

### 3 Ein Beispiel: Der Random Walk

Ein einfaches Modell für einen zufälligen Prozess ist der Random Walk oder auch Irrfahrt genannt. Sei  $q$  die Koordinationszahl eines Gitters  $\Lambda$ .  $N$  (fest) sei die Anzahl der Schritte. Wir definieren rekursiv über die Anzahl der Schritte: Der Walk habe  $i < N$  Schritte gemacht. Wähle mit gleicher Wahrscheinlichkeit ( $1/q$ ) einen der  $q$  Nachbarn für den  $i+1$ -ten Schritt.

Die wesentliche Eigenschaft des Random Walks ist die Unabhängigkeit der einzelnen Schritte. Jeder Schritt des Walkers hängt nur von seiner aktuellen Position (Gegenwart) und nicht von den bereits besuchten Plätzen (Vergangenheit) ab. Jeder Teilschritt ist ein neuer Ursprung. Der Walker kann also vorher besetzte Plätze nochmals belegen (keine Selbstvermeidung) und der Pfad des Walkers ist nicht kreuzungsfrei (vgl. die Abbildung 3.1).

In einer Dimension können wir das oben gestellte Problem recht leicht lösen. Sei  $a$  die Gitterkonstante und  $P(x, t)$  die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen an der Stelle  $x$ , zum Zeitpunkt  $t$ , zu finden. Die zeitliche Entwicklung von  $P(x, t)$  können wir wie folgt beschreiben: Wir erhalten einen Zuwachs der Wahrscheinlichkeit durch Sprünge (die mit der Wahrscheinlichkeit  $w(x \rightarrow x')$  für einen Sprung von  $x \rightarrow x'$  vorkommen) von einem der benachbarten Orte ( $x - a$  und  $x + a$ ) und einen Abfluss durch Sprünge vom Ort  $x$  zu einem der Nachbarn

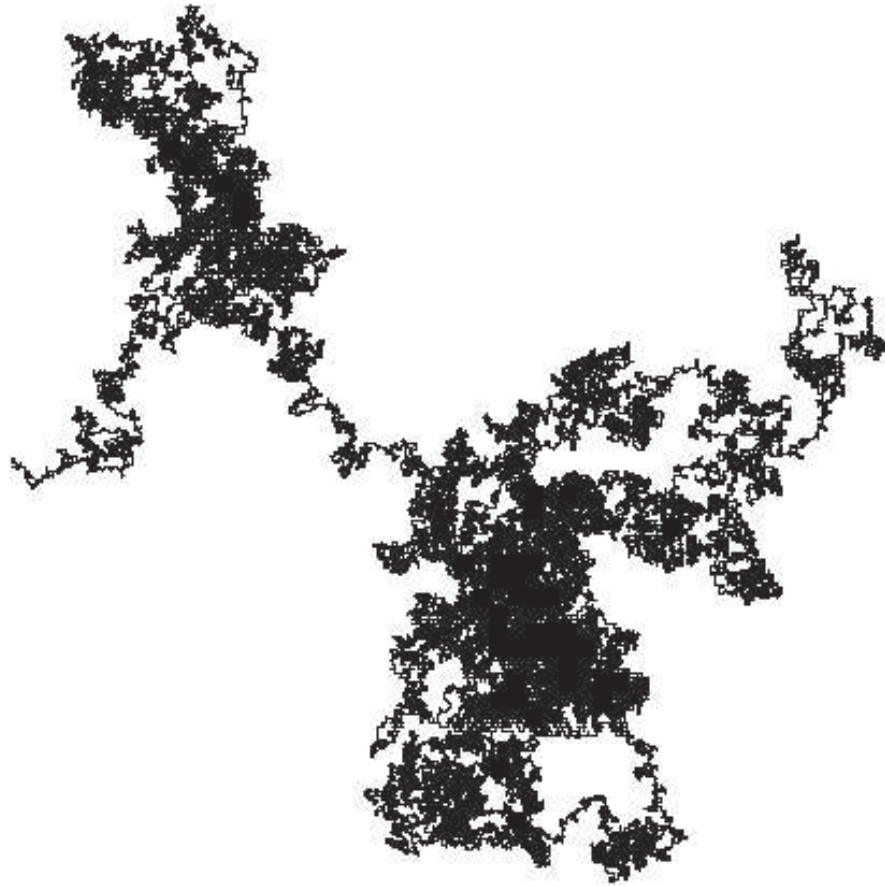
$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P(x, t) &= P(x + a, t)W(x + a \rightarrow x) + P(x - a, t)W(x - a \rightarrow x) \\ &- P(x, t)W(x \rightarrow x + a) - P(x, t)W(x \rightarrow x - a) \quad , \quad (3.1) \end{aligned}$$

wobei

$$W(x \rightarrow x \pm a) = W(x \pm a \rightarrow x) = \frac{\Gamma}{2} \quad , \quad (3.2)$$

mit  $\Gamma$  der Anzahl der Sprünge pro Zeiteinheit.

Die obige Gleichung (3.1) nennt man **Mastergleichung**. Sie lässt sich selbstverständlich verallgemeinern (siehe später).



**Abbildung 3.1:** Beispiel eines Random Walks auf einem einfach-quadratischen Gitter.

Zur Lösung der partiellen Differentialgleichung bietet sich eine Entwicklung der Wahrscheinlichkeit  $P(x, t)$ , um den Ort  $x$  an

$$P(x \pm a, t) = P(x, t) \pm a \frac{\partial}{\partial x} P(x, t) + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t) + O(a^3) \quad . \quad (3.3)$$

Setzen wir dies in Gleichung (3.1) ein und behalten nur die Terme bis zur quadratischen Ordnung in  $a$ , dann folgt

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \Gamma \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \quad . \quad (3.4)$$

Wir setzen nun

$$D = \Gamma \frac{a^2}{2} \quad . \quad (3.5)$$

Verallgemeinert erhalten wir bei entsprechender Symmetrie des Gitters  $\Lambda$

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{x}, t) = \frac{\Gamma}{6} a^2 \Delta P(\mathbf{x}, t) \quad , \quad (3.6)$$

mit dem Laplace-Operator  $\Delta$ .

Betrachten wir nun das zweite Moment der Verteilung  $P$ , welches die Distanz, die der Random Walk im Mittel vom Ursprung entfernt ist, angibt:

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 P(x, t) dx \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \frac{\partial}{\partial t} P(x, t) dx \quad (3.8)$$

$$= \frac{a^2}{2} \Gamma \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t) dx \quad (3.9)$$

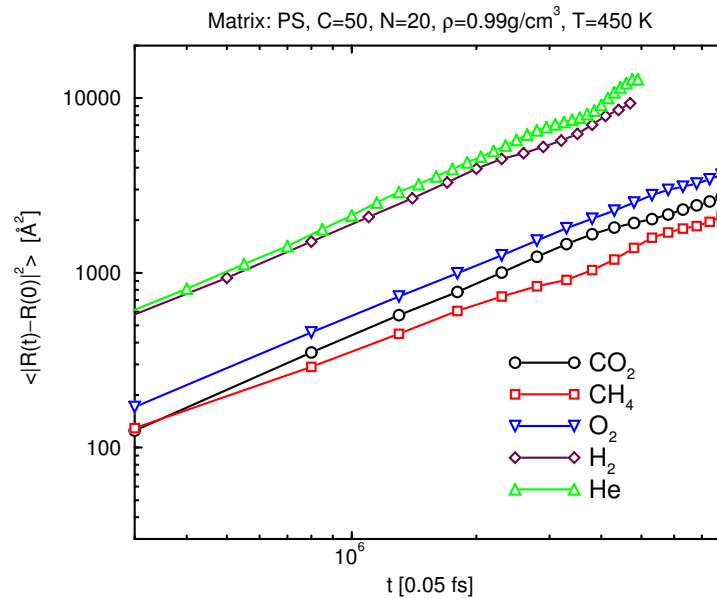
$$= a^2 \Gamma \int_{-\infty}^{\infty} P(x) dx \quad (3.10)$$

$$= 2D \quad . \quad (3.11)$$

Benutzt haben wir bei der partiellen Integration (3.9), dass die Verteilung für sehr große  $x$  schnell gegen Null geht. Zusammengefasst haben wir, dass die mittlere quadratische Verschiebung proportional zur Zeit ist

$$\langle x^2 \rangle = 2Dt \quad (3.12)$$

und man zeigt leicht, dass dies auch für höhere Raumdimensionen so ist. In Abbildung 3.2 ist gezeigt, dass auch Teilchen in einer Matrix von anderen Teilchen sich ebenfalls diffusiv verhalten. Gezeigt wird das Verhalten einiger Moleküle einer Polystyrol-Matrix. Aufgetragen ist das mittlere Verschiebungsquadrat gegen die Zeit  $t$  in einem log-log-Plot.



**Abbildung 3.2:** Aufgetragen ist das mittlere Verschiebungsquadrat gegen die Zeit  $t$  in einem log-log-Plot für verschiedene Moleküle in einer Polystyrol-Matrix.

### BEISPIEL 3.0 (Monte Carlo Simulation: Random Walk)

Wir wollen den Prozeß des Random Walks simulieren und bestätigen, dass der mittlere

End-zu-End-Abstand proportional zu  $t$ , bzw.  $N$ , der Anzahl der Schritte, ist. Hier benutzen wir ein **simple sampling**. Hierzu wird der Prozeß des Random Walks direkt nachgebildet, indem man  $N$  unabhängige Schritte auf einem Gitter  $\Lambda$  erzeugt. Jeder so generierte Walk ist unabhängig von den vorherigen Walks und kommt mit gleicher Wahrscheinlichkeit vor.

Beim simple sampling stellen sich berechenbare Größen als einfaches arithmetische Mittel dar

$$\begin{aligned}
 \langle R_E^2 \rangle &= \text{mittlerer End-zu-End-Abstand} \\
 &= \frac{1}{\text{MCSMAX}} \sum_{i=1}^n (x_i^2 + y_i^2),
 \end{aligned}$$

wobei MCSMAX die Anzahl der unabhängig erzeugten Walks sind.

Algorithmisch (**Monte Carlo Simulation**) sieht die Erzeugung von Random Walk und der Statistik über diese wie folgt aus:

---

**Algorithm 1** Simulation eines Random Walks
 

---

```

1: for i=0; i < MCSMAX do
2:   x = 0
3:   y = 0
4:   for j=0; j < N do
5:     xd = random +1 , -1
6:     yd = random +1 , -1
7:     x = x + xd
8:     y = y + yd
9:   end for
10:  Berechne den End-zu-End-Abstand
11: end for

```

---

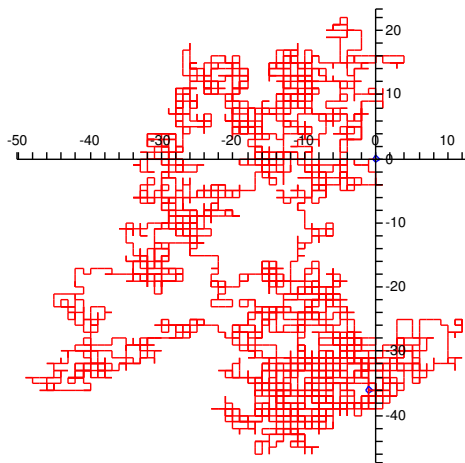
Das folgende Programm zeigt eine Implementierung des obigen Algorithmus in MAPLE sowie in Figure 3.3

**MAPLE 3.0.1**

```

> restart;
> with(plots);
> _seed := 471;
> L := 5000;
> grid:=array(1..2,1..L);
> grid[1,1]:=0;
> grid[2,1]:=0;
> A:=array(1..L);
> d:=rand(1..4);
> for i from 2 to L do
>   X:=d():
>   if (X=1) then grid[1,i]:=grid[1,i-1]+1: grid[2,i]:=grid[2,i-1]
>     elif (X=2) then grid[2,i]:=grid[2,i-1]+1: grid[1,i]:=grid[1,i-1]
>     elif (X=3) then grid[1,i]:=grid[1,i-1]-1: grid[2,i]:=grid[2,i-1]
>     elif (X=4) then grid[2,i]:=grid[2,i-1]-1: grid[1,i]:=grid[1,i-1]
>   end if:
> end do:
> for i from 1 to L do
>   A[i]:=[grid[1,i], grid[2,i]]:
> end do:

```



**Abbildung 3.3:** Beispiel eines Random Walks, der von dem MAPLE-Programm (3.0.1) erzeugt wurde, auf einem einfach quadratischen Gitter.

```
> pathpl:=plot(A):
> pts1:=plot([A[1],A[L]], style=POINT, color=blue):
> display(pathpl, pts1);
```

Interessant ist auch die Verteilung der Endpunkte, die ja den End-zu-End-Abstand bestimmt. Dazu benutzen wir das folgende kleine MAPLE-Programm. Das Resultat ist in Figur 3.4 gezeigt.

#### MAPLE 3.0.2

```
> restart;
> L:= 1000;
> B:=array(1..L);
> B1:=array(1..L);
> Bx:=array(1..L);
> By:=array(1..L);
> grid:=array(1..2);
> d:=rand(1..4);
> for j from 1 to L do
>   grid:=[0,0]:
>   for i from 2 to L do
>     X:=d();
```

---

```

>     if (X=1) then grid[1]:=grid[1]+1:
>     elif (X=2) then grid[2]:=grid[2]+1:
>     elif (X=3) then grid[1]:=grid[1]-1:
>     elif (X=4) then grid[2]:=grid[2]-1:
>     end if:
>     if (i=999) then B1[j]:=b end if:
> end do:
> B[j]:=grid:
> Bx[j]:=grid[1]:
> By[j]:=grid[2]:
> end do:
> plot(B, style=POINT);
> Nx:=array(1..200):
> Ny:=array(1..200):
> for j from 1 to 200 do
>   Nx[j]:=0:
>   Ny[j]:=0:
> end do:
> for j from 1 to L do
>   Nx[Bx[j]+100]:=Nx[Bx[j]+100]+1:
>   Ny[By[j]+100]:=Ny[By[j]+100]+1:
> end do:
> pNx:=array(1..200):
> pNy:=array(1..200):
> for j from 1 to 200 do
>   pNx[j]:=[j, Nx[j]]:
>   pNy[j]:=[j, Ny[j]]:
> end do:
> plot(pNx, style=POINT, color=red);
> plot(pNy, style=POINT, color=blue);

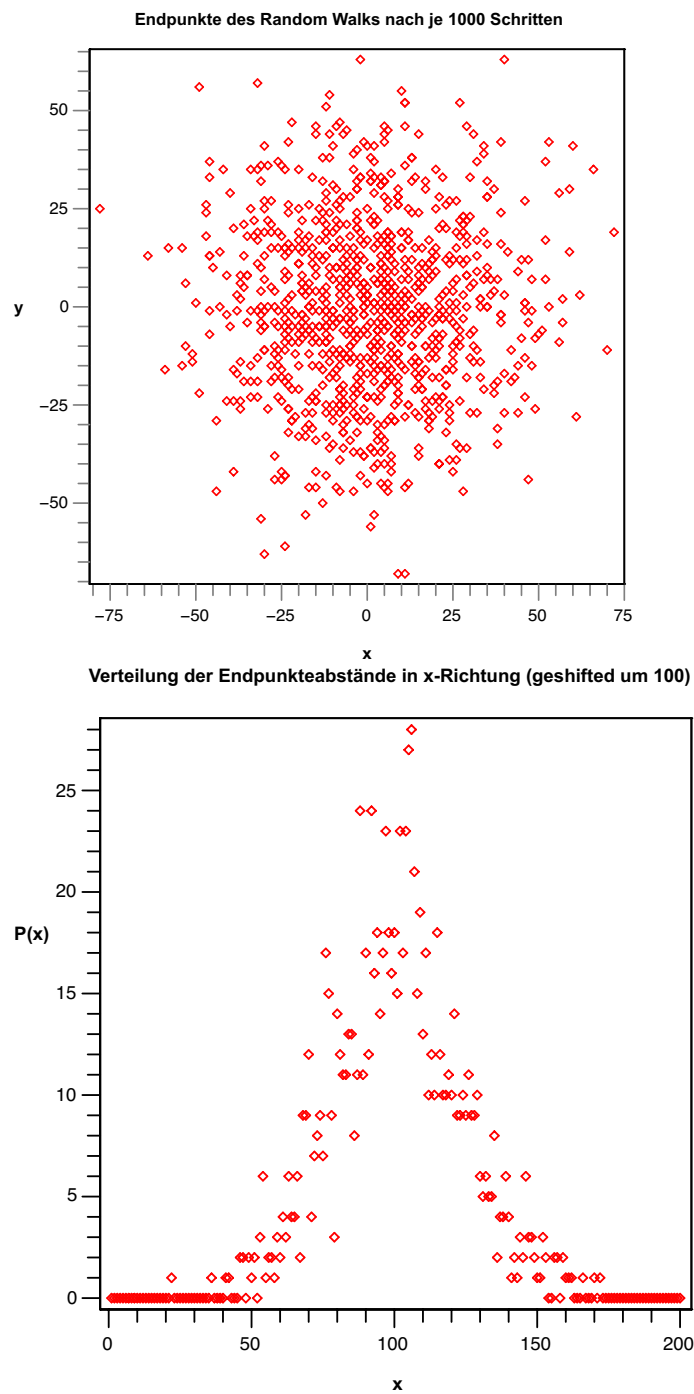
```

---

Gehen wir die Ableitung der Wahrscheinlichkeitsverteilung nochmals von einer anderen Seite an. Normieren wir einmal die Schrittweite auf 1. Der Walker geht mit Wahrscheinlichkeit  $p$  nach “links” ( $-1$ ) und mit der Wahrscheinlichkeit  $q$  nach “rechts” ( $+1$ ) mit

$$p + q = 1 \quad . \quad (3.13)$$

Jeder der insgesamt  $N$  Schritte ist gleichwahrscheinlich, so dass



**Abbildung 3.4:** Verteilung des End-zu-End-Abstands (Samplegröße 1000) für den Random Walk. In der unteren Figur ist die Verteilung bzgl. der  $x$ -Richtung gezeigt.



$$N = n_q + n_p \quad . \quad (3.14)$$

Sei  $N$  fixiert. Was ist nun die Wahrscheinlichkeit bei  $m = n_p - n_q$  angekommen zu sein? Da  $n_p$  und  $n_q$  über die Beziehung (3.14) miteinander verbunden sind, hängt dies nur von der Anzahl der positiven Schritte ab. Wegen der Unabhängigkeit der Schritte gilt für einen Weg

$$p^{n_p} q^{n_q} \quad . \quad (3.15)$$

Nun gehen wir von unserer fundamentalen Annahme aus, dass alle zugänglichen Zustände eines abgeschlossenen Systems gleichwahrscheinlich sind. Um die Wahrscheinlichkeit bei  $m$  zu landen anzugeben, müssen wir alle Möglichkeiten in Betracht ziehen. Die Zahl der Möglichkeiten bei  $N$  Schritten  $n$  positive Schritte einzubauen bzw. bei  $m$  anzukommen ist

$$\binom{N}{n} = \frac{N!}{n_q! n_p!} \quad , \quad (3.16)$$

also

$$P_N(m) = \binom{N}{n} p^n q^{N-n} \quad , \quad (3.17)$$

mit  $m = 2n - N$ , also der Binomialverteilung, die für große  $N$  in die Gaussverteilung übergeht.

**Definition 3.0.1** Sei  $\mathcal{P} = \{X_t | t \in T\}$ ,  $T$  Indexmenge, eine Familie von Zufallsvariablen.  $\mathcal{P}$  ist ein **stochastischer Prozeß mit diskreter Zeit** oder einfach **diskreter Prozeß**, falls die Indexmenge isomorph zu  $\mathbb{N}$  ist.

Ein stochastischer Prozeß kann als eine Familie von Variablen aufgefaßt werden, die sich mit der Zeit entwickelt. Dabei kann auch der Fall auftreten, bei dem die Variablen unabhängig voneinander sind.

**Definition 3.0.2** Eine **Markovkette** mit Zustandsraum (Phasenraum)  $\Omega$  ist eine Folge von  $\Omega$ -wertigen Zufallsvariablen  $X_0, X_1, \dots$ , so dass gilt:

1. Sei  $\alpha$  eine Anfangsverteilung aus  $\Omega$ , so dass

$$\mathcal{P}(X_0 = x) := \alpha_x \quad .$$

2. Sei  $P$  eine **Übergangsmatrix**  $P := (p_{xy})_{x,y \in \Omega} := (p(x \rightarrow y))_{x,y \in \Omega} := (p(x|y))_{x,y \in \Omega}$ . Dabei gilt:  $p_{xy} \geq 0$  für alle  $x, y \in \Omega$ , sowie  $\sum_y p_{xy} = 1$  für alle  $x \in \Omega$ .
3. Die Markovkette ist vollständig durch  $\mathcal{P}(X_0 = x_0, X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n) := \alpha_x p_{x_0 x_1} \dots p_{x_{n-1} x_n}$  bestimmt.

**Definition 3.0.3**  $p_{xy}^{(n)} := \mathcal{P}(X_{t+n} | X_t = x)$  heißt die **n-Schritt Übergangswahrscheinlichkeit**.

Es gilt

- $p_{xy}^{(1)} = p_{xy}$
- $p_{xy}^{(n)} = (p^n)_{xy}$

**Satz 3.0.1** Chapman-Kolmogorov Gleichung

$$p_{xy}^{(m+n)} = \sum_{z \in \Omega} p_{xz}^{(m)} p_{zy}^{(n)} .$$

Dies zeigt man wie folgt:

$$\begin{aligned} p_{xy}^{(m+n)} &= \mathbf{P}(X_{m+n} = y | X_0 = x) \quad \text{per. def.} \\ &= \sum_{z \in \Omega} \mathbf{P}(X_{m+n} = y, X_m = z | X_0 = x) \\ &= \sum_{z \in \Omega} \mathbf{P}(X_{m+n} = y | X_m = z, X_0 = x) \mathbf{P}(X_m = z | X_0 = x) \\ &= \sum_{z \in \Omega} \mathbf{P}(X_{m+n} = y | X_m = z) \mathbf{P}(X_m = z | X_0 = x) \end{aligned}$$

mit Markoveigenschaft

**Definition 3.0.4** (i) Eine Markovkette heißt **irreduzibel**, wenn jeder Zustand von jedem aus erreichbar ist, d.h.:

$$\forall x, y \in \Omega \exists n > 0 : p_{xy}^{(n)} > 0 .$$

(ii) Sei  $x \in \Omega$ , dann definieren wir die **Periode von  $x$**  ( $d_x$ ) als den größten gemeinsamen Teiler der Zahlen  $n > 0$ , für die  $p_{xy}^{(n)} > 0$ .

(iii) Ein Zustand  $x \in S$  heißt **aperiodisch**, falls  $d_x = 1$ .

Man kann zeigen:

- Falls eine Markovkette irreduzibel ist, dann haben alle Zustände dieselbe Periode  $d$ .
- Eine Kette ist irreduzibel und aperiodisch:  $\Leftrightarrow$

$$\forall x, y \in \Omega, \exists N_{xy} : \forall n \geq N_{xy} : p_{xy}^{(n)} > 0.$$

**Definition 3.0.5** Ein Wahrscheinlichkeitsmaß  $\pi := \{\pi_x\}_{x \in \Omega}$  heißt eine **stationäre Verteilung** (oder **invariante Verteilung**, bzw. **Gleichgewichtsverteilung**) zum Markovprozeß  $\mathcal{P}$ , falls:

$$\sum_x \pi_x p_{xy} = \pi_y, \quad \forall y \in \Omega.$$

Bemerkungen:

- Da  $\mathcal{P}$  durch die Übergangsmatrix  $\mathbf{P}$  bestimmt ist, ist die invariante Verteilung genau diejenige, die als Eigenvektor zum Eigenwert 1 auftritt.
- Eine stationäre Verteilung muß nicht existieren.

Zurück zum Random Walk. Wir beschränken uns auf ein endliches Intervall mit  $k$  Zuständen,

$$\begin{array}{cccccc} & -2 & -1 & 0 & +1 & +2 \\ 1 & & & \dots & & k \end{array}$$

Dann gilt für den Übergang vom Zustand  $i$  nach  $i + 1$ , dass er mit Wahrscheinlichkeit  $q = 1 - p$  vorkommt. Von  $i$  nach  $i - 1$  mit Wahrscheinlichkeit  $p$  und von  $i$  nach  $i$  mit Wahrscheinlichkeit 0. In Matrixform,

|    |   |   |   |   |   |    |
|----|---|---|---|---|---|----|
|    | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | .. |
| 1  | 0 | q |   |   | 0 |    |
| 2  | p | 0 | q |   |   |    |
| 3  |   | p | 0 | q |   |    |
| 4  |   |   | p | 0 | q |    |
| 5  |   |   |   | p | 0 |    |
| .. | 0 |   |   |   |   |    |

Dies ist eine Matrix mit Bandstruktur.

**Satz 3.0.2** Sei  $P$  die Matrix der Übergangswahrscheinlichkeiten einer irreduziblen Markovkette  $\mathcal{P}$  mit Periode  $d$ . Falls eine stationäre Verteilung  $\pi$  existiert, dann ist diese eindeutig. Falls  $p$  aperiodisch ist, gilt:  $\lim_{n \rightarrow \infty} p_{xy}^{(n)} = \pi_y$  für alle  $x \in \Omega$ .

D.h.: Unter den Voraussetzungen des vorstehenden Satzes konvergiert die Markovkette zu einer Gleichgewichtsverteilung unabhängig von der Anfangsbedingung! Dies ist besonders wichtig für die Anwendbarkeit in Monte-Carlo-Methoden, ja gerade eine der Basisfaktoren.

### BEISPIEL 3.0 (Student- oder t-Verteilung)

Als Grundlage nehmen wir standardisierte normal verteilte Daten. Diese sind nicht mehr normalverteilt, wenn die Varianz des Merkmals unbekannt ist und mit der Stichprobenvarianz geschätzt werden muss.

Die t-Verteilung beschreibt die Verteilung eines Ausdruckes

$$t_m = \frac{N(0, 1)}{\sqrt{\frac{\chi_m^2}{m}}} \quad (3.18)$$

wobei  $N(0, 1)$  eine standardnormalverteilte Zufallsvariable bedeutet und  $\chi_m^2$  eine  $\chi^2$ -verteilte mit  $m$  Freiheitsgraden. Die Zählervariable muss unabhängig von der Nennervariable sein. Die Dichtefunktion der t-Verteilung ist dann symmetrisch bezüglich ihres Erwartungswertes 0. Die t-Verteilung nähert sich für wachsende Stichprobenumfänge der Normalverteilung an, so dass für  $m > 30$  anstelle der t-Verteilung die Normalverteilung verwendet wird.

Die Werte der Verteilungsfunktion können nicht analytisch berechnet werden und liegen in der Regel tabelliert vor. Wir können eine t-verteilte Zufallsvariable mit der accept-reject Methode erzeugen.

#### R 3.0.1

```
newrt<-function(df=1){
  check<-0
  while (check==0){
    y1<-runif(1)*2-1
    y2<-runif(1)
    if (y2<0.5){x<-y1}
    else {x<-1/y1}
    u<-runif(1)
    if (u<= (((1+(x^2)/df)^(-(df+1)/2) )/min(1,x^(-2))))
```

```

    {check<-1}
  }
  return(x)
}

```

---

### 3.1 Überprüfen Sie Ihr Wissen

Überprüfen Sie die folgenden Aussagen und Fragen:

- Ist es richtig, dass man nur einen langen Random Walk ( $N \rightarrow \infty$ ) betrachten muss, um eine korrekte Aussagen für den End-zu-End-Abstand zu erhalten?

### 3.2 Übungen

1. Ein Polymer kann man im einfachsten Fall als einen allgemeinen Random Walk auffassen. Allgemein bedeutet, dass sowohl die Sprunglänge als auch der Winkel beliebig, also nicht an irgendein Gitter, gebunden sind. Ein allgemeiner Random Walk habe nun  $n$  Stellen (sites) besucht, somit gibt es also  $n - 1$  Verbindungsglieder (bonds) der Länge  $\vec{l}_i$ . Der vektorielle End-zu-End-Abstand ergibt sich somit zu:

$$\vec{r} = \sum_{i=0}^n \vec{l}_i \quad .$$

Der quadratische Trägheitsradius  $s^2$  ist durch die Koordinaten  $\vec{s}_i$  der sites definiert:

$$s^2 = \frac{1}{n+1} \sum_{i=0}^n \vec{s}_i^2 \quad .$$

Damit ist durch  $\vec{r}_{ij} = \vec{s}_j - \vec{s}_i$  der Trägheitsradius mit dem End-zu-End-Abstand verknüpft.

- a) Was ist der quadratische End-zu-End-Abstand  $r^2$ ? Wie groß ist der Mittelwert  $\langle r^2 \rangle$  unter der Annahme, dass alle bonds dieselbe Länge  $l$  haben?
- b) Drücke den Mittelwert  $\langle s^2 \rangle$  durch den Mittelwert von  $\langle \vec{r}_{ij}^2 \rangle$  aus. (Tip: Verwende obige Verknüpfung.)
- c) Berechne das Verhältnis  $\frac{r^2}{s^2}$ . Was ergibt sich für unendlich lange Random Walks?

2. Bei einem freien Random Walk ist der vektorielle End-zu-End-Abstand gaußverteilt:

$$P_N(\vec{R}) = \left( \frac{3}{2\pi Nl^2} \right)^{3/2} \exp \left( -\frac{3\vec{R}^2}{2Nl^2} \right) .$$

- Warum?
  - Berechne  $\langle (\vec{R}^2)^n \rangle$ . Was würde sich für ungerade Potenzen von  $\vec{R}$  ergeben?
  - Wie groß ist die Schwankung von  $\vec{R}^2$  also  $\frac{\langle (\vec{R}^2 - \langle \vec{R}^2 \rangle)^2 \rangle}{\langle \vec{R}^2 \rangle^2}$ ?
  - Kann man einen guten Schätzer für  $\langle \vec{R}^2 \rangle$  erhalten, indem man einen Random Walk immer länger macht? Warum? Wie kann man dieses Problem lösen?
3. Gegeben sei ein Teilchen der Masse  $M$  in einer Flüssigkeit. In der Flüssigkeit wirken zwei Kräfte auf das Teilchen: viskose Reibung  $B$  und zufällige Stöße durch andere Moleküle. Die Bewegungsgleichung lautet dann:

$$M \frac{d\vec{v}}{dt} = -\frac{\vec{v}}{B} + \vec{F}(t); \quad \overline{\vec{F}} = 0.$$

Mit einigen Umformungen ergibt sich:

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle r^2 \rangle + \frac{1}{\tau} \frac{d}{dt} \langle r^2 \rangle = 2 \langle v^2 \rangle \quad \text{mit} \quad \tau = MB .$$

- Berechne  $\langle r^2 \rangle$ . Benutze  $M \langle v^2 \rangle = 3kT$ . Zur Zeit  $t = 0$  sollen  $\langle r^2 \rangle$  und dessen zeitliche Ableitung Null sein.
  - Was ergibt sich für  $t \ll \tau$ ?
  - Was ergibt sich für  $t \gg \tau$ ?
4. **Zweidimensionaler Off-Lattice Random Walk**

Betrachten Sie einen Off-Lattice Random Walk in der komplexen Ebene, der aus  $N$  zweidimensionalen Vektoren  $e^{i\varphi_j} \in \mathbb{C}$ ,  $j \in \{1, \dots, N\}$  besteht, wobei  $\varphi_j$  gleichverteilt auf  $[0, 2\pi)$  verteilt ist. Der Walk startet im Ursprung des Koordinatensystems.

- Geben Sie die Endposition  $z_N \in \mathbb{C}$  an und berechnen Sie  $|z_N|^2$ .
- Berechnen Sie die Mittelwerte  $\langle z_N \rangle$  und  $\langle |z_N|^2 \rangle$  und verallgemeinern Sie die Formel auf den Fall von  $N$  Schritten  $re^{i\varphi_j}$  der Länge  $r > 0$ .
- Man kann den obigen Random Walk als Modell für Polymere auf einer Oberfläche benutzen. Betrachten Sie drei Polymerketten unterschiedlicher Längen:  $N_1 = 50$  Monomere,  $N_2 = 80$  Monomere und  $N_3 = 120$  Monomere. Dabei sei die Länge eines Monomers stets  $l = 10nm$ . Berechnen Sie für diese drei

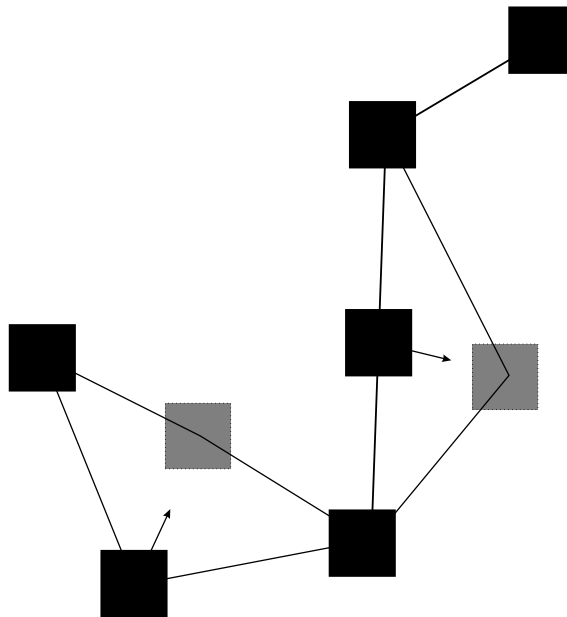


Abbildung 3.5:

Fälle jeweils die Wurzel des mittleren quadratischen End-zu-End-Abstands sowie die totale Kettenlänge  $L_i$  unter der Annahme, dass an den Verknüpfungspunkten immer alle Winkel  $\varphi_j \in [0, 2\pi)$  gleich wahrscheinlich sind.)

5. Eine Verallgemeinerung des Random Walk auf dem einfach quadratischen oder höher dimensionalen Raum ist durch das Bond-Fluktuationsmodell gegeben (vgl. Abbildung 3.5). Dieses Modell ist im Wesentlichen dadurch bestimmt, dass man von der Restriktion der Bondlänge (Schrittlänge) absieht und z.B. die folgende Hamiltonfunktion benutzt

$$H = \sum_i k_l (l_i - l_0)^2 \quad , \quad (3.19)$$

wobei  $l_i$  die Bond-, bzw. Schrittlänge ist,  $l_0$  die typische Länge und  $k_l$  der Wechselwirkungsparameter. Berechne den End-zu-End-Abstand als Funktion der Länge  $N$  des Walk und von  $k_l$ .