

3.5.2 Mehrere Funktionen von einem Satz von Zufallszahlen

Wir betrachten jetzt den allgemeineren Fall, dass m Funktionen $g = (g_1, \dots, g_m)$ von den gleichen n Zufallszahlen (x_1, \dots, x_n) abhängen:

$$\vec{g}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} g_1(\vec{x}) \\ \vdots \\ g_m(\vec{x}) \end{pmatrix} \quad (3.54)$$

Ein häufig auftretendes Beispiel ist eine Koordinatentransformation der Zufallsvariablen: die transformierten Variablen sind im allgemeinen eine Funktion aller ursprünglichen Variablen.

Die Erwartungswerte der Funktionen g_j und deren Varianzen ergeben sich für jede Funktion einzeln. Neu kommt jetzt allerdings hinzu, dass die Funktionen untereinander korreliert sein können und damit nicht-verschwindende Kovarianzen haben.

Wir linearisieren wieder jede der Funktionen ($k = 1, \dots, m$):

$$g_k(\vec{x}) = g_k(\vec{\mu}) + \sum_{i=1}^n (x_i - \mu_i) \left. \frac{\partial g_k}{\partial x_i} \right|_{\vec{x}=\vec{\mu}} + \dots \quad (3.55)$$

Mit

$$S_{ki} = \left. \frac{\partial g_k}{\partial x_i} \right|_{\vec{x}=\vec{\mu}} \quad (3.56)$$

ergibt (3.55):

$$\begin{aligned} g_k(\vec{x}) &= g_k(\vec{\mu}) + \sum_{i=1}^n (x_i - \mu_i) S_{ki} \\ \text{oder} & \\ \vec{g}(\vec{x}) &= \vec{g}(\vec{\mu}) + S \vec{x} \end{aligned} \quad (3.57)$$

Dabei sind \vec{x} , $\vec{\mu}$ Spaltenvektoren und die Jacobische Funktionalmatrix S ist in Matrixschreibweise:

$$S = \begin{pmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_1} & \frac{\partial g_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial g_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial g_2}{\partial x_1} & \frac{\partial g_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial g_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial g_m}{\partial x_1} & \frac{\partial g_m}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial g_m}{\partial x_n} \end{pmatrix} \quad (3.58)$$

Erwartungswert: Die Erwartungswerte der Funktionen $\vec{g}(\vec{x})$ ergibt sich wie für eine einzelne Funktion (3.48):

$$E(\vec{g}(\vec{x})) = \vec{g}(\vec{\mu}) \quad (3.59)$$

Varianz:

$$\begin{aligned} V_{kl}(\vec{g}(\vec{x})) &= E((g_k(\vec{x}) - E(g_k(\vec{x}))(g_l(\vec{x}) - E(g_l(\vec{x})))) \\ &= \sum_i \sum_j \frac{\partial g_k}{\partial x_i} \frac{\partial g_l}{\partial x_j} \underbrace{E((x_i - \mu_i)(x_j - \mu_j))}_{=V_{ij}(\vec{x})} \\ &= \sum_i \sum_j \frac{\partial g_k}{\partial x_i} \frac{\partial g_l}{\partial x_j} V_{ij}(\vec{x}) = \sum_i \sum_j S_{ki} S_{lj} V_{ij}(\vec{x}) \\ \implies V(\vec{g}(\vec{x})) &= S \cdot V(\vec{x}) \cdot S^T \end{aligned} \quad (3.60)$$

Dabei sind in der letzten Zeile alle Größen Matrizen.

Um das obige Beispiel einer Variablentransformation aufzugreifen: Die Matrix S kann man beispielsweise so bestimmen, dass die Transformation $\vec{x} \rightarrow \vec{g}$ die Kovarianzmatrix $V(\vec{g})$ diagonal macht, die neuen Variablen g_i also nicht korreliert sind.

Beispiel: Fehlerfortpflanzung bei Koordinatenwechsel.

Auf einem Koordinatenmesstisch werden rechtwinklige Koordinaten (x, y) mit den Auflösungen

$$\begin{aligned}\sigma_x &= 1 \mu\text{m} \\ \sigma_y &= 3 \mu\text{m}\end{aligned}\quad (3.61)$$

gemessen. Da die Messungen der beiden Koordinaten unabhängig sein sollen, ist die Kovarianzmatrix diagonal:

$$V(x, y) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 9 \end{pmatrix}\quad (3.62)$$

Für die weitere Auswertung sollen die Messpunkte in Polarkoordinaten (r, ϕ) ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned}x &= r \cos \phi & \implies & r = \sqrt{x^2 + y^2} \\ y &= r \sin \phi & & \phi = \arctan \frac{y}{x}\end{aligned}\quad (3.63)$$

Wir wollen nun berechnen, wie sich der Fehler der x, y -Messungen auf r, ϕ fortpflanzt und bestimmen deshalb die Kovarianzmatrix für die Variablen r, ϕ . Die Funktionalmatrix für die Transformation ist:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial r}{\partial x} & \frac{\partial r}{\partial y} \\ \frac{\partial \phi}{\partial x} & \frac{\partial \phi}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{x}{r} & \frac{y}{r} \\ -\frac{y}{r^2} & \frac{x}{r^2} \end{pmatrix}\quad (3.64)$$

Damit transformiert sich die Kovarianzmatrix wie folgt:

$$V(r, \phi) = S \cdot V(x, y) \cdot S^T = \begin{pmatrix} \frac{1}{r^2}(x^2\sigma_x^2 + y^2\sigma_y^2) & \frac{xy}{r^3}(-\sigma_x^2 + \sigma_y^2) \\ \frac{xy}{r^3}(-\sigma_x^2 + \sigma_y^2) & \frac{1}{r^4}(y^2\sigma_x^2 + x^2\sigma_y^2) \end{pmatrix}\quad (3.65)$$

Ausgedrückt in Polarkoordinaten ergibt sich für die Kovarianzmatrix:

$$V(r, \phi) = \begin{pmatrix} \sigma_r^2 & \text{cov}(r, \phi) \\ \text{cov}(r, \phi) & \sigma_\phi^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos^2\phi \sigma_x^2 + \sin^2\phi \sigma_y^2 & \frac{\sin\phi \cos\phi}{r}(-\sigma_x^2 + \sigma_y^2) \\ \frac{\sin\phi \cos\phi}{r}(-\sigma_x^2 + \sigma_y^2) & \frac{1}{r^2}(\sin^2\phi \sigma_x^2 + \cos^2\phi \sigma_y^2) \end{pmatrix}\quad (3.66)$$

Man sieht, dass die Kovarianzmatrix auch in Polarkoordinaten diagonal ist, wenn die x - und y -Messgenauigkeit gleich, also $\sigma_x = \sigma_y$, ist. Die Kovarianzen verschwinden auch für die Spezialfälle $\phi = 0^\circ, 90^\circ$, das heisst für Punkte auf der x - bzw. y -Achse:

$$V(r, \phi = 0^\circ) = \begin{pmatrix} \sigma_r^2 = \sigma_x^2 & \text{cov}(r, \phi) = 0 \\ \text{cov}(r, \phi) = 0 & \sigma_\phi^2 = \sigma_y^2 \end{pmatrix}\quad (3.67)$$

$$V(r, \phi = 90^\circ) = \begin{pmatrix} \sigma_r^2 = \sigma_y^2 & \text{cov}(r, \phi) = 0 \\ \text{cov}(r, \phi) = 0 & \sigma_\phi^2 = \sigma_x^2 \end{pmatrix}\quad (3.68)$$

Man kann jetzt auch wieder umgekehrt die Varianzen der Zufallsvariablen x und y berechnen, wenn die Kovarianzmatrix in Polarkoordinaten vorliegt. Will man zum Beispiel die Varianz von x am Punkt $(1, 1)$, also $(r = \sqrt{2}, \phi = 45^\circ)$, berechnet man zunächst

$$\sigma_r^2 = 5, \quad \sigma_\phi = \frac{5}{2}, \quad \text{cov}(r, \phi) = \frac{4}{\sqrt{2}}\quad (3.69)$$

Damit ergibt sich beispielsweise für σ_x^2 (siehe (3.53)):

$$\begin{aligned}\sigma_x^2 &= \left(\frac{\partial x}{\partial r}\right)^2 \sigma_r^2 + \left(\frac{\partial x}{\partial \phi}\right)^2 \sigma_\phi^2 + 2 \frac{\partial x}{\partial r} \frac{\partial x}{\partial \phi} \operatorname{cov}(r, \phi) \\ &= \cos^2 \phi \sigma_r^2 + r^2 \sin^2 \phi \sigma_\phi^2 - 2 r \cos^2 \phi \sin^2 \phi \operatorname{cov}(r, \phi) \\ &= \frac{5}{2} + \frac{5}{2} - \frac{8}{2} = 1 \quad (= \sigma_x^2)\end{aligned}\tag{3.70}$$

Es ergibt sich also korrekt wieder der Wert $\sigma_x^2 = 1$, der hineingesteckt wurde. Hier sieht man, dass man im allgemeinen die Kovarianzen nicht vernachlässigen kann: ohne Berücksichtigung der Kovarianz hätte sich $\sigma_x^2 = 5$ ergeben.

3.6 Transformationen von Zufallsvariablen

In dem obigen Beispiel hatten wir eine Transformation der Zufallsvariablen x, y auf r, ϕ und die daraus folgende Transformation der Varianzen betrachtet. Wir fragen nun, wie sich die Wahrscheinlichkeitsdichten transformieren, wenn man zu anderen Variablen übergeht. Variablentransformationen macht man unter anderem auch um einfachere Wahrscheinlichkeitsdichten zu erhalten, zum Beispiel Gleichverteilungen für eine Simulation (siehe Abschnitt 1.3).

Wir betrachten zunächst den Fall, dass eine einzelne Variable in eine andere transformiert wird:

$$x \rightarrow z, \quad f(x) \rightarrow g(z)\tag{3.71}$$

In einem Intervall dx , das in dz übergeht, müssen die Wahrscheinlichkeiten vor und nach der Transformation gleich sein:

$$dp = f(x) dx = g(z) dz \implies g(z) = f(x(z)) \left| \frac{dx}{dz} \right|\tag{3.72}$$

Im rechten Ausdruck wird der Betrag der Ableitung genommen, damit die Wahrscheinlichkeit positiv bleibt.

Für n Variable mit der Transformation

$$(x_1, \dots, x_n) \rightarrow (z_1, \dots, z_n), \quad f(x_1, \dots, x_n) \rightarrow g(z_1, \dots, z_n)\tag{3.73}$$

ergibt sich die Bedingung:

$$f(\vec{x}) dx_1 \dots dx_n = g(\vec{z}) dz_1 \dots dz_n \implies g(\vec{z}) = f(\vec{x}(\vec{z})) \left| \frac{\partial(x_1, \dots, x_n)}{\partial(z_1, \dots, z_n)} \right|\tag{3.74}$$

Der rechte Ausdruck ist die Funktional- oder Jacobi-Determinante:

$$\left| \frac{\partial(x_1, \dots, x_n)}{\partial(z_1, \dots, z_n)} \right| = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial z_1} & \frac{\partial x_1}{\partial z_2} & \dots & \frac{\partial x_1}{\partial z_n} \\ \frac{\partial x_2}{\partial z_1} & \frac{\partial x_2}{\partial z_2} & \dots & \frac{\partial x_2}{\partial z_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial x_n}{\partial z_1} & \frac{\partial x_n}{\partial z_2} & \dots & \frac{\partial x_n}{\partial z_n} \end{pmatrix}\tag{3.75}$$

Beispiele:

1. In der Physik kommt häufig die Transformation auf krummlinige Koordinaten vor. Für den Übergang von kartesischen auf Kugelkoordinaten, $(x, y, z) \rightarrow (r, \theta, \phi)$, ist die Jacobi-Determinante zum Beispiel $r^2 \sin \theta$ ($dx dy dz \rightarrow r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$).
2. Ein schnelles geladenes Teilchen emittiert sogenannte Bremsstrahlung, wenn eine Kraft auf das Teilchen wirkt, wie beim Durchgang durch Materie oder in elementaren Wechselwirkungen. Die Wahrscheinlichkeitsdichte für die Abstrahlungsrichtung θ relativ zur Teilchenrichtung hat etwa folgende Form:

$$w(\theta) = w_0 \frac{\sin \theta}{1 - \beta \cos \theta} \quad (3.76)$$

Dabei ist $\beta = v/c$ die Teilchengeschwindigkeit in Einheiten der Lichtgeschwindigkeit. Für Elektronen ist β schon bei relativ niedrigen Energien sehr nahe 1, zum Beispiel für $E = 1 \text{ GeV}$ ist $1 - \beta = 1.3 \cdot 10^{-7}$. In diesem Fall ‘hochrelativistischer’ Teilchen ist der Ausdruck $1/(1 - \beta \cos \theta)$ bei $\theta = 0$ nahezu divergent. Dieses Verhalten wird auch nicht durch den $\sin \theta$ -Term in (3.76) gedämpft, weil das Winkelement $\sin \theta d\theta = d \cos \theta$ bei $\theta = 0$ endlich bleibt.

Eine Simulation der Abstrahlung wird also zum Beispiel mit der Hit&Miss-Methode sehr ineffektiv. Man wird also eine Transformation suchen, die das Polverhalten dämpft. Tatsächlich kann man (3.76) auf eine Gleichverteilung transformieren. Entsprechend Abschnitt 1.3 machen wir den Ansatz (u ist eine zwischen 0 und 1 gleichverteilte Zufallsvariable):

$$w(\theta) d\theta = du \implies u = w_0 \int_0^\theta w(\vartheta) d\vartheta = W(\theta) = \frac{w_0}{\beta} \ln \frac{1 + \beta \cos \theta}{1 - \beta}, \quad (3.77)$$

wobei $W(\theta)$ die Verteilungsfunktion ist. Der Normierungsfaktor w_0 ergibt sich aus der Integration von $w(\theta)$ über den gesamten Wertebereich:

$$\frac{1}{w_0} = \int_0^\pi w(\vartheta) d\vartheta = W(\pi) = \frac{1}{\beta} \ln \frac{1 + \beta}{1 - \beta}, \quad (3.78)$$

Die Transformation $\theta \rightarrow u$ ergibt sich aus der Inversion von (3.77):

$$\theta = \arccos \left[\frac{1}{\beta} \left((1 - \beta) e^{\frac{\beta u}{w_0}} - 1 \right) \right] \quad (3.79)$$

Nehmen wir weiterhin an, dass die azimuthale Winkelverteilung der Strahlung durch Polarisierungseffekte (die Elektronenspins könnten zum Beispiel transversal zu ihrer Flugrichtung polarisiert sein) sinusförmig moduliert wird:

$$w'(\theta, \phi) = w'_0 \frac{\sin \theta \sin \phi}{1 - \beta \cos \theta} \quad (3.80)$$

Eine entsprechende Transformation von ϕ im Intervall 0 bis π auf eine zwischen 0 und 1 gleichverteilte Variable v erhält man wie in (3.77):

$$\alpha \sin \phi d\phi = dv \implies v = \frac{\int_0^\phi \sin \varphi d\varphi}{\int_0^\pi \sin \varphi d\varphi} = \frac{\cos \phi + 1}{2} \quad (3.81)$$

Dabei ist $\alpha = 1/2$ die Normierungskonstante und es gilt $w'_0 = w_0 \alpha$. Die gesamte Variablentransformation ist damit:

$$\begin{aligned}\theta &= \arccos \left[\frac{1}{\beta} \left((1 - \beta) e^{\frac{\beta v}{w_0}} - 1 \right) \right] \\ \phi &= \arccos(2v - 1)\end{aligned}\tag{3.82}$$

Daraus ergibt sich die Funktionaldeterminante:

$$\left| \frac{\partial(\theta, \phi)}{\partial(u, v)} \right| = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial\theta}{\partial u} & \frac{\partial\theta}{\partial v} \\ \frac{\partial\phi}{\partial u} & \frac{\partial\phi}{\partial v} \end{pmatrix} = \frac{1}{w'_0} \frac{1 - \beta \cos \theta}{\sin \theta \sin \phi} = \frac{1}{w'(\theta, \phi)}\tag{3.83}$$

Es ist natürlich kein Zufall, dass die Jacobi-Determinante gerade das Reziproke der ursprünglichen Dichteverteilung ergibt, weil ja gerade auf eine Gleichverteilung transformiert werden sollte.

