

# 1 Markoff-Ketten

## 1.1 Definition und Beispiele

In der Stochastik haben wir uns hauptsächlich mit unabhängigen Ereignissen und unabhängigen Zufallsgrößen beschäftigt. *Andrej Andrejewitsch Markoff* (1856–1922) hat erstmalig in einer Arbeit 1906 Zufallsexperimente analysiert, bei denen die einfachste Verallgemeinerung der unabhängigen Versuchsfolge betrachtet wurde. Man spricht bei diesen Versuchsfolgen heute von Markoff-Ketten. Wir werden sehen, dass sehr viele Modelle Markoff-Ketten sind. Man kann sie anschaulich wie folgt beschreiben: Ein Teilchen bewegt sich in diskreter Zeit auf einer höchstens abzählbaren Menge  $I$ . Befindet es sich auf einem Platz  $i \in I$ , so wechselt es mit gewissen Wahrscheinlichkeiten (die von  $i$  abhängen) zu einem anderen Platz  $j \in I$ . Diese Übergangswahrscheinlichkeiten hängen aber nicht weiter von der „Vorgeschichte“ ab, das heißt von dem Weg, auf dem das Teilchen zum Platz  $i$  gekommen ist.

**Definition 1.1** *Es sei  $I$  eine nichtleere, höchstens abzählbare Menge. Eine Matrix  $\mathbb{P} = (p_{ij})_{i,j \in I}$  heißt stochastische Matrix (stochastic matrix), wenn  $p_{ij} \in [0, 1]$  für alle  $i, j \in I$  und  $\sum_{j \in I} p_{ij} = 1$  für alle  $i \in I$  gelten. Die Komponenten  $p_{ij}$  heißen Übergangswahrscheinlichkeiten (transition probabilities). Eine stochastische Matrix wird im Zusammenhang mit Markoff-Ketten auch Übergangsmatrix (transition matrix) genannt. Eine auf einem Grundraum  $(\Omega, \mathcal{F}, P)$  definierte Zufallsgröße  $X : \Omega \rightarrow I$  nennt man  $I$ -wertige Zufallsgröße.*

**Definition 1.2** *Eine endlich oder unendlich lange Folge  $X_0, X_1, X_2, \dots$   $I$ -wertiger Zufallsgrößen heißt (zeitlich homogene, time homogeneous) Markoff-Kette (Markov chain) mit stochastischer Matrix  $\mathbb{P}$ , wenn für alle  $n \geq 0$  und alle  $i_0, i_1, \dots, i_n, i_{n+1} \in I$  mit  $P(X_0 = i_0, \dots, X_n = i_n) > 0$*

$$P(X_{n+1} = i_{n+1} \mid X_0 = i_0, X_1 = i_1, \dots, X_n = i_n) = p_{i_n i_{n+1}}$$

*gilt.*

*Die Startverteilung (initial distribution)  $\nu$  einer Markoff-Kette ist definiert durch  $\nu(i) = P(X_0 = i)$  für alle  $i \in I$ . Oft schreibt man  $P_\nu$ , um die Startverteilung zu betonen. Ist die Startverteilung auf einen Punkt konzentriert, d. h. gilt  $\nu(i) = 1$  für ein  $i \in I$ , so schreiben wir meist  $P_i$  anstelle von  $P_\nu$ .*

**Satz 1.3** *Sei  $\{X_n\}_{n \in \mathbb{N}_0}$  eine Markoff-Kette mit Startverteilung  $\nu$ .*

a) *Für alle  $n \in \mathbb{N}_0$  und  $i_0, i_1, \dots, i_n \in I$  gilt*

$$P(X_0 = i_0, X_1 = i_1, \dots, X_n = i_n) = \nu(i_0)p_{i_0 i_1} p_{i_1 i_2} \cdots p_{i_{n-1} i_n}.$$

b) Es seien  $n < m$  und  $i_n \in I$  sowie  $A \subset I^{\{0,1,\dots,n-1\}}$  und  $B \subset I^{\{n+1,\dots,m\}}$ . Falls  $P((X_0, X_1, \dots, X_{n-1}) \in A, X_n = i_n) > 0$  ist, so gilt

$$\begin{aligned} & P((X_{n+1}, \dots, X_m) \in B \mid (X_0, \dots, X_{n-1}) \in A, X_n = i_n) \\ &= P((X_{n+1}, \dots, X_m) \in B \mid X_n = i_n). \end{aligned}$$

*Beweis.* (a) folgt durch Induktion nach  $n$ : Definitionsgemäß gilt die Behauptung für  $n = 0$ . Gelte die Behauptung für ein  $n \in \mathbb{N}_0$  und seien  $i_0, i_1, \dots, i_{n+1} \in I$ . Ist  $P(X_0 = i_0, \dots, X_n = i_n) = 0$ , so gilt die behauptete Formel ebenfalls für  $n + 1$ : Ist  $P(X_0 = i_0, \dots, X_n = i_n) > 0$ , so folgt aus Definition 4.2

$$\begin{aligned} P(X_0 = i_0, \dots, X_n = i_n, X_{n+1} = i_{n+1}) &= P(X_{n+1} = i_{n+1} \mid X_0 = i_0, \dots, X_n = i_n) \\ &\quad \times P(X_0 = i_0, \dots, X_n = i_n) \\ &= \nu(i_0)p_{i_0i_1} \cdots p_{i_{n-1}i_n}p_{i_ni_{n+1}}. \end{aligned}$$

(b) Sei  $P((X_0, X_1, \dots, X_{n-1}) \in A, X_n = i_n) > 0$ . Mit der Definition der bedingten Wahrscheinlichkeit und Teil (a) folgt

$$\begin{aligned} & P((X_{n+1}, \dots, X_m) \in B \mid (X_0, \dots, X_{n-1}) \in A, X_n = i_n) \\ &= \frac{P((X_{n+1}, \dots, X_m) \in B, X_n = i_n, (X_0, \dots, X_{n-1}) \in A)}{P((X_0, \dots, X_{n-1}) \in A, X_n = i_n)} \\ &= \frac{\sum_{(i_{n+1}, \dots, i_m) \in B} \sum_{(i_0, \dots, i_{n-1}) \in A} \nu(i_0)p_{i_0i_1} \cdots p_{i_{m-1}i_m}}{\sum_{(i_0, \dots, i_{n-1}) \in A} \nu(i_0)p_{i_0i_1} \cdots p_{i_{n-1}i_n}} \\ &= \sum_{(i_{n+1}, \dots, i_m) \in B} p_{i_ni_{n+1}}p_{i_{n+1}i_{n+2}} \cdots p_{i_{m-1}i_m}. \end{aligned}$$

Dieser Ausdruck hängt nicht von  $A$  ab, insbesondere führt also die obige Rechnung für  $A = I^{\{0,1,\dots,n-1\}}$  zum gleichen Resultat. Aber für  $A = I^{\{0,1,\dots,n-1\}}$  gilt die in (b) behauptete Formel.  $\square$

**Bemerkung 1.4** Die Aussage von (b) heißt *Markoff-Eigenschaft* (*Markov property*). Sie spiegelt genau die eingangs erwähnte Eigenschaft wieder, daß in einer Markoff-Kette die Wahrscheinlichkeit, zur Zeit  $n + 1$  in einen beliebigen Zustand zu gelangen, nur vom Zustand zur Zeit  $n$  abhängt, aber nicht davon, in welchem Zustand die Kette früher war. Nicht jede Folge von  $I$ -wertigen Zufallsgrößen mit dieser Eigenschaft ist eine homogene Markoff-Kette in unserem Sinn: Die Übergangswahrscheinlichkeiten können nämlich noch von der Zeit abhängen. Genauer: Sei  $X_0, X_1, \dots$  eine Folge  $I$ -wertiger Zufallsgrößen, die die Eigenschaft aus Satz 4.3 b) hat. Dann existiert eine Folge  $\{\mathbb{P}_n\}_{n \in \mathbb{N}_0}$  von stochastischen Matrizen  $\mathbb{P}_n = (p_n(i, j))_{i, j \in I}$  mit

$$P(X_0 = i_0, \dots, X_n = i_n) = \nu(i_0)p_0(i_0, i_1) \cdots p_{n-1}(i_{n-1}, i_n)$$

für alle  $n \in \mathbb{N}_0$  und  $i_0, \dots, i_n \in I$ . Der Beweis sei dem Leser überlassen. Man spricht dann von einer (zeitlich) inhomogenen Markoff-Kette. Wir werden jedoch nur (zeitlich) homogene Ketten betrachten, ohne dies jedesmal besonders zu betonen.

**Satz 1.5** Es seien  $\mathbb{P} = (p_{ij})_{i,j \in I}$  eine stochastische Matrix,  $\nu$  eine Verteilung auf  $I$  und  $N \in \mathbb{N}_0$ . Dann gibt es eine abzählbare Menge  $\Omega$ , eine Wahrscheinlichkeitsverteilung  $p$  auf  $\Omega$  und Abbildungen  $X_i : \Omega \rightarrow I$  für alle  $i \in \{0, 1, \dots, N\}$ , so dass  $X_0, \dots, X_N$  eine homogene Markoff-Kette mit Startverteilung  $\nu$  und Übergangsmatrix  $\mathbb{P}$  ist.

*Beweis.* Es sei  $\Omega := I^{\{0, \dots, N\}}$  und  $p(i_0, \dots, i_N) := \nu(i_0)p_{i_0 i_1} \dots p_{i_{N-1} i_N}$  sowie  $X_n(i_0, \dots, i_N) = i_n$  für alle  $n \in \{0, 1, \dots, N\}$  und  $(i_0, \dots, i_N) \in \Omega$ . Da die Summe der Komponenten der stochastischen Matrix  $\mathbb{P}$  in jeder Zeile gleich eins ist, gilt für alle  $n \in \{0, 1, \dots, N\}$  und  $(i_0, \dots, i_n) \in I^{\{0, \dots, n\}}$

$$\begin{aligned} P(X_0 = i_0, \dots, X_n = i_n) &= \sum_{(i_{n+1}, \dots, i_N) \in I^{\{n+1, \dots, N\}}} P(X_0 = i_0, \dots, X_N = i_N) \\ &= \sum_{(i_{n+1}, \dots, i_N) \in I^{\{n+1, \dots, N\}}} \nu(i_0)p_{i_0 i_1} \dots p_{i_{N-1} i_N} \\ &= \nu(i_0)p_{i_0 i_1} \dots p_{i_{n-1} i_n}. \end{aligned}$$

Dieses Produkt ist größer als Null genau dann, wenn jeder Faktor größer als Null ist. Ist dies der Fall, so ist offenbar

$$P(X_{n+1} = i_{n+1} \mid X_0 = i_0, \dots, X_n = i_n) = p_{i_n i_{n+1}}.$$

□

*Bemerkung.* Nachfolgend soll stets von einer unendlich langen Markoff-Kette ausgegangen werden, dies jedoch nur wegen einer bequemerer Notation. Alle nachfolgenden Überlegungen benötigen die Konstruktion einer unendlichen Markoff-Kette nicht, sondern kommen damit aus, dass für jedes  $N$  eine Kette gemäß Satz 4.5 konstruiert werden kann.

**Beispiel 1.6** a) Sei  $p_{ij} = q_j$  für alle  $i, j \in I$ , wobei  $\sum_{j \in I} q_j = 1$  ist. Dann gilt

$$P(X_0 = i_0, X_1 = i_1, \dots, X_n = i_n) = \nu(i_0)q_{i_1} \dots q_{i_n}.$$

Man sieht leicht, dass  $q_j = P(X_m = j)$  für  $m \geq 1$  ist. Somit gilt

$$P(X_0 = i_0, \dots, X_n = i_n) = P(X_0 = i_0)P(X_1 = i_1) \dots P(X_n = i_n),$$

d. h., die  $X_0, X_1, \dots, X_n$  sind unabhängig. Satz 4.5 liefert also als Spezialfall die Konstruktion von unabhängigen,  $I$ -wertigen Zufallsgrößen.

b) *Irrfahrt auf  $\mathbb{Z}$ :* Es sei  $Y_1, Y_2, \dots$  eine Folge unabhängiger,  $\{1, -1\}$ -wertiger Zufallsgrößen mit  $P(Y_j = 1) = p$  und  $P(Y_j = -1) = 1 - p$ , wobei  $p \in [0, 1]$  ist. Sei  $X_0 := 0$  und  $X_n := \sum_{j=1}^n Y_j$  für  $n \geq 1$ . Dann ist  $X_0, X_1, \dots$  eine Markoff-Kette auf  $\mathbb{Z}$ . Die Übergangsmatrix  $\mathbb{P} = (p_{ij})_{i,j \in \mathbb{Z}}$  ist durch  $p_{i, i+1} = p$  und  $p_{i, i-1} = 1 - p$  eindeutig festgelegt, und die Startverteilung ist in 0 konzentriert.

- c) *Symmetrische Irrfahrt auf  $\mathbb{Z}^d$* : Hier ist  $I = \mathbb{Z}^d$  und  $p_{(i_1, \dots, i_d), (j_1, \dots, j_d)} = 1/(2d)$ , falls  $i_k = j_k$  für alle bis auf genau ein  $k \in \{1, 2, \dots, d\}$ , für das  $|i_k - j_k| = 1$  ist. Alle anderen Übergangswahrscheinlichkeiten müssen dann gleich Null sein.
- d) *Ehrenfests Modell der Wärmebewegung*: Es seien  $n$  Kugeln auf zwei Schachteln verteilt. Zu einem bestimmten Zeitpunkt seien  $r$  Kugeln in der rechten Schachtel und  $l := n - r$  in der linken. Mit Wahrscheinlichkeit  $1/2$  tun wir nun überhaupt nichts (dass diese auf den ersten Blick unsinnige Annahme begründet ist, werden wir zu einem späteren erkennen). Im anderen Fall wird mit Wahrscheinlichkeit  $1/2$  eine der  $n$  Kugeln nun zufällig ausgewählt, wobei jede dieselbe Chance hat, und in die andere Schachtel gelegt. Wir können für  $I$  die Anzahl der Kugeln in der rechten Schachtel nehmen, also  $I = \{0, \dots, n\}$ . Die Übergangswahrscheinlichkeiten sind gegeben durch

$$\begin{aligned} p_{r,r-1} &= r/2n, & r \in \{1, 2, \dots, n\}, \\ p_{r,r+1} &= 1/2 - r/2n, & r \in \{0, 1, \dots, n-1\}. \end{aligned}$$

- e) *Polyas Urnenschema*: In einer Urne liegen rote und schwarze Kugeln. Eine wird zufällig gezogen und zusammen mit einer neuen gleicher Farbe zurückgelegt. Hier ist  $I = \{(r, s) \mid r, s \in \mathbb{N}\}$  sowie  $p_{(r,s), (r+1,s)} = r/(r+s)$  und  $p_{(r,s), (r,s+1)} = s/(r+s)$  für alle  $r, s \in \mathbb{N}$ .
- f) *Galton-Watson-Prozess*: Sei  $(q_j)_{j \in \mathbb{N}_0}$  die Verteilung der Anzahl der Nachkommen eines Individuums.  $I$  ist gleich  $\mathbb{N}_0$ , und für jedes  $i \in \mathbb{N}$  ist der  $i$ -te Zeilenvektor  $(p_{ij})_{j \in \mathbb{N}_0}$  der stochastischen Matrix  $\mathbb{P}$  gerade die  $i$ -fache Faltung der Verteilung  $(q_j)_{j \in \mathbb{N}_0}$ . Für  $i = 0$  gilt  $p_{0j} = 1$ , falls  $j = 0$  ist, und  $p_{0j} = 0$ , falls  $j \geq 1$  ist.
- g) *Irrfahrt auf  $I = \{0, \dots, n\}$  mit Absorption (random walk with absorbing barriers)*: 0 und  $n$  seien absorbierend, also  $p_{00} = 1$  und  $p_{nn} = 1$ . Für  $i \in \{1, 2, \dots, n-1\}$  geschehe ein Schritt nach rechts mit Wahrscheinlichkeit  $p \in (0, 1)$  und ein Schritt nach links mit Wahrscheinlichkeit  $q := 1 - p$ , also  $p_{i,i+1} = p$  und  $p_{i,i-1} = q$ . Die stochastische Matrix hat somit die Form

$$\mathbb{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & & \\ q & 0 & p & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & q & 0 & p \\ & & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

- h) *Irrfahrt mit Reflexion (reflecting barriers)*: Das gleiche Modell wie in Beispiel (e) mit der Änderung, dass  $p_{01} = p_{n,n-1} = 1$  sein soll.
- i) *Wettervorhersage*: Wenn wir annehmen, dass die Wahrscheinlichkeit für Regen am folgenden Tag nur von Bedingungen von heute abhängt und unbeeinflusst ist vom Wetter der vergangenen Tage, so liefert dies eine ganz einfache Markoff-Kette. Ist  $\alpha$  die Wahrscheinlichkeit, dass es morgen regnet, wenn es heute

geregnet hat, und  $\beta$  die Wahrscheinlichkeit, dass es morgen regnet, wenn es heute nicht geregnet hat, so hat die stochastische Matrix die Form

$$\mathbb{P} = \begin{pmatrix} \alpha & 1 - \alpha \\ \beta & 1 - \beta \end{pmatrix}.$$

Auf Grund der Vielzahl von Beispielen für Markoff-Ketten könnte man vermuten, dass Markoff selbst aus angewandten Fragestellungen heraus die Ketten analysiert hat. Markoff hatte jedoch bei seinen Untersuchungen primär im Sinn, Gesetze der großen Zahlen und zentrale Grenzwertsätze für die Ketten zu studieren. Er hatte nur ein Beispiel vor Augen: er analysierte die möglichen Zustände „Konsonant“ und „Vokal“ bei der Buchstabenfolge des Romans „Eugen Onegin“ von Puschkin. Die Zufallsgröße  $X_n$  soll hier den  $n$ -ten Buchstaben des Textes angeben.

Eine stochastische Matrix  $\mathbb{P} = (p_{ij})_{i,j \in I}$  kann man stets ohne Probleme potenzieren: Für  $n \in \mathbb{N}_0$  definiert man die  $n$ -te Potenz  $\mathbb{P}^n = (p_{ij}^{(n)})_{i,j \in I}$  rekursiv durch  $p_{ij}^{(0)} = \delta_{ij}$  und

$$p_{ij}^{(n+1)} = \sum_{k \in I} p_{ik}^{(n)} p_{kj}$$

für alle  $i, j \in I$ , das heißt,  $\mathbb{P}^n$  ist das  $n$ -fache Matrixprodukt von  $\mathbb{P}$  mit sich selbst. Aus der rekursiven Definition folgt, dass  $\mathbb{P}^n$  selbst eine stochastische Matrix ist. Es gelten die aus der linearen Algebra bekannten Rechenregeln für Matrizen, insbesondere gilt  $\mathbb{P}^m \mathbb{P}^n = \mathbb{P}^{m+n}$ , das heißt

$$\sum_{k \in I} p_{ik}^{(m)} p_{kj}^{(n)} = p_{ij}^{(m+n)}, \quad i, j \in I.$$

Diese Gleichungen nennt man auch *Chapman-Kolmogoroff-Gleichungen*.

**Definition 1.7** Die Komponenten  $p_{ij}^{(n)}$  der Übergangsmatrix  $\mathbb{P}^n = (p_{ij}^{(n)})_{i,j \in I}$  heißen  *$n$ -stufige Übergangswahrscheinlichkeiten* ( *$n$  th order transition probabilities*).

**Bemerkung 1.8** Sei  $X_0, X_1, X_2, \dots$  eine Markoff-Kette mit stochastischer Matrix  $\mathbb{P} = (p_{ij})_{i,j \in I}$ . Sind  $m, n \in \mathbb{N}_0$  und  $i, j \in I$  mit  $P(X_m = i) > 0$ , so gilt

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

*Beweis.* Es gilt

$$\begin{aligned} & P(X_{m+n} = j \mid X_m = i) \\ = & \sum_{i_{m+1}, \dots, i_{m+n-1} \in I} P(X_{m+1} = i_{m+1}, \dots, \\ & X_{m+n-1} = i_{m+n-1}, X_{m+n} = j \mid X_m = i) \end{aligned}$$

und mit der Definition 4.2 folgt

$$\begin{aligned}
& P(X_{m+1} = i_{m+1}, \dots, X_{m+n-1} = i_{m+n-1}, X_{m+n} = j \mid X_m = i) \\
&= P(X_{m+n} = j \mid X_m = i, X_{m+1} = i_{m+1}, \dots, X_{m+n-1} = i_{m+n-1}) \\
&\quad \times \prod_{k=1}^{n-1} P(X_{m+k} = i_{m+k} \mid X_m = i, X_{m+1} = i_{m+1}, \dots, X_{m+k-1} = i_{m+k-1}) \\
&= p_{ii_{m+1}} p_{i_{m+1}i_{m+2}} \cdots p_{i_{m+n-1}j}.
\end{aligned}$$

Somit gilt

$$P(X_{m+n} = j \mid X_m = i) = \sum_{i_{m+1}, \dots, i_{m+n-1} \in I} p_{ii_{m+1}} \cdots p_{i_{m+n-1}j} = p_{ij}^{(n)}.$$

□

**Lemma 1.9** Für alle  $m, n \in \mathbb{N}_0$  und  $i, j, k \in I$  gilt  $p_{ij}^{(m+n)} \geq p_{ik}^{(m)} p_{kj}^{(n)}$ .

*Beweis.* Dies ergibt sich sofort aus den Chapman-Kolmogoroff-Gleichungen. □

**Lemma 1.10** Es sei  $X_0, X_1, X_2, \dots$  eine Markoff-Kette mit Startverteilung  $\nu$  und Übergangsmatrix  $\mathbb{P}$ . Dann gilt

$$P_\nu(X_n = j) = \sum_{i \in I} \nu(i) p_{ij}^{(n)}$$

für alle  $n \in \mathbb{N}_0$  und  $j \in I$ . Ist die Startverteilung  $\nu$  auf  $i \in I$  konzentriert, so gilt  $P_i(X_n = j) = p_{ij}^{(n)}$ .

*Beweis.* Aus Satz 4.3 a) folgt

$$\begin{aligned}
P_\nu(X_n = j) &= \sum_{i_0, \dots, i_{n-1} \in I} P_\nu(X_0 = i_0, \dots, X_{n-1} = i_{n-1}, X_n = j) \\
&= \sum_{i_0, \dots, i_{n-1} \in I} \nu(i_0) p_{i_0 i_1} \cdots p_{i_{n-1} j} = \sum_{i \in I} \nu(i) p_{ij}^{(n)}.
\end{aligned}$$

□

**Definition 1.11** Es sei  $\mathbb{P} = (p_{ij})_{i,j \in I}$  eine stochastische Matrix. Man sagt,  $j \in I$  sei von  $i \in I$  aus erreichbar (can be reached from), wenn ein  $n \in \mathbb{N}_0$  existiert mit  $p_{ij}^{(n)} > 0$ . Notation:  $i \rightsquigarrow j$ .

Die in Definition 4.11 definierte Relation auf  $I$  ist reflexiv und transitiv. Wegen  $p_{ii}^{(0)} = 1 > 0$  gilt  $i \rightsquigarrow i$  für alle  $i \in I$ . Falls  $i \rightsquigarrow j$  und  $j \rightsquigarrow k$  gelten, so gibt es  $m, n \in \mathbb{N}_0$  mit  $p_{ij}^{(m)} > 0$  und  $p_{jk}^{(n)} > 0$ , und dann ist  $p_{ik}^{(m+n)} \geq p_{ij}^{(m)} p_{jk}^{(n)} > 0$  nach Lemma 4.9.

Die durch  $i \sim j \Leftrightarrow (i \rightsquigarrow j \text{ und } j \rightsquigarrow i)$  für alle  $i, j \in I$  definierte Relation ist offenbar eine Äquivalenzrelation auf  $I$ . Wir werden  $i \sim j$  für den Rest dieses Kapitels stets in diesem Sinne verwenden.

Sind  $A, B \subset I$  zwei Äquivalenzklassen der obigen Äquivalenzrelation, so sagen wir,  $B$  ist von  $A$  aus erreichbar und schreiben  $A \rightsquigarrow B$ , wenn  $i \in A$  und  $j \in B$  existieren mit  $i \rightsquigarrow j$ . Offensichtlich hängt dies nicht von den gewählten Repräsentanten in  $A$  und  $B$  ab.

**Definition 1.12** *Es sei  $\mathbb{P}$  eine stochastische Matrix.*

- a) *Eine Teilmenge  $I'$  von  $I$  heißt abgeschlossen (closed), wenn keine  $i \in I'$  und  $j \in I \setminus I'$  existieren mit  $i \rightsquigarrow j$ .*
- b) *Die Matrix  $\mathbb{P}$  und auch eine Markoff-Kette mit Übergangsmatrix  $\mathbb{P}$  heißen irreduzibel (irreducible), wenn je zwei Elemente aus  $I$  äquivalent sind.*

**Bemerkung 1.13** *Es sei  $\mathbb{P} = (p_{ij})_{i,j \in I}$  eine stochastische Matrix.*

- a) *Ist  $I' \subset I$  abgeschlossen, so ist die zu  $I'$  gehörige Untermatrix  $\mathbb{P}' := (p_{ij})_{i,j \in I'}$  eine stochastische Matrix für  $I'$ .*
- b) *Ist  $\mathbb{P}$  irreduzibel, so existieren keine abgeschlossenen echten Teilmengen von  $I$ .*

**Beispiel 1.14** a) *Die symmetrische Irrfahrt auf  $\mathbb{Z}^d$  ist irreduzibel.*

- b) *Polyas Urnenschema: Keine zwei Elemente von  $I = \{(r, s) \mid r, s \in \mathbb{N}\}$  sind äquivalent. Es gibt aber sehr viele abgeschlossene Teilmengen von  $I$ , zum Beispiel ist für jede Wahl von  $r_0, s_0 \in \mathbb{N}$  die Menge  $\{(r, s) \mid r \geq r_0, s \geq s_0\}$  abgeschlossen.*
- c) *Bei der Irrfahrt auf  $\{0, \dots, n\}$  mit absorbierenden Rändern gibt es drei Äquivalenzklassen, nämlich  $\{0\}$ ,  $\{1, \dots, n-1\}$  und  $\{n\}$ . Die Mengen  $\{0\}$  und  $\{n\}$  sind abgeschlossen, und es gelten  $\{1, \dots, n-1\} \rightsquigarrow \{n\}$  und  $\{1, \dots, n-1\} \rightsquigarrow \{0\}$ .*
- d) *Eine symmetrische Irrfahrt auf einem Graphen  $\mathcal{G}$  ist offenbar genau dann irreduzibel, wenn der Graph zusammenhängend ist. (Ein Graph heißt zusammenhängend, wenn je zwei Knoten über einen endlichen Zug verbunden werden können.)*

e) Es sei  $I = \{0, 1, 2\}$  und die stochastische Matrix gegeben durch

$$\mathbb{P} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 1/4 & 1/4 \\ 0 & 1/3 & 2/3 \end{pmatrix}.$$

Dann ist die Markoff-Kette irreduzibel.

f) Es sei  $I = \{0, 1, 2, 3\}$  und die stochastische Matrix gegeben durch

$$\mathbb{P} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1/4 & 1/4 & 1/4 & 1/4 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Dann gibt es drei Äquivalenzklassen:  $\{0, 1\}$ ,  $\{2\}$  und  $\{3\}$ . Der Wert 0 ist von 2 aus erreichbar, aber nicht umgekehrt. Der Wert 3 hat absorbierendes Verhalten; kein anderer Wert ist von 3 aus erreichbar.

## 1.2 Der Ergodensatz

Es sei  $X_0, X_1, X_2, \dots$  eine Markoff-Kette mit Übergangsmatrix  $\mathbb{P} = (p_{ij})_{i,j \in I}$  und Startverteilung  $\nu$ . Die wichtigste Frage, die uns für einen Großteils des Kapitels beschäftigen wird, ist die Diskussion der Verteilung von  $X_n$  für große  $n$ , also

$$P_\nu(X_n = j) = \sum_{i \in I} \nu(i) p_{ij}^{(n)}, \quad j \in I.$$

Zu diesem Zwecke werden wir annehmen, dass der Zustandsraum  $I$  endlich ist. Aus obigen Überlegungen erhält man dann, dass die Frage der asymptotischen Verteilung von  $X_n$  äquivalent ist zur Frage, wie sich große Potenzen von stochastischen Matrizen verhalten. Im dem Falle, in dem  $I$  nur aus zwei Elementen besteht, kann man sich das noch recht leicht überlegen.

**Beispiel 1.15** Sei  $|I| = 2$  und

$$\mathbb{P} = \begin{pmatrix} 1 - \alpha & \alpha \\ \beta & 1 - \beta \end{pmatrix}.$$

Dann ist für  $\alpha = \beta = 0$   $\mathbb{P}^n = Id$  für jedes  $n$  (wobei  $Id$  bei uns immer die Identität bezeichnet, egal auf welchem Raum sie lebt). Im Falle von  $\alpha = \beta = 1$  ist offenbar  $\mathbb{P}^n = \mathbb{P}$  für jedes ungerade  $n$  und  $\mathbb{P}^n = Id$  für alle geraden  $n$ .

Im Falle von  $0 < \alpha + \beta < 2$  (dem interessanten Fall) diagonalisieren wir  $\mathbb{P}$ , um seine Potenzen zu berechnen. Es ist

$$\mathbb{P} = RDR^{-1},$$



wobei

$$R = \begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ 1 & -\beta \end{pmatrix}$$

und

$$D = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 - \alpha - \beta \end{pmatrix}$$

ist. Daher ist

$$\mathbb{P}^n = RD^nR^{-1}.$$

Nun konvergiert aber

$$D^n = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & (1 - \alpha - \beta)^n \end{pmatrix} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Eingesetzt ergibt das

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}^n = R \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} R^{-1} = \begin{pmatrix} \pi_1 & \pi_2 \\ \pi_1 & \pi_2 \end{pmatrix},$$

mit

$$\pi_1 = \frac{\beta}{\alpha + \beta} \quad \pi_2 = \frac{\alpha}{\alpha + \beta}.$$

Im allgemeinen, d.h. für  $|I| > 2$  sind wir leider ziemlich schnell am Ende unserer Weisheit, wenn es um die Berechnung der Eigenwerte von  $\mathbb{P}$  und damit um das Diagonalisieren von  $\mathbb{P}$  geht. Die obige Methode taugt also nicht, um allgemein Erkenntnisse über das Langzeitverhalten von Markoff-Ketten zu gewinnen. Der Effekt, den wir aber im Beispiel 4.15 gesehen haben, dass nämlich die Limesmatrix aus lauter identischen Zeilen besteht – und das bedeutet, dass die Markoff-Kette asymptotisch ihren Startort “vergißt” – werden wir in dem allgemeinen Limesresultat wiederfinden. Um dieses zu beweisen, müssen wir zunächst den Begriff der Entropie, den wir schon in Kapitel 4 und 6 für zweielementige Grundräume kennengelernt haben, auf größere Räume übertragen.

**Definition 1.16** *Es sei  $I$  eine endliche, mindestens zweielementige Menge und  $\nu, \varrho$  seinen Wahrscheinlichkeiten auf  $I$  mit  $\varrho(i) > 0$  für alle  $i \in I$ . Dann heißt*

$$H(\nu|\varrho) := \sum_{i \in I} \nu(i) \log \left( \frac{\nu(i)}{\varrho(i)} \right)$$

die relative Entropie (relative entropy) von  $\nu$  bezüglich  $\varrho$ . Hierbei setzen wir  $0 \log 0 = 0$ .

Wir sammeln ein paar Eigenschaften der Entropiefunktion

**Proposition 1.17** *In der Situation von Definition 4.15 ist  $H(\cdot|\varrho)$  positiv und strikt konvex und es ist  $H(\nu|\varrho) = 0 \Leftrightarrow \nu = \varrho$ .*

*Beweis.* Sei die nicht-negative, strikt-konvexe Funktion  $\psi(t)$  gegeben durch  $\psi(t) = t \log t - t + 1$  (und wieder ist  $\psi(t) = 0 \Leftrightarrow t = 1$ ). Dann ist

$$\begin{aligned} H(\nu|\varrho) &= \sum_{i \in I} \varrho(i) \left( \frac{\nu(i)}{\varrho(i)} \log \left( \frac{\nu(i)}{\varrho(i)} \right) - \frac{\nu(i)}{\varrho(i)} + 1 \right) \\ &= \sum_{i \in I} \varrho(i) \psi \left( \frac{\nu(i)}{\varrho(i)} \right), \end{aligned}$$

woraus die Behauptungen folgen. □

Wir kommen nun zu einem Satz, der das asymptotische Verhalten einer großen Gruppe von Markoff-Ketten klärt. Dieser Satz ist gewissermassen ein Gesetz der großen Zahlen für Markoff-Ketten; er wird in der Literatur häufig auch als *Ergodensatz* für Markoff-Ketten bezeichnet.

**Satz 1.18** *Ergodensatz (ergodic theorem) Sei  $\mathbb{P}$  eine stochastische Matrix über einem endlichen Zustandsraum  $I$  und  $\nu$  irgendeine Anfangsverteilung. Weiter existiere ein  $N$ , so dass  $\mathbb{P}^N$  nur strikt positive Einträge hat. Dann konvergiert*

$$\nu \mathbb{P}^n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \varrho,$$

wobei  $\varrho$  eine Wahrscheinlichkeit auf  $I$  ist, die der Gleichung

$$\varrho \mathbb{P} = \varrho$$

genügt.

**Bemerkung 1.19** Die Bedingung “es existiere ein  $N$ , so dass  $\mathbb{P}^N$  nur strikt positive Einträge hat” impliziert natürlich, dass  $\mathbb{P}$  irreduzibel ist (man kann nach spätestens  $N$  Schritten jeden Punkt von jedem anderen aus erreichen). Umgekehrt ist die Bedingung aber nicht äquivalent zur Irreduzibilität von  $\mathbb{P}$ . Beispielsweise ist die Matrix

$$\mathbb{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

irreduzibel, aber natürlich ist keine ihrer Potenzen strikt positiv. Man kann sich überlegen, dass obige Bedingung äquivalent ist zur Irreduzibilität von  $\mathbb{P}$  plus einer weiteren Bedingung, die Aperiodizität von  $\mathbb{P}$  heisst. Unter letzterem wollen wir verstehen, dass der ggT über sämtliche Zeiten, zu denen man mit positiver Wahrscheinlichkeit in den Punkt  $i$  zurückkehren kann, wenn man in  $i$  gestartet ist, und über sämtliche Startpunkte  $i$  eins ist. Wir werden diese Äquivalenz hier nicht beweisen und nur bemerken, dass irreduzible und aperiodische Markoff-Ketten manchmal auch *ergodisch* (*ergodic*) heißen.

Satz 4.18 enthält offenbar unter anderem eine unbewiesene Existenzaussage. Diese werden wir getrennt beweisen. Wir zeigen also zunächst, dass es eine Wahrscheinlichkeit  $\varrho$  mit

$$\varrho\mathbb{P} = \varrho$$

gibt. Die Existenz eines beliebigen  $\varrho$ , das obiger Gleichung genügt, ist ziemlich offensichtlich, denn offenbar ist 1 Eigenwert jeder stochastischen Matrix (die konstanten Funktionen sind rechte Eigenvektoren) – also muss es auch linke Eigenvektoren zum Eigenwert 1 geben; ein solcher ist  $\varrho$ . Auch ist es nicht schwierig, ein solches  $\varrho$  so zu normieren, dass die Summe seiner Einträge 1 ist. Was aber a priori überhaupt nicht klar ist, ist, warum ein solches  $\varrho$  eigentlich nicht-negativ sein sollte. Wer in der linearen Algebra ein wenig Perron-Frobenius Theorie betrieben hat, wird dies schon wissen. Wir werden es hier mit Hilfe eines anderen, mehr stochastischen Arguments herleiten.

**Satz 1.20** *Sei  $Q$  eine stochastische  $r \times r$  Matrix. Dann existiert*

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k Q^j =: H$$

und es gilt

$$HQ = QH = H \quad H^2 = H.$$

*Beweis.* Zunächst bemerken wir, dass mit  $Q$  auch  $Q^n$  stochastisch ist (es ist z.B.

$$\sum_{f=1}^r Q^2(e, f) = \sum_{f=1}^r \sum_{d=1}^r Q(e, d)Q(d, f) = 1;$$

für beliebiges  $n$  geht das analog.) Damit ist dann auch

$$P_k := \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k Q^j$$

stochastisch. Darüber sind die  $P_k \in \mathbb{R}^{r^2}$  und als solche beschränkt. Nach dem Satz von Bolzano–Weierstraß besitzt somit die Folge der  $P_k$  einen Häufungspunkt  $H$ . Wir wollen im folgenden sehen, dass es genau einen Häufungspunkt dieser Folge gibt. Dazu betrachten wir eine Teilfolge  $(H_l)$  der Folge  $(P_k)$ , die gegen  $H$  konvergiert. Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} QH_l &= H_lQ = \frac{1}{l} \sum_{j=1}^l Q^{j+1} \\ &= H_l - \frac{1}{l}Q + \frac{1}{l}Q^{l+1}. \end{aligned}$$

Da die letzten beiden Terme für  $l \rightarrow \infty$  verschwinden, ergibt sich

$$QH = HQ = H. \tag{1}$$

Ist nun  $H'$  ein weiterer Häufungspunkt und  $(H_m)$  eine Folge die gegen  $H'$  konvergiert, dann erhalten wir aus (44) einerseits

$$H'H = HH' = H.$$

Andererseits folgert man analog zu oben

$$H'P_k = P_kH' = H'$$

für alle  $k$  und somit

$$H'H = HH' = H'.$$

Daher ist  $H' = H$  und  $H^2 = H$ . □

Was haben wir nun damit gewonnen? Nun, die Gleichung  $HQ = H$  impliziert doch, dass für jede Zeile  $\varrho$  von  $H$  gilt, dass

$$\varrho Q = \varrho,$$

jede Zeile (und jede konvexe Kombination von Zeilen) von  $H$  ist also ein linker Eigenvektor von  $H$  zum Eigenwert eins. Darüber hinaus ist die Menge der stochastischen Matrizen abgeschlossen in  $\mathbb{R}^{r^2}$ . Das sieht man, indem man einerseits die Abgeschlossenheit aller nicht-negativen Matrizen erkennt (das ist nicht schwer) und andererseits sieht, dass die Menge aller Matrizen mit Zeilensumme eins für alle Zeilen abgeschlossen ist (die Menge der stochastischen Matrizen ist dann der Durchschnitt dieser beiden abgeschlossenen Mengen). Letzteres ist wahr, denn die Funktionen  $f_i$ , die die  $i$ 'te Zeilensumme bilden sind stetig, und die Menge der Matrizen mit Zeilensumme 1 ist dann das Urbild der (abgeschlossenen) Menge  $(1, \dots, 1)$  unter der stetigen Abbildung  $f = (f_1, \dots, f_r)$ .

Somit ist  $H$  als Limes stochastischer Matrizen wieder stochastisch, seine Zeilen sind also Wahrscheinlichkeiten auf dem Grundraum. Dies beweist die Existenz einer Wahrscheinlichkeit  $\varrho$  mit

$$\varrho Q = \varrho.$$

Solche Wahrscheinlichkeiten heißen auch *stationär* (*stationary*) bzgl.  $Q$ . Nun sind wir in der Lage Satz 4.17 zu beweisen.

*Beweis von Satz 4.17* Wie wir eben gesehen haben, existiert eine stationäre Verteilung  $\varrho$  bzgl.  $\mathbb{P}$ , nämlich beispielsweise eine Zeile des entsprechend Satz 4.19 gebildeten Cesaro-Limes der Potenzen von  $\mathbb{P}$ . Ein solches  $\varrho$  besitzt nur strikt positive Einträge. Wäre z.B.  $\varrho(i) = 0$ , so ergäbe das

$$0 = \varrho(i) = \sum_{j \in I} \varrho(j) \mathbb{P}^N(j, i)$$

im Widerspruch dazu, dass  $\mathbb{P}^N$  strikt positiv ist und  $\sum \varrho(j) = 1$  ist.

Darüber hinaus gibt es nur eine Verteilung  $\varrho$ , die stationär zu  $\mathbb{P}$  ist (insbesondere besteht  $H$  aus lauter identischen Zeilen). Gäbe es nämlich  $\varrho, \varrho'$ , die beide stationär bzgl.  $\mathbb{P}$  wären, so gälte für jedes  $a \in \mathbb{R}$  und  $n \in \mathbb{N}$

$$\varrho - a\varrho' = (\varrho - a\varrho')\mathbb{P}^n.$$

Wir wählen

$$a = \min_{i \in I} \frac{\varrho(i)}{\varrho'(i)} =: \frac{\varrho(i_0)}{\varrho'(i_0)}.$$

Damit ist

$$0 = (\varrho - a\varrho')(i_0) = \sum_{j \in I} (\varrho - a\varrho')(j) \mathbb{P}^N(j, i_0).$$

Aus der strikten Positivität von  $\mathbb{P}^N$  folgt somit, dass  $\varrho(j) = a\varrho'(j)$  für alle  $j \in I$  gelten muss. Da  $\varrho$  und  $\varrho'$  Wahrscheinlichkeiten sind, impliziert das, dass  $a = 1$  ist und folglich  $\varrho = \varrho'$ . Die im Satz behauptete Konvergenz ist also die Konvergenz gegen *einen* Punkt im klassischen Sinne.

Um diese Konvergenz schließlich zu zeigen, verwenden wir die Entropiefunktion aus Definition 4.15 in der Schreibweise

$$H(\nu|\varrho) = \sum_{i \in I} \varrho(i) \psi\left(\frac{\nu(i)}{\varrho(i)}\right),$$

wobei  $\psi$  wieder die strikt konvexe Funktion

$$\psi(t) = t \log t - t + 1$$

ist. Daher ist

$$\begin{aligned} H(\nu\mathbb{P}|\varrho) &= \sum_{i \in I} \varrho(i) \psi\left(\frac{\nu\mathbb{P}(i)}{\varrho(i)}\right) \\ &= \sum_{i \in I} \varrho(i) \psi\left(\frac{\sum_{j \in I} \nu(j) \mathbb{P}(j, i)}{\varrho(i)}\right) \\ &= \sum_{i \in I} \varrho(i) \psi\left(\frac{\sum_{j \in I} \varrho(j) \mathbb{P}(j, i)}{\varrho(i)} \frac{\nu(j)}{\varrho(j)}\right) \\ &\leq \sum_{i \in I} \sum_{j \in I} \varrho(j) \mathbb{P}(j, i) \psi\left(\frac{\nu(j)}{\varrho(j)}\right) \\ &= \sum_{j \in I} \varrho(j) \psi\left(\frac{\nu(j)}{\varrho(j)}\right) \\ &= H(\nu|\varrho), \end{aligned}$$

wobei das “ $\leq$ ”-Zeichen aus der Tatsache, dass  $\frac{\sum_{j \in I} \varrho(j) \mathbb{P}(j, i)}{\varrho(i)} \frac{\nu(j)}{\varrho(j)}$  eine konvexe Kombination der  $\frac{\nu(j)}{\varrho(j)}$  ist, folgt, zusammen mit der Konvexität von  $\psi$  und das vorletzte Gleichheitszeichen eine Konsequenz der Stochastizität von  $\mathbb{P}$  ist. Somit ist

$$H(\nu\mathbb{P}|\varrho) \leq H(\nu|\varrho)$$

mit Gleichheit genau dann, wenn  $\nu\mathbb{P} = \nu$ , also  $\nu = \varrho$  ist. Anwenden von  $\mathbb{P}$  verkleinert also die Entropie und damit eine Art Distanz zum invarianten Maß.

Somit ist insbesondere die Folge  $(H(\nu\mathbb{P}^n|\varrho))_n$  monoton fallend und zwar strikt, solange  $\nu\mathbb{P}^n \neq \varrho$  ist.

Wir wollen abschließend sehen, dass dies schon impliziert, dass die Folge  $\varrho_n := \nu\mathbb{P}^n$  gegen  $\varrho$  konvergiert. Da  $\varrho_n$  beschränkt ist, besitzt die Folge zumindest im  $\mathbb{R}^{|I|}$  einen Häufungspunkt  $\varrho'$  und es existiert eine Teilfolge  $(\varrho_{n_l})_l$ , die gegen  $\varrho'$  konvergiert. Wir zeigen, dass  $\varrho' = \varrho$  ist (und sind dann fertig, da die Argumentation für jeden Häufungspunkt gilt und die Folge  $\varrho_n$  damit gegen  $\varrho$  konvergiert).

Nun ist einerseits

$$H(\varrho'|\varrho) \geq H(\varrho'\mathbb{P}|\varrho).$$

Andererseits haben wir

$$\begin{aligned} H(\varrho'\mathbb{P}|\varrho) &= \sum_{j \in I} \varrho(j) \psi\left(\frac{(\varrho'\mathbb{P})(j)}{\varrho(j)}\right) \\ &= \lim_{l \rightarrow \infty} \sum_{j \in I} \varrho(j) \psi\left(\frac{(\nu\mathbb{P}^{n_l})\mathbb{P}(j)}{\varrho(j)}\right) \\ &= \lim_{l \rightarrow \infty} \sum_{j \in I} \varrho(j) \psi\left(\frac{(\nu\mathbb{P}^{n_l+1})(j)}{\varrho(j)}\right). \end{aligned}$$

Nun ist  $(n_l)_l$  eine Teilfolge und daher  $n_l + 1 \leq n_{l+1}$ . Dies ergibt mit der vorher gezeigten Monotonie

$$\begin{aligned} &\lim_{l \rightarrow \infty} \sum_{j \in I} \varrho(j) \psi\left(\frac{(\nu\mathbb{P}^{n_l+1})(j)}{\varrho(j)}\right) \\ &\geq \lim_{l \rightarrow \infty} \sum_{j \in I} \varrho(j) \psi\left(\frac{(\nu\mathbb{P}^{n_{l+1}})(j)}{\varrho(j)}\right) = H(\varrho'|\varrho). \end{aligned}$$

Insgesamt ist also

$$H(\varrho'|\varrho) = H(\varrho'\mathbb{P}|\varrho)$$

und daher

$$\varrho' = \varrho.$$

□

### Beispiel 1.21 1. Irrfahrt auf dem Kreis

Für  $n \in \mathbb{N}$  sei  $C_n$  der  $n$ -Kreis, d.h. der Graph, der entsteht, wenn man  $n$  Punkte durchnummeriert und den Punkt  $k$  mit den Punkten  $k-1$  und  $k+1$  verbindet (Punkt 1 wird mit 2 und  $n$  verbunden). Auf  $C_n$  definiert man eine Markoff-Kette vermöge der Übergangsvorschrift  $p_{ii} = 1/2$  und  $p_{i,i+1} =$

$p_{i,i-1} = 1/4$  (dabei ist die Addition modulo  $n$  zu verstehen). Offenbar ist für die zugehörige stochastische Matrix  $\mathbb{P}$  und jedes  $r > n/2 + 1$ ,  $\mathbb{P}^r$  strikt positiv. Also sind die Voraussetzungen des Ergodensatzes erfüllt und für jede beliebige Startverteilung  $\nu$  konvergiert  $\nu\mathbb{P}^n$  gegen das invariante Maß der Kette, was offensichtlich die Gleichverteilung auf allen Zuständen ist.

## 2. Ehrenfests Urnenmodell

In der Situation von Beispiel 4.6 d) rechnet man wieder nach, dass die Bedingungen des Ergodensatzes erfüllt sind. Die Kette konvergiert daher gegen ihre Gleichgewichtsverteilung, d.h. die Binomialverteilung.

## 1.3 Boltzmann-Gleichung und $H$ -Theorem

Wie in der Einleitung erwähnt, gehen die Anfänge der statistischen Mechanik auf Boltzmanns Analyse der thermodynamischen Gesetzmäßigkeiten zurück. Wir wollen zunächst seine Ergebnisse betrachten: Boltzmanns Grundannahme ist, dass Materie, in diesem Fall ein Gas, aus kleinsten Teilchen besteht, Atomen oder Molekülen, über deren individuelle Bewegungen man zwar nichts aussagen kann, die aber gewissen statistischen Annahmen genügen. Genauer nehmen wir an, dass es zu jedem Zeitpunkt  $t$  und an jedem Ort  $r$  unseres Gasbehälters sowie zu jedem Impuls  $p$  eine Dichte

$$f(r, p, t)$$

gibt, die die relative Anzahl der Teilchen zur Zeit  $t$  in  $r$  mit Impuls  $p$  beschreibt. Nun ist es möglich, mittels Impuls- und Energieerhaltung auszurechnen, welchen Impuls zwei Teilchen mit Anfangsimpuls  $p_1$  und  $p_2$  nach einem Stoß haben. Berechnet man zudem, wie viele solcher Stöße innerhalb eines kleinen Zeitintervalls  $dt$  bei gegebener Dichte  $f(r, p, t)$  stattfinden, so kommt man zu einer Differentialgleichung für  $f$ , der sogenannten BOLTZMANN-GLEICHUNG, die die Änderungen der Dichtefunktion über die Zeit beschreibt. Das Erstaunliche an dieser unschuldig aussehenden Differentialgleichung ist nun der folgende Sachverhalt: Ist  $f(r, p, t) \equiv f(p, t)$ , also die Dichte nicht mehr abhängig vom Ort, so impliziert die Boltzmann-Gleichung, dass

$$\frac{d}{dt}H(t) := \frac{d}{dt} \left( - \int f(p, t) \log f(p, t) dp \right) \geq 0$$

gilt. Die Größe  $H(t)$  stimmt bis auf eine additive Konstante mit der thermodynamischen Entropie überein, wir werden auch sie in der Folge mit ENTROPIE bezeichnen.

Die Boltzmann-Gleichung impliziert also ein Anwachsen der Entropie. Das sogenannte Boltzmannsche  $H$ -Theorem stellt eine Brücke zwischen der klassischen Mechanik und der Thermodynamik dar.

Trotz dieser wichtigen Rolle, die Boltzmanns Überlegungen in der Physik spielen, gab es von Beginn an Einwände gegen sie (und es gibt bis heute Spielraum für Interpretationen). Die beiden wichtigsten Einwände gegen das  $H$ -Theorem sind:

1. Das  $H$ -Theorem widerspricht der Mechanik. In der Tat sind alle Gesetze der Mechanik invariant unter der Zeitumkehr  $t \rightarrow -t$ : Beobachtet man die Bewegung eines einzelnen Teilchens, so lässt sich an ihr nicht ablesen, ob “der Film vorwärts oder rückwärts läuft”. Dagegen zeichnet das  $H$ -Theorem eine Zeitrichtung aus. Loschmidt formulierte diesen Einwand schon 1876 so: Wenn ein Gas sich aus einem Anfangszustand  $S_0$  nach  $t$  Zeiteinheiten in einen Zustand  $S_t$  bewegt hat, dann folgt nach Boltzmann

$$H_t \geq H_0.$$

Wenn man nun alle Geschwindigkeiten umkehrt, dann wird das System nach weiteren  $t$  Schritten wieder in  $S_0$  sein, wohingegen das  $H$ -Theorem

$$H_0 \geq H_t$$

impliziert, also ändert sich  $H$  überhaupt nicht. Boltzmanns Einwand darauf (“Bitte, drehen Sie die Geschwindigkeit um.”) ist zwar wichtig, hilft aber nicht so recht weiter.

2. Ein weiterer, vielleicht noch wesentlicherer Einwand stammt von Zermelo, der bemerkte, dass aufgrund des Poincaréschen Wiederkehrsatzes ein abgeschlossenes dynamisches System beliebig nahe an seinen Ausgangspunkt zurückkehrt. Wenn  $H$  also nur von der Dynamik abhängt, kann es nicht immer steigen. Boltzmann versuchte herauszuarbeiten, dass die Zeiten bis zu einer Rückkehr enorm lang sind (und entgegnete: “Bitte, warten Sie darauf.”).

Wir wollen dies genauer betrachten.

## 1.4 Der Poincarésche Wiederkehrsatz

Mathematisch lässt sich die Situation wie folgt beschreiben: Das Gas mit  $N$  Teilchen ist beschrieben durch  $2N$  Koordinaten (also typischerweise einem Element aus dem  $\mathbb{R}^{6N}$ )

$$q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N,$$

wobei die  $q_i$  die Ortskoordinaten und die  $p_i$  die Impulskoordinaten des  $i$ -ten Partikels beschreiben. Das Verhalten des Systems wird durch die HAMILTONFUNKTION

$$H(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)$$

(die  $t$  nicht explizit enthält) und die Bewegungsgleichungen

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

festgelegt. Es folgt, dass  $H$  (das man nicht mit der Entropie  $H$  verwechseln sollte) eine Konstante der Bewegungen des Systems ist (Energieerhaltungssatz) und wir nehmen weiter an, dass die “Energiefläche”

$$\mathcal{E} = \{(q, p) : H(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) = E\}$$



eine BESCHRÄNKTE MENGE ist.

Nun angenommen, wir starten unser System im Punkte

$$P_0 = (q_1^0, \dots, q_N^0, p_1^0, \dots, p_N^0).$$

Die Position des Teilchens  $i$  zur Zeit  $t$  ist eine Funktion  $(f_i, g_i)$ , die man aus der Lösung der Bewegungsgleichung erhält:

$$\begin{aligned} q_i(t) &= f_i(q_1^0, \dots, q_N^0, p_1^0, \dots, p_N^0), \\ p_i(t) &= g_i(q_1^0, \dots, q_N^0, p_1^0, \dots, p_N^0). \end{aligned}$$

Die Gesamtheit all dieser Funktionen definiert eine einparametrische Familie  $(T_t)_{t \in \mathbb{R}^+}$  von Transformationen des Zustandsraums des Systems – dieses heißt  $\Gamma$  – in sich selbst:

$$P_t = T_t P_0.$$

Der berühmte Satz von Liouville besagt nun, dass das Lebesguemaß  $\lambda^{6N}$  unter  $T$  invariant ist, also

$$\lambda^{6N}(A) = \lambda^{6N}(T_t A)$$

für alle messbaren Mengen  $A \subseteq \mathbb{R}^{6N}$  und alle  $t \in \mathbb{R}^+$ .

Wenn wir uns nun auf  $\mathcal{E}$  beschränken, impliziert der Satz von Liouville das folgende: Falls wir auf  $\mathcal{E}$  das Maß  $\mu$  vermöge

$$\mu(A) = \int_A \|\nabla H\|^{-1} d\sigma$$

(wobei wir annehmen, dass  $\|\nabla H\| > c > 0$  auf  $\mathcal{E}$  gilt, so dass  $\mu(\mathcal{E}) < +\infty$  ist), wobei  $\sigma$  ein Oberflächenelement ist und

$$\|\nabla H\|^2 = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial H}{\partial p_i} \right)^2 + \left( \frac{\partial H}{\partial q_i} \right)^2,$$

dann gilt

$$\mu(T_t(A)) = \mu(A).$$

All dies nur zur Einleitung.

Abstrakt sind wir in der folgenden Situation: Wir haben auf einer Menge  $\Omega$  eine  $\sigma$ -Algebra und ein endliches Maß  $\mu$  gegeben, wir können o.B.d.A. annehmen, dass

$$\mu(\Omega) = 1$$

gilt. Darüber hinaus haben wir eine einparametrische Familie  $(T_t)_{t \in \mathbb{R}^+}$  maßerhaltender, bijektiver Abbildungen von  $\Omega$  in sich gegeben (die Tatsache, dass die Abbildungen in unserem Beispiel bijektiv sind, folgt trivial aus den Bewegungsgleichungen). Wir nehmen an, dass die  $(T_t)_{t \in \mathbb{R}^+}$  eine Halbgruppe sind, d. h. dass  $T_t \circ T_s = T_{t+s}$  gilt.

Der Poincarésche Wiederkehrsatzt lautet nun:

**Theorem 1.22** Sei  $A$  eine meßbare Teilmenge von  $\Omega$  mit  $\mu(A) > 0$ . Dann gibt es für fast alle  $\omega \in A$  beliebig große Werte  $t \in \mathbb{R}^+$ , so dass

$$T_t(\omega) \in A$$

gilt.

**Beweis:** Es genügt, diskrete Zeiten  $T_1, T_2, \dots$  zu betrachten. Offensichtlich gilt

$$T_2 = T_1^2, T_3 = T_1^3, \text{ etc.}$$

Sei

$$A_1 = \{\omega \in A : T_1\omega \in A\}$$

und iterativ

$$A_n := \{\omega \in A : T_1\omega \notin A, \dots, T_{n-1}\omega \notin A, T_n\omega \in A\}.$$

Sei für eine Menge  $B$

$$\chi_B(\omega) = \begin{cases} 1 & \omega \in B \\ 0 & \omega \notin B \end{cases}.$$

Dann gilt

$$\chi_{A_n}(\omega) = \chi_A(\omega)(1 - \chi_A(T_1(\omega))) \dots (1 - \chi_A(T_1^{n-1}(\omega)))\chi_A(T_1^n(\omega))$$

und daher

$$\mu(A_n) = \int_{\Omega} \chi_A(\omega)(1 - \chi_A(T_1(\omega))) \dots (1 - \chi_A(T_1^{n-1}(\omega)))\chi_A(T_1^n(\omega))d\mu.$$

Setzen wir nun

$$f_n = \int_{\Omega} (1 - \chi_A(\omega))(1 - \chi_A(T_1(\omega))) \dots (1 - \chi_A(T_1^{n-1}(\omega)))d\mu.$$

Dann lässt sich  $\mu(A_n)$  ausdrücken als

$$\mu(A_n) = f_{n-1} - 2f_n + f_{n+1}$$

unter der Randbedingung  $f_0 = 1$ . Tatsächlich folgt diese Formel aus der Tatsache, dass  $T$  maßerhaltend ist, z. B. für  $\mu(A_3)$ :

$$\begin{aligned} \mu(A_3) &= \int_{\Omega} \chi_A(\omega)(1 - \chi_A(T_1(\omega)))(1 - \chi_A(T_1^2(\omega)))\chi_A(T_1^3(\omega))d\mu \\ &= \int_{\Omega} (1 - \chi_A(T_1(\omega)))(1 - \chi_A(T_1^2(\omega)))d\mu \\ &\quad - \int_{\Omega} (1 - \chi_A(\omega))(1 - \chi_A(T_1(\omega)))(1 - \chi_A(T_1^2(\omega)))d\mu \\ &\quad - \int_{\Omega} (1 - \chi_A(T_1(\omega)))(1 - \chi_A(T_1^2(\omega)))(1 - \chi_A(T_1^3(\omega)))d\mu \\ &\quad + \int_{\Omega} (1 - \chi_A(\omega))(1 - \chi_A(T_1(\omega)))(1 - \chi_A(T_1^2(\omega)))(1 - \chi_A(T_1^3(\omega)))d\mu. \end{aligned}$$

In der Tat ergeben sich die ersten beiden Integrale zu

$$\int_{\Omega} \chi_A(\omega)(1 - \chi_A(T_1(\omega)))(1 - \chi_A(T_1^2(\omega)))d\mu$$

und die beiden letzten zu

$$- \int_{\Omega} \chi_A(\omega)(1 - \chi_A(T_1(\omega)))(1 - \chi_A(T_1^2(\omega)))(1 - \chi_A(T_1^3(\omega)))d\mu,$$

also in der Summe  $\mu(A_3)$ . Da nun  $T$  maßerhaltend ist, sind die beiden mittleren Integrale einander gleich und zwar exakt gleich  $f_3$ . Also

$$\mu(A_3) = f_2 - 2f_3 + f_4.$$

Für allgemeines  $n$  geht dies ebenso. Der Clou ist nun, dass in der Summe  $\sum_{k=1}^n \mu(A_k)$  die meisten Terme verschwinden:

$$\sum_{k=1}^n \mu(A_k) = 1 - f_1 - (f_n - f_{n+1}).$$

Nun ist nach Konstruktion  $(f_n)$  eine fallende und (durch 0) von unten beschränkte Folge. Also existiert  $\lim f_n$ , und somit gilt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (f_n - f_{n+1}) = 0.$$

Also ergibt sich

$$\sum_{k=1}^{\infty} \mu(A_k) = 1 - f_1 = \mu(A).$$

Da die  $(A_k)$  konstruktionsgemäß paarweise disjunkt sind, gilt für fast jedes  $\omega \in A$ , dass wenigstens eine der iterierten Abbildungen  $T_1(\omega), T_2(\omega), \dots$  in  $A$  ist. Dies impliziert sofort, dass unendlich viele Iterationen in  $A$  landen. In der Tat: Sei  $D_\ell$  die Menge aller  $\omega$ , so dass  $\omega \in A$  und  $T^n \omega \notin A$  für alle  $n \geq \ell$ . Wendet man dann das soeben gezeigte auf  $T_1^\ell$  anstelle von  $T_1$  an, so ergibt sich

$$\mu(D_\ell) = 0$$

und somit auch

$$\mu\left(\bigcup_{\ell \geq 1} D_\ell\right) = 0.$$

Somit kehrt beinahe jeder Punkt aus  $A$  unter iterativer Abbildung durch  $T$  unendlich oft nach  $A$  zurück.  $\square$

Eine sehr naheliegende Frage, die, wie oben erwähnt, auch durch Boltzmann aufgeworfen wurde, ist die nach der durchschnittlichen Zeit, die eine solche Rückkehr benötigt (diese Zeit heißt auch die Länge eines Poincaré-Zyklus).

Für diskrete Zeit  $t = 1, 2, \dots$  ist diese definiert als

$$\Theta_1^* = \frac{1}{\mu(A)} \sum_{k=1}^{\infty} k \mu(A_k).$$

Misst man allgemeiner alle  $\tau$  Zeiteinheiten und ersetzt so  $T_1$  durch  $T_\tau$ , so ist die mittlere Rückkehrzeit definiert als

$$\Theta_\tau^* = \frac{\tau}{\mu(A)} \sum_{k=1}^{\infty} k \cdot \mu(A_k^\tau),$$

wobei

$$A_k^\tau = A \cap (T_\tau^{-1}(A))^c \cap \dots \cap (T_\tau^{-k-1}(A))^c \cap T_\tau^{-k}(A)$$

ist. Nun gilt nach dem eben gezeigten:

$$\sum_{k=1}^n k \mu(A_k) = \sum_{k=1}^n k(f_{k-1} - 2f_k + f_{k+1}) = 1 - f_n - n(f_n - f_{n+1}).$$

Nun ist die Summe links offenbar wachsend in  $n$ , also ist  $f_n + n(f_n - f_{n+1})$  fallend. Außerdem ist diese Folge offensichtlich durch 0 von unten beschränkt, denn  $f_n \geq 0$  und  $f_n \geq f_{n+1}$ . Somit existiert der Grenzwert

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f_n + n(f_n - f_{n+1}),$$

also auch der Grenzwert

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n(f_n - f_{n+1}).$$

Um den Grenzwert zu bestimmen, beobachten wir, dass

$$\sum_{n=1}^{\infty} (f_n - f_{n+1}) < +\infty,$$

da  $(f_n)$  konvergiert. Dies kann aber nur sein, wenn die einzelnen Summanden schneller als  $\frac{1}{n}$  gegen 0 konvergieren, also

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n(f_n - f_{n+1}) = 0.$$

Also ergibt sich

$$\sum_{k=1}^{\infty} k \mu(A_k) = 1 - \lim_{n \rightarrow \infty} f_n.$$

Ähnliches gilt für  $A_k^\tau$  und ein geeignet definiertes  $f_n^\tau$ . Nun nehmen wir an, dass  $T$  zu allen geforderten Eigenschaften auch ergodisch ist.

**Erinnerung:**  $T$  heißt ergodisch, falls aus

$$T(A) = A$$

folgt, dass

$$\mu(A) \in \{0, 1\}$$

ist.

Wir wollen zeigen, dass in diesem Fall

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f_n = 0$$

gilt. In der Tat ist ja

$$f_n = \mu(B_n) = \mu(\{\omega : \omega \notin A, T_\tau(\omega) \notin A, \dots, T_\tau^{n-1}(\omega) \notin A\}).$$

Da  $B_n$  fällt existiert

$$B = \bigcap_{n \geq 1} B_n.$$

Nun betrachte  $T_\tau B$ . Gilt

$$\omega \in T_\tau B,$$

so ist

$$T_\tau^{-1}(\omega) \in B,$$

also

$$T_\tau^{-1}(\omega) \notin A, \omega \notin A, T_\tau \omega \notin A, \dots,$$

also ist  $\omega \in B$ , d. h.

$$T_\tau B \subseteq B.$$

Ebenso zeigt man, dass auch

$$T_\tau^2 B \subseteq T_\tau B \subseteq B$$

gilt. Sei

$$C = \lim_{n \rightarrow \infty} T_\tau^n B.$$

Offenbar gilt

$$T_\tau C = C.$$

Aus der Ergodizität von  $T$  ergibt sich, dass

$$\mu(C) \in \{0, 1\}$$

gilt. Da nun

$$\mu(T_\tau^n B) = \mu(B) \quad \text{und} \quad T_\tau^{n+1} B \subseteq T_\tau^n B$$

gilt, folgt

$$\mu(B) = \mu(C) \in \{0, 1\}.$$

Nun impliziert aber  $\mu(B) = 1$ , dass auch  $\mu(B_1) = 1$  ist, also  $\mu(\omega \notin A) = 1$ , also  $\mu(A) = 0$  im Widerspruch zu unseren Annahmen. Somit ist  $\mu(B) = 0$ , aber das heißt auch, dass

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f_n = \mu(B) = 0$$

ist. Somit haben wir den folgenden Satz bewiesen.

**Satz 1.23** (Kac): Für bijektive, maßerhaltende, ergodische Abbildungen  $T$  gilt

$$\Theta_\tau^* = \frac{\tau}{\mu(A)}$$

für alle  $\tau > 0$ .

Der Nachteil dieser Formel wird offenkundig, wenn man den Limes  $\tau \rightarrow 0$  betrachtet, d. h. zu kontinuierlichen Systemen übergeht, dann erhalten wir stets

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \Theta_{\tau}^* = 0.$$

Dies ist natürlich deshalb der Fall, weil

$$\{\omega \in A, T_{\tau}\omega \in A\}$$

als eine Rückkehr zur Zeit  $\tau$  gewählt wird (obschon dies für sehr kleine  $\tau$  vermutlich keine echte Rückkehr sondern ein Verharren in  $A$  ist) und die Wahrscheinlichkeit dieses Ereignisses für  $\tau \rightarrow 0$  nahe bei 1 liegt. Einen Ausweg bietet eine Formel von Smoluchowski, der vorschlug, die mittlere Rückkehrzeit als

$$\Theta_{\tau} = \frac{\tau \sum_{k=1}^{\infty} k \mu(A_{k+1})}{\sum_{k=1}^{\infty} \mu(A_{k+1})}$$

zu definieren. Dies soll hier jedoch nicht weiter betrachtet werden.

## 1.5 Das Ehrenfestsche Urnenmodell

Durch die in Abschnitt 1.3 erwähnten Einwände von Loschmidt und Zermelo ist offenkundig, dass die naive Formulierung des Boltzmannschen Gesetzes, dass die Entropie stets wächst, unhaltbar ist. Boltzmann selbst sah, dass die Herleitung dieses Satzes auf statistischen Aussagen über die mittlere Anzahl von Kollisionen gewisser Art beruht (dem sogenannten “Stoßzahlansatz”) und schlug daher vor, das Wachstum der Entropie als eine rein statistische Aussage zu betrachten.

1911 unterzogen P. und T. Ehrenfest in einem sehr lesenswerten Artikel (Enc. Math. Wiss.) die Boltzmannsche Argumentation einer tiefgründigen Analyse. Grob gesprochen stellen sich zwei Fragen:

1. Ist es möglich, dass sich zeitliche Reversibilität und Rekurrenz auf der Mikroebene mit einem zeitlich irreversiblen Verhalten im Großen vereinbaren lassen?
2. Ist diese Vereinbarkeit im Rahmen der klassischen Mechanik möglich?

Problem 2 ist bis heute nicht wirklich gelöst, während Problem 1 zunächst rein logischer Natur ist. Es ist (im positiven Sinne) gelöst, wenn man ein Modell findet, dass die geforderten Eigenschaften aufweist. Ein solches Modell ist das EHRENFESTSCHE URNENMODELL. Dies lässt sich folgendermaßen beschreiben:

$2R$  Kugeln, die von 1 bis  $2R$  nummeriert sind, werden in eine Schachtel  $A$  gelegt. Zu diskreten Zeitpunkten  $t = 1, 2, \dots$  tut man mit Wahrscheinlichkeit  $\frac{1}{2}$  gar nichts (dies nur, um die resultierende Markovkette aperiodisch zu machen) und mit Wahrscheinlichkeit  $\frac{1}{2}$  zieht man eine Kugel und legt sie in eine zweite Schachtel  $B$ . So fährt man

fort, wobei man jeweils mit Wahrscheinlichkeit  $\frac{1}{2}$  nichts tut und mit Wahrscheinlichkeit  $\frac{1}{2}$  eine Kugel von  $1, \dots, 2R$  zieht und in die jeweils andere Schachtel legt.

Intuitiv ist klar, was geschieht. So lange die Anzahl der Kugeln in  $A$  – sagen wir  $n_A$  – sehr viel größer ist als  $R$ , sollten wir einen “Fluss” von Schachtel  $A$  nach Schachtel  $B$  beobachten; die Wahrscheinlichkeit, dass eine Kugel von  $A$  nach  $B$  wandert ist überwältigend viel größer als die Wahrscheinlichkeit, dass eine Kugel den umgekehrten Weg von  $B$  nach  $A$  nimmt. Wir haben somit global eine “beinahe irreversible” Bewegung.

Betrachten wir das ganze mathematisch: Sei  $n_A(t)$  die Anzahl der Kugeln in  $A$  zur Zeit  $t$ . Um die zeitliche Reversibilität des Systems zu diskutieren, berechnen wir

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(n_A(t+1) = n | n_A(t) = m) &\quad \text{und} \\ \mathbb{P}(n_A(t-1) = n | n_A(t) = m). \end{aligned}$$

Die erste Wahrscheinlichkeit berechnet sich als

$$\mathbb{P}(n_A(t+1) = n | n_A(t) = m) = \frac{1}{4R} m \delta_{\{n=m-1\}} + \frac{1}{4R} (2R - m) \delta_{\{n=m+1\}} + \frac{1}{2} \delta_{\{n=m\}}$$

(wobei  $\delta$  das Kronecker-Symbol ist). Die zweite ist etwas umständlicher herzuleiten.

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(n_A(t-1) = n | n_A(t) = m) &= \frac{\mathbb{P}(n_A(t-1) = n, n_A(t) = m)}{\mathbb{P}(n_A(t) = m)} \\ &= \mathbb{P}(n_A(t) = m | n_A(t-1) = n) \cdot \frac{\mathbb{P}(n_A(t-1) = n)}{\mathbb{P}(n_A(t) = m)} \\ &= \left( \frac{n}{4R} \delta_{\{m=n-1\}} + \frac{2R-n}{4R} \delta_{\{m=n+1\}} + \frac{1}{2} \delta_{\{n=m\}} \right) \cdot \frac{\mathbb{P}(n_A(t-1) = n)}{\mathbb{P}(n_A(t) = m)}. \end{aligned}$$

Nun hängen die Wahrscheinlichkeiten  $\mathbb{P}(n_A(t-1) = n)$  und  $\mathbb{P}(n_A(t) = m)$  sowohl von  $t$  als auch von der anfänglichen Anzahl  $n_0$  von Kugeln in  $A$  ab. Es ist jedoch plausibel und eine Konsequenz aus dem Ergodensatz für Markovketten, den wir gleich in Erinnerung rufen werden, dass diese Abhängigkeit für große  $t$  verschwindet. Hierzu rufe man sich vor Augen, dass  $n_A(t)$  in  $t$  eine Markovkette ist, also ein stochastischer Prozess in diskreter Zeit mit Übergangswahrscheinlichkeiten

$$\begin{aligned} &\mathbb{P}(n_A(t) = n | n_A(t-1) = m, n_A(t-2) = n_{t-2}, \dots, n_A(0) = n_0) \\ &= \mathbb{P}(n_A(t) = n | n_A(t-1) = m) = \frac{m}{4R} \delta_{\{n=m-1\}} + \frac{2R-m}{4R} \delta_{\{n=m+1\}} + \frac{1}{2} \delta_{\{n=m\}} \\ &:= Q(m, n). \end{aligned}$$

$(Q(m, n))_{m, n=0}^{2R}$  heißt die zu der Markovkette gehörige stochastische Matrix. Wie wir schon festgestellt haben, genügen Markovketten dem Ergodensatz.

Wir wollen nun feststellen, dass die Markovkette  $n_A(t)$  aus dem Ehrenfestschen Urnenmodell den Anforderungen des Ergodensatzes genügt.

**Satz 1.24**  $n_A(t)$  genügt dem Ergodensatz.

**Beweis:** Zunächst sei bemerkt, dass die Markovkette irreduzibel ist, d. h. für

$$n, m \in \{0, \dots, 2R\}$$

existiert  $t$ , so dass

$$\mathbb{P}(n_A(t) = n | n_A(0) = m) > 0$$

gilt (in der Tat kann man  $t \leq 2R$  wählen). Wegen der positiven Wahrscheinlichkeit, dass die Kette stehen bleibt, gilt sogar

$$\mathbb{P}(n_A(t) = n | n_A(0) = m) > 0$$

für alle  $t \geq 2R$  und alle  $n, m \in \{0, \dots, 2R\}$ . Dies aber ist gleichbedeutend mit

$$Q^N \gg 0$$

für alle  $N \geq 2R$ . □

Das im Ergodensatz auftretende Limesmaß berechnet sich wie folgt:

**Satz 1.25** Sei  $\rho$  das invariante Maß der Markovkette  $n_A(\cdot)$ . Dann gilt

$$\rho(m) = \binom{2R}{m} 2^{-2R}.$$

**Beweis:** Das rechnet man nach. □

Das Interessante daran ist, dass sich für dieses  $\rho$  die Identität

$$Q(n, m)\rho(n) = Q(m, n)\rho(m)$$

ableiten lässt. Vergegenwärtigen wir uns noch einmal, dass

$$Q(n, m) = \mathbb{P}(n_A(t) = m | n_A(t-1) = n)$$

(und eine analoge Formel für  $Q(m, n)$ ) gilt und für große Zeiten  $t$

$$\rho(n) = \mathbb{P}(n_A(t) = n) = \mathbb{P}(n_A(t-1) = n)$$

(und eine analoge Identität für  $\rho(m)$ ), so lässt sich aus dieser Identität

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(n_A(t-1) = n | n_A(t) = m) &= \frac{\rho(n)}{\rho(m)} \left( \frac{n}{4R} \delta_{\{n=m+1\}} + \frac{2R-n}{4R} \delta_{\{n=m-1\}} + \frac{1}{2} \delta_{\{n=m\}} \right) \\ &= \mathbb{P}(n_A(t+1) = n | n_A(t) = m) \end{aligned}$$

folgern.

In der Tat ist das Modell also (auf lange Sicht) zeitlich reversibel. Andererseits besagt der Ergodensatz für  $n_A(\cdot)$ , dass die Entropie als RELATIVE ENTROPIE bezüglich



$\rho$  stets fällt. Schließlich folgt aus der Irreduzibilität der Kette, dass sie jeden Zustand unendlich oft besucht. Wir haben also ein System gefunden, das den Anforderungen der ersten der aufgeworfenen Fragen genügt.

**Bemerkung:** In der Tat birgt das vorgestellte Modell allerdings eine kleine Falle: Die Berechnung der zeitlichen Reversibilität benutzte den Ergodensatz und vor allem die Approximation

$$\mathbb{P}(n_A(t) = m) \approx \rho(m) \quad \forall m.$$

Dies aber stimmt exakt nur, wenn sich das Modell im Gleichgewicht befindet, die Approximation also eine Gleichheit ist. Dann jedoch ist die relative Entropie konstant.

Wir wollen das Ehrenfestsche Urnenmodell hier verlassen und uns anderen Fragestellungen zuwenden, obschon es auch zu diesem Modell noch viel zu sagen gäbe.

**Bemerkung:** Eine letzte Bemerkung zum Boltzmannschen Argument, dass eine Rückkehr in einen unwahrscheinlichen Anfangszustand wesentlich länger dauert als die Beobachtungszeiträume, in denen ein Anwachsen der Entropie beobachtet wird. In der Tat kann man die folgende Überschlagsrechnung anstellen: Zöge man statt immer einer Kugel immer  $R$  Kugeln und ließe diese die Urnen tauschen, so wäre die Wahrscheinlichkeit, in einem Sprung von  $n_A(t) = R$  zu  $n_A(t+1) = 2R$  zu kommen,

$$\frac{R!}{(2R)^R} \approx \frac{\sqrt{R}}{(2e)^R} \leq \frac{1}{2^{2R}}.$$

Die Rückkehrzeit von einer mit der Hälfte der Kugeln gefüllten Urne zu einer vollen Urne sollte also mindestens  $2^{2R}$  betragen. Bedenkt man, dass  $R$  für realistische Systeme von der Ordnung

$$R \approx 10^{23}$$

ist, so ist das gigantisch viel länger als jeder für natürliche Prozesse relevante Zeitraum.

## 2 Gittergase und Spinsysteme

Die ersten Objekte, die man Studien der statistischen Mechanik unterzog, waren sogenannte freie Gase, also Gase, bei denen man annimmt, dass die einzelnen Moleküle nicht miteinander wechselwirken. Dies entspricht auf der wahrscheinlichkeitstheoretischen Seite Systemen unabhängiger Zufallsvariablen. Ihr Studium verläuft recht ähnlich den Prinzipien großer Abweichungen, die wir schon in der Stochastik kennengelernt haben sowie einigen Schritten aus dem letzten Kapitel.

Wir werden uns daher auf etwas realistischere Systeme stürzen, die auch Wechselwirkungen zwischen den Teilchen ermöglichen. Um umgekehrt die Systeme nicht zu kompliziert werden zu lassen, beschränken wir die Anzahl ihrer Freiheitsgrade

und lassen die Teilchen nur auf den Knoten eines Gitters leben. Dieses wird für die Zwecke dieser Vorlesung stets  $\mathbb{Z}^d$ ,  $d \geq 1$ , sein.

## 2.1 Gittergase

Sei  $\Lambda \subseteq \mathbb{Z}^d$  eine endliche Teilmenge. Wir identifizieren  $\Lambda$  mit seinen Knoten und stellen uns vor, dass in den Knoten von  $\Lambda$  Teilchen in verschiedenen Zuständen leben. Diese Zustände können z. B. “anwesend” = 1 und “abwesend” = 0 sein oder z. B. verschiedenen Magnetisierungen “spin up” = +1 und “spin down” = -1 entsprechen. Wir werden annehmen, dass nur Paare von Teilchen miteinander wechselwirken. Die Wechselwirkungsenergie zwischen Teilchen  $x_i$  an der Stelle  $i \in \Lambda$  und Teilchen  $x_j$  an der Stelle  $j \in \Lambda$  sei durch die Funktion

$$\varphi_{i,j}(x_i, x_j)$$

beschrieben. Die Gesamtenergie des Systems bestimmt sich dann als

$$H_\Lambda(x_1, \dots, x_N) = \sum_{i \neq j \in \Lambda} \varphi_{i,j}(x_i, x_j).$$

Ein physikalisches Prinzip besagt, dass Systeme stets Zustände niedriger Energie aufsuchen und dass Zustände hoher Energie exponentiell unwahrscheinlich sind. Dem entspricht der Ansatz eines Gibbs-Maßes für die Partikelkonfiguration  $(x_1, \dots, x_N)$ ,  $N = |\Lambda|$ , als

$$\mu_{\Lambda,\beta}(x_1, \dots, x_N) = \frac{e^{-\beta H_V(x_1, \dots, x_N)}}{Z_{\Lambda,\beta}}.$$

Hierbei ist  $\beta > 0$  die inverse Temperatur, also  $\beta = \frac{1}{T}$  und die bei den Physikern auftretende Boltzmann-Konstante  $k$  haben wir  $k \equiv 1$  gesetzt.  $Z_{\Lambda,\beta}$  heißt die Zustandssumme und muss sich als

$$Z_{\Lambda,\beta} = \sum_{x_1, \dots, x_N \in \Lambda} e^{-\beta H_N(x_1, \dots, x_N)}$$

schreiben lassen, um  $\mu_{\Lambda,\beta}$  zu einem Wahrscheinlichkeitsmaß zu machen. Dies ist (im wesentlichen) die Standardform eines Gittergases. Allerdings sei hier erwähnt, dass man zumeist von Gittergasen im engeren Sinne nur dann spricht, wenn die Wechselwirkung von der Form

$$\varphi_{i,j}(x_i, x_j) = f(i, j) \delta_{x_i} \delta_{x_j}$$

ist. Hierbei ist  $f(i, j)$  eine Funktion der Gitterplätze  $i$  und  $j$  und

$$\delta_{x_i} = \begin{cases} 1 & x_i = 1 \\ 0 & x_i = 0 \end{cases}$$

und die  $x_i$  nehmen Werte 0 und 1 ein. Man stellt sich also die jeweiligen Gitterplätze als “belegt” oder “frei” vor. Oft benötigt man noch einen “Korrekturfaktor”, die chemische Energie, damit nicht die günstigsten Zustände diejenigen sind, in denen

entweder  $x_i = 1 \quad \forall i \in \Lambda$  oder  $x_i = 0 \quad \forall i \in \Lambda$  gilt. Die Gesamtenergie nimmt dann die Form

$$H_V(x_1, \dots, x_N) = \sum_{i \neq j \in \Lambda} f(i, j) x_i x_j - \frac{\mu}{\beta} \sum_{i \in \Lambda} x_i, \quad \mu \in \mathbb{R},$$

an.

## 2.2 Spin-Systeme

Im Gegensatz zu Gittergasen stellen wir uns bei Spin-Systemen alle Plätze von  $\Lambda$  als “belegt” vor, allerdings können die Teilchen dort in verschiedenen Zuständen sein.

Der Prototyp dieses Modells wurde 1924 von E. Ising in seiner Dissertation unter Anleitung von Lenz untersucht. Es ist ein Spielzeugmodell zur Erklärung magnetischer Phänomene. Eine fundamentale Erklärung solcher Phänomene müsste eine quantenmechanische Ableitung liefern und entsprechend Systeme von  $10^{23}$  gekoppelten Schrödingergleichungen untersuchen.

Das sogenannte Ising-Modell wählt einen einfachen Ansatz: Es sei  $\Lambda \subseteq \mathbb{Z}^d$  eine endliche Menge und  $S = \{-1, +1\}$ . Eine Spinkonfiguration  $\sigma$  ist ein Element

$$\sigma \in \{-1, +1\}^\Lambda = S^\Lambda.$$

Im Ising-Modell wird einem solchen  $\sigma \in S^\Lambda$  die Wechselwirkungsenergie

$$H_{\Lambda, h}(\sigma) = - \sum_{\substack{i \neq j \in \Lambda \\ \langle i, j \rangle}} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i$$

zugeordnet. Hierbei ist  $h > 0$  die sogenannte Stärke des magnetischen Feldes und  $\sigma \in S^\Lambda$  hat die Komponenten  $\sigma_i$ ,  $i \in \Lambda$  und  $\langle i, j \rangle$  bedeutet  $i$  und  $j$  sind Nachbarn. Es ist offensichtlich, dass sich das Ising-Modell in ein Gittergas übersetzen lässt vermöge der Transformation

$$x_i = \frac{\sigma_i + 1}{2}.$$

Wählt man statt  $S = \{-1, +1\}$  eine andere Menge oder eine andere Interaktionsenergie, so erhält man ein allgemeines Spinsystem.

Eine wesentliche Größe bei all diesen Spinsystemen ist die sogenannte Magnetisierung

$$m_\Lambda = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i.$$

Da sie, insbesondere im Fall des Ising-Modells, ein Maß für die Ordnung des Systems ist, spricht man auch von einem Ordnungsparameter. Analog zum Gittergas definiert man das Gibbs-Maß

$$\mu_{\Lambda, \beta, h}(\sigma) = \frac{e^{-\beta H_{\Lambda, h}(\sigma)}}{Z_{\Lambda, \beta, h}}$$

mit

$$Z_{\Lambda, \beta, h} = \sum_{\sigma' \in S^\Lambda} e^{-\beta H_{\Lambda, h}(\sigma')}.$$

Eine wesentliche Größe bei der Untersuchung solcher Systeme stellt die FREIE ENERGIE dar:

$$F_{\Lambda,\beta,h} = -\frac{1}{\beta} \log Z_{\Lambda,\beta,h}.$$

Wie A. Bovier in seinem Buch beschreibt, stellt das Ising-Modell einen Wendepunkt in der statistischen Mechanik dar, da es zum ersten Mal versucht, andere Phänomene zu erklären als die der Thermodynamik (nämlich den Ferromagnetismus) und zum anderen bereit ist, eine sehr komplizierte Ausgangssituation (elektromagnetische und quantenmechanische Wechselwirkung) durch einfachere Annahmen zu ersetzen. Beides kann man auch heute noch beobachten. Die Prinzipien der statistischen Mechanik finden heute Anwendung bei der Erklärung so verschiedenartiger Phänomene wie Gehirnleistung oder soziologischem Verhalten. Dabei setzt man oft auf sehr vereinfachte Modelle, in der Hoffnung, dass diese archetypisch sind für komplexere Modelle. Diese Annahmen nennt man UNIVERSALITÄTSHYPOTHESE.

Wir werden in dieser Vorlesung zunächst verschiedene magnetische Modelle diskutieren. Diese Diskussion beginnen wir mit einer kurzen Untersuchung der freien Energie.

### 2.3 Die Existenz der freien Energie

Wir wollen in diesem kurzen Abschnitt zeigen, dass im Ising-Modell (und vielen anderen Modellen) die freie Energie pro Punkt

$$-\frac{1}{\beta|\Lambda|} \log Z_{\Lambda,\beta,h}$$

für  $|\Lambda| \rightarrow \infty$  in einem geeigneten Sinne existiert. Genauer beweisen wir

**Satz 2.1** *Falls die freie Energie  $F_{\Lambda,\beta,h}$  eines Systems subadditiv ist, d. h. falls*

$$-F_{\Lambda,\beta,h} \leq -F_{\Lambda_1,\beta,h} - F_{\Lambda_2,\beta,h}$$

*für  $\Lambda = \Lambda_1 \cup \Lambda_2$  und  $\Lambda_1 \cap \Lambda_2 = \emptyset$ ,  $\Lambda_1, \Lambda_2 \subseteq \mathbb{Z}^d$  endlich gilt, so existiert für jede Folge von Rechtecken  $\Lambda_1 \subseteq \Lambda_2 \subseteq \Lambda_n \subseteq \dots$  mit  $\Lambda_n \uparrow \mathbb{Z}^d$ , d. h. für jede beschränkte Menge  $A \subseteq \mathbb{Z}^d$  existiert ein  $n$  mit  $A \subseteq \Lambda_n$ , der Limes*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda_n|} F_{\Lambda_n,\beta,h} = f_{\beta,h}.$$

*Ist ferner*

$$\frac{\sup_{\sigma} H_{\Lambda}(\sigma)}{|\Lambda|} \geq C > -\infty$$

*für alle endlichen  $\Lambda \subseteq \mathbb{Z}^d$ , so ist  $f_{\beta,h}$  endlich.*

**Beweis:** Dies folgt aus dem folgenden Lemma (bzw. einer einfachen mehrdimensionalen Fassung), das wir schon aus der Wahrscheinlichkeitstheorie I kennen.  $\square$

**Lemma 2.2** Ist  $(a_n)$  eine Folge mit

$$a_{n+m} \leq a_n + a_m,$$

dann existiert  $\lim \frac{1}{n}a_n$  und es gilt

$$\lim \frac{1}{n}a_n = \inf \frac{1}{n}a_n.$$

**Korollar 2.3** Die freie Energie pro Punkt  $f_{\beta,h}$  existiert im Ising-Modell. Sie ist endlich.

**Beweis:** Wir behandeln nur den Fall periodischer Randbedingungen, d. h.

$$H_\Lambda(\sigma) = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i.$$

wobei  $\langle i, j \rangle$  jetzt bedeutet, dass  $i$  und  $j$  in dem periodisch fortgesetzten Gitter  $\Lambda$  Nachbarn sind. Definiere

$$\bar{H}(\sigma) = \bar{H}_\Lambda(\sigma) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \in \Lambda \\ \langle i,j \rangle}} (\sigma_i - \sigma_j)^2 - h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i.$$

Dann gilt

$$H(\sigma) - \bar{H}(\sigma) = -2d|\Lambda|,$$

da zu jedem Punkt ein  $4d\sigma_i^2$  hinzukommt, wobei  $d$  die Dimension des Systems ist. Also gilt für die zugehörigen freien Energien  $F$  und  $\bar{F}$

$$F - \bar{F} = -2d|\Lambda|.$$

Ist also  $\bar{F}$  subadditiv, so auch  $F$ .  $\bar{F}$  aber ist subadditiv, denn für seine Zustandssumme  $\bar{Z}$  gilt:

$$\bar{Z}_{\Lambda,\beta,h} = \sum_{\sigma_i, i \in \Lambda_1} \sum_{\tau_j, j \in \Lambda_2} \exp(-\beta(\bar{H}_{\Lambda_1}(\sigma) + \bar{H}_{\Lambda_2}(\tau))) \times \exp(-\beta \sum_{\substack{i \in \Lambda_1, j \in \Lambda_2 \\ \langle i,j \rangle}} (\sigma_i - \tau_j)^2),$$

wenn  $\Lambda = \Lambda_1 \cup \Lambda_2$  und  $\Lambda_1 \cap \Lambda_2 = \emptyset$  ist. Also ist

$$\bar{Z}_{\Lambda,\beta,h} \leq \bar{Z}_{\Lambda_1,\beta,h} \bar{Z}_{\Lambda_2,\beta,h}$$

und somit

$$-\bar{F}_{\Lambda,\beta,h} \leq -\bar{F}_{\Lambda_1,\beta,h} - \bar{F}_{\Lambda_2,\beta,h},$$

was zu zeigen war. Schließlich ist  $f_{\beta,n}$  endlich, weil

$$H_\Lambda(\sigma) \geq -4|\Lambda|$$

für alle  $\sigma$ . □

**Bemerkung:** Man kann sogar auf die strenge Subadditivität verzichten. Dies wird z. B. in Simons Buch gut erklärt.

## 2.4 Das eindimensionale Ising-Modell

Wir kommen nun zur Diskussion des Ising-Modells in einer Dimension. Dies war der zentrale Untersuchungsgegenstand von Isings Dissertation. Er fand (richtigerweise), dass dieses Modell in  $d = 1$  keine magnetische Phase aufweist und übertrug dieses Argument (fälschlicherweise) auf höhere Dimensionen. Es ist gewissermaßen eine Ironie der Geschichte, dass Ising nicht nur für diese nur halbrichtige Arbeit promoviert wurde, sondern dass dieses Modell auch heute noch seinen Namen trägt.

Betrachten wir noch einmal das Ising-Modell bzw. das zugehörige Gibbs-Maß

$$\mu_{\Lambda,\beta,h}(\sigma) = \frac{e^{\beta \sum_{\langle i,j \rangle \in \Lambda} \sigma_i \sigma_j + \beta h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i}}{Z_{\Lambda,\beta,h}}.$$

Mit ein wenig Nachdenken sieht man, warum dieses Modell überhaupt ein interessantes Modell für Magnetismus sein kann: Es hat die Chance sich für große  $\beta$  (kleine Temperaturen) grundsätzlich anders zu verhalten als für kleine  $\beta$  (hohe Temperaturen). In der Tat bevorzugt der Energieterm im Gibbs-Maß Zustände mit möglichst viel gleichgerichteten Spins. Andererseits gibt es davon auch nur exponentiell wenig (aus Entropiegründen). Wir haben es also mit einer Art Wettkampf zwischen Energie und Entropie zu tun. Da erstere einen Faktor  $\beta$  mit sich führt, letztere aber nicht, könnte es sein, dass manchmal die Energie gewinnt (Zustände großer Ordnung haben große Wahrscheinlichkeit) und manchmal die Entropie (Zustände hoher Unordnung sind am wahrscheinlichsten). Wir würden daher für genügend große  $\beta$  einen Sprung der Magnetisierung für  $h = 0$  und  $h \neq 0$  erwarten. Einen solchen Sprung nennt man Phasenübergang. Leider tritt er im eindimensionalen Ising-Modell nicht auf. Wir schreiben in einer Dimension

$$H_N(\sigma) = - \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_{i=1}^N \sigma_i,$$

wobei es ein kleines Problem mit den Punkten  $i = 1$  und  $i = N$  gibt, da diese als einzige nur einen Nachbarn besitzen. Wir werden in höher dimensionalen Modellen noch sehen, dass dies in der Tat einen wesentlichen Punkt berührt. Hier werden wir die einfachste Lösung wählen und die Punkte  $1, \dots, N$  auf einem Kreis anordnen, so dass die Addition in der Berechnung von  $H_N$  "modulo  $N$ " zu nehmen ist. Dann berechnet sich

$$Z_{N,\beta,h} = \sum_{\substack{\sigma_i = \pm 1 \\ i=1, \dots, N}} e^{\beta \sum \sigma_i \sigma_{i+1} + \beta h \sum \sigma_i} = \sum_{\substack{\sigma_i = \pm 1 \\ i=1, \dots, N}} \prod_{i=1}^N e^{\beta \sigma_i \sigma_{i+1} + \beta h \sigma_i}.$$

Schreiben wir für  $s, s' \in \{-1, +1\}$

$$L(s, s') = e^{\beta s s' + \beta h s}$$

und fassen dies als eine  $2 \times 2$  Matrix auf, die wir  $L$  nennen, so ist

$$Z_{N,\beta,h} = \sum_{\substack{\sigma_i = \pm 1 \\ i=1, \dots, N}} L(\sigma_1, \sigma_2) L(\sigma_2, \sigma_3) \dots L(\sigma_N, \sigma_1) = \text{tr} L^N.$$

Aber die Spur von  $L^N$  lässt sich berechnen: Hat  $L$  die Eigenwerte  $\lambda_1$  und  $\lambda_2$ , so ist

$$\text{tr} L^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N.$$

Nun berechnen sich  $\lambda_1$  und  $\lambda_2$  als

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= e^\beta \cosh(\beta h) + \sqrt{e^{2\beta} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta}} \\ \lambda_2 &= e^\beta \cosh(\beta h) - \sqrt{e^{2\beta} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta}}.\end{aligned}$$

Da  $\lambda_1 > \lambda_2$ , folgt

$$\begin{aligned}\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z_{N,\beta,h} = \log \lambda_1 &= \log \left( e^\beta \cosh(\beta h) + \sqrt{e^{2\beta} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta}} \right) \\ &= \beta + \log \left( \cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta}} \right).\end{aligned}$$

Also

$$f_{\beta,h} = -1 - \frac{1}{\beta} \log \left( \cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta}} \right).$$

Nun ist nach dem Satz von der majorisierten Konvergenz

$$\begin{aligned}-\frac{\partial}{\partial h} f_{\beta,h} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta N} \frac{\sum_{\sigma} \frac{\partial}{\partial h} e^{\beta \sum \sigma_i, \sigma_{i+1} + \beta h \sum \sigma_i}}{Z_{N,\beta,h}} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \mathbb{E}_{\mu} \frac{1}{N} \sum \sigma_i =: m,\end{aligned}$$

wobei  $\mathbb{E}_{\mu}$  den Erwartungswert bzgl.  $\mu_{\beta,N,h}$  bezeichnet. Wir wollen diese Größe die asymptotische Magnetisierung nennen. Nun ist aber im eindimensionalen Ising-Modell

$$m = -\frac{\partial f_{\beta,h}}{\partial h} = \frac{\sinh(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta}}}.$$

Diese Größe ist für alle  $0 \leq \beta < \infty$  differenzierbar und monoton in  $h$ . Ein magnetisches Verhalten für  $h \rightarrow 0$  ist daher nicht erkennbar. Daraus folgerte Ising (und folgern auch wir), dass das Ising-Modell in einer Dimension nicht die gewünschten Effekte zeigt. Bevor wir nun höherdimensionale Versionen des Ising-Modells studieren, wollen wir ein Modell vorführen, das die gewünschten Effekte sehr wohl aufweist.

## 2.5 Das Curie-Weiss-Modell

1896 entdeckte Pierre Curie, dass Ferromagnetismus ein Tieftemperaturphänomen ist: oberhalb einer gewissen Temperatur, der sogenannten Curie-Temperatur, verschwindet das Phänomen. Auf Basis dieser Entdeckung entwickelte Weiss 1907 eine Theorie des Ferromagnetismus. Vom Gesichtspunkt des Ising-Modells lässt es sich folgendermaßen beschreiben: Ein "natürliches" Modell des Ferromagnetismus würde nicht nur eine nächste Nachbarschaftswchselwirkung wie im reinen Ising-Modell in

Betracht ziehen, sondern eine Wechselwirkung von  $\sigma_i$  mit allen anderen  $\sigma_j$ , wobei die Stärke der Wechselwirkung von  $|i - j|$  abhänge und beispielsweise quadratisch mit  $|i - j|$  abnähme. Dies ist jedoch ziemlich komplex – bislang haben wir ja noch nicht einmal das Ising-Modell in  $d \geq 2$  gelöst. Daher könnte man auf die Idee kommen, die Wechselwirkung von  $\sigma_i$  mit allen anderen Spins durch die Wechselwirkung von  $\sigma_i$  mit einem Spin der Magnetisierung  $\frac{1}{N} \sum \sigma_j$  zu ersetzen. Dies führt zu der Energie- bzw. Hamiltonfunktion

$$H_N(\sigma) = -\frac{1}{2N} \sum_{1 \leq i, j \leq N} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i.$$

Hierbei ist  $\sigma \in \{-1, +1\}^N$ . Zu beachten ist, dass man dieses Modell zwar auf  $\mathbb{Z}^d$  definieren kann, dass aber die Geometrie von  $\mathbb{Z}^d$  hier keine Rolle mehr spielt: Die Nachbarschaftsstruktur von  $i$  und  $j \in \mathbb{Z}^d$  ist im Curie-Weiss-Modell bedeutungslos. Wir kommen zu einem besonderen Vorteil des Curie-Weiss-Modells. Schon im vorigen Kapitel haben wir die Bedeutung der Magnetisierung gesehen. Wir definieren:

$$m_N(\sigma) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i.$$

Der große Vorteil des Curie-Weiss-Modells ist, dass die Energiefunktion eine Funktion des Ordnungsparameters  $m_N$  ist

$$H_N(\sigma) = -\frac{N}{2} [m_N(\sigma)]^2 - hN m_N(\sigma).$$

Diese Hamiltonfunktion hängt also von der mittleren Magnetisierung ab, man spricht auch von einem meanfield-Modell, einem Mittelwertmodell. Das zugehörige GIBBS-MASS ist von der Form

$$\mu_{N,\beta,h}(\sigma) = \frac{e^{\frac{\beta N}{2} m_N^2(\sigma) + N\beta h m_N(\sigma)}}{Z_{N,\beta,h}}$$

mit

$$Z_{N,\beta,h} = \sum_{\sigma} e^{\frac{\beta N}{2} m_N^2(\sigma) + N\beta h m_N(\sigma)}.$$

Um das Gibbs-Maß und die Zustandssumme berechnen zu können, erinnern wir an die Theorie großer Abweichungen.

**Definition 2.4** Eine Folge  $\mathbb{R}^d$ -wertiger Zufallsvariablen  $X_1, X_2, \dots$  genügt einem Prinzip der großen Abweichungen mit Geschwindigkeit  $N$  und Ratenfunktion  $I$ , falls

- $I$  von unten halbstetig ist und  $0 \leq I \leq +\infty$ ,  $I \not\equiv 0$ .
- $I$  kompakte Niveaumengen hat, d. h.

$$N_L = \{x : I(x) \leq L\}$$

ist kompakt für alle  $L > 0$ .



- Für alle  $A \in B^1$  gilt:

$$-\inf_{x \in \overset{\circ}{A}} I(x) \leq \liminf_{x \in \overset{\circ}{A}} \frac{1}{N} \log \mathbb{P}(X_N \in \overset{\circ}{A}) \leq \limsup_{x \in \bar{A}} \frac{1}{N} \log \mathbb{P}(X_N \in \bar{A}) \leq -\inf_{x \in \bar{A}} I(x).$$

Hierbei bezeichnen  $\overset{\circ}{A}$  resp.  $\bar{A}$  das topologisch Innere bzw. den topologischen Abschluss der Menge  $A$ .

**Beispiel:** Ein erstes Beispiel für ein Prinzip der großen Abweichungen (LDP) haben wir schon in der Stochastikvorlesung kennengelernt. Ist  $X_1, X_2, \dots$  eine Folge von i.i.d. Zufallsvariablen mit

$$\mathbb{P}(X_1 = 0) = 1 - p = 1 - \mathbb{P}(X_1 = 1),$$

so genügt die Folge der Mittelwerte

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

einem LDP mit Geschwindigkeit  $n$  und Ratenfunktion

$$H(x|p) = x \log \frac{x}{p} + (1-x) \log \frac{1-x}{1-p}.$$

Der Beweis dieses Sachverhalts beruht i. w. auf der Anwendung der Stirling-Formel auf die Fakultäten der Binomialverteilung. Konzentriert man sich auf den Fall  $p = \frac{1}{2}$ , so hat die Rate die Form

$$H(x|\frac{1}{2}) = \log \frac{p}{1/2} + (1-p) \log \frac{1-p}{1/2} = p \log p + (1-p) \log(1-p) + \log 2.$$

Betrachtet man anstelle der  $(X_i)$  eine Folge  $(Y_i)$  mit

$$\mathbb{P}(Y_i = 1) = \mathbb{P}(Y_i = -1) = \frac{1}{2},$$

so entspricht dies einer Transformation

$$Y_i = 2X_i - 1.$$

Somit erhalten wir

$$\mathbb{P}\left(\frac{\sum_{i=1}^n Y_i}{n} = y\right) = \mathbb{P}(2S_n - 1 = y) = \mathbb{P}\left(S_n = \frac{y+1}{2}\right).$$

Wir sehen also, dass mit  $S_n$  auch  $\frac{\sum_{i=1}^n Y_i}{n}$  einem LDP genügt und zwar mit Rate

$$\begin{aligned} I(y) &= H\left(\frac{y+1}{2} \middle| \frac{1}{2}\right) = \frac{y+1}{2} \log \frac{y+1}{2} + \frac{1-y}{2} \log \frac{1-y}{2} + \log 2 \\ &= \frac{(1+y)}{2} \log \frac{1+y}{2} + \frac{(1-y)}{2} \log(1-y). \end{aligned}$$

Hinter dieser Überlegung steckt sogar ein allgemeines Prinzip, das ebenso elementar zu beweisen wie (oft) nutzlos ist.

**Satz 2.5** (Kontraktionsprinzip) *Es sei  $(X_n)$  eine Folge von Zufallsvariablen im  $\mathbb{R}^d$ , die einem LDP mit Geschwindigkeit  $n$  und Rate  $I(\cdot)$  genüge. Es sei*

$$f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^m$$

*stetig. Dann genügt auch die Folge*

$$Y_n = f(X_n)$$

*einem LDP mit Geschwindigkeit  $n$  und Ratenfunktion*

$$J(y) = \inf_{x:f(x)=y} I(x).$$

**Beweis:** Es sei  $A = \bar{A} \subseteq \mathbb{R}^m$ . Dann ist

$$\limsup \frac{1}{n} \log \mathbb{P}(Y_n \in \bar{A}) = \limsup \frac{1}{n} \log \mathbb{P}(X_n \in f^{-1}[\bar{A}]) \leq - \inf_{x \in f^{-1}[\bar{A}]} I(x).$$

Eine untere Abschätzung geht analog. □

Eine weit wichtigere Konsequenz aus einem LDP ist das sogenannte Varadhansche Lemma, das es erlaubt, gewisse Integrale asymptotisch zu berechnen.

**Satz 2.6** (Varadhan): *Es sei  $(X_n)_n$  eine Folge von Zufallsvariablen in  $\mathbb{R}^d$ , die einen LDP mit Geschwindigkeit  $n$  und Rate  $I$  genügt und*

$$f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$$

*sei stetig und beschränkt. Dann gilt*

$$\lim \frac{1}{n} \log \mathbb{E} e^{nf(X_n)} = \sup_x [f(x) - I(x)]$$

*(wobei die Existenz des Limes gleich mitbehauptet wird).*

Der Beweis dieses Satzes ist recht instruktiv:

**Beweis:** Da  $f$  stetig und beschränkt ist, lässt sich eine Überdeckung des  $\mathbb{R}^d$  durch endlich viele abgeschlossene Mengen  $A_1, \dots, A_M$  finden, so dass  $f$  auf jede dieser Mengen höchstens um ein vorgegebenes  $\delta > 0$  variiert, also

$$\sup_{x \in A_i} f(x) - \inf_{x \in A_i} f(x) \leq \delta \quad \forall i = 1, \dots, M.$$

Dann folgt

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^d} e^{nf(X_n)} d\mathbb{P} &\leq \sum_{j=1}^M \int_{A_j} e^{nf(X_n)} d\mathbb{P} \\
&\leq \sum_{j=1}^M \int_{A_j} e^{n \sup_{y \in A_j} f(y)} d\mathbb{P}_{X_n}(y) \\
&\leq \sum_{j=1}^M \int_{A_j} e^{n(\inf_{y \in A_j} f(y) + \delta)} d\mathbb{P}_{X_n}(y) \\
&= \sum_{j=1}^M e^{n(\inf_{y \in A_j} f(y) + \delta)} \mathbb{P}(X_n \in A_j).
\end{aligned}$$

Also

$$\begin{aligned}
\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \mathbb{E} e^{nf(X_n)} &\leq \sup_{1 \leq j \leq M} [\inf_{y \in A_j} f(y) + \delta - \inf_{y \in A_j} I(y)] \\
&\leq \sup_{1 \leq j \leq M} [\sup_{y \in A_j} (f(y) - I(y)) + \delta] \\
&= \sup_{y \in \mathbb{R}^d} (f(y) - I(y)) + \delta.
\end{aligned}$$

Lässt man  $\delta$  gegen 0 gehen, ergibt sich die obere Schranke. Für die untere Schranke argumentiert man, wie oft in der Theorie der großen Abweichungen, lokal. Da  $f$  stetig ist, gibt es zu jedem  $y_0 \in \mathbb{R}^d$  und  $\varepsilon > 0$  eine offene Umgebung  $U_\varepsilon(y_0)$ , so dass für alle  $y \in U_\varepsilon(y_0)$  gilt

$$f(y) \geq f(y_0) - \varepsilon.$$

Somit folgt

$$\mathbb{E} e^{nf(X_n)} \geq \int_{U_\varepsilon(y_0)} e^{nf(X_n)} d\mathbb{P} \geq e^{n(f(y_0) - \varepsilon)} \mathbb{P}(X_n \in U_\varepsilon(y_0)).$$

Mit Hilfe des LDP ergibt sich

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \mathbb{E} e^{nf(X_n)} \geq f(y_0) - \varepsilon - \inf_{y \in U_\varepsilon(y_0)} I(y) \geq f(y_0) - I(y_0) - \varepsilon.$$

Da dies für alle  $y_0$  stimmt, folgt

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \mathbb{E} e^{nf(X_n)} \geq \sup_y [f(y) - I(y)].$$

□

Ganz analog zu Varadhans Lemma lässt sich der folgende Satz über große Abweichungen beweisen:

**Satz 2.7** Die Folge von Zufallsvariablen  $(X_n)$  im  $\mathbb{R}^d$  genüge einem LDP mit Geschwindigkeit  $n$  und Ratenfunktion  $I$ . Für eine stetige beschränkte Funktion  $F : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  setze

$$J_n(S) = \int_S e^{nF(x)} d\mathbb{P}_{X_n}(x), \quad S \subseteq \mathbb{R}^d \text{ Borelsch.}$$

Definiere weiter

$$\mathbb{P}_n^F(S) = \frac{J_n(S)}{J_n(\mathbb{R}^d)}; \quad S \in \mathcal{B}^d$$

die  $\mathbb{P}_n^F$  sind Wahrscheinlichkeitsmaße. Dann genügt die Folge der  $(\mathbb{P}_n^F)_n$  einem LDP mit Geschwindigkeit  $n$  und Ratenfunktion

$$I^F(x) = -[F(x) - I(x)] + \sup_{y \in \mathbb{R}^d} [F(y) - I(y)].$$

**Beweis:** Es ist

$$\limsup \frac{1}{n} \log \mathbb{P}_n^F(S) = \limsup \frac{1}{n} \log J_n(S) - \limsup \frac{1}{n} \log J_n(\mathbb{R}^d)$$

und Analoges für  $\liminf$ . Nun wissen wir aus dem vorhergehenden Satz schon, dass

$$\lim \frac{1}{n} \log J_n(\mathbb{R}^d) = \sup_y [F(y) - I(y)]$$

gilt. Somit bleibt zu zeigen, dass für alle offenen Mengen  $G$  und alle abgeschlossenen Mengen  $A$  gilt

$$\liminf \frac{1}{n} \log J_n(G) \geq - \inf_{x \in G} [F(x) - I(x)]$$

und

$$\limsup \frac{1}{n} \log J_n(A) \leq - \inf_{x \in A} [F(x) - I(x)].$$

Dies aber geht genau wie im Beweis des Varadhanschen Lemmas.  $\square$

Mit diesen beiden Sätzen gerüstet, können wir nun das Curie-Weiss-Modell eingehender studieren.

**Satz 2.8** Für jede inverse Temperatur  $\beta > 0$  und jedes magnetische Feld  $h$  gilt

$$\begin{aligned} f_{\beta,h} &:= \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta N} \log Z_{N,\beta,h} = \inf_{m \in [-1,+1]} \left[ -\frac{m^2}{2} - hm - \frac{1}{\beta} (\log 2 - I(m)) \right] \\ &= - \sup_{m \in [-1,+1]} \left[ \frac{m^2}{2} + hm + \frac{1}{\beta} (\log 2 - I(m)) \right]. \end{aligned}$$

Hierbei ist

$$I(m) = \frac{1+m}{2} \log(1+m) + \frac{1-m}{2} \log(1-m).$$

**Beweis:** Es ist

$$Z_{N,\beta,h} = \sum_{\substack{\sigma_i \in \{\pm 1\} \\ \forall i=1,\dots,N}} e^{\frac{\beta N}{2} \left( \frac{\sum_{i=1}^N \sigma_i}{N} \right)^2 + N\beta h \left( \frac{\sum_{i=1}^N \sigma_i}{N} \right)} = 2^N \frac{1}{2^N} \sum_{\substack{\sigma_i \in \{\pm 1\} \\ \forall i=1,\dots,N}} e^{\frac{\beta N}{2} \left( \frac{\sum_{i=1}^N \sigma_i}{N} \right)^2 + N\beta h \left( \frac{\sum_{i=1}^N \sigma_i}{N} \right)}.$$

(Dies ist der Grund für das Auftreten des  $\log 2$ -Terms im Ausdruck für  $f_{\beta,h}$ ). Nun haben wir schon in einem Beispiel geklärt, dass  $\frac{\sum_{i=1}^N \sigma_i}{N}$  unter dem Produktmaß einem LDP mit Geschwindigkeit  $N$  und Ratenfunktion  $I(\cdot)$  genügt. Nun ist

$$F(x) = \frac{\beta x^2}{2} + \beta h x$$

natürlich im allgemeinen zwar stetig, aber nicht beschränkt. Nun lebt  $\frac{\sum_{i=1}^N \sigma_i}{N}$  aber auf  $[-1, +1]$ . Dort ist  $F(\cdot)$  sehr wohl beschränkt. Eine Anwendung des Varadhanschen Lemmas ergibt somit

$$\lim \frac{1}{N} \log(2^{-N} Z_{N,\beta,h}) = \sup_{m \in [-1,+1]} \left[ \frac{\beta m^2}{2} + \beta h m - I(m) \right].$$

Dies ist äquivalent zu unserer Behauptung. □

Ebenso lässt sich zeigen, dass die Magnetisierung

$$m_N := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

unter dem Gibbs-Maß

$$\mu_{N,\beta,h}(\sigma) = \frac{e^{-\beta H_N(\sigma)}}{Z_{N,\beta,h}}$$

einem LDP genügt.

**Satz 2.9**  $m_N(\cdot)$  genügt unter dem Gibbs-Maß  $\mu_{N,\beta,h}$  einem LDP mit Geschwindigkeit  $N$  und Ratenfunktion

$$J(x) = -\frac{\beta x^2}{2} - \beta h x + I(x) + \sup_{y \in [-1,1]} \left[ \frac{\beta y^2}{2} + \beta h y - I(y) \right],$$

wobei wieder

$$I(x) = \frac{1+x}{2} \log(1+x) + \frac{1-x}{2} \log(1-x)$$

ist.

**Beweis:** Dies folgt direkt aus den Sätzen über große Abweichungen, die wir zuvor bewiesen haben, da  $\mu_{N,\beta,h}$  genau die dortige exponentielle Struktur besitzt. □

Das Schöne an Prinzipien der großen Abweichungen ist, dass sie auch Gesetze der großen Zahlen implizieren. Dieses Faktum haben wir schon in Wahrscheinlichkeitstheorie II kennengelernt. Es soll hier kurz wiederholt werden.

**Satz 2.10** Eine Folge von Zufallsvariablen  $(X_n)_n$  in  $\mathbb{R}^d$  genüge einem LDP mit Rate  $I(\cdot)$  und Geschwindigkeit  $n$ . Dann gilt für die Menge der Nullstellen

$$\mathcal{N} = \{x \in \mathbb{R}^d : I(x) = 0\}$$

der Ratenfunktion und jedes  $\varepsilon > 0$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}(X_n \in \mathcal{N}_\varepsilon^c) < +\infty.$$

Hierbei ist

$$\mathcal{N}_\varepsilon = \{x : \|x - \mathcal{N}\| < \varepsilon\}.$$

Ist insbesondere  $\mathcal{N}$  einelementig, so folgt für  $\nu \in \mathcal{N}$

$$\mathbb{P}(X_n \rightarrow \nu) = 1.$$

**Beweis:** Da  $\mathcal{N}_\varepsilon^c$  abgeschlossen ist,  $I$  von unten halbstetig und  $\mathcal{N}$  die Menge der globalen Minima von  $I$  ist, folgt

$$a := \inf_{x \in \mathcal{N}_\varepsilon^c} I(x) > 0.$$

Aus der oberen Abschätzung der großen Abweichungen folgt, dass für hinreichend große  $n$

$$\mathbb{P}(X_n \in \mathcal{N}_\varepsilon^c) \leq e^{-na/2}$$

gilt. Somit ist

$$\sum_n \mathbb{P}(X_n \in \mathcal{N}_\varepsilon^c) < +\infty.$$

Die fast sichere Konvergenz ist eine unmittelbare Konsequenz dieser Summierbarkeit und des Borel-Cantelli-Lemmas.  $\square$

Wir müssen uns somit, um die Minima von

$$J(x) = -\frac{\beta x^2}{2} - \beta h x + I(x) + \sup_{y \in [-1, +1]} \left[ \frac{\beta y^2}{2} + \beta h y - I(y) \right]$$

mit

$$I(x) = \frac{1+x}{2} \log(1+x) + \frac{1-x}{2} \log(1-x)$$

kümmern. Diese Minima erfüllen also

$$I'(x) = \frac{1}{2} \log \frac{1+x}{1-x} = \beta(x+h),$$

also

$$e^{2\beta(x+h)} = \frac{1+x}{1-x}.$$

Durch langes Hinschauen erkennt man, dass dies äquivalent ist zu

$$x = \frac{e^{2\beta(x+h)} - 1}{e^{2\beta(x+h)} + 1} = \tanh(\beta(x+h)).$$

Man unterscheidet nun verschiedene Fälle:

- Ist  $h > 0$ , hat diese Gleichung zwei Lösungen, von denen aber nur die positive ein Minimum von  $J(\cdot)$  liefert (die andere ein Maximum).
- Für  $h < 0$  gibt es ebenfalls zwei Lösungen, von denen aber nur die negative ein Minimum, die positive aber ein Maximum ist.
- Für  $h = 0$  ist die Situation symmetrisch zum Ursprung. Für  $\beta \leq 1$  ist  $x = 0$  die einzige Lösung dieser Gleichung und liefert somit ein Minimum von  $J(\cdot)$ . Für  $\beta > 1$  hat die Gleichung allerdings drei Lösungen, von denen die Lösung  $x = 0$  diesmal ein Maximum von  $J(\cdot)$  liefert, die Lösungen, die verschieden sind von 0 aber Minima.

Zusammen erhält man:

**Satz 2.11** *Im Curie-Weiss-Modell gelten für die Magnetisierung  $m_N$  die folgenden Grenzwertsätze unter  $\mu_{N,\beta,h}$ .*

1. *Ist  $h > 0$ , so konvergiert  $m_N$  exponentiell schnell gegen die positive Lösung von*

$$x = \tanh(\beta(x + h)).$$

2. *Ist  $h < 0$ , so konvergiert  $m_N$  exponentiell schnell gegen die negative Lösung von*

$$x = \tanh(\beta(x + h)).$$

3. *Ist  $h = 0$  und  $\beta \leq 1$ , so konvergiert  $m_N$  exponentiell schnell gegen 0.*

4. *Ist  $h = 0$  und  $\beta > 1$ , so konvergiert  $m_N$  exponentiell schnell gegen die beiden von Null verschiedenen Lösungen von*

$$x = \tanh(\beta x).$$

5. *Insbesondere erhält man*

$$\lim_{h \downarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \mu_{N,\beta,h} \circ m_N^{-1} \Rightarrow \delta_{m^*(\beta)},$$

wobei  $m^*(\beta)$  die größte Lösung von

$$x = \tanh(\beta x)$$

ist.

5. ist in der physikalischen Literatur auch als “spontane Magnetisierung” bekannt: Ein Material, das in ein Magnetfeld gehalten wird, merkt sich dies bei genügend tiefen Temperaturen und wird selbst magnetisch. Bei hohen Temperaturen bleibt dieses Phänomen aus.

Auf der Ebene der Gesetze der großen Zahlen ist hiermit eigentlich alles gesagt. Als Wahrscheinlichkeitstheoretiker kann man sich fragen, ob  $m_N$  auch einem Zentralen Grenzwertsatz genügt und ob sich das kritische Verhalten bei  $\beta = 1$  auch hier widerspiegelt. Wir werden der Einfachheit halber hierfür nur den Fall  $h = 0$  betrachten. Der erste Trick besteht nun darin, dass man gar nicht betrachtet, was einen eigentlich interessiert, nämlich  $\mu_{N,\beta,0} \circ m_N^{-1}$ , sondern eine “geglättete” Version hiervon.

**Lemma 2.12** *Betrachte das Maß*

$$\chi_{N,\beta,a} = Q_N * \mathcal{N}\left(0, \frac{a^2}{\beta N}\right),$$

*also die Konvolution des Maßes*

$$Q_N := \mu_{N,\beta,0}(am_N)^{-1}$$

*mit einer Normalverteilung mit Erwartungswert 0 und Varianz  $\frac{a}{\beta N}$ . Hierbei ist  $a = a_N$  möglicherweise abhängig von  $N$ . Dann hat  $Q_N$  eine Dichte bezüglich  $\lambda^1$  der Form*

$$f_{N,\beta,a}(x) = \frac{e^{-N\beta\Phi_\beta(\frac{x}{a})}}{\int_{\mathbb{R}} e^{-N\beta\Phi_\beta(\frac{x}{a})}.$$

*Hierbei ist*

$$\Phi_\beta(x) = \frac{x^2}{2} - \frac{1}{\beta} \log \cosh(\beta x).$$

**Beweis:** Sei  $A \in \mathcal{B}^1$ . Dann ist

$$\begin{aligned} \chi_{N,\beta,a}(A) &= \frac{1}{2^N} \sum_{\sigma \in \{\pm 1\}^N} \mathcal{N}\left(0, \frac{a^2}{\beta N}\right)(A - m_N(\sigma)) \mu_{N,\beta,0}(\sigma) \\ &= \frac{1}{2^N} \sum_{\sigma} \sqrt{\frac{\beta N}{2\pi a^2}} \int_A e^{-\frac{\beta N}{2a^2}(x - a^2 m_N(\sigma))^2} dx \mu_{N,\beta,0}(\sigma) \\ &= \frac{1}{Z_{N,\beta,0}} \sqrt{\frac{\beta N}{2\pi a^2}} \int_A \frac{1}{2^N} \sum_{\sigma} e^{-\frac{\beta N}{2a^2}(x - am_N(\sigma))^2} \times e^{\frac{\beta N}{2} m_N(\sigma)^2} dx \\ &= \frac{1}{Z_{N,\beta,0}} \sqrt{\frac{\beta N}{2\pi a^2}} \int_A e^{-\frac{\beta N}{2a^2} x^2} + \frac{1}{2^N} \sum_{\sigma} e^{\frac{\beta}{a} x \sum_{i=1}^N \sigma_i} dx \\ &= \frac{1}{Z_{N,\beta,0}} \sqrt{\frac{\beta N}{2\pi a^2}} \int_A e^{-\frac{\beta N}{2a^2} x^2 + N \log \cosh(\frac{\beta x}{a})} dx \\ &= \frac{1}{Z_{N,\beta,0}} \sqrt{\frac{\beta N}{2\pi a^2}} \int_A e^{-N\beta\Phi_\beta(\frac{x}{a})} dx. \end{aligned}$$

Da  $\chi_{N,\beta,a}$  als Faltung zweier Wahrscheinlichkeitsmaße wieder ein Wahrscheinlichkeitsmaß ist, folgt

$$Z_{N,\beta,0} \sqrt{\frac{\beta N}{2\pi a^2}} = \int_{\mathbb{R}} e^{-N\beta\varphi_\beta(\frac{x}{a})} dx.$$



□

Wir werden nun zunächst einen Zentralen Grenzwertsatz für  $\chi_{N,\beta,a}$  beweisen, wobei wir  $a$  geeignet wählen. Tatsächlich fällt die Wahl von  $a$  nicht schwer: Die Vermutung, dass der Limes von einem geeignet skalierten  $m_N$  Gaußsch verteilt ist und man  $m_N$  mit  $\sqrt{N}$  skalieren muss, liegt nahe. Betrachten wir also  $\chi_{N,\beta,\sqrt{N}}$ .

**Satz 2.13** Für  $\beta < 1$  konvergiert  $\chi_{N,\beta,\sqrt{N}}$  gegen eine  $\mathcal{N}(0, \frac{1}{\beta(1-\beta)})$ -Verteilung.

**Beweis:** Die Dichte hat schon die gewünschte Exponentialstruktur, allerdings muss noch gezeigt werden, dass nur quadratische Terme im Exponenten überleben. Betrachten wir die Taylor-Entwicklung des  $\log \cosh(\cdot)$ , so erhalten wir

$$\log \cosh(x) = \frac{x^2}{2} + O(x^4).$$

Somit hat der Exponent von  $f_{N,\beta,\sqrt{N}}(x)$  die Entwicklung:

$$-N\beta \Phi_\beta\left(\frac{x}{\sqrt{N}}\right) = -\frac{N\beta}{2}\left(\frac{x}{\sqrt{N}}\right)^2 - N\beta^2\frac{x^2}{N} + N\beta O\left(\frac{x^4}{N^2}\right) = -\frac{x^2}{2}(\beta(1-\beta)) + O\left(\frac{x^4}{N^3}\right).$$

Mit Hilfe des Satzes von der majorisierten Konvergenz folgt somit für  $A \in \mathcal{B}^1$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \chi_{N,\beta,\sqrt{N}}(A) = \frac{\int_A e^{-\frac{x^2}{2}\beta(1-\beta)} dx}{\int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{x^2}{2}\beta(1-\beta)} dx}.$$

Da  $\lim_{N \rightarrow \infty} \chi_{N,\beta,\sqrt{N}}$  wieder ein Wahrscheinlichkeitsmaß ist, muss

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{x^2}{2}\beta(1-\beta)} dx = \sqrt{\frac{\beta(1-\beta)}{2\pi}}$$

gelten.

$$\sqrt{\frac{\beta(1-\beta)}{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}\beta(1-\beta)}$$

ist aber die Dichte der  $\mathcal{N}(0, \frac{1}{\beta(1-\beta)})$ -Verteilung. □

Aus diesem Satz lässt sich nun auch die Grenzverteilung von  $\sqrt{N}m_N$  unter  $\mu_{N,\beta,0}$  bestimmen.

**Satz 2.14** Für alle  $\beta < 1$  gilt

$$\mu_{N,\beta,0} \circ (\sqrt{N}m_N)^1 \Rightarrow \mathcal{N}\left(0, \frac{1}{1-\beta}\right).$$

**Beweis:** Das Maß  $\chi_{N,\beta,\sqrt{N}}$  muss nur noch “entfaltet” werden. Das geschieht so: Ist  $Y \sim \mathcal{N}(0, \frac{1}{\beta})$ -verteilt, so besagt der vorhergehende Satz gerade, dass  $Y + \sqrt{N}m_N \Rightarrow \mathcal{N}(0, \frac{1}{\beta(1-\beta)})$ . Ist für eine Zufallsvariable  $X$ ,  $\varphi_X$  definiert als

$$\varphi_X(t) = \mathbb{E}e^{itX},$$

so folgt

$$\varphi_{X_n+Y} \rightarrow \varphi_{X+Y} = \varphi_X \cdot \varphi_Y$$

für eine geeignete Zufallsgröße  $X$ . Da aber  $X_n$  und  $Y$  unabhängig sind, und  $\varphi_Y(t) \neq 0$  für alle  $t$ , erhalten wir

$$\varphi_{X_n} \rightarrow \varphi_X.$$

Der Rest ist eine einfache Varianzberechnung. □

Satz 3.14 kann für  $\beta = 1$  offenbar nicht richtig bleiben, denn eine Normalverteilung mit unendlicher Varianz ist unsinnig. Da  $\beta = 1$  auch die kritische Temperatur ist, bei der die Menge der Limespunkte im Gesetz der großen Zahlen von einer einelementigen in eine zweielementige Menge übergeht, sieht man, dass dieses kritische Verhalten auch auf der Ebene der Fluktuation widerspiegelt wird. Tatsächlich leben die Fluktuationen auf einer ganz anderen (kleineren) Skala. Das lässt sich am besten an einer Analyse des Maßes  $\chi_{N,1}$  erkennen. Da sich bei  $\beta = 1$  die 2. Ordnungsterme gegenseitig auslöschen, wird der 4. Ordnungsterm in der Entwicklung des  $\log \cosh(\cdot)$  den Hauptbeitrag liefern. Damit dieser nicht einfach verschwindet, muss statt  $a_N = \sqrt{N}$ ,  $a_N = \sqrt[4]{N}$  gewählt werden.

**Satz 2.15**  $\chi_{N,1,\sqrt[4]{N}}$  konvergiert schwach gegen ein Maß  $\bar{\chi}$ .  $\bar{\chi}$  hat eine Lebesgue-dichte der Form

$$\bar{f}(x) = \frac{e^{-\frac{1}{12}x^4}}{\int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{1}{12}x^4} dx}.$$

**Beweis:** Wieder entwickeln wir die  $\log \cosh(\cdot)$ :

$$\log \cosh(x) = \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{12} + O(x^6).$$

Damit ergibt sich für  $-N\Phi_1(\frac{x}{\sqrt[4]{N}})$  die Entwicklung

$$-N\Phi_1(\frac{x}{\sqrt[4]{N}}) = -\frac{x^4}{12} + O(N\frac{x^6}{N^{3/2}}).$$

Die Behauptung folgt nun wieder mit Hilfe des Satzes von der majorisierten Konvergenz. □

Im Falle von  $\beta = 1$  ist das Limesmaß  $\bar{\chi}$  der  $\chi_{N,1,\sqrt[4]{N}}$  auch schon das Limesmaß der Magnetisierung.

**Satz 2.16** Bei  $\beta = 1$  konvergiert

$$\mu_{N,1,0} \circ (\sqrt[4]{N}m_N)^{-1}$$

schwach gegen die Verteilung  $\bar{\chi}$  aus dem letzten Satz.

**Beweis:**  $\chi_{N,1,\sqrt[4]{N}}$  ist die Verteilung der Summe von  $\sqrt[4]{N}m_N$  (unter dem Gibbs-Maß bei Temperatur 1) und einer  $\mathcal{N}(0, \frac{1}{\sqrt{N}})$ -verteilten Zufallsvariablen, die davon unabhängig ist. Die letzte geht im Limes  $N \rightarrow \infty$  in Wahrscheinlichkeit gegen 0. Da 0 eine Konstante ist folgt daraus die Verteilungskonvergenz von  $\mu_{N,1,0} \circ (\sqrt[4]{N}m_0)^{-1}$  gegen  $\bar{\chi}$ .  $\square$

Wir haben somit ein Bild davon gewonnen, wie sich der Phasenübergang im Curie-Weiss-Modell auf der Ebene der zentralen Grenzwertsätze widerspiegelt. Tatsächlich lassen sich CLTs für  $\sqrt{N}m_N$  auch für  $h \neq 0$  und für  $\beta > 1$  beweisen. Hierbei ist es notwendig, die Maße richtig zu zentrieren und im Falle  $h = 0$ ,  $\beta > 1$ , darauf zu bedingen, dass man sich “in der Nähe” von  $m^*(\beta)$  bzw.  $-m^*(\beta)$  befindet. Wir werden dies nicht ausführlicher betrachten, sondern zum Studium des Ising-Modells übergehen.