Prof. Dr. Andreas Mielke
Andreas-Hofer-Weg 47
D-69121 Heidelberg
Germany

www.andreas-mielke.de
e-mail info@andreas-mielke.de

Stochastische Modelle

Andreas Mielke

4. März 2011

Modellierung bedeutet immer, von verschiedenen Effekten, die eventuell nicht wesentlich sind, zu abstrahieren. In sehr vielen Systemen, die mathematisch modelliert werden, treten viele kleine Effekte auf, die jeder für sich keine Rolle spielen und daher vernachlässigt werden. Die Summe dieser kleinen Effekte kann aber wichtige Effekte haben. Da man die einzelnen Effekte nicht genau genug kennt, um sie in einem Modell explizit zu berücksichtigen, oder da hierfür der mathematische Aufwand zu groß wäre, berücksichtigt man ihre Summe als eine stochastische Variable. Modelle, die stochastische Variable enthalten, haben besondere Eigenschaften und müssen auf besondere Weise behandelt werden. Welche Aspekte dabei wichtig sind, wird hier erläutert.

Copyright ©1999-2007 Andreas Mielke

Inhaltsverzeichnis

Copyright ©1999-2007 Andreas Mielke

1 Einführung

In sehr vielen Fällen werden Einfüsse auf ein System, die nicht hinreichend bekannt sind, in der Modellbildung vernachlässigt. Ob das vertretbar ist, hängt von der jeweiligen Situation und von der Fragestellung ab. In einigen Fällen ist es möglich, z.B. kleine, unvorhersagbare Unregelmäßigkeiten oder die Summe vieler kleiner Effekte durch Einführung einer stochastischen Variablen zu berücksichtigen. In der Physik werden solche Modelle, sei es mit statischen oder mit dynamischen Zufallsvariablen, seit sehr vielen Jahren in unterschiedlichen Bereichen sehr erfolgreich eingesetzt. Dabei hat sich gezeigt, daß es durch die Einführung solcher Größen in einem Modell zu ganz neuen Phänomenen kommen kann. Aber selbst wenn das nicht der Fall ist, kann es wichtig sein, Störungen in solch einem Rahmen zu berücksichtigen, um die Genauigkeit der Vorhersage abschätzen zu können. Da Störungen immer vorhanden sind - es gibt keine perfekt isolierten Systeme - stellt sich letztlich in jedem Modell die Frage, ob ihre Berücksichtigung wichtig ist.

In der Regel stellt es begrifflich keine besondere Schwierigkeit, in einem Modell Störungen in geeigner Weise durch stochastische Größen zu berücksichtigen. Bei der Lösung dieser Modelle gibt es ein paar Besonderheiten zu beachten:

- Einige Methoden, die für Modelle ohne stochastische Variable sehr effizient sind, können nicht oder nur mit Vorsicht angewandt werden.
- Um eine gute Statistik zu erhalten, benötigt man in deutlich mehr Rechenzeit als bei Modellen ohne stochastische Variable.
- Man benötigt einen Zufallszahlengenerator, an den je nach Modell unter Umständen hohe Qualitätsmaßstäbe angelegt werden müssen.

Auf diese Punkte wird weiter unten detailliert eingegangen,

2 Ursachen für stochastisches Verhalten

Es gibt zwei Quellen für stochastisches Verhalten. Stochastisches Verhalten kann durch äußere Störungen des Systems verursacht werden oder es kann in dem System selbst enthalten sein. Beide Fälle kann man sich an Beispielen deutlich machen:

Störungen.

Oft wird das Verhalten eines Systems durch unterschiedliche Störungen beeinflußt. Einige wenige, größere Störungen des Systems lassen sich eventuell explizit berücksichtigen. Das gilt zum Beispiel für den Einfluß anderer Himmelskörper auf die Bewegung eines Satelliten um die Erde. Inwieweit solche Störungen zu berücksichtigen sind, hängt von der Fragestellung ab und von der Genauigkeit, die für die Vorhersage benötigt wird. Viele, kleine Störungen, die nicht alle explizit berücksichtigt werden können, lassen sich häufig in der Summe durch einen stochastischen Term modellieren. Ein typisches Beispiel für ein solches System ist die Bewegung eines kleinen Teilchens in einer Flüssigkeit. Das kleine Teilchen wird durch die Flüssigkeitsmoleküle hin- und hergestoßen. Es bewegt sich unregelmäßig hin und her. Diese unregelmäßige Bewegung kann modelliert werden und es ist möglich, bestimmte Eigenschaften der Bewegung zu beschreiben. Die Bewegung

Copyright ©1999-2007 Andreas Mielke

wird Brownsche Bewegung genannt. In den meisten Fällen wirken hauptsächlich andere Kräfte auf das Teilchen, die eigentlich von Interesse sind und in dem Modell auftreten. Die Wirkung dieser Kräfte wird durch die Stöße der Flüssigkeitsmoleküle gestört. Je kleiner das System ist, desto größer ist der Einfluß der Störterme. Typische Beispiele treten bei der Modellierung von Systemen in der Nanotechnologie oder von mikrobiologischen Systemen auf.

Intrinsische Stochastizität.

In anderen Fällen ist das stochastische Verhalten von dem System selbst vorgegeben. Ein typisches Beispiel ist die Modellierung eines Devisenkurses. Wir gehen von dem Idealfall aus, daß alle Marktteilnehmer die gleichen Informationen haben. Ein Devisenkurs, also ein Preis für eine Währung in einer anderen Währung, entsteht durch ein Gleichgewicht von Angebot und Nachfrage. Der Devisenmarkt funktioniert nur deshalb, weil verschiedene Teilnehmer des Marktes aus diesen Informationen unterschiedliche Schlüsse ziehen und sich daher unterschiedlich verhalten. Gleiches Verhalten würde zu keinem vernünftigen Verhalten des Marktes führen, da alle Teilnehmer entweder verkaufen oder kaufen würden. Erst das unterschiedliche Verhalten der Teilnehmer führt zu einem funktionierenden Markt. Gründe für unterschiedliches Verhalten bei gleicher Information liegen an einer unterschiedlichen Erwartungshaltung der Marktteilnehmer, oder auch an unterschiedlichen Bedürfnissen und Interessen. Gerade bei einem Markt mit vielen Teilnehmern ist es nicht möglich, das Verhalten jedes Teilnehmers deterministisch zu beschreiben. Das stochastische Verhalten des Systems ist also intrinsisch im Modell vorhanden.

3 Rauschinduzierte Phänomene

Stochastische Größen in einem Modell werden auch als Rauschen bezeichnet. In vielen Fällen ist Rauschen unerwünscht. Betrachtet man zum Beispiel die Signalübertragung in einem Wellenleiter, dann wird man versuchen, Störungen zu unterdrücken, die zu einem Rauschen führen. In der Regel lassen sich Störungen aber nie vollständig unterdrücken.

Modelle, in denen stochastische Größen vorkommen, erlauben trotz der Zufälligkeit, die in dem Modell enthalten ist, eine Vorhersage oder eine Beschreibung des Systems. Man erhält allerdings nur statistische Aussagen, etwa über Mittelwerte oder Wahrscheinlichkeiten. Andererseits treten in einem stochastischen Modell neue Phänomene auf. Stichwörter hierfür sind stochastische Resonanz, rauschinduzierte Stabilität oder rauschinduzierter Transport:

- Stochastische Resonanz ist ein Verstärkungseffekt, der in vielen Systemen beobachtet wird. Ein periodisches Signal wird in diesen Systemen durch zusätzliches Rauschen erheblich verstärkt.
- Rauschen kann einen eigentlich instabilen Zustand des Systems so stabilisieren, daß sich das System hauptsächlich in diesem Zustand befindet.
- In bestimmten Fällen kann Rauschen zu einem Transport führen. Vorrausetzungen hierfür sind, daß das Rauschen selbst korreliert ist und daß das System eine geeignete Assymetrie hat.

Diese Phänomene werden insbesondere in der Nanotechnologie, in chemischen Systemen (mikroskopische Beschreibung von Reaktionen) oder in mikrobiologischen Systemen beobachtet.

Copyright ©1999-2007 Andreas Mielke

Der Grund dafür ist, daß in kleinen Systemen Störungen einen sehr viel größeren Einfluß haben. Rauschen spielt in kleinen Systemen eine wesentlich größere Rolle.

Einige ausgewählte Veröffentlichungen http://www.tphys.uni-heidelberg.de/~mielke/noise.htm und ein Vorlesungsscript http://www.tphys.uni-heidelberg.de/~mielke/ss01.pdf über rauschinduzierte Phänomene in Physik und Biologie finden Sie auf meiner homepage http://www.tphys.uni-heidelberg.de/~mielke/ an der Universität Heidelberg.

4 Modellierung

Es gibt unterschiedliche Möglichkeiten, stochastische Modelle zu formulieren:

- Die naheliegenste Formulierung besteht darin, als Ausgangspunkt ein Modell zu verwenden, in dem die kleinen Störungen als Ursache des Rauschens zunächst nicht berücksichtigt sind. Dieses Modell erweitert man, indem man in sehr idealisierter Weise die Störungen berücksichtigt. Da es in der Regel bei den Störungen nicht auf Details ankommt, können diese Erweiterungen unter Umständen eine sehr einfache Struktur haben. Diese Modelle enthalten dann eine große Zahl von Freiheitsgraden, die die Störungen modellieren und die eigentlich nicht von Interesse sind.
- Da die Störungen ohnehin nicht explizit bekannt sind, kann man ihren Einfluß in der Summe als einen Zufallsvariable beschreiben. Betrachtet man speziell zeitabhängige, also dynamische Systeme, dann wird diese Zufallsvariable ebenfalls zeitabhängig sein. Die wesentlichen Fragen für die Modellierung sind, welche statistischen Eigenschaften (Mittelwert, Korrelationen, Verteilungsfunktion, etc) die Zufallsvariable hat und an welcher Stelle sie im Modell auftaucht.
- Beschreibt man ein System durch ein Modell, in dem eine Zufallsvariable auftaucht, dann werden automatisch alle abgeleiteten Größen des Modells auch einen mehr oder weniger zufälligen Charakter haben. Von diesem Größen wird man also auch wieder die statistischen Eigenschaften berechnen können. In den meisten Fällen kann man aus dem Modell, in dem die Zufallsvariablen direkt auftreten, ein äquivalentes konstruieren, daß Aussagen über bestimmte statistische Größen liefert.
- Schließlich kann man in bestimmten Grenzfällen effektive Modelle konstruieren, die direkt effektive (statistische) Variable enthalten.

Die erste Möglichkeit spielt für praktische Fälle eine untergeordnete Rolle. Sie findet nur dann Anwendungen, wenn keine der anderen Modellierungen möglich ist. Die anderen Fälle sind praktisch relevant und werden im Folgenden diskutiert.

4.1 Stochastische Modellgleichungen

Stochastische Modellgleichungen sind von der Form den Modellgleichungen ohne Rauschen sehr ähnlich, enthalten aber einen oder mehrere Beiträge, in denen Zufallsgrößen vorkommen.

Beschreibt man mit dem Modell statische Größen, dann wird es sich bei den Modellgleichungen um statische Beziehungen handeln. Typische Fälle sind einfache, lineare Probleme oder komplizierte, nichtlineare Optimierungen. Diese Gleichungen werden in der Regel numerisch, also mit

Copyright ©1999-2007 Andreas Mielke

dem Computer gelöst. Das ist auch für den stochastischen Fall möglich. In der Regel wird man die Zufallsvariablen mit Hilfe eines geeigneten Zufallszahlengenerators erzeugen. Für jeden erzeugten Satz von Zufallsvariablen werden die Modellgleichungen gelöst. Die Lösungen selbst hängen natürlich von den gezogenen Zufallsvariablen ab. Hat man für hinreichend viele Sätze von Zufallsvariablen die Gleichungen gelöst, dann kann man die verschiedenen Lösungen mit gängigen statistischen Verfahren auswerten. Man erhält so für die Lösungen Mittelwerte, Varianzen, und je nach Bedarf Näherungen für Verteilungsfunktionen (Histogramme) oder höhere Momente.

Für dynamische Probleme ist das Vorgehen im Prinzip ähnlich, es sind allerdings einige zusätzliche Bedingungen zu beachten. Zunächst unterscheiden sich auch in diesem Fall die Modellgleichungen nur dadurch von dem Fall ohne Rauschen, daß zusätzliche Terme auftreten, die Zufallsvariablen enthalten. Auch hier kann man die Zufallsvariablen im Prinzip mit einem Zufallszahlengenerator erzeugen. Das Problem ist aber, daß die Zufallsvariablen zeitabhängig sind, man also im Prinzip für jedem Zeitpunkt eine neue Zufallszahl erzeugen müsste. Das ist natürlich nur möglich, wenn man sich auf diskrete Zeitschritte beschränkt.

Im Prinzip bedeutet die Beschränkung auf diskrete Zeitschritte zunächst keine wesentliche Einschränkung. Numerische Lösungsverfahren für dynamische Probleme arbeiten in der Regel immer mit diskreten Zeitschritten. Trotzdem sind vier Punkte zu beachten:

1. Wenn die Zufallsgröße zu diskreten Zeiten mit einem Zufallszahlengenerator bestimmt wird, der (im wesentlichen) unkorrelierte Zufallszahlen liefert, dann bestimmt der Zeitabstand zwischen zwei aufeinanderfolgenden Zeitpunkten die Korrelationszeit der Zufallsgröße. Ist die Zufallsgröße zeitlich unkorreliert, dann muß dieser Zeitabstand klein verglichen mit allen anderen typischen Zeitskalen des Systems gewählt werden. Sonst kann es durch die Korrelationen zu unerwünschten Nebeneffekten kommen. Ist die Zufallsgröße dagegen zeitlich korreliert, dann wird man die Zeitschritte in der Regel kleiner als die Korrelationszeit wählen und entsprechend korrelierte Zufallszahlen erzeugen. Die genaue Vorgehensweise hängt dann von der Art der Korrelationen ab.

2. Es gibt unterschiedliche Typen von Algorithmen zum Lösen dynamischer Probleme. Einige arbeiten mit einer festen Diskretisierung. Dann bleibt der Zeitabstand zwischen zwei aufeinanderfolgenden Zeitpunkten fest. Andere arbeiten mit variabler Diskretisierung. Dann wird der Zeitabstand während der Lösung immer an das Verhalten der dynamischen Größen angepasst. Für nicht stochastische Modelle sind diese Verfahren häufig sehr effizient. Simuliert man ein Modell mit stochastischen dynamischen Größen, kann es bei diesen Verfahren aber zu Problemen kommen. Zum einen kann es passieren, daß die automatisch bestimmte Schrittweite zu klein wird, dann ist das Verfahren ineffizient. Zum anderen kann es vorkommen, daß die variable Schrittweite zu variablen, zeitlichen Korrelationen führt, die unerwünscht sind.

3. Da man Zeitreihen von Zufallszahlen benötigt, ist es wichtig, einen guten Zufallszahlengenerator auszuwählen, der möglichst wenig Korrelationen hat. Zudem benötigt man sehr viele Zufallszahlen für eine gute Statistik, auch deshalb ist die Qualität des Zufallszahlengenerators wichtig.

4. In der Regel muß man, um eine gute Statistik zu erzielen, das Modell mit vielen Realisierungen der Zufallsgröße lösen. Für dynamsiche Probleme kann es genügen, das Modell mit einer Realisierung lange zu simulieren. Das wäre der Fall, wenn zeitliche Mittelwerte oder Korrelationen mit Mittelwerten oder Korrelationen über verschiedene Realisierungen

Copyright ©1999-2007 Andreas Mielke

übereinstimmen. Dieser Punkt ist in vielen Fällen aus den Modellgleichungen selbst abzuleiten, ohne eine Simulation durchführen zu müssen.

4.2 Modelle für statistische Größen

In einigen Fällen lassen sich aus den stochastischen Modellgleichungen direkt Gleichungen für statistische Größen (Mittelwerte, Momente von Verteilungen, Verteilungsfunktionen, etc.) ableiten. Je nachdem, wie kompliziert die Fragestellung ist, benötigt man kompliziertere Größen und damit auch kompliziertere Modelle. Diese Modelle enthalten keine stochastischen Variablen mehr, aber stattdessen Informationen über die statistischen Eigenschaften dieser Variablen. Zudem sind sie meist komplexer. Für ein dynamisches Problem, daß durch eine einzige Koordinate beschrieben werden kann (z.B. eine Reaktionskoordinate in einer chemischen Reaktion) wird aus einer gewöhnlichen stochastischen Differentialgleichungen im Rahmen des stochastischen Modells eine partielle Differentialgleichung für die Wahrscheinlichkeitsverteilung. Für diese Gleichungen stehen dann neue numerische Verfahren zur Lösung zur Verfügung. Speziell wenn man genaue Resultate braucht, ist der numerische Aufwand für diese komplizierteren Modelle geringer als der Aufwand für die vielfache Lösung der einfacheren stochastischen Gleichungen.

4.3 Effektive Modelle

Ob es möglich ist, effektive Modelle für ein Problem aufzustellen, das stochastische Größen enthält, hängt von der konkreten Problemstellung ab und kann nur im Einzelfall beantwortet werden. Wenn sich solche Modelle herleiten lassen, dann ist es in der Regel sehr viel weniger aufwendig, diese Modelle zu lösen, als eines der beiden vorangegangenen Verfahren anzuwenden.

5 Zufallszahlengeneratoren

In sehr vielen Fällen wird man ein Problem mit stochastischen Variablen durch direkte Lösung der stochastischen Modellgleichungen untersuchen. Man benötigt dann qualitativ gute Zufallszahlengeneratoren. Wie diese Generatoren funktionieren und was bei ihrer Anwendung zu beachten ist, wird in diesem Abschnitt diskutiert.

Echte Zufallszahlen, die nicht über einen Zufallszahlengenerator wie unten beschrieben generiert werden, sind im WWW unter random.org `http://www.random.org` zu bekommen.

5.1 Funktionsweise

Zufallszahlengeneratoren, die für numerische Zwecke verwendet werden, erzeugen aus einer oder mehrerer Zufallszahlen eine oder mehrere neue Zufallszahlen. Die Algorithmen, die dabvei verwendet werden, sind deterministisch. Es handelt sich bei solchen Zufallszahlen also streng genommen um Pseudo-Zufallszahlen.

Copyright ©1999-2007 Andreas Mielke

Einfache Zufallszahlengeneratoren benutzen die Multiplikation von ganzen Zahlen mit großen Primzahlen zur Erzeugung von Zufallszahlen. Die Ganzzahlarithmetik eines Rechners arbeitet mit endlich vielen Bits zur Darstellung einer ganzen Zahl. Es gibt daher eine größte ganze Zahl M. Ist das Ergebnis einer Rechnung größer als M, so liefert der Computer nicht das richtige Ergebnis, sondern nur den Rest, den man bei Division durch M erhält. Multipliziert man eine ganze Zahl mit einer Primzahl, die hinreichend groß ist, so erhält man auf diese Weise eine Reihe von Zufallszahlen. Folgender Fortrancode liefert eine Folge von Zufallszahlen `X`, die zwischen 0 und 1 liegen, und ganze Zahlen `I`, die zwischen 0 und 2147483647, wobei von einer 32-Bit Arithmetrik ausgegangen wurde:

```
I=I*65539
IF(I.LT.0) I=I+2147483647+1
X=I*0.4656612E-9
```

Die erzeugte Zahlenfolge ist zwar eine Folge von Pseudo-Zufallszahlen, aber natürlich periodisch, da es nur endlich viele ganze Zahlen in einer 32-Bit Arithmetrik gibt und sich die Zufallszahlen irgendwann wiederholen.

5.2 Tests

Es gibt eine Reihe einfacher statistischer Tests, mit denen man Zufallszahlengeneratoren testen kann. Meist stellt sich heraus, daß die Pseudo-Zufallszahlen Korrelationen haben, die unter Umständen zu Problemen führen können. In der Regel treten Korrelationen erst in höheren Ordnungen auf. Sie können mit statistischen Verfahren berechnet werden. In vielen Fällen haben sich aber auch physikalisch motivierte Tests bewährt. Ein sehr einfaches Beispiel ist die Besetzung eines Kubus. Man erzeugt dazu ganzzahlige Zufallszahlen zwischen 1 und N und interpretiert drei aufeinanderfolgende Zahlen (i,j,k) als Koordinaten in einem Würfel der Kantenlänge N. Wenn die Koordinaten (i,j,k) aufgetreten sind, gilt dieser Punkt als besucht. Berechnet man den Bruchteil der nicht besuchten Gitterplätze, dann sollte dieser mit der Zahl der berechneten Zufallszahlen verschwinden. Für den oben aufgeführten einfachen Algorithmus ist das für N=10 korrekt, aber schon für $N>15$ treten Probleme auf.

5.3 Ressourcen

Im GAMS (Guide to Available Mathematical Software `http://gams.nist.gov/`) gibt es ein Kapitel zu Zufallszahlengeneratoren (Class L6 ... Random number generation `http://gams.nist.gov/ser` findet man ein Vielzahl von Routinen zur Erzeugung von Zufallszahlen. In der Klasse L6c ... Service routines for random number generation `http://gams.nist.gov/serve.cgi/Class/L6c/` gibt es außerdem eine Reihe von Programmen zum Testen von Zufallszahlengeneratoren. Die meisten dieser Programme sind Fortran Routinen. Eine große Zahl ist inzwischen nach C portiert worden. Auf den WWW-Seiten des National Institut for Standards and Technology werden aber auch Java-Routinen `http://math.nist.gov/jnt/api/Package-jnt.random.html` zur Verfügung gestellt. Außerdem findet man dort qualitativ hochstehenden statistischen Referenzdaten `http://www.itl.nist.gov/div898/strd/`, die für statistische Zwecke benutzt werden können.

Copyright ©1999-2007 Andreas Mielke

Die GNU Scientific Library `http://www.gnu.org/software/gsl/gsl.html` bietet eine Vielzahl von Routinen in C für numerische Probleme aller Art. Enthalten sind auch eine Reihe sehr guter Zufallszahlengeneratoren und Routinen zum Testen von Zufallszahlengeneratoren. Die GNU Scientific Library ist zudem sehr gut dokumentiert.

Darüber hinaus gibt es eine Vielzahl weiterer Quellen. Eine kleine Zusammenfassung mit Verweisen auf andere Seiten gibt es an der Universität Karlsruhe `http://www.uni-karlsruhe.de/~RNG/`.

Echte Zufallszahlen, die nicht über einen Zufallszahlengenerator wie oben beschrieben generiert werden, sind im WWW unter random.org `http://www.random.org` zu bekommen.

An dieser Stelle sollte zudem deutlich gemacht werden, daß je nachdem, für welchen Zweck Zufallszahlen verwendet werden sollen, ganz unterschiedliche Ansprüche an Zufallszahlen gestellt werden. Für Simulationen benötigt man häufig eine sehr große Menge an Zufallszahlen, die zudem in den meisten Fällen unkorreliert sein sollten. Anders sieht die Situation z.B. in der Kryptographie aus, wo Zufallszahlen meist in geringer Menge benötigt werden, aber speziellen zusätzlichen Bedingungen genügen müssen. Auskunft hierzu bietet ein White Paper `http://www.cs.auckland.ac.nz/~pgut001/pubs/usenix98.pdf` zur Erzeugung solcher Zufallszahlen.

Copyright ©1999-2007 Andreas Mielke