Вычислительные технологии, 2020, том 25, № 6, с. 62–84. © ФИЦ ИВТ, 2020 ISSN 1560-7534
Computational Technologies, 2020, vol. 25, no. 6, pp. 62–84. © FRC ICT, 2020 eISSN 2313-691X

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

DOI:10.25743/ICT.2020.25.6.004

Вычислимые моделируемые преобразования декартовых координат для случайных векторов

А. Р. Абдразакова[1], А. В. Войтишек[1,2,*]

[1]Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, Россия

[2]Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск, Россия

[*]Контактный автор: Войтишек Антон Вацлавович, e-mail: vav@osmf.sscc.ru

Поступила 13 июля 2020 г., доработана 12 октября 2020 г., принята в печать 19 октября 2020 г.

Рассмотрены специальные преобразования декартовых координат, позволяющие строить эффективные (экономичные) алгоритмы численного моделирования многомерных случайных величин. В качестве иллюстративных и практически значимых примеров таких преобразований рассмотрены переходы к полярным, сферическим, параболическим и цилиндрическим координатам.

Ключевые слова: численное моделирование многомерных распределений, преобразования случайных векторов, вычислимое моделируемое преобразование декартовых координат.

Цитирование: Абдразакова А.Р., Войтишек А.В. Вычислимые моделируемые преобразования декартовых координат для случайных векторов. Вычислительные технологии. 2020; 25(6):62–84.DOI:10.25743/ICT.2020.25.6.004.

1. Стандартный алгоритм численного моделирования случайного вектора. Элементарные плотности распределения

С развитием вычислительной техники возрастает интерес к численным алгоритмам решения прикладных задач, причем особую важность приобретают вычислительные схемы, реализуемые на современной многопроцессорной технике. С этой точки зрения весьма перспективны алгоритмы численного статистического моделирования (или методы Монте-Карло) [1].

Основным элементом алгоритмов метода Монте-Карло является численное моделирование (реализация выборочных значений на компьютере) случайных величин и векторов (случайных точек, многомерных случайных величин). В силу относительно медленной сходимости алгоритмов метода Монте-Карло особое внимание обращается на эффективность (экономичность) этого моделирования.

Рассмотрим стандартный алгоритм моделирования случайных векторов (см., например, раздел 1.5.1 книги [1]).

Известно, что плотность $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) = f_{\boldsymbol{\xi}}(x^{(1)}, \ldots, x^{(d)})$ распределения d-мерного случайного вектора $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(d)}, \ldots, \xi^{(d)})$ может быть $d!$ способами разложена в произведение условных плотностей:

$$f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) = f_{\xi^{(i_1)}}\left(x^{(i_1)}\right) f_{\xi^{(i_2)}}\left(x^{(i_2)}|x^{(i_1)}\right) \times \cdots \times f_{\xi^{(i_d)}}\left(x^{(i_d)}|x^{(i_1)}, x^{(i_2)}, \ldots, x^{(i_{d-1})}\right), \tag{1.1}$$

где $(i_1,\ldots,i_d)$ — некоторая перестановка номеров $(1,\ldots,d)$ (таких перестановок как раз $d!$ штук),

$$f_{\xi^{(i_1)}}\left(x^{(i_1)}\right)=\int\cdots\int f_{\boldsymbol{\xi}}\left(x^{(1)},\ldots,x^{(d)}\right)dx^{(i_2)}\ldots dx^{(i_d)},$$
$$f_{\xi^{(i_2)}}\left(x^{(i_2)}|x^{(i_1)}\right)=f_{\xi^{(i_2)}}\left(x^{(i_2)}|\xi^{(i_1)}=x^{(i_1)}\right)=\frac{\int\cdots\int f_{\boldsymbol{\xi}}\left(x^{(1)},\ldots,x^{(d)}\right)dx^{(i_3)}\ldots dx^{(i_d)}}{f_{\xi^{(i_1)}}\left(x^{(i_1)}\right)},$$
$$f_{\xi^{(i_3)}}\left(x^{(i_3)}|x^{(i_1)},x^{(i_2)}\right)=\frac{\int\cdots\int f_{\boldsymbol{\xi}}\left(x^{(1)},\ldots,x^{(d)}\right)dx^{(i_4)}\ldots dx^{(i_d)}}{f_{\xi^{(i_1)}}\left(x^{(i_1)}\right)f_{\xi^{(i_2)}}\left(x^{(i_2)}|x^{(i_1)}\right)},$$
$$\ldots$$
$$f_{\xi^{(i_{d-1})}}\left(x^{(i_{d-1})}|x^{(i_1)},\ldots,x^{(i_{d-2})}\right)=\frac{\int f_{\boldsymbol{\xi}}\left(x^{(1)},\ldots,x^{(d)}\right)dx^{(i_d)}}{f_{\xi^{(i_1)}}\left(x^{(i_1)}\right)\times\cdots\times f_{\xi^{(i_{d-2})}}\left(x^{(i_{d-2})}|x^{(i_1)},\ldots,x^{(i_{d-3})}\right)},$$
$$f_{\xi^{(i_d)}}\left(x^{(i_d)}|x^{(i_1)},\ldots,x^{(i_{d-1})}\right)=\frac{f_{\boldsymbol{\xi}}\left(x^{(1)},\ldots,x^{(d)}\right)}{f_{\xi^{(i_1)}}\left(x^{(i_1)}\right)\times\cdots\times f_{\xi^{(i_{d-1})}}\left(x^{(i_{d-1})}|x^{(i_1)},\ldots,x^{(i_{d-2})}\right)}.$$

Каждому разложению (1.1) соответствует алгоритм моделирования случайного вектора $\boldsymbol{\xi}=(\xi^{(1)},\ldots,\xi^{(d)})$.

Алгоритм 1 (см., например, раздел 1.5.2 книги [1]).

1. Численно моделируем выборочное значение $\xi_0^{(i_1)}$ случайной компоненты $\xi^{(i_1)}$ вектора $\boldsymbol{\xi}$ согласно плотности $f_{\xi^{(i_1)}}(u)$.
2. Моделируем выборочное значение $\xi_0^{(i_2)}$ случайной компоненты $\xi^{(i_2)}$ согласно плотности $f_{\xi^{(i_2)}}\left(u|\xi_0^{(i_1)}\right)$.
3. Моделируем выборочное значение $\xi_0^{(i_3)}$ случайной компоненты $\xi^{(i_3)}$ согласно плотности $f_{\xi^{(i_3)}}\left(u|\xi_0^{(i_1)},\xi_0^{(i_2)}\right)$.

...

d. Моделируем выборочное значение $\xi_0^{(i_d)}$ случайной компоненты $\xi^{(i_d)}$ согласно плотности $f_{\xi^{(i_d)}}\left(u|\xi_0^{(i_1)},\ldots,\xi_0^{(i_{d-1})}\right)$.

Заметим, что на каждом шаге алгоритма 1 моделируется одномерная случайная величина ξ, распределенная в некотором интервале (a,b) согласно заданной плотности $f_\xi(u)$, $u\in(a,b)$.

Определение 1 (см. раздел 1.4.1 книги [1]). Плотность распределения $f_\xi(u)$, $u\in(a,b)$ называется элементарной, если для нее существует относительно простая (экономичная для компьютерных вычислений) формула метода обратной функции распределения. Это означает, что при решении уравнения

$$\int_\alpha^{\xi_0} f_\xi(u)du=\alpha_0,\quad \alpha_0\in U(0,1),\tag{1.2}$$

относительно верхнего предела интеграла в левой части удается получить выборочное значение ξ_0 в виде относительно простой композиции элементарных функций.

В формуле (1.2) (и далее) буквой “α” с нижним индексом (в данном случае α_0) обозначаются выборочные значения стандартной случайной величины $\alpha\in U(0,1)$, равномерно распределенной в интервале $(0,1)$ (другое название для $\{\alpha_i\}$ — стандартные случайные числа; см. раздел 1.1 книги [1]). Такие числа получаются на компьютере с помощью специальных генераторов (датчиков), представляющих собой подпрограммы, имеющие в языках программирования названия $RAND$ или $RANDOM$.

В качестве примера элементарной плотности приведем плотность степенного распределения $f_\xi(u) = (\lambda+1)u^\lambda$, $0 < u < 1$, $\lambda > 0$, для которой из уравнения (1.2) получаем хорошо известную (см., например, раздел 1.4.1 книги [1]) моделирующую формулу $\xi_0 = \alpha_0^{1/(\lambda+1)}$.

В качестве примера плотности, которая не является элементарной, можно привести плотность широко применяемого стандартного нормального (гауссовского) распределения

$$f_\xi(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-u^2/2}, \quad -\infty < u < +\infty; \tag{1.3}$$

здесь интеграл в левой части уравнения (1.2) не берется аналитически (в элементарных функциях). К слову, для распределения (1.3) хорошо известен эффективный специальный алгоритм численного моделирования — формулы Бокса — Мюллера — см., в частности, [1, 2], а также раздел 4 данной статьи — формулы (4.8).

На практике (и в данной работе) эффективными (экономичными) считаются (и, как правило, оказываются) те версии алгоритма 1, для которых на каждом шаге используется элементарная плотность.

Здесь уместно отметить, что, с одной стороны, далеко не каждая совместная плотность d-мерного случайного вектора имеет хотя бы одно из $d!$ разложений вида (1.1), дающее эффективный (с элементарными плотностями на каждом шаге) стандартный алгоритм 1. С другой стороны, в подавляющем большинстве алгоритмов метода Монте-Карло имеется возможность выбирать "удобные" для моделирования (с помощью алгоритма 1) плотности $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x})$ (см., например, раздел 1.5.3 книги [1]).

2. Основное определение и основное замечание

Введем важное новое понятие, основанное на следующем широко известном факте.

Утверждение 1 (теорема о замене случайных переменных; см., например, раздел 1.4.4 книги [1]). Пусть

$$y^{(j)} = \Phi^{(j)}\left(x^{(1)}, \ldots, x^{(d)}\right), \quad j = 1, \ldots, d, \tag{2.1}$$

— взаимно-однозначное дифференцируемое отображение области A в пространстве с координатами $\{x^{(i)}\} = \{x^{(1)}, \ldots, x^{(d)}\}$ на область B в пространстве с координатами $\{y^{(j)}\} = \{y^{(1)}, \ldots, y^{(d)}\}$. Если плотность случайного вектора $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \ldots, \xi^{(d)})$ в A равна $f_{\boldsymbol{\xi}}(x^{(1)}, \ldots, x^{(d)})$, то плотность распределения случайного вектора

$$\boldsymbol{\theta} = \left(\theta^{(1)}, \ldots, \theta^{(d)}\right) \in B, \quad \text{где } \theta^{(j)} = \Phi^{(j)}\left(\xi^{(1)}, \ldots, \xi^{(d)}\right), \tag{2.2}$$

имеет вид

$$f_{\boldsymbol{\theta}}\left(y^{(1)}, \ldots, y^{(d)}\right) = f_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{y}) = f_{\boldsymbol{\xi}}\left(x^{(1)}(\mathbf{y}), \ldots, x^{(d)}(\mathbf{y})\right) \left|\frac{\partial\left(x^{(1)}(\mathbf{y}), \ldots, x^{(d)}(\mathbf{y})\right)}{\partial\left(y^{(1)}, \ldots, y^{(d)}\right)}\right|.$$

В правой части последнего соотношения компоненты $x^{(i)}$ должны быть выражены через $\mathbf{y} = (y^{(1)}, \ldots, y^{(d)})$, а $\left|\dfrac{\partial(x^{(1)}(\mathbf{y}), \ldots, x^{(d)}(\mathbf{y}))}{\partial(y^{(1)}, \ldots, y^{(d)})}\right|$ есть якобиан перехода от координат $\{y^{(j)}\}$ к координатам $\{x^{(i)}\}$ — обратного к отображению (2.1).

Определение 2. Взаимно-однозначное отображение (2.1) назовем вычислимым моделируемым преобразованием декартовых координат для случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$, если в декартовых координатах $\{x^{(i)}\}$ для вектора $\boldsymbol{\xi}$ не удается построить разложение (1.1) с моделируемыми (например, элементарными) условными плотностями $f_{\xi^{(i_1)}}\left(x^{(i_1)}\right)$, $f_{\xi^{(i_2)}}\left(x^{(i_2)}|x^{(i_1)}\right), \ldots, f_{\xi^{(i_d)}}\left(x^{(i_d)}|x^{(i_1)}, x^{(i_2)}, \ldots, x^{(i_{d-1})}\right)$ (и соответствующий эффективный алгоритм 1), а для вектора $\boldsymbol{\theta}$ вида (2.2) такие разложение и эффективный вариант алгоритма 1 построить удается; кроме того, само отображение (2.1) и обратное к нему отображение

$$x^{(i)} = \left(\Phi^{-1}\right)^{(i)}(y^{(1)}, \ldots, y^{(d)}), \quad i = 1, \ldots, d, \tag{2.3}$$

можно представить в виде вычислимых на компьютере композиций элементарных функций.

Сформулируем следующее важное замечание.

Замечание 1. Построение примеров вычислимых моделируемых преобразований декартовых координат для d-мерных случайных векторов $\boldsymbol{\xi}$ (для $d > 1$) с различными многомерными распределениями представляет собой содержательную (часто — не простую) исследовательскую задачу. Данная работа посвящена нюансам построения и применения этих преобразований.

3. Использование классических преобразований

В первую очередь отметим, что содержательные примеры вычислимых моделируемых преобразований декартовых координат получаются только для многомерного случая $d > 1$. Действительно, если плотность одномерного распределения $f_\theta(y)$ элементарна, т. е. для моделирования выборочного значения θ_0 случайной величины θ из соответствующего уравнения вида (1.2) получается экономичная формула $\theta_0 = \psi_\theta(\alpha_0)$ (здесь $\psi_\theta(\cdot)$ — композиция элементарных функций), а также имеется представление вида (2.3) $x = \Phi^{-1}(y)$, то для случайной величины $\xi = \Phi^{-1}(\theta)$ получается моделирующая формула $\xi_0 = \Phi^{-1}[\psi_\theta(\alpha_0)]$, где $\Phi^{-1}\psi_\theta(\cdot)$ — композиция элементарных функций. Таким образом, исходная случайная величина ξ обладает элементарной плотностью распределения (и потому не удовлетворяет определению 2).

Необходимость использования вычислимых моделируемых преобразований чаще всего возникает при моделировании случайных векторов $\boldsymbol{\xi}$, распределенных в областях с криволинейными границами (т. е. в областях, отличных от прямоугольных). Приведем соответствующие примеры, в которых вычислимыми моделируемыми оказываются классические преобразования математического анализа (см., например, [3]).

Пример 1. Пусть требуется построить алгоритм численного моделирования двумерной случайной величины (вектора) $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)})$, распределенной согласно плотности

$$f_{\boldsymbol{\xi}}(u, v) = \begin{cases} \dfrac{3\sqrt{u^2 + v^2}}{2\pi R^3} & \text{при } (u, v) \in G^{(2,R)} \\ 0 \quad \text{иначе} \end{cases} \tag{3.1}$$

в круге

$$G^{(2,R)} = \left\{(u, v) : \sqrt{u^2 + v^2} < R\right\}. \tag{3.2}$$

Рассмотрим одно из двух (эквивалентных, в силу симметрии графика функции (3.1) относительно осей координат $0u$ и $0v$) разложений вида (1.1) для плотности (3.1):

$$f_{\boldsymbol{\xi}}(u, v) = f_{\xi^{(1)}}(u) f_{\xi^{(2)}}(v|u),$$

где

$$f_{\xi^{(1)}}(u) \;=\; \int\limits_{-\sqrt{R^2-u^2}}^{\sqrt{R^2-u^2}} \frac{3\sqrt{u^2+v^2}dv}{2\pi R^3} = \frac{3\left[v\sqrt{u^2+v^2}+u^2\ln\left(v+\sqrt{u^2+v^2}\right)\right]}{4\pi R^3}\Bigg|_{-\sqrt{R^2-u^2}}^{\sqrt{R^2-u^2}} =$$

$$= \tfrac{3}{4\pi R^3}\left[2R\sqrt{R^2-u^2}+u^2\ln\frac{\left(R+\sqrt{R^2-u^2}\right)^2}{u^2}\right], \quad -R<u<R, \tag{3.3}$$

$$f_{\xi^{(2)}}(v|u) = \frac{f_{\boldsymbol{\xi}}(u,v)}{f_{\xi^{(1)}}(u)} = \frac{2\sqrt{v^2+u^2}}{2R\sqrt{R^2-u^2}+u^2\ln\dfrac{\left(R+\sqrt{R^2-u^2}\right)^2}{u^2}}, \; -\sqrt{R^2-u^2}<v<\sqrt{R^2-u^2} \tag{3.4}$$

(см. раздел 2.271-3 книги [4]).

Несложно проверить, что плотности (3.3), (3.4) не являются элементарными.

Учитывая, что моделируемый двумерный случайный вектор $\boldsymbol{\xi}$ распределен в круге (3.2), здесь целесообразно рассмотреть взаимно-однозначное преобразование $\Phi(u,v)$, описывающее переход от двумерных декартовых координат $\{u,v\}$ к полярным координатам $\{r,\phi\}$. Обратное к $\Phi(u,v)$ преобразование (2.3) определяется формулами

$$u = r\sin\phi, \quad v = r\cos\phi, \quad r\geq 0, \quad 0\leq\phi<2\pi \tag{3.5}$$

(см., например, раздел 604.1 книги [3]).

Рассмотрим также случайный вектор

$$(\rho,\varphi) = \Phi\left(\xi^{(1)},\xi^{(2)}\right), \tag{3.6}$$

где вектор $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)},\xi^{(2)})$ имеет плотность распределения (3.1).

Согласно утверждению 1, с учетом того, что якобиан преобразования (3.5), обратного к $\Phi(u,v)$, равен

$$\left|\frac{\partial[u(r,\phi),v(r,\phi)]}{\partial(r,\phi)}\right| = r \tag{3.7}$$

(см., например, раздел 604.1 книги [3]) и $r=\sqrt{u^2+v^2}$, получаем, что плотность распределения вектора (3.6) равна

$$f_{(\rho,\varphi)}(r,\phi) = \frac{3r^2}{2\pi R^3}, \quad 0\leq r<R, \quad 0\leq\phi<2\pi. \tag{3.8}$$

Заметим, что

$$f_\rho(r) = \int\limits_0^{2\pi}\frac{3r^2d\phi}{2\pi R^3} = \frac{3r^2}{R^3}, \quad f_\varphi(\phi|r) = \frac{f_{(\rho,\varphi)}(r,\phi)}{f_\rho(r)} \equiv \frac{1}{2\pi} = \int\limits_0^R\frac{3r^2dr}{2\pi R^3} = f_\varphi(\phi), \tag{3.9}$$

где $0\leq r<R$, $0\leq\phi<2\pi$.

Таким образом, плотность (3.8) представима в виде

$$f_{(\rho,\varphi)}(r,\phi) = f_\rho(r)f_\varphi(\phi), \quad f_\rho(r) = \frac{3r^2}{R^3}, \quad 0\leq r<R, \quad f_\varphi(\phi)\equiv\frac{1}{2\pi}, \quad 0\leq\phi<2\pi. \tag{3.10}$$

Это означает, что компоненты случайного вектора (ρ, φ), определяемого соотношением (3.6), независимы и распределены согласно элементарным плотностям $f_\rho(r)$ и $f_\varphi(\phi)$ из соотношения (3.10). Решая соответствующие уравнения (1.2), получаем моделирующие формулы

$$\rho_0 = R\sqrt[3]{\alpha_1}, \quad \varphi_0 = 2\pi\alpha_2, \tag{3.11}$$

где $\alpha_1, \alpha_2 \in U(0,1)$ — стандартные случайные числа.

С учетом соотношений (3.5) и (3.11) получаем моделирующие формулы для двумерного случайного вектора

$$\xi_0^{(1)} = R\sqrt[3]{\alpha_1}\sin 2\pi\alpha_2, \quad \xi_0^{(2)} = R\sqrt[3]{\alpha_1}\cos 2\pi\alpha_2, \quad \alpha_1, \alpha_2 \in U(0,1).$$

Таким образом, мы показали, что согласно определению 2 преобразование декартовых координат $\{u, v\}$ к полярным координатам $\{r, \phi\}$ является вычислимым моделируемым для двумерного случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$ с распределением (3.1). Описание примера 1 закончено.

Пример 2. Пусть требуется построить алгоритм численного моделирования трехмерной случайной величины (вектора) $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)})$, распределенной согласно плотности

$$f_{\boldsymbol{\xi}}(u,v,w) = \begin{cases} \dfrac{105(u^2+v^2+w^2)\left(1-\sqrt{u^2+v^2+w^2}\right)^2}{4\pi} & \text{при } (u,v,w) \in G^{(3,R=1)} \\ 0 \quad \text{иначе} \end{cases} \tag{3.12}$$

в единичном шаре

$$G^{(3,R)} = \left\{(u,v,w) : \sqrt{u^2+v^2+w^2} < R\right\} \tag{3.13}$$

для $R = 1$.

Выкладки, аналогичные (3.3), (3.4), для плотности (3.12) подтверждают то, что в декартовых координатах $\{u, v, w\}$ прямое применение алгоритма 1 для моделирования рассматриваемого случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$ не дает экономичных моделирующих формул метода обратной функции распределения для всех компонент этой точки.

По аналогии с примером 1 учтем, что речь идет о моделировании случайной точки, распределенной в шаре (3.13), и поэтому целесообразно применить утверждение 1 и рассмотреть взаимно-однозначное преобразование $\Phi(u, v, w)$, описывающее переход от декартовых координат $\{u, v, w\}$ к сферическим координатам $\{r, \phi, \theta\}$. Обратное к $\Phi(u, v, w)$ преобразование (2.3) определяется формулами

$$u = r\sin\phi\sin\theta, \quad v = r\cos\phi\sin\theta, \quad w = r\cos\theta, \quad r \geq 0, \quad 0 \leq \phi < 2\pi, \quad 0 \leq \theta < \pi \tag{3.14}$$

(см., например, раздел 656.2 книги [3]).

Якобиан преобразования (3.14), обратного к $\Phi(u, v, w)$, равен

$$\left|\frac{\partial[u(r,\phi,\theta), v(r,\phi,\theta), w(r,\phi,\theta)]}{\partial(r,\phi,\theta)}\right| = r^2\sin\theta \tag{3.15}$$

(см., например, раздел 656.2 книги [3]), и в соответствии с утверждением 1 плотность случайного вектора

$$\left(\rho, \varphi, \tilde{\theta}\right) = \Phi\left(\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)}\right) \tag{3.16}$$

(здесь вектор $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)})$ распределен согласно плотности распределения (3.12)) имеет вид

$$f_{(\rho,\varphi,\tilde{\theta})}(r,\phi,\theta) = \frac{105r^4(1-r)^2 \sin\theta}{4\pi}, \quad 0 \le r < 1, \quad 0 \le \phi < 2\pi, \quad 0 \le \theta < \pi.$$

Реализуя выкладки типа (3.9), получаем следующий аналог соотношения (3.10):

$$f_{(\rho,\varphi,\tilde{\theta})}(r,\phi,\theta) = f_\rho(r) f_\varphi(\phi) f_{\tilde{\theta}}(\theta) = \left[105r^4(1-r)^2\right] \left(\frac{1}{2\pi}\right)\left(\frac{\sin\theta}{2}\right). \tag{3.17}$$

Это означает, что компоненты случайного вектора $\left(\rho, \varphi, \tilde{\theta}\right)$, определяемого соотношением (3.16), независимы и распределены согласно моделируемым плотностям $f_\rho(r)$, $f_\varphi(\phi)$ и $f_{\tilde{\theta}}(\theta)$ из соотношения (3.17). В частности, плотности $f_\varphi(\phi)$ и $f_{\tilde{\theta}}(\theta)$ являются элементарными. Решая соответствующие уравнения (1.2), получаем моделирующие формулы

$$\varphi_0 = 2\pi\alpha_1, \quad \cos\tilde{\theta}_0 = 1 - 2\alpha_2, \tag{3.18}$$

где $\alpha_1, \alpha_2 \in U(0,1)$ — стандартные случайные числа.

В свою очередь, случайный радиус ρ имеет бета-распределение $\rho = \beta^{(\mu,\nu)}$ с целыми параметрами $\mu = 5$ и $\nu = 3$. Для такого распределения наиболее эффективной (экономичной) является моделирующая формула

$$\beta_0^{(\mu,\nu)} = \prod_{i=1}^{\nu} \alpha_i^{1/(\mu+i-1)}, \quad \alpha_i \in U(0,1)$$

(см. [1, 5]), и поэтому для моделирования случайного радиуса ρ следует использовать формулу

$$\rho_0 = \sqrt[5]{\alpha_3}\sqrt[6]{\alpha_4}\sqrt[7]{\alpha_5}, \tag{3.19}$$

где $\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5 \in U(0,1)$ — стандартные случайные числа.

Согласно формулам (3.14), (3.18), (3.19), декартовы координаты выборочного значения $\boldsymbol{\xi}_0$ моделируемого случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$ равны

$$\begin{aligned} \xi_0^{(1)} &= \sin(2\pi\alpha_1) 2\sqrt{\alpha_2(1-\alpha_2)}\,\sqrt[5]{\alpha_3}\sqrt[6]{\alpha_4}\sqrt[7]{\alpha_5}, \\ \xi_0^{(2)} &= \cos(2\pi\alpha_1) 2\sqrt{\alpha_2(1-\alpha_2)}\,\sqrt[5]{\alpha_3}\sqrt[6]{\alpha_4}\sqrt[7]{\alpha_5}, \\ \xi_0^{(3)} &= (1-2\alpha_2)\sqrt[5]{\alpha_3}\sqrt[6]{\alpha_4}\sqrt[7]{\alpha_5}; \quad \alpha_1,\alpha_2,\alpha_3,\alpha_4,\alpha_5 \in U(0,1). \end{aligned} \tag{3.20}$$

Таким образом, мы показали, что согласно определению 2 преобразование декартовых координат $\{u, v, w\}$ к сферическим координатам $\{r, \phi, \theta\}$ является вычислимым моделируемым для трехмерного случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$ с распределением (3.12). Описание примера 2 закончено.

Примеры 1 и 2 являются частными случаями ситуаций, когда моделируется d-мерная случайная точка $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \ldots, \xi^{(d)})$ (для $d = 2$ и $d = 3$ соответственно), распределенная в d-мерном шаре радиуса R

$$G^{(d,R)} = \left\{ \mathbf{x} = (x^{(1)}, \ldots, x^{(d)}) : \|\mathbf{x}\| = \sqrt{\left(x^{(1)}\right)^2 + \cdots + \left(x^{(d)}\right)^2} < R \right\} \tag{3.21}$$

(см. формулы (3.2) и (3.13)). При этом в декартовых координатах эффективных (экономичных) моделирующих формул выписать не удается и применяется преобразование $\Phi(\mathbf{x}) = \Phi(x^{(1)}, \ldots, x^{(d)})$ вида (2.1), описывающее переход от декартовых координат $\{x^{(i)}\}$ к гиперсферическим координатам $\{r, \boldsymbol{\phi}\} = \{r, \phi^{(1)}, \ldots, \phi^{(d-1)}\}$.

Обратное к $\Phi(x^{(1)}, \ldots, x^{(d)})$ преобразование вида (2.3) описывается известными формулами обобщенного полярного преобразования (см., например, раздел 676.12 книги [3]):

$$\begin{aligned} &x^{(1)} = r \sin\phi^{(1)} \sin\phi^{(2)} \times \cdots \times \sin\phi^{(d-1)}, \\ &\quad \ldots \\ &x^{(i)} = r \cos\phi^{(i-1)} \sin\phi^{(i)} \times \cdots \times \sin\phi^{(d-1)}, \quad i = 2, \ldots, d-1, \\ &\quad \ldots \\ &x^{(d)} = r\cos\phi^{(d-1)}, \quad r \geq 0, \quad 0 \leq \phi^{(1)} < 2\pi, \quad 0 \leq \phi^{(i)} < \pi, \quad i = 2, \ldots, d-1. \end{aligned} \tag{3.22}$$

Отметим, что формулы (3.5), (3.14) являются частными случаями преобразования (3.22) для $d = 2$ и $d = 3$ соответственно.

Якобиан этого, обратного к $\Phi(x^{(1)}, \ldots, x^{(d)})$, преобразования равен

$$\left| \frac{\partial(x^{(1)}(r,\boldsymbol{\phi}), \ldots, u^{(d)}(r,\boldsymbol{\phi}))}{\partial(r, \phi^{(1)}, \ldots, \phi^{(d-1)})} \right| = r^{d-1} \sin\phi^{(2)} \sin^2\phi^{(3)} \times \cdots \times \sin^{d-2}\phi^{(d-1)} \tag{3.23}$$

(см., например, раздел 676.12 книги [3]). Отметим, что формулы (3.7), (3.15) являются частными случаями преобразования (3.23) для $d = 2$ и $d = 3$ соответственно.

Замечание 2. Построение примеров, в которых вычислимым моделируемым оказывается преобразование $\Phi(x^{(1)}, \ldots, x^{(d)})$, обратное к (3.22), для размерностей $d > 3$ весьма затруднено в связи с тем, что не имеется компактных формул записи самого преобразования $\Phi(x^{(1)}, \ldots, x^{(d)})$ вида (2.1). Имеются лишь выражения для радиуса $r = \sqrt{(x^{(1)})^2 + \cdots + (x^{(d)})^2}$ и для косинуса компоненты $\phi^{(d-1)} : \cos\phi^{(d-1)} = x^{(d)}/\sqrt{(x^{(1)})^2 + \cdots + (x^{(d)})^2}$ (см. далее примеры 5 и 6 из раздела 6 данной статьи), а для компонент ("углов") $\boldsymbol{\phi} = \{\phi^{(1)}, \ldots, \phi^{(d-2)}\}$ подобных простых выражений нет.

Отметим также, что с ростом размерности d усложняется выражение для якобиана (3.23). Последнее обстоятельство сказывается в том числе при рассмотрении одновременно простой и практически значимой задачи о моделировании d-мерной точки, равномерно распределенной в шаре (3.21) — см. далее раздел 4 данной работы.

Приведем еще два примера вычислимых моделируемых преобразований.

Пример 3. Пусть требуется построить алгоритм моделирования случайной точки $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)})$, распределенной в области

$$D^{(+)} = \big\{(1 \leq u \leq 2,\ 0 \leq v \leq u^2/2 - 1/2) \cup (2 \leq u \leq 4,\ 0 \leq v \leq -u^2/8 + 2)\big\} \tag{3.24}$$

согласно плотности распределения

$$f_{\boldsymbol{\xi}}(u,v) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{u^2+v^2}} & \text{при } (u,v) \in D^{(+)}, \\ 0 \quad \text{иначе.} \end{cases} \tag{3.25}$$

По аналогии с выкладками (3.3) из примера 1 можно констатировать, что первообразная функция (3.25) при интегрировании по u или по v имеет довольно сложный вид:

$$\int \frac{dv}{\sqrt{u^2+v^2}} = \ln\left(v + \sqrt{u^2+v^2}\right)$$

(см. раздел 2.271-4 из книги [4]). Кроме того, относительно сложный вид имеет также и криволинейная область (3.24). Поэтому построить подходящее разложение (1.1) и эффективный алгоритм 1 в декартовых координатах не удается.

Рассмотрим параболические координаты (s,t) (см., например, раздел 604.4 книги [3]), для которых

$$u = st, \quad v = \frac{1}{2}(s^2 - t^2). \tag{3.26}$$

Заметим, что преобразование (3.26) объединения области (3.24) с областью

$$D^{(-)} = \left\{(1 \le u \le 2,\ -u^2/2 + 1/2 \le v \le 0) \cup (2 \le u \le 4,\ u^2/8 - 2 \le v \le 0)\right\}$$

(это симметричное отражение области $D^{(+)}$ относительно оси $0u$) представляет собой квадрат с единичным ребром $\Delta = \{(s,t) : 1 \le s, t \le 2\}$.

Учитывая, что якобиан преобразования (3.26) равен $s^2 + t^2 = 2\sqrt{u^2(s,t) + v^2(s,t)}$, из утверждения 1 получаем, что плотность распределения вектора $(\zeta, \tau) = \Phi(\xi^{(1)}, \xi^{(2)})$ (здесь Φ — преобразование, обратное к (3.26)) является плотностью равномерного распределения на “половинке” (при $s \ge t$) квадрата Δ:

$$f_{(\zeta,\tau)}(s,t) = \frac{1}{\sqrt{u^2(s,t) + v^2(s,t)}} 2\sqrt{u^2(s,t) + v^2(s,t)} \equiv 2, \quad 1 \le s, t \le 2, \quad s \ge t.$$

В результате получаем следующий алгоритм численного моделирования случайной точки $\boldsymbol{\xi}$.

Алгоритм 2. Реализуем два стандартных случайных числа $\alpha_1, \alpha_2 \in U(0,1)$ и полагаем $\alpha_0^{(1)} = \max(\alpha_1, \alpha_2)$, $\alpha_0^{(2)} = \min(\alpha_1, \alpha_2)$. Моделирующие формулы для выборочных значений $\left(\xi_0^{(1)}, \xi_0^{(2)}\right)$ случайного вектора $(\xi^{(1)}, \xi^{(2)})$, распределенного согласно плотности (3.25) в области (3.24), имеют следующий вид:

$$\xi_0^{(1)} = (1 + \alpha_0^{(1)})(1 + \alpha_0^{(2)}), \quad \xi_0^{(2)} = \frac{(\alpha_0^{(1)} - \alpha_0^{(2)})(2 + \alpha_0^{(1)} + \alpha_0^{(2)})}{2}.$$

Таким образом, мы показали, что согласно определению 2 преобразование декартовых координат $\{u, v\}$ к параболическим координатам $\{s, t\}$ является вычислимым моделируемым для двумерного случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$ с распределением (3.25) в области (3.24). Описание примера 3 закончено.

Пример 4. Пусть требуется построить алгоритм численного моделирования трехмерной случайной величины (вектора) $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)})$, распределенной согласно плотности

$$f_{\boldsymbol{\xi}}(u,v,w) = \begin{cases} \dfrac{e^{-\left(\sqrt{u^2+v^2}+w\right)}}{2\pi(1-e^{-R})(1-e^{-H})\sqrt{u^2+v^2}} & \text{при } (u,v,w) \in C^{(R,H)} \\ 0 \quad \text{иначе} \end{cases} \tag{3.27}$$

в цилиндре

$$C^{(R,H)} = \left\{(u,v,w) : \sqrt{u^2+v^2} < R,\ 0 < w < H\right\}. \tag{3.28}$$

С помощью выкладок, аналогичных (3.3), (3.4), для плотности (3.27) несложно обнаружить, что компонента $\xi^{(3)}$ независима от двух других компонент $\xi^{(1)}$, $\xi^{(2)}$ и распределена согласно элементарной плотности

$$f_{\xi^{(3)}}(w) = \frac{e^{-w}}{1-e^{-H}}, \quad 0 < w < H \tag{3.29}$$

(это усеченное экспоненциальное распределение) с моделирующей формулой

$$\xi_0^{(3)} = -\ln\left[1 - \alpha_3(1-e^{-H})\right], \quad \alpha_3 \in U(0,1) \tag{3.30}$$

(см. раздел 1.7.5 книги [1]).

Выкладки, аналогичные (3.3), (3.4), подтверждают то, что в декартовых координатах $\{u, v, w\}$ прямое применение алгоритма 1 для моделирования рассматриваемого случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$ не дает экономичных моделирующих формул метода обратной функции распределения для всех компонент этой точки. Например, для плотности распределения первой компоненты с учетом соотношения (3.29) получаем

$$f_{\xi^{(1)}}(u) = \int\limits_{-\sqrt{R^2-u^2}}^{\sqrt{R^2-u^2}} \int\limits_0^H \frac{e^{-\left(\sqrt{u^2+v^2}+w\right)} dv dw}{2\pi(1-e^{-R})(1-e^{-H})\sqrt{u^2+v^2}} =$$

$$= \frac{1}{2\pi(1-e^{-R})} \int\limits_{-\sqrt{R^2-u^2}}^{\sqrt{R^2-u^2}} \frac{e^{-\sqrt{u^2+v^2}} dv}{\sqrt{u^2+v^2}}, \quad -R < u < R.$$

Последний интеграл не берется аналитически, и поэтому плотность $f_{\xi^{(1)}}(u)$ не является элементарной (так же, как и $f_{\xi^{(2)}}(v|\xi^{(1)} = u)$).

Учитывая то, что речь идет о моделировании случайной точки, распределенной в цилиндре (3.28), рассмотрим взаимно-однозначное преобразование $\Phi(u, v, w)$, описывающее переход от трехмерных декартовых координат $\{u, v, w\}$ к цилиндрическим координатам $\{r, \phi, z\}$. Обратное к $\Phi(u, v, w)$ преобразование определяется следующим образом (см. раздел 656.1 книги [3]):

$$u = r\cos\phi, \quad v = r\sin\phi, \quad w = z, \quad r \geq 0, \quad 0 \leq \phi < 2\pi, \quad -\infty < z < +\infty. \tag{3.31}$$

Рассмотрим также случайный вектор

$$(\rho, \varphi, \zeta) = \Phi(\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)}), \tag{3.32}$$

где вектор $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)})$ имеет плотность распределения (3.27).

Согласно утверждению 1, с учетом того, что якобиан $\left|\dfrac{\partial(u(r,\phi,z), v(r,\phi,z), w(r,\phi,z))}{\partial(r,\phi,z)}\right|$ равен r (это следствие соотношений (3.7), (3.31)), получаем плотность распределения вектора (3.32) и (по аналогии с выкладками (3.9), (3.10)) ее разложение вида (1.1):

$$f_{(\rho,\varphi,\zeta)}(r, \phi, z) = \frac{e^{-(r+z)}}{2\pi(1-e^{-R})(1-e^{-H})} = \left(\frac{e^{-r}}{1-e^{-R}}\right)\left(\frac{1}{2\pi}\right)\left(\frac{e^{-z}}{1-e^{-H}}\right),$$

где $0 \leq r < R$, $0 \leq \phi < 2\pi$, $0 < z < H$.

Это означает, что компоненты случайного вектора (ρ, φ, ζ), определяемого соотношением (3.32), независимы и распределены согласно элементарным плотностям: одна представляет плотность равномерного распределения, а две другие имеют вид (3.29). С учетом соотношений (3.11), (3.30), (3.31) получаем моделирующие формулы

$$\xi_0^{(1)} = -\ln\left[1 - \alpha_1(1 - e^{-R})\right]\cos 2\pi\alpha_2, \quad \xi_0^{(2)} = -\ln\left[1 - \alpha_1(1 - e^{-R})\right]\sin 2\pi\alpha_2,$$
$$\xi^{(3)} = -\ln\left[1 - \alpha_3(1 - e^{-H})\right], \quad \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 \in U(0,1). \tag{3.33}$$

Таким образом, мы показали, что согласно определению 2 преобразование декартовых координат $\{u, v, w\}$ к цилиндрическим координатам $\{r, \phi, z\}$ является вычислимым моделируемым для трехмерного случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$ с распределением (3.27). Описание примера 4 закончено.

4. Моделирование случайного изотропного вектора и гауссовского распределения

Определенным недостатком примеров 1–4 является то, что трудно указать известные практические применения распределений, рассмотренных в этих примерах. Укажем практически значимые (и по большей части хорошо известные) вычислимые моделируемые преобразования декартовых координат.

Важным приложением таких преобразований является моделирование многомерного случайного изотропного вектора.

Определение 3 (см., например, раздел 1.10.2 книги [1]). Случайный вектор $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \ldots, \xi^{(d)})$ называется изотропным, если точка $\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\xi}/\|\boldsymbol{\xi}\|$ равномерно распределена на поверхности d-мерной сферы единичного радиуса с центром в начале координат и не зависит от длины $\boldsymbol{\xi}\| = \sqrt{(\xi^{(1)})^2 + \cdots + (\xi^{(d)})^2}$.

Численные (реализованные на компьютере) выборочные значения $\{\boldsymbol{\xi}_i\}$ изотропного случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$ относительно небольшой размерности $d = 1-3$ широко используются в имитационных и весовых алгоритмах компьютерной реализации траекторий обрывающихся цепей Маркова различной природы (моделирование движения частиц, алгоритмы блуждания по сферам, шарам и границам для решения краевых задач и др.) — см., например, [1, 6–8]. Другое возможное применение выборочных значений $\{\boldsymbol{\xi}_i\}$ связано с тестированием вычислительных алгоритмов линейной алгебры. Но самым важным применением алгоритмов реализации выборочных значений $\{\boldsymbol{\xi}_i\}$ изотропного случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$ является численное моделирование случайных величин со стандартным нормальным распределением (1.3).

Утверждение 2 (см., например, раздел 1.10.2 книги [1]). Если $\boldsymbol{\xi}$ — изотропный случайный вектор, квадрат длины которого имеет χ^2-распределение с d степенями свободы (здесь $d \geq 2$), то его компоненты $\xi^{(1)}$, …, $\xi^{(d)}$ независимы и одинаково распределены с плотностью (1.3).

Из соображений симметрии следует, что задачу численного моделирования изотропного вектора можно свести к задаче моделирования случайной точки $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \ldots, \xi^{(d)})$, равномерно распределенной в d-мерном шаре (3.21) согласно плотности распределения

$$f_{\boldsymbol{\xi}}(x^{(1)}, \ldots, x^{(d)}) = \begin{cases} \dfrac{1}{\bar{G}^{(d,R)}} & \text{при } (x^{(1)}, \ldots, x^{(d)}) \in G^{(d,R)}, \\ 0 & \text{иначе.} \end{cases} \tag{4.1}$$

Здесь $\bar{G}^{(d,R)} = \dfrac{\pi^{d/2}R^d}{\Gamma(d/2+1)}$ — объем шара $G^{(d,R)}$, а $\Gamma(\nu) = \int\limits_0^{+\infty} w^{\nu-1}e^{-w}dw$ — гамма-функция.

По аналогии с рассуждениями из примера 1 получаем, что уже для двумерного случая ($d=2$) моделирование случайной точки $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)})$, равномерно распределенной в круге (3.2), в декартовых координатах затруднено.

Действительно, по аналогии с формулами (3.3), (3.4) здесь имеем

$$f_{\boldsymbol{\xi}}(u,v) \equiv \frac{1}{\pi R^2} = f_{\xi^{(1)}}(u) f_{\xi^{(2)}}(v|u), \quad (u,v) \in G^{(2,R)},$$

$$f_{\xi^{(1)}}(u) = \int\limits_{-\sqrt{R^2-u^2}}^{\sqrt{R^2-u^2}} \frac{dv}{\pi R^2} = \frac{2}{\pi R^2}\sqrt{R^2-u^2}, \quad -R < u < R, \tag{4.2}$$

$$f_{\xi^{(2)}}(v|u) = \frac{f_{\boldsymbol{\xi}}(u,v)}{f_{\xi^{(1)}}(u)} \equiv \frac{1}{2\sqrt{R^2-u^2}}, \quad -\sqrt{R^2-u^2} < v < \sqrt{R^2-u^2}. \tag{4.3}$$

Для каждого фиксированного $u \in (-R,R)$ плотность (4.3) является элементарной. Конкретнее, это плотность равномерного распределения на интервале $\left(-\sqrt{R^2-u^2}, \sqrt{R^2-u^2}\right)$ с моделирующей формулой

$$\xi_0^{(2)} = -\sqrt{R^2-u^2} + 2\sqrt{R^2-u^2}\alpha_2, \quad \alpha_2 \in U(0,1),$$

полученной из уравнения вида (1.2) для плотности (3.4). Однако плотность (4.2) не является элементарной, так как уравнение вида (1.2) для этой плотности

$$\frac{2}{\pi R^2}\int\limits_{-R}^{\xi_0^{(1)}} \sqrt{R^2-u^2}du = \alpha_1, \quad \alpha_1 \in U(0,1),$$

сводится к соотношению

$$\xi_0^{(1)}\sqrt{R^2-\left(\xi_0^{(1)}\right)^2} + R^2 \arcsin\left(\frac{\xi_0^{(1)}}{R}\right) + \frac{\pi R^2}{2} = \pi R^2 \alpha_1$$

(см. раздел 2.271-3 книги [4]), которое неразрешимо в элементарных функциях относительно $\xi_0^{(1)}$.

Таким образом, уже для $d=2$ (а тем более и для $d>2$) прямое применение алгоритма 1 для моделирования случайной точки, равномерно распределенной в d-мерном шаре $G^{(d,R)}$, не дает экономичных моделирующих формул метода обратной функции распределения для всех компонент этой точки.

По аналогии с примером 1 переход к полярным координатам (3.5) и к вектору (3.6) с учетом утверждения 1 и соотношения (3.7) дает плотность

$$f_{(\rho,\varphi)}(r,\phi) = \frac{r}{\pi R^2}, \quad 0 \le r < R, \quad 0 \le \phi < 2\pi,$$

для которой выкладки типа (3.9) дают представление

$$f_{(\rho,\varphi)}(r,\phi) = f_\rho(r) f_\varphi(\phi), \quad f_\rho(r) = \frac{2r}{R^2}, \quad 0 \le r < R, \quad f_\varphi(\phi) \equiv \frac{1}{2\pi}, \quad 0 \le \phi < 2\pi. \tag{4.4}$$

Это означает, что компоненты случайного вектора (ρ, φ), определяемого соотношением (3.6), независимы и распределены согласно элементарным плотностям $f_\rho(r)$ и $f_\varphi(\phi)$ из соотношения (4.4). Решая соответствующие уравнения (1.2), получаем моделирующие формулы

$$\rho_0 = R\sqrt{\alpha_1}, \quad \varphi_0 = 2\pi\alpha_2, \tag{4.5}$$

где $\alpha_1, \alpha_2 \in U(0,1)$ — стандартные случайные числа.

С учетом соотношений (3.8) и (4.5) получаем моделирующие формулы для двумерного случайного вектора с распределением (4.1):

$$\xi_0^{(1)} = R\sqrt{\alpha_1}\sin 2\pi\alpha_2, \quad \xi_0^{(2)} = R\sqrt{\alpha_1}\cos 2\pi\alpha_2. \tag{4.6}$$

Таким образом, мы показали, что согласно определению 2 преобразование декартовых координат $\{u, v\}$ к полярным координатам $\{r, \phi\}$ является вычислимым моделируемым для двумерного случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$ с распределением (4.1).

Поскольку длина вектора (4.6) равна $\|\boldsymbol{\xi}\| = \sqrt{\left(\xi_0^{(1)}\right)^2 + \left(\xi_0^{(2)}\right)^2} = R\sqrt{\alpha_1}$, получаем хорошо известные (см., например, раздел 1.10.2 книги [1]) формулы моделирования двумерного единичного изотропного случайного вектора:

$$\boldsymbol{\omega}_0 = \left(\omega_0^{(1)}, \omega_0^{(2)}\right) = \left(\sin 2\pi\alpha_0, \cos 2\pi\alpha_0\right), \tag{4.7}$$

где $\alpha_0 \in U(0,1)$ — стандартное случайное число.

Из утверждения 2, формул (4.7) и того факта, что плотность χ^2-распределения с двумя степенями свободы совпадает с элементарной плотностью экспоненциального распределения

$$f_\xi(u) = \lambda e^{-\lambda u}, \quad u > 0, \quad \lambda > 0,$$

(соответствующая моделирующая формула, полученная из уравнения (1.2), имеет вид $\xi_0 = -(1/\lambda)\ln\alpha_0$ — см., например, раздел 1.4.1 книги [1]) при $\lambda = 1/2$, получаются широко используемые формулы Бокса — Мюллера [2] для нахождения пары выборочных значений стандартной гауссовской случайной величины, имеющей плотность распределения (1.3):

$$\eta_1 = \sqrt{-2\ln\alpha_1}\sin 2\pi\alpha_2, \quad \eta_2 = \sqrt{-2\ln\alpha_1}\cos 2\pi\alpha_2, \tag{4.8}$$

где $\alpha_1, \alpha_2 \in U(0,1)$ — стандартные случайные числа. К слову, в примерах 1 и 4 (первые две компоненты вектора (3.33)) также моделировались двумерные изотропные случайные векторы (отличие от вектора (4.6) — другое распределение длины вектора).

В трехмерном случае $d = 3$, по аналогии с примером 2, при попытке моделирования случайной точки $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)})$, равномерно распределенной в шаре (3.13) согласно плотности $f_{\boldsymbol{\xi}}(u, v, w) \equiv \dfrac{3}{4\pi R^3}$, $(u, v, w) \in G^{(3,R)}$ в декартовых координатах, мы не получаем эффективных (экономичных) моделирующих формул. По той же аналогии можно перейти к сферическим координатам (3.14) и вектору (3.16) и с учетом утверждения 1 и соотношения (3.15) получить плотность

$$f_{(\rho,\varphi,\tilde{\theta})}(r, \phi, \theta) = \frac{3r^2\sin\theta}{4\pi R^3}, \quad 0 \le r < R, \quad 0 \le \phi < 2\pi, \quad 0 \le \theta < \pi.$$

Реализуя выкладки типа (3.9), получаем аналог соотношений (3.10), (3.17), (4.4):

$$f_{(\rho,\varphi,\tilde{\theta})}(r, \phi, \theta) = f_\rho(r) f_\varphi(\phi) f_{\tilde{\theta}}(\theta) = \left(\frac{3\,r^2}{R^3}\right)\left(\frac{1}{2\pi}\right)\left(\frac{\sin\theta}{2}\right). \tag{4.9}$$

Это означает, что компоненты случайного вектора $\left(\rho, \varphi, \tilde{\theta}\right)$, определяемого соотношением (3.16) (здесь вектор $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)})$ распределен согласно плотности распределения (4.1) для $d = 3$), независимы и распределены согласно элементарным плотностям $f_\rho(r)$, $f_\varphi(\phi)$ и $f_{\tilde{\theta}}(\theta)$ из соотношения (4.9). Решая соответствующие уравнения (1.2), получаем моделирующие формулы (3.18) и $\rho_0 = R(\alpha_3)^{1/3}$.

Декартовы координаты выборочного значения $\boldsymbol{\xi}_0$ изотропного случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$ равны

$$\begin{aligned}
\xi_0^{(1)} &= R\sin(2\pi\alpha_1) 2\sqrt{\alpha_2(1-\alpha_2)}\sqrt[3]{\alpha_3}, \\
\xi_0^{(2)} &= R\sin(2\pi\alpha_1) 2\sqrt{\alpha_2(1-\alpha_2)}\sqrt[3]{\alpha_3}, \\
\xi_0^{(3)} &= R(1-2\alpha_2)\sqrt[3]{\alpha_3}, \quad \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 \in U(0,1)
\end{aligned} \tag{4.10}$$

(это аналог формул (3.20)).

Таким образом, мы показали, что согласно определению 2 преобразование декартовых координат $\{u, v, w\}$ к сферическим координатам $\{r, \phi, \theta\}$ является вычислимым моделируемым для трехмерного случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$ с распределением (4.1).

Используя очевидное равенство $\|\boldsymbol{\xi}_0\| = \sqrt{\left(\xi_0^{(1)}\right)^2 + \left(\xi_0^{(1)}\right)^2 + \left(\xi_0^{(1)}\right)^2} = \rho_0$ и соотношения (3.18), получаем следующие известные (см., например, раздел 1.10.3 книги [1]), удобные для практического применения моделирующие формулы для единичного изотропного случайного вектора $\boldsymbol{\omega} = (\omega^{(1)}, \omega^{(2)}, \omega^{(3)}) = \boldsymbol{\xi}/\|\boldsymbol{\xi}\|$:

$$\omega_0^{(3)} = 1 - 2\alpha', \quad \omega_0^{(1)} = \sqrt{1 - \left(\omega_0^{(3)}\right)^2}\sin 2\pi\alpha'', \quad \omega_0^{(2)} = \sqrt{1 - \left(\omega_0^{(3)}\right)^2}\cos 2\pi\alpha'', \tag{4.11}$$

где $\alpha', \alpha'' \in U(0,1)$ — стандартные случайные числа. К слову, в примере 2 также моделировался трехмерный изотропный случайный вектор (отличие от вектора (4.10) — другое распределение длины вектора).

Отметим определенные трудности построения алгоритма численного моделирования случайного вектора $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \ldots, \xi^{(d)})$, распределенного согласно плотности (4.1), для случая $d \geq 4$. Практическое применение этого алгоритма могло быть связано с применением утверждения 2 для моделирования достаточно больших наборов выборочных значений случайной величины, имеющей стандартное нормальное распределение (1.3). В силу причин, сформулированных ниже, такое моделирование распределения (1.3) невозможно.

По аналогии со случаями $d = 2$ и $d = 3$ прямое применение алгоритма 1 (в декартовых координатах) для моделирования случайной точки, равномерно распределенной в d-мерном шаре $G^{(d,R)}$ для $d \geq 4$, не дает экономичных моделирующих формул метода обратной функции распределения для всех компонент этой точки.

По аналогии с дву- и трехмерным случаями применим утверждение 1 и рассмотрим взаимно-однозначное преобразование $\Phi(x^{(1)}, \ldots, x^{(d)})$, описывающее переход от декартовых координат $\{x^{(1)}, \ldots, x^{(d)}\}$ к гиперсферическим координатам $\{r, \phi^{(1)}, \ldots, \phi^{(d-1)}\}$. Обратное к $\Phi(x^{(1)}, \ldots, x^{(d)})$ преобразование определяется формулами (3.22), а якобиан преобразования выражается формулой (3.23).

Согласно утверждению 1 плотность случайного вектора

$$(\rho, \varphi^{(1)}, \ldots, \varphi^{(d-1)}) = \Phi(\xi^{(1)}, \ldots, \xi^{(d)}) \tag{4.12}$$

(здесь вектор $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(d)})$ имеет плотность распределения (4.1)) выражается в виде

$$f_{(\rho,\varphi^{(1)},\dots,\varphi^{(d-1)})}(r, \phi^{(1)}, \dots, \phi^{(d-1)}) = \\ = \frac{\Gamma(d/2+1) r^{d-1} \sin\phi^{(2)} \sin^2\phi^{(3)} \times \dots \times \sin^{d-2}\phi^{(d-1)}}{\pi^{d/2} R^d}, \quad (4.13)$$

$$0 \le r < R; \quad 0 \le \phi^{(1)} < 2\pi, \quad 0 \le \phi^{(i)} < \pi, \quad i = 2, \dots, d-1.$$

По аналогии с выкладками (3.9) можно представить плотность (4.13) как произведение

$$f_{(\rho,\varphi^{(1)},\dots,\varphi^{(d-1)})}(r, \phi^{(1)}, \dots, \phi^{(d-1)}) = \left(\frac{d r^{d-1}}{R^d}\right) \left(\frac{1}{2\pi}\right) \left(\frac{\sin\phi^{(2)}}{2}\right) \left(\frac{2\sin^2\phi^{(3)}}{\pi}\right) \times \quad (4.14)$$

$$\times \left(\frac{3\sin^3\phi^{(4)}}{4}\right) \left(\frac{8\sin^4\phi^{(5)}}{3\pi}\right) \times \dots \times \left(\frac{(i-1)!\sin^{i-1}\phi^{(i)}}{2^{i-1}\Gamma^2\left(\frac{i}{2}\right)}\right) \times \dots \times \left(\frac{(d-2)!\sin^{d-2}\phi^{(d-1)}}{2^{d-2}\Gamma^2\left(\frac{d-1}{2}\right)}\right);$$

здесь использованы следующие известные формулы (см., например, разделы 3.62, 8.33, 8.38 из книги [4]):

$$\int_0^{\pi} \sin^i u\,du = 2\int_0^{\pi/2} \sin^i u\,du = 2^i \mathrm{B}\left(\frac{i+1}{2}, \frac{i+1}{2}\right) = \frac{2^i \Gamma^2\left(\frac{i+1}{2}\right)}{i!},$$

$$\mathrm{B}(\mu,\nu) = \frac{\Gamma(\mu)\Gamma(\nu)}{\Gamma(\mu+\nu)}, \quad \mu > 0, \quad \nu > 0, \quad \Gamma(u) = (u-1)\Gamma(u-1), \quad \Gamma(i+1) = i!, \quad \Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$$

для натуральных i; в этих формулах $\Gamma(\nu) = \int_0^{+\infty} t^{\nu-1} e^{-t} dt$ — гамма-функция, а $\mathrm{B}(\mu,\nu) = \int_0^1 t^{\mu-1}(1-t)^{\nu-1} dt$ — бета-функция.

Из соотношения (4.14) следует, что компоненты случайного вектора (4.11) независимы. Однако в отличие от дву- и трехмерного случаев не все частные плотности распределения из разложения (4.14) являются элементарными. Более конкретно, только три первые плотности дают моделирующие формулы, полученные из уравнений типа (1.2):

$$\rho_0 = R\sqrt[d]{\alpha_1}, \quad (4.15)$$
$$\varphi_0^{(1)} = 2\pi\alpha_2, \quad \varphi_0^{(2)} = \arccos(1 - 2\alpha_3),$$

а вот для следующих компонент таких формул вывести не удается; в частности, для компоненты $\varphi^{(3)}$ уравнение (1.2) имеет вид

$$\frac{2}{\pi}\int_0^{\varphi_0^{(3)}} \sin^2 u\,du = \alpha_4 \quad \text{или} \quad 2\varphi_0^{(3)} - \sin 2\varphi_0^{(3)} = 2\pi\alpha_4;$$

последнее уравнение не разрешимо в элементарных функциях относительно $\varphi_0^{(3)}$.

Таким образом, мы показали, что преобразование декартовых координат $\{x^{(1)}, \ldots, x^{(d)}\}$ к гиперсферическим координатам $\{r, \phi^{(1)}, \ldots, \phi^{(d-1)}\}$ не является вычислимым моделируемым для случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$ размерности $d \geq 4$ с распределением (4.1).

Тем не менее решение проблемы моделирования случайной точки, равномерно распределенной в шаре $G^{(d,R)}$, согласно плотности (4.1) для случая $d \geq 4$ все-таки возможно благодаря следующим хорошо известным соображениям (см., например, раздел 1.10.3 книги [1]).

Из соотношения (4.13) следует, что случайный вектор (случайная точка) $\boldsymbol{\xi}$, имеющий плотность распределения (4.1), может быть представлен в виде

$$\boldsymbol{\xi} = \rho\boldsymbol{\omega}, \tag{4.16}$$

где $\boldsymbol{\omega}$ — единичный изотропный вектор (см. определение 3), а случайная величина ρ (длина $\|\boldsymbol{\xi}\|$ вектора $\boldsymbol{\xi}$) распределена с плотностью $f_\rho(r) = dr^{d-1}/R^d$, $0 \leq r < R$; при этом случайная величина ρ и случайный вектор $\boldsymbol{\omega}$ независимы.

Для случайной величины ρ из (4.16) имеется моделирующая формула (4.15). Для моделирования вектора $\boldsymbol{\omega}$ для случая $d \geq 4$ можно применить следующее (обратное к утверждению 2) утверждение.

Утверждение 3 (см., например, раздел 1.10.2 книги [1]). Если случайные величины $\eta^{(1)}$, $\ldots$, $\eta^{(d)}$ независимы и распределены согласно плотности (1.3), то вектор $\boldsymbol{\eta} = (\eta^{(1)}, \ldots, \eta^{(d)})$ является d-мерным изотропным случайным вектором.

Из формул (4.8), (4.15), (4.16) и утверждения 3 можно получить следующий алгоритм моделирования d-мерного случайного вектора $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \ldots, \xi^{(d)})$, имеющего плотность распределения (4.1).

Сначала рассмотрим случай четной размерности d.

Алгоритм 3. Пусть $d = 2k$. Реализуем k пар значений

$$\eta_0^{(1,i)} = \sqrt{-2\ln\alpha_1^{(i)}}\sin\alpha_2^{(i)}, \quad \eta_0^{(2,i)} = \sqrt{-2\ln\alpha_1^{(i)}}\cos\alpha_2^{(i)}, \quad i = 1, \ldots, k \tag{4.17}$$

(здесь $\{\alpha_1^{(i)}, \alpha_2^{(i)} \in U(0,1);\ i = 1, \ldots, k\}$ — стандартные случайные числа), и формируем выборочное значение d-мерного случайного вектора

$$\boldsymbol{\xi}_0 = \rho_0\boldsymbol{\omega}_0, \quad \rho_0 = R\sqrt[d]{\alpha_0}, \quad \boldsymbol{\omega}_0 = \left(\frac{\eta_0^{(1,1)}}{\|\boldsymbol{\eta}_0\|}, \frac{\eta_0^{(2,1)}}{\|\boldsymbol{\eta}_0\|}, \ldots, \frac{\eta_0^{(1,i)}}{\|\boldsymbol{\eta}_0\|}, \frac{\eta_0^{(2,i)}}{\|\boldsymbol{\eta}_0\|}, \ldots, \frac{\eta_0^{(1,k)}}{\|\boldsymbol{\eta}_0\|}, \frac{\eta_0^{(2,k)}}{\|\boldsymbol{\eta}_0\|}\right),$$

$$\|\boldsymbol{\eta}_0\| = \sqrt{\left(\eta_0^{(1,1)}\right)^2 + \left(\eta_0^{(2,1)}\right)^2 + \cdots + \left(\eta_0^{(1,i)}\right)^2 + \left(\eta_0^{(2,i)}\right)^2 + \cdots + \left(\eta_0^{(1,k)}\right)^2 + \left(\eta_0^{(2,k)}\right)^2}.$$

Для нечетной размерности d целесообразно реализовывать сразу два выборочных значения изотропного случайного вектора $\boldsymbol{\eta}$ по формулам вида (4.17).

5. Моделирование случайных блужданий при решении краевых задач

Выведенные в предыдущем разделе формулы (4.5), (4.6), (4.10), (4.11) для моделирования дву- и трехмерных изотропных случайных векторов и точек, равномерно распределенных в круге и шаре, широко используются для моделирования траекторий обрывающихся цепей Маркова (случайных блужданий) при численном решении краевых задач методом Монте-Карло (см., например, [1, 7, 8]).

Непосредственное применение этих формул используется при моделировании *итерационного процесса блуждания по сферам* (см. пример 1 из раздела 5.2.1 и раздел П.1.1 книги [8]), где на каждом (k-м) шаге происходит моделирование случайной точки $\boldsymbol{\zeta}_k$, равномерно распределенной на максимальной сфере. Эту сферу можно вписать в выпуклую область G, в которой решается трехмерная краевая задача, при этом центром сферы является случайная точка $\boldsymbol{\zeta}_{k-1}$, полученная на предыдущем шаге. Центром самой первой сферы является точка $\boldsymbol{\zeta}_0 = \hat{\mathbf{x}}$, в которой нужно вычислить значение решения $\varphi(\hat{\mathbf{x}})$ краевой задачи.

Для решения ряда краевых задач рассматривается также *итерационный процесс блуждания по границе (по полусферам)* (см., например, раздел 6.3.1 книги [8]), в котором на каждом (k-м) шаге происходит моделирование случайной точки $\boldsymbol{\theta}_k$, равномерно распределенной на внутренней (по отношению к области G, где ищется решение задачи) единичной полусфере, построенной на касательной плоскости к гладкой границе ∂G области G. Кроме того, рассматривается проведение луча между точкой касания $\boldsymbol{\zeta}_{k-1} \in \partial G$, полученной на предыдущем шаге, и смоделированной точкой $\boldsymbol{\theta}_k$ до пересечения с границей ∂G — эта точка обозначается $\boldsymbol{\zeta}_k \in \partial G$. Центром упомянутой полусферы является точка $\boldsymbol{\zeta}_{k-1} \in \partial G$. Центром самой первой полусферы является точка $\boldsymbol{\zeta}_0 = \mathbf{x}_0$ границы ∂G, ближайшая к точке $\hat{\mathbf{x}}$, в которой нужно вычислить значение решения $\varphi(\hat{\mathbf{x}})$ краевой задачи.

Что касается моделирования точки $\tilde{\boldsymbol{\omega}}$, равномерно распределенной на единичной полусфере $\{(u, v, w) : u^2 + v^2 + w^2 = 1, \ w \geq 0\}$, то следует получить выборочные значения $\left(\omega_0^{(1)}, \omega_0^{(2)}, \omega_0^{(3)}\right)$ компонент единичного трехмерного изотропного случайного вектора $\boldsymbol{\omega} = (\omega^{(1)}, \omega^{(2)}, \omega^{(3)})$ по формулам (4.11), и если $\omega_0^{(3)} \geq 0$, то положить $\tilde{\boldsymbol{\omega}}_0 = \left(\omega_0^{(1)}, \omega_0^{(2)}, \omega_0^{(3)}\right)$, иначе $\tilde{\boldsymbol{\omega}}_0 = \left(-\omega_0^{(1)}, -\omega_0^{(2)}, -\omega_0^{(3)}\right)$ (см. раздел П.1.2 книги [8]).

При решении краевых задач используется также *процесс блуждания по цилиндрам* (см. пример 4 из раздела 5.2.1 книги [8]). При его реализации используется тот факт, что преобразование декартовых координат $\{u, v, w\}$ к цилиндрическим координатам $\{r, \phi, z\}$ (см. соотношение (3.31)) является вычислимым моделируемым для трехмерного случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$, равномерно распределенного в цилиндре $C^{(R,H)}$ (см. соотношение (3.28)).

Соответствующие моделирующие формулы легко получаются по аналогии с рассуждениями из примеров 2 и 4 (см. также формулы (4.5), (4.6)) и имеют вид, аналогичный формулам (3.33):

$$\xi_0^{(1)} = R\sqrt{\alpha_1}\sin 2\pi\alpha_2, \quad \xi_0^{(2)} = R\sqrt{\alpha_1}\cos 2\pi\alpha_2, \quad \xi_0^{(3)} = \alpha_3 H, \quad \alpha_1, \alpha_2, \alpha_2 \in U(0,1).$$

Аналогом блуждания по сферам является *итерационный процесс блуждания по эллипсоидам* (см. пример 2 из раздела 5.2.1 книги [8]).

Здесь для моделирования случайной точки $\tilde{\boldsymbol{\omega}}$, распределенной на “единичном” трехмерном эллипсоиде $E = \{(u, v, w) : u^2/a + v^2/b + w^2/c = 1, \ a > 0, \ b > 0, \ c > 0\}$, используются формулы $\tilde{\boldsymbol{\omega}}_0 = \left(\sqrt{a}\omega_0^{(1)}, \sqrt{b}\omega_0^{(2)}, \sqrt{c}\omega_0^{(3)}\right)$, где $\left(\omega_0^{(1)}, \omega_0^{(2)}, \omega_0^{(3)}\right)$ — это выборочные значения компонент единичного трехмерного изотропного случайного вектора $\boldsymbol{\omega} = (\omega^{(1)}, \omega^{(2)}, \omega^{(3)})$, реализованные на компьютере по формулам (4.11).

При этом распределение случайной точки $\tilde{\boldsymbol{\omega}}$ не является равномерным; соответствующая плотность распределения равна

$$f_{\tilde{\omega}}(u,v,w) = \frac{1}{4\pi\sqrt{abc}\sqrt{(u/a)^2+(v/b)^2+(w/c)^2}}, \quad (u,v,w) \in E,$$

(см. раздел П.1.3 книги [8]).

6. Моделирование анизотропных распределений на трехмерной сфере

Вернемся к замечанию 2 из раздела 3 данной статьи о том, что создание содержательных иллюстративных или прикладных примеров распределений на многомерных шарах (3.21) при $d > 3$, для которых вычислимыми моделируемыми преобразованиями оказываются переходы к гиперсферическим координатам (обратные к (3.22)), затруднено тем обстоятельством, что "угловые" переменные $\boldsymbol{\phi} = \{\phi^{(1)},\ldots,\phi^{(d-2)}\}$ не допускают компактного описания через переменные $\{x^{(1)},\ldots,x^{(d)}\}$. На самом деле описание этих углов через декартовы координаты обнаруживается уже для размерностей $d = 2$ и $d = 3$.

Так, для двумерного случая описание полярного угла ϕ из соотношения (3.5) может выглядеть как

$$\phi = \begin{cases} \arccos\dfrac{v}{\sqrt{u^2+v^2}} & \text{при} \quad v \geq 0, \\ 2\pi - \arccos\dfrac{v}{\sqrt{u^2+v^2}} & \text{иначе.} \end{cases}$$

Еще более сложным является описание азимутального угла ϕ из соотношения (3.14) для трехмерного случая.

Отметим, однако, что для того же трехмерного случая при построении описаний и моделирующих формул, основанных на соотношениях (3.14), для зенитного угла θ нам требуется выражение только для $\cos\theta$ (при этом $\sin\theta = \sqrt{1-\cos^2\theta}$, так как $\theta \in [0,\pi)$), а для этого косинуса имеется относительно компактная формула

$$\cos\theta = \frac{w}{\sqrt{u^2+v^2+w^2}}. \tag{6.1}$$

Для изотропного трехмерного случайного вектора рандомизированные азимутальный угол φ и косинус зенитного угла $\cos\tilde{\theta}$ имеют равномерные распределения на полуинтервалах $[0,2\pi)$ и $(-1,1]$ соответственно (3.18).

На практике для моделирования "анизотропных" (неравномерных) распределений в трехмерном шаре (3.13) и на соответствующей сфере для $\cos\tilde{\theta}$ вида (6.1) выбираются распределения, отличные от равномерного (при этом распределение для φ остается равномерным).

Приведем соответствующие содержательные (с точки зрения практических приложений) примеры.

Пример 5. Пусть требуется построить алгоритм численного моделирования трехмерной случайной величины (вектора) $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)})$, распределенной согласно плотности

$$f_{\boldsymbol{\xi}}(u,v,w) = \begin{cases} \dfrac{3\kappa \exp\left(\dfrac{\kappa w}{\sqrt{u^2+v^2+w^2}}\right)}{4\pi R^3 \sinh\kappa} & \text{при } (u,v,w) \in G^{(3,R)},\ \kappa = \text{const} > 0, \\ 0 \quad \text{иначе} \end{cases} \tag{6.2}$$

в трехмерном шаре (3.13).

Несложно проверить, что по аналогии с примером 2 в декартовых координатах $\{u, v, w\}$ прямое применение алгоритма 1 для моделирования рассматриваемого случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$ не дает экономичных моделирующих формул метода обратной функции распределения для всех компонент этой точки.

Переход к сферическим координатам $\{r, \phi, \theta\}$ с учетом вида обратного преобразования (3.14) и его якобиана (3.15) дает следующий вид плотности случайного вектора (3.16) и его разложения (3.17) для заданного распределения (6.2):

$$f_{(\rho,\varphi,\tilde{\theta})}(r,\phi,\theta) = \frac{3r^2\kappa e^{\kappa\cos\theta}\sin\theta}{4\pi R^3\sinh\kappa} = \left(\frac{3\,r^2}{R^3}\right)\left(\frac{1}{2\pi}\right)\left(\frac{\kappa e^{\kappa\cos\theta}\sin\theta}{2\sinh\kappa}\right),$$

где $0 \le r < R$, $0 \le \phi < 2\pi$, $0 \le \theta < \pi$.

Это означает, что компоненты случайного вектора $\left(\rho, \varphi, \tilde{\theta}\right)$, определяемого соотношением (3.16), независимы и распределены согласно элементарным плотностям; соответствующие моделирующие формулы имеют вид

$$\varphi_0 = 2\pi\alpha_1, \quad \cos\tilde{\theta}_0 = \frac{\ln\left(e^{\kappa} - e^{\kappa}\alpha_2 + e^{-\kappa}\alpha_2\right)}{\kappa}, \quad \rho_0 = R\sqrt[3]{\alpha_3},$$

где $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 \in U(0,1)$ — стандартные случайные числа.

В декартовых координатах

$$\xi_0^{(1)} = \rho_0 \sin\varphi_0 \sin\tilde{\theta}_0, \quad \xi_0^{(2)} = \rho_0 \cos\varphi_0 \sin\tilde{\theta}_0, \quad \xi_0^{(3)} = \rho_0 \cos\tilde{\theta}_0, \tag{6.3}$$

где $\sin\tilde{\theta}_0 = \sqrt{1 - \cos^2\tilde{\theta}_0}$.

Таким образом, мы показали, что согласно определению 2 преобразование декартовых координат $\{u, v, w\}$ к сферическим координатам $\{r, \phi, \theta\}$ является вычислимым моделируемым для трехмерного случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$ с распределением (6.2).

Формулы (6.3) для $\rho_0 \equiv R$ используются в работе [9] для построения специальной версии блуждания по сферам (см. предыдущий раздел данной статьи) с неравномерным распределением точек, моделируемых на сферах, которая используется при моделировании диффузии со сносом. В этой же работе [9] отмечено, что используемое здесь распределение для $\cos\tilde{\theta}$ с элементарной плотностью

$$f_{\tilde{\theta}}(\theta) = \frac{\kappa e^{\kappa\cos\theta}\sin\theta}{2\sinh\kappa}, \quad 0 \le \theta < \pi,$$

известно в англоязычной литературе под названием “распределение Мизеса — Фишера”. Описание примера 5 закончено.

Пример 6. Пусть требуется построить алгоритм численного моделирования трехмерной случайной величины (вектора) $\boldsymbol{\xi} = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)})$, распределенной согласно плотности

$$f_{\boldsymbol{\xi}}(u,v,w) = \begin{cases} \dfrac{3\,(1-c_0^2)}{4\pi R^3 \left(1 + c_0^2 - 2c_0 \dfrac{w}{\sqrt{u^2+v^2+w^2}}\right)^{3/2}} & \text{при } (u,v,w) \in G^{(3,R)}, \\ 0 \quad \text{иначе} \end{cases} \tag{6.4}$$

в трехмерном шаре (3.13).

Несложно проверить, что по аналогии с примерами 2 и 5 в декартовых координатах $\{u,v,w\}$ прямое применение алгоритма 1 для моделирования рассматриваемого случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$ не дает экономичных моделирующих формул метода обратной функции распределения для всех компонент этой точки.

Переход к сферическим координатам $\{r,\phi,\theta\}$ с учетом вида обратного преобразования (3.14) и его якобиана (3.15) дает следующий вид плотности случайного вектора (3.16) и его разложения (3.17) для заданного распределения (6.4):

$$f_{(\rho,\varphi,\tilde{\theta})}(r,\phi,\theta) = \frac{3\,(1-c_0^2)\, r^2 \sin\theta}{4\pi R^3\, (1+c_0^2 - 2c_0\cos\theta)^{3/2}} = \left(\frac{3r^2}{R^3}\right)\left(\frac{1}{2\pi}\right) f_{\tilde{\theta}}(\theta),$$

где

$$f_{\tilde{\theta}}(\theta) = \frac{(1-c_0^2)\sin\theta}{(1+c_0^2-2c_0\cos\theta)^{3/2}} \quad \text{и} \quad 0 \le r < R,\ 0 \le \phi < 2\pi,\ 0 \le \theta < \pi. \tag{6.5}$$

Это означает, что компоненты случайного вектора $\left(\rho,\varphi,\tilde{\theta}\right)$, определяемого соотношением (3.16), независимы и распределены согласно элементарным плотностям; соответствующие моделирующие формулы имеют вид

$$\varphi_0 = 2\pi\alpha_1, \quad \cos\tilde{\theta}_0 = \frac{1}{2c_0}\left[1 + c_0^2 - \left(\frac{1-c_0^2}{c_0+1-2c_0\alpha_2}\right)^2\right], \quad \rho_0 = R\sqrt[3]{\alpha_3}, \tag{6.6}$$

где $\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3 \in U(0,1)$ — стандартные случайные числа. В декартовых координатах имеем соотношения (6.3).

Таким образом, мы показали, что согласно определению 2 преобразование декартовых координат $\{u,v,w\}$ к сферическим координатам $\{r,\phi,\theta\}$ является вычислимым моделируемым для трехмерного случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$ с распределением (6.4).

Формулы (6.3), (6.6) для $\rho_0 \equiv 1$ широко используются для моделирования анизотропного рассеяния частиц (“фотонов”) при столкновении с элементами вещества в задачах переноса излучения (см., например, [1, 6]). В этих задачах рассматривается локальная сферическая система координат в каждой точке столкновения и $\tilde{\theta}$ обозначает случайный угол между направлениями прямолинейного движения фотона до и после столкновения с элементом вещества (см., например, раздел 6.2.1 книги [1]).

Для моделирования анизотропного рассеяния используется распределение (6.5), которое носит название индикатриса Хеньи — Гринстейна (см., например, раздел 1.4.1 книги [1]). Важной особенностью этого распределения является то, что математическое ожидание косинуса угла $\tilde{\theta}$ равно параметру c_0, т. е. $\mathbf{E}\cos\tilde{\theta} = c_0$. Если $c_0 \lesssim 1$, то угол $\tilde{\theta}_0$, как правило, невелик и происходит “рассеяние вперед”. Если же $c_0 \gtrsim -1$, то угол $\tilde{\theta}_0$ близок к π и моделируется “рассеяние назад” (отражение). Описание примера 6 закончено.

Заметим, что для упомянутых в примерах 5 и 6 приложений радиус ρ_0 фиксирован, и поэтому то обстоятельство, что в этих примерах для случайного радиуса ρ рассматривалось степенное (квадратичное) распределение (как в случае моделирования равномерной точки в шаре — см. формулы (4.9), (4.10)), не является принципиальным (можно было взять другие распределения — как в примерах 1, 2 и 4).

Заключение

Введено понятие вычислимого моделируемого преобразования декартовых координат для случайного вектора. Такие преобразования расширяют возможности построения эффективных (экономичных) алгоритмов численного моделирования многомерных случайных величин.

Сформулирована проблема поиска примеров конструктивных, полезных для практических применений вычислимых моделируемых преобразований декартовых координат.

В качестве содержательных иллюстративных и прикладных примеров таких преобразований рассмотрены переходы к полярным, сферическим и цилиндрическим координатам (при моделировании случайных точек, распределенных в круге, шаре и цилиндре соответственно), а также к параболическим координатам (при моделировании случайных точек, распределенных в двумерных областях с “параболическими” границами).

Благодарности. Работа выполнена в рамках государственного задания ИВМиМГ СО РАН (проект № 0315-2019-0002).

Список литературы

[1] **Михайлов Г.А., Войтишек А.В.** Численное статистическое моделирование. Методы Монте-Карло. М.: Юрайт; 2018: 371.

[2] **Box G.E.P., Muller M.E.** A note on the generation of random normal deviates. The Annals of Mathematical Statistics. 1958; 29(2):610–611.

[3] **Фихтенгольц Г.М.** Курс дифференциального и интегрального исчисления. Т. 3. М.: Физматлит; 2001: 662.

[4] **Гранштейн И.С., Рыжик И.М.** Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Гос. изд-во физ.-матем. лит.; 1963: 1100.

[5] **Михайлов Г.А.** Замечания о практически значимых алгоритмах численного статистического моделирования. Сибирский журнал вычислительной математики. 2014; 17(2):180–190.

[6] **Марчук Г.И., Михайлов Г.А., Назаралиев М.А., Дарбинян Р.А., Каргин Б.А., Елепов Б.С.** Метод Монте-Карло в атмосферной оптике. Новосибирск: Наука; 1976: 283.

[7] **Сабельфельд К.К.** Методы Монте-Карло в краевых задачах. Новосибирск: Наука; 1989: 280.

[8] **Ермаков С.М., Сипин А.С.** Метод Монте-Карло и параметрическая разделимость алгоритмов. СПб.: Изд-во СПГУ; 2014: 248.

[9] **Sabelfeld K.K.** Random walk on spheres method for solving drift — diffusion problems. Monte Carlo Methods and Applications. 2016; 22(4):265–275

Вычислительные технологии, 2020, том 25, № 6, с. 62–84. © ФИЦ ИВТ, 2020 ISSN 1560-7534
Computational Technologies, 2020, vol. 25, no. 6, pp. 62–84. © FRC ICT, 2020 eISSN 2313-691X

COMPUTATIONAL TECHNOLOGIES

DOI:10.25743/ICT.2020.25.6.004

Computable simulated transformations of the Cartesian coordinates for random vectors

Abdrazakova Angela R.[1], Voytishek Anton V.[1,2,*]

[1]Novosibirsk State University, 630090, Novosibirsk, Russia
[2]Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics SB RAS, 630090, Novosibirsk, Russia
[*]Corresponding author: Voytishek Anton V., e-mail: vav@osmf.sscc.ru
Received July 13, 2020, revised October 12, 2020, accepted October 19, 2020

Abstract

The purpose of the paper was to expand the range of efficient (economical) computer algorithms for simulation of multi-dimensional random variables.

The authors noticed that in a number of applied problems (for example, when modelling two- or three-dimensional isotropic vectors), transitions from Cartesian to other coordinate systems (for example, to polar or spherical) are effective.

In this regard, the new generalizing notation of the computable simulated transformation of Cartesian coordinates is introduced in the paper. Such transformations allow constructing effective (economical) algorithms for the numerical modelling (simulation) of multi-dimensional random variables.

The problem of finding examples of constructive and practical applications for computer simulated transformations of Cartesian coordinates is formulated.

Transitions to polar, spherical, parabolic and cylindrical coordinates are considered as illustrative examples of such transformations.

The practical applications of computable simulated transformations of Cartesian coordinates found in the scientific literature are described in detail by the authors. These applications are associated with both computer modelling (simulation) of isotropic vectors and Gaussian distribution along with the numerical solution of boundary value problems and problems of radiation transfer.

Thus, the introduced notion of the computable simulated transformations of Cartesian coordinates is quite constructive. It opens up prospects for the scientific search for new transformations of this type with the aim of using them in stochastic computer models for important processes and phenomena.

Keywords: numerical simulation of multi-dimensional distributions, transformations of random vectors, computable simulated transformation of the Cartesian coordinates.

Citation: Abdrazakova A.R., Voytishek A.V. Computable simulated transformations of the Cartesian coordinates for random vectors. Computational Technologies. 2020; 25(6):62–84. DOI:10.25743/ICT.2020.25.6.004. (In Russ.)

Acknowledgements. The work was performed within the framework of the state task for ICMaMG SB RAS (project No. 0315-2019-0002).

References

1. **Mikhailov G.A., Voytishek A.V.** Chislennoe statisticheskoe modelirovanie. Metody Monte-Karlo [Numerical statistical modelling. Monte Carlo methods]. Moscow: Youright; 2018: 371. (In Russ.)

2. **Box G.E.P., Muller M.E.** A note on the generation of random normal deviates. The Annals of Mathematical Statistics. 1958; 29(2):610–611.
3. **Fichtenholts G.M.** Kurs differentsial'nogo i integral'nogo ischisleniya. T. 3 [Course of differential and integral analysis]. Moscow: Fizmatlit; 2001: 662. (In Russ.)
4. **Granshteyn I.S., Ryzhik I.M.** Tablitsy integralov, summ, ryadov i proizvedeniy [Tables of integrals, sums, series and products]. Moscow: Gos. izdatel'stvo fiz.-matem. literatury; 1963: 1100. (In Russ.)
5. **Mikhailov G.A.** About efficient algorithms of numerical-statistical simulation. Numerical Analysis and Applications. 2014; 17(2):147–158.
6. **Marchuk G.I., Mikhailov G.A., Nazaraliev M.A., Darbinyan R.A., Kargin B.A., Elepov B.S.** Metod Monte-Karlo v atmosfernoy optike [Monte Carlo method in atmospheric optics]. Novosibirsk: Nauka; 1976: 283. (In Russ.)
7. **Sabelfeld K.K.** Metody Monte-Karlo v kraevykh zadachakh [Monte Carlo methods in boundary value problems]. Novosibirsk: Nauka; 1989: 280. (In Russ.)
8. **Ermakov S.M., Sipin A.S.** Metod Monte-Karlo i parametricheskaya razdelimost' algoritmov [Monte Carlo method and parametric separability of algorithms]. SPb.: Izdatel'stvo SPGU; 2014: 248. (In Russ.)
9. **Sabelfeld K.K.** Random walk on spheres method for solving drift — diffusion problems. Monte Carlo Methods and Applications. 2016; 22(4):265–275.