10. Erzeugende Funktionen

Das Rechnen mit Wahrscheinlichkeitsverteilungen und die Lösung der Master-Gleichung (z.B. für chemische Prozesse) wird durch die "Methode der erzeugenden Funktionen" wesentlich erleichtert.

n: Teilchenzahl einer bestimmten Sorte

$P(n)$: Wahrscheinlichkeit dafür, n Teilchen einer Sorte in einem bestimmten Zustand vorzufinden.

z.B. Binomialverteilung: $P(n)=\dfrac{N!}{n!(N-n)!}p^n q^{N-n}$

oder Poissonverteilung: $P(n)=\dfrac{\lambda^n}{n!}e^{-\lambda}$, mit $\lambda=\bar{n}$

Die **erzeugende Funktion** einer Zufallsverteilung $P(n)$ ist folgendermaßen definiert

$$G(s)\equiv\overline{s^n}=\sum_{n=0}^{N}s^n P(n)$$

wobei s eine kontinuierlich veränderbare Variable und $\overline{s^n}$ den Erwartungswert von s^n darstellt.
(Verwandt mit der charakteristischen Funktion $C(\varphi)\equiv\overline{e^{in\varphi}}=\sum_n P(n)e^{in\varphi}$)

Offenbar gilt wegen der Normierung der Wahrscheinlichkeiten:

$$G(s)\big|_{s=1}=\sum_{n=0}^{N}s^n P(n)\big|_{s=1}=\sum_{n=0}^{N}P(n)=1$$

$$G(s)\big|_{s=1}=1$$

Die Kenntnis der erzeugenden Funktion erlaubt in einfacher Weise die Berechnung des Mittelwertes und der mittleren quadratischen Abweichung:

$$\left.\frac{dG}{ds}\right|_{s=1}=\sum_n n\,s^{n-1}P(n)\big|_{s=1}=\sum_n n\,P(n)\overset{\text{def.}}{=}\bar{n} \qquad \text{d.h.} \qquad \boxed{\left.\frac{dG}{ds}\right|_{s=1}=\bar{n}}$$

Zweite Ableitung:

$$\frac{d^2G}{ds^2}=\sum_n n(n-1)s^{n-2}P(n)$$

$$\left.\frac{d^2G}{ds^2}\right|_{s=1}=\sum_n n(n-1)P(n)=\sum_n n^2P(n)-\sum_n n\,P(n)=\overline{n^2}-\bar{n}^2 \qquad \text{d.h.}$$

$$\left.\frac{d^2G}{ds^2}\right|_{s=1} = \overline{n^2} - \overline{n}$$

Nach der Definition der Standardabweichung:

$$\sigma^2 \equiv \overline{n^2} - (\overline{n})^2 = \left.\frac{d^2G}{ds^2}\right|_{s=1} + \overline{n} - (\overline{n})^2$$

$$\boxed{\sigma^2 = \left[\frac{d^2G}{ds^2} + \frac{dG}{ds} - \left(\frac{dG}{ds}\right)^2\right]_{s=1}}$$

Mehrdimensionale Zufallsverteilungen erhält man z.B. bei der Betrachtung von mehreren Molekülsorten, d.h. $P = P(n_1, n_2, ..., n_m)$:

$$G(s_1, s_2, ..., s_m) = \sum_{n_1=0}^{N_1} \sum_{n_2=0}^{N_2} \ldots \sum_{n_m=0}^{N_m} s_1^{n_1} s_2^{n_2} \ldots s_m^{n_m} P(n_1, ..., n_m)$$

Beispiele:

1. Erzeugende Funktion der Binomialverteilung

$$P(n) = \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n q^{N-n} \qquad \text{mit} \quad p + q = 1$$

$$G(s) = \sum_{n=0}^{N} \frac{N!}{n!(N-n)!} s^n p^n q^{N-n} = (sp+q)^N$$

Es gilt: $G(s)_{s=1} = (p+q)^N = 1$

$$\left.\frac{dG}{ds}\right|_{s=1} = \left[N(sp+q)^{N-1} p\right]_{s=1} = Np$$

$$\left.\frac{d^2G}{ds^2}\right|_{s=1} = \left[N(N-1)(sp+q)^{N-2} p^2\right]_{s=1} = N(N-1)p^2$$

Nach dem obigen erhalten wir:

$$\sigma^2 = \left[\frac{d^2G}{ds^2} + \frac{dG}{ds} - \left(\frac{dG}{ds}\right)^2\right]_{s=1} = N(N-1)p^2 + Np - N^2p^2$$

$$= N^2 p^2 - Np^2 + Np - N^2 p^2 = Np(1-p) = Npq$$

$\sigma^2 = Npq$, wie gehabt.

2. Erzeugende Funktion der Poissonverteilung:

$$P(n) = \frac{\overline{n}^n}{n!} e^{-\overline{n}}$$

$$G(s) = \sum_{n=0}^{\infty} s^n P(n) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(s\overline{n})^n}{n!} e^{-\overline{n}} \quad = e^{-\overline{n}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(s\overline{n})^n}{n!} = e^{-\overline{n}} e^{s\overline{n}}$$

$$G(s) = e^{(s-1)\overline{n}}$$

Eigenschaften: $G(s)\big|_{s=1} = 1$, $\left.\frac{\partial G}{\partial s}\right|_{s=1} = e^{(s-1)\overline{n}}\,\overline{n}\big|_{s=1} = \overline{n}$

$$\sigma^2 = \overline{n^2} - (\overline{n})^2 = \left(\frac{d^2G}{ds^2} + \frac{dG}{ds} - \left(\frac{dG}{ds} \right)^2 \right)_{s=1} = e^{(s-1)\overline{n}} \Big((\overline{n})^2 + \overline{n} - (\overline{n})^2 \Big)_{s=1}$$

$\sigma^2 = \overline{n}$, wie gehabt

Oft kann man auch die "inverse Aufgabe" lösen:
Gegeben sei eine erzeugende Funktion $G(s)$ - wie sieht die zugehörige Verteilung $P(n)$ aus?

Aus der Entwicklung der erzeugenden Funktion in eine Taylor-Reihe um $s = 0$:

$$\sum_{n=0}^{N} s^n P(n) \equiv G(s) = G(0) + s \left.\frac{\partial G}{ds}\right|_{s=0} + \frac{1}{2} s^2 \left.\frac{d^2G}{ds^2}\right|_{s=0} \cdots = \sum_{n=0}^{N} \frac{s^n}{n!} \left.\frac{d^nG}{ds^n}\right|_{s=0}$$

mittels Koeffizientenvergleich erhalten wir:

$$\boxed{P(n) = \frac{1}{n!} \left.\frac{d^nG}{ds^n}\right|_{s=0}}$$

Beispiel:

$G(s) = (sp + q)^N$ gegeben.

$$P(0) = \frac{1}{0!} G(s)\Big|_{s=0} = q^N \qquad \hat{=} \left[\frac{N!}{n!(N-n)!} p^n q^{N-n} \right]_{n=0}$$

$$P(1) = \frac{1}{1!} \frac{dG}{ds}\Big|_{s=0} = N(sp+q)^{N-1} p\big|_{s=0} = Nq^{N-1} p \qquad \hat{=} \frac{N!}{1!(N-1)!} pq^{N-1}$$

$$P(2) = \frac{1}{2!} \frac{d^2G}{ds^2}\Big|_{s=0} = \frac{N(N-1)}{2} (sp+q)^{N-2} p^2\big|_{s=0} = \frac{N(N-1)}{2} q^{N-2} p^2 \qquad \hat{=} \frac{N!}{2!(N-2)!} pq^{N-1}$$

$$\left\{ \frac{N!}{2!(N-2)!} = \frac{N(N-1)}{2} \right\}$$

Analog zu der Charakteristischen Funktion, hat die erzeugende Funktion folgende nützliche Eigenschaften:

1. Nullpunktverschiebung und Multiplikation mit einer Konstanten:
Die Verteilung einer Zufallsvariablen n besitzt die erzeugende Funktion $G(s)$.
Dann besitzt die Verteilung der Zufallsvariablen $n' = a\,n + b$ die erz. Funktion $G'(s) = s^b G(s^a)$.
Das ist z.B. nützlich wenn man die erzeugende Funktion einer gegebenen Verteilung aus der der (in entsprechenden Tabellen zu findenden) normierter Verteilung ($\bar{n} = 0$, $\sigma = 1$) ermitteln möchte.

2. Addition unabhängiger Zufallsvariablen:
Seien n_1 und n_2 *unabhängige* Zufallsvariablen deren Verteilungen die erzeugenden Funktionen $G_1(s)$ und $G_2(s)$ besitzen.
Konstruiert man daraus die Zufallsvariable $n' = n_1 + n_2$ (mit zufällig ausgewählten n_1, n_2) dann besitzt deren Verteilung die erzeugende Funktion $G'(s) = G_1(s) \cdot G_2(s)$
Die Kenntnis der erzeugenden Funktion erlaubt dann z.B. die Berechnung der Momente der Verteilung, oder evtl. die Rekonstruktion der Verteilung selbst.
(Ein Beispiel für $n' = n_1 + n_2$ ist eine Variable, die sich aus der Summe zweier Messwerte ergibt. Diese können auch sehr unterschiedlichen Verteilungen gehorchen.)