花式生成正态分布

2015-05-20 宾狗 学术 数学

0x00 前言

> “So much of life, it seems to me, is determined by pure randomness.” – Sidney Poitier

在之前的博客中，或多或少都提到过一些随机、伪随机、随机数等等，但基本上只是直接使用，没有探寻背后的一些原理，刚好最近偶然看到`python`标准库中如何生成服从正态分布随机数的源码，所以本文就简单聊聊如何生成正态分布

0x01 知识回顾

为了防止你对接下来的内容一头雾水，我觉得还是有必要回顾一下我们曾经学过的高数和概率统计知识

均匀分布

均匀分布是生成其他分布的基础，基本上只要是个编程语言，其标准函数库里面肯定有一个随机生成$[0,1)$之间浮点数的函数，原理很简单，使用的是**线性同余法（linear congruential generator, LCG）**，依据下面这个递推公式

$$X_{n+1} = (aX_n + c) \pmod{m}$$

其中X就是伪随机数序列，X_n是序列中第N个数，a,c,m是常数，a是乘数，c是增量，m是模，我们熟悉的随机种子`seed`是X_0

LCG的周期最大为m，但大部分情况都会小于m。要令LCG达到最大周期，应符合以下条件：

- c,m互素
- m的所有质因数都能整除$a-1$
- 若m是4的倍数，$a-1$也是
- a,c,x_0都比m小
- a,c是正整数

不过这些约束怎么来的本文就暂不讨论了

我们以`Java`中`Random`的实现为例，为了便于理解，这里对代码进行了部分调整，只截取了相关的片段

```java
//这两个东西在本文后面讲正态分布的时候会涉及到
private double nextNextGaussian;
private boolean haveNextNextGaussian = false;

//随机数序列生成器种子
private final AtomicLong seed;

//线性同余发生器乘数a
private final static long multiplier = 0x5DEECE66DL;

//线性同余发生器加数c
private final static long addend = 0xBL;

//线性同余发生器模数m
private final static long mask = (1L << 48) - 1;

public Random(long seed) {
    this.seed = new AtomicLong(0L);
    setSeed(seed);
}

synchronized public void setSeed(long seed) {
    //实现线性同余算法
    seed = (seed ^ multiplier) & mask;
```

```java
        //atomic set具有写入（分配）volatile 变量的内存效果（即具有内存可见性）
        this.seed.set(seed);
        //暂且忽略。。
        haveNextNextGaussian = false;
    }

    protected int next(int bits) {
        long oldseed, nextseed;
        AtomicLong seed = this.seed;
        //ompareAndSet 如果当前值==预期值，则以原子方式将该值设置为给定的更新值（利用了CPU的硬件原语CAS指
    令）
        do {
        //atomic get具有读取volatile 变量的内存效果
        oldseed = seed.get();
        //实现线性同余算法
        nextseed = (oldseed * multiplier + addend) & mask;
        } while (!seed.compareAndSet(oldseed, nextseed));
        //截取bits位整型
        return (int)(nextseed >>> (48 - bits));
    }
```

有人可能会有疑惑，这个代码中的实现 `nextseed = (oldseed * multiplier + addend) & mask` 好像和递推公式不一样啊？那个模运算为什么变成了与运算？

注意， `x&[(1L << 48)-1]` 与 `x(mod 2^48)` 是**等价**的。为什么呢？从二进制的角度来考虑这个问题就很清楚了。一个数 `x` 除以 `2^n` ，在二进制中相当于将 `x` 右移 `n` 位，商和余数分别在小数点左侧和右侧。如 `23/8=2` ， `23%8=7` ， `23` 的二进制表示为 `10111` ，除以 `2^3=8` 相当于右移3位，得到 `10.111` ，左侧为商 `10` 也就是2，右侧为余数 `111` 也就是7。也就是说如果一个数对 `2^n` 取余，那么只需要得到该数的低 `n` 位即可，很自然的想到如果能得到这样$0\cdots0\underbrace{1\cdots1}_{n}$一个二进制数，与原来的数做与运算即可，而 `2^n-1` 恰好可以得到这样的一个二进制数。如 `2^3-1=7` → `111` ， `2^7-1=127` → `1111111` 。

现在回头看看 `nextseed = (oldseed * multiplier + addend) & mask` 这行代码可以理解了吧？

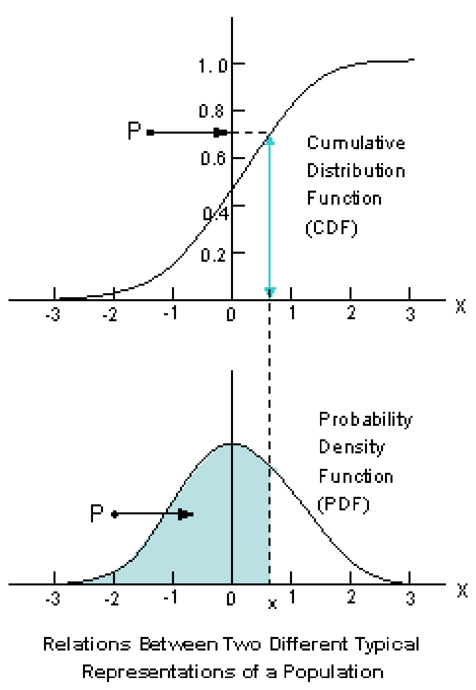
关于均匀分布的更多细节可以参考JDK源码分析——从java.util.Random源码分析线性同余算法

概率分布函数和概率密度函数

直接引用教材上的黑体字吧

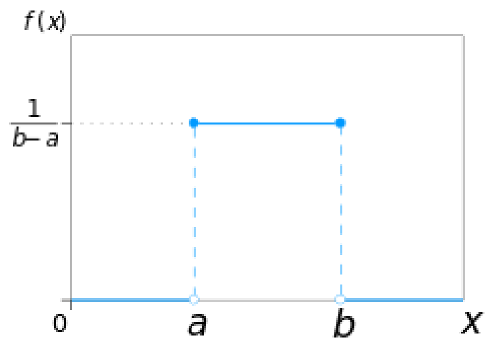
> 设随机变量X的分布函数为$F(x)$，若存在非负实函数$f(x)$，使对任意实数x，有$F(x)=\int_{-\infty}^{x}f(x)\,dx$，则称$X$为连续型随机变量，$f(x)$称为$X$的概率密度函数,简称概率密度或密度函数

看下面这张图也非常清楚，概率分布函数$F(x)$是**cumulative distribution function(CDF)**，概率密度函数$f(x)$是**probability density function(PDF)**



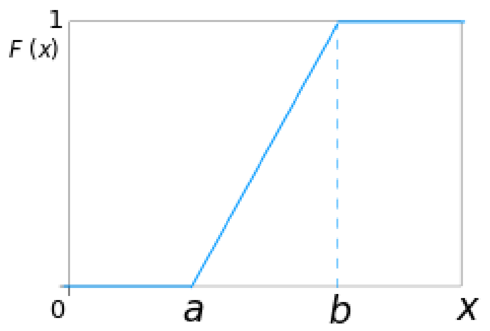
刚才说到的均匀分布概率密度函数$f(x)$如下

$$f(x)=\begin{cases}\frac{1}{b-a} & \text{for } a\le x\le b,\\ 0 & \text{for } x<a \text{ or } x>b\end{cases}$$



概率分布函数$F(x)$如下

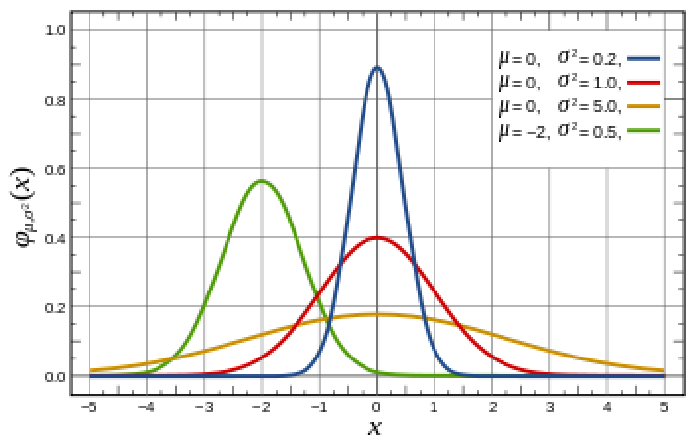
$$F(x)=\begin{cases}0 & \text{for } x<a\\ \frac{x-a}{b-a} & \text{for } x\in[a,b)\\ 1 & \text{for } x\ge b\end{cases}$$



期望为$\frac{1}{2}(a+b)$，方差为$\frac{1}{12}(b-a)^2$

正态分布的概率密度函数$f(x)$如下

$$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$



标准正态分布中，$\mu=0,\sigma=1$，$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{x^2}{2}}$

正态分布的概率分布函数不太好求，不信自己去积分试试...

中心极限定理

设$X_1,X_2,\cdots,X_n$为独立同分布的随机变量序列，均值为μ，方差为σ^2，则

$$Z_n=\frac{X_1+X_2+\cdots+X_n-n\mu}{\sigma\sqrt{n}}$$

具有渐近分布$N(0,1)$，也就是说当$n\to\infty$时，

$$P\left\{\frac{X_1+X_2+\cdots+X_n-n\mu}{\sigma\sqrt{n}}\le x\right\}\to\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{x}e^{-\frac{t^2}{2}}\,dt$$

说人话就是，n个相互独立同分布的随机变量之和的分布近似于正态分布，n越大，近似程度越好

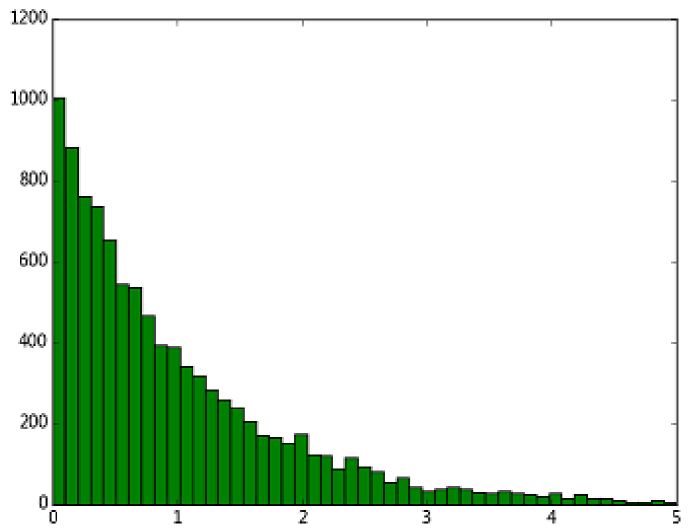
反变换法(Inverse transform sampling)

假设$u=F(x)$是一个概率分布函数(CDF)，F^{-1}是它的反函数，若U是一个服从$(0,1)$均匀分布的随机变量，则$F^{-1}(U)$服从函数F给出的分布

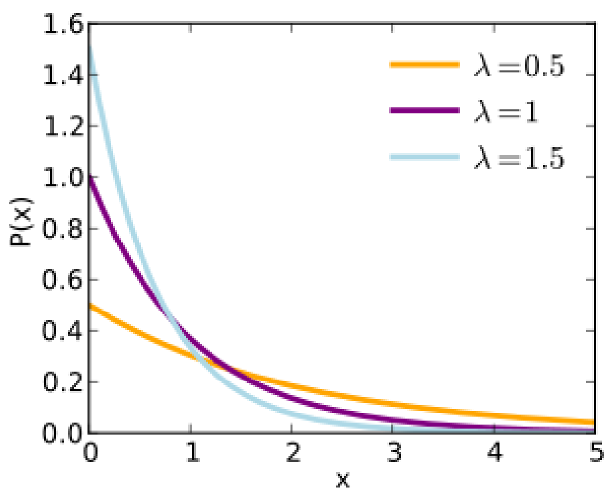
例如要生成一个服从指数分布的随机变量，我们知道指数分布的概率分布函数(CDF)为$F(x)=1-e^{-\lambda x}$，其反函数为$F^{-1}(x)=-\frac{\ln(1-x)}{\lambda}$，写程序实现一下

```
# -*- coding: utf-8 -*-
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

def getExponential(SampleSize,p_lambda):
    result = -np.log(1-np.random.uniform(0,1,SampleSize))/p_lambda
    return result

# 生成10000个数，观察它们的分布情况
SampleSize = 10000
es = getExponential(SampleSize, 1)
plt.hist(es,np.linspace(0,5,50),facecolor="green")
plt.show()
```

得到如下结果



对比维基百科里面标准的指数分布



那么为什么$F^{-1}(U)$会服从F给出的分布呢？其实很好证明，$P(F^{-1}(U)\leq x)$，两边同时取F得到$P(F^{-1}(U)\leq x)=P(U\leq F(x))$，根据均匀分布的定义$P(U<y)=y$，所以$P(U\leq F(x))=F(x)$，即$P(F^{-1}(U)\leq x)=F(x)$，刚好是随机变量服从某个分布的定义，证毕~

$$\begin{aligned}P(F^{-1}(U)\leq x)&=P(U\leq F(x))\\&=F(x)\end{aligned}$$

雅可比矩阵与雅可比行列式

这个东西在高数课本中有，只怪当初学习不用功......

设$\mathbf{f}:\mathbb{R}^n\rightarrow\mathbb{R}^m$是一个向量函数，输入为$\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n$，输出为$\mathbf{f}(\mathbf{x})\in\mathbb{R}^m$，雅可比矩阵可以写成如下形式：

$$J=\frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{x}}=\begin{bmatrix}\frac{\partial\mathbf{f}}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial\mathbf{f}}{\partial x_n}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n}\end{bmatrix}$$

当$m=n$时，雅可比矩阵为一个方阵，我们可以取它的行列式

$$|J| = \begin{vmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{vmatrix}$$

以咱们熟悉的平面直角坐标与极坐标转换为例吧，

$$\begin{cases} x = r\cos\theta \\ y = r\sin\theta \end{cases}$$

求雅可比矩阵，

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial \theta} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial \theta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathrm{cos}\theta & -\mathrm{rsin}\theta \\ \mathrm{sin}\theta & \mathrm{rcos}\theta \end{bmatrix}$$

取行列式

$$|J| = \mathrm{rcos}^2\theta + \mathrm{rsin}^2\theta = r$$

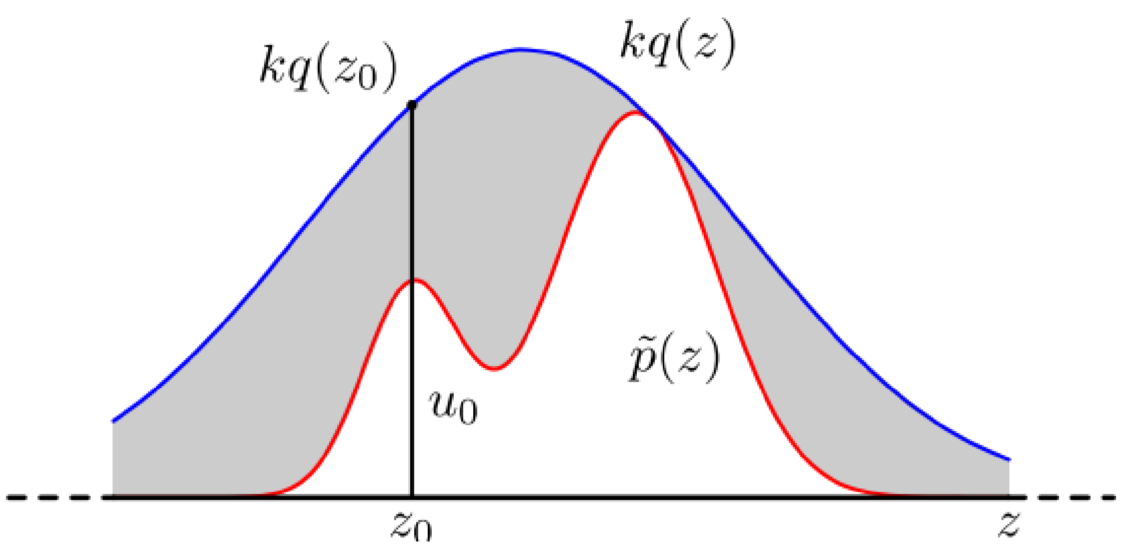
回顾当初学习二重积分时，利用极坐标变换时的式子如下

$$\iint\limits_D f(x,y)dxdy = \iint\limits_D f(r\cos\theta, r\sin\theta)rdrd\theta$$

现在知道那个多出来的r是怎么回事了吧？雅可比行列式相当于两个不同坐标系中微小区域面积的缩放倍数

拒绝采样(Rejection Sampling)

这个方法有的时候也称接收-拒绝采样，使用场景是有些函数$p(x)$太复杂在程序中没法直接采样，那么可以设定一个程序可抽样的分布$q(x)$比如正态分布等等，然后按照一定的方法拒绝某些样本，达到接近$p(x)$分布的目的：



具体操作如下，设定一个方便抽样的函数$q(x)$，以及一个常量k，使得$p(x)$总在$kq(x)$的下方。（参考上图）

- x轴方向：从$q(x)$分布抽样得到a
- y轴方向：从均匀分布$(0, kq(a))$中抽样得到u
- 如果刚好落到灰色区域：$u > p(a)$，拒绝；否则接受这次抽样
- 重复以上过程

证明过程就不细说了，知道怎么用就行了，感兴趣的可以看看这个文档

- Acceptance-Rejection Method

不过在高维的情况下，拒绝采样会出现两个问题，第一是合适的q分布比较难以找到，第二是很难确定一个合理的k值。这两个问题会造成图中灰色区域的面积变大，从而**导致拒绝率很高，无用计算增加。**

0x02 暴力生成正态分布

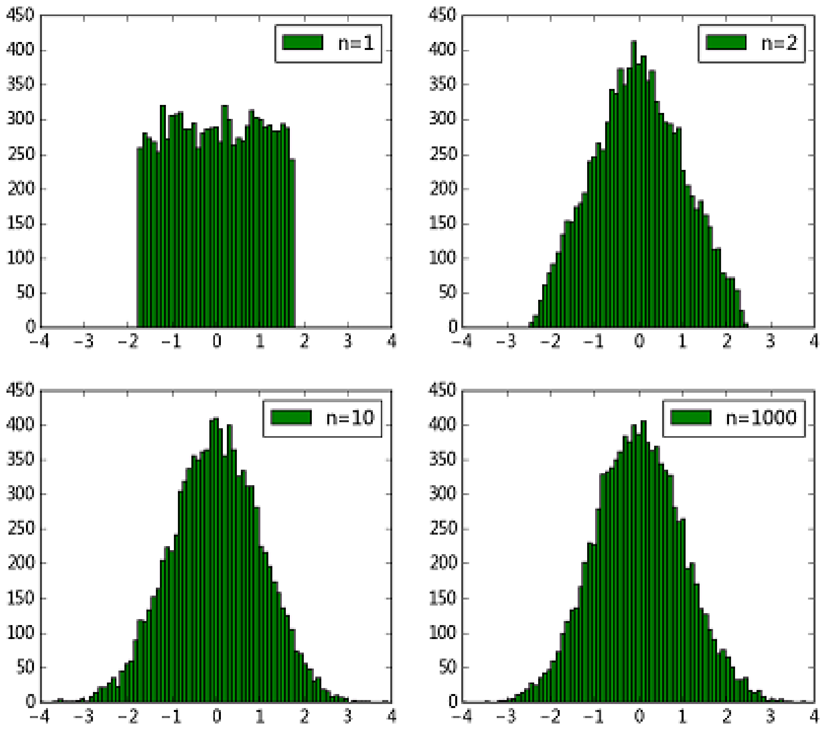
根据中心极限定理，生成正态分布就非常简单粗暴了，直接生成`n`个独立同分布的随机变量，求和即可。注意，**无论**你使用什么分布，当`n`趋近于无穷大时，它们和的分布都会趋近正态分布！

以最简单的均匀分布为例，看代码

```
# -*- coding: utf-8 -*-
import matplotlib.pyplot as plt
```

```python
import numpy as np

def getNormal(SampleSize,n):
    xsum = []
    for i in range(SampleSize):
        # 利用中心极限定理，[0,1)均匀分布期望为0.5，方差为1/12
        tsum = (np.mean(np.random.uniform(0,1,n))-0.5)*np.sqrt(12*n)
        xsum.append(tsum)
    return xsum

# 生成10000个数，观察它们的分布情况
SampleSize = 10000
# 观察n选不同值时，对最终结果的影响
N = [1,2,10,1000]

plt.figure(figsize=(10,20))
subi = 220
for index,n in enumerate(N):
    subi += 1
    plt.subplot(subi)
    normalsum = getNormal(SampleSize, n)
    # 绘制直方图
    plt.hist(normalsum,np.linspace(-4,4,80),facecolor="green",label="n={0}".format(n))
    plt.ylim([0,450])
    plt.legend()

plt.show()
```

得到结果如下图所示



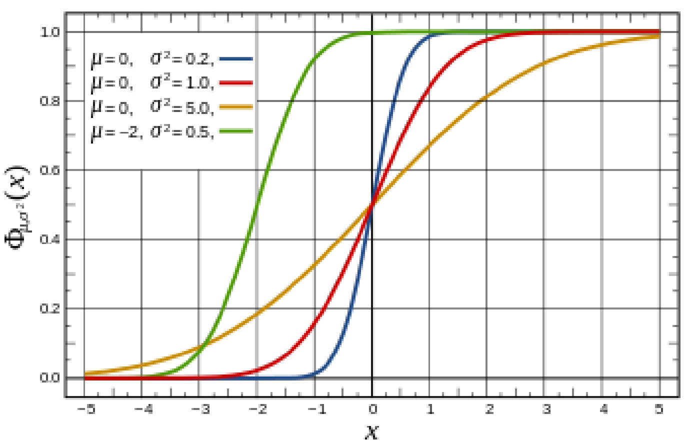
可以看到，`n=1` 时其实就是均匀分布，`n=2` 时有正态分布的样子了，但不够平滑，随着 `n` 逐渐增大，直方图轮廓越来越接近正态分布了~因此利用中心极限定理暴力生成服从正态分布的随机数是可行的

但是这样生成正态分布速度是非常慢的，因为要生成若干个同分布随机变量，然后求和、计算，效率非常低。那有没有其他办法呢？

当然有！利用反变换法

0x03 反变换法生成正态分布

正态分布的概率分布函数(CDF)如下图所示，

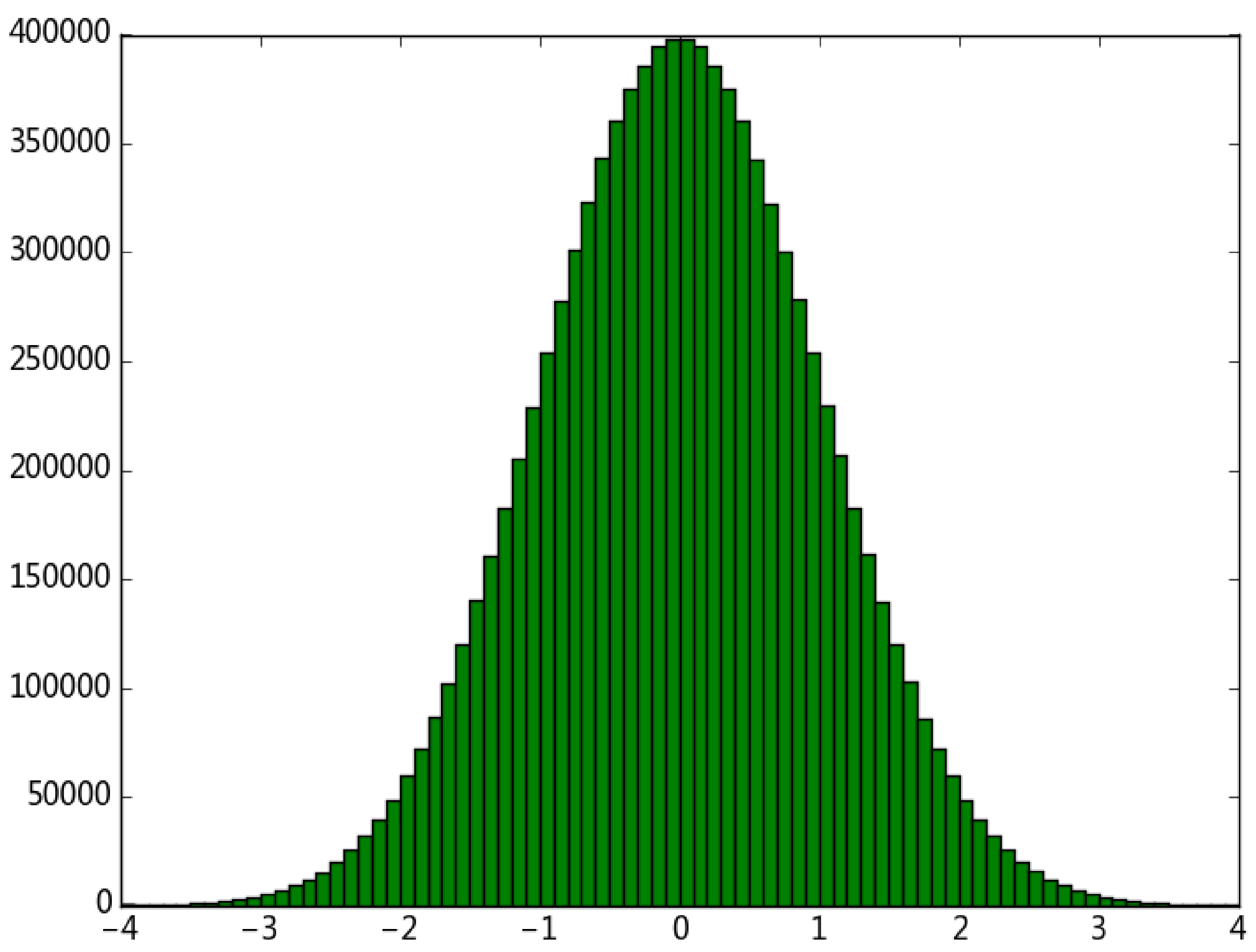


在 `y` 轴上产生服从(0,1)均匀分布的随机数，水平向右投影到曲线上，然后垂直向下投影到 `x` 轴，这样在 `x` 轴上就得到了正态分布。

当然正态分布的概率分布函数不方便直接用数学形式写出，求反函数也无从说起，不过好在 `scipy` 中有相应的函数，我们直接使用即可

```
# -*- coding: utf-8 -*-

import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
from scipy.stats import norm

def getNormal(SampleSize):
    iid = np.random.uniform(0,1,SampleSize)
    result = norm.ppf(iid)
    return result

SampleSize = 10000000
normal = getNormal(SampleSize)
plt.hist(normal,np.linspace(-4,4,81),facecolor="green")
plt.show()
```

结果如下图所示，



以上两个方法虽然方便也容易理解，但是效率实在太低，并不实用，那么在实际中到底是如何生成正态分布的呢？

0x04 Box–Muller算法

说来也巧，某天闲的无聊突然很好奇 `python` 是如何生成服从正态分布的随机数的，于是就看了看 `random.py` 的代码，具体实现的代码就不贴了，大家自己去看，注释中有下面几行

```
# When x and y are two variables from [0, 1), uniformly
# distributed, then
#
#    cos(2*pi*x)*sqrt(-2*log(1-y))
#    sin(2*pi*x)*sqrt(-2*log(1-y))
#
# are two *independent* variables with normal distribution
```

顿时感觉非常科幻，也就是说当x和y是两个独立且服从[0,1)均匀分布的随机变量时，$\cos(2\pi x)\cdot\sqrt{-2\ln(1-y)}$和$\sin(2\pi x)\cdot\sqrt{-2\ln(1-y)}$是两个独立且服从正态分布的随机变量！

后来查了查这个公式，发现这个方法叫做`Box-Muller`，其实本质上也是应用了反变换法，证明方法比较多，这里我们选取一种比较好理解的

我们把反变换法推广到二维的情况，设U_1,U_2为$(0,1)$上的均匀分布随机变量，(U_1,U_2)的联合概率密度函数为$f(u_1,u_2)=1(0\le u_1,u_2\le 1)$，若有：

$$\begin{cases} U_1=g_1(X,Y) \\ U_2=g_2(X,Y) \end{cases}$$

其中，g_1,g_2的逆变换存在，记为

$$\begin{cases} x=h_1(u_1,u_2) \\ y=h_2(u_1,u_2) \end{cases}$$

且存在一阶偏导数，设J为Jacobian矩阵的行列式

$$|J|=\begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial u_1} & \frac{\partial x}{\partial u_2} \\ \frac{\partial y}{\partial u_1} & \frac{\partial y}{\partial u_2} \end{vmatrix}\neq 0$$

则随机变量(X,Y)的二维联合密度为（回顾直角坐标和极坐标变换）：

$$f[h_1(u_1,u_2),h_2(u_1,u_2)]\cdot|J|=|J|$$

根据这个定理我们来证明一下，

$$\begin{cases} Y_1=\sqrt{-2\ln X_1}\cos(2\pi X_2) \\ Y_2=\sqrt{-2\ln X_1}\sin(2\pi X_2) \end{cases}$$

求反函数得

$$\begin{cases} X_1=e^{-\frac{Y_1^2+Y_2^2}{2}} \\ X_2=\frac{1}{2\pi}\arctan\frac{Y_2}{Y_1} \end{cases}$$

计算Jacobian行列式

$$\begin{aligned} |J|=\begin{vmatrix} \frac{\partial X_1}{\partial Y_1} & \frac{\partial X_1}{\partial Y_2} \\ \frac{\partial X_2}{\partial Y_1} & \frac{\partial X_2}{\partial Y_2} \end{vmatrix} &= \begin{vmatrix} -Y_1\cdot e^{-\frac{1}{2}(Y_1^2+Y_2^2)} & -Y_2\cdot e^{-\frac{1}{2}(Y_1^2+Y_2^2)} \\ -\frac{Y_2}{2\pi(Y_1^2+Y_2^2)} & \frac{Y_1}{2\pi(Y_1^2+Y_2^2)} \end{vmatrix} \\ &= e^{-\frac{1}{2}(Y_1^2+Y_2^2)}[\frac{-Y_1^2}{2\pi(Y_1^2+Y_2^2)}-\frac{Y_2^2}{2\pi(Y_1^2+Y_2^2)}] \\ &= -\frac{1}{2\pi}e^{-\frac{1}{2}(Y_1^2+Y_2^2)} \\ &= -(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{1}{2}Y_1^2})(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{1}{2}Y_2^2}) \end{aligned}$$

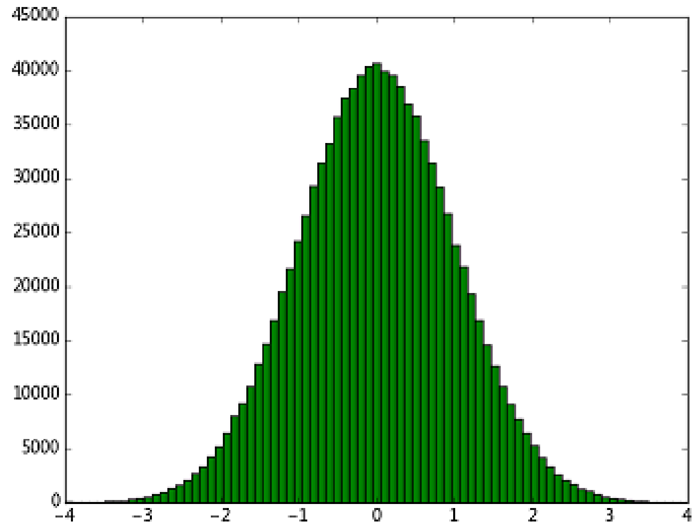
由于X_1,X_2为$(0,1)$上的均匀分布，概率密度函数均为1，所以Y_1,Y_2的联合概率密度函数为$-(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{1}{2}Y_1^2})(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{1}{2}Y_2^2})$，熟悉二维正态分布的就知道是两个独立的正态分布，所以Y_1,Y_2是两个独立且服从正态分布的随机变量~

写程序实现一下

```
# -*- coding: utf-8 -*-
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

def getNormal(SampleSize):
    iid = np.random.uniform(0,1,SampleSize)
    normal1 = np.cos(2*np.pi*iid[0:SampleSize/2-1])*np.sqrt(-2*np.log(iid[SampleSize/2:SampleSize-1]))
    normal2 = np.sin(2*np.pi*iid[0:SampleSize/2-1])*np.sqrt(-2*np.log(iid[SampleSize/2:SampleSize-1]))
    return np.hstack((normal1,normal2))

# 生成10000000个数，观察它们的分布情况
SampleSize = 10000000
es = getNormal(SampleSize)
```

```
plt.hist(es,np.linspace(-4,4,80),facecolor="green")
plt.show()
```

得到的结果如下图所示，



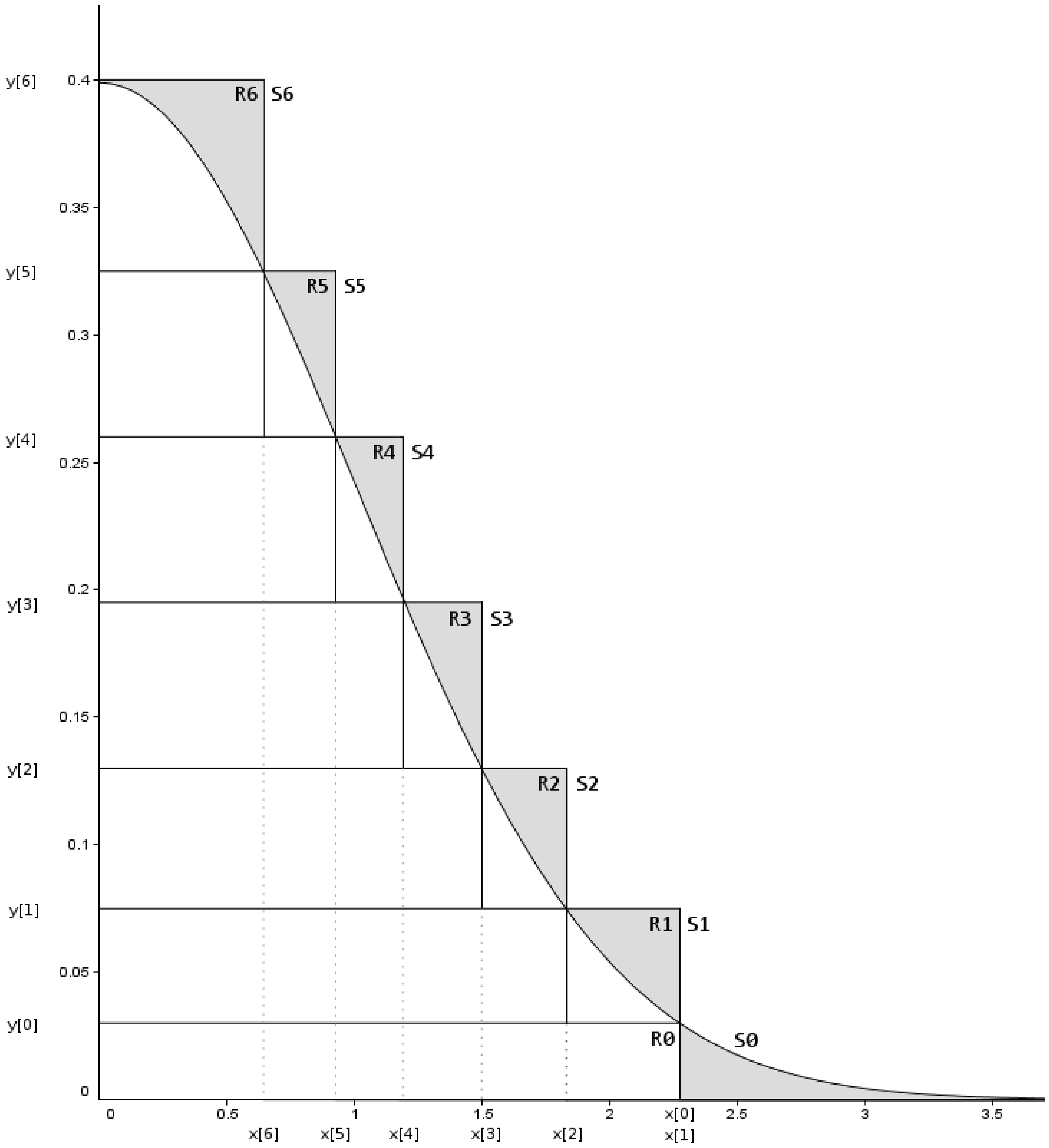
这里抽样次数达到1千万次，1秒左右就完成了，速度比暴力生成正态分布要快的多~

ps:由于`Box-Muller`算法一次性生成了两个独立且服从正态分布的随机数，所以可以把其中一个保存起来，下次直接使用即可。本文刚开始的那段代码中`nextNextGaussian`就是用来保存它的~

#0x05 Ziggurat Algorithm

`Box-Muller`算法虽然快了许多，但是由于用到了三角函数和对数函数，相对来说还是比较耗时的，如果想要更快一点有没有办法呢？

当然有，这就是`Ziggurat`算法，不仅可以用于快速生成正态分布，还可以生成指数分布等等。其基本思想就是利用**拒绝采样**，其高效的秘密在于构造了一个非常精妙的$q(x)$，看下面这张图



如果为了方便，我们当然可以直接使用一个均匀分布，也就是一个矩形，但是这样的话，矩形与正态分布曲线间的距离很大，容易造成**拒绝率很高，无用计算增加**，高效也就无从谈起了

再看看上面那张图，我们用多个堆叠在一起的矩形，这样保证阴影部分（被拒绝部分）的始终较小，这样就非常高效了

简单对图作一个解释：

- 我们用 `R[i]` 来表示一个矩形， `R[i]` 的右边界为 `x[i]` ，上边界为 `y[i]` 。 `S[i]` 表示一个分割，当 `i=0` 时， `S[0]=R[0]+tail` ，其他情况 `S[i]==R[i]`
- 除了 `R[0]` 以外，其他每个矩形面积相等，设为定值 `A` 。 `R[0]` 的面积=A- `tail` 的面积。这样保证从任何一个分割中抽样 `(x,y)` 的概率相等
- 当任意选定一个 `R[i]` 在其中抽样 `(x,y)` ，若 `x<x[i+1]` ， `y` 必然在曲线下方，满足条件，接受 `x` ；若 `x[i+1]<x<x[i]` ，则还需要进一步判断。同样这里 `R[0]` 和 `tail` 中的样本需要进行特殊处理
- 这里为了方便解释，只用了几个矩形，在程序实现的时候，一般使用 `128` 或 `256` 个矩形

可以看出，为了提高效率， `Ziggurat` 算法中使用了许多技巧性的东西，这在其 `C` 代码实现中更加明显，使用了与运算和字节等各种小技巧，代码就不在这里贴了，感兴趣可以看看下面几个版本， `C` 版本的追求的是极致的速度，每个矩形的边界已经提前计算好了。 `C#` 版本中的注释非常详细， `Java` 版的基本与 `C#` 一致，但是效率一般。

- C
- C#
- Java

最后对比一下 `Ziggurat` 算法与 `Box-muller` 算法的效率

Hardware
CPU: Intel Core i7 920
4 cores, 8 with hyperthreading (enabled).
Bloomfield / 45nm / 1.248V
Core Speed 2.798 GHz
Bus Speed 133.2 MHz
Multiplier 21x
RAM: DDR3, 3 channels. 533 MHz

Cores	Box Muller (Million samples/sec)	Ziggurat (Million samples/sec)	Speedup
1	23.2	36.7	1.58x
2	42	73.3	1.74x
3	66	108	1.63x
4	83	133	1.60x
8 (hyperthreading)	138	204	1.47

0x06 总结

本文介绍了多种生成正态分布的方法，其中 `Box-muller` 算法应对一般的需求足够了，但是要生成大量服从正态分布的随机数时， `Ziggurat` 算法效率会更高一点~

0x07 参考资料

- 大数定律与中心极限定理
- Jacobian 矩陣與行列式
- 从随机过程到马尔科夫链蒙特卡洛方法
- 随机数产生原理
- Transformed Random Variables
- Box-Muller Transform Normality
- The Ziggurat Method for Generating Random Variables
- The Ziggurat Algorithm for Random Gaussian Sampling