Markov-Ketten: Simulation von Gaspartikeln im Raum

Teilnehmer:

Eduard Cristian Fedorca	Herder-Gymnasium
Fabian Georgi	Andreas-Gymnasium
Lorenz Hufe	Käthe-Kollwitz-Gymnasium
John Huynh	Herder-Gymnasium
Alexander März	Heinrich-Hertz-Gymnasium
Thanh Loc Nguyen Hoang	Käthe-Kollwitz-Gymnasium
Jonas Rösener	Herder-Gymnasium
David Todorov	Andreas-Gymnasium

Gruppenleiter:

Thomas Grell, Humboldt-Universität zu Berlin
Stefan Korntreff, Humboldt-Universität zu Berlin

Motivation der Problemstellung

Um das Verhalten von Gaspartikeln mit nicht vernachlässigbarem Radius in einem Raum besser verstehen zu können, wird in der Physik ein *Hard-Core-Modell* verwendet. Dafür wird ein Teil des Raumes durch ein quaderförmiges Raster beschrieben, das aus kongruenten kleinen Würfeln besteht. Die Würfel stellen potentielle Aufenthaltsorte der Gaspartikel dar. Es wird angenommen, dass sich alle Gaspartikel in den Würfeln aufhalten und zwei benachbarte Würfel nicht zugleich Gaspartikel enthalten können. Eine Anordnung von Gaspartikeln im Würfel, die diesen Regeln entspricht, soll *zulässige Anordnung* heißen. Da die Gaspartikel sich bewegen und der Quader sich innerhalb der Gaswolke befindet, kann auch die Anzahl der Gaspartikel im Quader zu verschiedenen Zeitpunkten unterschiedlich sein. Die letzte Annahme des Hard-Core-Modells ist, dass die möglichen zulässigen Anordnungen von Gaspartikeln im Quader gleich verteilt sind. Zur Vereinfachung wird das Hard-Core Modell als Graph modelliert, in dem jeder Knoten einem Würfel entspricht, der genau dann durch eine Kante mit einem anderen Knoten verbunden ist, wenn die zugehörigen Würfel eine Fläche gemeinsam haben. Einem Knoten wird dann der Wert 1 zugeordnet, wenn er ein Gaspartikel enthält und eine 0, falls das nicht der Fall ist.

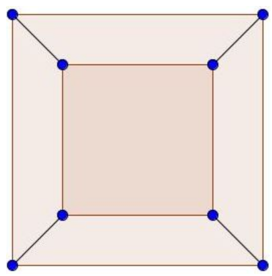
Wenn man nun den Erwartungswert der Anzahl der Gaspartikel in dem Quader bestimmen kann, dann kann man damit zum Beispiel die Dichte des Gases einschätzen. Nun ist die Berechnung des Erwartungswertes leider problematisch, denn es tauchen zwei Probleme auf:

- Die Bestimmung der Anzahl der möglichen zulässigen Anordnungen von Gaspartikeln für einen gegebenen Würfel ist nicht wirklich einfach.
- Die Berechnung des Erwartungswertes ist viel zu zeitaufwendig, sobald der Würfel größer als $8 \times 8 \times 8$ wird.

Das wird deutlich, wenn man sich das folgende Beispiel ansieht.

Beispiel 1.

Wie viele zulässige Anordnungen gibt es in einem $2 \times 2 \times 2$ Graph?



Betrachte den nebenstehenden Graphen, der aus der Plättung des Würfels entsteht.
Bezeichne die Knoten wie in der Abbildung und nenne v_1 bis v_4 die *inneren Knoten* und v_5 bis v_8 die *äußeren Knoten*. Sei G_i die Anzahl der erlaubten Konstellationen für i Partikel. Es ist $G_0 = 1$ und $G_1 = 8$.

Betrachte G_2. Es gibt drei Typen von erlaubten Konstellationen:

1. Genau zwei innere Knoten sind 1: Hierfür gibt es zwei nicht isomorphe Möglichkeiten, nämlich die Paare (v_1, v_3) und (v_2, v_4).
2. Genau zwei äußere Knoten sind 1: Hierfür gibt es zwei nicht isomorphe Möglichkeiten, die Paare (v_5, v_7) und (v_6, v_8).
3. Genau ein äußerer und ein innerer Knoten sind 1: Für jeden äußeren Knoten sind genau 3 innere Knoten erlaubt, bspw. zu v_5 die inneren Knoten v_2, v_3 und v_4. Somit ergeben sich $4 \cdot 3$ erlaubte Konstellationen für diesen Typ.

Es ist also $G_2 = 2 + 2 + 12 = 16$. Nun betrachte G_3, hier gibt es nur zwei Typen von erlaubten Konstellationen:

1. Genau zwei innere und ein äußerer Knoten sind 1: Für die beiden inneren Knoten gibt es zwei Konstellationen, die Paare (v_1, v_3) und (v_2, v_4). Für jedes dieser Paare gibt es nun je zwei erlaubte äußere Knoten, bspw. für (v_1, v_3) die äußeren Knoten v_6 und v_8. Somit ergeben sich $2 \cdot 2$ erlaubte Konstellationen für diesen Typ.

2. Genau zwei äußere und ein innerer Knoten sind 1: Man erhält analog $2 \cdot 2$ erlaubte Konstellationen für diesen Typ.

Somit gilt $G_3 = 4 + 4 = 8$ und es ist $G_4 = 2$. Es sind also 35 der möglichen $2^8 = 256$ Konstellationen erlaubt. Sei X eine Zufallsvariable mit Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(X = i) = \frac{G_i}{35}$. Dann gilt für den Erwartungswert

$$E(X) = \frac{0 \cdot 1 + 1 \cdot 8 + 2 \cdot 16 + 3 \cdot 8 + 4 \cdot 2}{35} = \frac{72}{35} \approx 2,057.$$

Grundlagen zu Markov Ketten

Eine Markov Kette ist ein besonderer stochastischer Prozess, der im zeithomogenen Fall keine innere Uhr besitzt.

Ein stochastischer Prozess X ist ein Prozess, in dem Zustände einer Zustandsmenge S nacheinander zufällig eintreten. X_1 steht dann für den als erstes eingetretenen Zustand, X_2 für den als zweites eingetretenen Zustand und so weiter. Die X_t mit $t \in \mathbb{N}$ sind damit als Positionen des stochastischen Prozesses X zu verstehen, zu denen Zustände der Zustandsmenge eintreten können. Ein stochastischer Prozess kann mit einem Zufallsgenerator simuliert werden, die dadurch entstandene Abfolge von Zuständen $(X_1, \cdots, X_n)$ heißt dann Stichprobe.

Definition 1. Sei die abzählbare Menge $S = \{i_1, i_2, \ldots\}$ die Zustandsmenge mit den Zuständen $i_1, i_2, \ldots$, die im stochastischen Prozess X eintreten können. Dann bilden die Zufallsvariablen $(X_t)_{t \in \mathbb{N}}$ mit Werten in S eine zeitdiskrete Markov Kette X, wenn für alle $n \in \mathbb{N}$, $1 \leqslant t_1 < t_2 < \ldots < t_{n+1} \in \mathbb{N}$ und $i_1, \ldots, i_n, i_{n+1} := j \in S$ mit $P(X_{t_1} = i_1, \ldots, X_{t_n} = i_n) > 0$ die Markov Eigenschaft (ME):

$$P\left(X_{t_{n+1}} = j \mid X_{t_1} = i_1, \ldots, X_{t_n} = i_n\right) = P\left(X_{t_{n+1}} = j \mid X_{t_n} = i_n\right)$$

erfüllt ist.

Die Markov Eigenschaft besagt, dass die Wahrscheinlichkeit des Eintretens eines Zustandes j in der Position $X_{t_{n+1}}$ nur vom zuletzt erreichten Zustand i in X_{t_n} abhängt. Ein mit Hilfe einer Markov Kette beschreibbarer stochastischer Prozess hat also nur ein kurzes Gedächtnis: Er erinnert nur den gegenwärtigen Zustand, nicht aber den Weg bis zu diesem Zustand.

Definition 2 (Übergangswahrscheinlichkeit und Übergangsmatrix)**.**

Für eine Markov Kette X mit $t_1 < t_2$ und $i, j \in S$ definiert

$$p_{ij}(t_1, t_2) := P(X_{t_2} = j \mid X_{t_1} = i)$$

die Übergangswahrscheinlichkeit. Sie gibt an, mit welcher Wahrscheinlichkeit zum Zeitpunkt t_2 der Zustand j erreicht wird, wenn man sich zum Zeitpunkt t_1 im Zustand i befindet. Im Fall $P(X_{t_1} = i) = 0$ kann $p_{ij}(t_1, t_2)$ eine beliebige Zahl zugeordnet werden. Die Übergangsmatrix ist dann folgendermaßen definiert:

$$P(t_1, t_2) = (p_{ij}(t_1, t_2))_{i,j \in S}.$$

Die Übergangsmatrix ist eine stochastische Matrix, mit $\sum_{j \in S} p_{ij}(t_1, t_2) = 1$ und $p_{ij}(t_1, t_2) \geq 0$ für alle $t_1, t_2 \in \mathbb{N}$ und $i \in S$.

Beispiel 2. Wir wollen ein System, das höchstens abzählbar viele Zustände annehmen kann, dadurch beschreiben, dass wir angeben, mit welcher Wahrscheinlichkeit es von einem Zustand in den anderen übergeht. Als Beispiel betrachten wir eine vereinfachte Beschreibung des Wetters an einem festgelegten Ort, wobei wir uns auf drei Zustände beschränken: $S = \{1, 2, 3\}$, die wir wie folgt interpretieren:

$$1 = \text{regnerisch}, \qquad 2 = \text{bewölkt}, \qquad 3 = \text{sonnig}.$$

Für die Wechsel zwischen den einzelnen Zuständen betrachten wir folgende Matrix:

	1	**2**	**3**
1	0,3	0,7	0
2	0,3	0,5	0,2
3	0,1	0,6	0,3

Die Matrix sagt uns, dass bspw. die Wahrscheinlichkeit, dass auf einen bewölkten Tag (Zustand 2) ein regnerischer Tag (Zustand 1) folgt, $p_{21} = 0,3$ ist. Die Einträge der Matrix sind relativ beliebig, jede 3×3-Matrix ist zulässig, solange sie zwei Bedingungen genügt:

- Da es sich um eine stochastische Matrix handelt, müssen alle Werte zwischen einschließlich 0 und 1 liegen.
- Da es sich außerdem um Wahrscheinlichkeiten für den folgenden Tag handelt und die Matrix alle möglichen Zustände beinhaltet, muss jede Zeilensumme 1 ergeben.

Um die Wahrscheinlichkeit zu ermitteln, dass es übermorgen regnet, wenn heute die Sonne scheint, müssen die Wahrscheinlichkeiten aller Pfade addiert werden. Es gilt:

$$\begin{aligned} P_{Sonne,Regen}(n, n+2) &= P_{Sonne,Regen}(n, n+1) \cdot P_{Regen,Regen}(n+1, n+2) \\ &\quad + P_{\text{Sonne, Bewölkt}}(n, n+1) \cdot P_{\text{Bewölkt, Regen}}(n+1, n+2) \\ &\quad + P_{Sonne,Sonne}(n, n+1) \cdot P_{Sonne,Regen}(n+1, n+2) \\ &= 0,1 \cdot 0,3 + 0,6 \cdot 0,3 + 0,3 \cdot 0,1 \\ &= 0,24. \end{aligned}$$

Berechnet man alle weiteren Wahrscheinlichkeiten, so erhält man die Matrix:

	1	**2**	**3**
1	0,3	0,56	0,14
2	0,26	0,58	0,16
3	0,24	0,55	0,21

Aufgrund des Rechenweges und der Ergebnisse ergibt sich die Vermutung, dass die Wahrscheinlichkeiten für übermorgen den Werten des Quadrats der Matrix entsprechen. Tatsächlich stimmt diese Vermutung, wegen der Chapman-Kologomorov Gleichung:
Für alle $t_1 < t_2 < t_3 \in \mathbb{N}$ gilt:

$$P(t_1, t_3) = P(t_1, t_2)\, P(t_2, t_3).$$

Definition 3. Die Übergangsmatrix und die Markov Kette werden dann zeithomogen genannt, wenn für alle $n, t \in \mathbb{N}$ gilt:

$$P(n, n+t) = P(1, 1+t).$$

Ist die Markov Kette zeithomogen, dann ist die Übergangswahrscheinlichkeit nicht mehr abhängig vom Zeitpunkt, die Markov Kette besitzt damit also keine innere Uhr. Die Übergangswahrscheinlichkeit nach n Schritten vom Zustand i zum Zustand j zu gelangen, kann im zeithomogenen Fall folgendermaßen definiert werden:

$$p_{ij}^{(n)} := P\left(X_{m+n} = j \mid X_m = i\right).$$

$p_{ij} := p_{ij}^{(1)}$ bezeichnet dann die Übergangswahrscheinlichkeit, in einem Schritt vom Zustand i zum Zustand j zu gelangen. Sei t nun ein beliebiger Zeitpunkt, dann ist die Übergangsmatrix durch

$$\Pi := P\left(t, t+1\right) = \left(p_{ij}\right)_{i,j \in S}$$

definiert. Die n-Schritt-Übergangsmatrix kann dann durch

$$\Pi^n = P\left(t, t+n\right) = \left(p_{ij}^{(n)}\right)_{i,j \in S}$$

angegeben werden. Es gilt dann mit der Chapman-Kolmogorov Gleichung:

$$\Pi^n = \underbrace{\Pi \cdot \Pi \cdot \ldots \cdot \Pi}_{n-mal}.$$

Definition 4. Die Verteilung $p = (p_{i_1}, p_{i_2}, \cdots)$ des Anfangszustandes X_0, heißt die Startverteilung der Markov Kette. Da S abzählbar ist, ist die diskrete Verteilung p eindeutig bestimmt durch $p_i = P\left(X_0 = i\right)$ mit $i \in S$.

Kennt man die Startverteilung p und die Übergangsmatrix Π einer zeithomogenen Markov Kette, so kann man die Verteilung von X_n berechnen:

$$P(X_n = i) = (p \cdot \Pi^n)_i.$$

Das ist jedoch nur bei Markov Ketten mit endlichem Zustandsraum S nützlich. Da sonst die Matrixmultiplikation schwer durchgeführt werden kann.

Beispiel 3. Betrachte die Zuwächse $Z_t \in \{+1, -1\}$ zum Zeitpunkt t, sei q die Wahrscheinlichkeit, dass $+1$ eintritt und $(1-q)$ die Wahrscheinlichkeit, dass -1 eintritt. Betrachte nun die Realisierung $X_{t+1} = X_t + Z_t$. Bei $X = (X_0, X_1, \ldots)$ handelt es sich damit um einen stochastischen Prozess mit Zuständen in $\mathbb{Z}$.

1. Es handelt sich hierbei um eine zeitdiskrete Markov Kette, da sie eine abzählbare Zustandsmenge besitzt und die Übergangswahrscheinlichkeiten von der Vorgeschichte des Prozesses unabhängig sind. Das bedeutet, dass die Wahrscheinlichkeiten, für den nächsten Zustand nur vom aktuellen Zustand, nicht aber von den vorherigen Zuständen abhängen. Zudem ist die Markov Kette zeithomogen, da es keine Rolle spielt, wann die Zuwächse eintreten.

2. Die Übergangsmatrix sieht dann wie folgt aus:

$$\begin{array}{c} \\ \vdots \\ n-1 \\ n \\ n+1 \\ \vdots \end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{ccccc} \cdots & n-1 & n & n+1 & \cdots \end{array} \\
\begin{pmatrix}
\ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \\
\cdots & 0 & q & 0 & \cdots \\
\cdots & 1-q & 0 & q & \cdots \\
\cdots & 0 & 1-q & 0 & \cdots \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots
\end{pmatrix}
\end{array}$$

3. Beispielhaft soll nun die Wahrscheinlichkeit berechnet werden, um nach 5 Schritten beginnend bei 0 auf der 3 zu enden.

$$P(X_5 = 3|X_0 = 0) = p_{03}^{(5)} = (1-q) \cdot q^4 \cdot 5$$

4. Verallgemeinert gilt die Formel

$$P(X_{t+n} = i|X_t = j) = (p_j \cdot \Pi^n)_i = \begin{cases} 0 & \text{für } n \text{ gerade, } (i-j) \text{ ungerade,} \\ 0 & \text{für } n \text{ ungerade, } (i-j) \text{ gerade,} \\ \binom{n}{\frac{n+i-j}{2}} \cdot q^{\frac{n+i-j}{2}} \cdot (1-q)^{\frac{n-i+j}{2}} & \text{sonst.} \end{cases}$$

Definition 5. Eine Verteilung $\pi = (\pi_{i_1}, \pi_{i_2}, \cdots)$ mit $i_1, i_2, \cdots \in S$, die $\pi \cdot \Pi = \pi$ erfüllt, heißt stationäre Verteilung.

Definition 6. Eine zeithomogene Markov Kette X heißt irreduzibel, wenn für alle $i, j \in S$ ein $n \in \mathbb{N}$ existiert, so dass $p_{ij}^{(n)} > 0$ gilt.

Definition 7. Eine zeithomogene Markov Kette X heißt aperiodisch, wenn für alle Zustände $i \in S$ gilt: $ggT\{n : p_{ii}^{(n)} > 0\} = 1$.

Beispiel 4.

$$\Pi = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0,3 & 0,2 & 0,5 \\ 0,4 & 0,5 & 0,1 \end{pmatrix}$$

Ist Π die Übergangsmatrix einer zeithomogenen Markow Kette X, dann ist X reduzibel und aperiodisch. Da $p_{11} = 1$ gibt es keine natürliche Schrittzahl, so dass man von Zustand 1 in Zustand 2 oder 3 mit positiver Wahrscheinlichkeit übergehen kann. X ist also nicht irreduzibel, sondern reduzibel. Da für jeden der drei Zustände, die Wahrscheinlichkeit, in diesem Zustand zu bleiben, positiv ist, ist X aperiodisch.

Beispiel 5.

$$\Pi = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Ist Π die Übergangsmatrix einer zeithomogenen Markow Kette X, dann ist X irreduzibel und periodisch. Jeder Zustand kann von jedem aus mit positiver Wahrscheinlichkeit in endlicher Schrittzahl erreicht werden, weshalb X irreduzibel ist. Jeder Zustand kann sich selbst nur in einer durch 3 teilbaren Schrittzahl mit positiver Wahrscheinlichkeit erreichen, weshalb X periodisch ist.

Satz 1. *Sei X eine zeithomogene Markov Kette mit endlicher Zustandsmenge S und $n \times n$-Übergangsmatrix Π mit Einträgen p_{ij} für alle $i, j \in S$. Eine Verteilung $v = (v_1, \ldots, v_n)$ ist eine stationäre Verteilung von X, wenn für alle Zustände $i, j \in S$ gilt:*

$$v_i p_{ij} = v_j p_{ji}. \tag{1}$$

Beweis:

Seien X und v wie im Satz gegeben. Es ist zu zeigen, dass v eine stantionäre Verteilung von X ist, d. h. dass gilt $v \cdot \Pi = v$. Dafür reicht es, für einen beliebigen Zustand $j \in \{1, \ldots, n\}$ zu zeigen, dass $(v \cdot \Pi)_j = v_j$. Sei also j beliebig gewählt, dann gilt:

$$(v \cdot \Pi)_j = \sum_{i=1}^{n} v_i \cdot p_{ij} =^{(??)} \sum_{i=1}^{n} v_j \cdot p_{ji} = v_j \cdot \sum_{i=1}^{n} p_{ji} = v_j \cdot 1.$$

Damit ist die Behauptung bewiesen. □

Das Langzeitverhalten zeithomogener, irreduzibler und aperiodischer Markov Ketten

Im Folgenden soll untersucht werden, wie sich die Einträge der Matrix Π^n verhalten, wenn n beliebig groß wird. Die Betrachtung von 3-, 4- und 5-Schritt-Übergangsmatrizen legt die Vermutung nahe, dass Π^n sich immer näher an eine Matrix annähert, bei der in jeder Zeile die stationäre Verteilung steht. Bevor wir uns dem Beweis dieser Aussage zuwenden, haben wir einige Hilfssätze zu zeigen.
Hierfür erinnern wir daran, dass der größte gemeinsame Teiler (ggT) einer endlichen Teilmenge $\{a_1, \dots, a_n\}$ der natürlichen Zahlen, induktiv über den ggT zweier natürlicher Zahlen erklärt ist:

$$ggT\{a_1, \dots, a_{n+1}\} := ggT(ggT\{a_1, \dots, a_n\}, a_{n+1}),$$

wobei $ggT(n, m)$ den ggT der natürlichen Zahlen n und m bezeichnet.

Lemma 1. *Sei $E_A = \{a_1, \dots, a_n\}$ eine endliche Teilmenge der natürlichen Zahlen. Der größte gemeinsame Teiler dieser Menge sei mit $ggT(E_A) = ggT\{a_1, \dots, a_n\}$ bezeichnet. Dann gibt es eine Darstellung*

$$ggT(E_A) = \sum_{k=1}^{n} b_k a_k, \text{ wobei } b_k \in \mathbb{Z} \text{ und } a_k \in E_A.$$

Beweis: Der Beweis erfolgt über vollständige Induktion.

- **Induktionsanfang** ($n = 2$): Entsprechend dem erweiterten euklidischen Algorithmus gibt es ganze Zahlen b_1, b_2, so dass $ggT(a_1, a_2) = b_1 a_1 + b_2 a_2$ gilt.
- **Induktionsvorraussetzung**: Für die n-elementige Menge $A_n := \{a_1, \dots, a_n\} \subset \mathbb{N}$ gelte:

$$\text{Es existieren } b_1, \dots, b_n \in \mathbb{Z} : ggT(A_n) = \sum_{k=1}^{n} b_k a_k.$$

- **Induktionsbehauptung**: Für die $(n+1)$-elementige Menge $A_{n+1} := \{a_1, \dots, a_{n+1}\} \subset \mathbb{N}$ gilt:

$$\text{Es existieren } c_1, \dots, c_n, c_{n+1} \in \mathbb{Z} : ggT(A_{n+1}) = \sum_{k=1}^{n+1} c_k a_k.$$

- **Induktionsschritt**:

$$\begin{aligned} ggT(A_{n+1}) = ggT\{a_1, \dots, a_n, a_{n+1}\} &= ggT\Big(ggT\{a_1, \dots, a_n\}, a_{n+1}\Big) \\ &=^{\mathrm{IV}} ggT\Big(\sum_{k=1}^{n} b_k a_k, a_{n+1}\Big). \end{aligned}$$

  Nach dem erweiterten euklidischen Algorithmus existieren ganze Zahlen x, y, so dass

$$ggT\Big(\sum_{k=1}^{n} b_k a_k, a_{n+1}\Big) = x \cdot \sum_{k=1}^{n} b_k a_k + y \cdot a_{n+1}.$$

  Mit $c_k := x \cdot b_k$ für alle $k \in \{1, \dots, n\}$ und $c_{n+1} := y$ folgt die Behauptung.

□

Lemma 2. *Sei $E_A = \{a_1, \dots, a_n\}$ eine endliche Teilmenge der natürlichen Zahlen mit $ggT(E_A) = 1$. Sei $A \subset \mathbb{N}$ eine aus E_A erzeugte Menge, die abgeschlossen bzgl. der Addition ist, d. h. für alle $a_i, a_j \in A$ gilt: $(a_i + a_j) \in A$. Dann gibt es ein $N_0 \in \mathbb{N}$, so dass $N_0 + n \in A$ für alle $n \in \mathbb{N}$.*

Beweis: Sei $E_A = \{a_1, a_2, \dots, a_n\} \subseteq A$ eine endliche Menge und A sei bezüglich der Addition abgeschlossen. Zu zeigen ist: Wenn $ggT(E_A) = 1$ gilt, dann gibt es ein $N_0 \in \mathbb{N}$, so dass $(N_0 + n) \in A$ für alle $n \in \mathbb{N}$.
Wenn $ggT(E_A) = 1$ gilt, gibt es $c_1, \dots, c_n \in \mathbb{Z}$ mit

$$\sum_{i=1}^{n} c_i \cdot a_i = 1.$$

Dann sei die Zahl N die Summe aller $\mid c_i \cdot a_i \mid$, für die $c_i < 0$ gilt. Und die Zahl P die Summe aller $c_i \cdot a_i$, für die $c_i \geq 0$ gilt. P und N sind Elemente von A, da sie aus der Addition endlich vieler Elemente von A gebildet werden. Außerdem gilt $P - N = 1$. Betrachte nun eine Zahl $n \geq (N-1)(N+1) =: N_0$. Es soll gezeigt werden, dass jede Zahl, die größer als N_0 ist, ein Element aus A ist. Dazu betrachte die Darstellung von n mit $n = a \cdot N + r$ mit $r \in \{0, 1, \dots, N-1\}$, die sich aus der Division mit Rest von n durch N ergibt.
Es gilt dann $n = a \cdot N + 1 \cdot r = a \cdot N + (P - N) \cdot r = (a - r) \cdot N + r \cdot P$. Ist nun $a \geq r$, so ist n ein Element aus A, weil es aus der Addition endlich vieler Elemente aus A gebildet werden kann. Angenommen, es würde $a < r$ gelten, dann könnte die folgende Abschätzung für n getroffen werden:

$$n = a \cdot N + r < (N-1)N + (N-1) = (N-1)(N+1) = N_0.$$

Dies widerspricht nun aber gerade der Wahl von n. Damit muss $a \geq r$ gelten und die Behauptung ist bewiesen. $\square$

Satz 2. *Ist $X = (X_0, X_1, \dots)$ eine zeithomogene Markov Kette mit endlicher Zustandsmenge S und aperiodisch, so gibt es für jedes $i \in S$ ein $N_0^{(i)} \in \mathbb{N}$, so dass $p_{ii}^{(n)} > 0$ für alle $n \geq N_0^{(i)}$ gilt.*

Beweis: Sei $i \in S$ beliebig gewählt und sei $A_i := \{n \in \mathbb{N} : p_{ii}^{(n)} > 0\}$. Dann gilt aufgrund der Aperiodizität der Markov Kette, dass $ggT(A_i) = 1$. Nach Lemma **??** muss nur noch gezeigt werden, dass A_i abgeschlossen bezüglich der Addition ist. Seien dafür $m, k \in A_i$ beliebig gewählt. Nach Vorraussetzung gilt dann $p_{ii}^{(m)}, p_{ii}^{(k)} > 0$ und damit: $p_{ii}^{(m+k)} = \sum\limits_{j \in S} p_{ij}^{(m)} \cdot p_{ji}^{(k)} \geq p_{ii}^{(m)} \cdot p_{ii}^{(k)} > 0.$ $\square$

Satz 3. *Sei $X = (X_0, X_1, \dots)$ eine zeithomogene, irreduzible und aperiodische Markov Kette mit endlichem Zustandsraum S und Übergangsmatrix Π. Dann existiert ein $N_0 \in \mathbb{N}$, so dass $p_{ij}^{(N_0+n)} > 0$ für alle Zustände $i, j \in S$ und alle $n \in \mathbb{N}$.*

Beweis: X ist zeithomogen und aperiodisch, daher gibt es nach Satz **??** für jeden Zustand $j \in S$ ein $N_0^{(j)} \in \mathbb{N}$, so dass $p_{jj}^{(N_0^{(j)}+n)} > 0$ für alle $n \in \mathbb{N}$. Aufgrund der Irreduzibilität von X gibt es zudem für alle Zustandspaare $(i, j) \in S^2$ ein $N_{ij} \in \mathbb{N}$, so dass $p_{ij}^{(N_{ij})} > 0$. Sei $N_0 := \max\{N_{ij} + N_0^{(j)} : i, j \in S\}$. Wähle $n \in \mathbb{N}$ beliebig und definiere $n_{ij}^* := N_0 - N_{ij} - N_0^{(j)} + n$. Damit gilt insbesondere $n_{ij}^* \geq n$. Es folgt:

$$p_{ij}^{(N_0+n)} = \sum_{k \in S} p_{ik}^{(N_{ij})} \cdot p_{kj}^{(N_0^{(j)}+n_{ij}^*)} \geq p_{ij}^{(N_{ij})} \cdot p_{jj}^{(N_0^{(j)}+n_{ij}^*)} > 0.$$

$\square$

Satz 4. *Für eine zeithomogene, irreduzible und aperiodische Markov Kette X mit endlichem Zustandsraum S, Übergangsmatrix Π und stationärer Verteilung π gilt:*

1. *Es existiert der Grenzwert $\lim\limits_{n \to \infty} \Pi^n =: M$.*
2. *Für die Grenzmatrix M gilt: In jeder Spalte j sind die Einträge M_{ij} in jeder Zeile $i \in S$ gleich und M ist eine stochastische Matrix.*

3. $\pi M = \pi$.

4. *π ist eindeutig und die Markov Kette konvergiert für jede Anfangsverteilung gegen die stationäre Verteilung π.*

Beweis: Betrachte eine beliebige Spalte j, dann definiere die Folgen

$$Max_n := max \left\{ p_{ij}^{(n)} : i \in S \right\} \text{ und } Min_n := \left\{ p_{ij}^{(n)} : i \in S \right\}.$$

Dann gilt:

$$Max_{n+1} = \underset{i \in S}{max} \left\{ \sum_{k \in S} p_{ik} p_{kj}^{(n)} \right\} \leq \underset{i \in S}{max} \left\{ Max_n \sum_{k \in S} p_{ik} \right\} = \underset{i \in S}{max} \{Max_n\} = Max_n,$$
$$Min_{n+1} = \underset{i \in S}{min} \left\{ \sum_{k \in S} p_{ik} p_{kj}^{(n)} \right\} \geq \underset{i \in S}{min} \left\{ Min_n \sum_{k \in S} p_{ik} \right\} = \underset{i \in S}{min} \{Min_n\} = Min_n.$$

Also sind die Folgen $(Max_n)_{n \in \mathbb{N}}$ und $(Min_n)_{n \in \mathbb{N}}$ monoton fallend bzw. monoton steigend und natürlich beschränkt. Daraus folgt, dass die Grenzwerte $Max := \lim_{n \to \infty} Max_n$ und $Min := \lim_{n \to \infty} Min_n$ existieren. Mit $Max = Min$, würden die Punkte 1. und 2. folgen.
Betrachte also das Grenzverhalten der Folge $(Max_n - Min_n)_{n \in \mathbb{N}}$. Nach Satz **??** gibt es eine Zahl $N_0 \in \mathbb{N}$, so dass $p_{ij}^{(N+n)} > 0$ für alle $n \in \mathbb{N}$ und alle Zustände $i, j \in S$ gilt. Damit gilt für jedes $n \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned} Max_{n+N} - Min_{n+N} &= \underset{i \in S}{max} \left\{ \sum_{k \in S} p_{ik}^{(N)} p_{kj}^{(n)} \right\} - \underset{i \in S}{min} \left\{ \sum_{k \in S} p_{ik}^{(N)} p_{kj}^{(n)} \right\} \\ &= \underset{i_1, i_2 \in S}{max} \left\{ \sum_{k \in S} p_{i_1 k}^{(N)} p_{kj}^{(n)} - \sum_{k \in S} p_{i_2 k}^{(N)} p_{kj}^{(n)} \right\}. \end{aligned}$$

Wir definieren $p_{mj}^{(n)} = Min_n$ und $p_{Mj}^{(n)} = Max_n$. Damit ergibt sich:

$$\begin{aligned} Max_{n+N} - Min_{n+N} &= \underset{i_1, i_2 \in S}{max} \left\{ \sum_{k \in S} p_{i_1 k}^{(N)} p_{kj}^{(n)} - \sum_{k \in S} p_{i_2 k}^{(N)} p_{kj}^{(n)} \right\} \\ &= \underset{i_1, i_2 \in S}{max} \left\{ \sum_{k \in S, k \neq m} p_{i_1 k}^{(N)} p_{kj}^{(n)} + p_{i_1 m}^{(N)} Min_n - \sum_{k \in S, k \neq M} p_{i_2 k}^{(N)} p_{kj}^{(n)} - p_{i_1 M}^{(N)} Max_n \right\} \\ &\leq \underset{i_1, i_2 \in S}{max} \left\{ Max_n \sum_{k \in S, k \neq m} p_{i_1 k}^{(N)} + p_{i_1 m}^{(N)} Min_n - Min_n \sum_{k \in S, k \neq M} p_{i_2 k}^{(N)} - p_{i_2 M}^{(N)} Max_n \right\} \\ &= Max_n + \underset{i \in S}{max} \left(Min_n - Max_n\right) p_{im}^{(N)} - Min_n - \underset{i \in S}{min} \left(Max_n - Min_n\right) p_{iM}^{(N)} \\ &\leq Max_n - Min_n - 2 \left(Max_n - Min_n\right) \underset{i,j \in S}{min}\, p_{ij}^{(N)} \\ &= \left(Max_n - Min_n\right) \left(1 - 2 \underset{i,j \in S}{min}\, p_{ij}^{(N)}\right). \end{aligned}$$

Nun ist aber für jedes $n \in \mathbb{N}$ die Matrix Π^n eine stochastische Matrix und damit gilt: $\sum_{j \in S} p_{ij}^{(N)} = 1$. Daraus folgt jedoch zwingend $0 < \underset{i,j \in S}{min}\, p_{ij}^{(N)} \leq 0,5$. Und damit folgt mit $\left(1 - 2 \underset{i,j \in S}{min}\, p_{ij}^{(N)}\right) =: q \in (0, 1)$:

$$\lim_{k \to \infty} Max_{kN} - Min_{kN} = \lim_{k \to \infty} \left(Max_1 - Min_1\right) q^k = 0. \tag{2}$$

Für alle $j \in S$ gibt es also ein p_j, so dass für alle $i \in S$ $\lim_{n\to\infty} p_{ij}^{(n)} = p_j$ gilt. Für eine beliebige Zeile der Grenzmatrix M gilt dann $\sum\limits_{j\in S} p_j = \sum\limits_{j\in S} \lim\limits_{n\to\infty} p_{ij}^{(n)} = \lim\limits_{n\to\infty} \sum\limits_{j\in S} p_{ij}^{(n)} = 1$. Damit ist 1. und 2. gezeigt und 3. folgt direkt aus der Existenz von M durch $\pi M = \lim\limits_{n\to\infty} \pi \Pi^n = \pi$. Damit gilt dann auch:

$$\pi_j = (\pi M)_j = \sum_{i\in S} \pi_i \left(\lim_{n\to\infty} p_{ij}^{(n)} \right) = \sum_{i\in S} \pi_i p_j = p_j \sum_{i\in S} \pi_i = p_j.$$

Damit bestehen die Zeilen der Grenzmatrix M alle aus dem transponierten Vektor der stationären Verteilung π, insbesondere ist π dann auch eindeutig. Ist v eine beliebige Anfangsverteilung so gilt:

$$(vM)_j = \sum_{i\in S} v_i \pi_j = \pi_j.$$

Damit konvergiert also jede Anfangsverteilung gegen die stationäre Verteilung π.

$\square$

Ein Algorithmus zur Lösung des Problems

Die Schritte der Iteration im Algorithmus sind die folgenden:

- Bestimme zufällig einen Knoten k im Graph des Hard Core Modells.
- Wirf eine faire Münze. Wenn *Kopf* fällt und kein Nachbarknoten den Wert 1 besitzt, dann trage in dem Knoten k eine 1 ein. Ansonsten trage eine 0 ein.
- Alle anderen Knoten des Graphen behalten ihren Wert.

Werden die Zustände X_t durch eine Iteration der obigen Beschreibung erzeugt, dann ist der sich daraus ergebende stochastische Prozess eine zeithomogene, irreduzible und aperiodische Markov Kette mit der Gleichverteilung als stationäre Verteilung π.

Begründung:

- Zur Zeithomogenität: Das Interationsverfahren ändert sich nicht in Abhängigkeit vom Iterationsschritt, daher ist die Markov Kette $X = (X_1, X_2, \ldots)$ zeithomogen.
- Zur Irreduzibilität: In jedem Schritt der Iteration ist die Wahrscheinlichkeit, dass aus einer gegebenen zulässigen Anordnung, die mindestens eine 1 enthält, eine 1 verschwindet, positiv. So gibt es auch eine positive Wahrscheinlichkeit, dass jede zulässige Anordnung nach endlich vielen Schritten in die Anordnung mit keiner einzigen 1 übergeht. Ebenso verhält es sich auch mit dem Hinzufügen einer 1 zu einer zulässigen Anordnung, die noch nicht die maximale Anzahl von 1-en enthält. Damit kann jeder Zustand in jeden Zustand mit einer positiven Wahrscheinlichkeit und in endlich vielen Schritten übergehen. Somit ist die Markov Kette irreduzibel.
- Zur Aperiodizität: Jede zulässige Anordnung kann mit einer positiven Wahrscheinlichkeit in einem Schritt wieder eintreffen. Damit ist jeder Zustand aperiodisch und damit auch die Markov Kette.
- Zur stationären Verteilung: Es soll gezeigt werden, dass die Gleichverteilung π die stationäre Verteilung der zeithomogenen, irreduziblen und aperiodischen Markov Kette $X = (X_1, X_2, \ldots)$ ist. Nach Satz **??** des Kapitels 2 ist lediglich zu zeigen, dass $\pi_i p_{ij} = \pi_j p_{ji}$ für alle Zustände i, j gilt. Da π gleichverteilt sein soll, haben wir also nur $p_{ij} = p_{ji}$ für alle Zustände i, j zu zeigen. Sei $K_{ij} \in \mathbb{N}$ die Anzahl der Knoten im Graphen, in denen sich i und j unterscheiden. Wir betrachten die folgenden drei Fälle:

- Fall 1 [$K_{ij} > 1$]: i und j unterscheiden sich also in mehr als einem Knoten. Nach der obigen Iterationsvorschrift ändert sich in jedem Interationsschritt aber maximal ein Knoten. Daher ist es nicht möglich, in einem Schritt von Zustand i zu j bzw. von j zu i überzugehen, also gilt: $p_{ij} = 0 = p_{ji}$.
- Fall 2 [$K_{ij} = 0$]: Die Zustände i und j sind identisch, weshalb $p_{ij} = p_{ji}$ gilt.
- Fall 3 [$K_{ij} = 1$]: i und j unterscheidet sich in genau einem Knoten. Sei m die Anzahl der Knoten im Graphen des Hard Core Modells, dann gilt: $p_{ij} = \frac{1}{m} \cdot \frac{1}{2} = p_{ji}$.

Nach Satz **??** des 3. Kapitels ist die Gleichverteilung π eindeutig und die Markov Kette $X = (X_1, X_2, \ldots)$ konvergiert für jede beliebige Startverteilung v gegen diese Gleichverteilung. Man kann mit Hilfe der Ergodentheorie zeigen, dass dann der Algorihmus eine Simulation des Erwartungswertes der Gleichverteilung liefert.
Unser eingangs gestelltes Problem lösen wir nun folgendermaßen: Jeder Iterationsschritt gibt uns eine zulässige Anordnung X_k des Hard-Core-Modell aus. Sei mit $\eta(X_k)$ die Anzahl der 1-en der zulässigen Anordnung X_k bezeichnet und mit $Y_k = \eta(X_k)$ eine entsprechende Zufallsvariable. Sei $Y = \eta(X)$, wobei X gleichverteilt ist und alle Zustände der Markov-Kette annehmen kann. Dann nähert sich das arithmetische Mittel $\overline{Y_n} = \frac{1}{n} \sum\limits_{k=1}^{n} Y_k$ für großes n dem Erwartungswert $E(Y)$.
Jede aperiodische und irreduzible Markov-Kette ist ergodisch und daher kann für solch eine Markov-Kette der Ergodensatz angewendet werden. Dieser stellt eine Art Gesetz der Großen Zahlen für abhängige stochastische Prozesse dar. Die Ergodentheorie alleine hätte jedoch schon die Woche gefüllt und so wurde sie nicht thematisiert. Tatschlich kann auch ohne Ergodentheorie die Gültigkeit des Gesetz der Großen Zahlen nachgewiesen werden. Das haben wir jedoch leider nicht mehr geschafft.