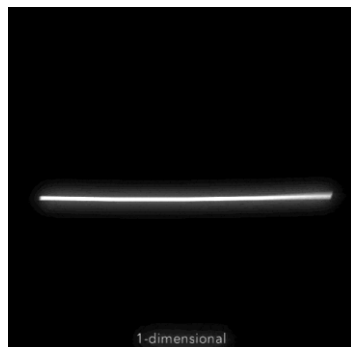


课程主页: <http://staff.ustc.edu.cn/~ynyang/vector>

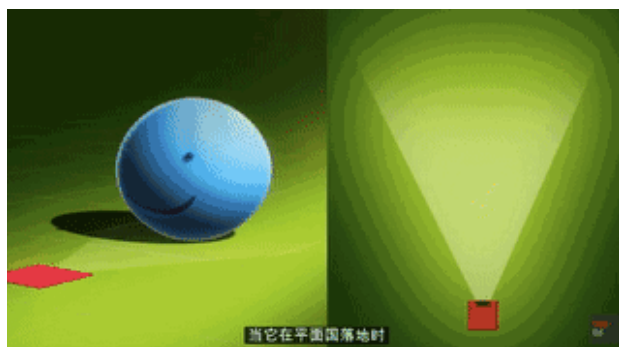
第二讲 球对称分布

2024.2.28

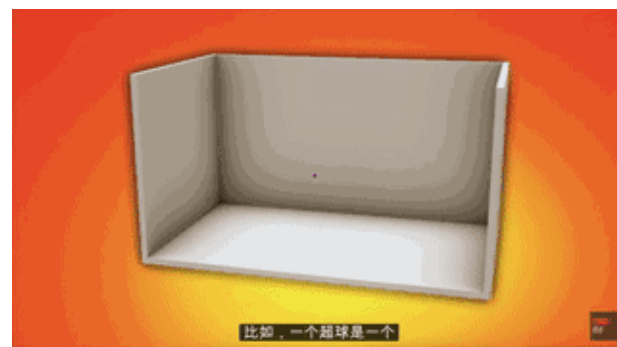
球面均匀分布是球面上唯一正交变换下不变的分布



展开立方体



穿越2维平面的三维球



穿越3维空间的四维球

<https://www.zhihu.com/zvideo/1409650387691003904>

第一讲定理1给出了 n 维欧氏空间中单位球面 S^{n-1} 上的均匀分布的边际概率密度，在某种意义上描述了球面的几何性质。边际概率密度或其它概率运算最好能给出显式数学表达（如定理1），也可以用蒙特卡洛方法模拟计算，两者互相印证。

关于 $n = 5$ 降维打击:

$$\mathbf{u} \sim U(S^4) \subset R^5 \Rightarrow \mathbf{u}_{[1:3]} \sim U(B^3)$$

我们隐含假设了星体都是球形的，生物生活在球表面。

- 引力本质是空间的弯曲（球面，非欧几何）
- 球形：旋转不变，各向同性

摘自网络杂志“Aeon”科普文章“Radical dimensions” by Margaret Wertheim:

<https://aeon.co/essays/how-many-dimensions-are-there-and-what-do-they-do-to-reality>

弦理论还有一个值得关注的发展。1999年，丽莎·兰德尔（Lisa Randall，第一位在哈佛大学获得终身教职的理论物理学家）和拉曼·桑德拉姆（Raman Sundrum，一位印度裔美国粒子理论家）提出，在广义相对论所描述的宇宙学尺度上，可能存在一个额外的维度。根据他们的“brane”理论——“brane”是“膜”的缩写——我们通常所指的宇宙可能嵌在一个更大的五维空间，一种超级宇宙中。在这个超级空间中，我们的宇宙可能只是众多平行宇宙中的一个，它们每一个都是一个独立的四维气泡，位于更广阔的五维空间里。

我们知道几何概率常常会出现悖论（比如Betrand paradox），这与均匀或随机的理解或定义的不同有关，也与球面上均匀分布没有概率密度有关。我们将利用球对称分布（比如标准正态分布）给出球面均匀分布随机向量的随机表示（并将以此为工具证明第一讲定理1）。

本次课：首先得到正态分布的以 χ 分布和球面均匀分布的正交随机表示刻画；将 χ 分布推广，得到一般的正交不变分布的刻画；在仿射变换下得到椭球对称分布，包括多元(椭球)正态。

惯例：

虚线框内容可忽略；

附录内容课忽略；

符号表示：

向量/随机向量：黑正体小写字母， $\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}$

变量/随机变量：斜体小写字母， x, θ （有时也用大写字母）

矩阵：大写字母， X

多元标准正态与 χ 、 χ^2 分布

标准正态

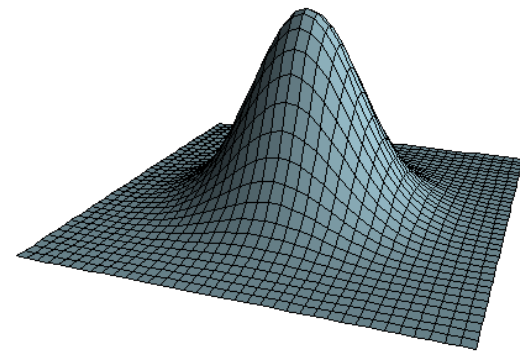
多元标准正态分布： $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)^\top \sim N_n(0, I_n) \Leftrightarrow x_1, \dots, x_n \text{ iid} \sim N(0, 1)$

\Leftrightarrow 概率密度函数： $p(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{x}^\top \mathbf{x}\right)$

球对称

$\mathbf{x} \sim N_n(0, I_n)$ 的密度仅与模长 $\|\mathbf{x}\|$ 有关，

对任何 \forall 正交阵 H ， $H\mathbf{x} \stackrel{d}{=} \mathbf{x}$ ，即 \mathbf{x} 的分布是正交旋转不变的，或球对称的。



卡方分布

若 $\mathbf{x} \sim N_n(0, I_n)$ ，称 $\|\mathbf{x}\|^2$ 服从自由度为 n 的卡方分布， $\|\mathbf{x}\|^2 \sim \chi_n^2$ ， $\|\mathbf{x}\|$ 服从 χ_n 分布。

$$R^n \text{球面面积: } A = \frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)} r^{n-1},$$

$$R^n \text{球的体积: } V = Ar/n = \frac{2\pi^{n/2}}{n\Gamma(n/2)} r^n.$$

下面求 χ_n 的分布（由此立得 χ_n^2 的分布）

解： \mathbf{x} 的密度 $f(\mathbf{x}) = \exp(-\|\mathbf{x}\|^2/2)/(2\pi)^{n/2}$.

半径 r 到 $r + \Delta r$ 的球壳体积为 $\Delta V = |S^{n-1}(r)| \Delta r = \frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)} r^{n-1} \Delta r$,

其中 $|S^{n-1}(r)| = \frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)} r^{n-1}$ 为球面面积,所以球壳上的概率质量为

$$f(\mathbf{x})\Delta V = f(\mathbf{x}) \times \frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)} r^{n-1} \Delta r = \frac{1}{2^{n/2-1}\Gamma(n/2)} r^{n-1} e^{-r^2/2} \Delta r = p_{\chi_n}(r)\Delta r$$

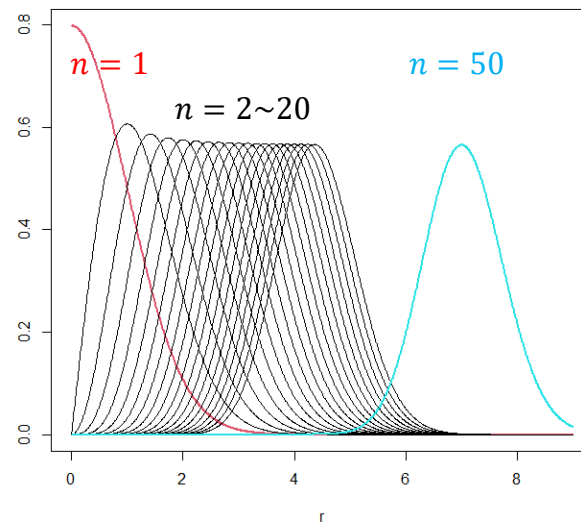
所以 $p_{\chi_n} = \frac{1}{2^{n/2-1}\Gamma(n/2)} r^{n-1} e^{-r^2/2}$ 。

注：也可用球坐标方法（参见定理2）

χ_n 的概率密度:

$$p_{\chi_n}(r) = \frac{1}{2^{n/2-1}\Gamma(n/2)} r^{n-1} e^{-r^2/2}, r > 0$$

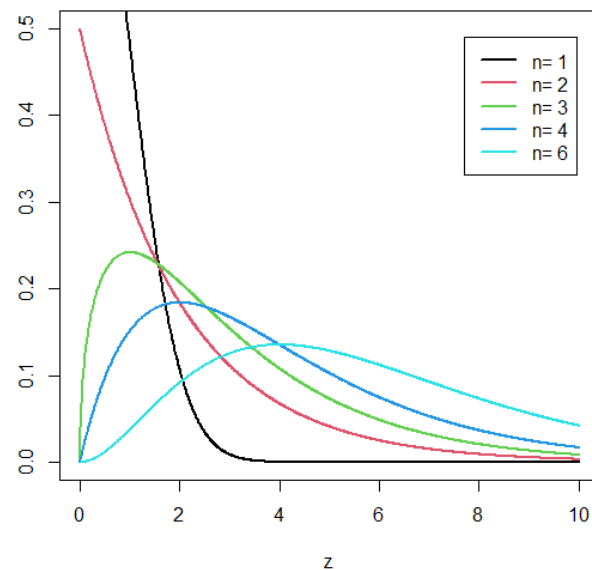
- $n = 1$ 时, 密度单调下降;
- $n \geq 2$ 时, 单峰分布, 众数 $\text{mode} = \sqrt{n-1}$;
- 当 n 较大, 密度形状几乎相同, n 变化时密度几乎平移不变 (方差近似相同)。后面将证明 $\chi_n \approx N(\sqrt{n-1}, 1/2)$ 。



χ_n^2 的概率密度:

$$p_{\chi_n^2}(z) = \frac{1}{2^{n/2}\Gamma(n/2)} z^{n/2-1} e^{-z/2}, z > 0.$$

- $n = 1, 2$ 时, 密度单调下降;
- $n = 2$ 时, χ_2^2 是指数分布 (参数 $1/2$);
- $n \geq 3$ 时, 单峰分布, 众数 $\text{mode} = n - 2$ 。

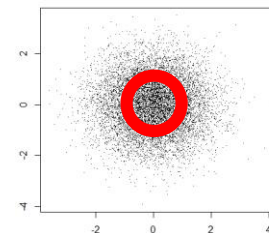


众数 mode

$$\text{mode}(\chi_n) = \sqrt{n-1}, \quad n \geq 2;$$

$$\text{mode}(\chi_n^2) = n-2, \quad n \geq 3。$$

注： $\mathbf{x} \sim N_n(0, I_n)$ ， $n > 1$ 时，考虑到原点的距离， \mathbf{x} 最大可能落在半径为 $\sqrt{n-1}$ 的球面上。对于二元标准正态，单位圆上数据点最多。



均值方差

- $E(\chi_n) = \sqrt{2}\Gamma(n/2)/\Gamma((n-1)/2)$, $\text{var}(\chi_n) = (n-1) - (E\chi_n)^2$
 $n \rightarrow \infty$ 时, $E(\chi_n) \approx \sqrt{n-1}$, $\text{var}(\chi_n) \approx 1/2$.
- $E(\chi_n^2) = n$, $\text{var}(\chi_n^2) = 2n$

记号说明:

- $E(\chi_n)$ 表示 χ_n 分布的期望, 完整的表达为“ $E(X), X \sim \chi_n$ ”
- “ $\chi_n^2 \approx N(n, 2n)$ ”即“若 $X \sim \chi_n^2$, 则近似地 $X \sim N(n, 2n)$ ”

Gamma 与 χ^2 分布

$\frac{1}{2}\chi_n^2 \stackrel{d}{=} \text{Gamma}(n/2)$ 分布, 其中Gamma(α)分布: $p(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} t^{\alpha-1} e^{-t}$,

$\chi_n^2 \stackrel{d}{=} \text{Gamma}(n/2, 1/2)$ 分布, 其中Gamma(α, λ): $p(t) = \frac{\lambda^\alpha}{\Gamma(\alpha)} t^{\alpha-1} e^{-\lambda t}$

分布近似

$n \rightarrow \infty$ 时, $\chi_n^2 \approx N(n, 2n)$; $\chi_n \approx N(\sqrt{n-1}, 1/2)$,
其中“ \approx ”表示两端的分布近似相同。

n 个独立标准正态随机变量的平方和 $\sum_{i=1}^n z_i^2 \sim \chi_n^2$, 其中 $z_i \text{ iid} \sim N(0,1)$,
由中心极限定理

$$\frac{\sum_{i=1}^n z_i^2 - n}{\sqrt{2n}} \xrightarrow{d} N(0,1), \quad n \rightarrow \infty$$

换言之, $\chi_n^2 \approx N(n, 2n)$ 。由delta方法, $\chi_n \approx N(\sqrt{n-1}, 1/2)$ 。

注： $\chi_n \approx N(\sqrt{n-1}, 1/2)$ 这一近似令人吃惊：
 若 $\mathbf{x} \sim N_n(0, I_n)$ ，则其模长 $\|\mathbf{x}\|$ 近似地有相同形状的分
 布，形状与维数无关： $\|\mathbf{x}\| \approx N\left(\sqrt{n-1}, \frac{1}{2}\right)$ 。

由上述近似正态结果可知，若 $\mathbf{x} \sim N_n(0, I_n)$ ，则

$$P(\sqrt{n-1}-1.38 \leq \|\mathbf{x}\| \leq \sqrt{n-1}+1.38) \approx 0.95,$$

其中 $1.38 = 1.96/\sqrt{2}$ 。

所以

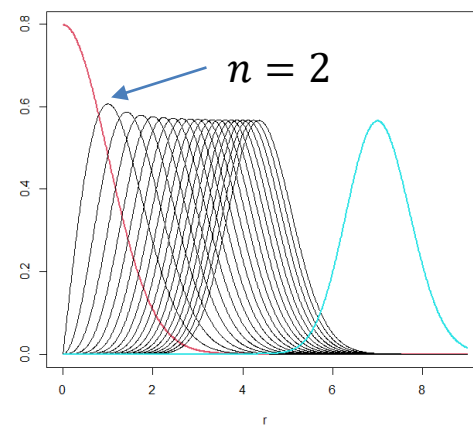
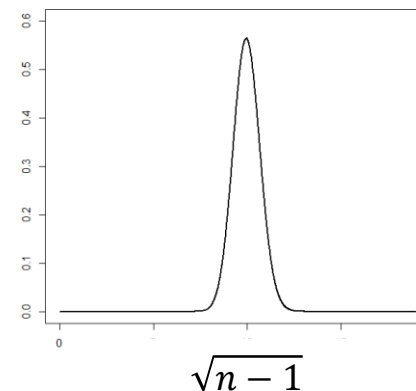
- n 较大时， $N_n(0, I_n)$ 的约95%的概率质量集中在半径 $\sqrt{n-1}$ ，厚度为2.76的球台上。

- 更令人吃惊的是，即使 $n=2$ ， χ_2 已经接近正态：

$$P(\sqrt{2-1}-1.38 \leq \|\mathbf{x}\| \leq \sqrt{2-1}+1.38) = 0.941,$$

(参见 χ_n 分布概率密度图)

$$\|\mathbf{x}\| \approx N(\sqrt{n-1}, 1/2)$$



球对称分布

定义(球对称分布). 若对任何正交矩阵 H , $H\mathbf{x} \stackrel{d}{=} \mathbf{x}$, 则称 \mathbf{x} 服从球对称分布 (或正交不变分布)。

其它名称: 球对称/球等高/正交不变/旋转不变分布, Spherically symmetric distribution, spherically contoured distribution, orthogonally invariant distribution, rotationally invariant distribution

命题1. 若 \mathbf{x} 有概率密度函数 $f(\mathbf{x})$, 且 $f(\mathbf{x})$ 仅依赖于 $\|\mathbf{x}\|$, 即存在一元函数 h 使得

$$f(\mathbf{x}) = h(\|\mathbf{x}\|)$$

则 \mathbf{x} 服从球对称分布。

球对称分布的例子:

□ R^1 中的球对称分布: 0对称分布 (1阶正交矩阵只有1和-1)。

□ $N_n(0, \sigma^2 I_n)$, $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{n/2}} e^{-\|\mathbf{x}\|^2/2\sigma^2}$

□ $U(B^n(r))$, $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{|B^n(r)|} = \frac{\Gamma(1+n/2)}{\pi^{n/2} r^n}$, $\|\mathbf{x}\| \leq r$

□ $U(S^{n-1})$ (无密度, 命题2)

其它球对称分布的例子:

□ n 元 t 分布(自由度 k):

$$f(\mathbf{x}) = \frac{\Gamma((n+k)/2)}{(k\pi)^{n/2}\Gamma(k/2)} \left(1 + \frac{\|\mathbf{x}\|^2}{k}\right)^{-(n+k)/2}, \quad \mathbf{x} \in R^n$$

($n = 1$ 时为一元student's t 分布; $k = 1$ 时为 n 元Cauchy分布)

□ n 元Cauchy分布:

$$f(\mathbf{x}) = \frac{\Gamma((n+1)/2)}{\pi^{(n+1)/2}} (1 + \|\mathbf{x}\|^2)^{-(n+1)/2}$$

同分布
等号

同分布操作需要小心, 比如 $\mathbf{x} \stackrel{d}{=} \mathbf{y}$ 蕴含 $\mathbf{x} + \mathbf{c} \stackrel{d}{=} \mathbf{y} + \mathbf{c}$ (常数 \mathbf{c}), 但未必蕴含 $\mathbf{x} + \mathbf{z} \stackrel{d}{=} \mathbf{y} + \mathbf{z}$ (随机变量 \mathbf{z})

引理1: 若随机向量 $\mathbf{x} \stackrel{d}{=} \mathbf{y}$, 则 $g(\mathbf{x}) \stackrel{d}{=} g(\mathbf{y})$, 其中 g 是任一(可测)向量函数。

特别地, $x_i \stackrel{d}{=} y_i$, $x_i x_j \stackrel{d}{=} y_i y_j$.

若 \mathbf{x} 服从球对称分布，直观上 \mathbf{x} 应等可能地/均匀地分布在各个方向上，我们将在定理2给出严格证明。首先看一个例子：

例1（一元球对称分布）。

（1）若 $P(x = 0) = 0$ ，且 x 服从关于0点的一元对称分布，即 $x \stackrel{d}{=} -x$ ，则 $u = x/|x|$ 与 $|x|$ 独立，且 $u \sim U\{\pm 1\}$ 。

（2） x 服从关于0点的一元对称分布 \Leftrightarrow 对任何 $u \sim U\{\pm 1\}$ ， $u \perp |x|$ ，有 $x \stackrel{d}{=} |x|u$

证明：（1）.由对称性 $P(u = 1) = P(x > 0) = \frac{1}{2} = P(x < 0) = P(u = -1)$ ，另外 $P(|x| \leq t, u = 1) = P(0 < x \leq t) = \frac{1}{2}P(|x| \leq t) = P(u = -1) \times P(|x| \leq t)$ ，所以 u 与 $|x|$ 独立。

例2. 假设 $x, y \text{ iid} \sim N(0,1)$ ， $u = y/|y| \sim U\{\pm 1\}$ ，由例1， x 与 x/u 同分布，则 $\frac{x}{y}$ 与 $\frac{x}{|y|}$ 同分布，这是因为

$$\frac{x}{y} = \frac{x}{|y|u} = \frac{x/u}{|y|} \stackrel{d}{=} \frac{x}{|y|}$$

该共同分布为 t_1 或Cauchy分布。

命题2: 若 \mathbf{x} 服从球对称分布, 则 \mathbf{x} 各个分量同分布, 且

$$E(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \text{var}(\mathbf{x}) = \sigma^2 I_n$$

证明: 因为置换变换是正交变换, 所以 \mathbf{x} 各个分量同分布, 方差相同; 因为反射(reflection: $x \rightarrow -x$)是正交变换, 我们有
 $x_i \stackrel{d}{=} -x_i, x_i x_j \stackrel{d}{=} -x_i x_j$, 从而 $E(x_i) = 0, \text{cov}(x_i, x_j) = 0$.

命题3. \mathbf{x} 服从球对称分布 $\Leftrightarrow \mathbf{t}^\top \mathbf{x} \stackrel{d}{=} x_1, \forall \mathbf{t} \in S^{n-1}$ 。

证明: $-(\Rightarrow)$ 任取正交矩阵 H ,其第一行为 \mathbf{t} ,则 $H\mathbf{x} \stackrel{d}{=} \mathbf{x}$, 特别地两边的第一分量等分布, 即 $\mathbf{t}^\top \mathbf{x} \stackrel{d}{=} x_1$ 。

(\Leftarrow) 对任何 $\mathbf{s} \in R^n$, 记 $\mathbf{t} = \mathbf{s}/\|\mathbf{s}\| \in S^{n-1}$, $H^\top \mathbf{t} \in S^{n-1}$, 所以

$$x_1 \stackrel{d}{=} \mathbf{t}^\top \mathbf{x}, x_1 \stackrel{d}{=} (H^\top \mathbf{t})^\top \mathbf{x} = \mathbf{t}^\top H\mathbf{x},$$

所以

$$\mathbf{t}^\top \mathbf{x} \stackrel{d}{=} \mathbf{t}^\top H\mathbf{x}$$

两边同乘常数 $\|\mathbf{s}\|$ 还是同分布的, 即 $\|\mathbf{s}\| \mathbf{t}^\top \mathbf{x} \stackrel{d}{=} \|\mathbf{s}\| \mathbf{t}^\top H\mathbf{x}$, 即 $\mathbf{s}^\top \mathbf{x} \stackrel{d}{=} \mathbf{s}^\top H\mathbf{x}$, 其矩母函数或特征函数也相同: $E \exp(\mathbf{s}^\top \mathbf{x}) = E \exp(\mathbf{s}^\top H\mathbf{x})$ 或 $E \exp(i\mathbf{s}^\top \mathbf{x}) = E \exp(i\mathbf{s}^\top H\mathbf{x})$, 所以 $\mathbf{x} \stackrel{d}{=} H\mathbf{x}$ 。

命题4. 球面均匀分布是球对称分布, 即若 $\mathbf{u} \sim U(S^{n-1})$, 则对任何正交矩阵 H , $H\mathbf{u} \sim U(S^{n-1})$.

证明: 对任何 $S_0 \subset S^{n-1}$ 和正交矩阵 H , $|H^T S_0| = |S_0|$, 则

$$P(H\mathbf{u} \in S_0) = P(\mathbf{u} \in H^T S_0) = |H^T S_0| / |S^{n-1}| = |S_0| / |S^{n-1}| = P(\mathbf{u} \in S_0).$$

定理1. 随机向量 $\mathbf{z} \in S^{n-1}$ 是球对称的 $\Leftrightarrow \mathbf{z} \sim U(S^{n-1})$

证明: (\Rightarrow) 取 $\mathbf{u} \sim U(S^{n-1})$, \mathbf{u} 与 \mathbf{z} 独立, 下面证明 \mathbf{z} 与 \mathbf{u} 同分布。

因为 \mathbf{u} 是球对称的, 由命题3, $\mathbf{z}^T \mathbf{u} | \mathbf{z} \stackrel{d}{=} u_1 | \mathbf{z} \stackrel{d}{=} u_1$

(最后一个等号是因为 \mathbf{z} 与 u_1 独立), 所以 $\mathbf{z}^T \mathbf{u} | \mathbf{z} \stackrel{d}{=} u_1$, 即给定 \mathbf{z} 时 $\mathbf{z}^T \mathbf{u}$ 的条件分布与条件 \mathbf{z} 无关, 所以 $\mathbf{z}^T \mathbf{u} \stackrel{d}{=} u_1$ 。

同理，因为 \mathbf{z} 是球对称的， $\mathbf{z}^\top \mathbf{u} | \mathbf{u} \stackrel{d}{=} z_1 | \mathbf{u} \stackrel{d}{=} z_1 \Rightarrow \mathbf{z}^\top \mathbf{u} \stackrel{d}{=} z_1$ 。

所以 $z_1 \stackrel{d}{=} u_1$ 。

注： $z_1 \stackrel{d}{=} u_1 \Rightarrow z_i \stackrel{d}{=} u_i, i = 1, \dots, n$,
但这并不蕴含 $\mathbf{z} \stackrel{d}{=} \mathbf{u}$

对任何常数向量 $\mathbf{t} \in S^{n-1}$ ，因为 \mathbf{u} ， \mathbf{z} 都是球对称的，

$$\mathbf{t}^\top \mathbf{u} \stackrel{d}{=} u_1, \mathbf{t}^\top \mathbf{z} \stackrel{d}{=} z_1 \Rightarrow \mathbf{t}^\top \mathbf{z} \stackrel{d}{=} \mathbf{t}^\top \mathbf{u}$$

所以 $E \exp(\mathbf{t}^\top \mathbf{z}) = E \exp(\mathbf{t}^\top \mathbf{u})$ ， \mathbf{u} 和 \mathbf{z} 有相同的矩母函数，

从而 \mathbf{z} 与 \mathbf{u} 同分布，即 $\mathbf{z} \sim U(S^{n-1})$ 。证毕。

定理1说明 $U(S^{n-1})$ 是单位球面上唯一的正交不变分布。

对于 \mathbf{x} 具有一般球对称分布的情形，我们也有类似于第一讲命题1的结论。因为球坐标的角度一般不是我们感兴趣的，所以结论的表述将只使用模长 $r = \|\mathbf{x}\|$ 和 \mathbf{x} 的单位化球面向量 $\mathbf{u} = \frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|} \in S^{n-1}$ 。

定理2: 假设 \mathbf{x} 服从球对称分布（概率密度函数为 f ），即存在一元函数 h ，使得 $f(\mathbf{x}) = h(\|\mathbf{x}\|)$ ，则

$$\mathbf{x} / \|\mathbf{x}\| \sim U(S^{n-1}), \quad \mathbf{x} / \|\mathbf{x}\| \text{ 与 } \|\mathbf{x}\| \text{ 独立,}$$

$$\text{且}\|\mathbf{x}\|\text{的概率密度为 } p(r) = \frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)} h(r)r^{n-1}, r > 0.$$

第一讲引理1: 球坐标变换 $\mathbf{x} \rightarrow (r, \boldsymbol{\theta}) = (r, \theta_1, \dots, \theta_{n-1})$, $r \geq 0$,

$$0 \leq \theta_1, \dots, \theta_{n-2} \leq \pi, \quad 0 \leq \theta_{n-1} < 2\pi,$$

$$x_1 = r \cos(\theta_1) = ru_1$$

$$x_2 = r \sin(\theta_1) \cos(\theta_2) = ru_2$$

...

$$x_{n-1} = r \sin(\theta_1) \cdots \sin(\theta_{n-2}) \cos(\theta_{n-1}) = ru_{n-1}$$

$$x_n = r \sin(\theta_1) \cdots \sin(\theta_{n-2}) \sin(\theta_{n-1}) = ru_n$$

变换的Jacobi:

$$J(\mathbf{x} \rightarrow (r, \boldsymbol{\theta})) = r^{n-1} \sin^{n-2}(\theta_1) \sin^{n-3}(\theta_2) \cdots \sin(\theta_{n-2}).$$

定理2的证明：记 $\mathbf{u} = \mathbf{x}/\|\mathbf{x}\|$, $r = \|\mathbf{x}\|$ 。

应用球坐标变换 $\mathbf{x} \rightarrow (r, \boldsymbol{\theta}) = (r, \theta_1, \dots, \theta_{n-1})$, $(r, \boldsymbol{\theta})$ 的概率密度

$$p(r, \boldsymbol{\theta}) = h(r) \times J = h(r) \times r^{n-1} \sin^{n-2}(\theta_1) \sin^{n-3}(\theta_2) \cdots \sin(\theta_{n-2})$$

这表明 $r, \theta_1, \dots, \theta_{n-1}$ 相互独立, 而 $\mathbf{u} = \mathbf{x}/\|\mathbf{x}\| = \mathbf{x}/r$ 仅与 θ 's 有关, $\|\mathbf{x}\| = r$,

所以 $\|\mathbf{x}\|$ 与 $\mathbf{u} = \mathbf{x}/\|\mathbf{x}\|$ 独立。

注意：只有 $\theta_{n-1} \sim U(0, 2\pi)$
均匀分布, 其它 θ_i 's 不服从均匀分布

因为

$$|S^{n-1}| = \int \sin^{n-2}(\theta_1) \sin^{n-3}(\theta_2) \cdots \sin(\theta_{n-2}) d\boldsymbol{\theta} = \frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)}$$

所以

$$p(r, \boldsymbol{\theta}) = \left[\frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)} h(r) r^{n-1} \right] \times \left[\frac{\Gamma(n/2)}{2\pi^{n/2}} \sin^{n-2}(\theta_1) \sin^{n-3}(\theta_2) \cdots \sin(\theta_{n-2}) \right]$$

$$\triangleq p(r) \times q(\boldsymbol{\theta})$$

两个方括号内分别是 $r, \boldsymbol{\theta}$ 的概率密度 $p(r), q(\boldsymbol{\theta})$ 。

下面证明 $\mathbf{u} \sim U(S^{n-1})$: 由定理1, $U(S^{n-1})$ 是球面上唯一正交不变的分布, 我们只需证明对任何正交矩阵 $H, H\mathbf{u} \sim \mathbf{u}$ ($H\mathbf{u}$ 和 \mathbf{u} 同分布)。

由 $H\mathbf{x} \sim \mathbf{x} \Rightarrow H\mathbf{x}/\|H\mathbf{x}\| \sim \mathbf{x}/\|\mathbf{x}\|$, 又因 $\|\mathbf{x}\| = \|H\mathbf{x}\|$

$$\Rightarrow H\mathbf{u} = H\mathbf{x}/\|\mathbf{x}\| = H\mathbf{x}/\|H\mathbf{x}\| \sim \mathbf{x}/\|\mathbf{x}\| = \mathbf{u}$$

所以 $\mathbf{u} = \mathbf{x}/\|\mathbf{x}\| \in S^{n-1}$ 的分布正交不变, 所以 $\mathbf{u} \sim U(S^{n-1})$. 证毕。

注: 实际上 $q(\boldsymbol{\theta})$ 是球面均匀分布的极坐标下的分布密度, 利用球坐标也可以证明 $\mathbf{u} \sim U(S^{n-1})$:

对任何 $S_0 \subset S^{n-1}$

$$P(\mathbf{u} \in S_0) = \int_{\mathbf{u} \in S_0} q(\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\theta}$$

单位球面的面积元 (第一讲引理1)

$$d_{S^{n-1}}A = \sin^{n-2}(\theta_1) \sin^{n-3}(\theta_2) \cdots \sin(\theta_{n-2}) d\boldsymbol{\theta}$$

$$= \int_{\mathbf{u} \in S_0} \frac{\Gamma(n/2)}{2\pi^{n/2}} \sin^{n-2}(\theta_1) \sin^{n-3}(\theta_2) \cdots \sin(\theta_{n-2}) d\boldsymbol{\theta}$$

$$= \frac{\Gamma(n/2)}{2\pi^{n/2}} \int_{\mathbf{u} \in S_0} d_{S^{n-1}}A = \frac{\Gamma(n/2)}{2\pi^{n/2}} |S_0| = |S_0|/|S^{n-1}|$$

所以 $\mathbf{u} \sim U(S^{n-1})$.

从定理2 的证明容易得到如下刻画（随机表示，同分布表示）

球对称分布的刻画

定理3: \mathbf{x} 服从球对称分布 $\Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{u}r$, 其中 \mathbf{u} , r 独立,
 $\mathbf{u} \sim U(S^{n-1}), r = \|\mathbf{x}\|$.

$\mathbf{x} = \mathbf{u}r$
这种方向 \mathbf{u} 乘以长度 r 的分解叫做“极分解”

证明: (\Rightarrow) 取 $\mathbf{u} = \mathbf{x} / \|\mathbf{x}\|, r = \|\mathbf{x}\|$ 。

(\Leftarrow) 若 $\mathbf{x} = \mathbf{u}r$, 因为 $\mathbf{u} \sim U(S^{n-1})$ 正交不变, 所以对任何正交矩阵 H ,
 $H\mathbf{x} = H\mathbf{u}r = \mathbf{u}r = \mathbf{x}$, 即 \mathbf{x} 分布正交不变, \mathbf{x} 服从球对称分布。

注: 模长分布唯一决定了球对称分布, 具体关系如下:

$$\text{已知 } \mathbf{x} \sim f(\mathbf{x}) = h(\|\mathbf{x}\|) \Rightarrow \|\mathbf{x}\| \sim p(r) = \frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)} h(r) r^{n-1}$$

$$\text{已知 } \|\mathbf{x}\| \sim p(r) \Rightarrow \mathbf{x} \sim f(\mathbf{x}) = h(\|\mathbf{x}\|) = \frac{\Gamma(\frac{n}{2}) p(\|\mathbf{x}\|)}{2\pi^{n/2} \|\mathbf{x}\|^{n-1}}$$

多元标准正态是定理2, 3的特殊情况, 鉴于其重要性, 我们把它单独列为定理4。

定理4.

(1) $\mathbf{x} \sim N_n(0, I_n) \Leftrightarrow \mathbf{x}/\|\mathbf{x}\| \sim U(S^{n-1}), \mathbf{x}/\|\mathbf{x}\| \perp \|\mathbf{x}\|, \|\mathbf{x}\| \sim \chi_n.$

(2) $\mathbf{x} \sim N_n(0, I_n) \Leftrightarrow \mathbf{x} \stackrel{d}{=} \mathbf{u}r,$ 其中 $\mathbf{u} \sim U(S^{n-1}), r \sim \chi_n, \mathbf{u} \perp r.$

正态的随机表示 (2) 形式地写成:

$$N_n(0, I_n) = U(S^{n-1}) \times \chi_n$$

注:

可利用定理4结论 (2) 和球面均匀分布生成一元正态随机数 (例3)。

可利用定理4结论 (1) 和球对称分布生成球面均匀随机向量

例3. (二元标准正态的随机表示/极分解及其应用)

$n = 2$ 时, $\mathbf{x} \sim N_2(0, I_2)$ 有表示 $\mathbf{x} \stackrel{d}{=} \mathbf{u}R$, 其中 $\mathbf{u} = (u_1, u_2)^\top \sim U(S^1)$ 单位圆周上的均匀分布, $R \sim \chi_2$ 具有概率密度 $p_{\chi_2}(r) = r \exp(-r^2/2)$ 。

该表示可用来从 \mathbf{u} 和 R 生成正态随机数, 如何生成 \mathbf{u} 和 R ?

- 取 $\theta_1 \sim (0, 2\pi)$, 则 $\mathbf{u} = (u_1, u_2)^\top = (\cos(\theta_1), \sin(\theta_1))^\top \sim U(S^1)$
- 而 χ_2 的累积分布函数为 $F(r) = 1 - \exp(-r^2/2)$, 则 $F(R), \bar{F}(R) \sim U(0, 1)$, 记 $\xi \triangleq \bar{F}(R) = \exp\left(-\frac{R^2}{2}\right) \sim U(0, 1)$, 故 $R = \sqrt{-2\log(\xi)}$, 其中 $\xi \sim U(0, 1)$ 。

Box-Muller方法: 产生 $\mathbf{x} = (x_1, x_2)^\top \sim N_2(0, I_2)$, 即 x_1, x_2 iid $N(0, 1)$

- 产生 $\theta_1 \sim U(0, 2\pi)$, $\xi \sim U(0, 1)$, 独立;
- $R = \sqrt{-2\log(\xi)}$, $\mathbf{u} = (\cos(\theta_1), \sin(\theta_1))^\top$;
- $\mathbf{x} = R\mathbf{u}$.

利用Box-Muller方法独立产生若干正态随机变量，合在一起即得到多元标准正态随机向量。所以正态随机数/向量容易产生。

因为正态随机数容易产生，定理4（1）提供了利用多元标准正态随机向量从球面对称分布抽样的方法，定理4（2）提供了从球对称分布抽样的方法：

- 产生 $\mathbf{x} \sim N_n(\mathbf{0}, I_n)$ ；
- （球面均匀）令 $\mathbf{u} = \frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|}$ ，则 $\mathbf{u} \sim U(S^{n-1})$ ；
- （球对称）为了产生 $\mathbf{y} \sim$ 球对称分布 $f(\mathbf{y}) = h(\|\mathbf{y}\|)$ 的随机向量，产生 $r \sim p(r) = \frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)} h(r)r^{n-1}$ （假设容易产生），令 $\mathbf{y} = \mathbf{u}r$ 。

$U(B^n)$ 随机表示的形式化表达：
 $U(B^n) = U(S^{n-1}) \times [U(0,1)]^{1/n}$

第一讲命题1是定理2的特殊情况：

例4. 假设 $\mathbf{x} \sim U(B^n)$, 即概率密度 $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{|B^n|} = \frac{n\Gamma(n/2)}{2\pi^{n/2}} 1_{(\|\mathbf{x}\| \leq 1)}$ 。由定理2知

$$\frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|} \sim U(S^{n-1}), \frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|} \perp \|\mathbf{x}\|, \|\mathbf{x}\| \sim p(r) = nr^{n-1} 1_{(0 < r \leq 1)}。$$

由定理3, 若 $\mathbf{x} \sim U(B^n)$, 则 \mathbf{x} 可表示为 $\mathbf{x} \stackrel{d}{=} \mathbf{u}r$, $\mathbf{u} \sim U(S^{n-1})$, $r \sim p(r) = nr^{n-1} 1_{(0 < r \leq 1)}$, 即 $r = U^{1/n}$, $U \sim U(0,1)$ 。

这可用于产生球均匀随机数：

球面均匀分布 $U(S^{n-1})$ 和球均匀分布 $U(B^n)$ 抽样

- 产生 $\mathbf{x} \sim N_n(0, I_n)$, 则 $\mathbf{u} = \frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|} \sim U(S^{n-1})$;
 - 产生 $U \sim U(0,1)$, 令 $r = U^{1/n}$ ($r \sim p(r) = nr^{n-1}, 0 < r < 1$);
 - 令 $\mathbf{y} = \mathbf{u}r$, 则 $\mathbf{y} \sim U(B^n)$ 。
-

注：拒绝抽样是一种简单易行的最常用的抽样/随机数产生方法，但这种方法不适用于生成 $U(B^n)$ 高维随机向量。

$U(B^n)$ 的拒绝抽样

- 产生 $[-1,1]^n$ 均匀随机数 $\mathbf{x} \sim U([-1,1]^n)$,
- 若 $\|\mathbf{x}\| < 1$, 则 $\mathbf{x} \sim U(B^n)$, 即为所求；否则，拒绝。

但当 n 较大时单位球体积趋于 0，大部分被拒绝，拒绝抽样效率低下。上页最后的算法是一个 $U(B^n)$ 抽样的高效方法。

均匀分布

定义. 假设集合 $C \subset R^n$ 的体积 $|C| < \infty$, 如果对于任何 $C_0 \subset C$,

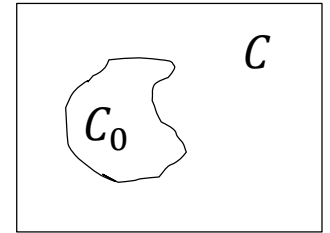
$$P(\mathbf{x} \in C_0) = |C_0| / |C|$$

则称 \mathbf{x} 在 C 上均匀分布, 记作 $\mathbf{x} \sim U(C)$.

由均匀分布的定义, 立得如下抽样基本原理

抽样基本原理1

假设 $\mathbf{x} \sim U(C)$, $C_0 \subset C$, 则 $\mathbf{x}|_{\mathbf{x} \in C_0} \sim U(C_0)$, 即限制在子集 C_0 上也是均匀分布。



简单拒绝抽样

假设区域 C_0 不规则, 难以从中生成均匀随机数。为了产生 $\mathbf{x} \sim U(C_0)$, 选取一个容易生成均匀随机数的规则区域 $C \supset C_0$, 比如立方体, 产生 $\mathbf{x} \sim U(C)$ 。若 $\mathbf{x} \in C_0$, 则 \mathbf{x} 即为所求; 否则, 舍弃/拒绝。

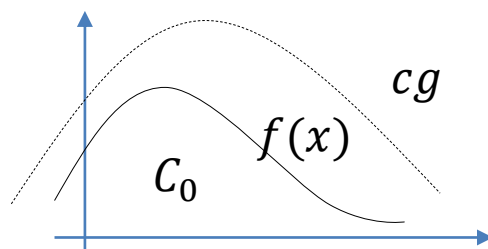
规则区域 C 包含 C_0 , C 越小越好。上页规则区域 $C = [-1, 1]^n \supset B^n$, 但 C 过大。

抽样基本原理2

考虑从概率密度 f 中抽样。若 $(X, Y) \sim U(C_0)$ ，其中 C_0 为密度函数 f 的下方与横轴之间的区域（subgraph）

$$C_0 = \text{sub}(f) = \{(x, y) : 0 \leq y \leq f(x)\}$$

则 $X \sim f$ 。



拒绝抽样原理

为了从密度 f 抽样，选取一个容易产生随机数的概率密度 g ，假设存在 $c \geq 1$ ，使得 $cg \geq f$ 。产生

$$(X, Y) \sim U(\text{sub}(cg)),$$

由基本原理2，若 $Y \leq f(X)$ ，则 X 即为所求，否则拒绝。

注意 $(X, Y) \sim U(\text{sub}(cg)) \Leftrightarrow X \sim g, Y|X \sim U(0, cg(X))$

$\Rightarrow U|X \triangleq \frac{Y}{cg(X)} | X \sim U(0, 1)$ ， $U \perp\!\!\!\perp X$ ，所以前述接受随机数的条件

“ $Y \leq f(X)$ ” $\Leftrightarrow U \leq \frac{f(X)}{cg(X)}$ 。基于这些观察，重述上述拒绝抽样过程如下（更容易，不必真的从 $\text{sub}(cg)$ 抽样）：

拒绝抽样

为了从密度 f 抽样，选取一个容易产生随机数的概率密度 g ，假设存在 $c \geq 1$ ，使得 $cg \geq f$ 。

Rejection sampling: 产生 $X \sim g$, $U \sim U(0,1)$, $U \perp X$, 若 $U \leq \frac{f(X)}{cg(X)}$, 则 X 即为所求，否则拒绝。

该方法首先产生一个 $r.v.$ $X \sim g$ ，计算 $p = \frac{f(X)}{cg(X)}$ 。

再独立地产生一个 $U \sim U(0,1)$ ，若 $U \leq p$ ，则接受 X

（这相当于抛一个正面概率为 p 的硬币，抛出正面就接受 X ，抛出反面，拒绝）。

所以拒绝抽样方法在产生 X 后采取了随机化方式（抛一个正面概率为 p 的硬币）来决定是否接受 X 。这看起来很神秘，而且简单数学计算可以证明这样得到的 X 确实服从分布 f ，其背后原理如上页所述，并不神秘。