Sei nun $p(t,n)$ die Lösung der chemischen Mastergleichung

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

Da die Wahrscheinlichkeitsverteilung $p(t,n)$ zeitabhängig ist, ist auch der Erwartungswert

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

zeitabhängig und es gilt

$$\begin{aligned} u'(t) &= \sum_n n \frac{\partial p(t,n)}{\partial t} \\ &= \sum_n \sum_{j=1}^{m} n \Big(\beta_j(n-\nu_j)\, p(t,n-\nu_j) - \beta_j(n)\, p(t,n) \Big) \end{aligned}$$

$$= \sum_{j=1}^{m} \Big(\sum_n n\, \beta_j(\underbrace{n-\nu_j}_{=:\tilde{n}})\, p(t,n-\nu_j) \quad - \sum_n n\, \beta_j(n)\, p(t,n) \Big)$$

$\tilde{n} = n - \nu_j$

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

$$= \sum_{j=1}^{m} \nu_j \sum_{\tilde{n}} \beta_j(\tilde{n})\, p(t,\tilde{n})$$

$$\left. \begin{array}{lll} \text{Annahme: Alle Reaktionen haben die Form} & & \\ \text{(i)} \quad S_i \xrightarrow{c_j} \dots & & \beta_j(n) = c_j \cdot n_i \\ \text{oder} & & \\ \text{(ii)} \quad * \xrightarrow{c_j} \dots & & \beta_j(n) = c_j \end{array} \right\} \quad (*)$$

Dann gilt $\sum_{\tilde{n}} \beta_j(\tilde{n}) p(t,\tilde{n}) = \beta_j(u(t))$, denn

Fall (i): $\sum_{\tilde{n}} \beta_j(\tilde{n}) p(t,\tilde{n}) = \sum_{\tilde{n}} c_j \tilde{n}_i p(t,\tilde{n}) = c_j u_i(t) = \beta_j(u(t))$

Fall (ii): $\sum_{\tilde{n}} \beta_j(\tilde{n}) p(t,\tilde{n}) = \sum_{\tilde{n}} c_j p(t,\tilde{n}) = c_j = \beta_j(u(t))$

Wir erhalten also unter der Voraussetzung (*)

$$u'(t) = \sum_{j=1}^{m} v_j \sum_{\tilde{n}} \beta_j(\tilde{n}) p(t,\tilde{n}) = \sum_{j=1}^{m} v_j \beta_j(u(t)),$$

und da in diesem Fall $\beta_j(u(t)) = \alpha_j(u(t))$ mit α_j aus 2.5 ist, gilt

$$u'(t) = \sum_{j=1}^{m} v_j \alpha_j(u(t)) = v_1 \alpha_1(u(t)) + \dots + v_m \alpha_m(u(t))$$

Dies ist genau die ODE, die man betrachtet, wenn man das Reaktionssystem mit dem klassischen, deterministischen Modell beschreibt, d.h. $u(t) = y(t)$.

Aber: Dies gilt nur, wenn die Annahme (*) erfüllt ist.
Bei den meisten „spannenden" Systemen ist dies nicht der Fall.
Dann gilt $u(t) \neq y(t)$, und die Abweichung kann sehr groß sein (vgl. Beispiel in 5.2).