- Gewisse Effekte (Aussterben) können nur im stochastischen und diskreten Modell reproduziert werden.

Nachteil des stochastischen Modells:

- komplizierter
- teurer (im Sinne von Rechenzeit)

Die Konstruktion von effizienten Verfahren für solche Modelle ist ein sehr aktuelles Forschungsthema.

5.3 Die chemische Mastergleichung

Gegeben: Allgemeines Reaktionssystem

Ziel: Berechne die Wahrscheinlichkeit

$$p(t,n) = \mathbb{P}(X(t) = n)$$

dass sich der stochastische Prozess $X(t)$ zur Zeit t im Zustand $n \in \mathbb{N}_0^d$ befindet, ohne viele Realisierungen von $X(t)$ zu erzeugen.

Leite eine Differentialgleichung für $p(t,n)$ her.

Für kleines $h>0$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass das System zur Zeit $t+h$ im Zustand $n \in \mathbb{N}_0^d$ ist,

(i) die Wahrscheinlichkeit, dass das System schon zur Zeit t im Zustand n ist, und dass zwischen t und $t+h$ keine Reaktion passiert

plus

(ii) die Wahrscheinlichkeit, dass das System zur Zeit t noch in einem anderen Zustand $\tilde{n}$ war, dass aber zwischen t und $t+h$ eine Reaktion R_k stattgefunden hat und das System dadurch in den neuen Zustand $n = \tilde{n} + \nu_k$ gesprungen ist.

Erinnerung (vgl. S. 1):

$\beta_j(n)\,h \approx$ Wahrscheinlichkeit, dass R_j im Zeitintervall $[t, t+h]$ einmal ausgeführt wird.

In Formeln übersetzt bedeutet dies

$$p(t+h,n) \approx \underbrace{p(t,n)\left(1-\sum_{j=1}^{m}\beta_j(n)h\right)}_{(i)} + \underbrace{\sum_{j=1}^{m} p(t,n-\nu_j)\,\beta_j(n-\nu_j)\,h}_{(ii)}$$

Forme um:

$$\frac{p(t+h,n)-p(t,n)}{h} \approx \sum_{j=1}^{m}\Big(\beta_j(n-\nu_j)\,p(t,n-\nu_j) - \beta_j(n)\,p(t,n)\Big)$$

Im Limes $h \to 0$ gilt

$$\lim_{h\to 0}\frac{p(t+h,n)-p(t,n)}{h} = \frac{\partial p(t,n)}{\partial t} \quad \text{(partielle Ableitung nach } t\text{)},$$

und da die rechte Seite nicht von h abhängt, erhält man die ...

Chemische Mastergleichung

$$\frac{\partial p(t,n)}{\partial t} = \sum_{j=1}^{m} \Big(\beta_j(n-v_j)\, p(t,n-v_j) - \beta_j(n)\, p(t,n) \Big) \qquad \begin{array}{l} n \in \mathbb{N}_0^d \\ t \geq 0 \end{array}$$

mit Anfangsbedingung $p(0,n) = p_0(n)$.

Konvention: Für $n-v_j \notin \mathbb{N}_0^d$ setze $\beta_j(n-v_j) = 0$, $p(t,n-v_j) = 0$

Satz 1

Sei $p_0(n)$ eine Wahrscheinlichkeitsverteilung, d.h. $p_0(n) \geq 0$ für alle $n \in \mathbb{N}_0^d$ und $\sum_{n \in \mathbb{N}_0^d} p_0(n) = 1$. Nehme an, dass $\sum_{n \in \mathbb{N}_0^d} \beta_j(n)\, p(t,n) < \infty$ für alle $j \in \{1, \dots, m\}$ und $t \geq 0$. Dann ist auch die Lösung $p(t,n)$ für alle $t \geq 0$ eine Wahrscheinlichkeitsverteilung.

Beweisskizze:

- $$\sum_n \frac{\partial_t p(t,n)}{\partial t} = \sum_{j=1}^{m} \Big(\sum_n \beta_j(n-v_j)\, p(t,n-v_j) - \sum_n \beta_j(n)\, p(t,n) \Big)$$
$$\overset{\hat n = n - v_j}{=} \sum_{j=1}^{m} \underbrace{\Big(\sum_{\hat n} \beta_j(\hat n)\, p(t,\hat n) - \sum_n \beta_j(n)\, p(t,n) \Big)}_{=0} = 0$$

- Wegen
$$\int_0^t \frac{\partial p(s,n)}{\partial t}\, ds = p(t,n) - p(0,n) = p(t,n) - p_0(n)$$
gilt
$$\sum_n p(t,n) = \underbrace{\sum_n p_0(n)}_{=1} + \int_0^t \underbrace{\sum_n \frac{\partial p(s,n)}{\partial t}}_{=0}\, ds = 1$$

- Zeige ähnlich wie in 3.4, dass $p(t,n) \geq 0$ für alle n.

Definition (Erwartungswert)

Der Erwartungswert einer Wahrscheinlichkeitsverteilung $\omega : \mathbb{N}_0^d \to \mathbb{R}$ ist

$$\mathbb{E}(\omega) = \sum_{n \in \mathbb{N}_0^d} n\,\omega(n) = \begin{pmatrix} \sum_n n_1 \omega(n) \\ \vdots \\ \sum_n n_d \omega(n) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^d$$

Beispiele:

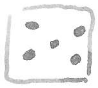
(i) Würfeln:

$$d = 1, \quad \omega(n) = \begin{cases} \frac{1}{6} & \text{falls } n \in \{1, \dots, 6\} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\mathbb{E}(\omega) = \sum_{n \in \mathbb{N}_0^1} n\,\omega(n) = \sum_{n=1}^{6} n \cdot \underbrace{\omega(n)}_{=\frac{1}{6}} = \frac{1}{6}(1+2+3+4+5+6) = \frac{21}{6} = \frac{7}{2}$$

$$= 3.5$$

Interpretation: Der Erwartungswert ist nicht „die wahrscheinlichste Zahl", denn alle Augenzahlen werden mit der gleichen Wahrscheinlichkeit geworfen, und es gilt insbesondere $\mathbb{E}(\omega) \notin \{1, \dots, 6\}$.
Wenn man jedoch sehr oft würfelt und den Mittelwert aus allen Würfen bestimmt, dann konvergiert das Ergebnis gegen den Erwartungswert.
(„Gesetz der großen Zahlen")

(ii) Würfeln mit einem modifizierten Würfel:
Betrachte Würfel, bei dem  durch  und  durch  ersetzt wurde.

n	1	2	3	4	5	6
$\omega(n)$	$\frac{2}{6}$	$\frac{2}{6}$	$\frac{1}{6}$	0	0	$\frac{1}{6}$

Dann gilt $\mathbb{E}(\omega) = \sum_{n=1}^{6} n \cdot \omega(n) = 1 \cdot \frac{2}{6} + 2 \cdot \frac{2}{6} + 3 \cdot \frac{1}{6} + 0 + 0 + 6 \cdot \frac{1}{6} = \frac{15}{6} = 2.5$