

ОЦЕНКА СКОРОСТИ СХОДИМОСТИ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ НОРМАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НА $SO(3)$ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ОРИЕНТАЦИЙ ЗЕРЕН ПОЛИКРИСТАЛЛОВ

© 2021 г. Д. В. Белявский^{1,*}, Т. И. Савёлова¹

¹ Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, 115409, Россия

*e-mail: dimabelstar@gmail.com

Поступила в редакцию 27.04.2021 г.

После доработки 04.05.2021 г.

Принята к публикации 11.05.2021 г.

В настоящее время в текстурном анализе активно применяются методы электронной микроскопии для исследования свойств и характеристик поликристаллических материалов. Для восстановления функции распределения зерен по ориентациям (ФРО) из полюсных фигур (ПФ), полученных экспериментально, используются методы аппроксимации нормальных распределений (НР) на $SO(3)$. Одним из таких методов является специализированный метод Монте-Карло. Алгоритм моделирования задается следующими величинами: параметрами данного распределения (координаты центра и 6 параметров аналога ковариационной матрицы), количеством n сверток бесконечно малых вращений, удовлетворяющих центральной предельной теореме (ЦПТ) на группе вращений трехмерного евклидова пространства $SO(3)$ и объемом выборки N из полученных приближений. Результат вычислений получается в виде матрицы вращений, из которой можно однозначно найти углы Эйлера. В данной работе исследуется точность приближений класса последовательностей, для которых справедлива центральная предельная теорема (ЦПТ-последовательностей), в смысле слабой сходимости на группе вращений $SO(3)$ для центрального нормального распределения (ЦНР) в зависимости от параметра остроты ϵ (аналога дисперсии). Была получена аналитическая оценка точности приближений метода ЦПТ-последовательностей в зависимости от параметра остроты в смысле слабой сходимости.

Ключевые слова: группа вращений $SO(3)$, Центральная предельная теорема, нормальное распределение, метод ЦПТ-последовательностей, метод Монте-Карло

DOI: 10.1134/S23044487X21030032

ВВЕДЕНИЕ

В классической теории вероятностей и математической статистике широко применяются нормальные распределения (НР). Распространение этих распределений связано с их многочисленными полезными свойствами, в частности, с тем, что при некоторых условиях НР хорошо описывают поведение суммы большого числа случайных величин. Этот важный факт в теории вероятностей называется центральной предельной теоремой (ЦПТ).

Известно, что определение НР и большинство их свойств могут быть обобщены на объекты более сложной природы. В данной работе исследуются НР на группе вращений трехмерного евклидова пространства $SO(3)$. Основной областью применения НР на $SO(3)$ на сегодняшний день является количественный текстурный анализ (КТА) [1], который необходим для выявления распределений кристаллографических ориентировок в поликри-

сталлических материалах, для изучения микро- и макротекстур. Также, моделирование НР на $SO(3)$ используется для вычисления функции распределения ориентаций и полюсных фигур, для оценки статистических характеристик текстуры в связи с развитием возможностей современной электронной микроскопии.

В работе [2] разработан специализированный метод Монте-Карло моделирования нормального распределения (НР) на группе вращений $SO(3)$, удовлетворяющего центральной предельной теореме (ЦПТ). Алгоритм моделирования задается следующими величинами: параметрами данного распределения (в общем случае их 9, это координаты “центра” g_0 и 6 параметров аналога ковариационной матрицы 3×3), количеством n сверток бесконечно малых вращений, удовлетворяющих ЦПТ на $SO(3)$, N объемом выборки из полученных приближений.

На вычисление одного вращения, являющегося приближением к НР с заданными параметрами, используется $3n$ равномерно распределенных чисел из отрезка $[0, 1]$, независимых между собой. Результат вычислений получается в виде матрицы вращений, из которой могут быть однозначно определены углы Эйлера трех поворотов.

В [3–5] проводятся численные эксперименты по исследованию свойств данного метода Монте-Карло от различных параметров НР на $SO(3)$ и даются некоторые примеры его применения в текстурном анализе. В [4] получена зависимость скорости сходимости последовательности приближений от количества сверток как $O\left(\frac{1}{n}\right)$.

В текстурном анализе существуют различные подходы к определению НР на группе $SO(3)$ (например, [6, 7]). Дается сравнение НР по свойствам и численным результатам, при этом из НР, рассматриваемых в [2], берется центральное НР, зависящее от одного параметра (кроме центра) вместо шести.

Известно ([8], с. 59), что скорость сходимости последовательностей в $\mathbb{R}^1$ относительно количества слагаемых n (аналога сверток на $SO(3)$) равна $O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)$, где константа, определяющая порядок, зависит от параметров НР.

Точность метода Монте-Карло относительно объема выборки имеет вид $l = 8$ и не зависит от размерности случайных величин [9].

В последние десятилетия в текстурном анализе широко применяются методы электронной микроскопии для изучения микротекстуры и макротекстуры поликристаллических материалов [10, 11]. При этом измеряются ориентации 10^4 – 10^8 зерен, которые подвергаются статистической обработке и вычислению различных характеристик материала (упругие свойства, пластичность и т.д.). Для изучения погрешностей измерений ориентаций отдельных зерен и дальнейшего вычисления количественных характеристик необходимо использование метода Монте-Карло для моделирования вращений на группе $SO(3)$ [10, 11].

Оценки точности нормальной аппроксимации (скорости сходимости в ЦПТ) для распределений сумм случайных величин играют важную роль во многих прикладных задачах. Такие оценки помогают осознанно принимать решения об адекватности или неадекватности нормальной модели для наблюдаемых статистических закономерностей. В настоящее время исследуются ситуации, в которых доступна лишь минимальная информация о существовании моментов второго порядка у слагаемых [12, 13] и моментов более высоких порядков [14, 15].

Для оценки точности нормальной аппроксимации распределений сумм независимых случайных величин также часто используется неравенство Берри–Эссеена ([8]):

$$\Delta_n = \sup_{x \in \mathbb{R}} \left| P\left(\frac{S_n}{\sigma\sqrt{n}} < x\right) - \Phi(x) \right| \leq A \frac{\beta}{\sigma^3\sqrt{n}},$$

где A – абсолютная положительная постоянная. Стоит отметить, что оно справедливо для любого конечного числа слагаемых.

В работе [16] рассматривается точность аппроксимации центрального нормального распределения на $SO(3)$ в зависимости от количества сверток.

В настоящей работе исследуется точность приближений в смысле слабой сходимости ЦПТ-последовательностей на группе вращений $SO(3)$ в зависимости от параметра остроты ε (аналога дисперсии).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫЕ СВЕДЕНИЯ. СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НОРМАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НА ГРУППЕ $SO(3)$

Обозначим через $g(\varphi, \theta, \psi)$, $-\pi \leq \varphi, \psi < \pi$, $0 \leq \theta \leq \pi$, углы Эйлера вращения из группы $SO(3)$, T_g – представление группы $SO(3)$,

$$A_i = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{T_{g_i}(t) - E}{t}$$

инфинитезимальные операторы представления T_{g_i} , $g_i(t)$ – система однопараметрических подгрупп $SO(3)$, α_{ij} – неотрицательно определенная матрица третьего порядка, α_i – действительные числа, $i, j = 1, 2, 3$. Вероятностная мера $\mu(g)$ называется идемпотентной, если $\mu^{*2} = \mu$, где μ^{*2} обозначает свертку распределения.

Распределение вероятностей $\mu(g)$ на группе $SO(3)$ называется нормальным [2–4], если $\mu(g)$ безгранично делимо, не является идемпотентной мерой и может быть представлено в виде

$$\int_{SO(3)} T_g d\mu(g) = \exp \left\{ \sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} A_i A_j + \sum_{i=1}^3 \alpha_i A_i \right\}. \quad (1)$$

Обозначается НР μ в виде

$$\mu \sim N \left[\begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} \right].$$

В общем случае НР определяется девятью параметрами: шестью параметрами α_{ij} (аналога дисперсии) и тремя α_i , которые характеризуют положение “центра”, $i, j = 1, 2, 3$. Если $d\mu(g)$ предста-

вить в виде ряда Фурье по элементам матричных представлений группы вращений

$$d\mu(g) = f(g)dg = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m,n=-l}^l C_{mn}^l t_{mn}^l(g)dg, \quad (2)$$

$$C_{mn}^l = (2l+1) \int_{SO(3)} f(g) \overline{t_{mn}^l(g)} dg,$$

то коэффициенты разложения C_{mn}^l однозначно определяются из уравнения (1).

Если $\alpha_{ij} = \varepsilon^2 \delta_{ij}$, $\alpha_i = 0$, $i, j = 1, 2, 3$, то получим центральное нормальное распределение [4], которое вычисляется из (1):

$$d\mu(g) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp\{-l(l+1)\varepsilon^2\} \frac{\sin(l+1/2)t}{\sin(t/2)} dg, \quad (3)$$

где

$$\cos \frac{t}{2} = \cos \frac{\theta}{2} \cos \frac{\varphi + \psi}{2}, \quad dg = \frac{1}{\pi} \sin^2 \frac{t}{2} dt.$$

Остальные НР находятся из уравнения (1) численно.

Следуя [2], для построения алгоритма вычисления НР введем параметры группы $SO(3)$. Будем рассматривать вращения в виде

$$g(\varphi, \theta, \psi) = g_1(\varphi)g_2(\theta)g_3(\psi),$$

$$-\pi \leq \varphi, \quad \psi < \pi, \quad 0 \leq \theta \leq \pi,$$

где

$$g_1(t) = \begin{pmatrix} \cos t & -\sin t & 0 \\ \sin t & \cos t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad g_2(t) = \begin{pmatrix} \cos t & 0 & -\sin t \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin t & 0 & \cos t \end{pmatrix},$$

$$g_3(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos t & -\sin t \\ 0 & \sin t & \cos t \end{pmatrix}.$$

Касательные матрицы к ним обозначим e_i , $i = 1, 2, 3$, где $e_i = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{g_i(t) - e}{t}$, e – единичная матрица.

Определим систему матриц

$$h^1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad h^2 = -\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad h^3 = -\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Алгоритм моделирования методом Монте-Карло ЦНР на группе $SO(3)$ имеет вид [4]:

$$\xi = \prod_{j=1}^n \left(\prod_{i=1}^3 h^i g_1 \left(2\sqrt{\frac{6\varepsilon^2}{n}} \left(\xi_i^j - \frac{1}{2} \right) \right) (h^i)^{-1} \right), \quad (4)$$

где ξ_i^j – независимые реализации случайной величины, равномерно распределенной на отрезке $[0, 1]$.

Результат моделирования по формуле (4) получается в виде матрицы вращения, из которой однозначно могут быть определены углы Эйлера.

В выражении (4) на получение одного вращения ξ , являющегося приближением к НР, используется $3n$ случайных чисел, равномерно распределенных на $[0, 1]$. Прделав вычисления по формуле (4) N раз, получим N случайных вращений. Получаемое приближение к НР $\mu(g) = \mu(g, \alpha_{ii}, \alpha_i)$ обозначим $\mu_n(g, \alpha_{ii}, \alpha_i)$.

Известно, что в евклидовом пространстве $\mathbb{R}^1$ точность нормальной аппроксимации распределений сумм независимых случайных величин есть $O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)$ ([8, с. 59]). Скорость сходимости метода Монте-Карло относительно объема выборки $O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)$ ([9]).

Для НР на $SO(3)$ в [2] доказано, что точность приближений в смысле слабой сходимости

$$P_n = \int_{SO(3)} f(g) (d\mu_n^{*n}(g, \alpha_{ii}, \alpha_i) - N(\|\alpha_{ii}\|, \alpha_i)) \rightarrow 0$$

при $n \rightarrow \infty$,

где $f(g) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m,n=-l}^l \tilde{C}_{mn}^l t_{mn}^l(g)$ – произвольная ограниченная суммируемая по обобщенным сферическим функциям $t_{mn}^l(g)$ на $SO(3)$ функция, где $\tilde{C}_{mn}^l$ – коэффициент, отличный от коэффициента C_{mn}^l в (2).

Рассмотрим $d\mu(g) \sim N(\|\alpha_{ii}\|, \alpha_i)$ – НР на $SO(3)$ с параметрами (α_{ij}) , (α_i) , $i, j = 1, 2, 3$

$$d\mu(g) = f(g)dg, \quad f(g) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m,n=-l}^l C_{mn}^l t_{mn}^l(g),$$

где $(C_{mn}^l) = (2l+1)(b_{mn}^l)$ – числовая матрица порядка $(2l+1) \times (2l+1)$, $l = 0, 1, 2, \dots$, $m, n = -l, -l+1, \dots, l$.

Аналогично разложим в ряд Фурье свертку

$$\mu_n^{*n}(g) = \tilde{f}(g)dg = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m,n=-l}^l \tilde{C}_{mn}^l t_{mn}^l(g),$$

где для приближения к НР могут быть вычислены коэффициенты $\tilde{C}_{mn}^l$ блочным образом

$$(\tilde{C}_{mn}^l), \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad m, n = -l, -l+1, \dots, l.$$

В [4, с. 75] доказана справедливость асимптотического разложения

$$P_n = \left[\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m,n=-l}^l C_{mn}^l (\exp A^l \cdot C^l)_{mn} \right] \frac{1}{n} + o\left(\frac{1}{n}\right), \quad (5)$$

где $A^l = \sum_{i=1}^3 \tilde{\alpha}_{ii} (\tilde{A}_i^l)^2 + \sum_{i=1}^3 \alpha_i A_i^l$,

$$C^l = \frac{1}{2} \left[\left(\sum_{i=1}^3 \alpha_i A_i^l \right)^2 + \left\{ \left(\sum_{i=1}^3 \alpha_i A_i^l \right) \left(\sum_{j=1}^3 \tilde{\alpha}_{jj} (\tilde{A}_j^l)^2 \right) - \left(\sum_{j=1}^3 \tilde{\alpha}_{jj} (\tilde{A}_j^l)^2 \right) \left(\sum_{i=1}^3 \alpha_i A_i^l \right) \right\} + \right. \\ \left. + \sum_{1 \leq i < j \leq 3} \tilde{\alpha}_{ii} \tilde{\alpha}_{jj} \left((\tilde{A}_i^l)^2 (\tilde{A}_j^l)^2 - (\tilde{A}_j^l)^2 (\tilde{A}_i^l)^2 \right) \right] - \frac{1}{5} \sum_{j=1}^3 \tilde{\alpha}_{jj}^2 (\tilde{A}_j^l)^4,$$

$\tilde{A}_i^l = T_{g_0}^l A_i^l (T_{g_0}^l)^{-1}$ — преобразованные инфинитезимальные операторы, T_g^l — представление группы $SO(3)$, $A_i = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{T_{g_i}^l(t) - E}{t}$ — матрицы инфинитезимальных операторов представлений $T_{g_i}^l$.

Таким образом, скорость сходимости ЦПТ-последовательности в методе Монте-Карло относительно количества сверток в алгоритме (4) равна $O\left(\frac{1}{n}\right)$.

Оценка погрешности относительно параметра остроты в смысле слабой сходимости

Для ЦНР оценка скорости сходимости P_n (5) имеет вид [18]:

$$d\mu_n^*(g, \varepsilon^2 \delta_{ij}, 0) - dN(\varepsilon^2 \delta_{ij}, 0) = \left(\frac{1}{n} \Delta_n + o\left(\frac{1}{n}\right) \right) dg,$$

$$\text{где } \Delta_n = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sum_{m,p=0}^l (\exp\{-l(l+1)\varepsilon^6 D^l\})_{mp} t_{mp}^l(g), \quad (6)$$

$$D^l = \begin{pmatrix} \rho_{-l} & 0 & \mu_{-l} & 0 & v_{-l} & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{-l+1} & 0 & \mu_{-l+1} & 0 & v_{-l+1} & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\mu_{-l} & 0 & \rho_{-l+2} & 0 & \mu_{-l+2} & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\mu_{-l+1} & 0 & \rho_{-l+3} & 0 & \mu_{-l+3} & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ v_{-l} & 0 & -\mu_{-l+2} & 0 & \rho_{-l+4} & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & \rho_{l-4} & 0 & \mu_{l-4} & 0 & v_{l-4} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & -\mu_{l-5} & 0 & \rho_{l-3} & 0 & \mu_{l-3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & -\mu_{l-4} & 0 & \rho_{l-2} & 0 & \mu_{l-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & v_{l-5} & 0 & -\mu_{l-3} & 0 & \rho_{l-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & v_{l-4} & 0 & -\mu_{l-2} & 0 & \rho_l \end{pmatrix}.$$

В формуле (6) элементы матрицы D^l вычисляются следующим образом:

$$\rho_p = -\frac{1}{5} p^4 - \frac{1}{40} (\alpha_{p-1}^2 \alpha_p^2 + (\alpha_p^2 + \alpha_{p+1}^2)^2 + \alpha_{p+1}^2 \alpha_{p+2}^2), \quad p = -l, \dots, l, \\ \mu_k = \frac{1}{2} (k+1) \alpha_{k+1} \alpha_{k+2}, \quad k = -l, \dots, (l-2), \\ v_s = -\frac{1}{40} \alpha_{s+1} \alpha_{s+2} \alpha_{s+3} \alpha_{s+4}, \quad s = -l, \dots, (l-4), \\ \alpha_k = \sqrt{(l+k)(l-k+1)}, \\ \text{причем } \alpha_k = \alpha_{-k+1}.$$

Для матрицы D^l находилась спектр собственных значений λ^l , и для каждого $l = 1, 2, \dots, 100$ вычислялись минимальное и максимальное значения, т.е. $\lambda_{\max}^l$ и $\lambda_{\min}^l$.

Так, для $l = 1$ и $l = 2$ имеем:

• $l = 1$:

$$D^1 = \begin{pmatrix} \rho_{-1} & 0 & \mu_{-1} \\ 0 & \rho_0 & 0 \\ -\mu_{-1} & 0 & \rho_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.4 & 0 & 0 \\ 0 & -0.4 & 0 \\ 0 & 0 & -0.4 \end{pmatrix},$$

$$\lambda_{1,2,3} = -0.4, \quad \lambda_{\max} = \lambda_{\min} = -0.4.$$

• $l = 2$:

$$D^2 = \begin{pmatrix} \rho_{-2} & 0 & \mu_{-2} & 0 & v_{-2} \\ 0 & \rho_{-1} & 0 & \mu_{-1} & 0 \\ -\mu_{-2} & 0 & \rho_0 & 0 & \mu_0 \\ 0 & -\mu_{-1} & 0 & \rho_1 & 0 \\ v_{-2} & 0 & -\mu_0 & 0 & \rho_2 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} -4.2 & 0 & -2.45 & 0 & -0.6 \\ 0 & -3.6 & 0 & 0 & 0 \\ 2.45 & 0 & -4.8 & 0 & 2.45 \\ 0 & 0 & 0 & -3.6 & 0 \\ -0.6 & 0 & -2.45 & 0 & -4.2 \end{pmatrix},$$

$$\lambda_{1,2,3,4,5} = \begin{cases} -3.6 \\ -4.8 + 3.46i \\ -4.8 - 3.46i \\ -3.6 \\ -3.6 \end{cases},$$

$$\lambda_{\max} = -3.6, \quad \lambda_{\min} = -4.8.$$

Для остальных l вычисления проводились аналогичным образом. В таблице 1 представлены полученные значения $\lambda_{\max}^l$ и $\lambda_{\min}^l$ для $l = 1, 2, \dots, 100$. Наблюдается увеличение модулей $\lambda_{\max}^l$ и $\lambda_{\min}^l$ с ростом l .

Находилась зависимость $\lambda_{\max}^l$ и $\lambda_{\min}^l$ от l в виде $C l^\beta$, где β – некоторое число.

По формулам $\log_l \frac{\lambda_{\min}^l(l)}{\lambda_{\min}^l(1)}$ для $\lambda_{\min}^l$ и $\log_l \frac{\lambda_{\max}^l(l)}{\lambda_{\max}^l(1)}$ для $\lambda_{\max}^l$ были найдены значения числа β для каждого $l = 1, 2, \dots, 100$, которые представлены в табл. 2, 3.

В качестве β бралось последнее значение логарифма, которое соответствует значению при $l = 100$. В результате получаем соотношения

$$\lambda_{\max} \sim l^{3.6235} \quad \text{и} \quad \lambda_{\min} \sim l^{3.8495}.$$

Аналитически получена оценка погрешности Δ_n (6) в зависимости от параметра остроты ϵ . Для точности приближений в смысле слабой сходимости справедливо асимптотическое разложение (5), где $A^l C^l = \epsilon^6 D^l$, матрица D^l определяется из (6).

Для собственных значений матрицы D^l введем обозначения

$$\max_{-l \leq k \leq l} \lambda_k = \overline{\lambda}_l, \quad \min_{-l \leq k \leq l} \lambda_k = \underline{\lambda}_l.$$

Получим оценку спектра матриц D^l в виде $\lambda_l = O(l^\beta)$.

Берем

$$A^l C^l = \epsilon^6 D^l = \epsilon^6 C^l \Lambda^l (C^l)^{-1},$$

$$\exp(A^l C^l) = C^l \exp(\epsilon^6 \Lambda^l) (C^l)^{-1},$$

Таблица 1. Значения минимального и максимального СЗ относительно l

	$\lambda_{\min}$	$\lambda_{\max}$
$l = 1$	-0.4	-0.4
$l = 2$	-4.8	-3.6
$l = 3$	-18	-9.6
$l = 4$	-64	-43.6
$l = 5$	-137.7	-81.6
$l = 6$	-278.4	-166.5
$l = 7$	-486.9	-289.6
$l = 8$	-854.4	-456.8
$l = 9$	-1333.2	-709.4
$l = 10$	-2029.4	-1036.2
...	...	...
$l = 99$	-1.9215×10^7	-6.7887×10^6
$l = 100$	-2.0003×10^7	-7.0632×10^6

Таблица 2. Значения β для $\lambda_{\min}$

	$\lambda_{\min}$	$\log_l \frac{\lambda_{\min}^l(l)}{\lambda_{\min}^l(1)}$
$l = 1$	-0.4	—
$l = 2$	-4.8	3.5850
$l = 3$	-18	3.4650
$l = 4$	-64	3.6610
$l = 5$	-137.7	3.6294
$l = 6$	-278.4	3.6530
$l = 7$	-486.9	3.6509
$l = 8$	-854.4	3.6869
$l = 9$	-1333.2	3.6918
$l = 10$	-2029.4	3.7053
...	...	...
$l = 99$	-1.9215×10^7	3.8492
$l = 100$	-2.0003×10^7	3.8495

где C^l – ортогональная матрица из собственных векторов D^l , Λ^l – диагональная матрица из собственных значений $\lambda_k^l, k = -l, -l+1, \dots, l$.

Из $P_n = \frac{1}{n} \Delta_n + o\left(\frac{1}{n}\right)$ получаем

$$\Delta_n = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp(-l(l+1)\epsilon^2) \begin{cases} \exp(-\epsilon^4 \overline{\lambda}_l) \\ \exp(-\epsilon^4 \underline{\lambda}_l) \end{cases}, \quad (8)$$

$$\Delta_n \sim \int_0^{+\infty} x e^{-\epsilon^2 x^2} \epsilon^4 x^\beta dx = \Gamma\left(\frac{\beta}{2} + 1\right) \epsilon^{2-\beta}.$$

Таблица 3. Значения β для $\lambda_{\max}$

	$\lambda_{\max}$	$\log_l \frac{\lambda_{\max}(l)}{\lambda_{\max}(1)}$
$l = 1$	-0.4	—
$l = 2$	-3.6	3.1699
$l = 3$	-9.6	2.8928
$l = 4$	-43.6	3.3841
$l = 5$	-81.6	3.3043
$l = 6$	-166.5	3.3661
$l = 7$	-289.6	3.3839
$l = 8$	-456.8	3.3858
$l = 9$	-709.4	3.4046
$l = 10$	-1036.2	3.4134
...	...	...
$l = 99$	-6.7887×10^6	3.6228
$l = 100$	-7.0632×10^6	3.6235

Таблица 4. Значения погрешности Δ_n относительно параметра остроты ε

ε	1	1/2	1/4	1/8	1/16	1/32
$\Delta_n(\lambda_l)$	1	3.60	12.99	46.80	168.66	607.82
$\Delta_n(\bar{\lambda}_l)$	1	3.02	9.49	29.25	90.13	277.72

По данной формуле без учета константы для найденных β имеем следующие значения (табл. 4):

Были получены уточнения оценки для различных групп остроты: $\varepsilon \geq 1$, $0.1 \leq \varepsilon < 1$, $0.05 \leq \varepsilon < 0.1$,

$0.03 \leq \varepsilon < 0.05$, $\varepsilon < 0.03$, где l ограничивается по формуле ([19], с. 78)

$$l_{\max} \approx \frac{\sqrt{-\ln \delta}}{\varepsilon},$$

$\delta = 10^{-3}$ – погрешность вычисления.

Для каждого диапазона параметра остроты ε находилось свое значение $l_{\max}$, для которого вычислялись коэффициенты $\beta_{\min} = \log_l \frac{\lambda_{\min}(l)}{\lambda_{\min}(1)}$ и

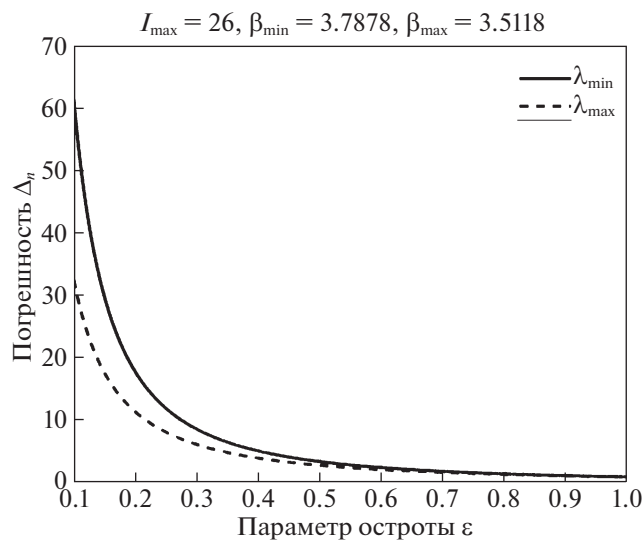
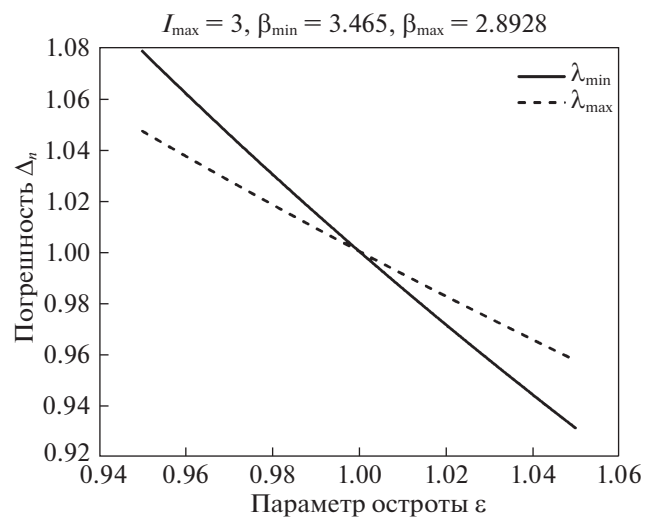
$\beta_{\max} = \log_l \frac{\lambda_{\max}(l)}{\lambda_{\max}(1)}$, и с помощью формулы (10) графически представлены оценки Δ_n для каждой группы ε .

На рис. 1–3 графики зависимости погрешности Δ_n от параметра остроты ε монотонно убывают. До значения $\varepsilon = 1$ график, соответствующий $\lambda_{\min}$, расположен выше графика для $\lambda_{\max}$. Однако, в точке $\Delta_n = 1$, $\varepsilon = 1$ кривые пересекаются (рис. 2) и меняют свое расположение относительно друг друга (рис. 3). Также, из расчетов видно, что при уменьшении ε увеличиваются значения $l_{\max}$, $\beta_{\min}$, $\beta_{\max}$.

Найдена зависимость β от ε (рис. 4). Графики представляют собой ломаные. Наблюдается нисходящий тренд. График, соответствующий $\beta_{\min}$, расположен выше, чем график, соответствующий $\beta_{\max}$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для оценки скорости слабой сходимости метода ЦПТ-последовательностей при моделировании ориентаций в зависимости от параметра

**Рис. 1.** Зависимость $\Delta_n(\varepsilon)$ для ε от 0.1 до 1.**Рис. 2.** Зависимость $\Delta_n(\varepsilon)$ для ε от 0.95 до 1.05.

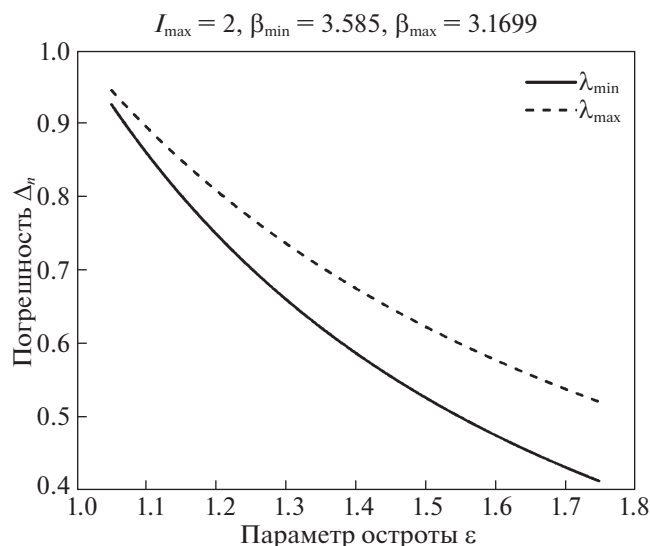


Рис. 3. Зависимость $\Delta_n(\epsilon)$ для ϵ от 1.05 до 1.75.

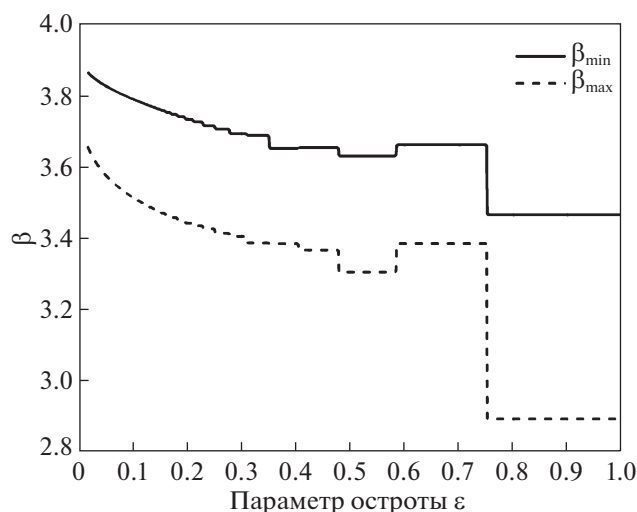


Рис. 4. Зависимость β от ϵ .

остроты ϵ в среднем получена оценка спектра матриц $D^l \sim \lambda_l = O(l^\beta)$:

$$\lambda_{\min} \sim \beta = 3.8495 \quad \text{и} \quad \lambda_{\max} \sim \beta = 3.6235,$$

где $\beta = \log_l \frac{\lambda_{\min}(l)}{\lambda_{\min}(1)}$ и $\beta = \log_l \frac{\lambda_{\max}(l)}{\lambda_{\max}(1)}$ при $l = 100$.

Построены графические зависимости $\beta_{\min}$ и $\beta_{\max}$ от параметра остроты ϵ . Получена аналитическая оценка точности приближений метода ЦПТ-последовательностей от параметра остроты:

$$\Delta_n = C\epsilon^{2-\beta}.$$

Найденная зависимость была исследована на различных участках параметра ϵ для монокристаллов ($\epsilon < 0.03$), поликристаллов ($0.1 \leq \epsilon < 1$,

$0.05 \leq \epsilon < 0.1$, $0.03 \leq \epsilon < 0.05$) и порошка ($\epsilon \geq 1$) и для каждой группы получены уточнения для параметров $l_{\max}$, $\beta_{\min}$, $\beta_{\max}$. Моделирование НР на SO(3) используется для вычисления функции распределения ориентаций и полюсных фигур для оценки статистических характеристик текстуры в связи с развитием возможностей современной электронной микроскопии ([10, 11, 20, 21]). Ошибки измерений ориентировок зерен поликристаллов оцениваются 1^0 – 5^0 [11]. Учитывая другие аспекты эксперимента, вносящие погрешности в измерения (зависимость ориентаций, неиндексируемые ориентировки, трудности определения границ зерен и т.д.), полагаем, что вычисление НР с рассмотренной точностью аппроксимации вполне удовлетворяет достигнутому уровню погрешности исходных данных.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Иванкина Т.И., Маттис З. О развитии количественного текстурного анализа и применении его в решении задач наук о Земле. Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2015. Т. 46. № 3. С. 665–768.
2. Боровков М.В., Савёлова Т.И. Вычисление нормальных распределений на группе вращений методом Монте-Карло. Журн. вычислительной математики и математической физики. 2002. Т. 42. № 1. С. 112–128.
3. Borovkov M., Savyolova T. The Computational Approaches to Calculate Normal Distributions on the Rotation Group. J. Appl. Crystallogr. 2007. V. 40. P. 449–455.
4. Боровков М.В., Савёлова Т.И. Нормальные распределения на SO(3). М.: МИФИ, 2002. 94 с.
5. Савёлова Т.И., Коренькова Е.Ф. Оценка точности некоторых статистических характеристик в текстурном анализе. Зав. лаб. 2006. Т. 72. № 12. С. 29–34.
6. Shaeben H. A Unified View of Methods to Resolve the Inverse Problem of Texture Geometry. Textures and Microstructures, 1996. V. 25. P. 171–181.
7. Qiu Y. Isotropic Distributions for 3-Dimensional Rotations and One-Sample Bayes Inference. Graduate Thesis and Dissertation, 2013. Paper 13007.
8. Фролов А.Н. Предельные теоремы теории вероятностей. СПбГУ, 2014. 152 с.
9. Ермаков С.М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. М.: Наука, 1975. 471 с.
10. Randle V., Engler O. Introduction to texture analysis: macrotexture, microtexture and orientation mapping. 2nd ed. Boca Raton, CRC Press, 2010. 488 с.
11. Ram F., Zaefferer S., Jäpel T., Raabe D. Error analysis of the crystal orientation and disorientation obtained by the classical electron backscatter diffraction technique. J. Appl. Crystallogr. 2015. V. 48. P. 1–17.
12. Королёв В.Ю., Дорофеева А.В. О неравномерных оценках точности нормальной аппроксимации для распределений некоторых случайных сумм при

- ослабленных моментных условиях. Информ. и ее примен. 2018. Т. 12. № 4. С. 86–91.
13. Korolev V., Dorofeeva A. Bounds of the accuracy of the normal approximation to the distributions of random sums under relaxed moment conditions. Lithuanian Mathematical Journal. 2017. V. 57. № 1. P. 38–58.
 14. Fan X. Exact rates of convergence in some martingale central limit theorems. Journal of Mathematical Analysis and Applications, 2018.
 15. Sunklodas J.K. On the rate of convergence in the global central limit theorem for random sums of independent random variables. Lithuanian Mathematical Journal. 2017. V. 57. № 2. P. 244–258.
 16. Белявский Д.В., Савёлова Т.И. Оценка точности приближений ЦПТ-последовательностей для нормальных распределений на SO(3). Вестник НИЯУ МИФИ. 2019. Т. 8. № 2. С. 188–194.
 17. Савёлова Т.И., Иванова Т.М., Сыпченко М.В. Методы решения некорректных задач текстурного анализа и их приложения. М.: НИЯУ МИФИ, 2012. 268 с.
 18. Савёлова Т.И., Сыпченко М.В., Коренькова Е.Ф. Оценки точности статистических характеристик нормальных распределений на группе вращений SO(3): Препринт 002-2006. М.: МИФИ, 2006. 32 с.
 19. Савёлова Т.И., Бухарова Т.И. Представления группы SU(2) и их применение. М.: МИФИ, 1996. 114 с.
 20. Антонова А.О., Савёлова Т.И. Исследование методами электронной микроскопии влияния параметров эксперимента на вычисление полюсных фигур поликристаллических материалов. Кристаллография. 2016. Т. 61. № 3. С. 495–503.
 21. Antonova A.O., Dzhumaev P.S., Savyolova T.I. Study of EBSD Experiment Parameters Influence on Computation of Polycrystalline Pole Figures and Orientation Distribution Function. MATEC Web of Conferences (ICMIE), 2016. V. 75. 09007.

Vestnik Natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta "MIFI", 2021, vol. 10, no. 3, pp. 230–238

Estimate of the Convergence Rate of Monte Carlo Method for Normal Distribution on SO(3) when Modeling the Orientations of Polycrystal Grains

D. V. Belyavskiy^{a,*} and T. I. Savyolova^a

^a National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia

*e-mail: dimabelstar@gmail.com

Received April 27, 2021; revised May 4, 2021; accepted May 11, 2021

Abstract—The electron microscopy method is actively applied in texture analysis to study the properties and characteristics of polycrystalline materials. To reconstruct the orientation distribution function from the experimentally obtained pole figures, methods of approximation of the normal distributions on SO(3) are used. One of these methods is the specialized Monte Carlo method. The modeling algorithm is specified by the following values: parameters of a given distribution (coordinates of the center and 6 parameters of an analogue of the covariance matrix), the number of n convolutions of infinitesimal rotations satisfying the central limit theorem (CLT) on the rotation group of the three-dimensional Euclidean space SO(3) and the sample size N from the obtained approximations. The result of the calculations is obtained in the form of rotation matrices, from which the Euler angles can be uniquely determined. The accuracy of approximations of the class of sequences for which the central limit theorem is valid (CLT sequences) has been studied on the three-dimensional rotation group SO(3) depending on the parameters. The dependence of the central normal distribution on the sharpness parameter ε (analogue of the standard deviation) has been studied. Orientations for the central normal distribution have been simulated by the specialized Monte Carlo method. An analytical estimate has been obtained of the accuracy of the approximations of the method of CLT sequences depending on the sharpness parameter in the sense of weak convergence.

Keywords: rotation group SO(3), central limit theorem, normal distribution, Monte Carlo method

DOI: 10.1134/S2304487X21030032

REFERENCES

1. Ivankina T.I., Matthies S. O razviti kolichestvennogo teksturnogo analiza i primeneni ego v reshenii zadach nauk o Zemle [On the development of the quantitative texture analysis and its application in solving problems of the Earth sciences]. *Physics of Particles and Nuclei*, 2015. vol. 46. no. 3. pp. 665–768. (in Russian)
2. Borovkov M.V., Savyolova T.I. Vychislenie normalnyh raspredeleniy na grupe vrashcheniy metodom Monte-Karlo [Calculation of normal distributions on a group

- of rotations by the Monte Carlo method]. *Comput. Math. Math. Phys.*, 2002, vol. 42, no. 1, pp. 112–128. (in Russian)
3. Borovkov M., Savyolova T. The Computational Approaches to Calculate Normal Distributions on the Rotation Group. *J. Appl. Crystallogr.*, 2007, vol. 40, pp. 449–455.
 4. Borovkov M.V., Savyolova T.I. *Normalnye raspredeleniya na SO(3)* [Normal distributions on SO(3)]. Moscow, National Research Nuclear University MEPhI Publ., 2002. 94 p.
 5. Savyolova T.I., Korenkova E.F. Otsenka tochnosti nekotorykh statisticheskikh harakteristik v teksturnom analize [Estimation of the accuracy of some statistical characteristics in texture analysis]. *Zav. lab.*, 2006. vol. 72. no. 12. pp. 29–34. (in Russian)
 6. Shaeben H. A Unified View of Methods to Resolve the Inverse Problem of Texture Geometry. *Textures and Microstructures*, 1996, vol. 25. pp. 171–181.
 7. Qiu Y. Isotropic Distributions for 3-Dimension Rotations and One-Sample Bayes Inference. *Graduate Thesis and Dissertation*, 2013. Paper 13007.
 8. Frolov A.N. *Predelnye teoremy teorii veroyatnostey* [Limit theorems of probability theory]. Saint-Petersburg University Publ., 2014. 152 p.
 9. Ermakov S.M. *Metod Monte-Karlo i smezhnye voprosy* [Monte Carlo method and related issues]. Moscow, Nauka Publ., 1975. 471 p.
 10. Randle V., Engler O. *Introduction to texture analysis: macrotexture, microtexture and orientation mapping. 2nd ed.* Boca Raton, CRC Press, 2010. 488 p.
 11. Ram F., Zaefferer S., Jäpel T., Raabe D. Error analysis of the crystal orientation and disorientation obtained by the classical electron backscatter diffraction technique. *J. Appl. Crystallogr.*, 2015, vol. 48, pp. 1–17.
 12. Korolev V., Dorofeeva A. O neravnomernykh otsenka-kh tochnosti normalnoy approksimatsii dlya raspredeleniy nekotorykh sluchaynykh summ pri oslablennykh momentnykh usloviyakh [On nonuniform estimates of accuracy of normal approximation for distributions of some random sums under relaxed moment conditions]. *Inform. Primen.*, 2018. vol. 12. no. 4. pp. 86–91. (in Russian)
 13. Korolev V., Dorofeeva A. Bounds of the accuracy of the normal approximation to the distributions of random sums under relaxed moment conditions. *Lithuanian Mathematical Journal*, 2017. vol. 57. no. 1. pp. 38–58.
 14. Fan X. Exact rates of convergence in some martingale central limit theorems. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 2018.
 15. Sunklodas J.K. On the rate of convergence in the global central limit theorem for random sums of independent random variables. *Lithuanian Mathematical Journal*, 2017. vol. 57. no. 2. pp. 244–258.
 16. Belyavskiy D.V., Savyolova T.I. Otsenka tochnosti priblizheniy TsPT-posledovatelnoctey dlya normalnykh raspredeleniy na SO(3) [Estimation of Accuracy of CLT-Sequence Approximations for Normal Distributions on SO(3)]. *Vestnik NIYaU MIFI*, 2019, vol. 8, no. 2, pp. 188–194. (in Russian)
 17. Savyolova T.I., Ivanova T.M., Sypchenko M.V. *Metody resheniya nekorrektnykh zadach teksturnogo analiza i ih prilozheniya* [Methods of solving incorrect problems of texture analysis and their applications]. Moscow, National Research Nuclear University MEPhI Publ., 2012. 268 p.
 18. Savyolova T.I., Sypchenko M.V., Korenkova E.F. *Otsenki tochnosti statisticheskikh kharakteristik normalnykh raspredeleniy na grappe vrashcheniy SO(3)* [Estimation of the accuracy of statistical characteristics for normal distributions on the rotation group SO(3)]. Preprint 002-2006. Moscow, National Research Nuclear University MEPhI Publ., 2006. 32 p.
 19. Savyolova T.I., Buharova T.I. *Predstavleniya gruppy SU(2) i ikh primeneniye* [Representations of the SU (2) group and their application]. Moscow, National Research Nuclear University MEPhI Publ., 1996. 114 p.
 20. Antonova A.O., Savyolova T.I. Issledovanie metodami elektronnoy mikroskopii vliyaniya parametrov eksperimenta na vychislenie polyusnykh figur polikristallicheskikh materialov [Investigation by electron microscopy of the influence of experimental parameters on the calculation of pole figures of polycrystalline materials]. *Kristallografiya*, 2016, vol. 61, no. 3, pp. 495–503. (in Russian)
 21. Antonova A.O., Dzhumaev P.S., Savyolova T.I. Study of EBSD Experiment Parameters Influence on Computation of Polycrystalline Pole Figures and Orientation Distribution Function. *MATEC Web of Conferences (ICMIE)*, 2016, vol. 75, 09007.