigation of conventional and efficient importance sampling. *IEEE Transactions on Communications*, 37:578–587, 1989.
- [JN02] S. Juneja and V.F. Nicola. Efficient simulation of buffer overflow probabilities in a queueing network. *Preprint*, 2002.
- [JS92] S. Juneja and P. Shahabuddin. Fast simulation of Markovian reliability/availability models with general repair policies. In *Proceedings of the 22nd International Symposium on Fault-Tolerant Computing*, pages 150–159, 1992.
- [JS00] S. Juneja and P. Shahabuddin. A splitting based importance sampling algorithm for the fast simulation of Markov chains with small transition probabilities. *IEEE Transactions on Reliability*, 50(3):235–245, 2000.
- [JS01] S. Juneja and P. Shahabuddin. Efficient simulation of Markov chains with small transition probabilities. *Management Science*, 47(4):547–562, 2001.

- [JS02] S. Juneja and P. Shahabuddin. Simulating heavy tailed processes using delayed hazard rate twisting. *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, 12(2):94–118, 2002.
- [JSC99] S. Juneja, P. Shahabuddin, and A. Chandra. Rare event simulation of heavy tailed risk processes using hazard rate twisting and delayed changes of measure. In *Proceedings of the 2nd International Workshop on Rare Event Simulation, RESIM '99*, pages 167–184, 1999.
- [Jun93] S. Juneja. *Efficient Rare Event Simulation for Stochastic Systems*. PhD thesis, Department of Operations Research, Stanford University, California, USA, 1993.
- [Jun01] S. Juneja. Importance sampling and the cyclic approach. *Operations Research*, 49(6):900–912, 2001.
- [Jun03] S. Juneja. Efficient rare event simulation using importance sampling: An introduction. *To appear in Computational Mathematics Modelling and Algorithms*, 2003.
- [Kar69] S. Karlin. *A First Course in Stochastic Processes*. Academic Press, 1969.
- [KC78] H.J. Kushner and D.S. Clark. *Stochastic Approximation Methods for Constrained and Unconstrained Systems*. Springer, 1978.
- [Kei79] J. Keilson. *Markov Chain Models – Rarity and Exponentiality*. Springer, 1979.
- [KK98] T. Kuhlmann and C. Kelling. Case studies on multidimensional RESTART simulations. *AEÜ International Journal of Electronics and Communications, Special Issue on Rare Event Simulation*, 52(3):190–196, 1998.
- [KL51] S. Kullback and R.A. Leibler. On information and sufficiency. *Annals of Mathematical Statistics*, 22:79–86, 1951.
- [Kle78] J.P.C. Kleijnen. Communication: Reply to Fox and Schruben. *Management Science*, 24:1772–1774, 1978.
- [KM53] H. Kahn and A.W. Marshall. Methods of reducing sample size in Monte Carlo computations. *Journal of the Operations Research Society*, 1(5):263–278, 1953.
- [KN99a] D.P. Kroese and V.F. Nicola. Efficient estimation of overflow probabilities in queues with breakdowns. *Performance Evaluation*, 36–37:471–484, 1999.

- [KN99b] D.P. Kroese and V.F. Nicola. On the change of measure for a tandem Jackson network. In *2nd International Workshop on Rare Event Simulation, RESIM '99, Collection of Papers*, pages 197–212, 1999.
- [KN02] D.P. Kroese and V.F. Nicola. Efficient simulation of a tandem Jackson network. *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, 12(2):119–141, 2002.
- [Knu69] D.E. Knuth. *The Art of Computer Programming. Volume 2: Seminumerical Algorithms*. Addison-Wesley, 1969.
- [Kov94] I.N. Kovalenko. Rare events in queueing systems – a survey. *Queueing Systems*, 16:1–49, 1994.
- [Kro02] D.P. Kroese. The cross-entropy method. In *Proceedings of the 4th International Workshop on Rare Event Simulation and related Combinatorial Optimization Problems, RESIM/COP 2002*, 2002.
- [KS69] J.G. Kemeny and J.L. Snell. *Finite Markov Chains*. Van Nostrand, 1969.
- [KS97] I. Kuruganti and S. Strickland. Optimal importance sampling for Markovian systems with applications to tandem queues. *Mathematics and Computers in Simulation*, 44:61–79, 1997.
- [KW52] J. Kiefer and J. Wolfowitz. Stochastic estimation of the maximum of a regression function. *Annals of Mathematical Statistics*, 23:462–466, 1952.
- [KW93] G. Kesidis and J. Walrand. Quick simulation of ATM buffers with on-off multiclass Markov fluid sources. *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, 3(3):269–276, 1993.
- [LB84] E.E. Lewis and F. Böhm. Monte Carlo simulation of Markov unreliability models. *Nuclear Engineering and Design*, 77:49–62, 1984.
- [LK00] A.M. Law and W.D. Kelton. *Simulation Modeling and Analysis*. McGraw-Hill, 3rd edition, 2000.
- [LN92] T. Lehtonen and H. Nyhinen. Simulating level-crossing probabilities by importance sampling. *Advances in Applied Probability*, 24:858–874, 1992.
- [LR96] J.T. Lewis and R. Russell. An introduction to large deviations. Tutorial, 1996.
- [LR97] D. Lieber and R.Y. Rubinstein. Quick estimation of rare events in stochastic networks. *IEEE Transactions on Reliability Systems*, 46(2):254–265, 1997.

- [LR00] D. Lieber and R.Y. Rubinstein. Rare event estimation via cross-entropy and importance sampling. In *Proceedings of the 3rd International Workshop on Rare Event Simulation, RESIM 2000*, 2000.
- [LY88] D. Lu and K. Yao. Improved importance sampling technique for efficient simulation of digital communication systems. *IEEE Journal on Selected Areas in Communications*, 6(1):67–75, 1988.
- [LY91] D. Lu and K. Yao. Estimating variance bounds of importance sampling simulations in digital communication systems. *IEEE Transactions on Communications*, 39:1413–1417, 1991.
- [Man96] M. Mandjes. Rare event analysis of batch arrival queues. *Telecommunication Systems*, 6:161–180, 1996.
- [Man98] M. Mandjes. Asymptotically optimal importance sampling for tandem queues with Markov fluid input. *AEÜ International Journal of Electronics and Communications, Special Issue on Rare Event Simulation*, 52(3):152–161, 1998.
- [Mey80] J.F. Meyer. On evaluating the performability of degradable computing systems. *IEEE Transactions on Computers*, C-29(8):720–731, 1980.
- [Mit01] M. Mitchell. *An Introduction to Genetic Algorithms*. MIT Press, 7th printing, 2001.
- [MMT96] J.K. Muppala, M. Malhotra, and K.S. Trivedi. Markov dependability models of complex systems: Analysis techniques. In S. Ozekici, editor, *Reliability and Maintenance of Complex Systems*, pages 442–486. Springer, 1996.
- [Nak94] M.K. Nakayama. Fast simulation methods for highly dependable systems. In *Proceedings of the 1994 Winter Simulation Conference, WSC '94*, pages 221–228. IEEE Press, 1994.
- [Nak95] M.K. Nakayama. Likelihood ratio derivative estimators in simulations of reliable Markovian systems. *Management Science*, 41:525–554, 1995.
- [Nak96] M.K. Nakayama. General conditions for bounded relative error in simulations of highly reliable Markovian systems. *Advances in Applied Probability*, 28(3):687–727, 1996.
- [NHS92] V.F. Nicola, P. Heidelberger, and P. Shahabuddin. Uniformization and exponential transformation: Techniques for fast simulation of highly dependable non-Markovian systems. In *Proceedings of the 22nd International Symposium on Fault-Tolerant Computing*, pages 130–139, 1992.

- [Nic89] V.F. Nicola. Lumping in Markov reward processes. IBM Research Report 14719, 1989.
- [NSHG93] V.F. Nicola, P. Shahabuddin, P. Heidelberger, and P.W. Glynn. Fast simulation of steady-state availability in non-Markovian highly dependable systems. In *Proceedings of the 23rd International Symposium on Fault-Tolerant Computing*, pages 38–47, 1993.
- [NSN01] V.F. Nicola, P. Shahabuddin, and M.K. Nakayama. Techniques for the fast simulation of highly dependable systems. *IEEE Transactions on Reliability, Special Issue on Advances in the Simulation of Highly Dependable Systems*, 50(3):246–264, 2001.
- [OA91] G.C. Orsak and B. Aazhang. Constrained solutions in importance sampling via robust statistics. *IEEE Transactions on Information Theory*, 37:307–316, 1991.
- [OA92] G.C. Orsak and B. Aazhang. Efficient importance sampling techniques for simulation of multiuser communication systems. *IEEE Transactions on Communications*, 40(6):1111–1118, 1992.
- [OB92] M.S. Oh and J. Berger. Adaptive importance sampling in Monte Carlo integration. *Journal of Statistical Computation and Simulation*, 41:143–168, 1992.
- [OB93] M.S. Oh and J. Berger. Integration of multimodal functions by Monte Carlo importance sampling. *Journal of the American Statistical Association*, 88:450–456, 1993.
- [O’C99] N. O’Connell. Large deviations with applications to telecommunications. Lecture Notes for a course given at Uppsala University, 1999.
- [OK00] L.E. Ortiz and L.P. Kaelbling. Adaptive importance sampling for estimation in structured domains. In *Proceedings of the 16th Annual Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence, UAI 2000*, pages 446–454, 2000.
- [OS94] W.D. Obal II and W.H. Sanders. Importance sampling simulation in Ultra-SAN. *Simulation*, 62:98–111, 1994.
- [PLG02] R. Perera, E. Lamers, and C. Görg. Optimum number of retrials in multi-threshold RESTART simulations. In *Proceedings of the 4th International Workshop on Rare Event Simulation and related Combinatorial Optimization Problems, RESIM/COP 2002*, 2002.
- [Put94] M.L. Puterman. *Markov Decision Processes: Discrete Stochastic Dynamic Programming*. Wiley & Sons, 1994.

- [PW89] S. Parekh and J. Walrand. A quick simulation method for excessive backlogs in networks of queues. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 34:54–56, 1989.
- [Raw91] G. Rawlins. *Foundations of Genetic Algorithms*. Morgan Kaufman, 1991.
- [Rid98] A. Ridder. Fast simulation of discrete time queues with Markov modulated batch arrivals and batch departures. *AEÜ International Journal of Electronics and Communications, Special Issue on Rare Event Simulation*, 52(3):127–132, 1998.
- [Rid00] A. Ridder. Fast simulation of retrial queues. In *Proceedings of the 3rd Workshop on Rare Event Simulation, RESIM2000*, 2000.
- [Rip87] B.D. Ripley. *Stochastic Simulation*. Wiley & Sons, 1987.
- [RK04] R.Y. Rubinstein and D.P. Kroese. *The Cross-Entropy Method: A Unified Approach to Combinatorial Optimization, Monte-Carlo Simulation and Machine Learning*. Springer, to be published, 2004.
- [RM51] H. Robbins and S. Monro. A stochastic approximation method. *Annals of Mathematical Statistics*, 22:400–407, 1951.
- [RM98] R.Y. Rubinstein and B. Melamed. *Modern Simulation and Modeling*. Wiley & Sons, 1998.
- [Ros70] S.M. Ross. *Applied Probability Models with Optimization Applications*. Holden-Day, 1970.
- [Ros02] S.M. Ross. *Simulation*. Academic Press, 3rd edition, 2002.
- [RS93] R.Y. Rubinstein and A. Shapiro. *Discrete Event Systems: Sensitivity Analysis and Stochastic Optimization by the Score Function Method*. Wiley & Sons, 1993.
- [RSN⁺00] D. Remondo, R. Srinivasan, V.F. Nicola, W.C. van Etten, and H.E.P. Tattje. Adaptive importance sampling for performance evaluation and parameter optimization of communication systems. *IEEE Transactions on Communications*, 48(4):557–565, 2000.
- [RST89] A. Reibman, R.M. Smith, and K.S. Trivedi. Markov and Markov reward model transient analysis: An overview of numerical approaches. *European Journal of Operations Research*, 40:257–267, 1989.
- [RSU96] R.Y. Rubinstein, A. Shapiro, and S. Uryasev. The score function method. *Encyclopedia of Management Sciences*, 1996.

- [Rub81] R.Y. Rubinstein. *Simulation and the Monte Carlo Method*. Wiley & Sons, 1981.
- [Rub86] R.Y. Rubinstein. *Monte Carlo Optimization, Simulation, and Sensitivity of Queueing Networks*. Wiley & Sons, 1986.
- [Rub97] R.Y. Rubinstein. Optimization of computer simulation with rare events. *European Journal of Operations Research*, 99:89–112, 1997.
- [Rub99a] R.Y. Rubinstein. The Cross-Entropy method for combinatorial and continuous optimization. *Methodology and Computing in Applied Probability*, 2:127–190, 1999.
- [Rub99b] R.Y. Rubinstein. Rare event simulation via cross entropy and importance sampling. In *2nd International Workshop on Rare Event Simulation, RESIM '99, Collection of Papers*, pages 1–18, 1999.
- [Rub01a] R.Y. Rubinstein. Combinatorial optimization, cross-entropy, ants and rare events. In S. Uryasev and P.M. Pardalos, editors, *Stochastic Optimization: Algorithms and Applications*, pages 304–358. Kluwer, 2001.
- [Rub01b] R.Y. Rubinstein. Combinatorial optimization via cross-entropy. In S. Gass and C. Harris, editors, *Encyclopedia of Operations Research and Management Sciences*. Kluwer, 2001.
- [Rub02] R.Y. Rubinstein. Cross-entropy and rare events for maximal cut and bipartition problems. *IEEE Transactions on Simulation*, 2002.
- [Sad91] J.S. Sadowsky. Large deviations and efficient simulation of excessive backlogs in a GI/G/m queue. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 36:1383–1394, 1991.
- [Sad93] J.S. Sadowsky. On the optimality and stability of exponential twisting in Monte Carlo estimation. *IEEE Transactions on Information Theory*, 39:119–128, 1993.
- [San98] W. Sandmann. Wartezeitverteilungen in Tandem-Warteschlangennetzen mit stückweise approximierenden Dichten maximaler Entropie. Master's thesis, Universität Bonn, Institut für Informatik, 1998.
- [San00] W. Sandmann. Application of importance sampling to transition class models with rare events. In *Proceedings of the 3rd International Workshop on Rare Event Simulation, RESIM2000*, 2000.

- [San04] W. Sandmann. Relative error and asymptotic optimality in estimating rare event probabilities by importance sampling. In *Proceedings of the 2004 OR Society Simulation Workshop (SW04) in cooperation with the ACM SIGSIM*, pages 49–57, March 23–24, 2004.
- [SB80] K.S. Shanmugan and P. Balaban. A modified Monte–Carlo simulation technique for the evaluation of error rate in digital communication systems. *IEEE Transactions on Communications*, 28:1916–1924, 1980.
- [SB90] J. Stoer and R. Bulirsch. *Numerische Mathematik II*. Springer, 1990.
- [Sch93] H.-J. Schlegel. On the asymptotic efficiency of importance sampling techniques. *IEEE Transactions on Information Theory*, 39:710–715, 1993.
- [SD03] B.C. Shultes and R. Dhamodaran. Efficient analysis of rare events associated with individual buffers in a tandem Jackson network. In *Proceedings of the 2003 Winter Simulation Conference, WSC'03*, pages 503–511, 2003.
- [SF00] Y. Su and M.C. Fu. Importance sampling in derivative securities pricing. *Proceedings of the 2000 Winter Simulation Conference, WSC2000*, pages 587–596, 2000.
- [Sha90] P. Shahabuddin. *Simulation and Analysis of Highly Reliable Systems*. PhD thesis, Department of Operations Research, Stanford University, California, USA, 1990.
- [Sha94a] P. Shahabuddin. Fast transient simulation of Markovian models of highly dependable systems. *Performance Evaluation*, 20:267–286, 1994.
- [Sha94b] P. Shahabuddin. Importance sampling for the simulation of highly reliable Markovian systems. *Management Science*, 40:333–352, 1994.
- [Sha95] P. Shahabuddin. Rare event simulation in stochastic models. In *Proceedings of the 1995 Winter Simulation Conference, WSC'95*, pages 178–185, 1995.
- [She93] G.S. Shedler. *Regenerative Stochastic Simulation*. Academic Press, 1993.
- [Shu02] B.C. Shultes. A balanced likelihood ratio approach for analyzing rare events in a tandem Jackson network. In *Proceedings of the 2002 Winter Simulation Conference, WSC'02*, pages 424–432, 2002.
- [Sie76] D. Siegmund. Importance sampling in the Monte Carlo study of sequential tests. *Annals of Statistics*, 4:673–684, 1976.
- [Sie00] G. Siersetzki. Algorithmen zur Erzeugung von Übergangsklassen–Modellen aus erweiterten stochastischen Petrinetzen. Master's thesis, Universität Bonn, Institut für Informatik, 2000.

- [Sig99] K. Sigman. A primer on heavy-tailed distributions. *Queueing Systems*, 33:261–275, 1999.
- [SJ80] J.E. Shore and R.W. Johnson. Axiomatic derivation of the principle of maximum entropy and the principle of minimum cross-entropy. *IEEE Transactions on Information Theory*, 26(1), 1980.
- [Smi01] P.J. Smith. Underestimation of rare event probabilities in importance sampling simulations. *Simulation*, 76(3):140–150, 2001.
- [SOQW95] W.H. Sanders, W.D. Obal II, M.A. Qureshi, and F.K. Widjanarko. The UltraSAN modeling environment. *Performance Evaluation*, 24(1):89–115, 1995.
- [SR93] J.S. Stadler and S. Roy. Adaptive importance sampling. *IEEE Journal on Selected Areas in Communications*, 11(3):309–316, 1993.
- [Sri98] R. Srinivasan. Some results in importance sampling and an application to detection. *Signal Processing*, 65(1), 1998.
- [Sri02] R. Srinivasan. *Importance Sampling – Applications in Communications and Detection*. Springer, 2002.
- [SSG97] P.J. Smith, M. Shafi, and H. Gao. Quick simulation: A review of importance sampling techniques in communications systems. *IEEE Journal on Selected Areas in Communications*, 15(4):597–613, 1997.
- [Ste94] W.J. Stewart. *Introduction to the Numerical Solution of Markov Chains*. Princeton University Press, 1994.
- [Sto89] J. Stoer. *Numerische Mathematik I*. Springer, 1989.
- [STR88] R.M. Smith, K.S. Trivedi, and A.V. Ramesh. Performability analysis: Measures, an algorithm, and a case study. *IEEE Transactions on Computers*, 37(4):406–417, 1988.
- [Str89] J.C. Strelen. Piecewise approximation of densities of maximum entropy: Waiting times in G/G/1-systems. In R. Puigjaner and D. Potier, editors, *Modelling Techniques and Tools for Computer Performance Evaluation*. Plenum Press, 1989.
- [Str97a] J.C. Strelen. Approximate disaggregation–aggregation solutions for general queueing networks. In A.R. Kaylan and A. Lehmann, editors, *Proceedings of the European Simulation Multi-Conference (ESM 97)*, pages 773–778. Society for Computer Simulation, 1997.

- [Str97b] J.C. Strelen. Approximate product form solutions for Markov chains. *Performance Evaluation*, 30:87–110, 1997.
- [Str97c] J.C. Strelen. Loss queueing networks with bursty arrival processes and phase type service times: Approximate analysis. In D. Kouvatsos, editor, *Proceedings of the 5th IFIP Workshop on Performance Modelling and Evaluation of ATM Networks*, pages 87/1–87/10. University of Bradford, 1997.
- [Str98] J.C. Strelen. Monte–Carlo simulation of Markov chains using a high–level modelling technique. In A. Bargiela and E.J. Kerckhoffs, editors, *Simulation Technology: Science and Art – Proceedings of the ESS 98*, pages 213–217. Society for Computer Simulation, 1998.
- [Str00] J.C. Strelen. Generation of transition class models from formal queueing network descriptions. In P.F. Möller, editor, *Simulation in Industry – Proceedings of the ESS 2000*, pages 525–530. The SCS Publishing House, 2000.
- [Stu98] K.T. Sturm. Wahrscheinlichkeitstheorie – Skript zur Vorlesung, Kapitel 13: Große Abweichungen. Institut für Angewandte Mathematik, Abteilung für Wahrscheinlichkeitstheorie und Mathematische Statistik, Universität Bonn, 1998.
- [SVM03a] W. Sandmann, A. Varga, and K.M. Masslow. Architecture for generating random numbers in simulation programs. *Manuscript for Periodica Polytechnica*, 2003.
- [SVM03b] W. Sandmann, A. Varga, and K.M. Masslow. Generating random numbers in OMNeT++. In *Proceedings of the 3rd OMNeT++ Workshop*, Budapest, Hungary, January 27–28 2003.
- [SW95] A. Shwartz and A. Weiss. *Large Deviations for Performance Analysis*. Chapman & Hall, 1995.
- [SW99] N.M Steiger and J.R. Wilson. Improved batching for confidence interval construction in steady–state simulation. *Proceedings of the 1999 Winter Simulation Conference, WSC99*, pages 442–451, 1999.
- [TCMS99] K.S. Trivedi, G. Ciardo, M. Malhotra, and R.A. Sahner. Dependability and performability analysis. In L. Donatiella and R. Nelson, editors, *Performance Evaluation of Computer and Communication Systems*, pages 587–612. Springer, 1999.
- [Tow00] J.K. Townsend. Practical rare event simulation: Progress and challenges. In *Proceedings of the 3rd International Workshop on Rare Event Simulation, RESIM2000*, 2000.

- [TPD00] S. Tartarelli, M. Pagano, and M. Devetsikiotis. Efficient estimation of the cell loss probability in a two-node buffer GPS scheduler. In *Proceedings of the 2000 International Conference on Communications*, 2000.
- [Tso92] P. Tsoucas. Rare events in series of queues. *Journal of Applied Probability*, 29:168–175, 1992.
- [VA98] J. Villen-Altamirano. RESTART method for the case where rare events can occur in retrials from any threshold. *AEÜ International Journal of Electronics and Communications, Special Issue on Rare Event Simulation*, 52(3):183–189, 1998.
- [VAMGF94] M. Villen-Altamirano, A. Martinez-Marron, J. Gamo, and F. Fernandez-Cuesta. Enhancement of the accelerated simulation method RESTART by considering multiple thresholds. In *Proceedings of the 14th International Teletraffic Congress, ITC-14*, pages 797–810. Elsevier, North-Holland, 1994.
- [Var02] A. Varga. OMNeT++ discrete event simulation system. User Manual, Version 2.2, Technical University of Budapest, Faculty of Electrical Engineering and Informatics, Department of Telecommunications, 2002.
- [VAVA91] M. Villen-Altamirano and J. Villen-Altamirano. RESTART: A method for accelerating rare event simulations. In J.W. Cohen and C.D. Pack, editors, *Queueing Performance and Control in ATM, Proceedings of the 13th International Teletraffic Congress, ITC-13*, pages 71–76. Elsevier, North-Holland, 1991.
- [VAVA94] M. Villen-Altamirano and J. Villen-Altamirano. RESTART: A straightforward method for fast simulation of rare events. In *Proceedings of the 1994 Winter Simulation Conference, WSC '94*, pages 282–289, 1994.
- [VAVA99] M. Villen-Altamirano and J. Villen-Altamirano. About the efficiency of RESTART. In *Proceedings of the 2nd International Workshop on Rare Event Simulation, RESIM'99*, pages 99–128, 1999.
- [VAVA00] M. Villen-Altamirano and J. Villen-Altamirano. Analysis of RESTART simulation: Theoretical basis and sensitivity study. In *Proceedings of the 3rd International Workshop on Rare Event Simulation, RESIM 2000*, 2000.
- [VAVA02] M. Villen-Altamirano and J. Villen-Altamirano. Optimality and robustness of RESTART simulation. In *Proceedings of the 4th International Workshop on Rare Event Simulation and related Combinatorial Optimization Problems, RESIM/COP 2002*, 2002.

- [VCW94] G. de Veciana, C. Courcoubetis, and J. Walrand. Decoupling bandwidths for networks: A decomposition approach to resource management. In *Proceedings of the IEEE Infocom*, volume 2, pages 466–474, 1994.
- [Vel76] W. Velte. *Direkte Methoden der Variationsrechnung*. Teubner, 1976.
- [vM93] A.P.A. van Moorsel. *Performability Evaluation Concepts and Techniques*. PhD thesis, University of Twente, Enschede, The Netherlands, 1993.
- [Web79] R. Weber. The interchangeability of $M/M/1$ queues in series. *Journal of Applied Probability*, 16:690–695, 1979.
- [Wel83] P.D. Welch. The statistical analysis of simulation results. In S. Lavenberg, editor, *The Computer Performance Modeling Handbook*, pages 320–323. Academic Press, 1983.
- [WF93] Q. Wang and V.S. Frost. Efficient estimation of cell blocking probability for ATM systems. *IEEE/ACM Transactions on Networking*, 1(2), 1993.
- [Yan95] T.-H. Yang. *Efficient Simulation Techniques with Application to ATM Switches*. PhD thesis, Department of Operations Research, Stanford University, California, USA, 1995.
- [YS00] Y. Yeh and B. Schmeiser. Simulation output analysis via dynamic batch means. *Proceedings of the 2000 Winter Simulation Conference, WSC2000*, pages 637–645, 2000.