

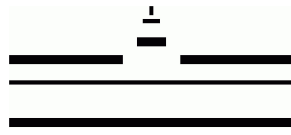
Westfälische Wilhelms-Universität Münster
Institut für Mathematische Statistik

Diplomarbeit

Das Hard-Core-Modell zur Beschreibung der Energielandschaft eines Glasbildners

eingereicht von
Andrea Winkler

15. September 2009



Westfälische Wilhelms-Universität Münster
Institut für Mathematische Statistik

Diplomarbeit

Das Hard-Core-Modell zur Beschreibung der Energielandschaft eines Glasbildners

eingereicht von

Andrea Winkler

betreut von

Prof. Dr. G. Alsmeyer

und

Prof. Dr. A. Heuer

15. September 2009

Diese Arbeit ist Anne Rolf gewidmet.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1. Grundlagen zum Hard-Core-Modell und zu Markov-Ketten	5
1.1. Einführung: Das Hard-Core-Modell	5
1.1.1. Modellbeschreibung	6
1.1.2. Stochastische Prozesse im Hard-Core-Modell	8
1.2. Einführung: Markov-Ketten im Hard-Core-Modell	10
1.2.1. Markoveigenschaft	10
1.2.2. Zustandseigenschaften	13
1.2.3. Ergodensatz und Kopplungsmethode	16
1.3. Computersimulationen	23
1.3.1. Finite-size-Effekte und periodische Randbedingungen	23
1.3.2. Metropolis-Algorithmus	25
2. Kombinatorische Methode	31
2.1. $M \times 1$ -Gitter	33
2.2. $M \times 2$ -Gitter	36
2.3. $M \times N$ -Gitter	40
2.4. Fazit	43
3. Numerische Methode	45
4. Prozessbasierte Methode: Kopplung minimaler Pfade	49
4.1. Mischzeit	50
4.2. Allgemeine Kopplung minimaler Pfade	52
4.3. Kopplung minimaler Pfade im Hard-Core-Modell	58
4.3.1. Mischzeit für die globale Bewegung eines Teilchens	61
4.3.2. Mischzeit für die lokale Bewegung eines Teilchens	72
4.4. Fazit und Ausblick	77
5. Anwendung: Analyse der Entropie pro Teilchen	79
A. Anhang	91
Literaturverzeichnis	95

Einleitung

Gemäß Galileo Galilei ist "das Buch der Natur mit mathematischen Symbolen geschrieben". Nutzen wir also die Mathematik, um bisweilen sehr komplizierte und doch perfekt aufeinander abgestimmte Naturphänomene ein kleines bisschen besser zu verstehen. Das zur Betrachtung in dieser Arbeit ausgewählte Objekt ist die Stoffklasse der sogenannten *Gläser*. Diese besteht aus mehr als nur dem aus dem Alltag bekannten Fenster- oder Flaschenglas.

Im Allgemeinen kann ein Stoff bei gegebener Temperatur und gegebenem Druck nur genau einen der möglichen Aggregatzustände fest, flüssig oder gasförmig annehmen. Bei 1013hPa ist beispielsweise Wasser bei weniger als 0°C fest, zwischen 0°C und 100°C flüssig und bei noch höheren Temperaturen gasförmig. Diese verschiedenen Zustände sind eng verknüpft mit der unterschiedlichen Bewegung der Teilchen bei verschiedenen Temperaturen und Drücken und der aus diesen Bewegungen resultierenden kinetischen Energie E_{kin} . Je höher die Temperatur (und damit die kinetische Energie) bzw. geringer der Druck ist, desto freier können sich die Teilchen bewegen. Im festen, kristallinen Zustand und bei entsprechend geringer kinetischer Energie bilden die Teilchen ein streng geordnetes, regelmäßiges Gitter, in dem sie nur minimal um ihre Gitterposition schwingen. Wird die kinetische Energie des Systems größer, so bricht die strenge Ordnung durch größere Teilchenbewegungen auf und der Stoff wird flüssig. Beim Übergang zum Gaszustand wird sie zugunsten der vollständig freien Beweglichkeit der Teilchen ganz aufgegeben.

Ein Übergang zwischen den Aggregatzuständen wird u.a. durch eine Temperaturänderung erreicht. Kühlt man eine Flüssigkeit ab, so sinkt ihre kinetische Energie, die Bewegungen der Teilchen werden langsamer und das System strebt eben jenen energiearmen, kristallinen Zustand an, in dem die Teilchen sich zum wohlgeordneten Gitter zusammenfinden.

Unter gewissen Voraussetzungen kann ein Stoff aber einen anderen Aggregatzustand annehmen, als ihm bei gegebener Temperatur und gegebenem Druck entspricht. Durch geschicktes Abkühlen einer Flüssigkeit etwa kann man bei einigen Stoffen die Kristallisation verhindern. Dazu muss der Stoff sehr schnell abgekühlt werden. Durch den starken Energieverlust in kurzer Zeit werden dann die Bewegungen der Teilchen so rasch langsamer, dass sie nicht ausreichend Zeit haben, sich im Kristallgitter anzuordnen, sondern in dem ungeordneten Zustand der Flüssigkeit erstarren. Eine solche Flüssigkeit nennt man *unterkühlte Flüssigkeit* oder einfach *Glas*. Ein Stoff, der ein solches Glas ausbilden kann, wird *Glasbildner* genannt.

Eine gute Anschauung erhält man, wenn man die durch die potentielle Energie

gegebene *Energielandschaft* (kurz PEL für *potential energy landscape*) eines solchen Systems betrachtet. Die potentielle Energie E_{pot} ist die Energie, die ein System aufgrund der Lage der Teilchen zueinander besitzt. Bei m Teilchen ist sie daher eine Funktion der $3m$ Raumvariablen. Vereinfacht wollen wir den Zustandsraum (d.h. den $3m$ -dimensionalen Raum aller möglichen Koordinaten, auch *Phasenraum* genannt) als 1-dimensionalen Raum auffassen, in dem wir die Zustände so anordnen, dass benachbarte Zustände direkt voneinander aus erreichbar sind. In Abbildung 0.1 ist eine beispielhafte Energielandschaft dargestellt.

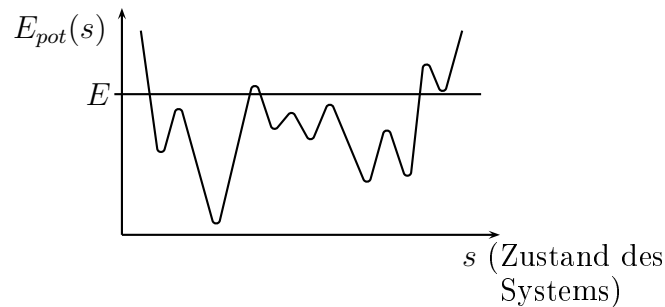


Abbildung 0.1.: Beispielhafte Energielandschaft

Im Kristall haben die Teilchen die energetisch günstigste Lage zueinander, in diesem Zustand befindet sich also das globale Minimum der potentiellen Energie. Im Glaszustand dagegen sind sie nicht perfekt angeordnet, dieser hat somit eine höhere potentielle Energie als der Kristall.

Die Gesamtenergie des Systems ergibt sich als Summe der kinetischen und der potentiellen Energie. Bei gegebener Gesamtenergie E kann sich das System in den Bereichen des Phasenraumes frei bewegen, in denen die potentielle Energie maximal E ist. Höherenergetische Zustände können nicht angenommen werden. Senkt man die Energie ab, so schränkt man den erreichbaren Zustandsraum immer weiter ein. Dabei kann es passieren, dass das System in einer kleinen Umgebung um ein lokales Minimum gefangen wird, da der Energieberg zum Verlassen dieser Region zu hoch ist. Genau dies geschieht beim Übergang zum Glaszustand. Wird die Temperatur sehr schnell reduziert, so wandert das System entlang des kleinsten Gradienten durch den Phasenraum, bis es ein lokales Minimum erreicht. Um dieses wieder zu verlassen und das globale Minimum, also den Kristallzustand zu erreichen, reicht die verbliebene Energie dann nicht mehr aus.

Energielandschaften makroskopischer Systeme sind natürlich keinesfalls so einfach wie Abbildung 0.1 es suggeriert. Vielmehr sind sie Funktionen im hochdimensionalen Phasenraum. Dennoch ist die Betrachtung der PEL ein mächtiges Werkzeug bei der Untersuchung von Gläsern (siehe auch [Heu08]), weshalb man durch Vereinfachungen versucht, ihrer habhaft zu werden. Eine solche Vereinfachung besteht darin, nur die

lokalen Minima der PEL zu betrachten, da sich ein System in guter Näherung als Prozess in der Zeit von einem lokalen Minimum zum nächsten bewegt. Eine erste Größe zum Verständnis eines solchen ungeordneten Systems ist daher die Anzahl lokaler Minima in der Energielandschaft. Es gibt verschiedene einfache Modelle, mit denen man diese Zahl zu ermitteln versucht (siehe [Heu08] Abschnitt 3.1). In dieser Arbeit wollen wir ein sehr einfaches und dennoch nicht triviales, auf Teilchen basierendes Modell studieren. Dies macht es auch als eigenständiges Modell zur Teilchenbewegung interessant.

Man stelle sich ein $M \times N$ -Gitter vor, auf das m Teilchen platziert werden. Wir vereinbaren, dass Energieminima dort auftreten, wo keine zwei Teilchen überlappen. Setzt man voraus, dass ein Gitterplatz etwas kleiner ist als ein Teilchen, so bedeutet dies, dass die relevanten Zustände diejenigen sind, bei denen keine zwei benachbarten Gitterplätze gleichzeitig besetzt sind. Es ergibt sich so das in der Mathematik bekannte *Hard-Core-Modell* (siehe Abschnitt 1.1), dessen Zustände abgezählt werden müssen.

Die Ergebnisse über die Anzahl an Zuständen sind nicht nur im Zusammenhang mit Minima der Energielandschaft von Interesse. Wie bereits erwähnt, ist das Modell auch geeignet, ein Vielteilchensystem zu beschreiben. Bei einem solchen ist unter anderem die *Entropie* S einer eingehenden Betrachtung wert. Diese ist definiert als

$$S := k_B \ln A \quad \text{mit der Boltzmann-Konstante } k_B = 1.3806504 \cdot 10^{-23} \text{ J/K,}$$

wobei A genau die Anzahl an Zuständen ist. In der Regel ist A sehr groß und schwierig zu berechnen. Daher werden Entropieänderungen bei chemischen Reaktionen auf thermodynamischem Wege bestimmt. Für umkehrbare Prozesse etwa kann dies über die Gleichung $\Delta S = Q_{\text{rev}}/T$ geschehen, wobei Q_{rev} die übertragene Wärmemenge und T die Temperatur bezeichnet (siehe dazu auch Abschnitt 3.5.4. in [Rie99]).

Für das Hard-Core-Modell kann aber, wie wir in Kapitel 5 sehen werden, eine geschlossene Formel für die Entropie angegeben und dadurch nicht nur Entropieänderungen sondern die absolute Entropie berechnet werden.

Aufbau

Die vorliegende Arbeit unterteilt sich in drei Abschnitte. Im ersten, bestehend aus Kapitel 1, wollen wir zunächst das Hard-Core-Modell einführen und einige Fakten zu endlichen Markov-Ketten zusammentragen, welche wir bei der Untersuchung dieses Modells benötigen. Wichtig ist dabei vor allem die Kopplungsmethode, welche ein sehr wirkungsvolles und zugleich sehr anschauliches Werkzeug zur Untersuchung von stochastischen Prozessen ist. Darüber hinaus betrachten wir allgemeine Fragen zu Computersimulationen und stellen insbesondere den Metropolis-Algorithmus vor.

Die Kapitel 2, 3 und 4 bilden zusammen den zweiten Abschnitt und befassen sich mit der Bestimmung der Anzahl A an Zuständen im Hard-Core-Modell. Es werden

drei Verfahren hierfür angeben: Zum einen auf analytischem Wege in Kapitel 2 mit einer Formel aus [MH92]. Es ergibt sich dort mit kombinatorischen Argumenten eine exakte lineare Rekursion für A . Zum anderen entwickeln wir in Kapitel 3 eine numerische Methode. Diese basiert auf dem starken Gesetz der großen Zahlen und ist deshalb leider nur asymptotisch exakt. Es wird sich aber herausstellen, dass diese für die Anwendung am geeignetsten ist. Als drittes stellen wir ein in [BD97] entwickeltes Verfahren vor, mit dessen Hilfe die Anzahl an Zuständen durch die stationäre Verteilung geeigneter stochastischer Prozesse geschätzt werden kann. Dabei läuft es darauf hinaus, die Geschwindigkeit der gleichmäßigen Verteilungskonvergenz gegen die stationäre Verteilung zu bestimmen. Von besonderem Interesse ist für uns nicht nur das Ergebnis, sondern auch die auf einer Kopplung basierenden Methode.

Den dritten Abschnitt und Abschluss dieser Arbeit bildet Kapitel 5, in dem wir die erhaltenen Daten auswerten und eine geschlossene Form für A herleiten, was von keinem der vorstehenden Verfahren geliefert wird. Insbesondere kann damit die Abhängigkeit der Entropie bzw. der Anzahl an Minima in der PEL von der Teilchenzahl und der Gittergröße untersucht werden.

Dank

Ich danke Herrn Prof. Dr. Gerold Alsmeyer und Herrn Prof. Dr. Andreas Heuer für die Bereitstellung dieses aus mathematischer und physikalischer Sicht interessanten und der weiteren Vertiefung würdigen Themas sowie für die anregende und hilfreiche Betreuung. Sie haben sich die Mühe gemacht eine interdisziplinäre Diplomarbeit zu betreuen.

1. Grundlagen zum Hard-Core-Modell und zu Markov-Ketten

Zu Beginn dieser Arbeit wollen wir das Hard-Core-Modell (kurz HC-Modell) einführen, welches wir in den folgenden Kapiteln genauer untersuchen. Wir werden Markov-Ketten hierauf betrachten und bestimmte Verfahren zu ihrer Simulation am Computer untersuchen. Das hierfür nötige Rüstzeug geben wir in Form einiger grundlegender Definitionen und Eigenschaften ebenfalls in diesem Kapitel an.

1.1. Einführung: Das Hard-Core-Modell

Das HC-Modell (kurz für *hard core lattice gas model*) wurde ursprünglich in der statistischen Mechanik als grobes Modell für ein Gas eingeführt, dessen Partikel nicht zu vernachlässigende Durchmesser $d^* \neq 0$ aufweisen und deshalb nicht überlappen können. Zusätzlich dürfen diese Partikel nur auf ausgezeichneten Stellen platziert werden, die durch ein Gitter gegeben sind. Dieses wiederum ist so gewählt, dass die Diagonale eines Gitterplatzes die Länge d^* habe. Zusammen mit dem Überlappingsverbot führt dies dazu, dass zwei benachbarte Gitterplätze nicht gleichzeitig besetzt werden können. Natürlich darf unter dieser Anschauung auch kein Platz doppelt besetzt werden. Durch eventuelle Skalierung können wir ohne Einschränkung der Allgemeinheit $d^* = \sqrt{2}$ annehmen, sodass der Abstand zweier nebeneinander liegender Gitterpunkte 1 ist. Den linken unteren Gitterpunkt setzen wir dann auf den Punkt (1,1).

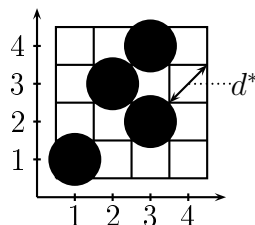


Abbildung 1.1.: Gestalt des Gitters im HC-Modell

1.1.1. Modellbeschreibung

Wir definieren zunächst das Gitter, auf dem die Teilchen platziert werden. Dazu sei $G = (\mathcal{C}, E)$ ein endlicher Graph mit der Knotenmenge $\mathcal{C} := \{1, \dots, M\} \times \{1, \dots, N\}$ für $M, N \geq 1$ und der Kantenmenge $E := \{(c, c') \in \mathcal{C}^2 \mid \|c - c'\| = 1\}$. Dabei sei $\|\cdot\|$ die gewöhnliche euklidische Norm, das heißt für $c = (c_1, c_2) \in \mathbb{Z}^2$ ist

$$\|c\| := \sqrt{c_1^2 + c_2^2}.$$

Für $c, c' \in \mathcal{C}$ schreiben wir $c \sim c'$, falls c und c' auf G benachbart sind, wenn also $(c, c') \in E$ gilt. Für die Gitterstruktur definieren wir darüber hinaus die Menge der zu einem Gitterplatz $c \in \mathcal{C}$ benachbarten Gitterplätze als

$$\mathcal{N}(c) := \{c' \in \mathcal{C} \mid c' \sim c\}$$

und Δ durch

$$\Delta := \max_{c \in \mathcal{C}} |\mathcal{N}(c)|$$

als die maximal mögliche Anzahl an Nachbarplätzen. Ein solches Gitter nennen wir auch kurz $M \times N$ -Gitter, wobei M die Anzahl an Spalten und N die Anzahl an Zeilen sei. Auf diesem ist beispielsweise

$$\Delta = \begin{cases} 2, & \text{falls } (M, N) \in \{(k, 1), (1, k)\} \text{ für ein } k \geq 3 \\ 3, & \text{falls } (M, N) \in \{(k, 2), (2, k)\} \text{ für ein } k \geq 3 \\ 4, & \text{falls } M, N \geq 3. \end{cases}$$

Wir betrachten in dieser Arbeit nur 2-dimensionale Gitter, das Modell kann aber natürlich völlig problemlos auf drei Dimensionen erweitert werden.

Die verschiedenen Zustände, die das System annehmen kann, ergeben sich nun als Anordnungen der Teilchen auf diesem Gitter. Es sei also weiter $\mathcal{V} = \{v_1, \dots, v_m\}$ die Menge der Teilchen und $\rho := \frac{m}{MN}$ die Teilchendichte. Damit definiere

$$\mathcal{S} := \mathcal{C}^{\mathcal{V}} := \{s : \mathcal{V} \longrightarrow \mathcal{C}\}$$

die Menge aller Funktionen s von \mathcal{V} nach \mathcal{C} . Jede solche Funktion beschreibt eine *Konfiguration* oder *Anordnung* $\{s(v), v \in \mathcal{V}\}$ der Teilchen auf dem Gitter. Für eine solche Konfiguration $s \in \mathcal{S}$ und ein Teilchen $v \in \mathcal{V}$ ist dabei $s(v) = c \in \mathcal{C}$ die Position des Teilchens v im Zustand s . Im Folgenden benutzen wir die Begriffe Konfiguration, Anordnung und Zustand synonym. Die Menge \mathcal{S} wollen wir *Zustandsraum des Systems* nennen.

Definition 1.1. Wir nennen eine Konfiguration $s \in \mathcal{S}$ *zulässig*, falls $s(v) \neq s(w)$ und $s(v) \approx s(w)$ für alle $v, w \in \mathcal{V}$ mit $v \neq w$ gilt. Die Menge der zulässigen Konfigurationen bezeichnen wir mit \mathcal{S}^z .

Als Modell für eine Teilchenbewegung bedarf es nun noch einer Energielandschaft. Eine solche ergibt sich durch eine Energiefunktion

$$U(s) := \sum_{v \neq w} \phi(d_{vw}^s),$$

$s \in \mathcal{S}$, wobei ϕ eine Paar-Energiefunktion sei und $d_{vw}^s := \|s(v) - s(w)\|$ für $v, w \in \mathcal{V}$ der Abstand zwischen $s(v)$ und $s(w)$. Als Paar-Energiefunktion verwenden wir die Funktion

$$\phi(d) := \begin{cases} 0, & \text{falls } d > 1 \\ \infty, & \text{falls } d \leq 1, \end{cases}$$

welche auch *hard-sphere potential* genannt wird. Für alle $s \in \mathcal{S}$ gilt damit für die Energiefunktion genauer

$$U(s) = \begin{cases} 0, & \text{falls } s \in \mathcal{S}^z \\ \infty, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (1.1)$$

Zulässige Zustände haben also eine potentielle Energie von 0 und können bei jeder Gesamtenergie $E \geq 0$ angenommen werden. Die Energie unzulässiger Zustände dagegen ist ∞ ; solche Zustände können vom System niemals erreicht werden. Im Zustandsraum können Bereiche zulässiger Zustände durch unzulässige Zustände voneinander getrennt sein. Dies führt dazu, dass - gegeben das System befindet sich in einem zulässigen Zustand - nicht jeder andere zulässige Zustand erreicht werden kann, da die dazwischenliegenden Energiebarrieren zu groß sind. Der Zustandsraum zerfällt also in verschiedene, untereinander nicht erreichbare Teilklassen. Siehe dazu sowohl Abbildung 1.2 als auch Bemerkung 1.9 a).

Die obige Energiefunktion ist verhältnismäßig einfach, da sie nur Wechselwirkungen von Paaren beinhaltet, deren Abstand höchstens 1 ist. Für unsere Zwecke ist sie aber ausreichend. Komplexere Energiefunktionen könnten auch die Wechselwirkungen von Teilchenpaaren mit einem größeren Abstand berücksichtigen. Möglich wäre ein gleichmäßiges Abfallen der Energie mit der Entfernung der Teilchen zueinander. Besonders energiearm sind dann Zustände, bei denen die Teilchen maximal voneinander entfernt, also sehr homogen auf dem ganzen Gitter verteilt sind. Eine andere Alternative wäre es, die Energie mit steigendem Abstand ansteigen zu lassen, sodass die Energieminima in besonders eng gepackten Konfigurationen zu finden sind. Für weitere Details verweisen wir auf Abschnitt 1.2 in [HM86].

Abschließend führen wir eine Äquivalenzrelation \star auf \mathcal{S} ein, um die verschiedenen Teilchen als ununterscheidbar ansehen zu können. Dies ist bei vielen Teilchenmodellen gängige Praxis. Dazu definieren wir

$$r \star s :\Leftrightarrow \text{für alle } v \in \mathcal{V} \text{ existiert ein } w \in \mathcal{V} \text{ mit } r(v) = s(w). \quad (1.2)$$

Unter \star werden demnach Zustände, bei denen die gleichen Gitterplätze besetzt sind, auch als gleich angesehen. Es ist somit irrelevant, *welche* Teilchen auf den einzelnen Plätzen liegen, wichtig ist nur, *ob* sich dort ein Teilchen befindet.

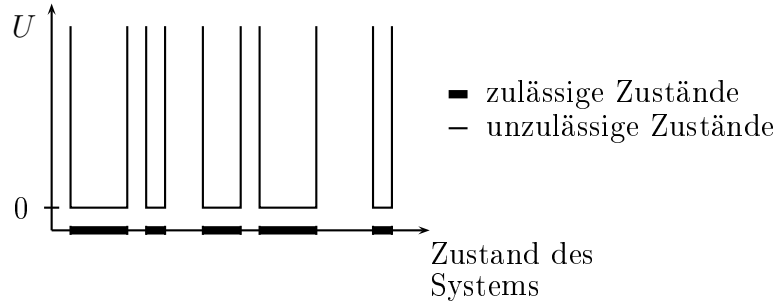


Abbildung 1.2.: Schematische Energielandschaft im HC-Modell

1.1.2. Stochastische Prozesse im Hard-Core-Modell

Die Dynamik im HC-Modell entsteht dadurch, dass sich einzelne oder mehrere Kugeln auf dem Gitter zufällig umordnen. Für $s \in \mathcal{S}$, $v \in \mathcal{V}$ und $c \in \mathcal{C}$ bezeichne $s_{v \rightarrow c} \in \mathcal{S}$ den durch die Verschiebung von Teilchen v auf Platz c resultierenden Zustand, d.h.

$$s_{v \rightarrow c}(w) = \begin{cases} c, & \text{falls } w = v, \\ s(w), & \text{falls } w \neq v \end{cases}$$

für alle $w \in \mathcal{V}$. Ist diese Bewegung zufällig, so erhalten wir unter einem geeigneten Wahrscheinlichkeitsmaß P auf einem messbaren Raum (Ω, \mathfrak{A}) einen stochastischen Prozess $(X_n)_{n \geq 0}$ mit Werten in \mathcal{S} für alle $n \geq 0$. Für diesen muss sogar

$$P(X_n \in \mathcal{S}^z) = 1$$

für alle $n \geq 0$ gelten, da bei keiner Energie Zustände in $\mathcal{S} \setminus \mathcal{S}^z$ angenommen werden.

Wir unterscheiden zwei verschiedene Arten von Teilchenbewegungen. Zum einen können sich die Teilchen lokal umordnen, das heißt auf benachbarte, besetzbare Gitterplätze springen. In diesem Fall gilt $\|X_{n+1}(v) - X_n(v)\| \leq 1$ P -fast sicher für alle $v \in \mathcal{V}$ und $n \geq 0$. Theoretisch sind aber auch globale Bewegungen möglich, bei denen die Teilchen in einem Zeitschritt größere Entfernungen zurücklegen. In beiden Fällen bewegt sich aber in einem Zeitschritt nur maximal ein Teilchen.

Die Übergangswahrscheinlichkeiten seien jeweils nur vom aktuellen Zustand und nicht von der weiteren Vergangenheit abhängig und werden für die globale und lokale Bewegung wie folgt definiert:

Globale Bewegung eines Teilchens: Für $r \in \mathcal{S}^z$ gelte

$$P(X_{n+1} = s \mid X_n = r) := \begin{cases} \frac{1}{|\mathcal{V}||\mathcal{C}|}, & r \neq s = r_{v \rightarrow c} \in \mathcal{S}^z \\ & \text{für ein } (v, c) \in \mathcal{V} \times \mathcal{C} \\ 1 - \sum_{\substack{v \in \mathcal{V} \\ c \neq r(v) \\ r_{v \rightarrow c} \in \mathcal{S}^z}} \frac{1}{|\mathcal{V}||\mathcal{C}|}, & s = r \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

sowie für $r \notin \mathcal{S}^z$

$$P(X_{n+1} = s \mid X_n = r) := \begin{cases} \frac{1}{|\mathcal{V}||\mathcal{C}|}, & r \neq s = r_{v \rightarrow c} \\ & \text{für ein } (v, c) \in \mathcal{V} \times \mathcal{C} \\ 1 - \sum_{v \in \mathcal{V}} \sum_{\substack{c \in \mathcal{N}(r(v)) \\ r_{v \rightarrow c} \in \mathcal{S}^z}} \frac{1}{|\mathcal{V}||\mathcal{C}|}, & s = r \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

für alle $n \geq 0$. Ein Übergang entsteht also dadurch, dass gemäß der Gleichverteilung auf \mathcal{V} ein Teilchen ausgewählt wird, welches verschoben werden soll. Als neue Position wird mit Wahrscheinlichkeit $|\mathcal{C}|^{-1}$ ein $c \neq r(v)$ gewählt. Ist r zulässig, so muss noch die Zulässigkeit von $r_{v \rightarrow c}$ geprüft werden. Ausgehend von einem unzulässigen Zustand können dagegen auch andere unzulässige Zustände angenommen werden. Mit der Restwahrscheinlichkeit wird $c = r(v)$ gewählt. Man erhält $P(X_{n+1} = r \mid X_n = r) \geq |\mathcal{C}|^{-1}$, was einer positiven Verharrungswahrscheinlichkeit entspricht.

Lokale Bewegung eines Teilchens: Für $r \in \mathcal{S}^z$ gelte

$$P(X_{n+1} = s \mid X_n = r) := \begin{cases} \frac{1}{|\mathcal{V}||\mathcal{C}|}, & r \neq s = r_{v \rightarrow c} \in \mathcal{S}^z \text{ für} \\ & (v, c) \in \mathcal{V} \times \mathcal{N}(r(v)) \\ 1 - \sum_{v \in \mathcal{V}} \sum_{\substack{c \in \mathcal{N}(r(v)) \\ r_{v \rightarrow c} \in \mathcal{S}^z}} \frac{1}{|\mathcal{V}||\mathcal{C}|}, & s = r \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

sowie für $r \notin \mathcal{S}^z$

$$P(X_{n+1} = s \mid X_n = r) := \begin{cases} \frac{1}{|\mathcal{V}||\mathcal{C}|}, & r \neq s = r_{v \rightarrow c} \text{ für} \\ & (v, c) \in \mathcal{V} \times \mathcal{N}(r(v)) \\ 1 - \sum_{v \in \mathcal{V}} \sum_{c \in \mathcal{N}(r(v))} \frac{1}{|\mathcal{V}||\mathcal{C}|}, & s = r \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

für alle $n \geq 0$. Auch hier entsteht ein Übergang dadurch, dass ein Teilchen gemäß der Gleichverteilung auf \mathcal{V} und als neue Position eine Stelle $c \neq r(v)$ mit Wahrscheinlichkeit $|\mathcal{C}|^{-1}$ ausgewählt wird. Zusätzlich wird hier gefordert, dass c zur ursprünglichen Position von v benachbart ist. Wieder haben wir eine positive Verharrungswahrscheinlichkeit von mindestens $|\mathcal{C}|^{-1}$.

Im tatsächlichen Teilchenverband kann ein Partikel innerhalb einer bestimmten Zeit nicht beliebig weite Strecken zurücklegen, es bewegt sich in einem Zeitschritt nur lokal. Erst bei größeren Zeitspannen treten globale Bewegungen auf, dann aber bewegen sich direkt mehrere Teilchen. Im realen System spielt die globale Bewegung einzelner

Teilchen also keine Rolle, dennoch wollen wir auch diese Bewegungsart untersuchen. Sie wird beispielsweise bei numerischen Simulationen verwendet, da sie besonders schnell große Veränderungen in der Teilchenanordnung bewirkt. Dies führt zu einer schnellen Äquilibration des Systems, das heißt einer schnellen Konvergenz gegen ein Gleichgewicht. In der Regel startet eine Simulation makroskopischer Systeme nicht im Gleichgewicht. Dies kann daran liegen, dass die Startzustände solche Zustände sind, die das System aufgrund ihrer Energie in der Realität nicht annimmt, oder dass die Zustände nicht gemäß ihrer Auftrittswahrscheinlichkeit im realen System angenommen werden. Bevor also für das System Rechnungen durchgeführt werden können, muss es äquilibriert werden. Ob dies durch globale oder lokale Bewegung geschieht, ist dabei irrelevant. In Abschnitt 4.3 werden wir sehen, dass das Gleichgewicht im HC-Modell bei der globalen Bewegung schneller erreicht wird, als bei der lokalen.

1.2. Einführung: Markov-Ketten im Hard-Core-Modell

Nun folgt eine sehr kurz gehaltene Einführung in die Theorie der endlichen Markov-Ketten, bei der wir uns weitgehend an [Als05a] orientieren. Es werden Definitionen und Eigenschaften zusammengestellt, die sowohl für die nachfolgenden Kapitel wichtig sind, als auch erste Ideen zum Verständnis von Prozessen im HC-Modells liefern. Für weiterführende Literatur verweisen wir ebenfalls auf [Als05a].

1.2.1. Markoveigenschaft

Sei $(\Omega, \mathfrak{A}, P)$ ein Wahrscheinlichkeitsraum und $M = (M_n)_{n \geq 0}$ ein stochastischer Prozess auf $(\Omega, \mathfrak{A}, P)$ mit Werten in einem messbaren Raum $(\mathcal{S}, \mathfrak{G})$. Ein Element $s \in \mathcal{S}$ heißt *Zustand* des Prozesses und $(\mathcal{S}, \mathfrak{G})$ sein *Zustandsraum*. M_n gebe den Zustand des Prozesses zur Zeit n an. Weiter sei P^{M_0} eine Startverteilung von M und für alle $n \geq 0$

$$P^{M_{n+1} | (M_0, \dots, M_n) = (s_0, \dots, s_n)}$$

die bedingte Verteilung von M_{n+1} , gegeben den Pfad $(M_0, \dots, M_n) = (s_0, \dots, s_n)$, der bis zur Zeit n durchlaufen wurde. Es sei vorausgesetzt, dass diese bedingten Verteilungen existieren. Dies ist nach Satz 53.4 in [Als05b] beispielsweise dann der Fall, wenn \mathfrak{G} abzählbar erzeugt und P^{M_n} für alle $n \geq 1$ kompakt approximierbar ist. Im Falle eines endlichen Zustandsraumes sind beide Bedingungen erfüllt.

Einige stochastische Prozesse haben die besonders einfache Struktur, dass die Übergangswahrscheinlichkeiten von der Vergangenheit nur über den aktuellen Zustand abhängen und nicht über den konkreten Pfad, auf dem der Prozess bis zu diesem Zustand gelangt ist.

Definition 1.2. Ein stochastischer Prozess $M = (M_n)_{n \geq 0}$ mit Zustandsraum $(\mathcal{S}, \mathfrak{G})$ heißt *Markov-Kette* (kurz MK), falls

$$P^{M_{n+1}|M_0, \dots, M_n} = P^{M_{n+1}|M_n} \text{ P-f.s.}$$

für alle $n \geq 0$ gilt. Diese Eigenschaft nennt man auch *Markoveigenschaft*. Weiter heißt die MK *zeitlich homogen*, wenn

$$P^{M_{n+1}|M_n} = P^{M_1|M_0} \text{ P-f.s.}$$

für alle $n \geq 0$ gilt, und *endlich* (kurz EMK), wenn ihr Zustandsraum endlich ist.

Die durch die globale oder lokale Bewegung erzeugten stochastischen Prozesse im HC-Modell sind offensichtlich zeitlich homogene EMK. Aus diesem Grund beschränken wir uns im Weiteren auf eben jene Markov-Ketten, setzen also von nun an stets die zeitliche Homogenität voraus. Außerdem schreiben wir für eine Verteilung λ auf \mathcal{S} kurz λ_s statt $\lambda(\{s\})$ für alle $s \in \mathcal{S}$.

Die Verteilung einer zeitlich homogenen EMK M wird nach dem Satz von Ionescu Tulcea (Satz 54.4 in [Als05b]) bereits durch die Startverteilung P^{M_0} und die bedingte Verteilung $P^{M_1|M_0}$ eindeutig bestimmt, welche wiederum durch die Wahrscheinlichkeiten

$$p_{rs} := P(M_1 = s \mid M_0 = r), \quad r, s \in \mathcal{S}$$

festgelegt ist. Diese nennt man auch *1-Schritt-Übergangswahrscheinlichkeiten* und fasst sie in der *Übergangsmatrix* $\mathbf{P} := (p_{rs})_{r,s \in \mathcal{S}}$ zusammen. Für eine solche Übergangsmatrix \mathbf{P} auf \mathcal{S} und eine Verteilung λ auf \mathcal{S} definieren wir das Maß $\lambda \mathbf{P}$ durch

$$(\lambda \mathbf{P})_s := \sum_{r \in \mathcal{S}} \lambda_r p_{rs}$$

für alle $s \in \mathcal{S}$. Dies ist wegen $\sum_{s \in \mathcal{S}} p_{rs} = 1$ für alle $r \in \mathcal{S}$ wieder eine Verteilung auf \mathcal{S} . Für eine EMK $(M_n)_{n \geq 0}$ mit Übergangsmatrix \mathbf{P} ist damit

$$P^{M_{n+1}} = \sum_{r \in \mathcal{S}} P^{M_n}(\{r\}) P^{M_{n+1}|M_n=r} = P^{M_n} \mathbf{P}$$

für alle $n \geq 0$. Definieren wir ausgehend von einer Übergangsmatrix \mathbf{P} die *n-Schritt-Übergangsmatrix* $\mathbf{P}^n := (p_{rs}^{(n)})_{r,s \in \mathcal{S}}$ induktiv durch

$$p_{rs}^{(n+1)} := \sum_{t \in \mathcal{S}} p_{rt}^{(n)} p_{ts}, \quad p_{rt}^{(0)} := \delta_{rt}$$

für alle $n \geq 0$, so ergibt sich durch eine leichte Induktion über n die folgende Darstellung für P^{M_n} :

Lemma 1.3. Für eine zeitlich homogene EMK M mit Werten in $(\mathcal{S}, \mathfrak{G})$, Anfangsverteilung $P^{M_0} = \lambda$ und Übergangsmatrix $\mathbf{P} = (p_{rs})_{r,s \in \mathcal{S}}$ gilt

$$P^{M_n} = \lambda \mathbf{P}^n$$

für alle $n \geq 0$.

Beispiel 1.4. Hard-Core-Modell: Wir betrachten ein 3×3 -Gitter ($M = N = 3$) mit einem Teilchen ($m = 1$). Es sei $(M_n)_{n \in \mathbb{N}}$ die durch die lokale Bewegung generierte EMK. Der Zustandsraum ist dann $\mathcal{S} = \{s_1, \dots, s_9\} = \mathcal{S}^z$ mit

$$s_{3(k-1)+j} : \mathcal{V} \longrightarrow \mathcal{C}, v \mapsto (j, k)$$

für alle $j, k \in \{1, 2, 3\}$. Die 1-Schritt-Übergangswahrscheinlichkeiten lauten

$$p_{rs} = \begin{cases} \frac{1}{9}, & \text{falls } s(v) \sim r(v) \\ 1 - \sum_{c \sim r(v)} \frac{1}{9}, & \text{falls } s = r \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

für alle $r, s \in \mathcal{S}$. Die neun Zustände sind untereinander wie in Abbildung 1.3 (a) dargestellt erreichbar. Die Übergangsmatrix ist in Abbildung 1.3 (b) dargestellt.

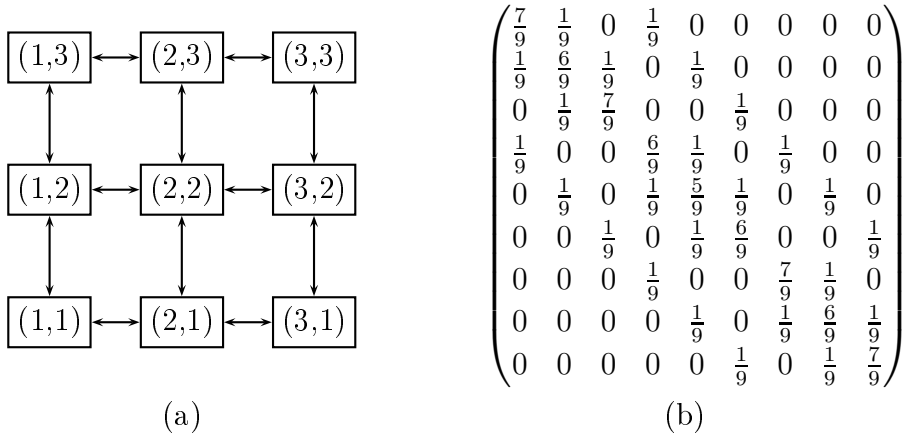


Abbildung 1.3.: (a) Zustandsgraph der EMK aus Beispiel 1.4, (b) Übergangsmatrix der EMK aus Beispiel 1.4

Wie oben erläutert, wird die Verteilung einer zeitlich homogenen EMK auf $(\mathcal{S}, \mathfrak{G})$ bereits durch die Startverteilung $P^{M_0} = \lambda$ und die Übergangsmatrix \mathbf{P} eindeutig bestimmt. Alle Eigenschaften der EMK müssen sich also durch Eigenschaften des Paares (λ, \mathbf{P}) charakterisieren lassen und anders herum. Die spezielle Gestalt der Zufallsvariablen $M_n, n \geq 0$, ist somit bei dieser Betrachtung irrelevant, was uns zu der folgenden Definition führt.

Definition 1.5. Für eine Übergangsmatrix \mathbf{P} auf $(\mathcal{S}, \mathfrak{G})$ heißt ein Modell

$$(\Omega, \mathfrak{A}, (M_n)_{n \geq 0}, (P_\lambda)_{\lambda \in \mathfrak{W}(\mathcal{S})}),$$

bestehend aus einem messbaren Raum (Ω, \mathfrak{A}) , einer Familie $(M_n)_{n \geq 0}$ von Zufallsvariablen und einer Familie $(P_\lambda)_{\lambda \in \mathfrak{W}(\mathcal{S})}$ von Wahrscheinlichkeitsmaßen auf (Ω, \mathfrak{A}) , ein *Standardmodell* zu \mathbf{P} , falls $M_n : (\Omega, \mathfrak{A}) \rightarrow (\mathcal{S}, \mathfrak{G}), n \geq 0$, unter P_λ eine EMK mit Startverteilung λ und Übergangsmatrix \mathbf{P} ist. Insbesondere ist also $P_\lambda^{M_n} = \lambda \mathbf{P}^n$.

Ein Beispiel für ein solches Standardmodell ist $(\Omega, \mathfrak{A}) = (\mathcal{S}^\infty, \mathfrak{G}^\infty)$, M_n für jedes $n \geq 0$ die Projektion auf die n -te Komponente und

$$P_\lambda(\{s_0\}, \dots, \{s_n\}, \Omega, \Omega, \dots) := \lambda_{s_0} p_{s_0 s_1} \cdot \dots \cdot p_{s_{n-1} s_n}$$

für alle $n \geq 0$ und $\lambda \in \mathfrak{W}(\mathcal{S})$ als Familie von W-Maße auf $(\mathcal{S}^\infty, \mathfrak{G}^\infty)$.

Mit einem solchen Standardmodell kann insbesondere die Startverteilung als freier Parameter des Modells angesehen werden. Statt bei Veränderung der Startbedingungen also einen neuen Prozess wählen zu müssen, können wir einfach die Startverteilung ändern. Bei der späteren Analyse des Grenzverhaltens von $P_\lambda^{M_n}$ für $n \rightarrow \infty$ erweist sich dies als besonders sinnvoll, da dort verschiedene EMK mit gleicher Übergangsmatrix aber verschiedenen Startverteilungen betrachtet werden.

Ist die Startverteilung eine Dirac-Verteilung in einem Zustand $s \in \mathcal{S}$, d.h. $\lambda = \delta_s$, so wollen wir verkürzend P_s statt P_{δ_s} schreiben. Ist eine Aussage unabhängig von der Startverteilung λ , so schreiben wir weiterhin einfach P statt P_λ . Beispielsweise schreiben wir $P^{M_{n+1}|M_n}$ anstelle von $P_\lambda^{M_{n+1}|M_n}$. Die obige Schreibweise weiterführend bezeichnet E_λ den Erwartungswertoperator unter P_λ und entsprechend E_s ebenjenen unter $P_s = P_{\delta_s}$.

1.2.2. Zustandseigenschaften

Gegeben sei von nun an eine zeitlich homogene EMK $M = (M_n)_{n \geq 0}$ in einem Standardmodell $(\Omega, \mathfrak{A}, (M_n)_{n \geq 0}, (P_\lambda)_{\lambda \in \mathfrak{W}(\mathcal{S})})$ mit Übergangsmatrix \mathbf{P} . Um die zeitliche Entwicklung dieser MK zu analysieren, muss zunächst der Zustandsraum unter dem Gesichtspunkt der Erreichbarkeit genauer studiert werden. Es wird untersucht, welche Zustände durch einen Pfad verbunden sind, sodass der Prozess, startend in einem der beiden Zustände, mit positiver Wahrscheinlichkeit den anderen in endlicher Zeit erreicht. Diese Betrachtung weiterführend wird untersucht, ob es Zustände gibt, die von anderen völlig isoliert sind. Daraus entwickelt sich der Begriff der *kommunizierenden Zustände*.

Definition 1.6. a) Für zwei Zustände $r, s \in \mathcal{S}$ sagen wir s ist von r aus erreichbar, kurz $r \rightarrow s$, wenn ein $n \geq 0$ existiert, sodass $p_{rs}^{(n)} > 0$ gilt.

b) Zwei Zustände $r, s \in \mathcal{S}$ heißen *kommunizierend*, kurz $r \leftrightarrow s$, falls $r \rightarrow s$ und $s \rightarrow r$ gilt.

Im einfachsten Fall kommunizieren alle Zustände miteinander, eine solche Kette heißt irreduzibel.

Definition 1.7. Eine EMK M heißt *irreduzibel*, wenn $r \leftrightarrow s$ für alle $r, s \in \mathcal{S}$ gilt.

Irreduzibilität bedeutet also, dass die Kette mit positiver Wahrscheinlichkeit von jedem Zustand aus in endlicher Zeit jeden beliebigen anderen Zustand erreichen kann.

Beispiel 1.8. a) Weiterführung von Beispiel 1.4: In Abbildung 1.3 (a) ist zu sehen, dass jeder Zustand von jedem anderen aus in endlich vielen Schritten erreichbar ist, wobei jeder einzelne Schritt eine positive Wahrscheinlichkeit besitzt. Es gibt also nur eine Äquivalenzklasse bezüglich \leftrightarrow und die EMK ist irreduzibel.

b) Ein Beispiel für eine nicht irreduzible EMK im HC-Modell bildet ein 2×2 -Gitter mit 2 Teilchen. Die zulässigen Zustände sind in Abbildung 1.4 zu sehen. Offensichtlich



Abbildung 1.4.: Zustände auf einem 2×2 -Gitter mit zwei Kugeln

kann in keinem der beiden Zuständen eine Kugel bewegt werden. Jeder Zustand ist somit eine irreduzible Klasse und die MK auf diesem Gitter reduzibel.

Bemerkung 1.9. a) Im Allgemeinen zerfällt der Zustandsraum \mathcal{S} im HC-Modell also in mehrere Irreduzibilitätsklassen. Da zulässige Zustände weder bei globaler noch bei lokaler Bewegung mit unzulässigen kommunizieren und in einer Irreduzibilitätsklasse alle Zustände miteinander kommunizieren, besteht eine Irreduzibilitätsklasse entweder nur aus zulässigen oder nur aus unzulässigen Zuständen.

b) Darüber hinaus sind Irreduzibilitätsklassen $\mathcal{R} \subseteq \mathcal{S}^z$ aus zulässigen Zuständen abgeschlossen, d.h. für ein $r \in \mathcal{R}$ und ein $s \in \mathcal{S}$ folgt aus $r \rightarrow s$ bereits $s \in \mathcal{R}$ und damit $r \leftrightarrow s$. Dies resultiert aus der Symmetrie der Übergangswahrscheinlichkeiten auf \mathcal{S}^z und der Tatsache, dass aus $r \rightarrow s$ mit $r \in \mathcal{R} \subseteq \mathcal{S}^z$ bereits $s \in \mathcal{S}^z$ folgt.

c) Die Irreduzibilitätsklassen der globalen und der lokalen Bewegung sind selbstverständlich unterschiedlich. Eine Irreduzibilitätsklasse der globalen Bewegung kann bezüglich der lokalen Bewegung in mehrere kleinere Klassen zerfallen.

Als nächste Charakterisierung der Zustände wollen wir Begriffe dafür einführen, zu welchen Zeiten die Kette bei Start in s zu diesem zurückkehren kann.

Definition 1.10. Ein Zustand $s \in \mathcal{S}$ heißt *d-periodisch*, falls

$$d = d(s) := \text{ggT}\{n \geq 1 \mid p_{ss}^{(n)} > 0\}$$

gilt. Ist $d(s) = 1$, so heißt der Zustand s auch *aperiodisch*.

Wir haben im obigen Beispiel gesehen, dass es im HC-Modell sowohl irreduzible, als auch reduzible MK gibt. Die Irreduzibilität ist unter anderem abhängig von der Teilchenzahl. Bei der Periodizität der Zustände ist dies anders. Da wir eine positive Verharrungswahrscheinlichkeit $p_{ss} \geq |\mathcal{C}|^{-1}$ für jeden Zustand $s \in \mathcal{S}$ haben, ist jeder Zustand einer solchen EMK aperiodisch.

Eine weitere Klassifikation unterscheidet die Zustände bezüglich der Häufigkeit, mit der die Kette diese annimmt. Dazu benötigen wir für $s \in \mathcal{S}$ die *Ersteintrittszeit*

$$\tau(s) := \inf\{n \geq 1 \mid M_n = s\}$$

in den Zustand s . Für $r, s \in \mathcal{S}$ sei weiter $f_{rs}^* := P_r(\tau(s) < \infty)$.

Definition 1.11. Ein Zustand $s \in \mathcal{S}$ heißt *rekurrent*, falls $f_{ss}^* = 1$, und *transient*, falls $f_{ss}^* < 1$.

Zu einem rekurrenten Zustand r kehrt die Kette also fast sicher in endlicher Zeit zurück, die Gesamtzahl an Besuchen ist damit unter P_r fast sicher unendlich. Zu einem transienten Zustand kehrt die Kette dagegen mit positiver Wahrscheinlichkeit in endlicher Zeit nicht mehr zurück. Ohne Beweis geben wir folgendes Rekurrenz Kriterium aus [Als05a] an.

Lemma 1.12. (Lemma 7.16 aus [Als05a]) *Ein Zustand $s \in \mathcal{S}$ ist genau dann rekurrent, wenn $P_s(M_n = s \text{ u.o.}) = 1$ gilt.*

Bemerkung 1.13. Aus diesem Lemma ergibt sich insbesondere, dass eine EMK bereits mindestens einen rekurrenten Zustand besitzt, da von den endlich vielen Zuständen aus \mathcal{S} zumindest einer unendlich oft besucht werden muss. Rekurrenz, Transienz und die Periode eines Zustandes sind sogenannte *Solidaritätseigenschaften* (siehe Satz 9.1. in [Als05a]). Dies sind Zustandseigenschaften, bei denen aus der Gültigkeit für ein $r \in \mathcal{S}$ schon die Gültigkeit für alle $s \in \mathcal{S}$ mit $r \leftrightarrow s$ folgt. In einer irreduziblen EMK sind daher alle Zustände rekurrent.

Definition 1.14. Eine EMK mit Zustandsraum $(\mathcal{S}, \mathfrak{G})$ heißt *rekurrent/transient*, *d-periodisch/aperiodisch*, falls sie irreduzibel ist und jeder Zustand $s \in \mathcal{S}$ die entsprechende Eigenschaft besitzt.

Satz 1.15. (Satz 9.3 aus [Als05a]) *Seien $r, s \in \mathcal{S}$ mit $r \neq s$, r rekurrent und $r \rightarrow s$, dann gilt $r \leftrightarrow s$.*

Beweis: Aus $r \rightarrow s$ folgt die Existenz eines $n \geq 1$ mit $p_{rs}^{(n)} > 0$. Ist dann $p_{sr}^{(m)} = 0$ für alle $m \geq 1$, also $s \nrightarrow r$, so gilt

$$\begin{aligned} P_r(M_m \neq r \text{ für alle } m \geq 1) &\geq P_r(M_n = s, M_{n+m} \neq r \text{ für alle } m \geq 1) \\ &= P(M_{n+m} \neq r \text{ für alle } m \geq 1 \mid M_n = s) P_r(M_n = s) \\ &= p_{rs}^{(n)} (1 - P_s(M_m = r \text{ für ein } m \geq 1)) \\ &\geq p_{rs}^{(n)} (1 - \sum_{m \geq 1} p_{sr}^{(m)}) = p_{rs}^{(n)} > 0. \end{aligned}$$

Damit ist $P_r(\tau(r) < \infty) < 1$ und somit die Rekurrenz von r nicht erfüllt. \square

Um die Zustände im HC-Modell bezüglich Rekurrenz und Transienz zu klassifizieren, müssen wir etwas vorgehen und Lemma 1.28 benutzen.

Satz 1.16. *Bei einer EMK im HC-Modell mit $\mathcal{S}^z \neq \emptyset$ ist jeder Zustand $s \in \mathcal{S}^z$ rekurrent und jeder Zustand $s \in \mathcal{S} \setminus \mathcal{S}^z$ transient.*

Beweis: Betrachten wir zuerst einen unzulässigen Zustand s . Von diesem aus kann gemäß Lemma 1.28 ein zulässiger Zustand r erreicht werden. Ist s darüber hinaus auch noch rekurrent, so gilt nach Satz 1.15 $r \rightarrow s$. Dies ist aber im HC-Modell nicht möglich.

Bleibt noch zu beweisen, dass alle zulässigen Zustände rekurrent sind. Dazu sei r ein zulässiger Zustand und \mathcal{R} seine nach Bemerkung 1.9 b) abgeschlossene Irreduzibilitätsklasse. Unter P_r nimmt die EMK also nur Zustände in \mathcal{R} an, weshalb zumindest ein Zustand $s \in \mathcal{R}$ unendlich oft angenommen werden muss und daher rekurrent ist. Damit sind aufgrund der Solidarität der Rekurrenz bereits alle $s \in \mathcal{R}$ rekurrent. \square

1.2.3. Ergodensatz und Kopplungsmethode

Eine häufig gestellte Frage im Zusammenhang mit MK ist die nach der Verteilung der Zufallsvariablen bei gegen unendlich strebender Zeit n . Wir werden sehen, dass in vielen Fällen die Verteilung $P_\lambda^{M_n}$ für $n \rightarrow \infty$ unabhängig von der Anfangsverteilung λ gegen eine eindeutig bestimmte Verteilung konvergiert, welche dann die folgende Eigenschaft besitzt.

Definition 1.17. Eine Verteilung π auf $(\mathcal{S}, \mathfrak{G})$ heißt *stationäre Verteilung* der EMK M mit Übergangsmatrix \mathbf{P} , falls

$$\pi \mathbf{P} = \pi$$

erfüllt ist.

Die EMK M selbst heißt stationär unter einer Startverteilung λ , wenn

$$P_\lambda^{(M_n, M_{n+1}, \dots)} = P_\lambda^{(M_0, M_1, \dots)}$$

P -fast sicher für alle $n \geq 0$ gilt. Wegen

$$\pi \mathbf{P}^n = \pi \mathbf{P} \mathbf{P}^{n-1} = \pi \mathbf{P}^{n-1} = \dots = \pi \tag{1.3}$$

für alle $n \geq 0$ und eine stationäre Verteilung π , gilt

$$\begin{aligned} P_\pi^{(M_n, M_{n+1}, \dots)}(\{s_n, s_{n+1}, \dots\}) &= P(M_{n+k} = s_{n+k}, k \geq 1 \mid M_n = s_n) P_\pi(M_n = s_n) \\ &= P_{s_n}(M_k = s_{n+k}, k \geq 1) (\pi \mathbf{P}^n)_{s_n} \\ &= P(M_k = s_{n+k}, k \geq 1 \mid M_0 = s_n) \pi_{s_n} \\ &= P_\pi(M_0 = s_n, M_1 = s_{n+1}, \dots) \end{aligned}$$

für alle $s_n, s_{n+1}, \dots \in \mathcal{S}, n \geq 0$. Unter einer stationären Verteilung wird M also zu einem stationären Prozess.

Allgemein muss eine stationäre Verteilung weder existieren noch eindeutig sein. Im Falle irreduzibler EMK ist aber zumindest die Existenz schnell gezeigt.

Satz 1.18. *Für eine irreduzible (und damit rekurrente) EMK $M = (M_n)_{n \geq 0}$ existiert eine stationäre Verteilung π mit $0 < \pi_s$ für alle $s \in \mathcal{S}$.*

Beweis: Da \mathbf{P} eine endliche Matrix ist, ist eine nichttriviale Lösung des linearen Gleichungssystems $\pi(I - \mathbf{P}) = \bar{0}$ zu finden. Die Zeilensummen von \mathbf{P} sind jeweils 1, weshalb die Zeilensummen von $I - \mathbf{P}$ jeweils 0 sind. Die Matrix $I - \mathbf{P}$ ist also nicht invertierbar, was als direkte Konsequenz zur Existenz einer Lösung $\neq \bar{0}$ führt. Durch Normieren ergibt sich so eine stationäre Verteilung π . Dass $\pi_s > 0$ für alle $s \in \mathcal{S}$ gilt, ergibt sich aus der Irreduzibilität. Es ist nämlich $\pi_r > 0$ zumindest für ein r . Zusätzlich existiert für jedes s ein $n \geq 1$ mit $p_{rs}^{(n)} > 0$. Daher gilt mit Gleichung (1.3)

$$\pi_s = \sum_{t \in \mathcal{S}} \pi_t p_{ts}^{(n)} \geq \pi_r p_{rs}^{(n)} > 0.$$

□

Um nun das Langzeitverhalten einer irreduziblen EMK zu untersuchen, wollen wir für jedes $n \geq 0$ den Abstand von $P_\lambda^{M_n}$ zur stationären Verteilung π betrachten. Als geeigneter Abstands begriff erweist sich die Totalvariation.

Definition 1.19. Es seien μ und ν zwei Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf einem messbaren Raum (Ω, \mathfrak{A}) . Ihr *Totalvariationsabstand* ist definiert durch

$$d_V(\mu, \nu) := \sup_{A \in \mathfrak{A}} |\mu(A) - \nu(A)|.$$

Ist Ω abzählbar, so gilt

$$d_V(\mu, \nu) = \sum_{k \in A^+} (\mu(\{k\}) - \nu(\{k\}))$$

mit $A^+ := \{k \in \Omega \mid \mu(\{k\}) \geq \nu(\{k\})\}$.

Die Antwort auf die Frage nach dem Langzeitverhalten bestimmter MK liefert nun der folgende Satz.

Satz 1.20. (Ergodensatz, Satz 11.1 in [Als05a]) *Es sei $M = (M_n)_{n \geq 0}$ eine aperiodische EMK mit Übergangsmatrix $\mathbf{P} = (p_{rs})_{r,s \in \mathcal{S}}$ und stationärer Verteilung π . Dann gilt für jede Anfangsverteilung λ bereits*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} d_V(P_\lambda^{M_n}, \pi) = 0.$$

Bemerkung 1.21. a) Man beachte, dass die Aperiodizität der EMK insbesondere ihre Irreduzibilität impliziert und damit schon ihre Rekurrenz folgt. Diese wird für die Existenz einer stationären Verteilung und auch an anderen Stellen im Beweis dieses Satzes, der unter etwas stärkeren Voraussetzungen auch auf nicht-endliche MK verallgemeinert werden kann, explizit benötigt.

b) Aus dem Ergodensatz folgt auch die Eindeutigkeit der stationären Verteilung für aperiodische EMK. Ist nämlich ξ eine weitere stationäre Verteilung, so gilt

$$d_V(\xi, \pi) = d_V(P_\xi^{M_n}, \pi) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0.$$

Für die Eindeutigkeit kann sogar die Forderung nach Aperiodizität fallen gelassen werden; siehe dazu Satz 10.4 in [Als05a]. Im HC-Modell ist diese aber erfüllt.

Der in [Als05a] gegebene Beweis des Ergodensatzes beruht auf der sogenannten *Kopplungsmethode*, welche uns auch in Kapitel 4 als entscheidendes Werkzeug begegnen wird. Diese wollen wir nun erläutern.

Es seien Q und Q' zwei W-Maße auf einem messbarem Raum (Ω', \mathfrak{A}') . Jedes Paar (X, X') von Zufallsvariablen auf demselben W-Raum $(\Omega, \mathfrak{A}, P)$ mit

$$P^X = Q \text{ und } P^{X'} = Q'$$

heißt dann eine *Kopplung von (Q, Q')* . Der Grund der häufigen Anwendung dieser recht einfachen Konstruktion wird im folgenden kleinen Satz deutlich.

Satz 1.22. (Kopplungsungleichung) *Unter den oben gemachten Voraussetzungen gilt*

$$d_V(Q, Q') \leq P(X \neq X').$$

Beweis: Die Aussage ergibt sich mittels der Abschätzung

$$\begin{aligned} d_V(Q, Q') &= \sup_{A \in \mathfrak{A}} |P(X \in A) - P(X' \in A)| \\ &= \sup_{A \in \mathfrak{A}} |P(X \in A, X = X') + P(X \in A, X \neq X') \\ &\quad - P(X' \in A, X = X') - P(X' \in A, X \neq X')| \\ &= \sup_{A \in \mathfrak{A}} |P(X \in A, X \neq X') - P(X' \in A, X \neq X')| \\ &= \sup_{A \in \mathfrak{A}} P(X \neq X') |P(X \in A | X \neq X') - P(X' \in A | X \neq X')| \\ &\leq P(X \neq X'). \end{aligned}$$

□

Der oft unhandliche Variationsabstand ist also beschränkt durch die sehr anschauliche Wahrscheinlichkeit, dass die beiden Zufallsvariablen verschiedene Werte annehmen. Besonders schön ist diese Aussage bei Folgen von Zufallsvariablen. Es seien Q

und Q' W-Maße auf $((\Omega')^\infty, (\mathfrak{A}')^\infty)$, deren eindimensionale Randverteilungen wir mit Q_n bzw. $Q'_n, n \geq 0$, bezeichnen. Weiter seien $X = (X_n)_{n \geq 0}$ und $X' = (X'_n)_{n \geq 0}$ zwei Folgen von Zufallsvariablen auf $(\Omega, \mathfrak{A}, P)$, sodass (X, X') eine Kopplung von (Q, Q') ist. Für jedes $n \geq 0$ sind dann insbesondere Q_n und Q'_n die Verteilung von X_n bzw. X'_n . Unter Benutzung der *Kopplungszeit* T , definiert durch

$$T := \inf\{n \geq 0 \mid X_k = X'_k \text{ für alle } k \geq n\},$$

gilt so die Ungleichung

$$d_V(Q_n, Q'_n) \leq P(X_n \neq X'_n) \leq P(T > n).$$

Sofern man also zeigen kann, dass die Kopplungszeit fast sicher endlich ist, kann direkt gefolgert werden, dass $d_V(Q_n, Q'_n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$ gilt. Man konstruiert also sinnvollerweise zwei Prozesse X und X' , die sich fast sicher irgendwann treffen und dann nicht mehr trennen.

Unter bestimmten Voraussetzungen gilt in Gleichung (1.22) sogar Gleichheit. Man spricht dann auch von einer *maximalen Kopplung*.

Satz 1.23. *Es seien Q_1 und Q_2 zwei Verteilungen auf einer endlichen Menge \mathcal{S} . Dann definieren wir*

$$Q_1 \wedge Q_2 := \sum_{s \in \mathcal{S}} Q_1(\{s\}) \wedge Q_2(\{s\}) \delta_s \quad \text{mit} \quad \|Q_1 \wedge Q_2\| := (Q_1 \wedge Q_2)(\mathcal{S})$$

$$(Q_2 - Q_1)^+ := \frac{(Q_2 - Q_1)(\cdot \cap A^+)}{d_V(Q_1, Q_2)} \quad \text{mit} \quad A^+ := \{s \in \mathcal{S} \mid Q_2(\{s\}) > Q_1(\{s\})\}.$$

Weiter seien Z, L, X' und Y' stochastisch unabhängige Zufallsvariablen auf dem gleichen W-Raum mit

$$(MK1) \quad Z \sim B(1, \alpha) \quad \text{mit} \quad \alpha := \|Q_1 \wedge Q_2\|,$$

$$(MK2) \quad L \sim \frac{Q_1 \wedge Q_2}{\alpha},$$

$$(MK3) \quad X' \sim \frac{Q_1 - Q_1 \wedge Q_2}{1 - \alpha} \quad \text{und} \quad Y' \sim \frac{Q_2 - Q_1 \wedge Q_2}{1 - \alpha}.$$

Dann ist $(Q_2 - Q_1)^+$ ein W-Maß auf \mathcal{S} und

$$(X, Y) := (ZL + (1 - Z)X', ZL + (1 - Z)Y')$$

eine maximale Kopplung von (Q_1, Q_2) mit

$$P^{Y|X=x} = \frac{(Q_1 \wedge Q_2)(\{x\})}{Q_1(\{x\})} \delta_x + \left(1 - \frac{(Q_1 \wedge Q_2)(\{x\})}{Q_1(\{x\})}\right) (Q_2 - Q_1)^+$$

für alle $x \in \mathcal{S}$ mit $Q_1(\{x\}) > 0$.

Bemerkung 1.24. Man beachte, dass

$$\left(1 - \frac{(Q_1 \wedge Q_2)(\{x\})}{Q_1(\{x\})}\right)(Q_2 - Q_1)^+$$

nur Masse auf $\mathcal{S} \setminus \{x\}$ hat.

Beweis: Dass $(Q_2 - Q_1)^+$ ein W-Maß ist, ergibt sich direkt aus der Definition des Totalvariationsabstandes. Wir zeigen nun zuerst, dass (X, Y) eine Kopplung von (Q_1, Q_2) darstellt, dass also $P^X = Q_1$ und $P^Y = Q_2$ gilt. Dies ergibt sich unter Benutzung der Unabhängigkeit von Z, L und X' durch die folgende Rechnung:

$$\begin{aligned} P^X &= P^{ZL+(1-Z)X'} \\ &= P^{L|Z=1}P(Z=1) + P^{X'|Z=0}P(Z=0) \\ &= \alpha P^L + (1-\alpha)P^{X'} \\ &= Q_1 \wedge Q_2 + (Q_1 - Q_1 \wedge Q_2) \\ &= Q_1 \end{aligned}$$

Eine völlig analoge Rechnung liefert $P^Y = Q_2$. Weiter ist wieder wegen der Unabhängigkeit von X' und Y'

$$\begin{aligned} P(X' = Y') &= \sum_{s \in \mathcal{S}} P(X' = s, Y' = s) \\ &= \sum_{s \in \mathcal{S}} P(X' = s)P(Y' = s) \\ &= \sum_{s \in \mathcal{S}} \frac{Q_1(\{s\}) - (Q_1 \wedge Q_2)(\{s\})}{1-\alpha} \cdot \frac{Q_2(\{s\}) - (Q_1 \wedge Q_2)(\{s\})}{1-\alpha}. \end{aligned}$$

Für $s \in A^+$ gilt für den ersten Faktor $Q_1(\{s\}) - (Q_1 \wedge Q_2)(\{s\}) = 0$ und für $s \in (A^+)^c$ ist $Q_2(\{s\}) - (Q_1 \wedge Q_2)(\{s\}) = 0$. Zusammen ergibt dies $P(X' \neq Y') = 1$. Damit können wir nachrechnen, dass (X, Y) sogar eine maximale Kopplung von (Q_1, Q_2) bildet:

$$\begin{aligned} P(X \neq Y) &= P(ZL + (1-Z)X' \neq ZL + (1-Z)Y') \\ &= P(X' \neq Y'|Z=0)P(Z=0) + P(L \neq L|Z=1)P(Z=1) \\ &= P(X' \neq Y')P(Z=0) \\ &= P(Z=0) \\ &= 1 - \|Q_1 \wedge Q_2\| \\ &= 1 - \sum_{s \in \mathcal{S}} (Q_1 \wedge Q_2)(\{s\}) \\ &= 1 - Q_1(A^+) - Q_2((A^+)^c) \\ &= Q_2(A^+) - Q_1(A^+) \\ &= d_V(Q_1, Q_2) \end{aligned}$$

Insbesondere ist also $1 - \alpha = d_V(Q_1, Q_2)$. Bleibt noch die Gestalt der bedingten Verteilung $P^{Y|X=x}$ mit $x \in \mathcal{S}$, $Q_1(\{x\}) > 0$ nachzurechnen. Für $y = x$ gilt

$$\begin{aligned}
 P(Y = y | X = x) &= \frac{P(Y = y, X = x | Z = 1)P(Z = 1) + P(Y = y, X = x | Z = 0)P(Z = 0)}{P(X = x)} \\
 &= \frac{P(L = y, L = x)P(Z = 1) + \overbrace{P(Y' = y, X' = x)}^{=0, \text{ da } x=y} P(Z = 0)}{P(X = x)} \\
 &= \frac{P(L = x)P(Z = 1)}{P(X = x)} \\
 &= \frac{(Q_1 \wedge Q_2)(\{x\})}{Q_1(\{x\})}.
 \end{aligned}$$

Für $y \neq x, y \in A^+$ ist

$$\begin{aligned}
 P(Y = y | X = x) &= \frac{\overbrace{P(L = y, L = x)}^{=0 \text{ da } y \neq x} P(Z = 1) + P(Y' = y, X' = x)P(Z = 0)}{P(X = x)} \\
 &= \frac{P(Y' = y)P(X' = x)P(Z = 0)}{P(X = x)} \\
 &= \left(1 - \frac{(Q_1 \wedge Q_2)(\{x\})}{Q_1(\{x\})}\right) \frac{Q_2(\{y\}) - Q_1(\{y\})}{d_V(Q_1, Q_2)},
 \end{aligned}$$

dabei ist nur in der letzten Zeile $y \in A^+$ eingegangen. Für $y \neq x, y \notin A^+$ verschwindet mit $P(Y' = y)$ auch $P(Y = y|X = x)$ gemäß der zweiten Zeile der obigen Rechnung. \square

Der letzte Satz dieses Abschnitts macht eine Aussage über die Absorptionswahrscheinlichkeit bestimmter Prozesse, die in Kapitel 4 für die Beweise der dort vorgestellten Kopplungstheoreme benötigt werden. Wir betrachten hier eine EMK $(S_n)_{n \geq 0}$ mit Werten in $\mathcal{M} := \{0, \dots, m\}$ der Form $S_n = S_0 + \sum_{i=1}^n X_i$ mit unabhängig identisch verteilten Zuwächsen $X_n, n \geq 1$, mit Werten in $\{-1, 0, 1\}$, d.h. eine symmetrische Irrfahrt. Diese habe die absorbierende Barriere 0 und sei eingebettet in ein Standardmodell $(\Omega, \mathfrak{A}, S_0, (X_n)_{n \geq 1}, (P_\lambda)_{\lambda \in \mathfrak{M}(\mathcal{M})})$.

Satz 1.25. *Es sei $S = (S_n)_{n \geq 0}$ mit $S_n = S_0 + \sum_{i=1}^n X_i$ für alle $n \geq 0$ eine symmetrische Irrfahrt auf der Menge $\{0, \dots, m\}$, die in 0 absorbiert wird. Die Verteilungen der unabhängigen Zuwächse $(X_n)_{n \geq 1}$ seien wie folgt gewählt: Für alle $n \geq 1$ sei*

$$\begin{aligned}
 P(X_n = \pm 1 | S_{n-1} \notin \{0, m\}) &= 2\alpha, & P(X_n = 0 | S_{n-1} \notin \{0, m\}) &= 1 - 2\alpha \\
 P(X_n = -1 | S_{n-1} = m) &= \alpha, & P(X_n = 0 | S_{n-1} = m) &= 1 - \alpha \\
 P(X_n = 0 | S_{n-1} = 0) &= 1.
 \end{aligned}$$

Weiter sei $\tau = \tau(0) = \min\{n \geq 0 | S_n = 0\}$. Dann ist

$$E_m(\tau) = \frac{m^2 + m}{2\alpha},$$

wobei E_m den Erwartungswert bezüglich des Maßes P_m bezeichne.

Beweis: Es ergibt sich für $1 \leq n \leq m - 1$

$$\begin{aligned} E_n(\tau) &= P_n(X_1 = -1)(E_{n-1}(\tau) + 1) + P_n(X_1 = 0)(E_n(\tau) + 1) \\ &\quad + P_n(X_1 = 1)(E_{n+1}(\tau) + 1) \\ &= 1 + \alpha E_{n-1}(\tau) + (1 - 2\alpha)E_n(\tau) + \alpha E_{n+1}(\tau) \end{aligned}$$

und damit iterativ unter Benutzung von $E_0(\tau) = 0$

$$E_n(\tau) - E_{n+1}(\tau) = E_{n-1}(\tau) - E_n(\tau) + \frac{1}{\alpha} = \dots = -E_1(\tau) + \frac{n}{\alpha}. \quad (1.4)$$

Durch Summation ergibt sich daraus

$$\begin{aligned} E_1(\tau) - E_m(\tau) &= \sum_{n=1}^{m-1} E_n(\tau) - E_{n+1}(\tau) \\ &= \sum_{n=1}^{m-1} -E_1(\tau) + \frac{n}{\alpha} \\ &= -(m-1)E_1(\tau) + \frac{(m-1)m}{2\alpha}. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Der gleiche Ansatz wie am Anfang des Beweises liefert

$$E_m(\tau) = 1 + \alpha E_{m-1}(\tau) + (1 - \alpha)E_m(\tau)$$

und damit direkt $E_{m-1}(\tau) - E_m(\tau) = -1/\alpha$. Zusammen mit Gleichung (1.4) ergibt sich

$$-\frac{1}{\alpha} = E_{m-1}(\tau) - E_m(\tau) = -E_1(\tau) + \frac{m-1}{\alpha},$$

was zu $E_1(\tau) = m/\alpha$ äquivalent ist. Durch Einsetzen in Gleichung (1.5) ergibt sich

$$E_m(\tau) = \frac{m^2}{\alpha} - \frac{(m-1)m}{2\alpha} = \frac{m(m+1)}{2\alpha}.$$

□

1.3. Computersimulationen

In den Kapiteln 2 und 3 werden wir Verfahren zur Bestimmung der Entropie des HC-Modells beschreiben, die zur Berechnung die Hilfe von Computern benötigen. In Kapitel 4 werden wir uns wie schon erwähnt mit stochastischen Prozessen im HC-Modell befassen und auch hier Computer einsetzen, um MK zu simulieren. Daher wollen wir nun einige Grundlagen zu Computersimulationen und bestimmten Algorithmen zusammenstellen.

1.3.1. Finite-size-Effekte und periodische Randbedingungen

Bei der Modellierung am Computer muss zwangsläufig das zu simulierende System vereinfacht werden. Man betrachte zum Beispiel die Teilchenzahl eines realen Systems: Bei Raumtemperatur enthält ein Liter eines beliebigen Gases etwa $2,7 \cdot 10^{22}$ Teilchen, ein Tropfen Wasser enthält bereits ungefähr $13,37 \cdot 10^{20}$ Teilchen. Bei einer so gewaltigen Systemgröße ist natürlich der Rechenaufwand sehr groß. Es muss also ein kleineres Teilsystem simuliert werden, welches aber eventuell weniger Aussagekraft für das reale System besitzt. Es sind daher zwei gegenläufige Tendenzen zu berücksichtigen.

Sei ξ ein System, welches am Computer simuliert werden soll. Dieses habe für eine Systemgröße K verschiedene mögliche Ausprägungen $k \in \mathcal{K} \subseteq \mathbb{R}$. Es sei dann ξ_k das System mit $K = k$ und

$$\Xi := \{\xi_k \mid k \in \mathcal{K}\}.$$

Für verschiedene Werte von k verhält sich das System natürlich unterschiedlich, sodass man für eine Eigenschaft \mathcal{A} die Menge

$$\mathfrak{Z}(\mathcal{A}) := \{\xi \in \Xi \mid \xi \text{ erfüllt } \mathcal{A}\}$$

definieren kann. Wir sagen dann das System ξ hat einen *finite-size-Effekt* bezüglich \mathcal{A} , wenn ein $k_0 \in \mathcal{K}$ existiert, sodass

$$\mathfrak{Z}(\mathcal{A}) = \{\xi_k \mid k \geq k_0\}$$

gilt. In der Simulation muss dann für die Systemgröße K mindestens der Wert k_0 gewählt werden, um ein für das makroskopische System aussagekräftiges Ergebnis zu erhalten. Bezüglich anderer, komplexerer Systemeigenschaften ist aber die genaue Definition einer Eigenschaft \mathcal{A} und eines solchen k_0 nicht immer klar. Wir werden dieses Problem für die Anzahl an zulässigen Zuständen in Abschnitt 5 untersuchen.

Als Beispiel für das Auftreten von finite-size-Effekten wollen wir die Oberflächeneffekte anführen. Wir betrachten ein System bestehend aus k^2 vielen im Quadrat angeordneten Teilchen. Von diesen sind $4k - 4$ nur in zwei bzw. drei Raumrichtungen mit anderen Teilchen in Kontakt, d.h. sie sind Randteilchen. Diese Randteilchen

verhalten sich qualitativ anders als innere Teilchen, da auf sie andere Kräfte wirken. Beispielsweise können sie sich viel leichter vom Rest des Systems lösen. Da in einem makroskopischen System der Anteil an Randteilchen sehr klein ist, wollen wir die Eigenschaft \mathcal{A} : "Der Anteil der Randteilchen ist höchstens 10%" betrachten. Die Systemgröße, von der wir diese Eigenschaft abhängig machen, ist die Teilchenzahl. Wegen $(4k - 4)/k^2 \leq 0,1 \Leftrightarrow k \geq 39$, ist

$$\mathfrak{Z}(\mathcal{A}) = \{\xi_k \mid k \geq 39\}.$$

Dieses System hat also bezüglich der betrachteten Eigenschaft einen finite-size-Effekt.

Einige finite-size-Effekte kann man durch geschickte Modellbildung umgehen oder zumindest verringern, der oben beschriebene finite-size-Effekt bezüglich der Oberflächeneffekte ist einer davon. Dies geschieht durch die Einführung sogenannter *periodischer Randbedingungen*. Eine kurze Beschreibung ist in [HM86], Abschnitt 3.1, zu finden. Um das Modell mit periodischen Randbedingungen zu versehen, wird die gesamte Ebene mit verschobenen Kopien dieses Grundsystems gefüllt. Die Teilchen des Grundsystems treten dabei in der gleichen Anordnung wieder in den Kopiersystemen auf (siehe Abbildung 1.5 (a) für ein Beispiel). Wandert also ein Teilchen aus der linken Seite des Grundsystems heraus, so wandert es gleichzeitig auf der rechten Seite wieder herein. Der Anteil an Randteilchen schrumpft dadurch auf 0 zusammen. Auch die Rechenzeit bleibt überschaubar, da nur die Bewegungen der verhältnismäßig wenigen Teilchen des Grundsystems berechnet werden müssen.

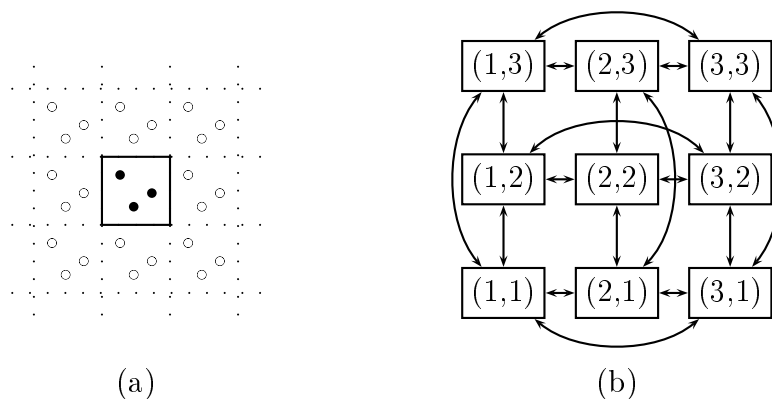


Abbildung 1.5.: (a) Modellsystem mit periodischen Randbedingungen, (b) Zustandsgraph der EMK aus Beispiel 1.4 mit periodischen Randbedingungen

Sofern nicht ausdrücklich etwas anderes gesagt wird, wollen wir von nun an Gitter mit periodischen Randbedingungen betrachten. Beispiel 1.4 verändert sich unter Berücksichtigung von periodischen Randbedingungen dahingehend, dass beispielsweise ein Übergang von Zustand $(1,1)$ in den Zustand $(1,3)$ in einem Schritt möglich

wäre. In Abbildung 1.5 (b) wird dargestellt, wie die neun Zustände in diesem Fall untereinander erreichbar sind.

Außerdem führen die periodischen Randbedingungen dazu, dass jeder Gitterplatz zu gleich vielen anderen Gitterplätzen benachbart ist, und somit $|\mathcal{N}(c)| = \Delta$ für alle $c \in \mathcal{C}$ gilt.

1.3.2. Metropolis-Algorithmus

Stellen wir uns vor, wir wollen eine Sequenz von Zuständen auf $\mathcal{S} = \mathcal{C}^{\mathcal{V}}$ der Menge der möglichen Zustände simulieren, sodass ein Zustand gemäß seiner Auftrittswahrscheinlichkeit im realen System angenommen wird. Wir wissen zwar, dass ein unzulässiger Zustand nur mit Wahrscheinlichkeit 0 angenommen wird, die Wahrscheinlichkeit eines zulässigen Zustandes aber ist unbekannt. Dies ist ein allgemeines Problem bei der Betrachtungen von Vielteilchenmodellen. In der Thermodynamik (siehe beispielsweise Abschnitt 2.2.1 in [GW00]) wird gezeigt, dass für die Auftrittswahrscheinlichkeit π_s eines bestimmten Zustandes s im realen System

$$\pi_s = \frac{1}{Z} \exp(-\beta U(s)) \quad (1.6)$$

gilt, sofern die Anzahl an erlaubten Zuständen wesentlich größer ist als die Anzahl an Teilchen. Dass diese Bedingung im HC-Modell erfüllt ist, werden wir in Kapitel 5 sehen. Dabei ist $\beta := \frac{1}{T}$ mit der Temperatur T gemessen in Kelvin, U eine Energiefunktion und

$$Z = \sum_{s \in \mathcal{S}} \exp(-\beta U(s))$$

ein Normierungsfaktor. Je größer also die Energie eines Zustandes, desto unwahrscheinlicher ist bei fester Temperatur T sein Auftreten. Der Faktor β bestimmt zusätzlich die Stärke des Einflusses der Energie auf die Auftrittswahrscheinlichkeit. Bei einer kleinen Temperatur und damit großem β bewirken auch kleine Unterschiede in der Energie zweier Zustände große Unterschiede der zugehörigen Wahrscheinlichkeiten. Bei hohen Temperaturen (kleines β) hat die Energie eines Zustandes deutlich weniger Auswirkungen auf die Wahrscheinlichkeit. Im Grenzfall $T = \infty$ ist die Wahrscheinlichkeit eines Zustandes sogar für jede Energie gleich. Dies ist physikalisch sinnvoll, da sich das System bei unendlich hoher Temperatur im gesamten Zustandsraum völlig frei bewegen kann.

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung π wird auch *Boltzmann-Verteilung* und der Normierungsfaktor Z *Zustandssumme* genannt. Diese Zustandssumme ist im Allgemeinen auf Grund der großen Anzahl an Zuständen schwer zu berechnen und deshalb als unbekannt anzusehen.

Wir definieren $\exp(-\beta U(s)) := a_s$ und erhalten somit $\pi_s = \frac{a_s}{Z}$ für alle $s \in \mathcal{S}$. Im

speziellen Fall des HC-Modells mit der Energiefunktion aus Gleichung (1.1) ist

$$a_s = \begin{cases} 1, & \text{falls } s \in \mathcal{S}^z \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Für die Boltzmann-Verteilung gilt damit

$$\pi_s = \begin{cases} \frac{1}{Z}, & \text{falls } s \in \mathcal{S}^z \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

für alle $s \in \mathcal{S}$. Sie ist also die Gleichverteilung auf der Menge der zulässigen Konfigurationen und Z die Anzahl an zulässigen Konfigurationen.

Für eine Teilmenge $\mathcal{R} \subseteq \mathcal{S}$ bezeichne $\pi|_{\mathcal{R}}$ die Verteilung π eingeschränkt auf die Menge \mathcal{R} . Dies bedeutet

$$(\pi|_{\mathcal{R}})_s := \frac{\pi_s}{\pi(\mathcal{R})} \mathbb{1}_{\mathcal{R}}(s)$$

für alle $s \in \mathcal{S}$. Da π die Gleichverteilung auf \mathcal{S}^z ist, gilt

$$(\pi|_{\mathcal{R}})_s = \frac{\frac{a_s}{Z}}{\frac{|\mathcal{R} \cap \mathcal{S}^z|}{Z}} \mathbb{1}_{\mathcal{R}}(s) = \begin{cases} \frac{1}{|\mathcal{R} \cap \mathcal{S}^z|}, & \text{falls } s \in \mathcal{R} \cap \mathcal{S}^z \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (1.7)$$

für alle $s \in \mathcal{S}$. $\pi|_{\mathcal{R}}$ ist demnach die Gleichverteilung auf der Menge der zulässigen Zustände in \mathcal{R} .

Wie soll man nun Zufallszahlen gemäß einer unbekanntem Verteilung erzeugen? (*)

Einen Ansatz, diese Aufgabe zu bewältigen, liefert der *Metropolis-Algorithmus*. Bei diesem besteht die Grundidee darin, stochastische Prozesse zu betrachten, deren Verteilung bekannt ist und gegen die unbekanntem Verteilung konvergiert. Eine Darstellung dieses Algorithmus entnehmen wir [Ros95], Seite 204.

Es sei $\mathbf{Q} = (q_{rs})_{r,s \in \mathcal{S}}$ eine beliebige symmetrische und irreduzible Übergangsmatrix auf \mathcal{S} und $\pi = \left(\frac{a_s}{Z}\right)_{s \in \mathcal{S}}$ die zugehörige, nach Satz 1.18 existierende und nach Bemerkung 1.21 eindeutige stationäre Verteilung. Wir definieren die *Metropoliskette* $M = (M_n)_{n \geq 0}$ wie folgt:

(M1) Die Kette wird in einem festen Zustand $s_0 \in \mathcal{S}$ gestartet, d.h. $M_0 = s_0$ fast sicher.

(M2) Definiere einen stochastischen Prozess $Y = (Y_n)_{n \geq 0}$ auf einem Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega, \mathfrak{A}, P)$ mit Werten in \mathcal{S} , sodass

$$P(Y_n \mid (M_k)_{0 \leq k \leq n}, (Y_k)_{0 \leq k \leq n-1}) = P(Y_n \mid M_n)$$

mit

$$P(Y_n = s \mid M_n = r) = q_{rs}$$

für alle $r, s \in \mathcal{S}$ und $n \geq 0$.

(M3) Damit sei

$$P(M_{n+1} \mid (M_k)_{0 \leq k \leq n}, (Y_k)_{0 \leq k \leq n}) = P(M_{n+1} \mid M_n, Y_n)$$

für alle $n \geq 0$. Genauer sei für alle $r, s \in \mathcal{S}, r \neq s$,

$$\begin{aligned} P(M_{n+1} = s \mid Y_n = s, M_n = r) &= \min \left\{ 1, \frac{a_s}{a_r} \right\} \\ P(M_{n+1} = r \mid Y_n = s, M_n = r) &= 1 - \min \left\{ 1, \frac{a_s}{a_r} \right\} \\ P(M_{n+1} = r \mid Y_n = r, M_n = r) &= 1, \end{aligned}$$

wobei wir $\frac{0}{0} := 1$ und $\frac{1}{0} := \infty$ setzen. Die Übergangswahrscheinlichkeiten von M sind somit gegeben durch

$$P(M_{n+1} = s \mid M_n = r) = \frac{P(Y_n = s \mid M_n = r)P(M_{n+1} = s \mid Y_n = s, M_n = r)}{P(Y_n = s \mid M_{n+1} = s, M_n = r)}$$

für alle $r, s \in \mathcal{S}$ und $n \geq 0$. Dabei ist $P(Y_n = s \mid M_{n+1} = s, M_n = r) = 1$, sofern $s \neq r$ gilt. Wir erhalten also

$$p_{rs} = \begin{cases} q_{rs} \min \left\{ 1, \frac{a_s}{a_r} \right\}, & \text{falls } s \neq r \\ q_{rr} + \sum_{s' \neq r} q_{rs'} (1 - \min \left\{ 1, \frac{a_{s'}}{a_r} \right\}), & \text{falls } s = r \end{cases}$$

für alle $r, s \in \mathcal{S}$.

Die Anschauung ist die Folgende: Die Kette Y liefert zu jeder Zeit $n \geq 0$ einen *Versuchszustand*, also einen Kandidaten für den Zustand zur Zeit $n + 1$. Dieser kann nun von der Kette M akzeptiert oder abgelehnt werden. Gegeben, dass $M_n = r$ und $Y_n = s$ ist für ein $n \geq 0$ und $r, s \in \mathcal{S}$, wird ein Zufallsexperiment mit Trefferwahrscheinlichkeit $\min \left\{ 1, \frac{a_s}{a_r} \right\}$ durchgeführt und der Versuchszustand s bei einem Treffer akzeptiert und sonst abgelehnt. Wird der Versuchszustand nicht akzeptiert, so verbleibt die Kette im aktuellen Zustand.

Die Metropoliskette ist eine zeitlich homogene EMK, trotz der Irreduzibilität von \mathbf{Q} aber nicht zwangsläufig irreduzibel, wie das folgende Beispiel zeigt.

Beispiel 1.26. Es sei $\mathcal{S} = \{1, 2, 3\}$, \mathbf{Q} gegeben durch

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & \frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{4} & \frac{3}{4} \end{pmatrix}$$

und $a_1 = 1, a_2 = 0, a_3 = 1$. Damit ist \mathbf{Q} offensichtlich irreduzibel und symmetrisch, für \mathbf{P} gilt allerdings

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

weshalb M offensichtlich nicht irreduzibel ist.

Der Zustandsraum \mathcal{S} zerfällt also bezüglich der Metropolis-Kette M in möglicherweise mehrere Irreduzibilitätsklassen. Ist sie aber irreduzibel, so gilt der folgende Satz, der uns nun insbesondere eine Antwort auf die eingangs gestellte Frage (*) liefert.

Satz 1.27. *Es sei M eine irreduzible Metropolis-Kette mit Werten in einem endlichen Zustandsraum \mathcal{S} . Dann ist die Boltzmann-Verteilung π die eindeutig bestimmte stationäre Verteilung von M und deshalb ihre Grenzverteilung, falls $q_{rr} > 0$ für alle $r \in \mathcal{S}$ gilt.*

Beweis: Wir zeigen zunächst, dass π eine stationäre Verteilung ist. Zu zeigen ist $\pi P = \pi$. Es gilt sogar $\pi_r p_{rs} = \pi_s p_{sr}$ für alle $r, s \in \mathcal{S}$. Für den Fall $r = s$ ist diese Behauptung sofort klar. Sei also $r \neq s$. Dann ist

$$\begin{aligned} \pi_r p_{rs} &= \pi_r q_{rs} \min \left\{ 1, \frac{a_s}{a_r} \right\} \\ &= \pi_r q_{rs} \min \left\{ 1, \frac{\pi_s}{\pi_r} \right\} \\ &= q_{rs} \min \left\{ \pi_r, \pi_s \right\}, \end{aligned} \tag{1.8}$$

was symmetrisch in r und s ist. Damit gilt aber

$$(\pi P)_s = \sum_r \pi_r p_{rs} = \sum_r \pi_s p_{sr} = \pi_s$$

für alle $s \in \mathcal{S}$. Es ist also π eine stationäre Verteilung. Wegen $q_{ss} > 0$ für alle $s \in \mathcal{S}$, ist auch $p_{ss} > 0$ für alle $s \in \mathcal{S}$. Jeder Zustand ist demnach aperiodisch. Hieraus folgt schließlich zusammen mit der Irreduzibilität der Kette gemäß dem Ergodensatz zum einen, dass π als stationäre Verteilung eindeutig bestimmt ist, und zum anderen, dass π auch die Grenzverteilung der Metropolis-Kette ist. \square

Mit dieser Methode lässt sich also eine EMK simulieren, deren Verteilung die Grenzverteilung π beliebig gut approximiert. Dabei ist die Grenzverteilung wie gerade gesehen nur abhängig von der Akzeptanzwahrscheinlichkeit und *unabhängig* von der Übergangsmatrix \mathbf{Q} (sofern diese die geforderten Eigenschaft erfüllt, d.h. irreduzibel und symmetrisch ist mit $q_{ss} > 0$ für alle $s \in \mathcal{S}$). Dies ist der besondere Clou an der Methode: Wir können die Matrix \mathbf{Q} frei wählen und sollten dies natürlich besonders geschickt tun. Was bedeutet dabei "geschickt"? Zum einen soll die EMK leicht zu simulieren und zum anderen die Konvergenzgeschwindigkeit möglichst hoch sein. Diese zwei Vorgaben werden wir in Kapitel 4 wieder aufgreifen.

Im HC-Modell wählen wir als irreduzible und symmetrische Übergangsmatrix \mathbf{Q}

$$q_{rs} := \begin{cases} \frac{1}{|\mathcal{V}||\mathcal{C}|}, & \text{falls } r \neq s = r_{v \rightarrow c} \\ & \text{für ein } v \in \mathcal{V}, c \in \mathcal{C} \\ 1 - \sum_v \sum_{c' \neq r(v)} \frac{1}{|\mathcal{V}||\mathcal{C}|}, & \text{falls } s = r \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (1.9)$$

für alle $r, s \in \mathcal{S}$. Die Symmetrie von \mathbf{Q} resultiert aus

$$s = r_{v \rightarrow s(v)} \Leftrightarrow r = s_{v \rightarrow r(v)}$$

und die Irreduzibilität aus der Tatsache, dass auch Übergänge zu unzulässigen Zuständen erlaubt sind. Die Akzeptanzwahrscheinlichkeit wollen wir leicht verändern und setzen für alle $r, s \in \mathcal{S}$

$$A_{r,v}(c) := \begin{cases} \min \left\{ 1, \frac{a_s}{a_r} \right\} \mathbf{1}_{\mathcal{C}^{(r,v)}}(c), & \text{falls } s = r_{v \rightarrow c}, v \in \mathcal{V}, c \in \mathcal{C} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (1.10)$$

für eine nichtleere Teilmenge $\mathcal{C}^{(r,v)}$ von \mathcal{C} . Mit $\mathcal{C}^{(r,v)} = \mathcal{C}$ erhalten wir so für die Metropolis-kette die globale Bewegung eines Teilchens, mit $\mathcal{C}^{(r,v)} = \mathcal{N}(r(v))$ ergibt sich die lokale Bewegung. Für $s = r_{v \rightarrow c}$ ist genauer

$$A_{r,v}(c) = \begin{cases} \mathbf{1}_{\mathcal{C}^{(r,v)}}(c), & \text{falls } r \notin \mathcal{S}^z \text{ oder } s \in \mathcal{S}^z \\ 0, & \text{falls } r \in \mathcal{S}^z \text{ und } s \notin \mathcal{S}^z. \end{cases}$$

Auch mit diesen Akzeptanzwahrscheinlichkeiten ist die Boltzmannverteilung stationär, wie eine leichte Abwandlung der Gleichungskette (1.8) zeigt. Und zwar ist

$$s(v) \in \mathcal{C}^{(r,v)} \Leftrightarrow r(v) \in \mathcal{C}^{(s,v)}$$

für $\mathcal{C}^{(r,v)} \in \{\mathcal{C}, \mathcal{N}(r(v))\}$ und somit weiterhin $\pi_r p_{rs} = \pi_s p_{sr}$. Die stationäre Verteilung und damit Grenzverteilung im HC-Modell ist also die Gleichverteilung auf \mathcal{S}^z , sofern M irreduzibel ist. Startet die Metropolis-kette in einem zulässigen Zustand s_0 , so erhalten wir zumindest die Irreduzibilität von M auf einer abgeschlossenen Teilmenge $\mathcal{R} \subset \mathcal{S}^z$ mit $s_0 \in \mathcal{R}$. Die stationäre Verteilung ergibt sich dann als Einschränkung der Gleichverteilung auf die Menge der zulässigen Zustände in \mathcal{R} .

Wir können nun das schon weiter oben benutzte Lemma beweisen. Dies muss aber ohne die Benutzung von Rekurrenz und Transienz geschehen, da es in die dortigen Beweise einging.

Lemma 1.28. *Ist $r \in \mathcal{S} \setminus \mathcal{S}^z$ mit $\mathcal{S}^z \neq \emptyset$ ein unzulässiger Zustand, so existiert bei globaler und lokaler Bewegung ein zulässiger Zustand s mit $r \rightarrow s$.*

Beweis: Nach Wahl von \mathbf{Q} ist für alle $r, s' = r_{v \rightarrow c}$, $c \in \mathcal{N}(r(v))$ und $v \in \mathcal{V}$ die Übergangswahrscheinlichkeit $q_{rs'} = (|\mathcal{V}||\mathcal{C}|)^{-1}$ positiv. Es existiert daher ein $h \in \mathbb{N}$ und eine Sequenz

$$z_0 = r, \dots, z_h = s,$$

sodass $s \in \mathcal{S}^z$ und $z_i = (z_{i-1})_{v_i \rightarrow c_i}$ für $c_i \in \mathcal{N}(v_i), v_i \in \mathcal{V}$ sowie $q_{z_{i-1}, z_i} > 0$ für alle $1 \leq i \leq h$ gilt. Dabei sei $z_i \notin \mathcal{S}^z$ für alle $1 \leq i \leq h-1$. Falls dies nicht der Fall ist, so verkürze die Sequenz bis zum ersten zulässigen Zustand. Damit gilt $A_{z_{i-1}, z_i}(c_i) = 1$ und deshalb $p_{z_{i-1}, z_i} = q_{z_{i-1}, z_i} > 0$ für alle $1 \leq i \leq h$. Es ergibt sich

$$p_{rs}^{(h)} \geq \prod_{i=1}^h p_{z_{i-1}, z_i} > 0.$$

Der Zustand s ist also bezüglich \mathbf{P} von r aus erreichbar. □

Wir sind nun ausreichend gerüstet, um das HC-Modell und stochastische Prozesse auf eben diesem zu studieren.

2. Kombinatorische Methode

Befassen wir uns nun mit der Frage nach der Anzahl zulässiger Konfigurationen im HC-Modell: Wie viele Möglichkeiten gibt es m ununterscheidbare Kugeln auf ein $M \times N$ -Gitter zu legen, sodass eine gemäß Abschnitt 1.1 zulässige Konfiguration entsteht? Zur Erinnerung: Eine solche Konfiguration heißt zulässig, falls keine zwei benachbarten Gitterplätze besetzt sind. Auch die übrige Notation aus Abschnitt 1.1 behalten wir bei. Es ist also $G = (\mathcal{C}, E)$ ein endlicher Graph mit der Knotenmenge $\mathcal{C} = \{1, \dots, M\} \times \{1, \dots, N\}$ sowie $\mathcal{V} = \{v_1, \dots, v_m\}$ die Menge der Teilchen und \mathcal{S}^z die Menge der zulässigen Zustände. Außerdem erinnern wir an die Äquivalenzrelation

$$r \star s \Leftrightarrow \text{für alle } v \in \mathcal{V} \text{ existiert ein } w \in \mathcal{V} \text{ mit } r(v) = s(w),$$

unter der die Teilchen ununterscheidbar werden.

Definition 2.1. Wir definieren

$$A(M \times N, m) := |\mathcal{S}^z / \star| = \frac{|\mathcal{S}^z|}{m!}$$

als die *Anzahl zulässiger Konfigurationen* im HC-Modell auf einem $M \times N$ -Gitter mit m ununterscheidbaren Kugeln.

Die Frage nach der Anzahl zulässiger Zustände ist, so intuitiv sie auch sein mag, doch schwer zu beantworten. Für ein 1-dimensionales Gitter ($N = 1$) gibt es zwar eine direkte Formel für die Anzahl erlaubter Konfigurationen (siehe Satz 5.2), diese lässt sich aber leider nicht auf den 2-dimensionalen Fall verallgemeinern.

Eine Möglichkeit, diese Anzahl zu bestimmen, ist die rekursive, kombinatorische Vorgehensweise nach McQuistan und Hock [MH92]. Die Grundidee dabei ist, rekursiv immer kleinere Gitter zu betrachten, bis hin zu Gittern, für die die Anzahl an Zuständen leicht zu sehen ist. Wir teilen dazu die Gesamtheit an Konfigurationen auf in die Konfigurationen, bei denen in der ersten Spalte bestimmte Stellen besetzt sind, und jene, bei denen diese Stellen unbesetzt sind. Ist beispielsweise bei einem $M \times 1$ -Gitter die erste Stelle besetzt, so muss die zweite frei sein. Um also die Anzahl an Zuständen mit besetzter erster Stelle zu bestimmen, genügt es zu untersuchen, wie viele Möglichkeiten es gibt $m - 1$ Kugeln auf ein $(M - 2) \times 1$ -Gitter zu platzieren. Diese Idee wollen wir in diesem Kapitel präzisieren.

Zunächst betrachten wir dabei Systeme (d.h. Gitter) ohne periodische Randbedingungen. Dies bedeutet, dass im Falle $N \geq 3$ die Stellen der ersten Zeile nicht zu denen der letzten Zeile benachbart sind. Gleiches gilt im Falle $M \geq 3$ für die erste und letzte Spalte.

Definition 2.2. Für eine Konfiguration $[s : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{C}] \in \mathcal{S}$ heißt ein Paar $(c, c') \in E$ benachbarter Gitterpunkte

- a) *0-0-Nachbar*, falls $s^{-1}(\{c, c'\}) = \emptyset$, d.h. beide Plätze frei sind,
- b) *0-1-Nachbar*, falls $s^{-1}(\{c, c'\}) = \{v\}$ für ein $v \in \mathcal{V}$, d.h. genau einer der beiden Plätze besetzt ist,
- c) *1-1-Nachbar*, falls $s^{-1}(\{c\}) = \{v\}$, $s^{-1}(\{c'\}) = \{w\}$ für verschiedene $v, w \in \mathcal{V}$ gilt, d.h. beide Plätze besetzt sind.

Für einen Zustand s sei n_{ij}^s , $i, j \in \{0, 1\}$, $i \leq j$, die Anzahl an i - j -Nachbarn. Ist s zulässig, so ist $n_{11}^s = 0$ und

$$n_{00}^s + n_{01}^s = |E| = 2MN - M - N. \quad (2.1)$$

Definition 2.3. Es sei

$$A(M \times N, m, n) := |\{s \in \mathcal{S}^z / \star \mid n_{01}^s = n\}|$$

die Anzahl zulässiger Konfigurationen auf einem $M \times N$ -Gitter mit m ununterscheidbaren Kugeln und n 0-1-Nachbarn.

Damit kann die Gesamtzahl an zulässigen Zuständen zerlegt werden in

$$A(M \times N, m) = \sum_{n \geq 0} A(M \times N, m, n).$$

Das Ziel ist es, für diese Gesamtzahl eine lineare Rekursion herzuleiten. Dazu zerlegen wir $A(M \times N, m, n)$ weiter und betrachten, welche Stellen der ersten Spalte besetzt bzw. frei sind. Es sei für einen Zustand $s \in \mathcal{S}^z$

$$s_i := |s^{-1}(\{(1, i)\})| \in \{0, 1\}$$

für alle $1 \leq i \leq N$ der Indikator für die Besetzung der ersten Stelle der i -ten Zeile. Durch $(s_1, \dots, s_N) \in \{0, 1\}^N$ ist somit die Besetzung der ersten Spalte eindeutig gegeben. Verkürzt wollen wir im Folgenden nur $s_1 s_2 \dots s_N$ statt (s_1, \dots, s_N) schreiben. Ein solches Tupel $a = a_1 \dots a_N \in \{0, 1\}^N$ kann als Element eines N -stufigen Baumes

$$\mathbb{T} = \bigcup_{n=0}^N \{0, 1\}^n$$

aufgefasst werden, der in jeder Stufe in zwei Äste verzweigt und dessen Knoten wir wie folgt numerieren: Den Ursprung bezeichnen wir mit \emptyset und entgegen anderer geläufiger Bezeichnungen für ein $a \in \{0, 1\}^{N-1}$ mit $0a$ und $1a$ die Nachkommen von

a , d.h. die Knoten, die von a abzweigen. Da uns nicht die genealogische Struktur des Baumes, sondern nur seine Einträge in der N -ten Stufe interessieren, wollen wir diese unübliche Bezeichnung zulassen. Auf diese Weise können wir die Menge $\{0, 1\}^N$ auf eindeutige Weise gemäß

$$000\dots 0, 100\dots 0, 010\dots 0, 110\dots 0, \dots, 01\dots 11, 11\dots 11$$

durchzählen.

Definition 2.4. Wir definieren für alle $a \in \{0, 1\}^N, a = a_1\dots a_N$,

$$A_a(M \times N, m, n) := \left| \left\{ s \in \mathcal{S}^z / \star \mid n_{01}^s = n \text{ und } s_i = a_i, 1 \leq i \leq N \right\} \right|$$

als die Anzahl zulässiger Konfigurationen auf einem $M \times N$ -Gitter mit m ununterscheidbaren Kugeln und n 0-1-Nachbarn, für welche die Besetzung der ersten Spalte des Gitters durch a eindeutig festgelegt ist. Es ist

$$A(M \times N, m, n) = \sum_{a \in \{0, 1\}^N} A_a(M \times N, m, n).$$

Auch die $A_a(M \times N, m, n), a \in \{0, 1\}^N$, werden weiter zerlegt, indem wir untersuchen, ob die Stellen $(2, i), 1 \leq i \leq N$, belegt sind oder nicht. Um diese Zerlegung formal zu beschreiben, bietet es sich an, die folgenden Operatoren zu benutzen.

Definition 2.5. Für alle $M, N, m, n \geq 1$ und $a \in \{0, 1\}^N$ definieren wir

- a) $RA_a(M \times N, m, n) := A_a((M-1) \times N, m, n)$, das heißt R reduziert die Gitterlänge M um 1.
- b) $R_1A_a(M \times N, m, n) := A_a(M \times N, m-1, n)$, das heißt R_1 reduziert die Anzahl der Kugeln m um 1.
- c) $R_{01}A_a(M \times N, m, n) := R_{10}A_a(M \times N, m, n) := A_a(M \times N, m, n-1)$, das heißt $R_{01} = R_{10}$ reduziert die Anzahl n der 0-1-Nachbarn um 1.

Wird durch einen Operator $\Lambda \in \{R, R_1, R_{01}\}$ ein Argument von $A_a(M \times N, m, n)$ negativ, so setzen wir $\Lambda A_a(M \times N, m, n) = 0$.

2.1. $M \times 1$ -Gitter

Wir wollen damit beginnen, eine lineare Rekursion für $M \times 1$ -Gitter herzuleiten und diese in den folgenden Abschnitten schrittweise verallgemeinern.

In Abbildung 2.1 ist verdeutlicht, wie mit Hilfe der oben definierten Operatoren $A_0(M \times 1, m, n)$ zerlegt werden kann.

$$\begin{array}{l}
 \boxed{\quad} \boxed{?} \cdots \boxed{?} \quad A_0(M \times 1, m, n) \\
 \cdots \boxed{\quad} \cdots \boxed{?} \quad = RA_0(M \times 1, m, n) \\
 \cdots \bullet \cdots \boxed{?} \quad + RR_{01}A_1(M \times 1, m, n)
 \end{array}$$

Abbildung 2.1.: Rekursive Zerlegung von $A_0(M \times 1, m, n)$

Es ist in Operatorschreibweise

$$\begin{aligned}
 A_0(M \times 1, m, n) &= R(A_0(M \times 1, m, n) + R_{01}A_1(M \times 1, m, n)) \\
 A_1(M \times 1, m, n) &= RR_1R_{01}A_0(M \times 1, m, n)
 \end{aligned}$$

oder in Matrixschreibweise

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} A_0(M \times 1, m, n) \\ A_1(M \times 1, m, n) \end{pmatrix} &= R \cdot \begin{pmatrix} 1 & R_{01} \\ R_1R_{01} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_0(M \times 1, m, n) \\ A_1(M \times 1, m, n) \end{pmatrix} \quad (2.2) \\
 0 &= \begin{pmatrix} 1 - R^{-1} & R_{01} \\ R_1R_{01} & -R^{-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_0(M \times 1, m, n) \\ A_1(M \times 1, m, n) \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

für alle $M \geq 2$ und $m, n \geq 1$. Dabei sei R^{-1} der zu R inverse Operator, d.h. bei seiner Anwendung wird M um 1 erhöht. Für eine nichttriviale Lösung muss nun

$$|Q_1 - R^{-1}I_2| \cdot A_a(M \times 1, m, n) = 0 \quad (2.3)$$

für alle $a \in \{0, 1\}$ gelten, wobei I_2 die 2×2 -Einheitsmatrix sei und

$$Q_1 := \begin{pmatrix} 1 & R_{01} \\ R_1R_{01} & 0 \end{pmatrix}.$$

Aus Gleichung (2.3) zusammen mit Definition 2.4 erhalten wir dann durch Aufsummieren über alle Werte von a

$$\begin{aligned}
 0 &= |Q_1 - R^{-1}I_2| \cdot A(M \times 1, m, n) \\
 &= (-R^{-1} + R^{-2} - R_1R_{01}^2)A(M \times 1, m, n).
 \end{aligned}$$

Hieraus ergibt sich

$$R^{-2}A(M \times 1, m, n) = (R^{-1} + R_1R_{01}^2)A(M \times 1, m, n)$$

bzw. nach Anwenden von R^2 auf beiden Seiten der Gleichung

$$A(M \times 1, m, n) = A((M - 1) \times 1, m, n) + A((M - 2) \times 1, m - 1, n - 2)$$

Bedingung	Begründung
$M \leq n$ oder $m > \frac{M+1}{2}$ oder $n \notin \{2m-2, 2m-1, 2m\} \Rightarrow A = 0$	solche Besetzungen sind nicht möglich
$A(M \times 1, 0, 0) = 1$	das gesamte Gitter ist leer
$A(1 \times 1, 1, 0) = 1$	klar
$A(M \times 1, 1, 0) = 0$ falls $M > 1$	klar
$A(M \times 1, 1, 1) = 2$ falls $M > 1$	die Kugel muss auf einem Randpunkt liegen
$A(M \times 1, 1, 2) = M - 2$ falls $M > 2$	die Kugel darf nicht auf den Randpunkten liegen

Tabelle 2.1.: Abbruchbedingungen bei $M \times 1$ -Gittern

für $M \geq 2, m \geq 1$ und $n \geq 2$. Bei Tupeln (M, m, n) mit $M < 2, m < 1$ oder $n < 2$ bricht die Iteration ab und die Anzahl an Möglichkeiten muss per Hand ausgerechnet werden. Dies geschieht über die Abbruchbedingungen aus Tabelle 2.1. Mit diesen einfachen Regeln können wir ein Beispiel rechnen.

Beispiel 2.6.

$$\begin{aligned}
A(10 \times 1, 4, 7) &= A(9 \times 1, 4, 7) + A(8 \times 1, 3, 5) \\
&= A(8 \times 1, 4, 7) + 2A(7 \times 1, 3, 5) + A(6 \times 1, 2, 3) \\
&= A(7 \times 1, 4, 7) + 3A(6 \times 1, 3, 5) + 3A(5 \times 1, 2, 3) + A(4 \times 1, 1, 1) \\
&= 0 + 3A(5 \times 1, 3, 5) + 6A(4 \times 1, 2, 3) + 3A(3 \times 1, 1, 1) + 2 \\
&= 0 + 6A(3 \times 1, 2, 3) + 6A(2 \times 1, 1, 1) + 3 \cdot 2 + 2 \\
&= 0 + 6 \cdot 2 + 8 = 20.
\end{aligned}$$

Die obige Rechnung und Gleichung (2.3) deuten bereits an, dass sich die gesuchte Anzahl an zulässigen Zuständen im 1-dimensionalen Fall ähnlich wie ein Binomialkoeffizient verhält, da die Konstanten des Pascalschen Dreiecks auftreten. Dass dies tatsächlich der Fall ist, zeigen wir im bereits erwähnten Satz 5.2 in Kapitel 5.

Für gegebenes m führt wie in der Tabelle beschrieben nur $n \in \{2m-2, 2m-1, 2m\}$ zu einer positiven Anzahl an Möglichkeiten. Dabei gehört

- $n = 2m - 2$ zu Konfigurationen, bei denen beide Enden des Gitters besetzt sind,
- $n = 2m - 1$ zu Konfigurationen, bei denen nur ein Ende des Gitters besetzt und das andere Ende unbesetzt ist,

- $n = 2m$ zu Konfigurationen, bei denen beide Enden des Gitters unbesetzt sind.

Um das Modell mit periodischen Randbedingungen zu versehen, verbinden wir die erste und die letzte Stelle des $M \times 1$ -Gitters, wir erhalten einen Ring. Dadurch werden aber einige vorher zulässige Konfigurationen unzulässig. Dies sind solche, bei denen beide Enden des Gitters besetzt sind, für die also $n = 2m - 2$ gilt. Die Gesamtzahl an erlaubten Konfigurationen für gegebenes M und m bei periodischen Randbedingungen berechnet sich also zu

$$A(M \times 1, m) = A(M \times 1, m, 2m - 1) + A(M \times 1, m, 2m).$$

2.2. $M \times 2$ -Gitter

Wir können die obige Vorgehensweise nun auf ein $M \times 2$ -Gitter ausdehnen. In Abbildung 2.2 ist die Indizierung gemäß Definition 2.4 veranschaulicht. Für jedes $M \geq 1$ und $m, n \geq 0$ ist $A_{11}(M \times 2, m, n) = 0$, da Konfigurationen unzulässig sind, bei denen die ersten Stellen der ersten *und* zweiten Zeile besetzt sind. Dennoch wollen wir $A_{11}(M \times 2, m, n)$ weiterhin berücksichtigen, da dies die anschließende Verallgemeinerung auf beliebige Gitter vereinfacht.

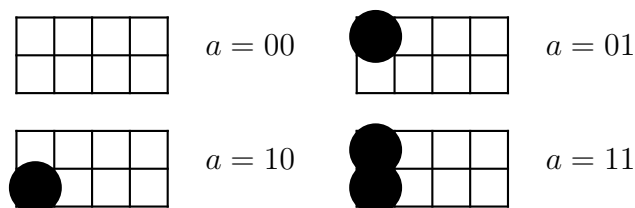


Abbildung 2.2.: Veranschaulichung der Indizierung bei $M \times 2$ -Gittern

Völlig analog zum Fall eines $M \times 1$ -Gitters zerlegen wir $A_a(M \times 2, m, n)$, $a \in \{0, 1\}^2$, weiter in eine Summe, bestehend aus je einem Summanden für jede Möglichkeit, die zweite Spalte zu besetzen. Für $a = 00$ beispielsweise bedeutet das

$$\begin{aligned} A_{00}(M \times 2, m, n) &= A_{00}((M - 1) \times 2, m, n) + A_{10}((M - 1) \times 2, m, n - 1) \\ &\quad + A_{01}((M - 1) \times 2, m, n - 1) \end{aligned}$$

für alle $M \geq 2, m \geq 0$ und $n \geq 2$. Die Verringerung der Anzahl n an 0-1-Nachbarn entsteht dadurch, dass die 0-1-Nachbarn zwischen der ersten und zweiten Spalte, sowie die innerhalb der ersten Spalte bei Betrachtung des kleineren Gitters nicht mehr gezählt werden. Genauso müsste die Teilchenzahl m verringert werden, wenn sich in der ersten Spalte Teilchen befänden. Das heißt für $a = 10$ ist

$$\begin{aligned} A_{10}(M \times 2, m, n) &= A_{00}((M - 1) \times 2, m - 1, n - 2) \\ &\quad + A_{01}((M - 1) \times 2, m - 1, n - 3) \end{aligned}$$

für alle $M \geq 2, m \geq 0$ und $n \geq 2$.

Der Operatorschreibweise aus Definition 2.5 wollen wir aus Notationsgründen die Operatoren

$$\mathbf{d)} R_0 := 1 \quad \mathbf{e)} R_{00} := 1 \quad \mathbf{f)} R_{11} := 0$$

hinzufügen. Damit können wir dann allgemein für $a = ij$ mit $i, j \in \{0, 1\}$ und $M \geq 2, m \geq 2, n \geq 3$

$$\begin{aligned} A_{ij}(M \times 2, m, n) &= RR_j R_i R_{ji} \cdot R_{j0} R_{i0} A_{00}(M \times 2, m, n) \\ &\quad + RR_j R_i R_{ji} \cdot R_{j0} R_{i1} A_{10}(M \times 2, m, n) \\ &\quad + RR_j R_i R_{ji} \cdot R_{j1} R_{i0} A_{01}(M \times 2, m, n) \\ &\quad + RR_j R_i R_{ji} \cdot R_{j1} R_{i1} A_{11}(M \times 2, m, n) \\ &= RR_j R_i R_{ji} \sum_{u=0}^1 \sum_{t=0}^1 R_{jt} R_{iu} A_{tu}(M \times 2, m, n) \end{aligned}$$

schreiben. In Matrixschreibweise (vgl. Gleichung (2.2)) erhalten wir

$$\begin{pmatrix} A_{00}(M \times 2, m, n) \\ A_{10}(M \times 2, m, n) \\ A_{01}(M \times 2, m, n) \\ A_{11}(M \times 2, m, n) \end{pmatrix} = R \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & R_{01} & R_{01} & R_{01}^2 \\ R_1 R_{01}^2 & 0 & R_1 R_{01}^3 & 0 \\ R_1 R_{01}^2 & R_1 R_{01}^3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{=: Q_2} \cdot \begin{pmatrix} A_{00}(M \times 2, m, n) \\ A_{10}(M \times 2, m, n) \\ A_{01}(M \times 2, m, n) \\ A_{11}(M \times 2, m, n) \end{pmatrix}$$

und damit für eine nichttriviale Lösung wie oben

$$|Q_2 - R^{-1} I_{2^2}| \cdot A(M \times 2, m, n) = 0. \quad (2.4)$$

Dabei können wir Q_2 faktorisieren als

$$Q_2 = P_2 Q_1^{[2]},$$

mit der folgenden 4×4 -Matrix P_2 , bestehend aus den Operatoren für die Anzahl nächster Nachbarpaare,

$$P_2 = \begin{pmatrix} R_{00} & & & \\ & R_{01} & & \\ & & R_{10} & \\ & & & R_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & R_{01} & & \\ & & R_{01} & \\ & & & 0 \end{pmatrix},$$

und dem Kroneckerprodukt $Q_1^{[2]}$ von Q_1 mit sich selbst.

Definition 2.7. Für zwei Matrizen $A = (a_{ij})_{\substack{1 \leq i \leq m \\ 1 \leq j \leq n}} \in Mat(m, n)$ und $B \in Mat(r, s)$ definieren wir ihr *Kroneckerprodukt* als

$$A \otimes B := \begin{pmatrix} a_{11}B & \dots & a_{1n}B \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1}B & \dots & a_{mn}B \end{pmatrix} \in M(mr, ns).$$

Für $Q_1^{[2]}$ ergibt sich also

$$Q_1^{[2]} = \begin{pmatrix} Q_1 & R_{01}Q_1 \\ R_1R_{01}Q_1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & R_{01} & R_{01} & R_{01}^2 \\ R_1R_{01} & 0 & R_1R_{01}^2 & 0 \\ R_1R_{01} & R_1R_{01}^2 & 0 & 0 \\ R_1^2R_{01}^2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Die Operatormatrix P_2 beschreibt die Korrelation der zwei Zeilen, aus denen das $M \times 2$ -Gitter zusammengesetzt ist. Der Eintrag $(P_2)_{11}$, der nur zu $A_{00}(M \times 2, m, n)$ einen Beitrag liefert, beschreibt die Verknüpfung zweier Zeilen mit leeren ersten Feldern. Diese können aneinander gefügt werden, ohne einen Einfluss auf die Anzahl an 0-1-Nachbarn zu haben. Der Eintrag $(P_2)_{22}$, welcher nur zu $A_{10}(M \times 2, m, n)$ einen Beitrag liefert, beschreibt die Verknüpfung zweier Zeilen, von denen die erste an der ersten Stelle besetzt, die zweite dort unbesetzt ist. Fügt man diese aneinander, so erzeugt man einen 0-1-Nachbarn. Da im nächsten Rekursionsschritt durch den Übergang zum $(M - 1) \times 2$ -Gitter die erste Spalte nicht mehr berücksichtigt wird, muss die Anzahl an 0-1-Nachbarn für dieses kleinere Gitter also um 1 reduziert werden. Dafür sorgt der Operator R_{01} an dieser Stelle. Die letzten beiden Einträge von P_2 entstehen analog.

Dagegen beschreibt $Q_1^{[2]}$ den Anteil der Rekursion, der sich aus zwei *unabhängigen* $M \times 1$ -Gittern ergibt. Die ersten vier Einträge oben links nehmen als Operatoren Einfluss auf Gitter, bei denen die erste und zweite Stelle der oberen Zeile frei sind. Diese Einträge bestehen also nur aus den Operatoren für die untere Zeile und bilden zusammen Q_1 . Die vier Einträgen darunter haben Einfluss auf Gitter, bei denen die erste Stelle der oberen Zeile besetzt und die zweite Stelle dieser Zeile frei ist. Dies führt zusätzlich zu den Operatoren für die untere Zeile zu R_1R_{01} , da ein Teilchen und ein 0-1-Nachbar quasi bereits verbraucht ist. Insgesamt also zu $R_1R_{01} \cdot Q_1$ an dieser Stelle. Ist bei der oberen Zeile des Gitters die erste Stelle frei und die zweite besetzt, so wird der Operator R_{01} benötigt, sind sogar beide Stellen besetzt, so ist es der Operator $R_{11} = 0$. Insgesamt ergibt sich also wie behauptet das Kroneckerprodukt

$$\begin{pmatrix} Q_1 & R_{01} \cdot Q_1 \\ R_1R_{01} \cdot Q_1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Durch Berechnung der Determinante und Anwendung der entsprechenden Operatoren erhalten wir aus Formel (2.4)

$$\begin{aligned} R^{-4}A(M \times 2, m, n) \\ = (R^{-3} + 2 \cdot R^{-2}R_1R_{01}^3 + R^{-2}R_1^2R_{01}^6 + R^{-1}R_1^2R_{01}^6)A(M \times 2, m, n) \end{aligned}$$

bzw. nach Anwenden von R^4 auf beiden Seiten

$$\begin{aligned} A(M \times 2, m, n) &= A((M - 1) \times 2, m, n) + 2 \cdot A((M - 2) \times 2, m - 1, n - 3) \\ &\quad + A((M - 2) \times 2, m - 2, n - 6) + A((M - 3) \times 2, m - 2, n - 6) \end{aligned}$$

für $M \geq 3, m \geq 2$ und $n \geq 6$. Auch hier benötigt man Abbruchbedingungen für Tupel (M, m, n) mit $M < 3, m < 2$ oder $n < 6$. Zu sehen sind diese in Tabelle 2.2 und erläutert in der folgenden Bemerkung.

Bedingung	Begründung
$M < m \Rightarrow A = 0$	es passen höchstens M Kugeln auf das Gitter
$3M - 2 < n \Rightarrow A = 0$	vergleiche Gleichung (2.1)
$n \notin \{3m - 2, 3m - 1, 3m\} \Rightarrow A = 0$	diese Besetzungen sind nicht möglich
$A(M \times 2, 0, 0) = 1$	klar
$M = 1: A(1 \times 2, 1, 1) = 2$ $A(1 \times 2, 0, 0) = 1$ $(m, n) \notin \{(0, 0), (1, 1)\} \Rightarrow A = 0$	klar
$M = 2: A(2 \times 2, 2, 4) = 2$ $A(2 \times 2, 1, 2) = 4, A(2 \times 2, 0, 0) = 1$ $(m, n) \notin \{(0, 0), (1, 2), (2, 4)\} \Rightarrow A = 0$	klar
$M > 2, m = 1: A(M \times 2, 1, 2) = 4$ $A(M \times 2, 1, 3) = 2M - 4$ $n \neq 2, 3 \Rightarrow A = 0$	Eckpunkt muss besetzt werden Eckpunkt nicht besetzen Besetzung nicht möglich
$M > 2, m = 2: A(M \times 2, 2, 4) = 4$ $A(M \times 2, 2, 5) = 8M - 20$ $A(3 \times 2, 2, 6) = 0$ $M > 3 \Rightarrow A(M \times 2, 2, 6) = 2M^2 - 12M + 18$	beide Eckplätze besetzen siehe Bemerkung 2.8 a) Besetzung ist unzulässig siehe Bemerkung 2.8 b)

Tabelle 2.2.: Abbruchbedingungen für $M \times 2$ -Gitter

Bemerkung 2.8. a) Im Fall $M > 2, m = 2$ und $n = 5$ muss eine Kugel auf einem Eckplatz sitzen, die andere gerade nicht auf einem solchen. Für diese stehen also nur $2M - 5$ Plätze zur Auswahl, da auch der innere Platz neben der ersten Kugel verboten ist. Damit ist $A(M \times 2, 2, 5) = 4(2M - 5)$.

b) Im Fall $M > 3, m = 2$ und $n = 6$ müssen beide Kugeln im Innern des Gitters liegen. Effektiv hat man also nur ein $(M - 2) \times 2$ -Gitter zu besetzen. Sitzt dann die erste Kugel auf einem der vier Eckplätze dieses kleineren Gitters (also im großen Gitter in der zweiten oder zweitletzten Spalte), so bleiben der anderen Kugel noch $2(M - 2) - 3$ Felder übrig. Verboten sind dann nämlich der schon besetzte Platz und

seine beiden Nachbarn. Sitzt die erste Kugel auf einem der $2(M-2) - 4$ Plätze im Innern des kleineren Gitters, so bleiben der zweiten noch $2(M-2) - 4$ Felder zur Auswahl, da der besetzte Platz in diesem Fall drei Nachbarn hat. Insgesamt sind es also

$$\frac{4 \cdot (2(M-2) - 3) + (2(M-2) - 4)^2}{2} = 2M^2 - 12M + 18$$

Möglichkeiten. Dabei resultiert die 2 im Nenner daraus, dass die beiden Teilchen ununterscheidbar sind.

Da es hier bereits deutlich schwieriger ist, periodische Randbedingungen einzuführen, werden wir darauf nicht weiter eingehen. Ohne diese berechnet sich die Gesamtzahl zulässiger Konfigurationen zu

$$A(M \times 2, m) = \sum_{n=3m-2}^{3m} A(M \times 2, m, n).$$

Am Ende dieses Kapitels werden wir das Problem der Einführung periodischer Randbedingungen aber noch einmal aufgreifen.

2.3. $M \times N$ -Gitter

Setzt man das Vorgehen, die $A_a(M \times N, m, n)$, $a \in \{0, 1\}^N$, zu zerlegen, für beliebige Werte von N fort, so gilt:

Proposition 2.9. *Für alle $N \geq 1$ beschreibt $Q_1^{[N]} := \bigotimes_{i=1}^N Q_1$ den Anteil der Rekursion, der durch N unabhängige Zeilen entsteht, und*

$$P_N := \prod_{i=1}^{N-1} \bigotimes_{j=1}^{N-1} \delta_{ij} \quad \text{mit} \quad \delta_{ij} := \begin{cases} P_2 & \text{wenn } i=j \\ I_2 & \text{wenn } i \neq j \end{cases}$$

den Anteil der Rekursion, der durch die Verknüpfung der N Zeilen entsteht. Insgesamt ist damit

$$\begin{pmatrix} A_{0\dots 0}(M \times N, m, n) \\ \vdots \\ A_{1\dots 1}(M \times N, m, n) \end{pmatrix} = R \underbrace{P_N Q_1^{[N]}}_{=: Q_N} \begin{pmatrix} A_{0\dots 0}(M \times N, m, n) \\ \vdots \\ A_{1\dots 1}(M \times N, m, n) \end{pmatrix}.$$

Beweis: Die Behauptung für $Q_1^{[N]}$ zeigen wir mit Induktion nach N . Für $N \in \{1, 2\}$ haben wir dies schon in den beiden vorigen Abschnitten gesehen. Im Induktionsschritt $N \mapsto N+1$ ist nun zu zeigen, dass die Operatormatrix die Gestalt

$$Q_1 \otimes Q_1^{[N]} = \begin{pmatrix} Q_1^{[N]} & R_{01} Q_1^{[N]} \\ R_1 R_{01} Q_1^{[N]} & 0 \end{pmatrix}$$

hat. Die Begründung erfolgt analog zu der im Falle $N = 2$ bereits oben geführten. Wegen der Numerierung der $A_a(M \times (N + 1), m, n)$, $a \in \{0, 1\}^{N+1}$, durch den Baum, ist $a_{N+1} = 0$ für die ersten 2^N Knoten und $a_{N+1} = 1$ für die letzten 2^N Knoten. Daher liefert die obere Hälfte der benötigten Operatormatrix nur Beiträge für Konfigurationen s mit $s_{N+1} = a_{N+1} = 0$, d.h. die erste Stelle der $(N + 1)$ -ten Zeile ist frei. Die untere Hälfte der Matrix liefert Beiträge für Konfigurationen mit $s_{N+1} = 1$, hier ist die erste Stelle der $(N + 1)$ -ten Zeile besetzt. Sei nun $b \in \{0, 1\}^{N+1}$ dasjenige Tupel, welches die Besetzung der zweiten Spalte angibt, so enthält aus dem gleichen Grund die linke Hälfte der Matrix die Operatoren für die Summanden mit $b_{N+1} = 0$ und die rechte Hälfte die Operatoren für Summanden mit $b_{N+1} = 1$. Die Operatoren für die einzelne zusätzliche $(N + 1)$ -te Zeile sind

$$\begin{aligned} &1, && \text{falls } a_{N+1} = b_{N+1} = 0 \\ &R_{01}, && \text{falls } a_{N+1} = 0 \text{ und } b_{N+1} = 1 \\ &R_1 R_{01}, && \text{falls } a_{N+1} = 1 \text{ und } b_{N+1} = 0 \\ &0, && \text{falls } a_{N+1} = b_{N+1} = 1. \end{aligned}$$

Die Operatoren für die übrigen N Zeilen sind die gleichen wie beim $M \times N$ -Gitter, wodurch sich insgesamt die Behauptung ergibt.

Die Gestalt der Operatormatrix für die Korrelation der N Zeilen zeigen wir direkt. Dazu betrachten wir für ein festes $1 \leq i \leq N - 1$ das Kroneckerprodukt $\bigotimes_{j=1}^{N-1} \delta_{ij}$ mit δ_{ij} wie oben definiert. Wir zeigen, dass dieses Produkt die Korrelation der $(N - i)$ -ten mit der $(N - i + 1)$ -ten Zeile beschreibt. Es ist

$$\bigotimes_{j=1}^{N-1} \delta_{ij} = I_{2^{i-1}} \otimes P_2 \otimes I_{2^{N-i-1}} = \left(\begin{array}{ccc} P_2 \otimes I_{2^{N-i-1}} & & \\ & \ddots & \\ & & \underbrace{P_2 \otimes I_{2^{N-i-1}}}_{2^{i-1} \text{mal}} \end{array} \right)$$

mit

$$P_2 \otimes I_{2^{N-i-1}} = \left(\begin{array}{ccc} 1 \cdot I_{2^{N-i-1}} & & \\ & R_{01} \cdot I_{2^{N-i-1}} & \\ & & R_{01} \cdot I_{2^{N-i-1}} \\ & & & 0 \cdot I_{2^{N-i-1}} \end{array} \right).$$

Die Operatoren für die Korrelation der $(N - i)$ -ten und $(N - i + 1)$ -ten Zeile lauten:

$$\begin{aligned} &1, && \text{falls } a_{N-i} = a_{N-i+1} = 0 \\ &R_{01}, && \text{falls } a_{N-i} = 1 \text{ und } a_{N-i+1} = 0 \\ &R_{01}, && \text{falls } a_{N-i} = 0 \text{ und } a_{N-i+1} = 1 \\ &0, && \text{falls } a_{N-i} = a_{N-i+1} = 1. \end{aligned}$$

Mit $\{0, 1\}^N = \{a^1, \dots, a^{2^N}\}$ ist

$$\left. \begin{array}{l} a_{N-i}^k = a_{N-i+1}^k = 0 \\ a_{N-i}^k = 1, a_{N-i+1}^k = 0 \\ a_{N-i}^k = 0, a_{N-i+1}^k = 1 \\ a_{N-i}^k = a_{N-i+1}^k = 1 \end{array} \right\} \text{ genau dann,}$$

$$\text{wenn } k \in \left\{ \begin{array}{l} \bigcup_{l=0}^{2^{i-1}-1} \{l \cdot 2^{N-i+1}, \dots, l \cdot 2^{N-i+1} + 2^{N-i-1} - 1\} \\ \bigcup_{l=0}^{2^{i-1}-1} \{l \cdot 2^{N-i+1} + 2^{N-i-1}, \dots, l \cdot 2^{N-i+1} + 2^{N-i} - 1\} \\ \bigcup_{l=0}^{2^{i-1}-1} \{l \cdot 2^{N-i+1} + 2^{N-i}, \dots, l \cdot 2^{N-i+1} + 3 \cdot 2^{N-i-1} - 1\} \\ \bigcup_{l=0}^{2^{i-1}-1} \{l \cdot 2^{N-i+1} + 3 \cdot 2^{N-i-1}, \dots, l \cdot 2^{N-i+1} + 2^{N-i+1} - 1\}. \end{array} \right.$$

Die Begründung ist die folgende: Bei den ersten 2^{N-i-1} Knoten in der N -ten Stufe des Baumes werden die ersten $N-i-1$ Einträge variiert, für $1 \leq k \leq 2^{N-i-1}$ gilt daher $a_h^k = 0$ für alle $h \geq N-i$. Der nächste Eintrag ist $a^{2^{N-i-1}+1}$ und erfüllt $a_{N-i}^{2^{N-i-1}+1} = 1$ sowie $a_h^{2^{N-i-1}+1} = 0$ für alle $h \neq N-i$. Darauf folgen wieder Knoten, bei denen nur die ersten $N-i-1$ Einträge variiert werden, bis man den Eintrag $a^{2^{N-i}+1}$ mit $a_{N-i+1}^{2^{N-i}+1} = 1, a_h^{2^{N-i}+1} = 0$ für alle $h \neq N-i+1$ erhält. Auf diese Weise fortfahrend erhält man bis zum Eintrag $a^{2^{N-i+1}}$ mit $a_h^{2^{N-i+1}} = 1$ für alle $h \leq N-i+1$ und $a_h^{2^{N-i+1}} = 0$ für alle $h > N-i+1$ jeden der vier Operatoren aus P_2 genau 2^{N-i-1} -mal in Folge.

Da nun für die nächsten 2^{N-i-1} Einträge $a^k, k \in \{2^{N-i+1}+1, \dots, 2^{N-i+1}+2^{N-i-1}\}$, wieder $a_1^k = \dots = a_{N-i+1}^k = 0$ gilt, wiederholt sich das Prinzip von oben. Dies geschieht so lange, bis auch der letzte Eintrag auf 1 gesetzt wurde; da nach dem Knoten $N-i+1$ noch genau $i-1$ Knoten folgen, also genau 2^{i-1} -mal.

Dies liefert, als Matrix geschrieben,

$$I_{2^{i-1}} \otimes P_2 \otimes I_{2^{N-i-1}}.$$

Es gibt $\bigotimes_{j=1}^{N-1} \delta_{ij}$ also tatsächlich die Operatoren für die Korrelation der $(N-i)$ -ten mit der $(N-i+1)$ -ten Zeile an. Die Gesamtkorrelation zwischen den N Zeilen erhält man nun durch ein einfaches Produkt, da alle Matrizen Diagonalmatrizen sind.

Diese wiederum multipliziert mit $Q_1^{[N]}$ und R liefert insgesamt die für den Rekursionsschritt bei $M \times N$ -Gittern benötigte Operatormatrix. \square

Wir erhalten so als Verallgemeinerung von Gleichung (2.4)

$$|Q_N - R^{-1} \cdot I_{2^N}| \cdot A(M \times N, m, n) = 0 \quad (2.5)$$

mit der Einheitsmatrix I_{2^N} .

2.4. Fazit

Die oben hergeleitete Methode ist im Gegensatz zu den in den zwei folgenden Kapiteln aufgezeichneten Methoden exakt. Dennoch ist sie für die praktische Anwendung eher ungeeignet, da die Formel aus Gleichung (2.5) schnell sehr lang wird.

Beispiel 2.10. Für ein $M \times 4$ -Gitter erhält man als Rekursion

$$\begin{aligned}
A(M \times 4, m, n) = & (R_1^9 R_{01}^{36} R^7 + R_1^3 R_{01}^{13} R^4 + R_1^9 R_{01}^{36} R^6 - R_1^5 R_{01}^{21} R^5 \\
& - 4R_{01}^{19} R^4 R_1^5 + 4R_{01}^{11} R_1^3 R^3 + R_1^4 R_{01}^{16} R^5 - R_1^7 R_{01}^{28} R^6 + 7R_{01}^{16} R^3 R_1^4 \\
& + R_1^4 R_{01}^{16} R^2 - 3R_1^7 R_{01}^{28} R^5 - R_{01}^{21} R^4 R_1^5 + R_{01}^3 R^2 R_1^2 - 2R_1^5 R_{01}^{20} R^5 \\
& + R_{01}^5 R^2 R_1 + 3R_{01}^7 R^2 R_1^2 + 4R_{01}^8 R^2 R_1^2 + 2R_{01}^7 R_1^2 R^3 + 2R_{01}^9 R^3 R_1^2 \\
& + 2R_{01}^9 R^2 R_1^2 + R_{01}^{11} R^4 R_1^3 + 2R_{01}^{11} R^2 R_1^3 + 7R_{01}^{12} R^2 R_1^3 - R_1^6 R_{01}^{23} R^6 \\
& - 3R_{01}^{20} R^4 R_1^5 - 5R_1^6 R_{01}^{24} R^4 + R^2 R_{01}^{13} R_1^3 + 3R_{01}^{13} R^3 R_1^3 - R_{01}^{22} R^5 R_1^6 \\
& - 2R_{01}^{18} R^4 R_1^5 - R_{01}^{22} R^4 R_1^6 - 2R_1^6 R_{01}^{24} R^6 + 2R_1^8 R_{01}^{31} R^7 - 4R_{01}^{23} R^5 R_1^6 \\
& - R_{01}^{18} R^5 R_1^5 + R_1^8 R_{01}^{32} R^7 - R_{01}^{14} R^4 R_1^4 - 2R_{01}^{19} R^5 R_1^5 + 4R_{01}^{16} R^4 R_1^4 \\
& - 3R_1^5 R_{01}^{27} R^7 + R_1^9 R_{01}^{35} R^7 + R_1^9 R_{01}^{35} R^6 - R_{01}^{39} R^8 R_1^{10} - R_1^7 R^4 R_{01}^{27} \\
& + R_{01}^{26} R^6 R_1^7 + R + 2R_{01}^{12} R^4 R_1^3 + 2R_{01}^8 R^3 R_1^2 - 9R_1^6 R_{01}^{24} R^5 \\
& + 3R_{01}^{12} R^2 R_1^3 - R_1^7 R_{01}^{28} R^4 - 3R_{01}^{23} R^4 R_1^6 + R_1^8 R^6 R_{01}^{32} \\
& + 4R_1^8 R^6 R_{01}^{31} + 2R_{01}^4 R^2 R_1) \cdot A(M \times 4, m, n)
\end{aligned}$$

für $M \geq 8, m \geq 10$ und $n \geq 39$.

Ist L die Anzahl an Termen in der Formel, so zerlegt sich in jedem Rekursionsschritt jeder Term in L neue Terme. Dies lässt den Rechenaufwand explodieren. Zusätzlich steigt auch die Anzahl benötigter Abbruchbedingungen mit N stark an, da in der Rekursionsformel immer größere Potenzen der Operatoren auftreten. Diese Abbruchbedingungen lassen sich aber nicht einheitlich für verschiedene Gittergrößen bestimmen, sondern müssen für jeden Fall einzeln entwickelt werden.

Auch bezüglich der periodischen Randbedingungen stoßen wir schnell auf die Grenzen dieses Verfahrens. Nur in die eine Richtung lassen sich diese problemlos einführen. Und zwar können wir im Falle $N \geq 3$ die erste und die N -te Zeile miteinander verbinden. Die daraus entstehende Korrelation kann durch die entsprechenden Operatoren berücksichtigt werden. Diese lauten

$$\begin{aligned}
& 1, & \text{falls } a_1 = a_N = 0, \\
& R_{01}, & \text{falls } a_1 = 1 \text{ und } a_N = 0, \\
& R_{01}, & \text{falls } a_1 = 0 \text{ und } a_N = 1, \\
& 0, & \text{falls } a_1 = a_N = 1.
\end{aligned}$$

Da sich der Eintrag a_1 beim Durchlaufen der N -ten Stufe des Baumes in jedem Schritt und a_N nur nach 2^{N-1} Schritten genau einmal ändert, erhalten wir als Matrix für die

Korrelation dieser beiden Zeilen

$$P_{N_c} := \begin{pmatrix} I_{2^{N-2}} \otimes \begin{pmatrix} 1 & \\ & R_{01} \end{pmatrix} & \\ & I_{2^{N-2}} \otimes \begin{pmatrix} R_{01} & \\ & 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

für alle $N \geq 3$. Als vollständige Operatormatrix für solche zylindrischen Gitter erhalten wird damit $RP_{N_c}Q_N$.

In die andere Richtung lassen sich periodische Randbedingungen dagegen nicht so leicht einführen, da wir bei diesem Verfahren an keiner Stelle die Korrelation der ersten mit der letzten Spalte beschreiben. Die entscheidende Idee, die ersten Spalten durch Verändern der Werte von M, m und n nicht mehr berücksichtigen zu müssen, ist nicht anwendbar, wenn die erste mit der letzten Spalte korreliert.

3. Numerische Methode

Eine Alternative zu der kombinatorischen (und exakten) Methode liefert ein numerisches Verfahren, welches auf der Konsistenz des Stichprobenmittels als Schätzer für den Erwartungswert beruht. In der Literatur ist es als *Widom-Methode* bekannt (siehe [FS02]).

Die naheliegendste Methode, die Anzahl an zulässigen Konfigurationen numerisch zu bestimmen, ist die, zufällige Konfigurationen zu erzeugen und diese durchzuzählen. Sind $s_1, \dots, s_n \in \mathcal{S}^z / \star$, $n \in \mathbb{N}$, zufällig erzeugte Konfigurationen mit ununterscheidbaren Teilchen, so ist für $n \rightarrow \infty$ die Anzahl zulässiger Konfigurationen genau $|\{s_1, \dots, s_n\}|$. Dieses Verfahren sprengt aber erstens den Speicherplatz eines gebräuchlichen Rechners, da alle unterschiedlichen Konfigurationen gespeichert werden müssen, um sie mit jedem neuen Zustand vergleichen zu können, und hat zweitens eine sehr schlechte Konvergenzrate. Die Wahrscheinlichkeit, einen Zustand r auch nach n vielen betrachteten Konfigurationen nicht erhalten zu haben, ist gegeben durch

$$\left(1 - \frac{m!}{|\mathcal{S}^z|}\right)^n.$$

Es ist $|\mathcal{S}^z|/m! = A(M \times N, m) \gg 1$, (siehe dazu auch Kapitel 5). Daher ist die obige Wahrscheinlichkeit selbst für sehr große n noch sehr groß.

Aus diesem Grund benutzen wir die Widom-Methode. Kurz gesagt wird bei dieser ausgehend von einem bekannten Zustand ein Testteilchen hinzugefügt, um die Möglichkeiten für Zustände mit einem zusätzlichen Teilchen abzutasten. Ist sowohl die Anzahl an Zuständen mit m Teilchen, also auch die Anzahl an besetzbaren Plätzen in Zuständen mit m Teilchen bekannt, so kann damit die Anzahl an Zuständen mit $m + 1$ Teilchen bestimmt werden.

Es sei $B(M \times N, m)$ die Anzahl an Möglichkeiten, m *unterscheidbare* Kugeln auf einem $M \times N$ -Gitter anzuordnen, sodass keine zwei Kugeln nebeneinander liegen. Dann ist

$$B(M \times N, m) = |\mathcal{S}^z|.$$

Für jede zulässige Konfiguration $s \in \mathcal{S}^z$ mit m Teilchen sei nun $K_m(s)$ die Anzahl an Stellen, auf die eine weitere Kugel gelegt werden kann, sodass die entstehende Konfiguration (mit $m + 1$ Kugeln) immer noch zulässig ist. Wir definieren für festes $M, N \geq 1$ und $m \geq 0$, $\mathcal{S} = (\{1, \dots, M\} \times \{1, \dots, N\})^{\{v_1, \dots, v_m\}}$, eine Folge $(X_i^m)_{i \geq 1}$ von unabhängigen und identisch verteilten Zufallsvariablen mit Werten in der Menge

$\mathfrak{K} := \{K_m(s) \mid s \in \mathcal{S}^z\}$. Und zwar sei

$$P(X_1^m = k) = \frac{|\{s \in \mathcal{S}^z \mid K_m(s) = k\}|}{|\mathcal{S}^z|}$$

für alle $k \in \mathfrak{K}$ die relative Häufigkeit von Zuständen mit m Teilchen, denen auf k Stellen noch ein weiteres Teilchen hinzugefügt werden kann. Damit ist

$$\begin{aligned} B(M \times N, m+1) &= \sum_{k \in \mathfrak{K}} k |\{s \in \mathcal{S}^z \mid K_m(s) = k\}| \\ &= \sum_{k \in \mathfrak{K}} \frac{B(M \times N, m)}{|\mathcal{S}^z|} k |\{s \in \mathcal{S}^z \mid K_m(s) = k\}| \\ &= B(M \times N, m) \sum_{k \in \mathfrak{K}} k P(X_1^m = k) \\ &= B(M \times N, m) E(X_1^m) \end{aligned}$$

für alle $m \geq 0$. Nach dem starken Gesetz der großen Zahlen ist

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\sum_{i=1}^n X_i^m}{n} = E(X_1^m) \text{ P-f.s.}$$

für jedes $m \geq 0$. Daher ergibt sich für $A(M \times N, m)$

$$\begin{aligned} A(M \times N, m) &= \frac{B(M \times N, m)}{m!} = \frac{B(M \times N, m-1) E(X_1^{m-1})}{m!} \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{A(M \times N, m-1) \sum_{i=1}^n X_i^{m-1}}{m n} \text{ P-f.s.} \end{aligned} \quad (3.1)$$

für alle $m \geq 1$ und $A(M \times N, 0) := 1$. Wir können damit Gleichung (3.1) für hinreichend großes n als gute Näherung ansehen.

Implementierung

Der entscheidende Punkt zur Implementierung dieses Algorithmus ist es, Realisierungen der Zufallsvariablen $X_i^m, 1 \leq i \leq n, m \geq 0$, zu erzeugen. Dazu müssen zufällige Konfigurationen $s_i \in \mathcal{S}^z, 1 \leq i \leq n$, erzeugt werden. Dies kann dadurch geschehen, dass sukzessive für jedes Teilchen ein zufälliger Gitterplatz ausgewählt und das Teilchen auf diesen gelegt wird, sofern dies zulässig ist. Ist es das nicht, so muss ein neuer Platz gesucht werden. Je mehr Plätze aber schon besetzt sind, desto unwahrscheinlicher wird es, einen besetzbaren Platz zu finden. Ist die Dichte hinreichend groß, so kann es sogar vorkommen, dass auf dem Gitter für kein weiteres Teilchen Platz ist.

Leider liegt bei periodischen Randbedingungen die kritische Dichte für ein solches Szenario bei lediglich $\frac{1}{3}$ im 1-dimensionalen Fall bzw. $\frac{1}{5}$ im 2-dimensionalen Fall.

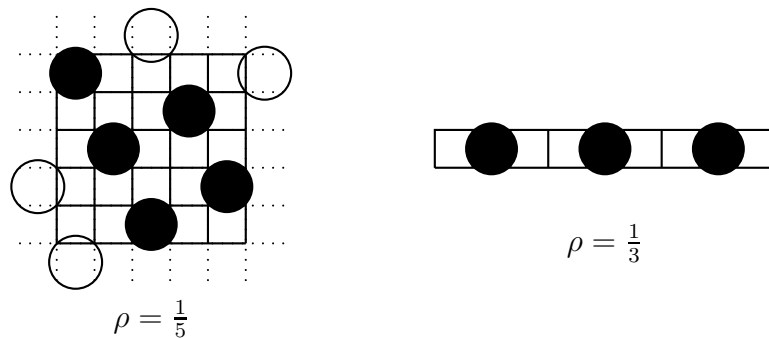


Abbildung 3.1.: Beispiele für Gitter mit Dichten $\rho = \frac{1}{5}$ und $\rho = \frac{1}{3}$, bei denen keine weitere Stelle besetzbar ist

Der Grund hierfür ist, dass pro bereits gesetztem Teilchen maximal 3 bzw. 5 Plätze für weitere Teilchen nicht besetzbar sind und es Zustände gibt, bei denen dieses Maximum ausgeschöpft wird, wie Abbildung 3.1 zeigt.

Bei größeren Dichten wird daher eine andere Gitterbesetzung gewählt. Dazu gehen wir nun sukzessive die Gitterplätze durch und besetzen sie mit einer zuvor gewählten Wahrscheinlichkeit p mit einer Kugel, sofern dies zulässig ist, bis schließlich alle Kugeln positioniert sind. Das oben beschriebene Problem, keine freie Stelle mehr zur Verfügung zu haben, kann durch ein Erhöhen der Besetzungswahrscheinlichkeit behoben werden. Im Limes $p = 1$ kann das Gitter deterministisch bis zur maximalen Dichte $\rho = 0,5$ besetzt werden.

Allerdings sind die so erhaltenen Zustände nicht mehr zwangsläufig zufällig (beispielsweise im Fall $p = 1$). Daher betrachten wir die Zustände als Ausgangspunkt einer Metropolis-Kette und lassen diese einige zufällige Teilchenbewegungen durchführen. Nach Satz 1.27 wird nach hinreichend vielen Schritten ein gemäß der Gleichverteilung gewählter Zustand angenommen, das System ist dann äquilibriert. Die hierfür benötigte Zeit werden wir im nächsten Kapitel genauer definieren und abschätzen.

Abschließend wollen wir noch bemerken, dass dieses Verfahren ohne Veränderung auch auf 3-dimensionale Gitter angewendet werden kann.

4. Prozessbasierte Methode: Kopplung minimaler Pfade

Rufen wir uns noch einmal die bisher aufgeworfenen Fragen ins Gedächtnis, so sind dies die Frage nach der Anzahl erlaubter Konfigurationen (zwei Wege zu einer Antwort kennen wir nun schon, stellen aber hier dennoch einen weiteren vor) und in Bezug auf das vorherige Kapitel die Frage nach der Äquilibrierungszeit. Zum einen wollen wir also den Zeitpunkt bestimmen, ab wann eine MK im HC-Modell annähernd stationär verteilt ist, zum anderen wollen wir die stationäre Verteilung selbst bestimmen, denn diese ist genau die Gleichverteilung auf der Menge der zulässigen Zustände. Dazu werden wir mit Hilfe des in Abschnitt 1.3.2 vorgestellten Metropolis-Algorithmus eine EMK M mit Werten in $\mathcal{S} = \mathcal{C}^{\mathcal{V}}$, der Menge der Funktionen von \mathcal{V} nach \mathcal{C} , und vorgegebener, unbekannter, stationärer Verteilung π erzeugen. \mathcal{V} und \mathcal{C} können dabei zunächst zwei beliebige nicht-leere, endliche Mengen sein. Im Originalartikel von Bubley und Dyer [BD97] wird M als Prozess auf der Menge der gefärbten Graphen mit der Knotenmenge \mathcal{V} und den Farben \mathcal{C} aufgefasst. In dieser Arbeit verstehen wir aber gemäß Abschnitt 1.1 $\mathcal{V} = \{v_1, \dots, v_m\}$ als die Menge der Teilchen und $\mathcal{C} = \{1, \dots, M\} \times \{1, \dots, N\}$ als die Menge der Gitterplätze im HC-Modell.

Für eine Metropolkette ist aus Satz 1.27 bekannt, dass sie im Limes unendlich langer Zeiten gemäß der im Algorithmus auftretenden Boltzmannverteilung π verteilt ist. Da aber nur endlich viel Rechenzeit zur Verfügung steht, ist die um π bis auf ein $\varepsilon > 0$ anzunähern benötigte Zeit von besonderem Interesse. Dabei spricht man von *schnellem Mischen*, wenn diese Zeit polynomiell in allen auftretenden Variablen ist. Die gute Nachricht vorab: Wir werden für einige EMK im HC-Modell schnelles Mischen beweisen können. Dazu werden wir jeweils eine obere Schranke der *Mischzeit* angeben, welche wir noch genau zu definieren haben und die der oben angesprochenen Äquilibrierungszeit entspricht.

Bei Kenntnis dieser Mischzeit τ kann also zum einen die Länge der Äquilibrierungsphase optimiert und zum anderen eine Zufallsvariable erzeugt werden, deren Verteilung nach τ Schritten annähernd π ist. Dabei ist die Boltzmannverteilung einer auf einer Teilmenge $\mathcal{R} \subset \mathcal{S}$ irreduziblen EMK im HC-Modell die Gleichverteilung auf der Menge der zulässigen Zustände in \mathcal{R} .

Zu Beginn dieses Kapitels wollen wir uns aber nicht nur auf das HC-Modell mit seiner Einteilung in zulässige und unzulässige Zustände beschränken, sondern allgemeinere Ergebnisse angeben.

4.1. Mischzeit

Wir betrachten also eine EMK $M = (M_n)_{n \geq 0}$ mit Zustandsraum $(\mathcal{S}, \mathfrak{G})$ und Übergangsmatrix \mathbf{P} , wie immer in einem Standardmodell $(\Omega, \mathfrak{A}, (M_n)_{n \geq 0}, (P_\lambda)_{\lambda \in \mathfrak{W}(\mathcal{S})})$. Die EMK sei weiter irreduzibel und aperiodisch und damit rekurrent, weshalb sie nach Satz 1.18 eine stationäre Verteilung π besitzt, die nach Bemerkung 1.21 eindeutig ist.

Wie angekündigt definieren wir nun die *Mischzeit*, welche angibt, wann die Verteilung $P_\lambda^{M_n}$ für jede Startverteilung λ die stationäre Verteilung π bis auf ein $\varepsilon > 0$ annähert hat.

Definition 4.1. Für eine EMK $M = (M_n)_{n \geq 0}$ mit stationärer Verteilung π ist für alle $\varepsilon > 0$ die *Mischzeit* $\tau(\varepsilon)$ definiert als

$$\tau(\varepsilon) := \sup_{\lambda \in \mathfrak{W}(\mathcal{S})} \min\{n \geq 0 \mid d_V(P_\lambda^{M_n}, \pi) \leq \varepsilon\}.$$

Man beachte, dass $\tau(\varepsilon)$ keine Stoppzeit ist. Wir können nun im folgenden Lemma eine obere Schranke für $\tau(\varepsilon)$ angeben, welche wir mit Hilfe der Kopplungsmethode erhalten. Den dazu benötigten Prozess $(X_n, Y_n)_{n \geq 0}$ wollen wir ebenfalls in ein Standardmodell $(\Omega', \mathfrak{A}', (X_n, Y_n)_{n \geq 0}, (P_\mu)_{\mu \in \mathfrak{W}(\mathcal{S}^2)})$ einbetten. Für $P_{\lambda \otimes \mu}$ mit $\lambda, \mu \in \mathfrak{W}(\mathcal{S})$ schreiben wir dabei kurz $P_{\lambda, \mu}$.

Lemma 4.2. *Es sei $M = (M_n)_{n \geq 0}$ eine irreduzible und aperiodische EMK mit Zustandsraum \mathcal{S} und stationärer Verteilung π und $(X, Y) = (X_n, Y_n)_{n \geq 0}$ eine Kopplung von (P_λ^M, P_π^M) , für die $X_n = Y_n \Rightarrow X_{n+1} = Y_{n+1}$ f.s für alle $n \geq 0$ gilt. Weiter sei $\Phi : \mathcal{S} \times \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{N}_0$ eine Metrik mit $D_\Phi := \max_{r, s \in \mathcal{S}} \Phi(r, s)$. Gilt dann*

$$E_{\lambda, \pi}(\Phi(X_n, Y_n)) \leq \zeta E_{\lambda, \pi}(\Phi(X_{n-1}, Y_{n-1}))$$

für alle $n \geq 1$, jede Startverteilung λ und ein $\zeta > 0$, so ist

$$d_V(P_\lambda^{M_n}, \pi) \leq \zeta^n D_\Phi$$

für alle $n \geq 0$ und jede Startverteilung λ . Insbesondere gilt für alle $\varepsilon > 0$

(i) im Fall $\zeta < 1$

$$\tau(\varepsilon) \leq \frac{\ln(\varepsilon D_\Phi^{-1})}{\ln \zeta} + 1,$$

(ii) im Fall $\zeta = 1$

$$\tau(\varepsilon) \leq \frac{D_\Phi^2 + D_\Phi}{\varepsilon \alpha} + 1,$$

sofern $\Phi(X_{n+1}, Y_{n+1}) - \Phi(X_n, Y_n) \in \{-1, 0, 1\}$ $P_{\lambda, \pi}$ -f.s. für alle $n \geq 0$ und $\alpha := \inf_{n \geq 0} P_{\lambda, \pi}(\Phi(X_{n+1}, Y_{n+1}) \neq \Phi(X_n, Y_n) \mid X_n \neq Y_n) > 0$ für alle $\lambda \in \mathfrak{W}(\mathcal{S})$ gilt.

Beweis: Durch Iteration ergibt sich aus der Voraussetzung für alle $n \geq 0$

$$\begin{aligned} E_{\lambda,\pi}(\Phi(X_n, Y_n)) &\leq \zeta E_{\lambda,\pi}(\Phi(X_{n-1}, Y_{n-1})) \\ &\vdots \\ &\leq \zeta^n E_{\lambda,\pi}(\Phi(X_0, Y_0)) \\ &\leq \zeta^n D_\Phi. \end{aligned}$$

Da Φ nur nichtnegative ganze Zahlen annimmt, folgert man

$$\begin{aligned} \zeta^n D_\Phi &\geq E_{\lambda,\pi}(\Phi(X_n, Y_n)) \geq \sum_{h=1}^{D_\Phi} P_{\lambda,\pi}(\Phi(X_n, Y_n) = h) \\ &= P_{\lambda,\pi}(X_n \neq Y_n) \geq d_V(P_\lambda^{M_n}, \pi) \end{aligned}$$

für alle $n \geq 0$, wobei sich die letzte Ungleichung aus der Kopplungsungleichung ergibt.

(i) Falls $\zeta < 1$ ist, gilt

$$d_V(P_\lambda^{M_n}, \pi) \leq \zeta^n D_\Phi \leq \varepsilon \Leftrightarrow n \geq \frac{\ln(D_\Phi^{-1}\varepsilon)}{\ln \zeta}$$

für jede Startverteilung λ , was zu beweisen war.

(ii) Da $P_{\lambda,\pi}(\Phi(X_{n+1}, Y_{n+1}) - \Phi(X_n, Y_n) \in \{-1, 0, 1\}) = 1$ für alle $n \geq 0$ ist, beschreibt

$$(\Phi_n)_{n \geq 0} := (\Phi(X_n, Y_n))_{n \geq 0}$$

unter $P_{\lambda,\pi}$ eine Irrfahrt auf $\{0, \dots, D_\Phi\}$, welche in 0 absorbiert wird und deren Zuwächse $(Z_n)_{n \geq 1}$ fast sicher nur Werte aus der Menge $\{-1, 0, 1\}$ annehmen. Daraus ergibt sich wegen $\zeta = 1$

$$\begin{aligned} 0 &\geq E_{\lambda,\pi}(\Phi(X_{n+1}, Y_{n+1}) - \Phi(X_n, Y_n)) \\ &= E_{\lambda,\pi}(Z_{n+1} \mid \Phi_n \neq 0)P_{\lambda,\pi}(\Phi_n \neq 0) + E_{\lambda,\pi}(Z_{n+1} \mid \Phi_n = 0)P_{\lambda,\pi}(\Phi_n = 0) \\ &= E_{\lambda,\pi}(Z_{n+1} \mid \Phi_n \neq 0) \underbrace{P_{\lambda,\pi}(\Phi_n \neq 0)}_{>0} \end{aligned}$$

für alle $n \geq 0$, und deshalb

$$P_{\lambda,\pi}(Z_{n+1} = 1 \mid \Phi_n \neq 0) \leq P_{\lambda,\pi}(Z_{n+1} = -1 \mid \Phi_n \neq 0).$$

Unter Benutzung der Voraussetzung ist somit

$$\begin{aligned} \frac{\alpha}{2} &\leq \frac{1}{2} P_{\lambda,\pi}(\Phi(X_{n+1}, Y_{n+1}) \neq \Phi(X_n, Y_n) \mid X_n \neq Y_n) \\ &= \frac{1}{2} P_{\lambda,\pi}(Z_{n+1} = -1 \mid \Phi_n \neq 0) + P_{\lambda,\pi}(Z_{n+1} = 1 \mid \Phi_n \neq 0) \\ &\leq P_{\lambda,\pi}(Z_{n+1} = -1 \mid \Phi_n \neq 0). \end{aligned}$$

Die Kopplungszeit T der Kopplung (X, Y) ist gleich der Absorbtionszeit des Prozesses $(\Phi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ in 0, diese gilt es also abzuschätzen. Die erwartete Absorbtionszeit $E_{\lambda, \pi}(T)$ steigt, je kleiner $P_{\lambda, \pi}(Z_{n+1} = -1 \mid \Phi_n \neq 0)$ und je größer $P_{\lambda, \pi}(Z_{n+1} = 1 \mid \Phi_n \neq 0)$ ist. Sie ist wegen der vorigen Gleichung nach oben beschränkt durch die erwartete Absorbtionszeit einer Irrfahrt $(S_n)_{n \geq 0}$ auf $\{0, \dots, D_\Phi\}$ startend in D_Φ , für deren Zuwächse $(Z'_n)_{n \geq 1}$

$$P_{\lambda, \pi}(Z'_{n+1} = -1 \mid S_n \neq 0) = \frac{\alpha}{2} = P_{\lambda, \pi}(Z'_{n+1} = 1 \mid S_n \notin \{0, m\})$$

gilt. Ansonsten seien die $(Z'_n)_{n \geq 0}$ verteilt wie $(Z_n)_{n \geq 0}$, das heißt

$$\begin{aligned} P_{\lambda, \pi}(Z'_{n+1} = 0 \mid S_n = m) &= 1 - \frac{\alpha}{2} \\ P_{\lambda, \pi}(Z'_{n+1} = 0 \mid S_n = 0) &= 1 \\ P_{\lambda, \pi}(Z'_{n+1} = 0 \mid S_n \notin \{0, m\}) &= 1 - \alpha. \end{aligned}$$

Für diese symmetrische Irrfahrt erhalten wir mit Satz 1.25 für seine erwartete Absorbtionszeit

$$E_{\lambda, \pi}(\tau \mid S_0 = D_\Phi) = \frac{D_\Phi^2 + D_\Phi}{\alpha}.$$

Eine letzte Anwendung der Markov-Ungleichung liefert das Ergebnis

$$\begin{aligned} d_V(P_\lambda^{M_n}, \pi) &\leq P_{\lambda, \pi}(X_n \neq Y_n) = P_{\lambda, \pi}(T > n) \\ &\leq \frac{E_{\lambda, \pi}(T)}{n} \leq \frac{D_\Phi^2 + D_\Phi}{n\alpha} \leq \varepsilon \\ \Leftrightarrow \quad n &\geq \frac{D_\Phi^2 + D_\Phi}{\varepsilon\alpha}. \end{aligned}$$

□

Ob schnelles Mischen vorliegt oder nicht, ist also an α abzulesen.

4.2. Allgemeine Kopplung minimaler Pfade

Es gilt nun, die EMK auf $\mathcal{S} = \mathcal{C}^\mathcal{V}$ genauer zu betrachten und eine Kopplung sowie eine Metrik zu wählen, sodass das vorige Lemma anwendbar ist. Dabei sollte die Kopplung möglichst geschickt gewählt werden, damit $\zeta \leq 1$ gilt. Wie bereits angekündigt, verlassen wir dazu zunächst den engen Rahmen des HC-Modells. Diese allgemeineren Ergebnisse dienen nicht zuletzt dazu, das Prinzip der von uns gewählten Kopplung aufzuzeigen. Wir betrachten aber weiterhin Teilchenbewegungen auf einem Gitter, weshalb an die Notation aus Abschnitt 1.1 erinnert sei. Dort wurde für einen Zustand $s \in \mathcal{S}$, ein Teilchen $v \in \mathcal{V}$ und ein Gitterplatz $c \in \mathcal{C}$ die Position des Teilchens v

im Zustand s mit $s(v)$ und der aus der Verschiebung von Teilchen v auf den Platz c resultierende Zustand mit $s_{v \rightarrow c}$ bezeichnet.

Die Übergänge der EMK M setzen sich zusammen aus der Wahl eines Teilchens, welches verschoben werden soll - diese Wahl wird durch eine Verteilung $\Gamma_{\mathcal{V}}$ auf \mathcal{V} beschrieben - und, bei gegebenem Zustand r und gewähltem Teilchen v , aus der Wahl der neuen Position dieses Teilchens, beschrieben durch einen stochastischen Kern $\Gamma_{\mathcal{C}} : (\mathcal{S} \times \mathcal{V}) \times \mathfrak{P}(\mathcal{C}) \rightarrow [0, 1]$. Dabei sei zunächst an $\Gamma_{\mathcal{V}}$ und $\Gamma_{\mathcal{C}}$ nur die Voraussetzung gemacht, dass die Übergangsmatrix $\mathbf{P} = (p_{rs})_{r,s \in \mathcal{S}}$ von M , gegeben durch

$$p_{rs} = \begin{cases} \Gamma_{\mathcal{V}}(\{v\})\Gamma_{\mathcal{C}}((r, v), \{c\}), & \text{falls } s = r_{v \rightarrow c} \neq r, (v, c) \in \mathcal{V} \times \mathcal{C}, \\ 1 - \sum_{s'=r_{v \rightarrow c} \neq r} \Gamma_{\mathcal{V}}(\{v\})\Gamma_{\mathcal{C}}((r, v), \{c\}), & \text{falls } s = r, \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases} \quad (4.1)$$

für alle $r, s \in \mathcal{S}$, irreduzibel ist.

Wir führen nun zunächst einen geeigneten Abstands begriff auf \mathcal{S} ein. Dieser sei die Anzahl an Kugeln, die in zwei Zuständen $r, s \in \mathcal{S}$ auf unterschiedlichen Gitterplätzen liegen.

Definition 4.3. Wir definieren den *Hamming-Abstand* $H : \mathcal{S} \times \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{N}_0$ durch

$$H(r, s) := |\mathfrak{H}(r, s)|$$

mit $\mathfrak{H}(r, s) := \{v \in \mathcal{V} \mid r(v) \neq s(v)\}$ für alle $r, s \in \mathcal{S}$.

Bemerkung 4.4. Der Hamming-Abstand bildet eine Metrik auf $\mathcal{S} \times \mathcal{S}$. Symmetrie und Definitheit sind offensichtlich. Um die Dreiecksungleichung zu zeigen, wähle für $r, t \in \mathcal{S}$ ein Teilchen $v \in \mathfrak{H}(r, t)$. Für ein weiteres $s \in \mathcal{S}$ ist dann $v \in \mathfrak{H}(s, t)$ im Falle $s(v) = r(v) \neq t(v)$ und $v \in \mathfrak{H}(r, s)$ im Falle $s(v) \neq r(v)$. Insgesamt also $\mathfrak{H}(r, t) \subseteq \mathfrak{H}(r, s) \cup \mathfrak{H}(s, t)$.

Hiermit kann nun für je zwei Zustände $r, s \in \mathcal{S}$ mit $H(r, s) = h \geq 0$ eine Sequenz von Zuständen $z_0 = r, z_1, \dots, z_{h-1}, z_h = s$ in \mathcal{S} mit $H(z_{i-1}, z_i) = 1$ für alle $1 \leq i \leq h$ angegeben werden. Mit $\mathfrak{H}(r, s) = \{v_1, \dots, v_h\}$ lautet eine mögliche Sequenz

$$\begin{aligned} z_0 &= r \\ z_1 &= (z_0)_{v_1 \rightarrow s(v_1)} \\ z_2 &= (z_1)_{v_2 \rightarrow s(v_2)} \\ &\vdots \\ z_h &= (z_{h-1})_{v_h \rightarrow s(v_h)} = s. \end{aligned}$$

Eine solche Sequenz liefert einen minimalen Pfad

$$r = z_0 \rightarrow z_1 \rightarrow \dots \rightarrow z_{h-1} \rightarrow z_h = s$$

von r nach s .

Definition 4.5. Für eine Metrik Φ und zwei Zustände $r, s \in \mathcal{S}$ heißt eine Sequenz $z_0 = r, z_1, \dots, z_{h-1}, z_h = s$ mit $z_i \in \mathcal{S}$ für alle $0 \leq i \leq h$ ein *minimaler Pfad* von r nach s bezüglich Φ in \mathcal{S} , falls $h = \Phi(r, s)$ und $\Phi(z_{i-1}, z_i) = 1$ für alle $1 \leq i \leq h$ gilt.

Für je zwei Zustände existiert somit immer ein minimaler Pfad bezüglich H in \mathcal{S} , dieser muss aber nicht eindeutig sein. Es sei auch darauf hingewiesen, dass im HC-Modell ein solcher minimaler Pfad nicht notwendig aus zulässigen Zuständen bestehen, das heißt auch ein minimaler Pfad in \mathcal{S}^z sein muss.

Kommen wir nun zu dem Konstrukt, welches diesem Kapitel seinen Namen gibt und von Bubley und Dyer in [BD97] eingeführt wird. Diese Kopplung minimaler Pfade wird sich für Lemma 4.2 als besonders geeignete Kopplung erweisen. Wir wollen zunächst das Prinzip erläutern, um im Voraus eine Anschauung zu geben.

Es sei (X, Y) eine Kopplung von (P_λ^M, P_π^M) . Wie bei jeder Kopplung ist es auch hier das Ziel, eine besonders geschickte Abhängigkeitsstruktur von X_n und Y_n zu finden, welche $P(X_n \neq Y_n)$ minimiert. Dies geschieht wie folgt: Sei $(X_n, Y_n) = (x, y)$ der aktuelle Zustand der Kopplung, $H(x, y) = h$ und $z_0 = x, z_1, \dots, z_h = y$ ein minimaler Pfad von x nach y . Zur Bildung von (X_{n+1}, Y_{n+1}) gibt nun eine weitere, von X_n, Y_n unabhängige Zufallsvariable V_n gemäß der Verteilung Γ_V ein Teilchen v an, welches bewegt wird. Dieses Teilchen wird nun aber nicht etwa nur in den Zuständen x und y verschoben, sondern auch in den Zuständen z_i , $1 \leq i \leq h-1$, entlang des Pfades. Jeder Zustand z_i wird quasi als Startpunkt einer neuen MK betrachtet. Auf welche Position das Teilchen in den verschiedenen Zuständen verschoben wird, wird durch Zufallsvariablen $C_{n,i}$, $0 \leq i \leq h$, bestimmt, und zwar so, dass $(C_{n,i-1}, C_{n,i})$, gegeben den minimalen Pfad und das gewählte Teilchen, für alle $1 \leq i \leq h$ eine maximale Kopplung von $\Gamma_C((z_{i-1}, v), \cdot)$ und $\Gamma_C((z_i, v), \cdot)$ bilden. Es ergibt sich insbesondere für alle $n \geq 0$

$$X_n = Y_n \Rightarrow X_{n+1} = Y_{n+1}.$$

Mit $C_{n,i} = c_i \in \mathcal{C}$, $0 \leq i \leq h$, setzen wir dann $X_{n+1} = x_{v \rightarrow c_0}$ und $Y_{n+1} = y_{v \rightarrow c_h}$ und können sagen, dass der Übergang $(z_i)_{v \rightarrow c_i}$, $0 \leq i \leq h$, erfolgreich war, falls sich der minimale Pfad von $x_{v \rightarrow c_0}$ nach $y_{v \rightarrow c_h}$ im Vergleich zum minimalen Pfad von x nach y verkürzt hat, d.h. wenn

$$H(x_{v \rightarrow c_0}, y_{v \rightarrow c_h}) \leq \zeta H(x, y) \tag{4.2}$$

für ein $\zeta \leq 1$ gilt. Durch die Übergänge eines jeden Zustandes entlang des minimalen Pfades von x nach y ergibt sich von $x_{v \rightarrow c_0}$ nach $y_{v \rightarrow c_h}$ aber auch der Pfad

$$(z_0)_{v \rightarrow c_0} = x_{v \rightarrow c_0}, (z_1)_{v \rightarrow c_1}, \dots, (z_h)_{v \rightarrow c_h} = y_{v \rightarrow c_h}.$$

Dieser ist nicht zwangsläufig minimal, kann aber benutzt werden, um den Abstand $H(x_{v \rightarrow c_0}, y_{v \rightarrow c_h})$ abzuschätzen. Es gilt nämlich mit Hilfe der Dreiecksungleichung

$$H(x_{v \rightarrow c_0}, y_{v \rightarrow c_h}) \leq \sum_{i=1}^h H((z_{i-1})_{v \rightarrow c_{i-1}}, (z_i)_{v \rightarrow c_i}). \tag{4.3}$$

Kann nun $H((z_{i-1})_{v \rightarrow c_{i-1}}, (z_i)_{v \rightarrow c_i})$ für jedes i gegen ein $\zeta \leq 1$ abgeschätzt werden, so gilt (4.2) und wir können Lemma 4.2 benutzen, um die Mischzeit abzuschätzen.

Wir betrachten also einen trivariaten Prozess $(X_n, Y_n, V_n)_{n \geq 0}$ mit kanonischer Filtration $(\mathfrak{F}_n)_{n \geq 0}$ und Werten in $\mathcal{S}^2 \times \mathcal{V}$, welcher die folgenden Eigenschaften besitze:

(PK1) $(X_n)_{n \geq 0}$ und $(Y_n)_{n \geq 0}$ besitzen beide die in Gleichung (4.1) gegebene Übergangsmatrix \mathbf{P} .

(PK2) $Y_0 \sim \pi$ mit der stationären Verteilung π , es ist also $Y_n \sim \pi$ für alle $n \geq 0$.

(PK3) Es ist $V_n \sim \Gamma_{\mathcal{V}}$ und unabhängig von $\sigma(\mathfrak{F}_{n-1}, X_n, Y_n)$ für alle $n \geq 0$, wobei $\mathfrak{F}_{-1} := \emptyset$ gesetzt sei.

(PK4) Für jedes $n \geq 0$ sei $Z_{n,0} := X_n, Z_{n,1}, \dots, Z_{n,h_n-1}, Z_{n,h_n} := Y_n$ ein zufälliger minimaler Pfad bezüglich H in \mathcal{S} von X_n nach Y_n . Weiter definieren wir die σ -Algebra

$$\mathfrak{F}_n^* := \sigma(\mathfrak{F}_n, (Z_{k,1}, \dots, Z_{k,h_k-1})_{0 \leq k \leq n})$$

und eine Folge $C_{n,0}, \dots, C_{n,h_n}$ von Zufallsvariablen auf dem gleichen W-Raum wie X_n, Y_n und V_n mit Werten in \mathcal{C} ,

$$P^{C_{n,0} | \mathfrak{F}_n^*} = \Gamma_{\mathcal{C}}((X_n, V_n), \cdot)$$

und für alle $1 \leq i \leq h_n$

$$P^{C_{n,i} | \mathfrak{F}_n^*, C_{n,0}, \dots, C_{n,i-1}} = P^{C_{n,i} | Z_{n,i-1}, Z_{n,i}, V_n, C_{n,i-1}}.$$

Genauer sei für alle $1 \leq i \leq h_n$

$$\begin{aligned} & P\left(C_{n,i} \in \cdot \mid Z_{n,i-1} = z_{i-1}, Z_{n,i} = z_i, V_n = v, C_{n,i-1} = c\right) \\ &= \alpha(z_{i-1}, z_i, v, c) \delta_c + (1 - \alpha(z_{i-1}, z_i, v, c)) \left(\Gamma_{\mathcal{C}}((z_i, v), \cdot) - \Gamma_{\mathcal{C}}((z_{i-1}, v), \cdot) \right)^+ \end{aligned}$$

mit

$$\alpha(z_{i-1}, z_i, v, c) := \frac{\Gamma_{\mathcal{C}}((z_{i-1}, v), \{c\}) \wedge \Gamma_{\mathcal{C}}((z_i, v), \{c\})}{\Gamma_{\mathcal{C}}((z_{i-1}, v), \{c\})}$$

und $\left(\Gamma_{\mathcal{C}}((z_i, v), \cdot) - \Gamma_{\mathcal{C}}((z_{i-1}, v), \cdot) \right)^+$ definiert in Satz 1.23.

(PK5) Mit (PK1)-(PK4) ist im Falle $(X_n, Y_n, V_n) = (x, y, v)$ und $C_{n,i} = c_i$ für alle $0 \leq i \leq h_n$

$$\begin{aligned} X_{n+1} &= x_{v \rightarrow c_0} \quad \text{und} \quad Y_{n+1} = y_{v \rightarrow c_{h_n}} \\ Z'_{n,i} &:= (Z_{n,i})_{v \rightarrow c_i} \quad \text{für alle } 1 \leq i \leq h_n - 1 \end{aligned}$$

für alle $n \geq 0$.

Definition 4.6. Eine trivariate Kette $(X_n, Y_n, V_n)_{n \geq 0}$, welche die obigen Bedingungen (PK1)-(PK5) erfüllt, nennen wir *Kopplung minimaler Pfade* zu $(\mathbf{P}, \pi, \Gamma_{\mathcal{V}}, \Gamma_{\mathcal{C}})$.

Für den neuen, nicht unbedingt minimalen Pfad $(Z_{n,i})_{V_n \rightarrow C_{n,i}}, 0 \leq i \leq h_n$ von $(X_n)_{V_n \rightarrow C_{n,0}}$ nach $(Y_n)_{V_n \rightarrow C_{n,h_n}}$ gilt

$$H((Z_{n,i-1})_{V_n \rightarrow C_{n,i-1}}, (Z_{n,i})_{V_n \rightarrow C_{n,i}}) \in \{0, 1, 2\} \quad (4.4)$$

fast sicher für alle $1 \leq i \leq h_n$. Mit $Z_{n,i} = (Z_{n,i-1})_{w \rightarrow c}$ gilt genauer

$$H(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = \begin{cases} 0, & \text{falls } V_n = w, C_{n,i-1} = C_{n,i} \\ & \text{oder } V_n \neq w, C_{n,i-1} = Z_{n,i}(w), C_{n,i} = Z_{n,i-1}(w), \\ 1, & \text{falls } V_n = w, C_{n,i-1} \neq C_{n,i} \\ & \text{oder } V_n \neq w, C_{n,i-1} = C_{n,i}, \\ 2, & \text{falls } V_n \neq w \text{ und} \\ & C_{n,i-1} \neq C_{n,i}, (C_{n,i-1}, C_{n,i}) \neq (Z_{n,i}(w), Z_{n,i-1}(w)) \end{cases} \quad (4.5)$$

für alle $n \geq 0$ und $1 \leq i \leq h_n$. Hieraus können wir zusammen mit der Dreiecksungleichung (4.3) das gesuchte ζ bestimmen.

Theorem 4.7. Allgemeine Pfad-Kopplung (Bubley, Dyer [BD97] Thm. 1)
 Sei $M = (M_n)_{n \geq 0}$ eine EMK auf $\mathcal{S} = \mathcal{C}^{\mathcal{V}}$, $|\mathcal{V}| = m$, mit der irreduziblen und aperiodischen Übergangsmatrix \mathbf{P} aus Gleichung (4.1) und stationärer Verteilung π . Weiter sei (X, Y, V) eine Kopplung minimaler Pfade von $(\mathbf{P}, \pi, \Gamma_{\mathcal{V}}, \Gamma_{\mathcal{C}})$. Definiere

$$\beta := \max_{\substack{r \neq s \in \mathcal{S} \\ s=r_{w \rightarrow c}}} \left\{ 1 - \Gamma_{\mathcal{V}}(\{w\}) + \sum_{v \in \mathcal{V}} \Gamma_{\mathcal{V}}(\{v\}) \cdot d_{\mathcal{V}} \left(\Gamma_{\mathcal{C}}((r, v), \cdot), \Gamma_{\mathcal{C}}((s, v), \cdot) \right) \right\},$$

wobei das Maximum über der leeren Menge als ∞ gesetzt wird. Für alle $n \geq 0$ und jede Startverteilung λ gilt dann $d_{\mathcal{V}}(P_{\lambda}^{M_n}, \pi) \leq \beta^n m$. Insbesondere gilt für alle $\varepsilon > 0$

(i) im Fall $\beta < 1$

$$\tau(\varepsilon) \leq \frac{\ln(m^{-1}\varepsilon)}{\ln \beta} + 1,$$

(ii) im Fall $\beta = 1$

$$\tau(\varepsilon) \leq \frac{m^2 + m}{\varepsilon \alpha} + 1,$$

falls $\alpha := \inf_{n \geq 0} P_{\lambda, \pi}(H(X_{n+1}, Y_{n+1}) \neq H(X_n, Y_n) \mid X_n \neq Y_n) > 0$ gilt.

Beweis: Es sei $Z_{n,0} = X_n, Z_{n,1}, \dots, Z_{n,h_n} = Y_n$ für jedes $n \geq 0$ ein minimaler Pfad bezüglich H von X_n nach Y_n . Weiter sei $C_{n,0}, \dots, C_{n,h_n}$ wie in (PK4) gewählt. Gemäß Satz 1.23 ist $(C_{n,i-1}, C_{n,i})$, gegeben \mathfrak{F}_n^* , eine maximale Kopplung von $\Gamma_{\mathcal{C}}((Z_{n,i-1}, V_n), \cdot)$ und $\Gamma_{\mathcal{C}}((Z_{n,i}, V_n), \cdot)$ und deshalb für alle $1 \leq i \leq h_n$

$$P(C_{n,i-1} \neq C_{n,i} \mid \mathfrak{F}_n^*) = d_{\mathcal{V}} \left(\Gamma_{\mathcal{C}}((Z_{n,i-1}, V_n), \cdot), \Gamma_{\mathcal{C}}((Z_{n,i}, V_n), \cdot) \right). \quad (4.6)$$

Im Folgenden schreiben wir für $r, s \in \mathcal{S}$ mit $s = r_{w \rightarrow c}$ statt $P(\cdot | Z_{n,i-1} = r, Z_{n,i} = s)$ kurz $P^{(i,r,s)}$ und statt $P(\cdot | Z_{n,i-1} = r, Z_{n,i} = s, V_n = v)$ kurz $P^{(i,r,s,v)}$. Es gilt dann unter Benutzung der Gleichungen (4.4), (4.5) und (4.6)

$$\begin{aligned}
 & E^{(i,r,s,v)}(\mathbb{H}(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i})) \\
 &= P^{(i,r,s,v)}(\mathbb{H}(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = 1) + 2P^{(i,r,s,v)}(\mathbb{H}(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = 2) \\
 &= 1 - P^{(i,s,r,v)}(\mathbb{H}(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = 0) + P^{(i,r,s,v)}(\mathbb{H}(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = 2) \\
 &\leq \begin{cases} 1 - P^{(i,r,s,w)}(C_{n,i} = C_{n,i-1}), & \text{falls } v = w \\ 1 + P^{(i,r,s,v)}(C_{n,i} \neq C_{n,i-1}), & \text{falls } v \neq w \end{cases} \\
 &= \begin{cases} d_V(\Gamma_C((r, w), \cdot), \Gamma_C((s, w), \cdot)), & \text{falls } v = w \\ 1 + d_V(\Gamma_C((r, v), \cdot), \Gamma_C((s, v), \cdot)), & \text{falls } v \neq w \end{cases}
 \end{aligned}$$

und damit

$$\begin{aligned}
 & E^{(i,r,s)}(\mathbb{H}(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i})) \\
 &\leq \Gamma_V(\{w\})d_V(\Gamma_C((r, w), \cdot), \Gamma_C((s, w), \cdot)) \\
 &\quad + \sum_{v \neq w} \Gamma_V(\{v\}) \left(1 + d_V(\Gamma_C((r, v), \cdot), \Gamma_C((s, v), \cdot))\right) \\
 &= 1 - \Gamma_V(\{w\}) + \sum_{v \in \mathcal{V}} \Gamma_V(\{v\})d_V(\Gamma_C((r, v), \cdot), \Gamma_C((s, v), \cdot)) \\
 &\leq \beta
 \end{aligned}$$

nach Definition von β für alle $1 \leq i \leq h_n, n \geq 0$ und $r, s \in \mathcal{S}$ geeignet. Dies wiederum führt mit Hilfe von Gleichung (4.3), die auch für Zufallsvariablen Bestand hat, zu

$$\begin{aligned}
 & E_{\lambda, \pi}(\mathbb{H}(X_{n+1}, Y_{n+1})) \\
 &= E_{\lambda, \pi} \left(E(\mathbb{H}(X_{n+1}, Y_{n+1}) \mid X_n, Y_n, (Z_{n,i})_{0 \leq i \leq \mathbb{H}(X_n, Y_n)}) \right) \\
 &\leq E_{\lambda, \pi} \left(E \left(\sum_{i=1}^{\mathbb{H}(X_n, Y_n)} \mathbb{H}(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) \mid X_n, Y_n, (Z_{n,i})_{0 \leq i \leq \mathbb{H}(X_n, Y_n)} \right) \right) \\
 &= E_{\lambda, \pi} \left(\sum_{i=1}^{\mathbb{H}(X_n, Y_n)} E(\mathbb{H}(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) \mid Z_{n,i-1}, Z_{n,i}) \right) \\
 &\leq E_{\lambda, \pi} \left(\sum_{i=1}^{\mathbb{H}(X_n, Y_n)} \beta \right) \\
 &= \beta E_{\lambda, \pi}(\mathbb{H}(X_n, Y_n)).
 \end{aligned}$$

Da für die Kopplung minimaler Pfade insbesondere

$$X_n = Y_n \Rightarrow X_{n+1} = Y_{n+1} \quad \text{f.s.}$$

für alle $n \geq 0$ gilt, ist Lemma 4.2 anwendbar. Daraus folgt $d_V(P_\lambda^{M_n}, \pi) \leq \beta^n m$ für alle $n \geq 0$ und jede Startverteilung λ und außerdem die Aussage aus (i) wegen $D_H = m$. Teil (ii) ergibt sich ebenso aus Lemma 4.2, da in X_n und Y_n das gleiche Teilchen verschoben wird und somit $P_{\lambda, \pi}(\mathbb{H}(X_{n+1}, Y_{n+1}) - \mathbb{H}(X_n, Y_n) \in \{-1, 0, 1\}) = 1$ für alle $n \geq 0$ gilt. \square

In [BD97] wird eine Vielzahl von Beispielen angegeben, für die mit Hilfe dieses Resultates schnelles Mischen gezeigt werden kann. Unter anderem sind dies Knotenfärbungen ungerichteter Graphen, bei denen die Ecken des Graphen mit je einer von k möglichen Farben eingefärbt werden, oder Graphen mit Orientierungen ohne Senken und Quellen. Hier werden den Kanten des Graphen Flusswerte zugeordnet und man spricht von einer Senke (Quelle) im Knoten v , wenn die von v wegführenden (hin-führenden) Flusswerte 0 sind. Auch das HC-Modell wird als Anwendung aufgeführt - diesem wenden wir uns in den nächsten Abschnitten genauer zu.

4.3. Kopplung minimaler Pfade im Hard-Core-Modell

Betrachten wir nun wieder konkret das HC-Modell mit periodischen Randbedingungen, $|\mathcal{V}| = m$ und $|\mathcal{C}| = MN$. Wie bisher sei $\mathcal{S}^z \subseteq \mathcal{S}$ die Menge der zulässigen Zustände, d.h. für $s \in \mathcal{S}^z$ gilt $s(v) \not\stackrel{z}{\ll} s(w)$ für alle $v, w \in \mathcal{V}, v \neq w$. Weiter ist $\mathcal{N}(s(v))$ mit $|\mathcal{N}(s(v))| = \Delta$ für $s \in \mathcal{S}$ und $v \in \mathcal{V}$ definiert als die Menge der zu $s(v)$ benachbarten Gitterplätze.

Um die schon bekannten Teilchenbewegungen zu erhalten, definieren wir die Verteilungen $\Gamma_{\mathcal{V}}$ und $\Gamma_{\mathcal{C}}$ als

$$\Gamma_{\mathcal{V}}(\{v\}) := \frac{1}{|\mathcal{V}|}$$

für alle $v \in \mathcal{V}$ und

$$\Gamma_{\mathcal{C}}((s, v), \{c\}) := \begin{cases} \frac{1}{|\mathcal{C}|} A_{s,v}(c), & \text{falls } c \neq s(v) \\ 1 - \sum_{c' \neq c} \frac{1}{|\mathcal{C}|} A_{s,v}(c'), & \text{falls } c = s(v) \end{cases}$$

für alle $s \in \mathcal{S}$ und $(v, c) \in \mathcal{V} \times \mathcal{C}$. Dabei benutzen wir die Akzeptanzwahrscheinlichkeit

$$A_{s,v}(c) = \min \left\{ 1, \frac{\pi_{s \rightarrow c}}{\pi_s} \right\} \mathbb{1}_{\mathcal{C}(s,v)}(c)$$

aus Gleichung (1.10) und

$$\mathcal{C}^{(s,v)} = \begin{cases} \mathcal{C}, & \text{bei der globalen Bewegung} \\ \mathcal{N}(s(v)), & \text{bei der lokalen Bewegung.} \end{cases}$$

Wir können die EMK also als Metropolis-Kette auf $\mathcal{C}^{\mathcal{V}}$ verstehen mit der irreduziblen und symmetrischen Matrix $\mathbf{Q} = (q_{rs})_{r,s \in \mathcal{C}^{\mathcal{V}}}$,

$$q_{rs} = \begin{cases} \frac{1}{m|\mathcal{C}|}, & \text{falls } s = r_{v \rightarrow c} \neq r \text{ für } (v, c) \in \mathcal{V} \times \mathcal{C} \\ 1 - \sum_{s' = r_{v \rightarrow c} \neq r} \frac{1}{m|\mathcal{C}|}, & \text{falls } s = r, \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

aus Gleichung (1.9) für die Vorschlagskette. M hat dann mit den oben gegebenen Akzeptanzwahrscheinlichkeiten die Übergangsmatrix $\mathbf{P} = (p_{rs})_{r,s \in \mathcal{C}^{\mathcal{V}}}$, gegeben durch

$$p_{rs} := \begin{cases} \Gamma_{\mathcal{V}}(\{v\}) \frac{1}{|\mathcal{C}|} A_{r,v}(c), & \text{falls } s = r_{v \rightarrow c} \neq r \text{ mit } c \in \mathcal{C} \\ 1 - \sum_{v \in \mathcal{V}} \sum_{c \neq r(v)} \Gamma_{\mathcal{V}}(\{v\}) \frac{1}{|\mathcal{C}|} A_{r,v}(c), & \text{falls } s = r \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.7)$$

Mit den gerade definierten $\Gamma_{\mathcal{V}}$ und $\Gamma_{\mathcal{C}}$ ist dies genau die Gestalt aus (4.1).

Das Problem ist nun, dass Theorem 4.7 für diese speziellen Übergangsmatrizen keine Aussage macht. Bei der Bestimmung von β werden auch unzulässige Zustände berücksichtigt, obwohl der Prozess, ausgehend von einem zulässigen Zustand, einen unzulässigen nicht erreichen kann. Dies führt zu $\beta > 1$, wie die folgende Proposition zeigt.

Proposition 4.8. *Sind $\Gamma_{\mathcal{V}}$ und $\Gamma_{\mathcal{C}}$ gemäß der globalen oder lokalen Bewegung von Teilchen gegeben, so gilt für die in Theorem 4.7 definierte Konstante $\beta > 1$.*

Beweis: a) *Globale Bewegung:* Betrachte die Zustände r und s aus Abbildung 4.1(a). Der Zustand r ist zwar unzulässig, wird aber dennoch bei der Bestimmung von β gemäß der Definition berücksichtigt. Man beachte dabei, dass von einem unzulässigen Zustand aus jeder Versuchszustand akzeptiert wird. Für diese zwei konkreten Zustände ist daher mit $d(v) := d_{\mathcal{V}}(\Gamma_{\mathcal{C}}((r, v), \cdot), \Gamma_{\mathcal{C}}((s, v), \cdot))$

$$\begin{aligned} \beta &\geq 1 - \frac{1}{m} + \frac{1}{m} \left(d(v) + d(w) + d(x) \right) \\ &= 1 - \frac{1}{m} + \frac{1}{m} \left(1 - \frac{1}{|\mathcal{C}|} + 1 - \frac{1}{|\mathcal{C}|} + 1 - \frac{1}{|\mathcal{C}|} \right) \\ &= 1 + \frac{2|\mathcal{C}| - 3}{m|\mathcal{C}|}. \end{aligned}$$

b) *Lokale Bewegung:* Betrachte nun die zwei Zustände aus Abbildung 4.1(b). Hier

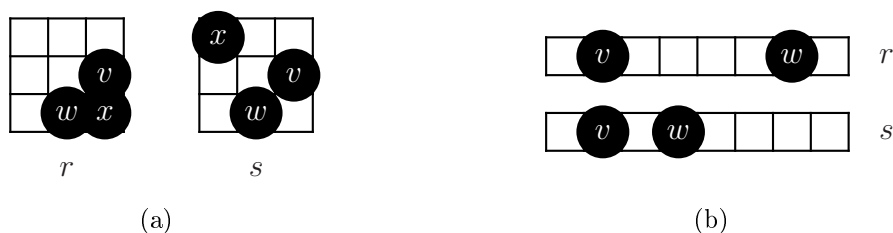


Abbildung 4.1.: Zustände aus dem Beweis der Proposition 4.8

sind zwar beide Zustände zulässig, aber trotz des Hamming-Abstandes von 1 sind sie nicht innerhalb eines Schrittes ineinander überführbar. Für diese ergibt sich

$$\begin{aligned}
 \beta &\geq 1 - \frac{1}{m} + \frac{1}{m} (d(v) + d(w)) \\
 &= 1 - \frac{1}{m} + \frac{1}{m} \left(\frac{1}{|\mathcal{C}|} + 1 \right) \\
 &= 1 + \frac{1}{m|\mathcal{C}|}.
 \end{aligned}$$

□

Was wir also benötigen, um eine zu Theorem 4.7 analoge Aussage zu bekommen, ist eine bessere Abschätzung für ζ aus Lemma 4.2, indem nur zulässige Zustände berücksichtigt werden, die auch innerhalb eines Schrittes ineinander überführbar sind. Dazu schränken wir die EMK auf eine Menge von zulässigen Zuständen ein. Das heißt von nun an sei $M_0 \in \mathcal{R} \subseteq \mathcal{S}^z$ P_λ -f.s für jede Startverteilung und M irreduzibel auf \mathcal{R} . Es ist jeweils nach Satz 1.27 die Boltzmannverteilung eingeschränkt auf \mathcal{R} (siehe zur Erinnerung die Gleichungen (1.6) und (1.7)) die stationäre Verteilung von M , da $q_{rr} > 0$ für alle $r \in \mathcal{R}$ gilt.

Außerdem führen wir eine neue Metrik ein, die die Mindestanzahl an Schritten angibt, welche M benötigt, um von r nach s zu gelangen.

Definition 4.9. Für $r, s \in \mathcal{R}$ sei die Metrik $H'(r, s)$ definiert durch

$$H'(r, s) := \min \left\{ h \geq 0 \mid \text{es ex. } z_0 := r, z_1, \dots, z_h := s, \right. \\
 \left. \text{mit } z_i \in \mathcal{R} \text{ und } p_{z_{i-1}, z_i} > 0 \text{ für alle } 1 \leq i \leq h \right\}.$$

Weiter definieren wir

$$D := \max_{r, s \in \mathcal{R}} H'(r, s) \leq |\mathcal{R}|$$

als den maximalen Abstand auf \mathcal{R} .

Die Existenz eines $h < \infty$ und damit eines Pfades $z_0 = r, z_1, \dots, z_{h-1}, z_h = s$ von r nach s für $r, s \in \mathcal{R}$ mit $z_i \in \mathcal{R}$ und $p_{z_{i-1}, z_i} > 0$ für alle $1 \leq i \leq h$ erhalten wir aus der Irreduzibilität von M auf \mathcal{R} . Man beachte, dass H' eine Metrik auf $\mathcal{R} \times \mathcal{R}$ ist, welche genau die Länge eines minimalen Pfades der oben beschriebenen Art in \mathcal{R} angibt, aber *nicht* der Hamming-Abstand ist. Ein Beispiel, bei dem $H \neq H'$ gilt, ergibt sich durch folgende Konstruktion:

Beispiel 4.10. Seien $s \in \mathcal{R}, v, w \in \mathcal{V}$, $v \neq w$, und $c, d, e \in \mathcal{C}$ paarweise verschieden mit $s_{v \rightarrow c}, s_{w \rightarrow d}, s_{v \rightarrow c, w \rightarrow e} \in \mathcal{R}$ und $s_{w \rightarrow e}, s_{v \rightarrow c, w \rightarrow d} \notin \mathcal{S}^z$, so ist $H(s_{w \rightarrow d}, s_{v \rightarrow c, w \rightarrow e}) = 2$, aber die Pfade

$$s_{w \rightarrow d} \rightarrow s_{w \rightarrow e} \rightarrow s_{v \rightarrow c, w \rightarrow e} \quad \text{und} \quad s_{w \rightarrow d} \rightarrow s_{v \rightarrow c, w \rightarrow d} \rightarrow s_{v \rightarrow c, w \rightarrow e}$$

der Länge 2 sind unzulässig. Damit ist $s_{w \rightarrow d} \rightarrow s \rightarrow s_{v \rightarrow c} \rightarrow s_{v \rightarrow c, w \rightarrow e}$ ein kürzester Pfad in \mathcal{R} und $H'(s_{w \rightarrow d}, s_{v \rightarrow c, w \rightarrow e}) = 3$ (zum besseren Verständnis siehe auch Abbildung 4.2).

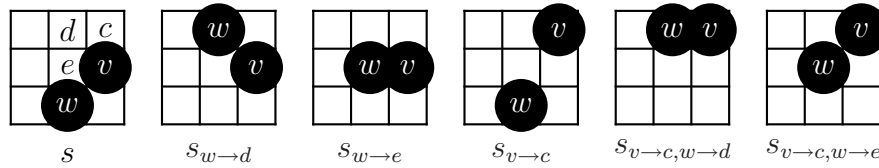


Abbildung 4.2.: Ein Beispiel für eine Wahl von Zuständen wie in Beispiel 4.10

4.3.1. Mischzeit für die globale Bewegung eines Teilchens

Mit dieser Vorarbeit kann nun in fast vollständiger Analogie zu Theorem 4.7 ein erstes Resultat für EMK im HC-Modell angegeben werden, deren Übergangsmatrizen durch die globale Bewegung der Teilchen gegeben sind.

Satz 4.11. Sei $M = (M_n)_{n \geq 0}$ eine EMK im HC-Modell mit globaler Bewegung und Werten in einer irreduziblen Teilmenge $\mathcal{R} \subseteq \mathcal{S}^z \subseteq \mathcal{C}^{\mathcal{V}}$. Die Übergangsmatrix \mathbf{P} sei gegeben durch Gleichung (4.7) und π die stationäre Verteilung. Weiter sei

$$\beta^* := \max_{\substack{r \neq s \in \mathcal{R} \\ s = r_{w \rightarrow c}}} \left\{ 1 - \Gamma_{\mathcal{V}}(\{w\}) + \Gamma_{\mathcal{V}}(\{w\}) \cdot d_{\mathcal{V}}(\Gamma_{\mathcal{C}}((r, w), \cdot), \Gamma_{\mathcal{C}}((s, w), \cdot)) \right. \\ \left. + \sum_{v \neq w} \Gamma_{\mathcal{V}}(\{v\}) \cdot 2d_{\mathcal{V}}(\Gamma_{\mathcal{C}}((r, v), \cdot), \Gamma_{\mathcal{C}}((s, v), \cdot)) \right\}.$$

Dann ist

$$d_{\mathcal{V}}(P_{\lambda}^{M_n}, \pi) \leq (\beta^*)^n D$$

für jede Startverteilung λ und alle $n \geq 0$. Insbesondere gilt im Fall $\beta^* < 1$ für alle $\varepsilon > 0$

$$\tau(\varepsilon) \leq \frac{\ln(D^{-1}\varepsilon)}{\ln(\beta^*)} + 1.$$

Beweis: Es sei $(X_n, Y_n, V_n)_{n \geq 0}$ eine Kopplung minimaler Pfade von $(\mathbf{P}, \pi, \Gamma_{\mathcal{V}}, \Gamma_{\mathcal{C}})$. Für jedes $n \geq 0$ sei

$$X_n = Z_{n,0}, \dots, Z_{n,h_n} = Y_n$$

ein minimaler Pfad bezüglich H' in \mathcal{R} von X_n nach Y_n mit $h_n := H'(X_n, Y_n)$. Dann ist $H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) \leq 3$ fast sicher, da durch

$$Z'_{n,i-1} \rightarrow Z_{n,i-1} \rightarrow Z_{n,i} \rightarrow Z'_{n,i}$$

ein Pfad mit maximal Länge 3 in \mathcal{R} gegeben ist, dessen einzelne Übergänge jeweils mit positiver Wahrscheinlichkeit durchgeführt werden. Genauer ist bei globaler Bewegung für alle $1 \leq i \leq h_n$ und $n \geq 0$

$$H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) \begin{cases} = 0 \\ = 1 \\ \in \{2, 3\} \end{cases} \Leftrightarrow H(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = \begin{cases} 0 \\ 1 \\ 2 \end{cases} \quad (4.8)$$

Damit ergibt sich für $Z_{n,i-1} = r, Z_{n,i} = s = r_{w \rightarrow c}$ bei Anwendung von Gleichung (4.5) in der fünften Zeile

$$\begin{aligned} & E^{(i,r,s,v)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i})) \\ & \leq P^{(i,r,s,v)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = 1) + 3P^{(i,r,s,v)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) \in \{2, 3\}) \\ & = 1 - P^{(i,s,r,v)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = 0) + 2P^{(i,r,s,v)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) \in \{2, 3\}) \\ & = 1 - P^{(i,s,r,v)}(H(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = 0) + 2P^{(i,r,s,v)}(H(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = 2) \\ & \leq \begin{cases} 1 - P^{(i,r,s,w)}(C_{n,i} = C_{n,i-1}), & \text{falls } v = w \\ 1 + 2P^{(i,r,s,v)}(C_{n,i} \neq C_{n,i-1}), & \text{falls } v \neq w \end{cases} \\ & = \begin{cases} d_V(\Gamma_{\mathcal{C}}((r, w), \cdot), \Gamma_{\mathcal{C}}((s, w), \cdot)), & \text{falls } v = w \\ 1 + 2d_V(\Gamma_{\mathcal{C}}((r, v), \cdot), \Gamma_{\mathcal{C}}((s, v), \cdot)), & \text{falls } v \neq w \end{cases} \end{aligned}$$

und damit

$$\begin{aligned} E^{(i,r,s)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i})) & \leq \Gamma_{\mathcal{V}}(\{w\})d_V(\Gamma_{\mathcal{C}}((r, w), \cdot), \Gamma_{\mathcal{C}}((s, w), \cdot)) \\ & \quad + \sum_{v \neq w} \Gamma_{\mathcal{V}}(\{v\}) \left(1 + 2d_V(\Gamma_{\mathcal{C}}((r, v), \cdot), \Gamma_{\mathcal{C}}((s, v), \cdot))\right) \\ & = 1 - \Gamma_{\mathcal{V}}(\{w\}) + \Gamma_{\mathcal{V}}(\{w\}) \cdot d_V(\Gamma_{\mathcal{C}}((r, w), \cdot), \Gamma_{\mathcal{C}}((s, w), \cdot)) \\ & \quad + \sum_{v \neq w} \Gamma_{\mathcal{V}}(\{v\}) \cdot 2d_V(\Gamma_{\mathcal{C}}((r, v), \cdot), \Gamma_{\mathcal{C}}((s, v), \cdot)) \\ & \leq \beta^*. \end{aligned}$$

Wieder gilt für jede Startverteilung λ unter Benutzung der Dreiecksungleichung

$$\begin{aligned}
 E_{\lambda,\pi}(H'(X_{n+1}, Y_{n+1})) &= E_{\lambda,\pi}\left(E(H'(X_{n+1}, Y_{n+1}) \mid X_n, Y_n, (Z_{n,i})_{0 \leq i \leq H'(X_n, Y_n)})\right) \\
 &\leq E_{\lambda,\pi}\left(\sum_{i=1}^{H'(X_n, Y_n)} E(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) \mid Z_{n,i-1}, Z_{n,i})\right) \\
 &\leq E_{\lambda,\pi}\left(\sum_{i=1}^{H'(X_n, Y_n)} \beta^*\right) \\
 &= \beta^* E_{\lambda,\pi}(H'(X_n, Y_n))
 \end{aligned}$$

für alle $n \geq 0$ und damit die Behauptung wegen Lemma 4.2. \square

Im Original von Bubley und Dyer wurde diese Aussage zusammen mit einem Zusatz für den Fall (ii) aus Lemma 4.2 unabhängig von Theorem 4.7 mit Hilfe einer leicht modifizierten Kopplung minimaler Pfade, im Folgenden *Metropoliskopplung minimaler Pfade* genannt, bewiesen. Diese wird durch die Eigenschaften (PK1)-(PK3) und (PK4'), (PK5') definiert.

(PK4') Für jedes $n \geq 0$ sei mit $h_n = H'(X_n, Y_n)$

$$Z_{n,0} := X_n, Z_{n,1}, \dots, Z_{n,h_n-1}, Z_{n,h_n} := Y_n$$

ein zufälliger minimaler Pfad bezüglich H' in \mathcal{R} von X_n nach Y_n . Wir definieren wie oben die σ -Algebra

$$\mathfrak{F}_n^* := \sigma(\mathfrak{F}_n, (Z_{k,1}, \dots, Z_{k,h_n-1}))_{0 \leq k \leq n}.$$

Dann seien C_n und U_n für alle $n \geq 0$ zwei unabhängige Zufallsvariablen auf dem gleichen W-Raum wie X_n, Y_n und V_n mit Werten in \mathcal{C} bzw. $[0, 1]$ und

$$P^{C_n | \mathfrak{F}_n^*} = P^{C_n} := \sum_{c \in \mathcal{C}} \frac{1}{|\mathcal{C}|} \delta_c$$

sowie $U_n \sim \mathcal{R}(0, 1)$.

(PK5') Mit den Voraussetzungen aus (PK1)-(PK3) und (PK4') gilt für jedes $n \geq 0$ und $0 \leq i \leq h_n$, gegeben $Z_{n,i} = z_i$ und $(V_n, C_n, U_n) = (v, c, p)$,

$$Z'_{n,i} = \begin{cases} (z_i)_{v \rightarrow c}, & \text{falls } p \leq A_{z_i, v}(c) \\ z_i, & \text{sonst,} \end{cases}$$

wobei $Z'_{n,0} = X_{n+1}$ und $Z'_{n,h_n} = Y_{n+1}$ ist.

Definition 4.12. Wir nennen eine trivariate Kette $(X_n, Y_n, V_n)_{n \geq 0}$ *Metropoliskopplung minimaler Pfade* von $(\mathbf{P}, \pi, \Gamma_{\mathcal{V}})$, falls sie die Bedingungen (PK1)-(PK3), (PK4') und (PK5') erfüllt.

In der allgemeinen Kopplung minimaler Pfade wird zu jeder Zeit $n \geq 0$ für die Zustände $Z_{n,i}$, $0 \leq i \leq h_n$, entlang des minimalen Pfades eine Position $C_{n,i} \in \mathcal{C}$ gewählt, für die $C_{n,i} \neq C_{n,j}$ für $i \neq j$ gelten kann und $(C_{n,i-1}, C_{n,i})$ maximal gekoppelt sind. In verschiedenen Zuständen entlang des Pfades wird also das ausgewählte Teilchen auf eventuell verschiedene Zustände gelegt. Bei der Metropoliskopplung dagegen ist die vorgeschlagene Position für das Teilchen V_n in jedem Zustand entlang des Pfades die gleiche. Diese Position wird im Zustand $Z_{n,i}$ mit der Wahrscheinlichkeit $A_{Z_{n,i}, V_n}(C_n)$ akzeptiert und sonst abgelehnt. Auch hier ist wieder

$$X_n = Y_n \Rightarrow X_{n+1} = Y_{n+1} \text{ f.s.}$$

für alle $n \geq 0$ erfüllt.

Da in einem Schritt für jeden Zustand entlang des minimalen Pfades die gleiche Position vorgeschlagen wird, ist bei dieser Kopplung mit $Z_{n,i-1} = r, Z_{n,i} = s = r_{w \rightarrow c}$

$$H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = \begin{cases} 0, & \text{falls } V_n = w, U_n \leq (A_{r,w}(C_n) \wedge A_{s,w}(C_n)) \\ 2, & \text{falls } V_n = v \neq w, C_n \notin \{r(w), s(w)\} \text{ und} \\ & (A_{r,v}(C_n) \wedge A_{s,v}(C_n)) < U_n \leq (A_{r,v}(C_n) \vee A_{s,v}(C_n)) \\ 1, & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.9)$$

für alle $1 \leq i \leq h_n$ und alle $n \geq 0$. Wir setzen nun noch für alle $r, s \in \mathcal{R}$ und $v \in \mathcal{V}$

$$\begin{aligned} S_v(r, s) &:= \frac{1}{|\mathcal{C}|} \sum_{c \in \mathcal{C}} (A_{r,v}(c) \wedge A_{s,v}(c)) \\ F_v(r, s) &:= \frac{1}{|\mathcal{C}|} \sum_{c \in \mathcal{C}} |A_{r,v}(c) - A_{s,v}(c)| \\ \gamma &:= \max_{\substack{r \neq s \in \mathcal{R} \\ s = r_{w \rightarrow c}}} \left\{ 1 - \Gamma_{\mathcal{V}}(\{w\}) S_w(r, s) + \sum_{v \neq w} \Gamma_{\mathcal{V}}(\{v\}) F_v(r, s) \right\} \end{aligned} \quad (4.10)$$

und erhalten damit die folgende Aussage.

Theorem 4.13. (Bubley, Dyer [BD97] Thm. 2) Sei $M = (M_n)_{n \geq 0}$ eine EMK im HC-Modell mit globaler Bewegung und Werten in einer irreduziblen Teilmenge $\mathcal{R} \subseteq \mathcal{S}^z \subseteq \mathcal{C}^{\mathcal{V}}$. Die Übergangsmatrix \mathbf{P} sei gegeben durch Gleichung (4.7) und π die stationäre Verteilung. Weiter seien $S_v(r, s)$ und $F_v(r, s)$ für alle $r, s \in \mathcal{R}$ und $v \in \mathcal{V}$ sowie γ gemäß (4.10) definiert und D gemäß Definition 4.9. Darüber hinaus sei (X, Y, V) eine Metropolis-Kopplung minimaler Pfade von $(\mathbf{P}, \pi, \Gamma_{\mathcal{V}})$.

Dann ist

$$d_V(P_{\lambda}^{M_n}, \pi) \leq \gamma^n D$$

für jede Startverteilung λ und alle $n \geq 0$. Insbesondere gilt für alle $\varepsilon > 0$

(i) im Fall $\gamma < 1$

$$\tau(\varepsilon) \leq \frac{\ln(D^{-1}\varepsilon)}{\ln \gamma} + 1,$$

(ii) im Fall $\gamma = 1$

$$\tau(\varepsilon) \leq \frac{D^2 + D}{\varepsilon\alpha} + 1,$$

falls $\alpha := \inf_{n \geq 0} P_{\lambda, \pi}(H'(X_{n+1}, Y_{n+1}) \neq H'(X_n, Y_n) \mid X_n \neq Y_n) > 0$ gilt.

Beweis: Für jedes $n \geq 0$ sei $Z_{n,0} = X_n, \dots, Z_{n,h_n} = Y_n$ ein minimaler Pfad bezüglich H' in \mathcal{R} von X_n nach Y_n mit $h_n := H'(X_n, Y_n)$. Wegen Gleichung (4.9) ergibt sich für alle $1 \leq i \leq h_n, n \geq 0$, alle $r, s \in \mathcal{R}$, $v, w \in \mathcal{V}$ und $c \in \mathcal{C}$ mit $Z_{n,i-1} = r$ und $Z_{n,i} = s = r_{w \rightarrow c}$

$$\begin{aligned} P^{(i,r,s,v)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = 0) &= P^{(i,r,s,w)}(U_n \leq (A_{r,w}(C_n) \wedge A_{s,w}(C_n))) \delta_{vw} \\ &= \frac{1}{|\mathcal{C}|} \sum_{d \in \mathcal{C}} (A_{r,w}(d) \wedge A_{s,w}(d)) \delta_{vw} \\ &= S_w(r, s) \delta_{vw} \end{aligned}$$

und unter Benutzung von $A_{t,v}(d) \in \{0, 1\}$ für alle $t \in \mathcal{S}, v \in \mathcal{V}$ und $d \in \mathcal{C}$ weiter

$$\begin{aligned} P^{(i,r,s,v)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = 2) &\leq P^{(i,r,s,v)}((A_{r,v}(C_n) \wedge A_{s,v}(C_n)) < U_n \leq (A_{r,v}(C_n) \vee A_{s,v}(C_n))) (1 - \delta_{vw}) \\ &= \frac{1}{|\mathcal{C}|} \sum_{d \in \mathcal{C}} |A_{r,v}(d) - A_{s,v}(d)| (1 - \delta_{vw}) \\ &= F_v(r, s) (1 - \delta_{vw}). \end{aligned}$$

Durch eine Rechnung wie im Beweis zu Satz 4.11 ergibt sich

$$\begin{aligned} E^{(i,r,s,v)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i})) &= 1 - P^{(i,r,s,v)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = 0) + P^{(i,r,s,v)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = 2) \\ &\leq \begin{cases} 1 - S_w(r, s), & \text{falls } v = w \\ 1 + F_v(r, s), & \text{falls } v \neq w \end{cases} \end{aligned}$$

und damit unter Beachtung der Definition von γ

$$\begin{aligned} E^{(i,r,s)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i})) &\leq \Gamma_{\mathcal{V}}(\{w\}) (1 - S_w(r, s)) + \sum_{v \neq w} \Gamma_{\mathcal{V}}(\{v\}) (1 + F_v(r, s)) \\ &\leq \gamma \end{aligned}$$

für alle $1 \leq i \leq h_n$ und $n \geq 0$. Dies liefert für eine beliebige Startverteilung λ

$$\begin{aligned}
 E_{\lambda, \pi} \left(H'(X_{n+1}, Y_{n+1}) \right) &= E_{\lambda, \pi} \left(E \left(H'(X_{n+1}, Y_{n+1}) \mid X_n, Y_n, (Z_{n,i})_{0 \leq i \leq H'(X_n, Y_n)} \right) \right) \\
 &\leq E_{\lambda, \pi} \left(\sum_{i=1}^{H'(X_n, Y_n)} E \left(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) \mid Z_{n,i-1}, Z_{n,i} \right) \right) \\
 &\leq E_{\lambda, \pi} \left(\sum_{i=1}^{H'(X_n, Y_n)} \gamma \right) \\
 &= \gamma E_{\lambda, \pi} \left(H'(X_n, Y_n) \right).
 \end{aligned}$$

Da sich auch bei der Metropolis-Kopplung die Zufallsvariablen X_n und Y_n nach ihrem ersten Treffen fast sicher nicht mehr trennen, ist Lemma 4.2 anwendbar. Hieraus folgt

$$d_V(P_\lambda^{M_n}, \pi) \leq \gamma^n D$$

für jedes λ und alle $n \geq 0$ und die Behauptung aus Teil (i). Teil (ii) folgt ebenfalls mit Lemma 4.2, da hier

$$H'(X_{n+1}, Y_{n+1}) - H'(X_n, Y_n) \in \{-1, 0, 1\}$$

fast sicher für alle $n \geq 0$ gilt. Wenn in beiden Zuständen X_n und Y_n ein Teilchen verschoben wird, dann zwangsläufig auf die gleiche Position. \square

In Abschnitt 1.3.2 haben wir angedeutet, dass eine Metropolis-Kette so gewählt werden kann, dass die Verteilungen besonders schnell konvergieren und die Kette gleichzeitig leicht zu simulieren ist. Für die Metropolis-Kopplung minimaler Pfade wollen wir diesbezüglich das folgende Lemma zeigen.

Lemma 4.14. *Bei globaler Bewegung von $m > 0$ Teilchen auf einem $M \times N$ -Gitter ist mit den Bezeichnungen aus Satz 4.11 und Theorem 4.13 $\gamma \leq \beta^*$ und*

$$\gamma \leq \begin{cases} 1 - \frac{1}{m^2}, & \text{falls } \rho = \frac{1}{3(\Delta+1)} \\ 1 - \frac{\delta}{m(1+\delta)}, & \text{falls } \rho \leq \frac{1}{3(\Delta+1)(1+\delta)} \text{ für ein } \delta > 0 \end{cases}$$

und damit $\gamma < 1$, falls $\rho \leq (3(\Delta+1))^{-1}$ gilt.

Beweis: Nach Definition ist bei globaler Bewegung der Teilchen

$$\begin{aligned}
 \beta^* &= \max_{\substack{r \neq s \in \mathcal{R} \\ s=r_{w \rightarrow c}}} \left\{ 1 - \Gamma_V(\{w\}) \left(1 - d_V(\Gamma_C((r, w), \cdot), \Gamma_C((s, w), \cdot)) \right) \right. \\
 &\quad \left. + \sum_{v \neq w} \Gamma_V(\{v\}) \cdot 2d_V(\Gamma_C((r, v), \cdot), \Gamma_C((s, v), \cdot)) \right\} \\
 \gamma &= \max_{\substack{r \neq s \in \mathcal{R} \\ s=r_{w \rightarrow c}}} \left\{ 1 - \Gamma_V(\{w\}) S_w(r, s) + \sum_{v \neq w} \Gamma_V(\{v\}) F_v(r, s) \right\}.
 \end{aligned}$$

Wir zeigen zuerst, dass

$$S_w(r, s) = 1 - d_V \left(\Gamma_{\mathcal{C}}((r, w), \cdot), \Gamma_{\mathcal{C}}((s, w), \cdot) \right)$$

und

$$F_v(r, s) \leq 2d_V \left(\Gamma_{\mathcal{C}}((r, v), \cdot), \Gamma_{\mathcal{C}}((s, v), \cdot) \right)$$

für alle $v \neq w$ und damit $\gamma \leq \beta^*$ gilt.

Da $\Gamma_{\mathcal{C}}((r, w), \{d\}) > \Gamma_{\mathcal{C}}((s, w), \{d\})$ nur für $d = r(w)$ gilt und $A_{s,w}(r(w)) = 1$ ist, ergibt sich

$$\begin{aligned} d_V \left(\Gamma_{\mathcal{C}}((r, w), \cdot), \Gamma_{\mathcal{C}}((s, w), \cdot) \right) &= \Gamma_{\mathcal{C}}((r, w), \{r(w)\}) - \Gamma_{\mathcal{C}}((s, w), \{r(w)\}) \\ &= 1 - \sum_{d \neq r(w)} \frac{1}{|\mathcal{C}|} A_{r,w}(d) - \frac{1}{|\mathcal{C}|} A_{s,w}(r(w)) \\ &= 1 - \frac{1}{|\mathcal{C}|} \left(|\{d \neq r(w) \mid A_{r,w}(d) = 1\}| + 1 \right) \\ &= 1 - \frac{1}{|\mathcal{C}|} |\{d \in \mathcal{C} \mid A_{r,w}(d) = 1\}|. \end{aligned}$$

Da bei Wegnehmen der Kugel w die verbliebenen Kugeln in r und s auf den gleichen Positionen liegen, ist

$$\begin{aligned} S_w(r, s) &= \frac{1}{|\mathcal{C}|} \sum_{d \in \mathcal{C}} A_{r,w}(d) \wedge A_{s,w}(d) \\ &= \frac{1}{|\mathcal{C}|} |\{d \in \mathcal{C} \mid A_{r,w}(d) = A_{s,w}(d) = 1\}| \\ &= \frac{1}{|\mathcal{C}|} |\{d \in \mathcal{C} \mid A_{r,w}(d) = 1\}| \\ &= 1 - d_V \left(\Gamma_{\mathcal{C}}((r, w), \cdot), \Gamma_{\mathcal{C}}((s, w), \cdot) \right). \end{aligned}$$

Betrachten wir nun ein Teilchen $v \neq w$. Für dieses ist

$$\{d \in \mathcal{C} \mid A_{r,v}(d) \neq A_{s,v}(d)\} \subseteq \mathcal{N}(r(w)) \cup \{r(w)\} \cup \mathcal{N}(s(w)) \cup \{s(w)\},$$

mit $|\mathcal{N}(r(w))| = \Delta$ für alle r und w , und deshalb

$$\begin{aligned} F_v(r, s) &= \frac{1}{|\mathcal{C}|} \sum_{d \in \mathcal{C}} |A_{r,v}(d) - A_{s,v}(d)| \\ &= \frac{1}{|\mathcal{C}|} |\{d \in \mathcal{C} \mid A_{r,v}(d) \neq A_{s,v}(d)\}| \\ &\leq \frac{2(\Delta + 1)}{|\mathcal{C}|}. \end{aligned}$$

Es sei ohne Einschränkung der Allgemeinheit

$$\left| \{d \in \mathcal{C} \mid A_{s,v}(d) = 1, A_{r,v}(d) = 0\} \right| \geq \left| \{d \in \mathcal{C} \mid A_{s,v}(d) = 0, A_{r,v}(d) = 1\} \right|, \quad (4.11)$$

ansonsten vertausche die Bezeichnungen von r und s . Dann ist wegen $r(v) = s(v)$

$$\begin{aligned} & d_V \left(\Gamma_{\mathcal{C}}((r, v), \cdot), \Gamma_{\mathcal{C}}((s, v), \cdot) \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{d \in \mathcal{C}} \left| \Gamma_{\mathcal{C}}((r, v), \{d\}) - \Gamma_{\mathcal{C}}((s, v), \{d\}) \right| \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\left| \{d \neq r(v) \mid A_{r,v}(d) \neq A_{s,v}(d)\} \right|}{|\mathcal{C}|} + \left| \Gamma_{\mathcal{C}}((r, v), \{r(v)\}) - \Gamma_{\mathcal{C}}((s, v), \{r(v)\}) \right| \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\left| \{d \neq r(v) \mid A_{r,v}(d) \neq A_{s,v}(d)\} \right|}{|\mathcal{C}|} + \left| \sum_{d \neq r(v)} \frac{1}{|\mathcal{C}|} A_{s,v}(d) - \sum_{d \neq r(v)} \frac{1}{|\mathcal{C}|} A_{r,v}(d) \right| \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\left| \{d \neq r(v) \mid A_{r,v}(d) \neq A_{s,v}(d)\} \right|}{|\mathcal{C}|} \right. \\ &\quad \left. + \left| \frac{\left| \{d \in \mathcal{C} \mid A_{s,v}(d) = 1, A_{r,v}(d) = 0\} \right| - \left| \{d \in \mathcal{C} \mid A_{s,v}(d) = 0, A_{r,v}(d) = 1\} \right|}{|\mathcal{C}|} \right| \right) \\ &= \frac{\left| \{d \in \mathcal{C} \mid A_{s,v}(d) = 1, A_{r,v}(d) = 0\} \right|}{2|\mathcal{C}|}. \end{aligned}$$

Daraus ergibt sich wieder wegen (4.11)

$$\begin{aligned} 2d_V \left(\Gamma_{\mathcal{C}}((r, v), \cdot), \Gamma_{\mathcal{C}}((s, v), \cdot) \right) &\geq \frac{1}{|\mathcal{C}|} \left| \{d \in \mathcal{C} \mid A_{s,v}(d) \neq A_{r,v}(d)\} \right| \\ &= F_v(r, s). \end{aligned}$$

Insgesamt ist somit $\gamma \leq \beta^*$ gezeigt.

Kommen wir also zur zweiten Behauptung und bestimmen $S_w(r, s)$ und $F_v(r, s)$ genauer. Da bei Wegnehmen eines Teilchens die $m - 1$ verbliebenen Teilchen einer Konfiguration maximal $(\Delta + 1)(m - 1)$ Plätze blockieren, gilt für $r, s \in \mathcal{R}$ mit $s = r_{w \rightarrow c}$ für ein $w \in \mathcal{V}$

$$S_w(r, s) = \frac{1}{|\mathcal{C}|} \left| \{d \in \mathcal{C} \mid A_{r,w}(d) = 1\} \right| \geq \frac{MN - (\Delta + 1)(m - 1)}{|\mathcal{C}|}.$$

Zusätzlich haben wir weiter oben bereits

$$F_v(r, s) \leq \frac{2(\Delta + 1)}{|\mathcal{C}|}$$

gesehen. Deshalb erhalten wir für γ mit $\rho = \frac{1}{3(\Delta+1)(1+\delta)}$ für geeignetes δ (eventuell $\delta = 0$ und damit $\rho = \frac{1}{3(\Delta+1)}$)

$$\begin{aligned}
 \gamma &\leq 1 - \frac{1}{m} \frac{MN - (\Delta + 1)(m - 1)}{MN} + \frac{(2\Delta + 2)(m - 1)}{MNm} \\
 &= 1 - \frac{1}{m} \left(1 - \frac{3(\Delta + 1)m}{MN} + \frac{3(\Delta + 1)}{MN} \right) \\
 &= 1 - \frac{1}{m} + \frac{3\rho(\Delta + 1)}{m} \left(1 - \frac{1}{m} \right) \\
 &= 1 - \frac{1}{m} + \frac{1}{m(1 + \delta)} \left(1 - \frac{1}{m} \right) \\
 &= 1 - \frac{1}{m(1 + \delta)} \left(\delta + \frac{1}{m} \right)
 \end{aligned}$$

und damit

$$\gamma \leq \begin{cases} 1 - \frac{1}{m^2}, & \text{falls } \delta = 0 \\ 1 - \frac{\delta}{m(1+\delta)}, & \text{falls } \delta > 0. \end{cases}$$

□

Bemerkung 4.15. Die Metropoliskopplung minimaler Pfade hat also gegenüber der allgemeinen Kopplung mehrere Vorteile.

Erstens ist sie tatsächlich leichter zu programmieren, da zu jeder Zeit $n \geq 0$ für einen Versuchszustand nur eine zufällige Position erzeugt werden muss. Dies führt natürlich auch dazu, dass die benötigte Rechenzeit geringer ist.

Zweitens ist bei Verwendung der allgemeinen Kopplung keine Aussage für den Fall $\beta^* = 1$ möglich. Lemma 4.2 (ii) kann nicht angewendet werden, da die Differenz $H'(X_{n+1}, Y_{n+1}) - H'(X_n, Y_n)$ wie in Gleichung (4.8) dargestellt auch die Werte ± 2 annehmen kann und somit

$$(H'_n) := (H'(X_n, Y_n))_{n \geq 0}$$

keine Irrfahrt beschreibt.

Drittens gilt nach dem obigen Lemma $\gamma \leq \beta^*$, das heißt die minimalen Pfade kontrahieren bei Benutzung der Metropoliskopplung mindestens genauso stark wie bei Benutzung der allgemeinen Kopplung. Ohne Metropolis werden die Positionen für das Teilchen V_n so ausgewählt, dass sie maximal gekoppelt, also mit größtmöglicher Wahrscheinlichkeit gleich sind. Mit der Restwahrscheinlichkeit wird das Teilchen in den verschiedenen Zuständen auf irgendwelche anderen Positionen gelegt. In der Metropoliskopplung dagegen werden die Teilchen immer auf die gleiche Position gelegt, sofern dies zulässig ist. Ansonsten verbleibt das Teilchen, wo es vorher war. Dieses Teilchen sollte also im Mittel in mindestens genauso vielen Zuständen auf die gleiche Position gelegt werden wie bei der allgemeinen Kopplung. Wird das Teilchen

in zwei aufeinander folgenden Zuständen auf unterschiedliche Positionen gelegt, so ist es egal, ob diese Positionen neu oder ihre ursprünglichen sind. Deshalb kontrahieren die minimalen Pfade mindestens genauso stark und die Konvergenzrate der Metropolis-Kopplung ist zumindest nicht schlechter.

Sie ist aber auch nicht grundsätzlich besser, das heißt es gilt nicht $\gamma < \beta^*$. Für triviale Fälle wie etwa $m = 1$ oder

$$\{(r, s) \in \mathcal{R} \mid s = r_{v \rightarrow c} \text{ für ein } v \in \mathcal{V}, c \in \mathcal{C}\} = \emptyset \quad (4.12)$$

ist offensichtlich $\gamma = \beta^*$, wie man leicht an den Definitionen sieht. Für ein 3×3 -Gitter mit drei Teilchen beispielsweise gilt Gleichung (4.12) sogar für \mathcal{S}^z anstelle von \mathcal{R} .

Wir sind nun in der Lage als diskretes Analogon zu Satz 2 in [KMM03] eine konkrete Schranke für die Mischzeit zu bestimmen.

Satz 4.16. *Es sei M eine auf $\mathcal{R} \subset \mathcal{S}^z$ irreduzible EMK im HC-Modell auf einem $M \times N$ -Gitter mit periodischen Randbedingungen und m Teilchen, bei der Versuchszustände durch eine globale Bewegung der Teilchen entstehen. Weiter sei $\pi|_{\mathcal{R}}$ mit der Boltzmann-Verteilung π die stationäre Verteilung. Dann ist die Mischzeit dieser EMK beschränkt durch*

$$\tau(\varepsilon) \leq \begin{cases} m^2 \ln(2\varepsilon^{-1}m) + 1, & \text{falls } \rho = (3\Delta + 3)^{-1} \\ m^{\frac{1+\delta}{\delta}} \ln(2\varepsilon^{-1}m) + 1, & \text{falls } \rho \leq (3(\Delta + 1)(\delta + 1))^{-1} \text{ für ein } \delta > 0. \end{cases}$$

Beweis: Zunächst berechnen wir für ein Paar r, s von Zuständen in \mathcal{R} ihren bezüglich H' maximal möglichen Abstand D . Mit $\mathcal{V} = \{v_1, \dots, v_m\}$ konstruieren wir dazu einen Pfad

$$z_0 = r \rightarrow z_1 \rightarrow \dots \rightarrow z_{2m-1} \rightarrow z_{2m} = s$$

in \mathcal{R} von r nach s der Länge $2m$ mit positiven Übergangswahrscheinlichkeiten. Das Vorgehen ist das folgende: In beiden Zuständen r, s wird das Teilchen v_1 ausgewählt und auf eine Position gesetzt, die in beiden Zuständen besetzbar ist. Dass eine solche unter den gegebenen Voraussetzungen existiert, ist natürlich noch zu zeigen. Gleiches wird nun sukzessive mit den übrigen Teilchen wiederholt, sodass die Kette in m Schritten von r und s aus in einen Zustand z_m gelangen kann. Definiere dazu induktiv für alle $1 \leq i \leq m$

$$z_i := (z_{i-1})_{v_i \rightarrow c_i} \quad z_{2m-i} := (z_{2m+1-i})_{v_i \rightarrow c_i}$$

für $c_i \in \mathcal{C}_i$, mit

$$\mathcal{C}_i := \left(\bigcup_{v \in \mathcal{V} \setminus \{v_i\}} \{z_{i-1}(v), z_{2m+1-i}(v)\} \cup \mathcal{N}(z_{i-1}(v)) \cup \mathcal{N}(z_{2m+1-i}(v)) \right)^c.$$

Dabei ist $\mathcal{C}_i \neq \emptyset$ für alle $1 \leq i \leq m$, da jeder Gitterpunkt Δ viele Nachbarn hat, weshalb

$$\begin{aligned} \left| \bigcup_{v \in \mathcal{V} \setminus \{v_i\}} \mathcal{N}(z_{i-1}(v)) \cup \mathcal{N}(z_{2m+1-i}(v)) \right| &\leq 2\Delta(m-1) \\ \left| \bigcup_{v \in \mathcal{V} \setminus \{v_i\}} \{z_{i-1}(v), z_{2m+1-i}(v)\} \right| &\leq 2(m-1) \end{aligned}$$

gilt. Es ergibt sich damit unter Benutzung von $\rho \leq \frac{1}{3(\Delta+1)}$

$$\begin{aligned} |\mathcal{C}_i| &\geq MN - 2\Delta(m-1) - 2(m-1) \\ &= MN - 2(\Delta+1)\rho MN + 2(\Delta+1) \\ &\geq 2(\Delta+1). \end{aligned}$$

Es ist nun tatsächlich $z_m = (z_{m-1})_{v_m \rightarrow c_m} = (z_{m+1})_{v_m \rightarrow c_m}$, da sukzessive alle Teilchen auf die gleichen Plätze gelegt werden, und damit

$$r = z_0 \rightarrow z_1 \rightarrow \dots \rightarrow z_{2m-1} \rightarrow z_{2m} = s$$

ein zulässiger Pfad. So ergibt sich $D \leq 2m$.

Zusammen mit dem vorigen Lemma zur Bestimmung von γ und Theorem 4.13 ergibt sich im Fall $\rho = (3\Delta+3)^{-1}$

$$\tau(\varepsilon) \leq \frac{\ln(D\varepsilon^{-1})}{-\ln \gamma} + 1 \leq \frac{\ln(2\varepsilon^{-1}m)}{-\ln(1 - \frac{1}{m^2})} + 1.$$

Da $1-x \leq e^{-x}$ für alle $x \in [0, 1]$ gilt, folgt $-\ln(1-x) \geq x$, und damit

$$\tau(\varepsilon) \leq \frac{\ln(2\varepsilon^{-1}m)}{-\ln(1 - \frac{1}{m^2})} + 1 \leq m^2 \ln(2\varepsilon^{-1}m) + 1.$$

Eine analoge Rechnung liefert im Fall $\rho = (3(\Delta+1)(\delta+1))^{-1}$

$$\tau(\varepsilon) \leq \frac{\ln(2\varepsilon^{-1}m)}{-\ln(1 - \frac{\delta}{m(1+\delta)})} + 1 \leq \frac{1+\delta}{\delta} m \ln(2\varepsilon^{-1}m) + 1.$$

□

Bei ausreichend kleinen Dichten liegt also schnelles Mischen vor und die Mischzeit ist von der Ordnung $\mathcal{O}(m^2 \ln m)$ bzw. $\mathcal{O}(m \ln m)$. Für die Anzahl an Nachbarplätzen und damit für die kritische Dichte gilt

$$\Delta = \begin{cases} 2, & N = 1 \\ 3, & N = 2 \\ 4, & N \geq 3 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{3(\Delta+1)} = \begin{cases} \frac{1}{9}, & N = 1 \\ \frac{1}{12}, & N = 2 \\ \frac{1}{15}, & N \geq 3. \end{cases}$$

In den meisten interessanten Simulationen ist allerdings die Dichte höher als die hier angegebene Schranke.

Satz 2 in [KMM03] gibt eine ähnliche Schranke für die Mischzeit im stetigen HC-Modell an. Dieses ergibt sich, wenn die Teilchen nicht auf ein ausgezeichnetes Gitter gelegt werden, sondern in eine d -dimensionale Box $[0, l]^d$ - wieder mit der Einschränkung, dass sie nicht überlappen. In diesem Fall ist die Dichte ρ gegeben durch $\rho := mVl^{-2}$, mit dem d -dimensionalen Kugelvolumen V . Man erhält als Schranke für die Mischzeit

$$\tau(\varepsilon) \leq \begin{cases} 2m^2 \ln(2\varepsilon^{-1}m), & \text{falls } \rho = (2^{d+1})^{-1} \\ \frac{1+\delta}{\delta} 2m \ln(2\varepsilon^{-1}m), & \text{falls } \rho \leq (2^{d+1}(1+\delta))^{-1} \text{ für ein } \delta > 0. \end{cases}$$

Der zusätzliche Faktor 2 in der Schranke für die Mischzeit resultiert aus der Annahme einer Verharrungswahrscheinlichkeit von $\frac{1}{2}$, die in [KMM03] vorausgesetzt wurde. Für unseren Beweis war die Verharrungswahrscheinlichkeit von $|\mathcal{C}|^{-1}$ für die Aperiodizität ausreichend. Die kritische Dichte ist im stetigen Modell deutlich kleiner, da durch die Diskretisierung das ausgeschlossene Volumen stark ansteigt.

4.3.2. Mischzeit für die lokale Bewegung eines Teilchens

Betrachten wir zunächst nur lokale Bewegungen auf einem 1-dimensionalen Gitter. Die Frage nach der Verallgemeinerung auf den 2-dimensionalen Fall werden wir am Ende dieses Abschnittes stellen und leider verneinen.

Beginnen wir mit der allgemeinen Kopplung minimaler Pfade: Wie oben betrachten wir zwei aufeinander folgende Zustände $Z_{n,i-1} = r$ und $Z_{n,i} = s$, $1 \leq i \leq h_n$, $n \geq 0$, aus dem minimalen Pfad. Diese unterscheiden sich gerade um ein Teilchen w , für das $r(w) \sim s(w)$ gilt. Ein Übergang entsteht nun dadurch, dass ein Teilchen und für jeden Zustand entlang des minimalen Pfades eine Position ausgewählt wird. Positive Wahrscheinlichkeit haben dabei nur Positionen, die zu der ursprünglichen benachbart sind. Gleichung (4.8) muss dann durch

$$H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = \begin{cases} 0, & V_n = w, C_{n,i-1} = C_{n,i} \\ & \text{oder } V_n \neq w, C_{n,i-1} = s(w) \neq r(w) = C_{n,i} \\ 2, & V_n = w, C_{n,i-1} \not\sim C_{n,i} \\ & \text{und } \{C_{n,i-1} = r(w) \text{ oder } C_{n,i} = s(w)\} \\ & \text{oder } V_n \neq w, C_{n,i-1} \neq C_{n,i}, C_{n,i-1} \sim C_{n,i} \\ 3, & V_n = w, C_{n,i-1} \not\sim C_{n,i}, (C_{n,i-1}, C_{n,i}) \neq (r(w), s(w)) \\ & \text{oder } V_n \neq w, C_{n,i-1} \not\sim C_{n,i} \\ 1, & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.13)$$

ersetzt werden. Daher können wir Satz 4.11 nicht einfach übernehmen. Vielmehr müssen wir $E^{(i,r,s)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}))$ neu berechnen. In Satz A.1 im Anhang wird gezeigt,

dass $E^{(i,r,s)}(\mathbb{H}'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i})) = 1$ gilt. Damit ist

$$\begin{aligned} E_{\lambda,\pi}(\mathbb{H}'(X_{n+1}, Y_{n+1})) &= E_{\lambda,\pi}\left(E\left(\mathbb{H}'(X_{n+1}, Y_{n+1}) \mid X_n, Y_n, (Z_{n,i})_{0 \leq i \leq \mathbb{H}'(X_n, Y_n)}\right)\right) \\ &\leq E_{\lambda,\pi}\left(\sum_{i=1}^{\mathbb{H}'(X_n, Y_n)} E(\mathbb{H}'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) \mid Z_{n,i-1}, Z_{n,i})\right) \\ &= E_{\lambda,\pi}(\mathbb{H}'(X_n, Y_n)), \end{aligned} \quad (4.14)$$

also $\zeta = 1$ für das ζ aus Lemma 4.2. Nun jedoch die schlechte Nachricht: Analog zu Bemerkung 4.15 beschreibt $(\mathbb{H}'_n)_{n \geq 0} = (\mathbb{H}'(X_n, Y_n))_{n \geq 0}$ auch bei lokaler Bewegung eines Teilchens keine Irrfahrt, da Zuwächse größer als eins möglich sind. Das Lemma ist deshalb nicht anwendbar und somit auf diesem Wege keine Aussage über die Mischzeit möglich.

Infolgedessen betrachten wir nun die Metropolis-Kopplung minimaler Pfade und hoffen auf ein positives Ergebnis. Auch hier kann wegen der Ungültigkeit von Gleichung (4.9) der schon bewiesene Satz nicht übernommen werden. Bei Benutzung der Metropolis-Kopplung wird aber im Unterschied zur allgemeinen Kopplung minimaler Pfade für jeden Zustand entlang des minimalen Pfades die gleiche Position vorgeschlagen. Falls $U_n \leq A_{t,v}(C_n)$ für ein $t \in \mathcal{S}$ und $v \in \mathcal{V}$ gilt, so wird der Versuchszustand $t_{v \rightarrow C_n}$ akzeptiert. Wir erhalten mit $Z_{n,i-1} = r, Z_{n,i} = s = r_{w \rightarrow c}$

$$\mathbb{H}'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = \begin{cases} 0, & \text{falls } V_n = w, U_n \leq (A_{r,w}(C_n) \wedge A_{s,w}(C_n)) \\ 2, & \text{falls } C_n \notin \{r(w), s(w)\} \text{ und} \\ & (A_{r,V_n}(C_n) \wedge A_{s,V_n}(C_n)) < U_n \leq (A_{r,V_n}(C_n) \vee A_{s,V_n}(C_n)) \\ 1, & \text{sonst} \end{cases}$$

für alle $1 \leq i \leq h_n$ und alle $n \geq 0$. Dabei ist $C_n \sim \sum_{c \in \mathcal{C}} \frac{1}{|\mathcal{C}|} \delta_c$ und $U_n \sim \mathcal{R}(0, 1)$. Es ergibt sich wie vorher

$$\begin{aligned} &E^{(i,r,s)}(\mathbb{H}'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i})) \\ &= 1 - P^{(i,r,s)}(\mathbb{H}'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = 0) + P^{(i,r,s)}(\mathbb{H}'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = 2) \\ &= 1 - \frac{1}{m} P^{(i,r,s,w)}\left(U_n \leq (A_{r,w}(C_n) \wedge A_{s,w}(C_n))\right) \\ &\quad + \frac{1}{m} \sum_{v \in \mathcal{V}} P^{(i,r,s,v)}\left(\left((A_{r,v}(C_n) \wedge A_{s,v}(C_n)) < U_n \leq (A_{r,v}(C_n) \vee A_{s,v}(C_n)),\right.\right. \\ &\quad \left.\left. C_n \notin \{r(w), s(w)\}\right)\right) \\ &= 1 - \frac{1}{m|\mathcal{C}|} \left(\sum_{c \in \mathcal{C}} A_{r,w}(c) \wedge A_{s,w}(c) - \sum_{v \in \mathcal{V}} \sum_{c \neq r(w), s(w)} |A_{r,v}(c) - A_{s,v}(c)| \right). \end{aligned}$$

Da bei der lokalen Bewegung nur die ursprüngliche Position und Nachbarplätze des ausgewählten Teilchens akzeptiert werden, gilt

$$\sum_{c \in \mathcal{C}} A_{r,w}(c) \wedge A_{s,w}(c) = \left| \left(\mathcal{N}(r(w)) \cup \{r(w)\} \right) \cap \left(\mathcal{N}(s(w)) \cup \{s(w)\} \right) \right| = 2.$$

Weiter ist $A_{r,w}(c) \neq A_{s,w}(c)$ für $c \notin \{r(w), s(w)\}$, falls c nur zu einem der beiden Plätze $r(w), s(w)$ benachbart ist und in r und s keinen weiteren besetzten Nachbarplatz hat. Für $v \neq w$ ist $A_{r,v}(c) \neq A_{s,v}(c)$ für $c \notin \{r(w), s(w)\}$, falls c zu $r(v) = s(v)$ und zu einem der beiden Plätze $r(w), s(w)$ benachbart ist. Zum dritten Summanden der obigen Darstellung liefern also nur die zwei Nachbarplätze des Pärchens $r(w), s(w)$ einen Beitrag. Dieses sind die Plätze

$$\{c_1, c_2\} = \left(\mathcal{N}(r(w)) \cup \mathcal{N}(s(w)) \right) - \left(\mathcal{N}(r(w)) \cap \mathcal{N}(s(w)) \right).$$

Ohne Einschränkung sei $c_1 \in \mathcal{N}(r(w))$ und $c_2 \in \mathcal{N}(s(w))$. Wir betrachten zunächst den Platz c_1 . Im Falle $r^{-1}(\mathcal{N}(c_1)) = \{w\}$ hat c_1 im Zustand s keinen und im Zustand r nur $r(w)$ als besetzten Nachbarplatz. Daraus ergibt sich

$$A_{r,w}(c_1) = 1, \quad A_{s,w}(c_1) = 0 \quad \text{und} \quad A_{r,v}(c_1) = A_{s,v}(c_1) = 0$$

für alle $v \neq w$. Ist dagegen $r^{-1}(\mathcal{N}(c_1)) = \{w, v_1\}$ für ein $v_1 \in \mathcal{V}$, so ist

$$s(v_1) = r(v_1) \sim c_1 \sim r(w)$$

und $s^{-1}(\mathcal{N}(c_1)) = \{v_1\}$. Daraus folgt

$$A_{r,v_1}(c_1) = 0, \quad A_{s,v_1}(c_1) = 1, \quad \text{und} \quad A_{r,v}(c_1) = A_{s,v}(c_1) = 0$$

für alle $v \neq v_1$. Der Gitterplatz c_1 liefert also den Beitrag 1 zu der fraglichen Summe. Zusammen mit einer analogen Fallunterscheidung für c_2 ergibt sich insgesamt

$$\sum_{v \in \mathcal{V}} \sum_{c \neq r(w), s(w)} |A_{r,v}(c) - A_{s,v}(c)| = 2.$$

Dies führt wie bei der allgemeinen Kopplung minimaler Pfade zu

$$E^{(i,r,s)} \left(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) \right) = 1,$$

und damit analog zu Gleichung (4.14) zu $\zeta = 1$ für das ζ aus Lemma 4.2. Allerdings haben wir hier $H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) \in \{0, 1, 2\}$ fast sicher, weshalb Teil (ii) von Lemma 4.2 anwendbar ist. Für ein 1-dimensionales Gitter können wir den folgenden Satz und damit schnelles Mischen beweisen.

Satz 4.17. (Kannan, Mahoney, Montenegro [KMM03] Thm. 3) *Es sei M eine auf $\mathcal{R} \subset \mathcal{S}^z$ irreduzible EMK im HC-Modell auf einem $M \times 1$ -Gitter mit periodischen Randbedingungen, $m < \lfloor \frac{M}{2} \rfloor$ Teilchen und Teilchendichte ρ , bei der Versuchszustände durch eine lokale Bewegung der Teilchen entstehen. Weiter sei $\pi_{|\mathcal{R}}$ mit der Boltzmannverteilung π die stationäre Verteilung. Dann ist die Mischzeit der EMK beschränkt durch*

$$\tau(\varepsilon) \leq \frac{8}{\varepsilon} m^3 M^3 (1 - \rho)^2 + 1.$$

Beweis: Wieder muss zuerst der maximale Abstand D zweier Zustände r, s berechnet werden. Dazu sei $\mathcal{C} = \{c_1, \dots, c_M\}$ mit $c_i \sim c_{i+1}$ für alle $1 \leq i \leq M-1$ und $c_M \sim c_1$. Man nummeriere die Teilchen in Zustand r wie folgt: v_1 sei definiert durch

$$r(v_1) = \min \left\{ i \in \{1, \dots, M\} \mid r(v) = c_i \text{ für ein } v \in \mathcal{V} \right\}.$$

Es sei dann $r(v_1) = c_{K_{r,1}}$ und damit sukzessive v_i für $2 \leq i \leq m$ durch

$$r(v_i) = \min \left\{ j \in \{K_{r,i-1} + 1, \dots, M\} \mid r(v) = c_j \text{ für ein } v \in \mathcal{V} \right\}$$

gegeben, wobei $r(v_i) = c_{K_{r,i}}$ für alle $1 \leq i \leq m$ sei. Die gleiche Numerierung setzen wir im Zustand s .

Dann ist $|K_{r,i} - K_{s,i}| \leq M - m$ für alle $1 \leq i \leq m$. Ist $K_{r,1} > K_{s,1}$, so sind im Zustand r die Positionen $c_{K_{s,1}}, \dots, c_{K_{r,1}-1}$ unbesetzt. Daher liefert

$$r^1 := r_{v_1 \rightarrow c_{K_{r,1}-1}}, \quad r^2 := (r^1)_{v_1 \rightarrow c_{K_{r,1}-2}}, \dots, \quad r^k := (r^{k-1})_{v_1 \rightarrow c_{K_{s,1}+1}}$$

mit $k = |K_{r,i} - K_{s,i}| - 1 \leq M - m - 1$ eine Sequenz zulässiger Zustände und Teilchen v_1 kann ausgehend von Zustand r in maximal $M - m - 1$ Schritten auf die Position $c_{K_{s,1}+1}$ bewegt werden.

Ist $K_{s,1} \neq 1$, so ist $c_{K_{s,1}-1}$ in beiden Zuständen r und s und damit auch in r^k unbesetzt, sodass auch der Übergang $(r^k)_{v_1 \rightarrow c_{K_{s,1}}}$ positive Wahrscheinlichkeit besitzt. Gleiches ist der Fall, falls zwar $K_{s,1} = 1$, aber c_M in r unbesetzt ist.

Analog kann im Fall $K_{r,1} < K_{s,1}$ das Teilchen v_1 in Zustand s in maximal $M - m - 1$ Schritten auf die Position $c_{K_{r,1}+1}$ oder in maximal $M - m$ Schritten bereits auf die Position $c_{K_{r,1}}$ verschoben werden. Daraus folgt, dass die Positionen von v_1 in den beiden Zuständen nun benachbart oder gleich sind.

Die obigen Schritte lassen sich für die übrigen Teilchen wiederholen. Nur dann, wenn in einem der Zustände r, s die Position c_1 und im anderen die Position c_M besetzt ist (ohne Einschränkung sei dann $r(v_1) = c_1$ und $s(v_m) = c_M$), liegen nach diesen Übergängen wie oben beschrieben noch nicht alle Teilchen auf den selben Positionen, sondern auf zueinander benachbarten. Nach Voraussetzung ist $m < \lfloor \frac{M}{2} \rfloor$, also $2m < M$. Es gibt daher eine Position c_j , $2 \leq j \leq M-1$, die weder in r noch in s besetzt ist. Dies führt dazu, dass zumindest die Teilchen v_i , für die $K_{s,i} > c_j$

und $K_{r,i} > c_j$ gilt, nun auf gleichen Positionen liegen. Aus diesem Grund ist nun c_M unbesetzt und v_1 kann in dem aus s resultierenden Zustand auf die Position c_1 verschoben werden. Dann können auch alle anderen noch nicht deckungsgleich liegenden Teilchen eine Position weiter verschoben werden. Jedes der m Teilchen ist so um maximal $M - m$ Schritte bewegt worden. Dies liefert einen Pfad von r nach s mit höchstens Länge $2m(M - m)$. Es ist daher $D \leq 2m(M - m) = 2mM(1 - \rho)$.

Es bleibt nun noch $P(H'(X_{n+1}, Y_{n+1}) \neq H'(X_n, Y_n) \mid X_n \neq Y_n)$ abzuschätzen. Da für jedes $n \geq 0$ ein minimaler Pfad

$$X_n = Z_{n,0}, Z_{n,1} = (X_n)_{v \rightarrow c}, \dots, Z_{n,h_n-1} = (Y_n)_{w \rightarrow d}, Z_{n,h_n} = Y_n$$

existiert, liefert sowohl die Wahl des Tupels (v, c) , als auch die des Tupels (w, d) eine Verringerung des Abstandes. Da diese aber auch gleich sein können, gilt für alle $n \geq 0$

$$\alpha := \inf_{n \geq 0} P(H'(X_{n+1}, Y_{n+1}) \neq H'(X_n, Y_n) \mid X_n \neq Y_n) \geq \frac{1}{mM}.$$

Es ergibt sich nun gemäß Lemma 4.2 zusammen mit $\zeta = 1$ aus dem vorigen Satz

$$\tau(\varepsilon) \leq \frac{D^2 + D}{\varepsilon\alpha} + 1 \leq \frac{2D^2}{\varepsilon\alpha} + 1 \leq \frac{8}{\varepsilon} m^3 M^3 (1 - \rho)^2 + 1.$$

□

Bemerkung 4.18. Die hier angegebene Schranke für die Mischzeit ist etwas schlechter als die aus [KMM03]. Dies hat verschiedene Gründe. Erstens wird dort statt mit der Abschätzung $\tau(\varepsilon) \leq \frac{D^2+D}{\varepsilon\alpha}$ mit $\tau(\varepsilon) \leq \frac{D^2}{\varepsilon\alpha}$ gerechnet. Dies wird aber nicht bewiesen. Zweitens wurde D fälschlicherweise durch $mM(1 - \rho)$ abgeschätzt. Der wichtigste Unterschied ist aber, dass dort mit der allgemeinen Kopplung minimaler Pfade und der Verteilung

$$P(C_{n,i} = c \mid \mathfrak{F}_n^*) = \begin{cases} \frac{1}{4}, & \text{falls } c \sim Z_{n,i}(V_n) \\ \frac{1}{2}, & \text{falls } c = Z_{n,i}(V_n) \end{cases}$$

gearbeitet wurde. Wie wir aber festgestellt haben, ist mit der allgemeinen Kopplung im Fall $\zeta = 1$ keine Aussage möglich.

Leider lässt sich die Methode der Metropoliskopplung bei der lokalen Bewegung nicht auf den zweidimensionalen Fall anwenden, wie die folgende Rechnung zeigt. Es sei wieder $Z_{n,0} = X_n, \dots, Z_{n,h_n} = Y_n$ ein minimaler Pfad von X_n nach Y_n in \mathcal{R} . Für die Zustände $Z_{n,i-1} = r, Z_{n,i} = s = r_{w \rightarrow c}$ ist

$$\{d \in \mathcal{C} \mid A_{Z_{n,i-1},w}(d) = A_{Z_{n,i},w}(d) = 1\} = \{r(w), s(w)\},$$

weshalb

$$P^{(i,r,s)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = 0) = \frac{2}{m|\mathcal{C}|}$$

gilt. Wegen $\left| \left(\mathcal{N}(r(w)) \cup \mathcal{N}(s(w)) \right) - \left(\mathcal{N}(r(w)) \cap \mathcal{N}(s(w)) \right) \right| = 6$ folgt analog zur Rechnung vor Theorem 4.17

$$P^{(i,r,s)}(\mathbb{H}'(X_{n+1}, Y_{n+1}) = 2) = \frac{6}{m|\mathcal{C}|}.$$

Beides zusammen führt zu

$$\begin{aligned} E^{(i,r,s)}(\mathbb{H}'(Z_{n,i-1}, Z_{n,i})) \\ &= 1 - P^{(i,r,s)}(\mathbb{H}'(Z_{n,i-1}, Z_{n,i}) = 0) + P^{(i,r,s)}(\mathbb{H}'(Z_{n,i-1}, Z_{n,i}) = 2) \\ &= 1 + \frac{4}{m|\mathcal{C}|} > 1. \end{aligned}$$

Befindet sich die Kopplung (X_n, Y_n) in Zuständen r, s mit Abstand 1, so entfernen sich X_n und Y_n im Mittel wieder voneinander. Die minimalen Pfade zwischen ihnen kontrahieren im Mittel nicht und es gibt kein $\zeta \leq 1$ sodass für alle $n \geq 0$ $E_{\lambda,\pi}(\mathbb{H}'(X_{n+1}, Y_{n+1})) \leq \zeta E_{\lambda,\pi}(\mathbb{H}'(X_n, Y_n))$ gilt.

4.4. Fazit und Ausblick

Wir kennen also nun die Äquilibrierungszeit und sind in der Lage, eine Zufallsvariable gemäß der stationären Verteilung im HC-Modell zu simulieren. Als Methode zur Bestimmung der Anzahl zulässiger Zustände hat diese jedoch den großen Nachteil, dass die EMK im Allgemeinen nur auf einer echten Teilmenge $\mathcal{R} \subset \mathcal{S}^z$ irreduzibel ist. Es können mit dieser Methode also nur Aussagen über die Anzahl zulässiger Zustände auf verschiedenen Irreduzibilitätsklassen gemacht werden.

Durch die Verknüpfung einer der ersten beiden Methoden mit dieser letzten sind aber weiterreichende Aussagen möglich. So kann etwa untersucht werden, wie groß verschiedene Irreduzibilitätsklassen im Verhältnis zu $|\mathcal{S}^z|$ sind. Beispielsweise gibt es besonders kleine Irreduzibilitätsklassen, bestehend aus nur wenigen oder gar nur einem Zustand (etwa der Zustand, bei dem genau eine Diagonale eines quadratischen Gitters besetzt ist). Es wäre interessant zu untersuchen, ob die übrigen zulässigen Zustände sich auf wenige große Irreduzibilitätsklassen verteilen.

Um die vorgestellte Methode bezüglich ihrer Anwendbarkeit zu verbessern, könnte untersucht werden, ob die minimalen Pfade bezüglich einer anderen Funktion als der \mathcal{L}_1 -Norm besser kontrahieren. Darüber hinaus könnte die lokale Bewegung dahingehend verändert werden, dass auch diagonale Sprünge erlaubt sind. Dadurch wird die Wahrscheinlichkeit für eine erfolgreiche Kopplung erhöht, sodass die Pfade stärker kontrahieren. Außerdem sollte dies die Mischzeit herabsetzen, da so größere Veränderungen innerhalb eines Zeitschrittes möglich sind.

5. Anwendung: Analyse der Entropie pro Teilchen

In diesem letzten Kapitel wollen wir die vorgestellten Verfahren anwenden, um die gesuchte Anzahl zulässiger Zustände zu untersuchen. Wir werden eine Näherung für eine direkte Formel herleiten und die Abhängigkeit von der Gittergröße und der Teilchenzahl analysieren.

Definition 5.1. Für $M, N, m \geq 1$ mit $A(M \times N, m) \geq 1$ sei

$$\alpha(M \times N, m) := \frac{\ln A(M \times N, m)}{m}$$

die *Entropie pro Teilchen*.

In Abbildung 5.1 sind für einige M und N die Werte von $\alpha(M \times N, m)$ aufgetragen, wie sie sich aus der exakten, kombinatorischen Methode ergeben. Qualitativ ist zu sehen, dass die Entropie pro Teilchen mit steigender Teilchenzahl abnimmt. Die genaue Art der Abhängigkeit von Teilchenzahl und Gittergröße ist aber nicht offensichtlich.

Um zu einem diesbezüglichen Ergebnis zu kommen, wollen wir eine direkte Formel für $\alpha(M \times N, m)$ angeben. Dies kann im Allgemeinen nur als Näherung geschehen. Im Falle eines eindimensionalen Gitters aber gilt der folgende Satz.

1-dimensionaler Fall

Satz 5.2. *Auf einem $M \times 1$ -Gitter mit periodischen Randbedingungen, m ununterscheidbaren Kugeln und Dichte $\rho = \frac{m}{M} \leq \frac{1}{2}$ gilt für die Anzahl $A(M \times 1, m)$ an zulässigen Konfigurationen*

$$A(M \times 1, m) = \frac{1}{1 - \rho} \binom{(1 - \rho)M}{\rho M}.$$

Beweis: Für gerades M und $m = M/2$ ist die Aussage direkt klar, da es in diesem Fall genau zwei Möglichkeiten gibt, das Gitter zu besetzen. Wir können also im Folgenden stets $m < M/2$ annehmen. Wir verwenden ein Vorgehen wie in [Heu08], Seite 50, die möglichen Konfigurationen durch Zahlenreihen zu kodieren. Dazu sei für eine Konfiguration $s \in \mathcal{S}^z$ und $\mathcal{C} = \{1, \dots, M\}$ die Menge

$$D_s := \{c \in \mathcal{C} \mid c \neq s(v) \text{ für alle } v \in \mathcal{V}\} = \{d_1, \dots, d_{M-m}\},$$

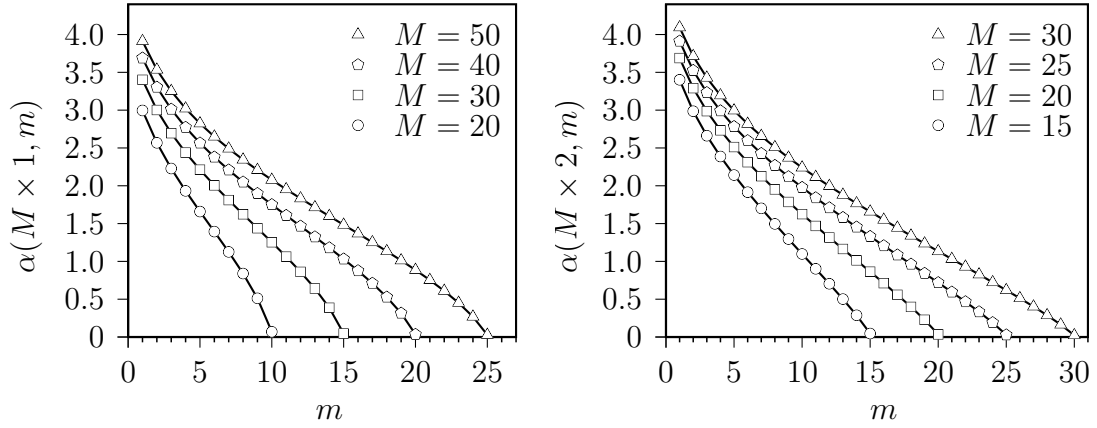


Abbildung 5.1.: $\alpha(M \times N, m)$, $N = 1, 2$, für verschiedene Werte von M

sodass $d_i < d_{i+1}$ für alle $1 \leq i \leq M - m - 1$, die Menge der Leerstellen auf dem Gitter. Auf ähnliche Weise numerieren wir die Teilchen $v_1, \dots, v_m \in \mathcal{V}$ in s , sodass $s(v_i) < s(v_{i+1})$ für alle $1 \leq i \leq m - 1$. Wie bisher sei \star die Äquivalenzrelation aus Gleichung (1.2). Es ist also $|\mathcal{S}^z / \star| = A(M \times 1, m)$. Damit definieren wir

$$F : \mathcal{S}^z / \star \longrightarrow \left\{ \omega \in \{0, 1\}^{M-m} \mid \sum_{i=1}^{M-m} \omega_i = m \right\}$$

$$s \mapsto (\omega_1, \dots, \omega_{M-m})$$

mit

$$\omega_i = \begin{cases} 0, & \text{falls } d_i \sim d_{i+1} \\ 1, & \text{falls } d_i \not\sim d_{i+1} \end{cases}$$

für alle $1 \leq i \leq M - m - 1$ und

$$\omega_{M-m} = \begin{cases} 0, & \text{falls } d_{M-m} \sim d_1 \\ 1, & \text{falls } d_{M-m} \not\sim d_1. \end{cases}$$

ω_i gibt also für jedes $1 \leq i \leq M - m$ die Anzahl an Kugeln zwischen zwei aufeinander folgenden Leerstellen an. F ist zwar surjektiv, da zu jeder solchen Zahlenkombination eine zulässige Konfiguration gefunden werden kann, aber leider nicht injektiv. Um dies einzusehen, betrachten wir die Menge

$$\mathfrak{J} := \left\{ s \in \mathcal{S}^z / \star \mid F(s) = (\omega_1, \dots, \omega_{M-m}) \text{ mit } \omega_{M-m} = 1 \right\}.$$

Für $s \in \mathfrak{J}$ ist die erste oder letzte Stelle des Gitters besetzt, da $d_{M-m} \not\sim d_1$. Sei $s_1 \in \mathfrak{J}$ mit besetzter erster Stelle und den Leerstellen

$$D_{s_1} = \{d_1 = 2, d_2, \dots, d_{M-m-1}, d_{M-m} = M\}.$$

Dann ist $s_1(v_1) = 1$ und wir definieren durch

$$s_2 := (s_1)_{v_1 \rightarrow M, v_i \rightarrow s_1(v_i)-1, 2 \leq i \leq m}$$

den aus der Verschiebung aller Teilchen um eine Position nach links resultierenden Zustand. Für diesen ist $D_{s_2} = \{d_1 - 1 = 1, d_2 - 1, \dots, d_{M-m} - 1\}$. Da

$$d_i - 1 \sim d_{i+1} - 1 \Leftrightarrow d_i \sim d_{i+1}$$

für alle $1 \leq i \leq M - m - 1$ und

$$d_{M-m} - 1 \sim d_1 - 1 \Leftrightarrow d_{M-m} \sim d_1$$

gilt, ist $F(s_2) = F(s_1)$. Ein Verschieben aller Kugeln um eine Position nach rechts führt dagegen zu einer anderen Zahlenkombination. Es sei $d_i, d_{i+1} = d_i + 1$ das kleinste Paar benachbarter Leerstellen, für die $d_i - 1$ besetzt ist. Da $m < M/2$ gilt, muss ein solches Paar existieren. Verschiebt man nun alle Kugeln um eine Position nach rechts, so erhält man die Leerstellen

$$e_1 = 1, \dots, e_i = d_i - 1, e_{i+1} = d_i + 1, \dots, e_{M-m}.$$

Für die neue Konfiguration s' gilt deshalb $e_i \approx e_{i+1}$ und damit $F(s_1) \neq F(s')$. Für alle $r \neq s_2$ ist also $F(r) \neq F(s_1)$. Es gibt in \mathfrak{J} somit jeweils zwei Konfigurationen, die auf dieselbe Zahlenreihe abgebildet werden. Für $r, s \notin \mathfrak{J}$ ist $F(r) \neq F(s)$, da für r und s jeweils die erste *und* die letzte Stelle des Gitters frei ist. Das Verschieben aller Teilchen nach rechts oder links führt dann dazu, dass sich einige Leerstellen auf andere Positionen verschieben, aber entweder die erste oder die letzte Gitterstelle weiterhin frei ist. Insgesamt ergibt dies

$$\begin{aligned} A(M \times 1, m) &= |\mathcal{S}^z / \star| = 2|F(\mathfrak{J})| + |F(\mathfrak{J}^c)| = |F(\mathcal{S}^z / \star)| + |F(\mathfrak{J})| \\ &= \left| \left\{ \omega \in \{0, 1\}^{M-m} \mid \sum_{i=1}^{M-m} \omega_i = m \right\} \right| \\ &\quad + \left| \left\{ \omega \in \{0, 1\}^{M-m} \mid \sum_{i=1}^{M-m} \omega_i = m, \omega_{M-m} = 1 \right\} \right| \\ &= \binom{M-m}{m} + |\{\omega \in \{0, 1\}^{M-m-1} \mid \sum_{i=1}^{M-m-1} \omega_i = m-1\}| \\ &= \binom{M-m}{m} + \binom{M-m-1}{m-1} \\ &= \frac{(M-m)! + (M-m-1)! m}{m!(M-2m)!} \\ &= \frac{M}{M-m} \binom{M-m}{m} = \frac{1}{1-\rho} \binom{(1-\rho)M}{\rho M}. \end{aligned}$$

□

Mit der Stirlingschen Näherung

$$\ln(k!) \approx k \ln(k) - k + 1/2 \ln(2\pi k),$$

angewandt auf den obigen Ausdruck, erhalten wir als gute Näherung für die Entropie

$$\begin{aligned} \alpha(M \times 1, m) &= \frac{\ln A(M \times 1, m)}{m} \\ &\approx \frac{1}{\rho M} \left(-\ln(1-\rho) + (1-\rho)M \ln((1-\rho)M) - (1-\rho)M \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \ln(2\pi(1-\rho)M) - \rho M \ln(\rho M) + \rho M - \frac{1}{2} \ln(2\pi\rho M) \right. \\ &\quad \left. - (1-2\rho)M \ln((1-2\rho)M) + (1-2\rho)M - \frac{1}{2} \ln(2\pi(1-2\rho)M) \right) \\ &= \frac{1}{\rho M} \left(M \ln \left(\frac{(1-\rho)^{1-\rho}}{\rho^\rho(1-2\rho)^{1-2\rho}} \right) - \frac{\ln M}{2} - \ln(\sqrt{2\pi\rho(1-\rho)(1-2\rho)}) \right) \\ &= \underbrace{\ln \left(\frac{(1-\rho)^{\frac{1}{\rho}-1}}{\rho(1-2\rho)^{\frac{1}{\rho}-2}} \right)}_{=:a(\rho)} + \underbrace{\left(-\frac{1}{2\rho} \right)}_{=:b(\rho)} \frac{\overbrace{\ln(2\pi\rho(1-2\rho)(1-\rho)M)}^{=:c(\rho)}}{M} \end{aligned} \quad (5.1)$$

Diese Darstellung führt zu zwei grundlegenden Eigenschaften von $\alpha(M \times 1, m)$: Erstens ist es bei festem ρ linear in $\frac{\ln(c(\rho)M)}{M}$ mit $c(\rho)$ wie oben. Zweitens gilt ebenfalls bei fester Dichte für große Gitter

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \alpha(M \times 1, \rho M) = a(\rho).$$

Ist dabei ρM nicht ganzzahlig, so setzen wir

$$\begin{aligned} \alpha(M \times 1, \rho M) &:= (\lceil \rho M \rceil - \rho M) \alpha(M \times 1, \lfloor \rho M \rfloor) + (\rho M - \lfloor \rho M \rfloor) \alpha(M \times 1, \lceil \rho M \rceil). \end{aligned} \quad (5.2)$$

Im Limes hängt die Entropie also von M und m nur noch über die Dichte ab. Dabei ist wegen (5.1)

$$|\alpha(M \times 1, \rho M) - a(\rho)| \simeq \frac{\ln(c(\rho)M)}{2\rho M}.$$

Für welche Werte von M diese Abweichung geringer als ε ist, kann für einige Kombinationen von ε und ρ in Tabelle 5.1 nachgelesen werden. Die hierfür kritische Gittergröße fällt mit steigender Dichte. Je größer also die Dichte ist, desto eher ist die absolute Gittergröße und Teilchenzahl für die Entropie irrelevant.

ε	$\rho = 0.25$	$\rho = 0.2$	$\rho = 0.15$	$\rho = 0.1$	$\rho = 0.05$
0.1	77	104	148	233	488
0.01	1334	1739	2402	3714	7625

Tabelle 5.1.: Liste der minimalen M , für die $|\alpha(M \times 1, \rho M) - a(\rho)| < \varepsilon$ bei gegebenem ρ und ε gilt.

2-dimensionaler Fall

Betrachten wir nun größere Gitter mit periodischen Randbedingungen. Wir wollen hier ein Analogon zu Gleichung (5.1) finden. Dazu bietet es sich wegen der geringeren Rechenzeit an, die numerische Methode zu verwenden. Ist der Stichprobenumfang n aus Gleichung (3.1) groß genug, so ist die Abweichung von den exakten Werten hinreichend klein. In Abbildung 5.2 ist die relative Differenz der kombinatorisch ($\alpha_{komb.}$) und der numerisch ($\alpha_{num.}$, $n \in \{100, 1000\}$) bestimmten Daten beispielhaft für ein 50×1 - und ein 30×2 -Gitter dargestellt.

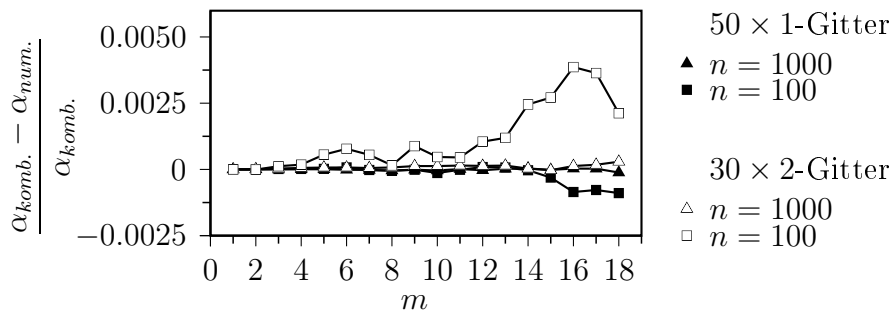


Abbildung 5.2.: Relative Differenz der kombinatorischen und numerischen Daten für verschiedene Gitter, jeweils mit $n \in \{100, 1000\}$.

Um eine direkte Formel für $\alpha(M \times N, m)$ zu bestimmen, wollen wir nun ein an die Virialentwicklung angelehntes Verfahren anwenden (siehe dazu Kapitel 4 in [HM86]). Bei diesem fassen wir im ersten Schritt die Teilchen als Punkte ohne Volumen auf und berücksichtigen ihr Eigenvolumen dann schrittweise immer stärker. Wir starten also mit der noch sehr schlechten Annahme, dass die m Kugeln unabhängig voneinander auf jeweils einen der MN Plätze gelegt werden. Dabei wird das Überlappungsverbot zunächst ignoriert - sowohl die Besetzung benachbarter Plätze wie auch die Mehrfachbesetzung eines Platzes sind zunächst erlaubt. Dadurch wird die Anzahl an zulässigen Zuständen natürlich überschätzt. Wir erhalten für $M, N, m \geq 1$

$$A(M \times N, m) \leq \frac{(MN)^m}{m!}$$

und damit für die Entropie pro Teilchen

$$\begin{aligned}
 \alpha(M \times N, \rho MN) &\leq \frac{\ln\left(\frac{(MN)^m}{m!}\right)}{m} \\
 &\approx \frac{m \ln(MN) - m \ln(m) + m - \frac{1}{2} \ln(2\pi m)}{m} \\
 &= \ln\left(\frac{e}{\rho}\right) - \frac{\ln(2\pi\rho MN)}{2\rho MN}. \tag{5.3}
 \end{aligned}$$

Um zu einer besseren Näherung zu kommen, berücksichtigen wir nun, dass jede Kugel ein nicht zu vernachlässigendes Eigenvolumen besitzt, was zu einem Ausschlussvolumen für die übrigen Teilchen führt. Gewisse Plätze sind deshalb nicht besetzbar.

In diesem zweiten Schritt verbieten wir die Plätze, auf denen die Kugeln selbst sitzen. Die Besetzung benachbarter Plätze ist weiterhin zugelassen. So erhalten wir

$$A(M \times N, m) \leq \binom{MN}{m}.$$

Unter Benutzung der auf der Stirlingschen Näherung basierenden Gleichung

$$\ln \binom{n}{k} \approx \ln \left(\frac{n^n}{k^k (n-k)^{n-k}} \right) - \frac{\ln(2\pi \frac{k}{n} (n-k))}{2} \tag{5.4}$$

ergibt sich für die Entropie pro Teilchen mit $\rho = \frac{m}{MN}$

$$\begin{aligned}
 \alpha(M \times N, \rho MN) &\leq \frac{\ln \binom{MN}{m}}{m} \\
 &\approx \frac{1}{m} \ln \left(\frac{MN^{MN}}{m^m (MN-m)^{MN-m}} \right) - \frac{\ln(2\pi\rho(MN-m))}{2\rho MN} \\
 &= \ln \left(\frac{1}{\rho(1-\rho)^{\frac{1}{\rho}-1}} \right) - \frac{\ln(2\pi\rho(1-\rho)MN)}{2\rho MN} \tag{5.5}
 \end{aligned}$$

für alle $M, N, m \geq 1$.

Tatsächlich müssen aber auch die zu den besetzten Plätzen benachbarten Stellen verboten werden, dies ist der dritte Schritt der Virialentwicklung. Die Anzahl an Nachbarplätzen eines Gitterplatzes wurde in Kapitel 1.1 als Δ definiert, für das hier $\Delta = 4$ gilt. Wir erhalten für ein $s \in \mathcal{S}^z$ mit m platzierten Teilchen

$$\left| \bigcup_{v \in \mathcal{V}} \{s(v)\} \cup \mathcal{N}(s(v)) \right| \leq 5m,$$

da einige Gitterplätze zu verschiedenen Teilchen benachbart sein können. Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} A(M \times N, m) &\geq \frac{MN(MN - 5) \cdot \dots \cdot (MN - 5(m - 1))}{m!} \\ &= 5^m \cdot \binom{\frac{MN}{5}}{m}, \end{aligned}$$

sowie wiederum unter Benutzung von Gleichung (5.4) für die Entropie pro Teilchen

$$\begin{aligned} \alpha(M \times N, m) &\geq \frac{\ln(5^m \cdot \binom{\frac{MN}{5}}{m})}{m} \\ &\approx \ln(5) + \frac{1}{m} \ln\left(\frac{\frac{MN}{5}^{\frac{MN}{5}}}{m^m (\frac{MN}{5} - m)^{\frac{MN}{5} - m}}\right) - \frac{\ln(2\pi \frac{5m}{MN} (\frac{MN}{5} - m))}{2m} \\ &= \ln\left(\frac{1}{\rho(1 - 5\rho)^{\frac{1}{5\rho} - 1}}\right) - \frac{\ln(2\pi\rho(1 - 5\rho)MN)}{2\rho MN}, \end{aligned} \quad (5.6)$$

falls $\rho < 5^{-1}$. Durch diese Formel wird die Anzahl der verfügbaren Plätze etwas unterschätzt, allerdings sollte dieser Effekt bei kleinen Dichten verschwindend gering sein. Genau das ist ersichtlich in Abbildung 5.3, in der $\alpha(10 \times 10, m)$ gegen m auf-

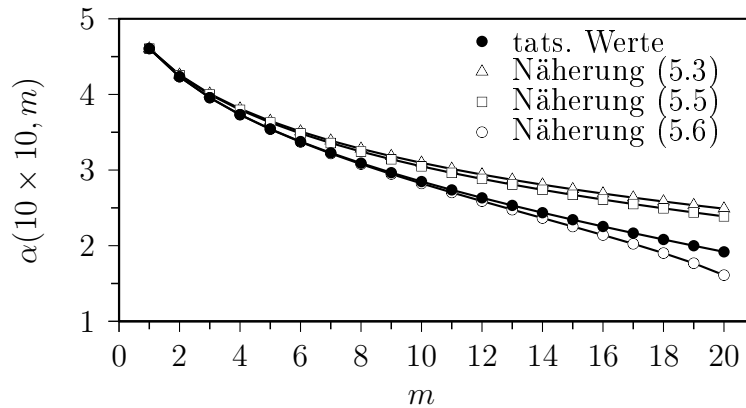


Abbildung 5.3.: $\alpha(10 \times 10, m)$

getragen ist. Zu sehen sind einmal die tatsächlichen Werte (\bullet), und zusätzlich die durch Näherung (5.3) (\triangle), durch Näherung (5.5) (\square) und durch Näherung (5.6) (\circ) bestimmten Werte. Die schrittweise Verbesserung dieser Näherungen ist deutlich zu sehen. Die erste Näherung ist sehr schlecht, wie es zu erwarten war. Die zweite Näherung ist bereits eine minimale Verbesserung der ersten. Die dritte Näherung

schließlich ist zumindest bis zu einer Dichte von 0.1 ($m = 10$) sehr genau. Danach wird α wie erwartet unterschätzt.

Vergleichen wir Gleichung (5.6) mit der Darstellung (5.1) für ein eindimensionales Gitter, so haben beide die Form

$$\alpha(M \times N, \rho MN) \approx a(\rho) + b(\rho) \frac{\ln(c(\rho)MN)}{MN}, \quad (5.7)$$

mit $b(\rho) = -(2\rho)^{-1}$. Die Koeffizienten $a(\rho)$ und $c(\rho)$ sind dabei allerdings verschieden. Es zeigt sich also, dass auch bei zweidimensionalen Gittern und hinreichend kleinen Dichten $\alpha(M \times N, \rho MN)$ linear in $\ln(c(\rho)MN)/(MN)$ ist. Es liegt die Vermutung nahe, dass dieses Verhalten auch für größere Dichten gilt. Um diese Vermutung mit unseren Daten zu untermauern, wählen wir für $M > 1$ und festes ρ bei quadratischen Gittern den folgenden Ansatz: Für jedes Tupel $(M - 1, M)$, $M \geq 2$, existieren von der Dichte ρ abhängige Konstanten $C_{M-1,M}$ und $A_{M-1,M}$, sodass diese zumindest für $\alpha((M - 1) \times (M - 1), \rho(M - 1)^2)$ und $\alpha(M \times M, \rho M^2)$ die richtigen Konstanten aus Gleichung (5.7) sind. Das heißt

$$\begin{aligned} \alpha(M, \rho) := \alpha(M \times M, \rho M^2) &= A_{M-1,M} - \frac{1}{2\rho} \frac{\ln C_{M-1,M} + 2 \ln M}{M^2} \\ \alpha(M - 1, \rho) &= A_{M-1,M} - \frac{1}{2\rho} \frac{\ln C_{M-1,M} + 2 \ln(M - 1)}{(M - 1)^2}. \end{aligned}$$

Für diese Konstanten ergibt sich dann

$$\begin{aligned} \alpha(M, \rho) + \frac{\ln C_{M-1,M} + 2 \ln M}{2\rho M^2} &= A_{M-1,M} \\ &= \alpha(M - 1, \rho) + \frac{\ln C_{M-1,M} + 2 \ln(M - 1)}{2\rho(M - 1)^2} \end{aligned}$$

und

$$\ln C_{M-1,M} := \frac{\alpha(M, \rho) - \alpha(M - 1, \rho) + \frac{\ln M}{\rho M^2} - \frac{\ln(M-1)}{\rho(M-1)^2}}{\frac{1}{2\rho(M-1)^2} - \frac{1}{2\rho M^2}}. \quad (5.8)$$

Mit den Daten von $\alpha(M, \rho)$ für verschiedene Werte von ρ bestimmen wir mit Gleichung (5.8) die Werte $C_{M-1,M}$. Deren arithmetisches Mittel definieren wir als das gesuchte $c(\rho)$. Hiermit wiederum lassen sich die Werte $A_{M-1,M}$ bestimmen, deren arithmetisches Mittel wir als das gesuchte $a(\rho)$ definieren. Da wir für kleine Dichten aufgrund von finite-size-Effekten ein stark irreguläres Verhalten erwarten, benutzen wir für diese Auswertung Datensätze mit $20 \leq M \leq 30$. Die für die Koeffizienten erhaltenen Werte sind in Abbildung 5.4 zu sehen (•).

Als geschlossene Form für die Koeffizienten $a(\rho)$ und $c(\rho)$ setzen wir in Anlehnung

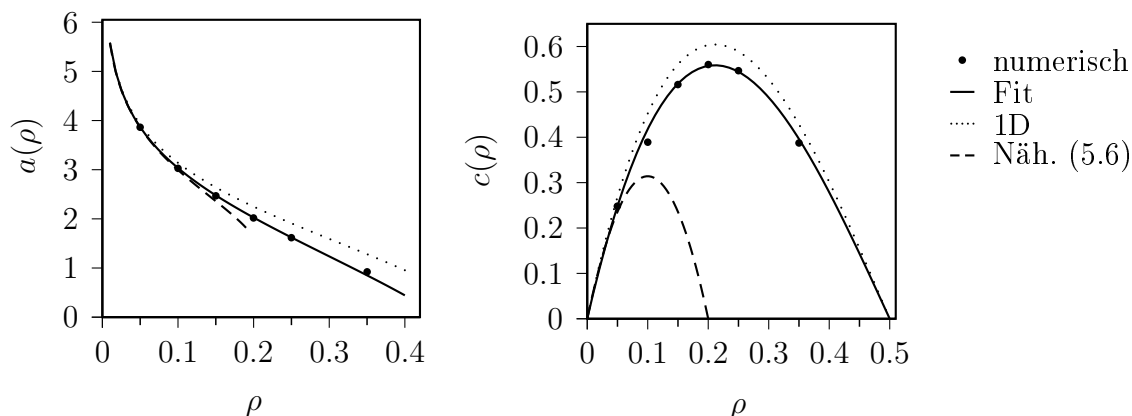


Abbildung 5.4.: Koeffizienten für Gleichung (5.7)

an ihre exakte Gestalt im 1-dimensionalen Fall

$$\begin{aligned}
 a(\rho) &= \ln \left(\frac{(1-\rho)^{\frac{1}{\rho}-E}}{\rho(1-2\rho)^{\frac{1}{\rho}-2}} \right) \\
 c(\rho) &= F \cdot \pi \rho (1-2\rho)(1-\rho)
 \end{aligned} \tag{5.9}$$

und erhalten

$$E = 0 \quad \text{und} \quad F = 1.8481$$

als Fitparameter. Die entsprechenden Graphen sind ebenfalls in Abbildung 5.4 zu sehen. Zum Vergleich enthalten die Abbildungen auch die Graphen für den eindimensionalen Fall, sowie diejenigen, die sich aus Näherung (5.6) ergeben. Es wird deutlich, dass die Näherung für den Koeffizienten $a(\rho)$ für Dichten bis zu 0,1 sehr gut ist. Die entsprechende Funktion ist aber nur für $\rho \in (0, 0.2)$ definiert. Für den Koeffizienten $c(\rho)$ ist die Abweichung schon deutlich eher sehr groß. Der Grund hierfür ist, dass der Fehler aus der Stirlingnäherung ebenfalls in diesem Koeffizienten auftaucht.

Um die Güte des obigen Ansatzes zu bestimmen, betrachten wir in Abbildung 5.5 die relative Differenz der tatsächlichen, mit dem numerischen Verfahren bestimmten Werte und der durch Gleichung (5.7) mit den gerade bestimmten Koeffizienten berechneten Werte für verschiedene Dichten. Die großen Abweichungen bei kleinen Dichten und kleinen Gittern resultieren daraus, dass für einen solchen Fall die Entropie grundsätzlich schwer zu definieren ist. Sofern $\rho M^2 < 1$ gilt, ergibt sich die Entropie pro Teilchen gemäß Gleichung (5.2) zum Teil aus der Entropie für $m = 0$ Teilchen, welche nicht definiert ist, und die wir auf Null setzen. Es verwundert also nicht, dass hier Abweichungen auftreten. Sobald aber $\rho M^2 \geq 1$ gilt, fallen die Kurven annähernd auf Null ab. Wir können daher ein

$$M_1^{krit} \simeq \frac{1}{\sqrt{\rho}}$$

definieren, sodass Gleichung (5.7) mit den obigen Koeffizienten für alle $M \geq M_1^{krit}$ gültig ist. Bemerkenswerterweise ist die kritische Gittergröße recht klein; bei den betrachteten Dichten treten bereits ab 5×5 -Gittern lediglich noch minimale statistischen Schwankungen auf. Dies bestätigt uns in dem oben gewählten Ansatz für $a(\rho)$ und $c(\rho)$.

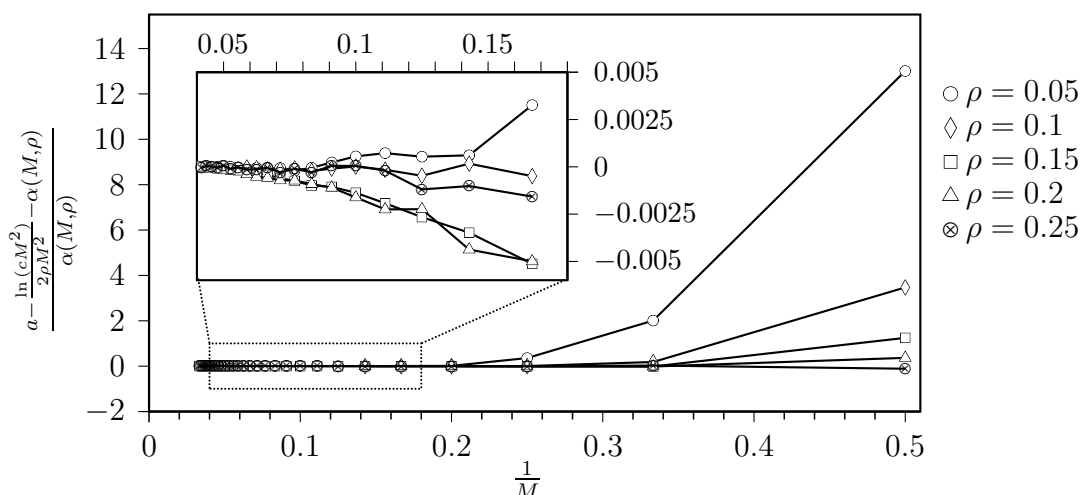


Abbildung 5.5.: Relative Differenz der gefitteten und tatsächlichen Werte in Abhängigkeit von M für verschiedene Dichten

Analog zum 1-dimensionalen Fall ergibt sich

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \alpha(M, \rho) = a(\rho)$$

für alle $\rho > 0$. Auch hier ist die Entropie pro Teilchen im Limes unendlich großer Gitter nur noch abhängig von der Dichte und für die Abweichung gilt

$$|\alpha(M \times M, \rho M^2) - a(\rho)| \simeq \frac{\ln(c(\rho)M^2)}{2\rho M^2}.$$

Tabelle 5.2 zeigt für einige Kombinationen von ε und ρ , für welche Werte von M^2 die obige Abweichung kleiner als ε ist. Diese kritischen Gittergrößen ähneln jeweils stark denjenigen im 1-dimensionalen Fall (Vergleiche Tabelle 5.1).

Fazit und Ausblick

Wir haben im Fall 1-dimensionaler Gitter durch Gleichung (5.1) für $M, m \geq 1$ und im Fall 2-dimensionaler Gitter durch die Gleichung

$$\alpha(M, \rho) = a(\rho) - \frac{1}{2\rho} \frac{\ln(c(\rho)M^2)}{M^2} \tag{5.10}$$

ε	$\rho = 0.25$	$\rho = 0.2$	$\rho = 0.15$	$\rho = 0.1$	$\rho = 0.05$
0.1	$9^2 = 81$	$11^2 = 121$	$12^2 = 144$	$16^2 = 256$	$22^2 = 484$
0.01	$37^2 = 1369$	$42^2 = 1764$	$49^2 = 2401$	$61^2 = 3721$	$87^2 = 7569$

Tabelle 5.2.: Liste der minimalen M^2 , für die $|\alpha(M \times M, \rho M^2) - a(\rho)| < \varepsilon$ bei gegebenem ρ und ε gilt.

für $M \geq M_1^{krit}$, $m \geq 1$ mit den Koeffizienten aus (5.9) eine geschlossene Form für die Entropie pro Teilchen herleiten können. Diese liefert explizit die Abhängigkeit der Entropie von der Gittergröße und der Teilchenzahl.

Das Verhalten der Entropie pro Teilchen muss also auf verschiedenen Regimes getrennt beschrieben werden. Sie verhält sich auf Gittern mit $M < M_1^{krit}$ qualitativ anders als auf Gittern mit $M \geq M_1^{krit}$. An Abbildung 5.5 ist dies gut zu erkennen. Auf diese Weise lässt sich ein finite-size-Effekt erster Ordnung charakterisieren. Es schließt sich ein Regime an, auf dem Gleichung (5.10) das Verhalten gut beschreibt. Die minimalen Abweichungen in Abbildung 5.5 resultieren aus statistischen Schwankungen des Stichprobenmittels, mit Hilfe dessen gemäß Kapitel 3 die Werte bestimmt wurden. In diesem Regime ist auch der zweite Term aus Gleichung (5.10) wichtig. Erst ab einer weiteren kritischen Gittergröße M_2^{krit} ist dieser vernachlässigbar. Hier können wir daher einen finite-size-Effekt zweiter Ordnung definieren. Bezüglich der beiden kritischen Gittergrößen ist zu sehen, dass M_2^{krit} genau wie M_1^{krit} mit fallender Dichte ansteigt.

Zurückkehrend zu der ursprünglichen Fragestellung nach der Anzahl A an Minima in der Energielandschaft eines Glasbildners können wir festhalten, dass sich diese für einen hinreichend großen Phasenraum und damit hinreichend großes M wie $\exp(a(\rho)m)$ verhält. Es ist dann

$$A\left(\frac{m}{\rho} \times \frac{m}{\rho}, \rho\right) = A\left(\frac{m}{2\rho} \times \frac{m}{2\rho}, \rho\right)^2,$$

was zeigt, dass hinreichend große Systeme in kleinere, unabhängige Teilsysteme aufgeteilt werden können. Es gibt also ganze Gruppen von Teilchen, die sich in ihrer Dynamik nicht gegenseitig beeinflussen. Diese Eigenschaft der *Faktorisierung* wird auch den Glasbildnern zugesprochen (siehe [Heu08], Abschnitt 3.1.2). Dass unsere Ergebnisse ebenfalls diese Eigenschaft aufweisen, spricht dafür, dass dieses einfache Modell tatsächlich geeignet ist, bestimmte Aspekte der Glasbildner zu beschreiben. Für kleineren Phasenraum dagegen haben wir mit $k_\rho := \exp(a(\rho))$ und $K_\rho(m) := c(\rho)M^2$

$$A\left(\frac{m}{\rho} \times \frac{m}{\rho}, \rho\right) = k_\rho^m K_\rho(m)^{-0.5},$$

was die Faktorisierungshypothese nicht erfüllt.

Abschließend noch einige Worte zur Verallgemeinerung auf den 3-dimensionalen Fall. Die oben vorgestellte Virialentwicklung ist problemlos auch für diese Gitter

anwendbar. Sei auf einem $L \times M \times N$ -Gitter mit m ununterscheidbaren Teilchen $A(L \times M \times N, m)$ die Anzahl zulässiger Zustände, $\alpha(L \times M \times N, m)$ wie im ein- und zweidimensionalen die Entropie pro Teilchen und $\rho = \frac{m}{LMN}$ die Dichte, so lautet der Gleichung (5.3) entsprechende Ausdruck

$$\begin{aligned}\alpha(L \times M \times N, m) &\leq \frac{\ln \left(\frac{(LMN)^m}{m!} \right)}{m} \\ &\approx \ln \left(\frac{e}{\rho} \right) - \frac{\ln(2\pi\rho LMN)}{2\rho LMN}.\end{aligned}$$

Werden jeweils die Plätze verboten, auf denen bereits ein Teilchen sitzt, so ergibt sich analog zu Gleichung (5.5)

$$\begin{aligned}\alpha(L \times M \times N, m) &\leq \frac{\ln \binom{LMN}{m}}{m} \\ &\approx \ln \left(\frac{1}{\rho(1-\rho)^{\frac{1}{\rho}-1}} \right) - \frac{\ln(2\pi\rho(1-\rho)LMN)}{2\rho LMN}.\end{aligned}$$

Im dritten Schritt werden wieder auch die Nachbarn eines besetzten Platzes verboten. Für ein 3-dimensionales Gitter mit periodischen Randbedingungen ist $\Delta = 6$, weshalb pro bereits gesetztem Teilchen maximal 7 Plätze verboten sind. Das Analogon von Gleichung (5.6) lautet daher

$$\begin{aligned}\alpha(L \times M \times N, m) &\leq \frac{\ln \left(7^m \binom{LMN}{m} \right)}{m} \\ &\approx \ln \left(\frac{1}{\rho(1-7\rho)^{\frac{1}{7\rho}-1}} \right) - \frac{\ln(2\pi\rho(1-7\rho)LMN)}{2\rho LMN}\end{aligned}$$

für $\rho < 7^{-1}$.

Wie in Abschnitt 3 erwähnt, ist die numerische Methode ebenfalls auf dreidimensionale Gitter erweiterbar. Es kann daher auch hier die Entropie pro Teilchen analog zu den oben gemachten Untersuchungen analysiert werden. Da wir auch bei den drei obigen Gleichungen die grundsätzliche Gestalt

$$\alpha(L \times M \times N, m) = a(\rho) + b(\rho) \frac{\ln(c(\rho)LMN)}{LMN}$$

mit $b(\rho) = -(2\rho)^{-1}$ vorliegen haben, erwarten wir qualitativ ähnliche Ergebnisse.

A. Anhang

Hier beweisen wir den in Abschnitt 4.3.2 benötigten Satz.

Satz A.1. *Betrachte im HC-Modell mit lokaler Teilchenbewegung auf $\mathcal{R} \subset \mathcal{S}^z$ und $N = 1$ eine allgemeine Kopplung minimaler Pfade $(X_n, Y_n, V_n)_{n \geq 0}$ von $(\mathbf{P}, \pi, \Gamma_{\mathcal{V}}, \Gamma_{\mathcal{C}})$. Weiter sei H' die in Definition 4.9 angegebene Metrik und $(Z_{n,i})_{n \geq 0, 0 \leq i \leq H'(X_n, Y_n)}$ gemäß (PK₄) definiert. Dann ist für alle $r, s \in \mathcal{R}$ mit $s = r_{w \rightarrow c}$ für ein $w \in \mathcal{V}, c \in \mathcal{C}$ und alle $n \geq 0, 1 \leq i \leq H'(X_n, Y_n)$*

$$E^{(i,r,s)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i})) = 1.$$

Beweis: Für jedes $n \geq 0$ sei $Z_{n,0} = X_n, \dots, Z_{n,h_n} = Y_n$ ein minimaler Pfad bezüglich H' in \mathcal{R} von X_n nach Y_n , $h_n := H'(X_n, Y_n)$. Für $Z_{n,i-1} = r$ und $Z_{n,i} = s = r_{w \rightarrow c}$ für geeignete $r, s \in \mathcal{R}, w \in \mathcal{V}$ und $c \in \mathcal{N}(r(w))$ ist mit Gleichung (4.13)

$$\begin{aligned} & P^{(i,r,s,v)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = 0) \\ &= P^{(i,r,s,w)}(C_{n,i-1} = C_{n,i})\delta_{vw} + P^{(i,r,s,v)}(C_{n,i-1} = s(w) \neq r(w) = C_{n,i})(1 - \delta_{vw}) \\ &= \left(1 - d_V(\Gamma_{\mathcal{C}}((r, w), \cdot), \Gamma_{\mathcal{C}}((s, w), \cdot))\right)\delta_{vw}, \end{aligned}$$

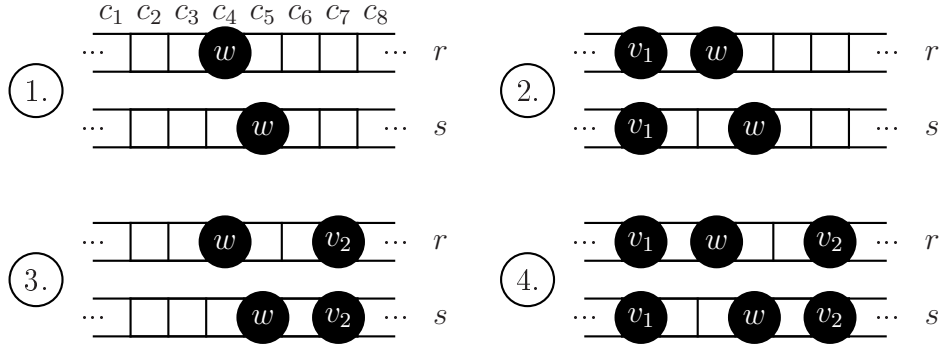
da kein $v \in \mathcal{V}, v \neq w$ existiert mit $r(v) \sim s(w)$ und $s(v) \sim r(w)$. Der Grund hierfür ist, dass aus $r(v) = s(v)$ sonst $s(v) \sim s(w)$ und $r(v) \sim r(w)$ folgen würde, was nicht zulässig ist. Unter nochmaliger Anwendung von Gleichung (4.13) ergibt sich daraus

$$\begin{aligned} & E^{(i,r,s,v)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i})) \\ &= \sum_{k=1}^3 k P^{(i,r,s,v)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = k) \\ &= 1 - P^{(i,r,s,v)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = 0) + P^{(i,r,s,v)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = 2) \\ &\quad + 2P^{(i,r,s,v)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i}) = 3) \\ &= 1 + \left(-1 + d_V(\Gamma_{\mathcal{C}}((r, w), \cdot), \Gamma_{\mathcal{C}}((s, w), \cdot))\right) \\ &\quad + P^{(i,r,s,w)}(C_{n,i-1} \not\stackrel{\neq}{\sim} C_{n,i}, \{C_{n,i-1} = r(w) \text{ oder } C_{n,i} = s(w)\}) \\ &\quad + 2P^{(i,r,s,w)}(C_{n,i-1} \not\stackrel{\neq}{\sim} C_{n,i}, C_{n,i-1} \neq r(w), C_{n,i} \neq s(w))\delta_{vw} \\ &\quad + \left(P^{(i,r,s,v)}(C_{n,i-1} \neq C_{n,i}, C_{n,i-1} \sim C_{n,i}) + 2P^{(i,r,s,v)}(C_{n,i-1} \not\stackrel{\neq}{\sim} C_{n,i})\right)(1 - \delta_{vw}) \end{aligned}$$

und weiter

$$\begin{aligned}
 E^{(i,r,s)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i})) &= 1 + \frac{1}{m} \left(-1 + d_V(\Gamma_{\mathcal{C}}((r, w), \cdot), \Gamma_{\mathcal{C}}((s, w), \cdot)) + P^{(i,r,s,w)}(C_{n,i-1} \not\approx C_{n,i}) \right. \\
 &\quad \left. + P^{(i,r,s,w)}(C_{n,i-1} \not\approx C_{n,i}, C_{n,i-1} \neq r(w), C_{n,i} \neq s(w)) \right) \\
 &\quad + \sum_{v \neq w} \frac{1}{m} \left(P^{(i,r,s,v)}(C_{n,i-1} \neq C_{n,i}) + P^{(i,r,s,v)}(C_{n,i-1} \not\approx C_{n,i}) \right).
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

Für $(Z_{n,i-1}, Z_{n,i}) = (r, s)$ mit $s = r_{w \rightarrow c}$ können die folgenden vier Fälle eintreten:



Die Kugeln $v \neq w$, welche nicht eingezeichnet sind, liegen in beiden Konfigurationen auf derselben Position, da sich r und s nur in einem Teilchen - dieses ist Teilchen w - unterscheiden. Ist in r oder s ein Nachbarplatz von Teilchen v unbesetzbar, so auch im jeweils anderen Zustand. Deshalb ist $\Gamma_{\mathcal{C}}((r, v), \cdot) = \Gamma_{\mathcal{C}}((s, v), \cdot)$ und somit $P^{(i,r,s,v)}(C_{n,i-1} \neq C_{n,i}) = 0$ für alle $v \notin \{w, v_1, v_2\}$.

Die betrachteten Gitterplätze seien jeweils von c_1 bis c_8 durchnummeriert ($c = c_5$). Es ergibt sich so für jeden der vier Fälle

$$\begin{aligned}
 d_V(\Gamma_{\mathcal{C}}((r, w), \cdot), \Gamma_{\mathcal{C}}((s, w), \cdot)) &= \Gamma_{\mathcal{C}}((r, w), \{c_3\}) + \Gamma_{\mathcal{C}}((r, w), \{c_4\}) - \Gamma_{\mathcal{C}}((s, w), \{c_4\}) \\
 &= 1 - \Gamma_{\mathcal{C}}((r, w), \{c_5\}) - \Gamma_{\mathcal{C}}((s, w), \{c_4\}) \\
 &= \frac{|\mathcal{C}| - 2}{|\mathcal{C}|}.
 \end{aligned}$$

Damit ist gemäß (PK4) mit

$$\alpha(r, s, v, c) := \frac{\Gamma_{\mathcal{C}}((r, v), \{c\}) \wedge \Gamma_{\mathcal{C}}((s, v), \{c\})}{\Gamma_{\mathcal{C}}((r, v), \{c\})},$$

für $v \in \mathcal{V}$ und $c \in \mathcal{C}$,

$$\begin{aligned} & P^{(r,r,s,w)}(C_{n,i-1} = c_j, C_{n,i} = c_k) \\ &= \Gamma_{\mathcal{C}}((r, w), \{c_j\}) \left(\alpha(r, s, w, c_j) \delta_{c_j c_k} \right. \\ & \quad \left. + \left((\Gamma_{\mathcal{C}}((r, w), \{c_k\}) - \Gamma_{\mathcal{C}}((s, w), \{c_k\})) \vee 0 \right) \frac{(1 - \alpha(r, s, w, c_j)) |\mathcal{C}|}{|\mathcal{C}| - 2} (1 - \delta_{vw}) \right) \end{aligned}$$

für $j, k \in \{1, \dots, 8\}$. Diese Wahrscheinlichkeiten sind in den folgenden Tabellen zusammengestellt.

		$C_{n,i}$		
		c_4	c_5	c_6
$C_{n,i-1}$	c_3	0	$\frac{ \mathcal{C} -3}{ \mathcal{C} (\mathcal{C} -2)}$	$\frac{1}{ \mathcal{C} (\mathcal{C} -2)}$
	c_4	$\frac{1}{ \mathcal{C} }$	$\frac{(\mathcal{C} -3)^2}{ \mathcal{C} (\mathcal{C} -2)}$	$\frac{ \mathcal{C} -3}{ \mathcal{C} (\mathcal{C} -2)}$
	c_5	0	$\frac{1}{ \mathcal{C} }$	0
	c_6	0	0	0

		$C_{n,i}$		
		c_4	c_5	c_6
$C_{n,i-1}$	c_3	0	0	0
	c_4	$\frac{1}{ \mathcal{C} }$	$\frac{ \mathcal{C} -3}{ \mathcal{C} }$	$\frac{1}{ \mathcal{C} }$
	c_5	0	$\frac{1}{ \mathcal{C} }$	0
	c_6	0	0	0

		$C_{n,i}$		
		c_4	c_5	c_6
$C_{n,i-1}$	c_3	0	$\frac{1}{ \mathcal{C} }$	0
	c_4	$\frac{1}{ \mathcal{C} }$	$\frac{ \mathcal{C} -3}{ \mathcal{C} }$	0
	c_5	0	$\frac{1}{ \mathcal{C} }$	0
	c_6	0	0	0

		$C_{n,i}$		
		c_4	c_5	c_6
$C_{n,i-1}$	c_3	0	0	0
	c_4	$\frac{1}{ \mathcal{C} }$	$\frac{ \mathcal{C} -2}{ \mathcal{C} }$	0
	c_5	0	$\frac{1}{ \mathcal{C} }$	0
	c_6	0	0	0

Mit Hilfe dieser Tabellen kann

$$P^{(i,r,s,w)}(C_{n,i-1} \not\stackrel{\neq}{=} C_{n,i}) = P^{(i,r,s,w)}\left((C_{n,i-1}, C_{n,i}) \in \{(c_3, c_5), (c_3, c_6), (c_4, c_6)\}\right)$$

und

$$\begin{aligned} & P^{(i,r,s,w)}\left(C_{n,i-1} \not\stackrel{\neq}{=} C_{n,i}, C_{n,i-1} \neq r(w), C_{n,i} \neq s(w)\right) \\ &= P^{(i,r,s,w)}\left((C_{n,i-1}, C_{n,i}) = (c_3, c_6)\right) \end{aligned}$$

abgelesen werden. Damit ist

$$P^{(i,r,s,w)}(C_{n,i-1} \not\stackrel{\neq}{=} C_{n,i}) = \begin{cases} \frac{2|\mathcal{C}|-5}{|\mathcal{C}|(|\mathcal{C}|-2)}, & \text{1. Fall} \\ \frac{1}{|\mathcal{C}|}, & \text{2. Fall} \\ \frac{1}{|\mathcal{C}|}, & \text{3. Fall} \\ 0, & \text{4. Fall} \end{cases}$$

sowie

$$P^{(i,r,s,w)}(C_{n,i-1} \not\approx C_{n,i}, \{C_{n,i-1} \neq r(w), C_{n,i} \neq s(w)\}) = \begin{cases} \frac{1}{|\mathcal{C}|(|\mathcal{C}|-2)}, & \text{1. Fall} \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Die Verteilung von $(C_{n,i-1}, C_{n,i})$, gegeben $V_n = v_1$ bzw. $V_n = v_2$, ergeben sich zu

		$C_{n,i}$					$C_{n,i}$		
	$V_n = v_1$	c_1	c_2	c_3		$V_n = v_2$	c_6	c_7	c_8
$C_{n,i-1}$	c_1	$\frac{1}{ \mathcal{C} }$	0	0		c_6	0	$\frac{1}{ \mathcal{C} }$	0
	c_2	0	$\frac{ \mathcal{C} -2}{ \mathcal{C} }$	$\frac{1}{ \mathcal{C} }$		c_7	0	$\frac{ \mathcal{C} -2}{ \mathcal{C} }$	0
	c_3	0	0	0		c_8	0	0	$\frac{1}{ \mathcal{C} }$

und damit

$$\begin{aligned} P^{(i,r,s,v)}(C_{n,i-1} \neq C_{n,i}) &= P^{(i,r,s,v)}(C_{n,i-1} = c_2, C_{n,i} = c_3)\delta_{vv_1} \\ &\quad + P^{(i,r,s,v)}(C_{n,i-1} = c_6, C_{n,i} = c_7)\delta_{vv_2} \\ P^{(i,r,s,v)}(C_{n,i-1} \not\approx C_{n,i}) &= 0 \end{aligned}$$

für alle $v \in \mathcal{V}$ mit $v \neq w$. Damit ergibt sich für die vier Fälle

$$P^{(i,r,s,v)}(C_{n,i-1} \neq C_{n,i}) = \begin{cases} 0, & \text{1. Fall} \\ \frac{1}{|\mathcal{C}|}\delta_{vv_1}, & \text{2. Fall} \\ \frac{1}{|\mathcal{C}|}\delta_{vv_2}, & \text{3. Fall} \\ \frac{1}{|\mathcal{C}|}(\delta_{vv_1} + \delta_{vv_2}), & \text{4. Fall.} \end{cases}$$

Dies alles führt mit Hilfe von Gleichung (A.1) zu

$$\begin{aligned} E^{(i,r,s)}(H'(Z'_{n,i-1}, Z'_{n,i})) &= 1 + \frac{1}{m} \left(-1 + \frac{|\mathcal{C}|-2}{|\mathcal{C}|} \right) + \begin{cases} \frac{2|\mathcal{C}|-5}{m|\mathcal{C}|(|\mathcal{C}|-2)} + \frac{1}{m|\mathcal{C}|(|\mathcal{C}|-2)}, & \text{1. Fall} \\ \frac{1}{m|\mathcal{C}|} + \frac{1}{m|\mathcal{C}|}, & \text{2. Fall} \\ \frac{1}{m|\mathcal{C}|} + \frac{1}{m|\mathcal{C}|}, & \text{3. Fall} \\ \frac{2}{m|\mathcal{C}|}, & \text{4. Fall} \end{cases} \\ &= 1 + \frac{1}{m} \left(-1 + \frac{|\mathcal{C}|-2}{|\mathcal{C}|} + \frac{2}{|\mathcal{C}|} \right) \\ &= 1 \end{aligned}$$

für alle $r, s \in \mathcal{R}$ mit $s = r_{w \rightarrow c}$, $w \in \mathcal{V}, c \in \mathcal{C}$ und alle $1 \leq i \leq H'(X_n, Y_n), n \geq 0$. \square

Literaturverzeichnis

- [Als05a] ALSMEYER, G.: *Stochastische Prozesse Teil 1*. 3. Auflage. Skripten zur Mathematischen Statistik Nr. 33, 2005
- [Als05b] ALSMEYER, G.: *Wahrscheinlichkeitstheorie*. 4. Auflage. Skripten zur Mathematischen Statistik Nr. 30, 2005
- [BD97] BUBLEY, R. ; DYER, M.: Path Coupling: a Technique for Proving Rapid Mixing in Markov Chains. In: *38th Annual Symposium on Foundations of Computer Science (1997)*, S. 223–231
- [FS02] FRENKEL, D. ; SMIT, B.: *Understanding Molecular Simulation*. 2. Edition. Academic Press, 2002
- [GW00] GÖPEL, W. ; WIEMHÖFER, H.-D.: *Statistische Thermodynamik*. Heidelberg, Berlin : Spektrum Akademischer Verlag GmbH, 2000
- [Heu08] HEUER, A.: Exploring the potential energy landscape of glass-forming systems: from inherent structures via metabasins to macroscopic transport. In: *J.Phys.:Condens. Matter* 20 (2008), S. 13,50
- [HM86] HANSEN, J.-P. ; MCDONALD, I.R.: *Theory of simple liquids*. 2. Edition. Academic Press, 1986
- [KMM03] KANNAN, R. ; MAHONEY, M. W. ; MONTENEGRO, R.: Rapid Mixing of Several Markov Chains for a Hard-Core Model. In: *14th Annual International Symposium on Algorithms and Computation (ISAAC) (2003)*, S. 663–675
- [MH92] MCQUISTAN, R.B. ; HOCK, J.L.: Composite nearest-neighbor degeneracies for several kinds of simple particles distributed on two-dimensional, square-cell lattices. In: *J.Math.Phys.* 33 (1992), Nr. 8, S. 2877–2883
- [Rie99] RIEDEL, E.: *Anorganische Chemie*. 4. Auflage. Berlin : de Gruyter, 1999
- [Ros95] ROSS, S. M.: *Stochastic Processes*. 2. Edition. John Wiley and Sons Inc., 1995

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich diese Diplomarbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die in der Literaturangabe aufgeführten Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

Münster, den 15. September 2009

Andrea Winkler