Prof. Dr. Sabine H. L. Klapp
Dr. Alice von der Heydt
Inst. f. Theoret. Physik, TU Berlin

Blatt 2

Abgabe: Do., 30.04.2015, 10:15 Uhr, in/vor der Vorlesung
Bitte Lösungen großzügig kommentieren und mit Namen versehen!

Aufgabe 4. *Korrelationsmatrix* (3 Punkte)

Betrachten Sie die multivariate Gaußverteilung für d (zentrierte) Zufallsvariablen $x_1, \ldots, x_d$,

$$\varrho(\underline{x}) = (2\pi)^{-d/2} \left(\det \underline{\underline{A}}\right)^{-1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^{d} \left(\underline{\underline{A}}^{-1}\right)_{jk} x_j x_k\right\},$$

mit $\underline{x} := (x_1, \ldots, x_d)^T$ und einer reellen, symmetrischen, positiv definiten Matrix $\underline{\underline{A}}$. Verifizieren Sie, dass für die Einträge der Korrelationsmatrix $\underline{\underline{G}}$ (vgl. Vorlesung) gilt:

$$(\underline{\underline{G}})_{mn} = \langle x_m x_n \rangle = (\underline{\underline{A}})_{mn}$$

Aufgabe 5. *Unbeschränkte Teilbarkeit* (8 Punkte)

Eine Zufallsvariable Y wird *unbeschränkt teilbar* genannt, wenn sie für jede natürliche Zahl $N \in \mathbb{N}$, $N > 1$, als Summe

$$Y = X_1 + X_2 + \cdots + X_N$$

von unabhängigen, identisch verteilten Zufallsvariablen X_j, $j \in \{1, \ldots, N\}$, dargestellt werden kann. In diesem Fall wird auch die Wahrscheinlichkeitsdichte $\varrho_Y(y)$ der Zufallsvariablen Y als unbeschränkt teilbar bezeichnet. Das Kriterium der unbeschränkten Teilbarkeit muss insbesondere für jede Grenz-Wahrscheinlichkeitsdichte, wie die Gaußverteilung, erfüllt sein.

Zeigen Sie:

a) Die Wahrscheinlichkeitsdichte $\varrho_Y(y)$ ist genau dann unbeschränkt teilbar, wenn für ihre charakteristische Funktion $\phi_Y(k)$ zu jeder Zahl $N \in \mathbb{N}$, $N > 1$, eine charakteristische Funktion $\phi_X(k)$ existiert mit

$$\phi_Y(k) = \big(\phi_X(k)\big)^N$$

b) Die charakteristische Funktion einer unbeschränkt teilbaren Wahrscheinlichkeitsdichte hat keine reellen Nullstellen.

c) Die spezielle charakteristische Funktion

$$\phi(k) = \frac{1-b}{1 - b\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k}},\; 0 < b < 1,$$

gehört zu einer unbeschränkt teilbaren Wahrscheinlichkeitsdichte.

Aufgabe 6. *Markov-Ketten: Stochastische Copolymerisation* (9 Punkte)

Ein lineares, binäres Copolymer ist eine (Ising-) Kette von Segmenten der chemischen Spezies A und B, Bsp. ●●○●$\cdots$. Die Synthese der Sequenzen kann häufig als Markov-Prozess modelliert werden: Die Spezies eines an ein reaktives Ende angefügten Segments korreliert nur mit der Spezies dieses Endsegments, nicht mit der vorangegangener Segmente. Der Vektor der Wahrscheinlichkeiten, dass Segment s des wachsenden Copolymers die Spezies A bzw. B besitzt, $\underline{v}(s) := [p_A(s), p_B(s)]^T$, wird durch die Übergangsmatrix

$$\underline{\underline{M}} = \begin{pmatrix} 1 - p(B|A) & p(A|B) \\ p(B|A) & 1 - p(A|B) \end{pmatrix}$$

auf den Wahrscheinlichkeitsvektor $\underline{v}(s+1) = [p_A(s+1), p_B(s+1)]^T$ für das nächste Segment abgebildet, $\underline{v}(s+1) = \underline{\underline{M}}\,\underline{v}(s)$. Dabei ist $p(\alpha|\beta)$ die bedingte Wahrscheinlichkeit, dass ein Segment der Spezies α am Ende bindet, falls letzteres von der Spezies β ist.

a) Bestimmen Sie den stationären Wahrscheinlichkeitsvektor $\underline{v}^* := (p, 1-p)$, der nicht vom Segmentindex s innerhalb eines Copolymers bzw. von der Reaktionszeit abhängt. Begründen Sie, dass p unter stationären Reaktionsbedingungen (Konzentrationen der freien A-/B-Segmente werden z. B. durch ein Bad konstant gehalten) auch der globale (Zahlen-) Anteil der Segmente der Spezies A, gebunden oder frei, ist.

b) Geben Sie den zweiten Eigenwert λ der Übergangsmatrix $\underline{\underline{M}}$ an, und bestimmen Sie den möglichen Wertebereich. In welchem Grenzfall entstehen strikt alternierende Copolymere, ●○●○$\cdots$? (Inwiefern kann λ als Spezies-Korrelation benachbarter Segmente interpretiert werden?)

c) Drücken Sie die Einträge von $\underline{\underline{M}}$ durch p und λ aus, und vervollständigen Sie die Diagonalisierung von $\underline{\underline{M}}$ für $\lambda \neq -1$. Stellen Sie mit Hilfe von Potenzen von $\underline{\underline{M}}$ die Matrix der bedingten Wahrscheinlichkeiten auf, bei Segment s die Spezies α vorzufinden, vorausgesetzt, Segment $s \pm \Delta s$ (diskretisierte Distanz $\Delta s \in \mathbb{N}$) auf demselben Copolymer ist von der Spezies β.