

## Diskrete stochastische Systeme

Die **reaktionskinetischen Gleichungen** zur Beschreibung der Änderung von kontinuierlichen Konzentrationen vom Typ

$$\frac{dX_i}{dt} = f(X_i, \{X_j\})$$

sind für kleine Teilchen- bzw. Individuenzahlen nicht mehr anwendbar.

Zum einen macht sich der Übergang von kontinuierlichen Zustandsvariablen zu diskreten Abundancen notwendig ( $X \rightarrow N$ ), zum anderem muß häufig die Kinetik modifiziert werden.

Am anschaulichsten wird dies bei autokatalytischen Reaktionen:



kontinuierlich

diskret

$$f(X) = k_{yxx} \cdot X \cdot X = k_{yxx} \cdot X^2$$

$$f(N) = k_{mnn-1} \cdot N \cdot (N-1) = k_{mnn-1} \cdot (N^2 - N)$$

Was ist in diesem Sinne eine kleine Teilchenzahl?

Abhängig vom Typ der Kinetik kann man gewisse Faustregeln aufstellen:

...

...  $f(X_i, \{X_j\})$  ist deutlich von  $f(X_i - 1, \{X_j\})$  verschieden

hier:  $N^2 - N \ll N^2$  ; d.h. hier ca. bei  $N = 20..30$

...

## Ein Beispiel

Seien X (N) und Y (M) zwei Populationen, deren Wechselbeziehungen im Kontinuum vereinfacht mit zwei gekoppelten Differentialgleichungen vom Lotka-Volterra-Typ beschrieben wird, die für diskrete Abundancen modifiziert werden müssen.

$$\frac{dX}{dt} = X(a - bY - cX) \quad ; \quad X \text{ "Beute" } N \quad \frac{dN}{dt} = N \left( a - bM - c(N-1) \right)$$

$$\frac{dY}{dt} = Y(X b h_{yx} - d) \quad ; \quad Y \text{ "Räuber" } M \quad \frac{dM}{dt} = M \left( N b h_{yx} - d \right)$$

Gegenüber dem kontinuierlichen LVS wird bei dieser Beschreibung eine der Realität besser entsprechende Beschreibung insbesondere bei kleinen Abundancen N und M erzielt.

Eine weitere Schwierigkeit ergibt sich bei der taktweisen Abarbeitung für kontinuierliche Reaktionen durch die zunehmend von diskreten **Ereignissen** geprägte Dynamik

D.h. die ursprüngliche Taktzeit bei der expliziten oder impliziten Integration von kontinuierliche Konzentrationsänderungen kommt in Konflikt mit der Relaxationszeit des Systems zwischen den jetzt diskreten **Zuständen**.

# Konzentration

## Konzentration

$$\mathbf{k}_{\mathbf{X}+\mathbf{dX},\mathbf{X}} \quad \mathbf{X}^{3/4} \quad \mathbf{X}^{3/4} \quad \textcircled{\text{R}} \quad \mathbf{X}+\mathbf{dX} \quad \text{---} \quad \textcircled{\text{R}} \quad \mathbf{dX} \text{ reell}$$

# diskreter Zustand



**N** **W<sub>N,N<sub>±</sub></sub>** **D** **N**  
**3/4** **3/4** **3/4** **®**

# diskreter Zustand



**N ± DN - - - - ®**  
**DN ganz**

$$\mathbf{P}(\mathbf{N})^{3/4} \otimes \mathbf{P}(\mathbf{N}_{\pm} \otimes \mathbf{N})$$

# Beschreibung diskreter Übergänge

## ***Vorbemerkungen***

Ereignisse besitzen eine Wartezeit.

Mit zunehmender Teilchenzahl wird die Wartezeit für ein Einzelereignis immer geringer oder die Zahl der Ereignisse pro Zeit nimmt zu (Übergang zur kontinuierlichen Beschreibung).

Ratenfunktionen für Konzentrationen werden durch Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen diskreten Zuständen ersetzt.

Eine anschauliche Ableitung des Überganges findet sich in Ebeling & Feistel (1982, S. 122-128).

## Wartezeitverteilungen

Häufig lassen sich die Wartezeiten mittels exponentieller Zeitverteilungen beschreiben (Abl. w. o. g.).

Ohne weitere detaillierte Ableitung sei hier eine mittlere Wartezeit angegeben:

$$t = - \frac{1}{\sum w_i} \ln(1 - e^{-\sum w_i})$$

wobei die  $W_i$  die jeweiligen Übergangswahrscheinlichkeiten darstellen sollen.

# Übung

## A Diskussion der modifizierten DGL

- Bedeutung der Parameter
- qualitatives Verhalten
- Veränderungen

## B Demonstration und üben am Computer