Равномерное распределение точек на гиперповерхностях: Моделирование случайных равновероятных ориентировок твердого тела с помощью равномерного распределения точек на поверхности трехмерной гиперсферы в четырехмерном пространстве

Н.П. Копытов, Е.А. Митюшов

Уральский федеральный университет имени Первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

e-mail: nikitako@mail.ru, mityushov-e@mail.ru

Аннотация

В статье описывается универсальный метод для моделирования равномерных распределений точек на гладких регулярных поверхностях в евклидовых пространствах различной размерности. Представлена интерпретация множества возможных значений параметров Родрига-Гамильтона, используемых для описания ориентировок твердого тела, как множества точек трехмерной гиперсферы в четырехмерном евклидовом пространстве. Установлена связь между случайными равновероятными ориентировками твердого тела и равномерным распределением точек на поверхности трехмерной гиперсферы в четырехмерном евклидовом пространстве.

Ключевые слова: равномерное распределение точек на гиперповерхностях, параметры Родрига-Гамильтона, трехмерная гиперсфера, случайные равновероятные ориентировки, случайные точки на трехмерной гиперсфере.

Введение

Несмотря на простоту постановки, задача о равномерном распределении точек на поверхностях является непростой в решении. Рассмотрение конкретных типов поверхностей в совокупности с различными подходами могут привести к появлению частного для каждого отдельно взятого случая решения. Например, хорошо известны методы для равномерного распределения точек на плоскости и поверхности сферы [1,2,5]. Менее известны методы для равномерного распределения точек на поверхности эллипсоида [5], и поверхностях, задаваемых уравнениями явного вида [6,7].

Помимо работ, описывающих методы для равномерного распределения точек на поверхностях в трехмерном пространстве, ряд научных исследований посвящен методам для равномерного распределения точек на поверхности гиперсферы [2,4,5]. Также

известны методы для равномерного распределения точек на поверхности гиперэллипсоида [5]. Среди исследователей, работы которых наиболее часто цитируются при упоминании проблемы равномерного распределения точек на поверхности гиперсферы, стоит выделить таких, как G. Marsaglia [1] и M.E. Muller [2]. Данной проблеме также посвящена также отдельная страница на интернет-ресурсе MathWorld (E.W. Weisstein, «Hypersphere Point Picking», [4]).

В отмеченных выше работах представлены методы, которые являются либо частными для конкретных поверхностей, либо обобщены для узкого класса поверхностей. Однако, учитывая, что проблема равномерного распределения точек на различных поверхностях является важной для многих прикладных и фундаментальных исследований, и в особенности для группы методов Монте-Карло, возникает необходимость поиска более универсального метода для равномерного распределения точек на поверхностях и гиперповерхностях.

В данной статье кратко описывается разработанный авторами метод для моделирования равномерных распределений точек на гладких регулярных поверхностях в евклидовых пространствах различной размерности. На основе предложенного метода обосновывается возможность использования равномерного распределения точек на трехмерной гиперсфере в четырехмерном евклидовом пространстве для задания равновероятных ориентировок твердого тела.

1. Моделирование равномерных распределений точек на гладких регулярных поверхностях в евклидовых пространствах различной размерности

В работах [8-12] авторами был представлен подход для равномерного распределения точек на гладких регулярных поверхностях в трехмерном и многомерном евклидовом пространствах. Предложенный подход является двух шаговым и включает:

1. Нахождение функции плотности совместного распределения значений параметров поверхности, задающей равномерное распределение точек на этой поверхности;
2. Генерирование значений параметров с использованием полученной функции плотности их совместного распределения и последующее вычисление координат точек.

Рассмотрение проблемы равномерного распределение точек на гладких регулярных поверхностях требует введения ряда строгих математических определений.

Определение 1. *Распределение точек на гладкой регулярной поверхности называется равномерным, если при случайном бросании точки на эту поверхность вероятность ее попадания в любую область этой поверхности пропорциональна площади этой области.*

Определение 2. *Геометрическая вероятность попадания точки в элемент гладкой регулярной поверхности при случайном бросании точки на эту поверхность определяется равенством*

$$P(X \subset dS) = \frac{dS}{S}.$$

Здесь X *– точка поверхности, положение которой определяется случайным вектором,* dS *– площадь элемента поверхности,* S *– площадь всей поверхности.*

Определение 3. *Плотность вероятности* $f(u_1, u_2, ..., u_m)$ *совместного распределения параметров, задающих положение точки, случайно брошенной на гладкую регулярную поверхность, определяется равенством:*

$$P(X \subset dS) = f(u_1, u_2, ..., u_m) du_1 du_2 ... du_m.$$

Пусть функции $x_1(u_1, u_2, ..., u_m)$, $x_2(u_1, u_2, ..., u_m)$, …, $x_n(u_1, u_2, ..., u_m)$, где $(u_1, u_2, ..., u_m) \in D$, определяют гладкую регулярную m-мерную поверхность в n-мерном евклидовом пространстве. Найдем функцию $f(u_1, u_2, ..., u_m)$ плотности совместного распределения параметров $u_1, u_2, ..., u_m$, соответствующую равномерному распределению точек на рассматриваемой поверхности.

Из определения 2 геометрическая вероятность попадания произвольной точки X на элемент поверхности dS равна

$$P(X \subset dS) = \frac{dS}{S}.$$

Для гладких регулярных поверхностей в многомерном евклидовом пространстве справедливы следующие выражения

$$dS = \sqrt{g} du_1 du_2 ... du_m, \; S = \iiint_D ... \int \sqrt{g} du_1 du_2 ... du_m.$$

Здесь $g = \det(g_{ij})$ - определитель матрицы метрического тензора на поверхности. Матрица метрического тензора на поверхности имеет вид

$$\left(g_{ij}\right) = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & \cdots & g_{1m} \\ g_{21} & g_{22} & \cdots & g_{2m} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ g_{m1} & g_{m2} & \cdots & g_{mm} \end{pmatrix},$$

где $i, j = 1, 2, ..., m$, $g_{ij} = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial x_k}{\partial u_i} \frac{\partial x_k}{\partial u_j}$.

Следовательно,

$$P(X \subset dS) = \frac{\sqrt{g}du_1du_2...du_m}{\iiint\limits_D ...\int \sqrt{g}du_1du_2...du_m}.$$

С учетом определения 3 плотность вероятности определяется выражением

$$f(u_1,u_2,...,u_m) = \frac{\sqrt{g}}{\iiint\limits_D ...\int \sqrt{g}du_1du_2...du_m}.$$

Таким образом, плотность распределения параметров $u_1,u_2,...,u_m$, задающая равномерное распределение точек на поверхности, определяется функцией

$$f(u_1,u_2,...,u_m) = \begin{cases} \dfrac{\sqrt{g}}{\iiint\limits_D ...\int \sqrt{g}du_1du_2...du_m}, & (u_1,u_2,...,u_m) \in D; \\ 0, & (u_1,u_2,...,u_m) \notin D. \end{cases} \quad (1)$$

Генерируя значения параметров $u_1,u_2,...,u_m$ по функции $f(u_1,u_2,...,u_m)$ плотности их совместного распределения с помощью обобщенного метода Неймана можно равномерно распределить точки на заданной поверхности.

Когда размерность поверхности $m = 2$, размерность пространства $n = 3$, что соответствует поверхности в трехмерном евклидовом пространстве R^3, матрица метрического тензора принимает вид

$$\left(g_{ij}\right) = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{pmatrix}.$$

Функция $f(u_1,u_2,...,u_m) = \dfrac{\sqrt{g}}{\iiint\limits_D ...\int \sqrt{g}du_1du_2...du_m}$ может быть записана в виде

$$f(u_1,u_2) = \frac{\sqrt{g_{11}g_{22} - g_{12}{}^2}}{\iint\limits_D \sqrt{g_{11}g_{22} - g_{12}{}^2}du_1du_2}.$$

Принимая во внимание, что $g_{11} = E$, $g_{12} = g_{21} = F$, $g_{22} = G$, где E, F, G - коэффициенты первой квадратичной формы поверхности, функция плотности для поверхностей в трехмерном евклидовом пространстве, задаваемых параметрическими уравнениями $x = x(u,v)$, $y = y(u,v)$, $z = z(u,v)$ находится равенством:

$$f(u,v) = \frac{\sqrt{EG - F^2}}{\iint\limits_D \sqrt{EG - F^2}dudv}.$$

На рисунках 1 и 2 представлены равномерные распределения точек на поверхности тора и геликоида в трехмерном евклидовом пространстве, полученные с использованием предложенного выше метода.

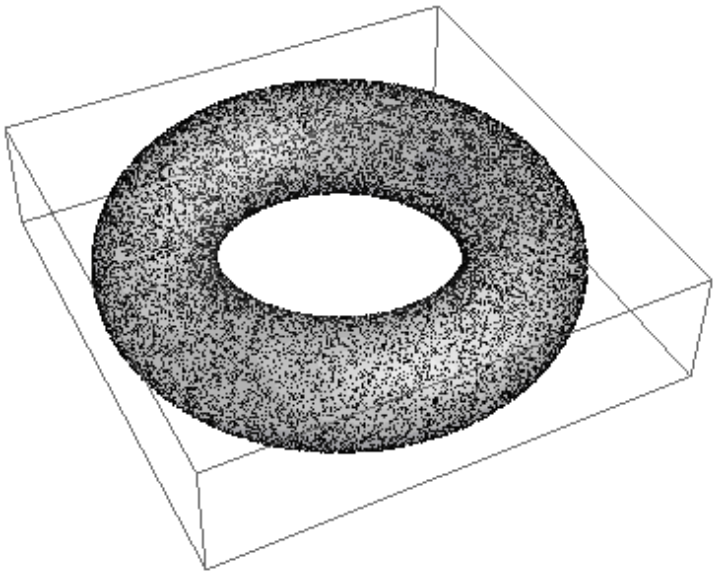

Рис. 1. Равномерное распределение точек на поверхности тора,

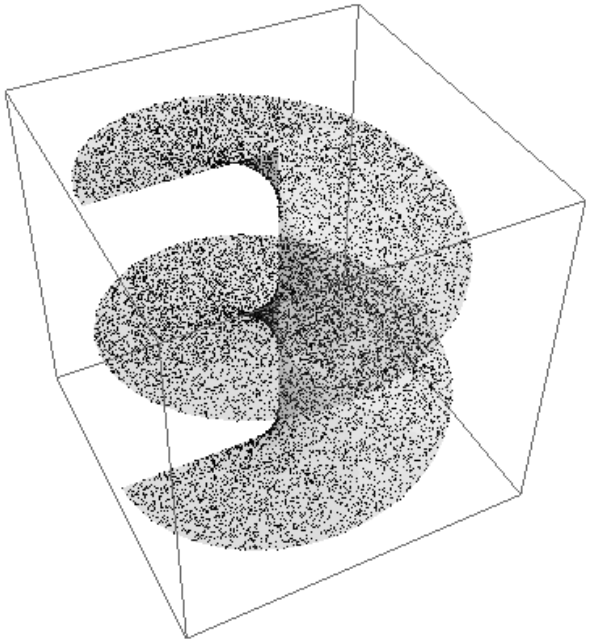

Рис. 2. Равномерное распределение точек на поверхности геликоида,

Предложенный метод может рассматриваться как универсальный для моделирования равномерных распределений точек на гладких регулярных поверхностях различных типов. Учитывая существующий в мировой научно-исследовательской среде интерес к проблеме равномерного распределения точек на поверхностях, подтверждаемый различными работами в данной сфере (см. список литературы и ссылки в них), важно отметить, что предложенный метод может быть полезен наряду с уже открытыми методами, которые разработаны либо для отдельных конкретных поверхностей, либо только для определенного типа поверхностей.

2. Параметры Родрига-Гамильтона и моделирование равновероятных ориентировок твердого тела с помощью равномерного распределения точек на поверхности трехмерной гиперсферы в четырехмерном евклидовом пространстве

Известно, что при рассмотрении вращения твердого тела могут быть использованы параметры Родрига-Гамильтона. Связь между параметрами Родрига-Гамильтона и углами Эйлера задается уравнениями:

$$x_0 = \cos\frac{\vartheta}{2}\cos\frac{\psi+\varphi}{2},\ x_1 = \sin\frac{\vartheta}{2}\cos\frac{\psi-\varphi}{2},\ x_2 = \sin\frac{\vartheta}{2}\sin\frac{\psi-\varphi}{2},\ x_3 = \cos\frac{\vartheta}{2}\sin\frac{\psi+\varphi}{2}, \qquad (2)$$

где $0 \le \vartheta \le \pi,\ 0 \le \psi \le 2\pi,\ 0 \le \varphi \le 2\pi$.

Параметры Родрига-Гамильтона удовлетворяют условию нормировки

$$x_0^2 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1. \qquad (3)$$

Соотношение (3) тождественно уравнению единичной трехмерной гиперсферы в четырехмерном евклидовом пространстве. Таким образом, множество возможных значений параметров Родрига-Гамильтона может рассматриваться как множество точек единичной трехмерной гиперсферы в четырехмерном евклидовом пространстве, а уравнения (2) связи между параметрами Родрига-Гамильтона и углами Эйлера могут быть рассмотрены как параметрические уравнения данной единичной гиперсферы.

Используя формулу (1) и уравнения (2) связи между параметрами Родрига-Гамильтона и углами Эйлера в качестве параметризации единичной трехмерной гиперсферы в четырехмерном евклидовом пространстве можно найти функцию плотности совместного распределения значений параметров (в данном случае углов Эйлера), соответствующую равномерному распределению точек на поверхности гиперсферы.

Результаты вычислений дают следующую функцию:

$$f(\psi,\vartheta,\varphi) = \frac{\sin\vartheta}{8\pi^2}. \qquad (4)$$

Функция (4) совпадает с известной функцией плотности совместного распределения углов Эйлера, используемой при описании множества равновероятных ориентировок твердого тела, когда в качестве параметров, задающих ориентировки тела, используется система углов Эйлера. Следовательно, **множество равномерно распределенных точек на поверхности единичной трехмерной гиперсферы в четырехмерном евклидовом пространстве дает множество значений параметров Родрига-Гамильнона, соответствующих множеству равновероятных ориентировок твердого тела**.

Задание равномерных и неравномерных распределений точек на гиперсфере в четырехмерном пространстве может быть использовано при решении различных задач

механики твердого тела и некоторых задач физики конденсированного состояния и материаловедения. Так, применительно к количественному текстурному анализу поликристаллических материалов может быть сформулировано утверждение: **равномерное распределение точек на поверхности трехмерной гиперсферы в четырехмерном пространстве и использование связи между параметрами Родрига-Гамильтона и углами Эйлера дает распределение кристаллографических осей соответствующее нетекстурированному поликристаллическому материалу**.

Заключение

Представленные в работе результаты в части равномерных распределений точек на поверхностях могут оказаться полезными для различных научных исследований, в которых используются методы статистического моделирования.

Установленная связь между равномерным распределением точек на поверхности трехмерной гиперсферы в черыпехмерном евклидовом пространстве и равновероятными ориентировками тела может быть полезна в различных прикладных областях, таких как, например, количественный текстурный анализ поликристаллических материалов.

Помимо равномерных распределений точек на различных поверхностях и гиперповерхностях несомненный научный интерес имеет рассмотрение, исследование и применение неравномерного распределения точек на различных поверхностях и гиперповерхностях.

Список литературы

[1] Marsaglia, G. Choosing a Point from the Surface of a Sphere // Ann. Math. Stat. – 1972. – V.43. – P. 645-646.

[2] Muller M. E. A Note on a Method for Generating Points Uniformly on N-Dimensional Spheres // Comm. Assoc. Comput. Mach. 2 – 1959. – P. 19-20.

[3] Weisstein E. W. Sphere Point Picking // From MathWorld--A Wolfram Web Resource. URL: http://mathworld.wolfram.com/SpherePointPicking.html (request data: 22.09.2013)

[4] Weisstein E. W. Hypersphere Point Picking // From MathWorld--A Wolfram Web Resource. URL: http://mathworld.wolfram.com/HyperspherePointPicking.html (request data: 22.09.2013)

[5] Rubinstein R.Y., Kroese D.P. Simulation and the Monte Carlo methods. Second Edition. – Wiley-Intersciens, 2007. – 345 p.

[6] Melfi G., Schoier G. Simulation of random distributions on surfaces // Societa Italiana di Statistica (SIS). Atti della XLII Riunione Scientifica. – Bari, 2004. – P. 173-176.

[7] Sandro P. Simulation de points aleatoires independants et non-independants sur surfaces non planes // Universit ée de Neuchatel – Diplome postgrade en statistique. Travial de diplome. URL: http://gibonet.ch/pub/travail.pdf (request data: 22.09.2013)

[8] Kopytov N.P., Mityushov E.A. The method for uniform distribution of points on surfaces in multi-dimensional Euclidean space, preprint in www.intellectualarchive.com. http://www.intellectualarchive.com/?link=item&id=1170

[9] Kopytov N.P., Mityushov E.A. Universal Algorithm Of Uniform Distribution Of Points On Arbitrary Analitic Surfaces In Three-dimensional Space, preprint in www.intellectualarchive.com. http://www.intellectualarchive.com/?link=item&id=473

[10] Копытов Н.П., Митюшов Е.А. Математическая модель армирования оболочек из волокнистых композиционных материалов и проблема равномерного распределения точек на поверхностях // Вестник ПГТУ. Механика. – 2010. – № 4. – С. 55-66.

[11] Копытов Н.П., Митюшов Е.А. Равномерное распределение точек на поверхностях для создания структур композитных оболочек с трансверсально-изотропными свойствами // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. – 2011. – № 4 (5) – С. 2263-2264.

[12] Копытов Н.П., Митюшов Е.А. Универсальный алгоритм равномерного распределения точек на произвольных аналитических поверхностях в трехмерном пространстве // Фундаментальные исследования. – 2013. – № 4, часть 3. – С. 618-622.