即将刊载于《数学》，《数学》

球面上有限均匀数据的最优量化

MRINAL KANTI ROYCHOWDHURY

arXiv:2601.03333v1 [math.OC] 6 Jan 2026

Abstract. 本文建立了单位球面 $\mathbb{S}^2$上最优量化的系统性几何理论，重点研究支撑于球面上的有限均匀概率分布，而非支撑于圆或圆弧等低维测地子集上的分布。我们首先证明最优 n均值集合的存在性，并通过质心球面 Voronoi 镶嵌对其进行刻画。由此获得三项基本结构性结果。首先，簇纯度定理表明，当支撑集由彼此充分分离的分量组成时，每个最优沃罗诺伊区域均保持在单一分量内。其次，环分配（离散注水）定理给出了描述最优代表点如何分布于多个纬度环之间的明确规则，并提供了闭式失真公式。第三，*Lipschitz* 型稳定性定理量化了支撑集发生小幅测地扰动时最优构型的稳健性。此外，本文还提出了球面版本的 Lloyd 算法：在迭代优化中，以内在（Karcher）均值替代欧几里得质心。这些结果共同为理解 $\mathbb{S}^2$上最优量化的几何与算法结构提供了统一而清晰的框架。

1. Introduction

针对概率分布的最优量化，是指用支撑集包含有限个或更少数值的离散概率分布，来估计一个给定的概率分布；该给定分布的支撑集包含无限个（离散或连续）或有限个值。它在通信、信息论、信号处理和数据压缩领域有广泛应用（见 [1, 2, 3, 4, 5, 6]）。Graf 和 Luschgy 的专著 [7] 系统而严谨地论述了概率分布的量化，包括其存在性、唯一性和高分辨率渐近性质。

设 (M, d) 为一个度量空间。设 P 是 M 上的博雷尔概率测度，且 $r \in \in (0, \infty)$。设 α 是 M 的一个局部有限子集（即，对于 M 的任意有界子集，α 与该子集的交集均为有限集）。这意味着 α 是可数且闭的。于是，P 关于集合 $\alpha \subset M$、阶数为 r 的失真误差，记为 $V_r(P; \alpha)$，定义为

$$V_r(P;\alpha) = \int \min_{a\in\alpha} d(x,a)^r dP(x).$$

于是，对于 $n \in \mathbb{N}$，P的 n阶量化误差 （阶为 r）定义为

$$V_{n,r} := V_{n,r}(P) = \inf\Big\{V_r(P;\alpha) : \alpha \subset M,\ 1 \le \operatorname{card}(\alpha) \le n\Big\}, \tag{1}$$

其中，card(A) 表示集合 A 的基数。对于概率测度 P，我们假设

$$\int d(x,0)^r dP(x) < \infty.$$

于是，存在一个集合 α 使得式（1）中的下确界能够达到（见 [7]）。若集合 α 使得式（1）中的下确界能够达到，且其元素不超过 n 个，则称其为 n个均值的最优集合，用于 P 阶 r量化。通常，文献中取 $r = 2$。如果 P 的支撑集包含无限多个元素，那么 n个均值的最优集合总是恰好包含 n 个元素（见 [7]）。当 $M = R^k$，其中 $k \in \mathbb{N}$ 且 d 是标准欧几里得度量时，针对博雷尔概率测度 P的量化问题已得到广泛研究。该方向的一些近期研究可参见 [8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19]。欧几里得情形受益于线性结构、

2020 《数学》学科分类。 主要分类 62H30、41A25；次要分类 60Exx、94A34、68U05。关键词和短语。 最优量化；球面量化；质心 Voronoi 镶嵌；离散均匀分布；测地距离；内在（Karcher）均值；Lipschitz 稳定性；环状结构数据；流形上的 Lloyd 算法。

凸性以及显式质心的可用性，从而能够推导出最优n均值及相关沃罗诺伊划分的精细性质。

当底层空间（M， d）为非欧氏时，量化问题会变得更加微妙。在黎曼流形上，距离沿测地线以内蕴方式测量，曲率会直接影响沃罗诺伊区域的几何性质以及最优代表点的结构。尤其是，由于缺乏全局线性结构和凸性，无法直接采用欧氏平均：必须以内蕴方式定义一组点的均值，通常使用 Karcher（内蕴）均值 [20, 21], ，而且必须根据测地距离构造 Voronoi 分割。因此，许多经典的欧氏量化技术无法直接推广到弯曲空间。

在黎曼流形中，二维单位球面 $\mathbb{S}^2$ 发挥着核心作用，因为球面数据和方向数据广泛存在于科学与工程应用中。典型示例包括方向统计（如风向和洋流方向、动物运动轨迹及地球物理流动）、天体物理学和行星科学（在天球上表示天体）、机器人学和航空航天工程（刚体的姿态和方向）、计算机视觉与图形学（球面区域上的头部姿态、注视方向和反射模型），以及流形上的机器学习（用于全局数据对齐的球面嵌入和模型）。

在 $\mathbb{S}^2$ 上的量化与经典欧几里得情形有着根本区别。在欧几里得空间中，距离由范数诱导，沃罗诺伊区域是凸多面体，而最优代表点由算术平均值给出。然而，在球面上，距离沿大圆测地线测量，沃罗诺伊区域体现球面几何，而最优代表点由内在（Karcher）均值决定，而非线性质心。此外，S^2 的非零曲率会影响沃罗诺伊单元的形状以及失真泛函极小化点的行为。因此，要分析球面流形上最优量化器的存在性、结构和稳定性，需要采用新的几何论证（例如，参见 [7, 20, 21, 22]）。

尽管球面流形上的最优量化理论具有重要意义，但其发展远不如欧几里得空间中的相关理论成熟。早期研究主要集中于特殊的对称分布或连续的旋转不变模型，而离散且具有结构的球面数据集受到的关注则相对有限。

近期进展与研究动机。 最近，作者着手系统发展支撑于 $\mathbb{S}^2$ 上一维测地子集的球面量化，例如大圆、小圆和测地弧 [23, 24]。这些研究给出了最优失真的显式公式、沃罗诺伊划分的几何描述，以及直观的可视化，旨在让初入该领域的研究生和研究人员能够更容易地理解球面量化。这些研究的一项重要发现是，曲率会以微妙但可量化的方式影响沃罗诺伊单元的几何形状以及最优代表点的位置。

本文将这一框架从一维支撑集扩展到完整的二维球面，研究支撑于 上的有限离散均匀分布。对于现代数据驱动应用而言，这一设定十分自然，因为球面数据往往以有限样本的形式出现。它也构成了此前研究的基于曲线的模型 [23, 24] 与更具分析复杂性的、相对于连续曲面测度进行量化的情形之间的重要桥梁。

本文所说的球面上的有限离散均匀分布，是指对单位球面上的有限点集赋予相等权重而得到的概率分布。这类分布自然来源于有限球面数据集，其中每个观测值都被平等对待，而球面的几何结构决定了距离和最优逼近的概念。

本文的目标与贡献。 </style}本研究的主要目标是，在有限均匀数据的设定下，为 $\mathbb{S}^2$ 上的最优量化建立一种几何上清晰易懂的理论，其中量化问题被表述为平方测地失真的最小化，而最优量化器恰好是 n 均值的最优集合。更具体地说，我们考虑一个有限集

$$X = \{x_1, x_2, \ldots, x_M\} \subset \mathbb{S}^2,$$

其中每个点具有相同的概率质量，并探究最优代表点的结构与计算方面。主要贡献概述如下:

•**存在性与刻画**。 我们证明，对于球面上的所有有限均匀分布，最优的 n 均值均存在，并通过球面 Voronoi 划分和内在（Karcher）均值刻画这类最优构型。这建立了欧几里得质心 Voronoi 特征的精确几何类比。

• **最优簇的结构理论**。 我们推导出三个新结果，描述离散球面支撑集上最优 Voronoi 簇的内部组织：（1）簇纯度定理表明，当 X 分解为彼此充分分离的分量（例如纬度环）时，最优 Voronoi 区域仍局限于单个分量；（2）针对多纬度数据的环分配原则 揭示，每个环上的最优码点数量遵循离散注水规则；（3）*Lipschitz* 型稳定性定理表明，在较小的测地扰动下，最优构型会随支撑集连续变化。

•**算法框架**。 我们构建了 Lloyd 算法的球面类比版本，其中用内在均值取代欧几里得质心，并通过测地距离定义沃罗诺伊划分。

2. Notation and Preliminaries

Let

$$\mathbb{S}^2 = \{x \in \mathbb{R}^3 : \|x\| = 1\}$$

表示 $\mathbb{R}^3$ 中的单位球面，其上赋有由标准黎曼度量诱导的测地距离。我们使用球坐标 $x = (\phi,\ \theta)$, 其中 $\phi \in \left[-\frac{\pi}{2},\ \frac{\pi}{2}\right]$ 表示纬度， $\theta \in [0, 2\pi)$ 表示经度。 x 的相应笛卡尔表示为

$$x = (x, y, z) = (\cos\phi\cos\theta,\ \cos\phi\sin\theta,\ \sin\phi).$$

2.1. **测地距离**。 对于 $x_1 = (\phi_1,\ \theta_1)$ 和 $x_2 = (\phi_2,\ \theta_2)$, 其中两者均属于 $\mathbb{S}^2$, 测地距离为

$$d_G(x_1, x_2) = \arccos\big(\sin\phi_1\sin\phi_2 + \cos\phi_1\cos\phi_2\cos(\theta_1 - \theta_2)\big). \tag{2}$$

2.2. $\mathbb{S}^2$**上的有限离散均匀分布**。 设

$$X = \{x_1, x_2, \ldots, x_M\} \subset \mathbb{S}^2$$

是一个由互不相同的点组成的有限集 球面上的点。相应的离散均匀概率测度为

$$P = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\delta_{x_i}, \tag{3}$$

其中， δ_{x_i} 表示位于 x_i处的狄拉克测度。因此， P 为每个支撑点 $1/M$ 赋予相同的质量，代表以均匀权重对球面进行有限采样。与连续曲面测度不同，分布 P 的支撑集是一个有限集；然而，其底层几何仍由度量 d_G决定。

2.3. **失真 与最优** n**–均值**。 对于一组代表点（量化器）

$$Q = \{q_1, q_2, \ldots, q_n\} \subset \mathbb{S}^2,$$

阶数为 $r > 0$ 的失真定义为

$$V_{n,r}(P; Q) = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\min_{1\le j\le n} d_G(x_i, q_j)^r. \tag{4}$$

使用 n 个代表点时可达到的最小失真为

$$V_{n,r}(P) = \inf_{Q\subset\mathbb{S}^2,\,|Q|\le n} V_{n,r}(P; Q), \tag{5}$$

任何达到此下确界的 Q^* 都称为 n均值最优集合。为简洁起见，当 $r = 2$时，我们记作 $V_n(P) := V_{n,2}(P)$。

注 2.4. 由于 P具有有限支撑，且$(\mathbb{S}^2)^n$ 是紧致的，映射$Q \mapsto V_{n,\,2}(P;\, Q)$是连续的。因此， n均值的最优集合总是存在的，不过当 P 的支撑集具有对称性时，它未必唯一。

2.5. **球面 Voronoi 划分。** 给定 $Q = \{q_1, \ldots, q_n\}$，与 q_j 关联的球面 Voronoi 区域为

$$V_j(Q) = \{x \in \mathbb{S}^2 : d_G(x, q_j) \le d_G(x, q_k) \text{ for all } k\}. \tag{6}$$

S由于 P 支撑在 X上，我们将分配给 q_j 的离散簇定义为

$$X_j(Q) = X \cap V_j(Q) = \{x_i \in X : d_G(x_i, q_j) \le d_G(x_i, q_k) \text{ for all } k\}. \tag{7}$$

注 2.6. 当 P 均匀分布时，基数 $|X_j(Q)|$ 决定了总失真和中每个簇的权重。无需对球面面积进行显式积分，但 $\mathbb{S}^2$的几何仍会影响距离 d_G ，进而影响最优配置。

2.7. **球面上的内在（Karcher）均值。** 对于包含在半径小于 $\frac{\pi}{2}$ 的测地球中的任意非空有限集 $A \subset \mathbb{S}^2$ ，A 的内在（Karcher）均值是唯一的点

$$q_A = \arg\min_{q \in \mathbb{S}^2} \sum_{x \in A} d_G(x, q)^2. \tag{8}$$

Karcher [20] 证明，在所述半径条件下，这样的极小化点存在且唯一。直观而言， q_A 在沿测地线测量距离时，起到欧几里得质心的作用。

注 2.8（关于内在均值的约定）。 全文中，只要对有限子集 $A \subset S^2$提及内在（Karcher）均值，我们就默认假设 A 包含在半径严格小于 $\pi/2$的测地球内。在此条件下，Karcher 的经典结果保证内在均值存在且唯一。第 4–7 节中讨论的所有簇都满足这一条件，要么是因为它们位于同一个足够小的球面分量内，要么是因为它们构成固定纬度上的连续块，且其测地直径严格小于$\pi/2$。

定义 2.9（质心 Voronoi 配置）。 若构型 $Q = \{q_1, \ldots, q_n\}$ 满足：对于离散分布 P ，每个代表点 q_j 都与其所在簇 $X_j(Q)$的内在均值重合，则称该构型为质心型。等价地，配对$(Q, \{X_j(Q)\})$ 构成有限集 X的质心球面 Voronoi 镶嵌。

注记 2.10。 在欧几里得情形中，质心 Voronoi 构型对应于失真泛函的驻点。同样的刻画可推广到球面情形，并为第 3–7 节中发展的结果提供变分基础。

2.11. **符号汇总。** 为方便读者，现将全文使用的主要符号约定汇总如下。

- $\mathbb{S}^2$： $\mathbb{R}^3$ 中的单位球面，配备测地距离 d_G。
- $d_G(x, y)$： $x, y \in S^2$之间的测地（大圆）距离。
- $X = \{x_1, \ldots, x_M\} \subset S^2$：离散均匀分布的有限支撑集。
- $P = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M} \delta_{x_i}$： X上的离散均匀概率测度。
- $Q = \{q_1, \ldots, q_n\} \subset S^2$： n 代表点（量化器）的集合。
- $V_n(P;\, Q)$：与 Q和 P相关的失真。
- $V_n(P)$：所有 n点构型中的最小失真。
- $V(q)$：与 $q \in Q$相关的球面 Voronoi 区域。
- $X_q = X \cap V(q)$：分配给 q的簇。
- q_A：有限集 $A \subset S^2$的内在（Karcher）均值。
- R_t：纬度为 ϕ_t的第 t个纬度环。
- k_t：分配给环 R_t的代表点数量。
- $E_t(k)$：由 k 个代表点服务时， R_t 所贡献的最小失真。

3. Existence and Characterization of Optimal n–Means

根据紧性论证，可以直接得出 $\mathbb{S}^2$ 上有限离散均匀分布的最优配置存在。本节将证明这一存在性结果，并给出质心型刻画，为后续所有定理奠定基础。

命题 3.1 (最优集合的存在性)。 设 P 是 $\mathbb{S}^2$ 和 $n \geq 1$ 上的有限离散均匀分布。那么至少存在一个构型 $Q^* \subset \mathbb{S}^2$，满足 $|Q^*| \leq n$，使得

$$V_{n,2}(P; Q^*) = \min_{Q \subset \mathbb{S}^2, |Q| \leq n} V_{n,2}(P; Q).$$

每个这样的 Q^* 都称为 P 的 n 均值最优集合。

证明。 空间 $(\mathbb{S}^2)^n$ 是紧致的，且函数

$$F(q_1, \ldots, q_n) = V_{n,2}(P; \{q_1, \ldots, q_n\}) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \min_{1 \leq j \leq n} d_G(x_i, q_j)^2$$

是连续的。因此， F 在 $(\mathbb{S}^2)^n$ 上取得其最小值。与此最小值对应的构型 Q^* 是 n 均值的最优集合。□

注 3.2. 最优配置不一定唯一。如果 P 的支撑集具有非平凡对称性（例如正多面体的顶点），那么将最优配置按该对称群中的任意旋转变换后，得到的仍是最优配置。

3.2. **球面 Voronoi 划分与质心性质**。 对于一个构型 $Q = \{q_1, \ldots, q_n\}$，回顾第 2 节，球面 Voronoi 单元定义如下:

$$V_j(Q) = \{x \in \mathbb{S}^2 : d_G(x, q_j) \leq d_G(x, q_k) \text{ for all } k\},$$

并且 $X_j(Q) = X \cap V_j(Q)$ 是与 P相关联的离散簇。以下定理通过质心结构刻画最优配置。

定理 3.3 (必要质心条件). 设 $P = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \delta_{x_i}$ 是有限集 $X \subset \mathbb{S}^2$上的均匀概率测度，并令 $n \geq 1$。对于一个构型 $Q = \{q_1, \ldots, q_n\} \subset \mathbb{S}^2$，记

$$X_j(Q) := \{\, x \in X : \ d_G(x, q_j) \leq d_G(x, q_k) \ \textit{for all } k \,\}$$

and

$$V_{n,2}(P; Q) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \min_{1 \leq j \leq n} d_G(x_i, q_j)^2.$$

若 Q^* 是 P的 n–均值最优集合，则对于最近邻簇 $X_j^* := X_j(Q^*)$，对每个 j，都有

$$q_j^* \in \arg\min_{q \in \mathbb{S}^2} \sum_{x \in X_j^*} d_G(x, q)^2.$$

换言之，每个最优代表点都是其所属簇的内在（*Karcher*）均值，而最优划分就是最近邻划分。

注 3.4 （质心条件并非充分条件）。 定理 3.3中的最近邻条件和质心型（内在均值）条件是必要条件，但一般来说并非充分条件，不足以保证最优性。下面这个关于 $\mathbb{S}^2$ 的简单例子清楚地说明了这一点，并明确验证了最近邻分配。

例（四个赤道点， $n = 2$）。取 $\alpha \in (0, \frac{\pi}{2})$，并考虑 $\mathbb{S}^2$赤道上的四个点:

$$x_1 = (0, 0), \quad x_2 = (0, \alpha), \quad x_3 = (0, \pi), \quad x_4 = (0, \pi + \alpha),$$

在球坐标（ϕ， θ）中。沿赤道的距离由环绕角差测量

$$d_G\big((0, \theta), (0, \theta')\big) = \min\big\{|\theta - \theta'|,\ 2\pi - |\theta - \theta'|\big\}.$$

设 P为 $\{x_1, x_2, x_3, x_4\}$ 上的均匀测度，并取 $n = 2$。

配置 A（相邻点对）。簇：

$$C_1 = \{x_1, x_2\}, \qquad C_2 = \{x_3, x_4\}.$$

由于每个簇中的间隔为 $\alpha < \pi$，每个两点簇都在较短测地弧的中点处具有唯一的 内在均值：

$$q_1 = (0, \tfrac{\alpha}{2}), \qquad q_2 = (0, \pi + \tfrac{\alpha}{2}).$$

配置 A 的最近邻检查：对于每个点，我们将其与 q_1 和 q_2 的距离进行比较。

- 对于 $x_1 = (0,\ 0)$:

$$d_G(x_1, q_1) = \tfrac{\alpha}{2}, \qquad d_G(x_1, q_2) = \pi - \tfrac{\alpha}{2} > \tfrac{\alpha}{2}.$$

因此 x_1 被分配给 q_1。

- 对于 $x_2 = (0,\ \alpha)$：

$$d_G(x_2, q_1) = \tfrac{\alpha}{2}, \qquad d_G(x_2, q_2) = \pi - \tfrac{\alpha}{2} > \tfrac{\alpha}{2}.$$

因此， x_2 被分配给 q_1。

- 对于 $x_3 = (0,\ \pi)$：

$$d_G(x_3, q_2) = \tfrac{\alpha}{2}, \qquad d_G(x_3, q_1) = \pi - \tfrac{\alpha}{2} > \tfrac{\alpha}{2}.$$

因此， x_3 被分配给 q_2。

- 对于 $x_4 = (0,\ \pi + \alpha)$：

$$d_G(x_4, q_2) = \tfrac{\alpha}{2}, \qquad d_G(x_4, q_1) = \pi - \tfrac{\alpha}{2} > \tfrac{\alpha}{2}.$$

因此， x_4 被分配给 q_2。

因此，最近邻规则恰好生成簇 C_1 和 C_2。每个点到其代表点的距离为 $\frac{\alpha}{2}$，因此

$$V_{2,2}(P; Q_A) = \frac{1}{4}\Big[4\big(\tfrac{\alpha}{2}\big)^2\Big] = \frac{\alpha^2}{4}.$$

配置 B（交叉配对）。簇：

$$C_1' = \{x_1, x_4\}, \qquad C_2' = \{x_2, x_3\}.$$

由于簇内间距为 $\pi - \alpha < \pi$，每个双点簇都在较短测地弧的中点处具有唯一的内在均值。从 0 到 $\pi + \alpha$ 的带符号较短差为 $-(\pi - \alpha)$，因此

$$q_1' = \Big(0, -\frac{\pi - \alpha}{2}\Big) \equiv \Big(0, \frac{3\pi + \alpha}{2}\Big) \pmod{2\pi}, \qquad q_2' = \Big(0, \alpha + \frac{\pi - \alpha}{2}\Big) = \Big(0, \frac{\pi}{2} + \frac{\alpha}{2}\Big).$$

配置 B 的最近邻检查：

$$\begin{aligned}
&\text{For } x_1 = (0,0): && d_G(x_1, q_1') = \tfrac{\pi-\alpha}{2}, && d_G(x_1, q_2') = \tfrac{\pi}{2} + \tfrac{\alpha}{2} > \tfrac{\pi-\alpha}{2};\\
&\text{For } x_4 = (0,\pi+\alpha): && d_G(x_4, q_1') = \tfrac{\pi-\alpha}{2}, && d_G(x_4, q_2') = \tfrac{\pi}{2} + \tfrac{\alpha}{2} > \tfrac{\pi-\alpha}{2};\\
&\text{For } x_2 = (0,\alpha): && d_G(x_2, q_2') = \tfrac{\pi-\alpha}{2}, && d_G(x_2, q_1') = \tfrac{\pi}{2} + \tfrac{\alpha}{2} > \tfrac{\pi-\alpha}{2};\\
&\text{For } x_3 = (0,\pi): && d_G(x_3, q_2') = \tfrac{\pi-\alpha}{2}, && d_G(x_3, q_1') = \tfrac{\pi}{2} + \tfrac{\alpha}{2} > \tfrac{\pi-\alpha}{2}.
\end{aligned}$$

因此，最近邻规则恰好得到 C_1' 和 C_2'，并且每个点到其代表点的距离均为 $(\pi - \alpha)\ /2$。所以

$$V_{2,2}(P; Q_B) = \frac{1}{4}\Big[4\Big(\frac{\pi - \alpha}{2}\Big)^2\Big] = \frac{(\pi - \alpha)^2}{4}.$$

结论。 Q_A 和 Q_B 均满足最近邻条件和质心条件，但 Q_A 产生的失真严格更小。因此，这些条件不足以保证最优性。

注释 3.5。 前述示例说明，质心 Voronoi 构型对应于失真泛函的驻点，但不一定是全局最优的。特别是，多个质心配置可能以不同的失真值共存，并且还需要额外的结构性论证来确定全局极小化点。

注释 3.6. 定理 3.3 为最优配置提供了纯几何解释：每个代表点都使其所属簇的球面转动惯量最小。特别地，如果支撑集 X 在对称群 $G \subset O(3)$ 下保持不变，那么可以寻找 G不变的质心配置，这类配置往往就是全局极小化点。

4. Quantization on Finite Latitudinal Rings

本节分析单位球面上由有限个纬度环支撑的有限离散均匀分布的最优量化。为使阐述清晰，我们先概述本节的主要结构性结果，再给出技术引理及其证明。

注释 4.1 (无跨环混合)。 本节结果所依托的一项关键结构特征是：在离散均匀测度下，最优沃罗诺伊单元不会混合来自不同纬度环的点。下文将严格证明这一性质（见定理 4.4 和定理4.6(ii)），这意味着量化问题可按环分解。因此，各环之间代表点的全局分配可表述为一个离散优化问题，并自然导出本节稍后介绍的注水原理。

4.2. 离散环构型。固定互不相同的纬度 ϕ_1， ϕ_2，……， $\phi_T \in \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right]$，其中 $\phi_1 < \phi_2 < \cdots < \phi_T < \frac{\pi}{2}$，并令 $N_t \geq 1$ 表示第 t 个环上的等间距点数。因此，每个环都是

$$R_t = \{x_{t,j} = (\phi_t, \theta_{t,j}) : \theta_{t,j} = 2\pi j/N_t,\ j = 0, 1, \ldots, N_t - 1\},$$

其中 $(\phi,\ \theta)$ 表示球面 坐标，定义见第 2 节。总支撑集是互不相交的并 n

$$X = \bigsqcup_{t=1}^{T} R_t, \qquad M = \sum_{t=1}^{T} N_t,$$

相应的概率分布为

$$P = \frac{1}{M} \sum_{t=1}^{T} \sum_{j=1}^{N_t} \delta_{x_{t,j}},$$

它是 由这些 T 纬度环支撑的有限离散均匀分布。

核心结构性结果。 我们首先介绍描述最优 Voronoi 划分的几何结构以及代表点在各纬度环之间分配情况的主要定理。

定理 4.3 （最优簇在环内的连续性）。 固定一个纬度 $\phi \in (-\frac{\pi}{2}、\ \frac{\pi}{2})$ ，考虑由 N 个等间距点组成的环

$$R_\phi = \{(\phi, \theta_j) :\ \theta_j = 2\pi j/N,\ j = 0, 1, \ldots, N-1\}.$$

设 $Q = \{q_1, \ldots, q_n\} \subset \mathbb{S}^2$ 是一个最优的 n均值集合，并且对于每个 $q_i \in Q$，令 V_i表示其沃罗诺伊区域。则对于每个 i，分配给 q_i的环上点集合，即

$$X_i := R_\phi \cap V_i,$$

（如果非空）是该环上按经度循环顺序排列的单个连续块。

定理 4.4 （分离分量的簇纯度）。 设 $X = \bigsqcup_{t=1}^{T} C_t \subset \mathbb{S}^2$ 是一个分解为两两不交的非空分量 C_t 的有限集。假设对每个 t，都存在一个点$p_t \in \mathbb{S}^2$ 和一个半径 $r > 0$，使得

$$C_t \subset B(p_t, r) \quad \textit{and} \quad B(p_s, r) \cap B(p_t, r) = \varnothing \ \ \textit{for all } s \neq t, \tag{9}$$

其中

$$B(p_t, r) := \{x \in \mathbb{S}^2 : d_G(x, p_t) < r\}$$

表示半径为 r 且以球面上的点 p_t 为中心的开测地球。注意，p_t 位于 $\mathbb{S}^2$的表面上，距离是沿大圆弧以内在方式测量的。

设 P是 X上的均匀概率测度，且 $Q^* = \{q_1^*, \ldots, q_n^*\}$ 是针对 P的 n均值最优集合。那么，每个沃罗诺伊区域 $V(q_j^*)$ 至多与一个分量 C_t相交。因此，没有任何最优沃罗诺伊单元包含来自两个不同分量的点。

注 4.5. 条件 $C_t \subset B(p_t, r)$表示每个分量都位于球面上以 p_t 为中心的一个小球面区域内。由于使用的是测地距离，$B(p_t, r)$应被视为 $\mathbb{S}^2$上的一个弯曲区域，而不是一个三维球体。分离条件 $B(p_s, r) \cap B(p_t, r) = \varnothing$确保各分量在球面上彼此充分分离。直观地说，这样的小区域中的点总是比起靠近另一小区域的中心，更接近位于本区域内的中心，因此，让一个沃罗诺伊区域包含来自两个不同分量的点并非最优。

定理 4.6 (环形划分与分配原理)。设 P 是支撑在 T 个纬度环 $R_t = \{(\phi_t, \theta_{t,j}) : \theta_{t,j} = 2\pi j/N_t,\ j = 0, \ldots, N_t - 1\}$ 上的离散均匀分布，这些纬度各不相同，且设 Q^* 是 P 的一个最优 n 均值集合。那么：

(i)**环内连续性与中点代表点**。对于每个 t，子集 R_t 被 Q^* 划分为 $k_t \geq 0$ 个按循环顺序排列的连续经度块。每个非空块的长度为 $\lfloor N_t/k_t \rfloor$ 或 $\lceil N_t/k_t \rceil$，其代表点 $q \in Q^*$ 位于纬度 ϕ_t 上，处于该块经度范围的中点。

(ii)**不发生跨环混合**。每个最优沃罗诺伊簇 $X_j(Q^*)$ 都包含在单个环 R_t 内；等价地说，没有任何沃罗诺伊区域与两个不同的环相交。

(iii)**离散注水分配**。令 $E_t(k)$ 表示在 R_t 上恰好由 k 个代表点服务 R_t 时的最小环内失真（具有 (i) 中的连续性/中点结构）。那么 E_t 关于 k 严格递减且离散凸，而全局问题

$$\min_{k_1, \ldots, k_T \in \mathbb{Z}_{\geq 0}} \sum_{t=1}^{T} E_t(k_t) \qquad subject\ to \qquad \sum_{t=1}^{T} k_t = n$$

可通过依次将每个新增代表点分配给边际失真降幅最大的环来求解 $\Delta_t(k) := E_t(k) - E_t(k+1)$（离散注水规则）。

上述定理概括了按纬度组织的球面数据的最优量化器在几何和组合结构方面的基本特征。

We 现在汇集证明核心结果所需的技术引理。

引理 4.7（纵向代价的凸性）。固定 $\phi \in (-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ 并定义

$$f_\phi(\Delta\theta) := d_G\big((\phi, 0), (\phi, \Delta\theta)\big)^2, \qquad \Delta\theta \in [0, \pi].$$

那么 f_ϕ 是 $\Delta\theta$ 的偶函数，并且在 $(0, \pi)$ 上严格凸。

证明。偶性。根据球面余弦定理，

$$d_G\big((\phi, 0), (\phi, \Delta\theta)\big) = \arccos\Big(\sin^2\phi + \cos^2\phi \cos\Delta\theta\Big).$$

由于 $\cos(\Delta\theta)$ 关于 $\Delta\theta$ 为偶函数，因此 arccos 的自变量是偶函数，所以 $d_G\big((\phi, 0), (\phi, \Delta\theta)\big)$ 是偶函数，$f_\phi(\Delta\theta)$ 也是偶函数。

严格凸性。令 $c := \cos\phi \in (0, 1]$ 并记

$$\sigma(\Delta\theta) := d_G\big((\phi, 0), (\phi, \Delta\theta)\big).$$

利用恒等式 $\cos\sigma = \sin^2\phi + \cos^2\phi\cos\Delta\theta = 1 - 2c^2\sin^2(\Delta\theta/2)$，我们得到便于使用的形式

$$\sigma(\Delta\theta) = 2\arcsin\big(c\,\sin(\Delta\theta/2)\big), \qquad \Delta\theta \in [0, \pi].$$

因此

$$f_\phi(\Delta\theta) = \sigma(\Delta\theta)^2.$$

我们将证明，对于 $\Delta\theta \in (0,\pi)$， $f_\phi''(\Delta\theta) > 0$。

令 $w(\Delta\theta) := c\sin(\Delta\theta/2)$ 和 $D(\Delta\theta) := \sqrt{1-w(\Delta\theta)^2} = \sqrt{1-c^2\sin^2(\Delta\theta/2)}$。于是，通过求导，

$$\sigma'(\Delta\theta) = \frac{c\cos(\Delta\theta/2)}{D(\Delta\theta)}, \qquad \sigma''(\Delta\theta) = -\frac{c(1-c^2)\,\sin(\Delta\theta/2)}{2\,D(\Delta\theta)^3}.$$

（这些可由 $\sigma = 2\arcsin w$ 得出，因此 $\sigma' = 2w'/\sqrt{1-w^2}$ with $w' = \frac{c}{2}\cos(\Delta\theta/2)$，再对 D^{-1} 直接求导即可。）

由于 $f_\phi = \sigma^2$，我们有

$$f_\phi''(\Delta\theta) \;=\; 2\big(\sigma'(\Delta\theta)^2 + \sigma(\Delta\theta)\sigma''(\Delta\theta)\big).$$

为了证明其为正，将所有内容改写为关于 σ 和 $\Delta\theta$ 的形式会很有帮助，所用关系为

$$\cos\sigma = 1 - 2c^2\sin^2\Big(\frac{\Delta\theta}{2}\Big).$$

由于 $\sigma = 2\arcsin\, w$ with $w(\Delta\theta) := c\sin(\Delta\theta/2)$，我们还有

$$\sin\sigma = 2\sin\Big(\frac{\sigma}{2}\Big)\cos\Big(\frac{\sigma}{2}\Big) = 2w\sqrt{1-w^2} = 2c\sin\Big(\frac{\Delta\theta}{2}\Big)D(\Delta\theta),$$

其中 $D(\Delta\theta) := \sqrt{1-w(\Delta\theta)^2} = \sqrt{1-c^2\sin^2(\Delta\theta/2)}$。特别地，对于 $\Delta\theta \in (0,\pi)$，$\sin\sigma > 0$，因此在下文中我们可以直接除以 $\sin\sigma$。

从下式出发，经过简单的代数运算

$$\sigma'(\Delta\theta) = \frac{c^2\sin\Delta\theta}{\sin\sigma}, \qquad \sigma''(\Delta\theta) = \frac{c^2\cos\Delta\theta}{\sin\sigma} - \frac{c^4\cos\sigma\,\sin^2\Delta\theta}{\sin^3\sigma},$$

（它们等价于先前得到的关于 σ' 和 σ''的表达式），可得恒等式

$$f_\phi''(\Delta\theta) = \frac{2c^4\sin^2\Delta\theta}{\sin^3\sigma}(\sin\sigma - \sigma\cos\sigma) + \frac{2c^2\sigma\cos\Delta\theta\,\sin^2\sigma}{\sin^3\sigma}. \qquad (*)$$

现在，对于每个 $\sigma \in (0,\pi)$，有

$$\sin\sigma - \sigma\cos\sigma > 0,$$

这等价于经典结论：$t \mapsto \sin_t t$ 在 $(0,\pi)$ 上严格递减。因此，只要 $\sin\Delta\theta \neq 0$，即对于 $\Delta\theta \in (0,\pi)$，$(*)$ 中括号内的第一项就严格为正。第二项 $\sigma\cos\Delta\theta\sin^2\sigma$ 可能变号，但有下界；而第一项严格为正，并且在任意内点附近占主导。由于前因子 $c^2\sin^3\sigma$ 为正，我们得出

$$f_\phi''(\Delta\theta) > 0 \quad \text{for all } \Delta\theta \in (0,\pi),$$

这证明了在 $(0,\ \pi)$ 上的严格凸性。 □

注 4.8（初学者直觉）。 f_ϕ 的严格凸性源于这样一个事实：在球面上，沿纬圈的测地距离会随着经度间隔的增大而“快于线性”地增长。关键不等式

$$\sin\sigma - \sigma\cos\sigma > 0 \qquad \text{for all } \sigma \in (0,\pi)$$

表明函数 $\sin_\sigma \sigma$ 在 $(0,\ \pi)$ 上严格递减。从几何上看，这意味着随着 σ 增大，球面弧的“弯曲程度”越来越大，因此 $\Delta\theta$ 的增量对距离平方的贡献也越来越大。这种曲率效应迫使二阶导数 $f_\phi''(\Delta\theta)$ 在 $(0,\ \pi)$ 上始终为正，这正是严格凸性的定义。

推论 4.9（环上的唯一边界）。固定 $\phi \in \big(-\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{2}\big)$，设 $q_i = (\phi,\alpha_i)$ 和 $q_j = (\phi,\alpha_j)$是同一纬度上的两个不同点。考虑连接 α_i 与 α_j的较短经度区间（弧） $I \subset \mathbb{R}/(2\pi\mathbb{Z})$。那么存在唯一的经度 $\theta^* \in I$，使得

$$d_G\big((\phi,\theta^*),q_i\big) = d_G\big((\phi,\theta^*),q_j\big).$$

此外，对于 $\theta \in I$，有

$$\theta < \theta^* \implies d_G\big((\phi,\theta),q_i\big) < d_G\big((\phi,\theta),q_j\big), \qquad \theta > \theta^* \implies d_G\big((\phi,\theta),q_i\big) > d_G\big((\phi,\theta),q_j\big).$$

特别地，沿着较短弧 I ， q_i 和 q_j 之间的沃罗诺伊边界与环恰好相交于一个点。

证明。 将沿纬度的平方距离 ϕ写成引理4.7中的形式：

$$f_\phi(\Delta\theta) := d_G\big((\phi,0),(\phi,\Delta\theta)\big)^2, \qquad \Delta\theta \in [0,\pi].$$

由引理 4.7， f_ϕ 在 $(0,\pi)$ 上是偶函数且严格凸。用变量 I 参数化较短弧$t \in [0,L]$ （其中 $L \in (0,\pi]$ 是经度方向的弧长），使得 $\theta(t)$ 沿着 I从 α_i移动到α_j 。那么，沿 I 到 q_i 和 q_j 的平方距离可以写成

$$D_i(t) = f_\phi(t), \qquad D_j(t) = f_\phi(L-t).$$

定义 $g(t) := D_i(t) - D_j(t) = f_\phi(t) - f_\phi(L-t)$，其中 $t \in [0,L]$。由于 f_ϕ 在 $(0,\pi)$ 上可微且严格凸，其导数在 $(0,\pi)$ 上严格递增。因此，对于 $t \in (0,L)$，

$$g'(t) = f'_\phi(t) + f'_\phi(L-t) > 0,$$

因为 f'_ϕ严格递增，而 f_ϕ的奇对称性意味着对于 $u \in (0,\pi)$， $f'_\phi(u) \geq 0$。因此 g在 $[0,L]$上严格递增。此外，

$$g(0) = f_\phi(0) - f_\phi(L) < 0, \qquad g(L) = f_\phi(L) - f_\phi(0) > 0.$$

由连续性和严格单调性，存在唯一的 $t^* \in (0,L)$，使得 $g(t^*) = 0$。等价地，$\theta^* := \theta(t^*)$ 是 I 上两段距离相等的唯一点。 g 的符号严格变化，因此在 θ^* 两侧得到所述不等式。□

定理 4.3 的证明。 固定一个纬度 $\phi \in \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$ 并考虑环

$$R_\phi = \{(\phi,\theta_j) : \theta_j = 2\pi j/N,\ j = 0,\dots,N-1\}.$$

设 $Q = \{q_1,\dots,q_n\} \subset \mathbb{S}^2$ 是由 n 个均值构成的最优集合，并对每个 q_i 记

$$X_i := R_\phi \cap V(q_i)$$

the 在由 Q 诱导的沃罗诺伊划分下，分配给 q_i 的环上点集合 .

步骤 1：将代表点约化到环上。 设 $X_i \neq \emptyset$。若 q_i 不位于纬度 ϕ 上，则将 q_i 沿环所在位置的球面切平面反射，得到一个关于 R_ϕ 对称的点 q_i' 。对于每个 $x \in R_\phi$ ，有

$$d_G(x,q_i) = d_G(x,q_i').$$

令 $\tilde{q}_i$ 为连接 q_i 和 q_i'的测地线段的中点。则 $\tilde{q}_i$ 位于纬度 ϕ 上，并满足

$$d_G(x,\tilde{q}_i) \leq d_G(x,q_i) \quad \text{for all } x \in R_\phi,$$

等号成立当且仅当 q_i 已经位于该环上。用 $\tilde{q}_i$ 替换 q_i 不会增加总失真。因此，在不失最优性的前提下，每个为环上点提供服务的代表点都位于 R_ϕ上。

步骤2：环上两个代表点之间的唯一边界。设 $q_i = (\phi,\alpha_i)$ 和$q_j = (\phi,\alpha_j)$ 是位于 R_ϕ上的两个不同代表点。根据推论4.9，沿着连接 R_ϕ 与α_i 的 α_j 较短弧，存在唯一一个经度 θ^* 使得

$$d_G\big((\phi,\theta^*),q_i\big) = d_G\big((\phi,\theta^*),q_j\big),$$

平方距离之差恰好改变一次符号。因此， q_i 与 q_j 之间的沃罗诺伊边界恰好在一点处与该环相交，并且该环被划分为两段连续的圆弧，一段分配给 q_i ，另一段分配给 q_j。

步骤3：排除不连通的分配。反设 X_i 沿环的循环顺序并不连续。那么存在三个连续的环上点 x_a， x_b，$x_c \in R_\phi$ （按循环顺序排列），使得

$$x_a, x_c \in X_i, \qquad x_b \in X_j$$

对于某个 $j \neq i$。特别是，

$$d_G(x_b,q_j) \leq d_G(x_b,q_i), \qquad d_G(x_a,q_i) \leq d_G(x_a,q_j), \qquad d_G(x_c,q_i) \leq d_G(x_c,q_j).$$

然而，根据引理 $f_\phi(\Delta\theta)$ 中的严格凸性（引理 4.7）以及推论 4.9中的单调性结果，函数

$$x \longmapsto d_G(x,q_i)^2 - d_G(x,q_j)^2$$

沿环的一段连通弧，符号不能改变两次。因此，将 x_b 分配给 q_j，同时将其紧邻的两个邻居分配给 q_i，这与符号仅改变一次的性质相矛盾。等价地，将 x_b从 q_j 重新分配给 q_i 会严格降低总失真，这与 Q的最优性相矛盾。

结论。因此，每个非空的 X_i 都必须由环上连续经度（按循环顺序）组成的单个连续块构成。证明至此完成。□

定理的证明 4.4。反设存在一个最优沃罗诺伊区域$V(q^*)$，它与两个不同的分量 C_s 和 C_t 相交，其中 $s \neq t$。定义

$$A := C_s \cap V(q^*), \qquad B := C_t \cap V(q^*),$$

并注意到 A 和 B 都非空。

根据假设，$A \subset B(p_s, r)$ 和 $B \subset B(p_t, r)$，其中测地球 $B(p_s, r)$ 和 $B(p_t, r)$ 不相交。因此，对于所有 $x \in A$ 和 $y \in B$，

$$d_G(x,p_s) < d_G(x,p_t), \qquad d_G(y,p_t) < d_G(y,p_s).$$

Let

$$q_s := \arg\min_{q\in S^2} \sum_{x\in A} d_G(x,q)^2, \qquad q_t := \arg\min_{q\in S^2} \sum_{y\in B} d_G(y,q)^2$$

分别表示 A 和 B 的内在（Karcher）均值。由于 $A \subset B(p_s, r)$ 和 $B \subset B(p_t, r)$，因此可得

$$q_s \in B(p_s, r), \qquad q_t \in B(p_t, r).$$

由 q_s 和 q_t 的最优性可得

$$\sum_{x\in A} d_G(x,q_s)^2 \le \sum_{x\in A} d_G(x,q^*)^2, \qquad \sum_{y\in B} d_G(y,q_t)^2 \le \sum_{y\in B} d_G(y,q^*)^2.$$

如果两个不等式都取等号，那么 $q^* = q_s = q_t$，这不可能，因为 q_s 和 q_t 位于互不相交的测地球内。因此，上述不等式至少有一个是严格不等式，从而

$$\min\left\{ \sum_{u\in A\cup B} d_G(u,q_s)^2, \sum_{u\in A\cup B} d_G(u,q_t)^2 \right\} < \sum_{u\in A\cup B} d_G(u,q^*)^2.$$

令 $q^\dagger \in \{q_s, q_t\}$ 为取得上述最小值的点，并定义

$$\widetilde{Q} := (Q^* \setminus \{q^*\}) \cup \{q^\dagger\}.$$

~ ~于是 $|Q| = n$。将 X 中的每个点分配给 Q 中离它最近的代表点。对于 $A \cup B$ 中的点，总失真严格减小，而对于所有其他点，失真不增加。因此，

$$V_n(\widetilde{Q}; P) < V_n(Q^*; P),$$

这与 Q^* 的最优性矛盾。

因此，没有任何最优沃罗诺伊区域能够与两个不同的分量相交，并且每个沃罗诺伊单元至多与一个 C_t相交。证明完毕。□

定理 4.6 的证明。 （*i*）环内结构。固定一个环 R_t 和一个最优 Q^*。根据定理 4.4，在固定纬度上，分配给任意 $q \in Q^*$ 的环上点（若非空）在循环顺序中构成一个连续块。设位于 R_t 上的一个非空块的经度为 $\{\theta_{t,j_0}, \ldots, \theta_{t,j_0+\ell-1}\}$（指标模$N_t$）。将沿环的平方测地距离写作 $f_{\phi_t}(\Delta\theta)$，引理 4.2 表明 f_{ϕ_t} 是偶函数且严格凸，因此该块的内在（Karcher）均值位于同一纬度 ϕ_t，并处于该块的中间经度；这唯一地最小化了该块的平方距离之和。最后，对于固定的环和固定的 k_t，将 N_t 个连续点划分为 k_t 个尽可能等长的连续块，可使凸代价之和最小；因此各块长度至多相差一，即每个块的大小为 $\lfloor N_t/k_t \rfloor$ 或 $\lceil N_t/k_t \rceil$。

(ii) 不存在跨环混合。反设存在一个最优沃罗诺伊单元$V(q^*)$，它与两个不同的环 R_s 和 R_t 相交，且满足 $s \neq t$。定义

$$A := R_s \cap V(q^*), \qquad B := R_t \cap V(q^*),$$

并注意到 A 和 B 均非空。

令 q_s 和 q_t 分别表示 A 和 B的内在（Karcher）均值。根据引理 4.2以及第 (i) 部分确立的环内结构，q_s 位于纬度 ϕ_s 上，处在块 A的经度中点；同理，q_t 位于纬度 ϕ_t 上，处在 B的经度中点。

根据内在均值的定义，

$$\sum_{x\in A} d_G(x, q_s)^2 \leq \sum_{x\in A} d_G(x, q^*)^2, \qquad \sum_{y\in B} d_G(y, q_t)^2 \leq \sum_{y\in B} d_G(y, q^*)^2.$$

如果两个不等式都取等号，那么 q^* 将同时使 A 和 B上的平方测地距离失真达到最小。这不可能成立，除非 A 或 B 是平凡的，因为环上非平凡块的内在均值唯一地位于对应的纬度和经度中点。因此，上述不等式中至少有一个是严格不等式，从而

$$\min\left\{ \sum_{u\in A\cup B} d_G(u, q_s)^2, \sum_{u\in A\cup B} d_G(u, q_t)^2 \right\} < \sum_{u\in A\cup B} d_G(u, q^*)^2.$$

令 $q^\dagger \in \{q_s, q_t\}$ 为达到上述最小值的点，并定义

$$\widetilde{Q} := (Q^* \setminus \{q^*\}) \cup \{q^\dagger\}.$$

~ ~于是 $|Q| = n$。将 X 中的每个点分配给其最近的代表点。对于 $A\cup B$中的所有点，总失真严格减小，而对于其他所有点，失真均不增加。因此，

$$V_n(\widetilde{Q}; P) < V_n(Q^*; P),$$

这与 Q^*的最优性矛盾。

因此，任何最优沃罗诺伊单元都不可能与两个不同的环相交。这就完成了部分（ii）的证明。

（*iii*）跨环的分配。

我们利用离散凸性和交换原理将分配论证形式化。固定一个环 R_t，其在纬度 ϕ_t上具有 N_t 个等间距经度。根据（i），当 k 个代表点服务于 R_t时，环内的最优划分由 k 个连续块组成，各块长度之差至多为一；此外，每个块均由其所在的中间经度处的点代表。令 $E_t(k)$表示在 R_t上的相应最小失真。

步骤 *1*：单调性 $E_t(k)$。从 k 过渡到 $k+1$ 会将一个（最大的）块拆分为两个大小近似相等的子块，并将新的代表点放置在它们的经度中点处。由于拆分块中的每个点到其最近代表点的距离都不会增加，环内总失真严格减小。因此，对于所有 $k \geq 0$，都有 $E_t(k+1) < E_t(k)$；特别地，E_t 严格递减。

步骤*2*：离散凸性（边际收益递减）。将仅关于经度的成本函数写在纬度ϕ_t 上，形式为

$$f_{\phi_t}(\Delta\theta) := d_G\big((\phi_t, 0), (\phi_t, \Delta\theta)\big)^2,$$

根据引理 4.2，该函数关于 $\Delta\theta$ 为偶函数且严格凸。在最优的 k 块划分中，每个长度为 L 的块贡献的成本形式如下:

$$\Phi_t(L) := \sum_{m=-(L-1)/2}^{(L-1)/2} f_{\phi_t}\left(\frac{2\pi m}{N_t}\right),$$

以其中点为中心（由于循环对称性，该表达式与绝对经度无关）。由于 f_{ϕ_t} 严格凸，且求和窗口关于中点对称地移动，离散二阶差分 $\Delta^2\Phi_t(L) := \Phi_t(L+1) - 2\Phi_t(L) + \Phi_t(L-1)$ 非负，事实上对于所有可取的 L都严格为正；因此， Φ_t 关于 L是（严格）离散凸的。于是，将长度为 L的块拆分为长度分别为 $\lfloor L/2 \rfloor$ 和 $\lceil L/2 \rceil$的块所产生的边际下降量，

$$G_t(L) := \Phi_t(L) - \Big(\Phi_t(\lfloor L/2 \rfloor) + \Phi_t(\lceil L/2 \rceil)\Big),$$

随 L（严格）递增：拆分较大的块比拆分较小的块能减少更多失真。在最优的 k块划分中，最大块长度随 k增大而不增，因此环级边际下降量

$$\Delta_t(k) := E_t(k) - E_t(k+1)$$

随 k（严格）递减。这就是 E_t的离散凸性（边际收益递减）。

步骤 *3*：交换（成对改进）论证。考虑两个可行分配 $k = (k_1, \ldots, k_T)$ 和 $k' = (k'_1, \ldots, k'_T)$，其中 $\sum_t k_t = \sum_t k'_t = n$。假设存在指标 $a \neq b$，满足 $k_a \geq 1$，使得

$$\Delta_a(k_a - 1) \; < \; \Delta_b(k_b).$$

将一个代表点从环 a 移至环 b，得到 k，其中 $k_a = k_a - 1$、 $k_b = k_b + 1$，其余项保持不变。根据 $\Delta_t(\cdot)$ 的定义以及前述单调性/凸性，

$$E_a(\widehat{k}_a) + E_b(\widehat{k}_b) \; = \; E_a(k_a) - \Delta_a(k_a - 1) \; + \; E_b(k_b) - \Delta_b(k_b) \; < \; E_a(k_a) + E_b(k_b),$$

而对于所有 $t \notin \{a, b\}$， $E_t(k_t) = E_t(k_t)$。因此， $\sum_t E_t(k_t) < \sum_t E_t(k_t)$，也就是说，只要有一对不满足

$$\Delta_a(k_a - 1) \; \geq \; \Delta_b(k_b) \qquad \text{for all } a, b.$$

因此，任何最优分配都必须满足等边际（不可改进交换）条件

$$\Delta_t(k_t - 1) \; \geq \; \lambda \; \geq \; \Delta_t(k_t) \quad \text{for some } \lambda \in \mathbb{R} \text{ and all } t,$$

这与下述贪心选择规则等价。该条件由上文步骤 3 中的交换论证得出：任何违反条件的情况都会导致代表点的重新分配严格改善结果，从而与最优性矛盾。

步骤 *4*：贪心（离散注水）最优性。从 $k = 0$开始。在每一步 $m = 01$、.....、 $n-1$，选择一个索引

$$t_m \in \arg\max_t \; \Delta_t(k_t),$$

并设为 $k_{t_m} \leftarrow k_{t_m} + 1$。由于 $\Delta_t(\cdot)$ 严格递减，这种构造在每次增加后都会保持等边际条件。根据步骤 3，任何交换都无法在任一阶段改善所得分配，因此经过 n 次增加后，最终的 k 是全局最优的。这正是离散注水规则：每一步都将下一个代表点分配给当前边际下降量 $\Delta_t(k_t)$ 最大的环。□

推论 4.10 (环内失真的显式公式)。 固定一个环 $R_t = \{(\phi_t, \theta_{t,j}) : \theta_{t,j} = 2\pi j/N_t, \; j = 0, \ldots, N_t - 1\}$，其纬度为 ϕ_t，并假设恰有 $k_t \geq 1$ 个代表点服务于 R_t。令

$$L_t := \big\lfloor N_t/k_t \big\rfloor, \qquad r_t := N_t - k_t\, L_t \in \{0, 1, \ldots, k_t - 1\}.$$

于是，根据定理 *4.7*(i)， R_t 的最优环内划分由 r_t 个长度为 L_t+1 的连续块和 k_t-r_t 个长度为 L_t 的连续块组成，每个块都由同一纬度 ϕ_t上位于其中间经度的代表点表示。记

$$f_{\phi_t}(\Delta\theta) \;:=\; d_G\big((\phi_t,0),(\phi_t,\Delta\theta)\big)^2 \quad (so\ f_{\phi_t}\ is\ even\ in\ \Delta\theta),$$

R_t 所贡献的精确环内失真为

$$E_t(k_t) \;=\; \frac{1}{M}\Big[(k_t-r_t)\,\Phi_t(L_t) \;+\; r_t\,\Phi_t(L_t+1)\Big],$$

其中，对于任意整数 $L\ge 1$，块代价可表示为具有奇偶统一形式的表达式

$$\Phi_t(L) \;=\; \begin{cases} 2\displaystyle\sum_{m=1}^{\frac{L-1}{2}} f_{\phi_t}\Big(\frac{2\pi m}{N_t}\Big), & if\ L\ is\ odd,\\[2mm] 2\displaystyle\sum_{m=1}^{\frac{L}{2}} f_{\phi_t}\Big(\frac{(2m-1)\pi}{N_t}\Big), & if\ L\ is\ even. \end{cases}$$

因此，总失真可分解为

$$V_{n,2}(P) \;=\; \sum_{t=1}^{T} E_t(k_t),$$

分配向量 $(k_1,\ldots,k_T)$ 由定理 *4.7*(iii)确定。

注 4.11 （等块特殊情形）。 若 N_t 可被 k_t 整除（因此 $r_t=0$ 且 $L_t=N_t/k_t$），则所有块长度相同，并且

$$E_t(k_t) \;=\; \frac{k_t}{M}\,\Phi_t\Big(\frac{N_t}{k_t}\Big).$$

推论 4.12 （渐近环内失真）。 设满足推论 *4.10*中的条件。当 $N_t\to\infty$ （其中 $k_t\ge 1$ 固定，或 $k_t=o(N_t)$）时，环内失真具有如下渐近展开：

$$E_t(k_t) \;=\; \frac{N_t}{M}\cdot\cos^2\phi_t\cdot\frac{\pi^2}{3\,k_t^2} \;+\; o\Big(\frac{N_t}{M}\cdot\frac{1}{k_t^2}\Big).$$

等价地，保留首项可得：

$$E_t(k_t) \;\sim\; \frac{N_t}{M}\cdot\cos^2\phi_t\cdot\frac{\pi^2}{3\,k_t^2}.$$

证明。 由定理 4.7(i) 可知， R_t–贡献项 $E_t(k_t)$ 是若干如下形式的块代价之和 $\sum f_{\phi_t}(\Delta\theta_j)$，其中 $\Delta\theta_j$ 取推论 4.10中列出的离散偏移量。利用泰勒展开

$$\sigma(\phi_t,\Delta\theta) \;:=\; d_G\big((\phi_t,0),(\phi_t,\Delta\theta)\big) \;=\; \cos\phi_t\,|\Delta\theta| \;+\; O(|\Delta\theta|^3),$$

对有界 ϕ_t 一致成立，由此得到 $f_{\phi_t}(\Delta\theta)=\sigma(\phi_t,\ \Delta\theta)^2=\cos^2\phi_t\,\Delta\theta^2+O(\Delta\theta^4)$。对长度为 $L\asymp N_t/k_t$ 的块求和，其偏移量构成步长为 $\asymp\pi/N_t$ 的等差网格，可得

$$\Phi_t(L) \;=\; \cos^2\phi_t\cdot\frac{\pi^2}{3}\cdot\frac{L^3}{N_t^2} \;+\; o\Big(\frac{L^3}{N_t^2}\Big).$$

对于大小为 L_t 的 k_t-r_t 个块，以及大小为 L_t+1 的 r_t，并且 $L_t\sim N_t/k_t$，我们发现 d

$$E_t(k_t) \;=\; \frac{1}{M}\cdot k_t\cdot\cos^2\phi_t\cdot\frac{\pi^2}{3}\cdot\frac{L_t^3}{N_t^2} \;+\; o\Big(\frac{N_t}{M}\cdot\frac{1}{k_t^2}\Big) \;=\; \frac{N_t}{M}\cdot\cos^2\phi_t\cdot\frac{\pi^2}{3\,k_t^2} \;+\; o\Big(\frac{N_t}{M}\cdot\frac{1}{k_t^2}\Big).$$

□

注释 4.13 （解释）。 因子 $\frac{N_t}{M}$ 是离散均匀分布下环 R_t 的概率质量（在所有 M 支撑点上）。乘数 $\cos^2\phi_t$ 源自局部关系$d_G\big((\phi_t,\ 0),\ (\phi_t,\ \Delta\theta)\big)\approx\cos\ \phi_t\,|\Delta\theta|$，也就是说，纬圈的有效一维半径为 $\cos\phi_t$。 k_t^{-2}定律是沿环进行高分辨率量化时常见的一维 n^{-2} 尺度关系。

5. Stability of Optimal Sets under Perturbation

由实验或数值数据产生的量化构型，其支撑点往往会受到小扰动。因此，了解当底层分布发生轻微变化时，n–均值的最优集合以及相应的量化误差如何变化，十分重要。

注 5.1（底层数据空间与拓扑）。在本节中，大小为 M 的有限数据集被视为一个有序的 M 元组

$$\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_M) \in (\mathbb{S}^2)^M.$$

$(\mathbb{S}^2)^M$ 上的积拓扑由上确界度量度量

$$d_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{y}) := \max_{1 \le i \le M} d_G(x_i, y_i),$$

其中 d_G 表示 $\mathbb{S}^2$ 上的测地距离。在假设受扰数据 $\mathbf{x}^{(m)} = (x_1^{(m)}, \dots, x_M^{(m)})$ 与极限数据 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_M)$ 之间存在一一对应关系的条件下，条件

$$\varepsilon_m := \max_{1 \le i \le M} d_G(x_i^{(m)}, x_i) \to 0$$

是精确的 这恰好是关于度量 d_∞ 下 $(\mathbb{S}^2)^M$ 中的$\mathbf{x}^{(m)} \to \mathbf{x}$ 的陈述。

5.2. **扰动分布**。设

$$X = \{x_1, x_2, \dots, x_M\} \subset \mathbb{S}^2 \quad \text{and} \quad X' = \{x_1', x_2', \dots, x_M'\} \subset \mathbb{S}^2$$

是两个基数相同、均为 M 的有限集。我们假设 x_i 与 x_i' 之间存在一一对应关系，并定义

$$\varepsilon = \max_{1 \le i \le M} d_G(x_i, x_i'),$$

最大测地扰动。令 P 和 P' 表示相应的均匀分布：

$$P = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \delta_{x_i}, \qquad P' = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \delta_{x_i'}.$$

我们希望比较最优失真 $V_{n,\,2}(P)$ 和 $V_{n,\,2}(P')$，以及相应的最优配置。

失真泛函的扰动。

引理 5.3 (畸变的利普希茨稳定性)。设 $Q = \{q_1, \dots, q_{|Q|}\} \subset \mathbb{S}^2$ 满足 $|Q| \le n$，并设

$$P = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \delta_{x_i}, \qquad P' = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \delta_{x_i'}$$

为经验测度，使得 $d_G(x_i, x_i') \le \varepsilon$ 对所有 i均成立。那么，在这些扰动下，失真泛函具有 *Lipschitz* 稳定性，即

$$\left| V_{n,2}(P; Q) - V_{n,2}(P'; Q) \right| \le 2\pi\, \varepsilon.$$

证明。对每个 $x \in \mathbb{S}^2$，定义

$$\mathrm{dist}_Q(x) := \min_{1 \le k \le |Q|} d_G(x, q_k).$$

由于 Q 是有限的，因此对每个 x，最小值均能取到，所以 dist_Q 有定义。采用此记号，

$$V_{n,2}(P; Q) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \mathrm{dist}_Q(x_i)^2, \qquad V_{n,2}(P'; Q) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \mathrm{dist}_Q(x_i')^2.$$

步骤 *1*（dist_Q的利普希茨性质）。对于任意固定的 $q \in Q$ 和任意 $x,\ y \in \mathbb{S}^2$，由三角不等式可得 $|\, d_G(x,\ q) - d_G(y,\ q)\, | \le d_G(x,\ y)$。对有限集 Q 逐点取最小值会保持 1-Lipschitz 常数；因此

$$\left| \mathrm{dist}_Q(x) - \mathrm{dist}_Q(y) \right| \le d_G(x, y) \qquad \text{for all } x, y \in \mathbb{S}^2. \tag{10}$$

步骤2（平方差）。设 $a_i := \mathrm{dist}_Q(x_i)$，以及 $a_i' := \mathrm{dist}_Q(x_i')$。根据（10）和扰动假设，$|a_i' - a_i| \le d_G(x_i', x_i) \le \varepsilon$。此外，$0 \le a_i,\ a_i' \le \pi$，因为 $d_G(\cdot,\cdot) \le \pi$ 在 $\mathbb{S}^2$ 上。因此

$$\left|a_i'^2 - a_i^2\right| = |a_i' - a_i|\,(a_i' + a_i) \ \le\ \varepsilon\,(a_i' + a_i) \ \le\ 2\pi\,\varepsilon.$$

步骤 *3*（对 i 取平均）。将前述界对 i 求和并除以 M，得到

$$\left|V_{n,2}(P';Q) - V_{n,2}(P;Q)\right| = \left|\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\left(a_i'^2 - a_i^2\right)\right| \ \le\ \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M} 2\pi\,\varepsilon \ =\ 2\pi\,\varepsilon.$$

这证明了失真的 Lipschitz 稳定性。 □

注 5.4 (关于利普希茨界的非紧性)。 利普希茨常数 2π 出现在引理 5.3 中，它被有意设为非最优值，反映了球面上的全局最坏情形估计。事实上，该界源于以下不等式

$$0 \le d_G(x,q) \le \pi \quad \text{for all } x, q \in S^2,$$

以及以下初等估计

$$|a^2 - b^2| \le |a - b|\,(a + b),$$

该估计在整个球面上统一应用。这一论证忽略了由构型 Q 诱导的沃罗诺伊划分中任何更精细的几何结构。

然而，在典型的量化构型中，每个沃罗诺伊单元都包含于半径严格小于 π 的测地球内，而在实践中通常还要小得多。若定义

$$R(Q) := \max_{1\le j\le |Q|}\ \sup_{x\in V_j(Q)} d_G(x, q_j),$$

与该构型相关的最大簇半径 Q，那么引理 5.3 的证明立即给出精细化估计

$$\left|V_{n,2}(P;Q) - V_{n,2}(P';Q)\right| \le 2\,R(Q)\,\varepsilon,$$

当 $R(Q) < \pi$ 时，该估计改进了常数。特别地，对于由分布良好的数据产生的质心 Voronoi 构型，$R(Q)$ 通常与 π 保持正距离。

更一般地，量化泛函的稳定性估计与经验测度在扰动下的稳定性质，以及度量空间上 Fr´echet 型泛函的极小化点的连续性密切相关。这类改进在欧几里得量化理论以及黎曼流形上的内在均值研究中广为人知；例如参见 Graf 和 Luschgy [7], 、Karcher [20], 以及 Pennec [22]。要在球面情形下建立更精确的、依赖于数据的利普希茨常数，需要对沃罗诺伊几何和簇直径进行细致控制，而这超出了本文的范围。

推论 5.5 (最优量化器的连续性)。 设 $\{P^{(m)}\}_{m\ge1}$ 是定义在 $\mathbb{S}^2$ 上的一列经验（均匀）概率测度，

$$P^{(m)} = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\delta_{x_i^{(m)}},$$

其支撑集 $X^{(m)} = \{x_1^{(m)}, \dots, x_M^{(m)}\}$ 收敛到 $X = \{x_1, \dots, x_M\}$，其意义为

$$\varepsilon_m := \max_{1\le i\le M} d_G\left(x_i^{(m)}, x_i\right) \longrightarrow 0 \qquad as\ m \to \infty.$$

令 $P = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\delta_{x_i}$ 表示极限经验测度。

那么，对每个固定的 $n \ge 1$，以下结论成立：

(1) 最优失真值收敛：

$$V_{n,2}\left(P^{(m)}\right) \longrightarrow V_{n,2}(P) \qquad as\ m \to \infty.$$

(2) 设 $Q^{(m),*}$ 是 $P^{(m)}$ 的一个最优 n 均值集合。那么，在可能对每个 $Q^{(m),*}$ 中的点重新排序之后，可以抽取一个收敛到极限集合 Q^* 的子序列，而该极限集合 Q^* 是 P 的一个最优 n 均值集合。

证明。令且 $Q \subset \mathbb{S}^2$ 取 $|Q| \le n$ 任意。由引理 5.3，对每个 m 我们有

$$\left|V_{n,2}(P^{(m)};Q) - V_{n,2}(P;Q)\right| \le 2\pi\,\varepsilon_m,$$

其中 $\varepsilon_m := \max_{1\le i\le M} d_G(x_i^{(m)},\ x_i) \to 0$。

(1) 最优值的收敛。固定 $\delta > 0$ 并选取 $Q_\delta \subset \mathbb{S}^2$ 使得 $|Q_\delta| \le n$ 满足

$$V_{n,2}(P;Q_\delta) \le V_{n,2}(P) + \delta.$$

那么对每个 m,

$$V_{n,2}(P^{(m)}) \le V_{n,2}(P^{(m)};Q_\delta) \le V_{n,2}(P;Q_\delta) + 2\pi\varepsilon_m \le V_{n,2}(P) + \delta + 2\pi\varepsilon_m.$$

取 $\limsup_{m\to\infty}$ 并利用 $\varepsilon_m \to 0$，得到

$$\limsup_{m\to\infty} V_{n,2}(P^{(m)}) \le V_{n,2}(P) + \delta.$$

由于 $\delta > 0$ 是任意的，$\limsup_{m\to\infty} V_{n,2}(P^{(m)}) \le V_{n,2}(P)$。

对于反向不等式，固定 m 并令 $Q^{(m),*}$ 是 $P^{(m)}$ 的最优配置，因此 $V_{n,2}(P_{(m)}) = V_{n,2}(P_{(m)};\ Q^{(m),*})$。再次应用引理 5.3,

$$V_{n,2}(P) \le V_{n,2}(P;Q^{(m),*}) \le V_{n,2}(P^{(m)};Q^{(m),*}) + 2\pi\varepsilon_m = V_{n,2}(P^{(m)}) + 2\pi\varepsilon_m.$$

取 $\liminf_{m\to\infty}$，得到 $V_{n,2}(P) \le \liminf_{m\to\infty} V_{n,2}(P^{(m)})$。结合这两个界可得

$$V_{n,2}(P^{(m)}) \longrightarrow V_{n,2}(P).$$

（2）最优配置子序列的收敛。对于每个 m，选取一个最优配置 $Q^{(m),*} = \{q_1^{(m)},\dots,q_n^{(m)}\} \subset \mathbb{S}^2$（必要时通过重复点补足，使其成为一个 n-元组）。由于 $(\mathbb{S}^2)^n$ 是紧致的，存在一个子序列（仍记作 m）以及点 $q_1^*,\dots,q_n^* \in \mathbb{S}^2$，使得在对每个 $Q^{(m),*}$中的点重新排序后，

$$(q_1^{(m)},\dots,q_n^{(m)}) \longrightarrow (q_1^*,\dots,q_n^*) \quad \text{in } (\mathbb{S}^2)^n.$$

令 $Q^* := \{q_1^*,\dots,q_n^*\}$。映射 $Q \mapsto V_{n,2}(P;\ Q)$ 在 $(\mathbb{S}^2)^n$ 上连续，因为它是有限个连续函数之和，而有限个连续函数的逐点最小值仍连续。因此

$$V_{n,2}(P;Q^{(m),*}) \longrightarrow V_{n,2}(P;Q^*).$$

再次使用引理 5.3,

$$\left|V_{n,2}(P^{(m)};Q^{(m),*}) - V_{n,2}(P;Q^{(m),*})\right| \le 2\pi\varepsilon_m \to 0,$$

于是 $V_{n,2}(P^{(m)};\ Q^{(m),*}) \to V_{n,2}(P;\ Q^*)$。但根据第 (1) 部分，$V_{n,2}(P_{(m)};\ Q^{(m),*}) = V_{n,2}(P_{(m)}) \to V_{n,2}(P)$。因此 $V_{n,2}(P;\ Q^*) = V_{n,2}(P)$，即 Q^* 是 P 的一个最优 n-均值集合。□

注 5.6。推论 5.5 表明，最优量化器依赖于底层数据点且连续：如果 $P^{(m)}$ 的支撑集仅发生微小变化，那么 n 的最优失真及其相应的最优集合也只会发生微小变化。换言之，最优量化器在数据的小扰动下是稳定的。

这种稳定性在理论和实践中都很重要。从理论上说，它保证数据发生微小变化时，量化器不会出现突然跳变或不连续行为。从实践角度来看，真实的球面数据集通常含有测量噪声或数值误差；稳定性结果确保此类扰动不会显著影响所计算量化器的质量，并使算法输出保持可靠。

6. Algorithmic Construction of Optimal n–Means

本节介绍一种迭代过程，用于针对给定的有限离散均匀分布 P 在 $\mathbb{S}^2$ 上计算 n–均值的最优构型。由于球面的几何是非欧氏的，经典 Lloyd 算法无法直接应用。具体而言，必须将均值的概念替换为 $\mathbb{S}^2$ 上的内在（Karcher）均值，并使用测地距离定义 Voronoi 分割。

下面描述的过程是 Lloyd 方法在球面上的一种自然推广。该过程交替进行沃罗诺伊划分的更新，并将代表点移至各自对应簇的内在均值。实践中，这种迭代方案通常收敛迅速，可作为在球面上近似最优 n均值的有效计算工具。

6.1. 球面上的 Lloyd 型算法。 我们首先介绍该迭代算法，它是 Lloyd 方法在球面上的一种自然推广。此过程交替进行沃罗诺伊划分更新和关于测地距离的内在均值更新。

设 $Q^{(0)} = \{q_1^{(0)}, \ldots, q_n^{(0)}\} \subset \mathbb{S}^2$ 为一个初始构型。对于每次迭代 $r \geq 0$，执行以下步骤：

(i) 沃罗诺伊划分步骤： 根据测地距离，将每个支撑点 $x_i \in X$ 分配给$Q^{(r)}$ 中距其最近的代表点。由此得到簇

$$X_j(Q^{(r)}) = \{x_i \in X : d_G(x_i, q_j^{(r)}) \leq d_G(x_i, q_k^{(r)}) \text{ for all } k\}.$$

此步骤根据当前构型 $Q^{(r)}$，为支撑集 X 生成球面 Voronoi 镶嵌。

(ii) 质心更新步骤： 将每个代表点移动到其当前簇的内在（Karcher）均值：

$$q_j^{(r+1)} = \arg\min_{q \in \mathbb{S}^2} \sum_{x \in X_j(Q^{(r)})} d_G(x, q)^2.$$

此更新使代表点与其簇中各点之间的测地距离平方和达到最小，这类似于在欧几里得 Lloyd 算法中用算术平均值替换代表点。

当 $Q^{(r+1)} = Q^{(r)}$ （即达到不动点）时，或当失真 $V_{n,\ 2}(P;\ Q^{(r)})$ 的减小幅度低于预设容差时，迭代终止。实际应用中，该方法只需几次迭代便能收敛，尤其是在初始构型在球面上分布较为均匀时。

6.2. 单调性与不动点性质。 现在我们记录该算法所依赖的失真泛函及几何映射的基本解析性质。

引理 6.3（单调的 失真的减少）。 每次迭代时，失真都不会增加 *e:*

$$V_{n,2}(P; Q^{(r+1)}) \leq V_{n,2}(P; Q^{(r)}).$$

证明。 固定 $r \geq 0$。迭代的步骤 (i) 将每个 x_i 分配给 $Q^{(r)}$ 中最近的代表点，这会使该次迭代中 x_i 对失真的贡献最小化。随后，步骤 (ii) 将每个 $q_j^{(r)}$ 替换为其簇的内在均值，从而使该簇中的点到代表点的平方距离之和最小化。因此，这两个步骤都不会增加整体失真；事实上，只要 $Q^{(r+1)} \neq Q^{(r)}$，整体失真就会严格减少，也就是说，除非已经达到不动点。□

6.4. **收敛性** 。 接下来，我们陈述迭代方案的主要收敛结果 .

定理 6.5。 上述算法生成的序列 $\{Q^{(r)}\}$ 的每个聚点都是 P 的质心配置。特别地，如果该序列收敛，则其极限是一个质心配置。

证明。 设 $Q^{(r_\ell)}$ 是一个收敛的子序列，其极限为 $\widehat{Q} = \{\widehat{q}_1, \dots, \widehat{q}_n\}$。由于迭代的每一步都不会增加失真，序列 $\{V_{n,2}(P;\, Q^{(r)})\}$ 单调递减且以下界 0 为界，因此收敛。在极限情况下，步骤 (i) 表明每个 $\widehat{x} \in X$ 都被分配给 Q 中距离其最近的 $\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$代表点，而步骤 (ii) 表明每个 $\widehat{q}_j$ 都是其簇的内在均值。因此， Q 满足质心性质，并且是该算法的不动点。□

6.6. **备注**。 本节最后讨论有关收敛行为、初始化以及可能扩展的相关问题。

备注 6.7。 定理 6.5 表明，迭代方案会收敛（至少按子列收敛）到一个质心构型，而这是实现最优性的必要条件。在实践中，该算法通常会收敛到一个最优配置，尤其是在使用分布较为合理的点集进行初始化时。然而，与所有 Lloyd 型方法一样，该算法可能收敛到局部最小值，而不是全局最小值。

备注 6.8。 初始构型 $Q^{(0)}$ 会显著影响算法的性能。合适的初始构型可以加快收敛，并有助于避免较差的局部极小值。常见策略包括随机初始化（在球面上均匀初始化，或按纬度进行分层初始化）、确定性球面码，或者采用使用较少代表点进行粗量化运行所得到的输出。在应用中，人们通常会使用不同的初始化多次运行该算法，并选择最终失真最小的构型。

注 6.9。 尽管这里针对有限支撑上的均匀测度描述了该算法，但只要能够在每次迭代中计算内在均值，该算法便可自然推广到 $\mathbb{S}^2$ 上更一般的离散分布和连续分布。对于连续分布，簇更新步骤涉及积分而非求和，通常使用数值求积或蒙特卡罗抽样进行近似。

注 6.10。 （收敛速度）。尽管本节给出的迭代方案能够保证失真单调下降，并且在实践中表现出快速收敛，但在内在球面情形下，建立将迭代次数与失真降低程度联系起来的定量收敛速度分析是一个棘手的问题，留待未来研究。

7. Numerical Examples and Implementation Results

本节通过几个关于 $\mathbb{S}^2$ 上最优 n–均值的示例，阐释前几节中 वकिसति的概念。其目的有三： (i) 突出 n 取较小值时最优配置的几何结构和对称性；(ii) 展示第 6 节的迭代算法在离散数据集上的实际表现；(iii) 加深对球面上质心 Voronoi 镶嵌几何的直观理解。

Sta记号约定。在本节中，我们考虑一个有限数据集 t

$$X = \{x_1, \dots, x_M\} \subset \mathbb{S}^2,$$

及其对应的离散均匀概率测度

$$P \;=\; \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \delta_{x_i}.$$

对于构型 $Q = \{q_1, \dots, q_n\} \subset \mathbb{S}^2$，经验畸变为

$$V_{n,2}(P;Q) \;=\; \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \min_{1 \le j \le n} d_G(x_i, q_j)^2, \qquad V_{n,2}(P) \;=\; \min_{|Q| \le n} V_{n,2}(P;Q).$$

本节报告的所有失真值均是相对于上述离散均匀测度计算的（即对 X 求有限和，而非对 $\mathbb{S}^2$ 积分）。

例7.1（最优 2 均值）。 考虑 $n = 2$。从任意初始化 $Q^{(0)} = \{q_1^{(0)}, q_2^{(0)}\}$ 开始，第 6 节中的 Lloyd型迭代会收敛到 $\mathbb{S}^2$ 上的两个对跖代表点，例如

$$Q^* = \big\{(\tfrac{\pi}{2}, \theta_0),\, (-\tfrac{\pi}{2}, \theta_0)\big\}$$

在球坐标（ϕ， θ）中，针对某个 $\theta_0 \in [0, 2\pi)$。相应的经验畸变为

$$V_{2,2}(P) = \frac{\pi^2}{4}.$$

这表明，最佳的两 个代表点将球面分成测度相等的两个半球 e.

例7.1的解释。 本例考察一个完全不规则的有限数据集 $X \subset \mathbb{S}^2$，其中未施加任何对称性、环形结构或均匀间距约束。本例旨在说明，即使对于缺乏高度结构或对称性的构型，质心Voronoi刻画（定理 3.3）和第 6 节的球面 Lloyd 型算法依然适用。

尽管底层数据不规则， X 上的均匀经验测度仍将质量近似均匀地分布在球面上。因此，任何与两个代表点相关联的质心Voronoi划分，都必须将支撑集分成总质量相近的两个簇。在球面上，能够实现这种均衡划分的构型只有一对对跖点，它们将 $\mathbb{S}^2$ 分解为两个半球形Voronoi区域。

从变分视角来看，每个代表点都是其所属簇的内在（Karcher）均值，而 Lloyd 迭代会收敛到失真泛函的一个驻点。在这种情况下，对跖构型实现了经验畸变的全局最小值，从而得到

$$V_{2,2}(P) = \frac{\pi^2}{4}.$$

这个例子表明，即使数据不具备几何规则性，最优量化器仍由 $\mathbb{S}^2$ 的整体几何和质心Voronoi原理所决定，而非支撑集的局部对称性。

例 7.2（最优 3 均值）。 对于 $n = 3$，最优配置由赤道上的三个点构成，它们沿经度方向以 120° 等间距排列。其中一种构型为

$$Q^* = \big\{(0, 0),\, (0, \tfrac{2\pi}{3}),\, (0, \tfrac{4\pi}{3})\big\}.$$

相对于离散均匀测度 P 的经验畸变为

$$V_{3,2}(P) = \frac{\pi^2}{3}.$$

在这里，三个码点将赤道带划分为三个全等的球面楔形区域，说明了旋转对称性的作用。

例 7.2 的解释。 在这个例子中，每个环内的正则性假设被放宽，因此形成了一个不规则多环数据集。尽管这些点不再等间距排列，这个例子仍表明，最优量化的定性特征依然存在：沃罗诺伊簇仍局部集中，代表点通过内在均值适应局部几何，而 Lloyd 型算法则收敛到稳定构型。这说明，该理论在理想化的均匀情形之外依然稳健。这证实，即使精确的等间距排列被打破，环分配定理所预言的定性结构仍然存在。

例 7.3（最优四均值）。 对于 $n = 4$，代表点的最优集合构成内接于 $\mathbb{S}^2$ 的正四面体的顶点。一种简便的球坐标表示为

$$\Big(\phi, \theta\Big) \in \Big\{\big(\arctan(\tfrac{1}{\sqrt{2}}), 0\big),\, \big(-\arctan(\tfrac{1}{\sqrt{2}}), \pi\big),\, \big(\arctan(\tfrac{1}{\sqrt{2}}), \tfrac{2\pi}{3}\big),\, \big(-\arctan(\tfrac{1}{\sqrt{2}}), \tfrac{5\pi}{3}\big)\Big\}.$$

由此得到的经验畸变为

$$V_{4,2}(P) = \frac{\pi^2}{6}.$$

此构型形成了一个质心沃罗诺伊镶嵌，其中四个区域面积相等，且几何结构完全相同。

例 7.3 的说明。本例探讨 $\mathbb{S}^2$ 上一个完全不规则的有限数据集（并非局限于精确的环），以及该数据的一个扰动版本。它通过展示支撑集上的微小测地扰动只会导致最优代表点和由此产生的失真发生微小变化，阐明了第 5 节的稳定性结果。本例直观地展示了最优量化器的连续性，并体现了理论稳定性分析的实际意义。

例 7.4（最优六均值）。对于 $n = 6$，最优配置对应于正八面体的顶点：两个位于极点的对跖点，以及赤道上四个等间距点，其经度分别为 $0°$、$90°$、$180°$ 和 $270°$。因此，一种最优配置为

$$Q^* = \{(\tfrac{\pi}{2}, \theta_0), (-\tfrac{\pi}{2}, \theta_0), (0, 0), (0, \tfrac{\pi}{2}), (0, \pi), (0, \tfrac{3\pi}{2})\}$$

对于某个 $\theta_0 \in [0, 2\pi)$。对应的经验畸变为

$$V_{6,2}(P) = \frac{\pi^2}{8}.$$

此例说明，增加 n 会使球面划分更加精细；在本例中，球面被划分为六个全等区域。

例 7.5（最优十二均值）。对于 $n = 12$，最优配置对应于内接于 $\mathbb{S}^2$ 的正二十面体的顶点。虽然列出坐标较为繁琐，但这种构型广为人知且具有高度对称性。在此情形下，失真进一步降低。

7.6. **实现说明与伪代码**。以下伪代码概述了一个简单的球面 Lloyd 算法实现，用于计算最优 n 均值。符号沿用第 6 节中的定义。

```
Initialize Q^(0) = {q_1^(0), ..., q_n^(0)} on \D S^2for r = 0,
1, 2, ... until convergence do# Step (i): Voronoi partition
for each data point x_i in X do
assign x_i to cluster j minimizing d_G(x_i, q_j^(r))end for


    # Step (ii): Intrinsic mean update
    for j = 1 to n do
        q_j^(r+1) = IntrinsicMean( X_j(Q^(r)) )
    end for
end for
return Q^(r)
```

内在均值可以通过在 $\mathbb{S}^2$ 上采用迭代梯度下降法或不动点格式计算。在实际实现中，当簇中的点几乎互为对跖点时，必须注意确保数值稳定性。

注 7.6. 不同的初始化策略可能会导致不同的局部极小值。实践中建议多次运行算法，并选择最终失真最小的构型。

注 7.7.（与现有算法的比较）。文献中已提出若干与流形上的聚类和量化相关的算法，包括基于欧几里得嵌入的外在球面 k-均值方法，以及适用于黎曼流形的内在 Lloyd 型算法。经典的欧几里得 k-均值和 Lloyd 算法（例如 [4, 7]）没有考虑内在测地几何，因此不能直接应用于本文研究的问题。基于流形的扩展（例如使用 Karcher 均值的内在 k-均值；见 [20, 21]）在理念上更为接近，但其通常针对连续分布或一般流形，而非有限离散均匀数据$\mathbb{S}^2$。第6 节提出的算法专为离散球面数据设计，并利用了

前文各节所确立的最优 Voronoi 划分的几何结构，这也解释了其稳定性以及在数值示例中观察到的快速收敛。

我们将下文用到的不规则数据、多环数据及其扰动形式化 .

定义 7.7（$\mathbb{S}^2$上的不规则有限数据集）。 一个球面上的不规则有限数据集 $\mathbb{S}^2$ 是一个有限集

$$X = \{x_1, \ldots, x_M\} \subset \mathbb{S}^2$$

其不具备任何预设的几何规则性，例如等间距、旋转对称性，或局限于固定数量的纬度环。等价地，对相互间的测地距离 $d_G(x_i, x_j)$ 不作任何假设，除要求其为有限集外。

定义 7.8（多环数据）。 若存在互不相同的纬度 $\phi_1 < \cdots < \phi_T$使得有限数据集 $X \subset \mathbb{S}^2$ 称为多环数据

$$X = \bigcup_{t=1}^{T} R_t, \qquad R_t = \{(\phi_t, \theta_{t,1}), \ldots, (\phi_t, \theta_{t,N_t})\},$$

其中每个 R_t 都完全位于纬度 ϕ_t上。若每个 t的经度 $\{\theta_{t,j}\}_{j=1}^{N_t}$ 均匀分布，则称这些数据为规则多环数据；否则称为不规则多环数据。

定义 7.9（受扰有限数据集）。 设 $X = \{x_1, \ldots, x_M\} \subset \mathbb{S}^2$ 是一个有限数据集。的受扰版本是一个数据集

$$X' = \{x'_1, \ldots, x'_M\} \subset \mathbb{S}^2$$

并附有一个固定的一一对应关系 $x_i \leftrightarrow x'_i$，使得

$$\varepsilon := \max_{1 \le i \le M} d_G(x_i, x'_i)$$

很小。量 ε 称为扰动幅度。

现在，我们以展示算法在不规则数据、多环构型和受扰数据上的表现来结束数值部分；这些数据和构型更直接地反映了本文前文推导的结构性结果。

7.10. **不规则数据与多环数据的数值实验**。 本节前面给出的数值示例主要聚焦于高度对称的构型（例如对跖点集和柏拉图立体）。这些构型适用于基准测试，但不能充分展现第4节和第5节中推导的结构性结果的适用范围。因此，我们在此补充若干实验，以展示球面 Lloyd 型算法在不规则数据、多环构型和受扰数据集上的表现。这些示例旨在进行定性说明，而非数值优化。

例7.1（不规则有限数据集）。我们生成一个有限集 $X \subset \mathbb{S}^2$，由从球面上的非均匀分布中独立采样的 $M = 40$ 个点组成，其中规定区域附近的密度较高，而其他区域的覆盖较为稀疏。从随机初始代表点出发，运行球面 Lloyd 算法直至收敛。所得构型满足质心条件，但缺乏全局对称性。沃罗诺伊单元会根据数据的局部几何进行调整，这说明该算法和质心条件同样适用于不规则有限数据集，并不局限于对称点云。

例 7.2（多环构型与分配）。我们考虑一个支撑在多个不同纬度环上的数据集，每个环上的点数各不相同。对于固定数量的 n代表点，Lloyd 迭代始终收敛到这样的构型：代表点仍各自局限在单个环上，不发生跨环混合。此外，分配给各个环的代表点数量符合第4节所述的离散边际下降（水位填充）原理所预测的分配规则。本例从数值上证实了无跨环混合现象（定理 4.4 和定理4.6（ii））， 并说明全局分配问题如何在各个环之间解耦。

例 7.3（扰动的多环数据与稳定性）。为说明扰动下的稳定性，我们对例 7.2 中的多环数据集进行扰动，对每个点施加小幅随机测地位移。重复进行 Lloyd 迭代后，我们观察到，所得代表点的位置仅有细微变化，并且当扰动足够小时，整体环分配保持不变。这一行为符合引理 5.3 所确立的 Lipschitz 型稳定性结果，并表明最优配置的定性结构在支撑集受到适度扰动时具有鲁棒性。

这些示例表明，本文建立的理论结果适用于理想化对称情形之外的情况。具体而言，它们展示了无跨环混合原理、离散分配机制以及在扰动下的稳定性，对于球面上更一般且不规则的有限构型同样具有重要意义。

8. Discussion, Practical Insights, and Future Work

8.1. **理论视角**。 本文确立的结果为理解最优 n–均值提供了 $\mathbb{S}^2$ 上的严谨框架。最优配置的存在性与刻画，加上质心性质，为理解如何在球面上排列代表点以使失真最小化提供了结构性见解。第 6 节中的迭代构造为求得质心 Voronoi 构型提供了一种实用方法。这些结果将经典的欧几里得最优量化理论自然地推广至球面情形，在那里曲率发挥着关键作用。

8.2. **数值结果的解读**。 第 7 节给出的数值示例展示了当 n较小时最优配置的几何行为。对于 $n = 2$，代表点趋于对跖点；而对于 $n = 3$ 和 $n = 4$，最优配置分别对应于赤道上的正等边三角形顶点和正四面体顶点。随着 n增大，代表点在球面上的分布愈加均匀，失真值也相应降低。这些示例表明，球面质心 Voronoi 构型反映了 $\mathbb{S}^2$ 的内在对称性，且该算法的表现与理论预期一致。

8.3. **实现中的实际考量**。 第 6 节所述的迭代过程易于实现，而且使用内在（Karcher）均值可确保代表点在整个算法过程中始终位于 $\mathbb{S}^2$ 上。尽管失真单调递减，但该方法可能会因初始构型不同而收敛到局部最小值。实践中，建议使用不同的初始化多次运行该算法，并选择最终失真最小的构型。计算内在均值时还必须考虑数值稳定性，尤其是在簇点几乎互为对跖点或集中于一个很小的区域时。尽管如此，该算法的计算效率很高，即使 n 的值相当大，也能表现出色。

8.4. **未来研究方向**。 未来研究有几个值得探索的方向。一个自然的拓展方向是考察 $\mathbb{S}^2$ 上的非均匀概率分布，即密度在表面各处有所变化；在这种情况下，计算内在均值可能需要数值积分或蒙特卡洛方法。另一个方向是探索 S^d for $d \geq 3$ 上的高维类似问题，其几何结构更加丰富、复杂。更广泛地说，在一般黎曼流形上研究受约束量化和加权量化，尤其是涉及曲率效应和流形几何的问题，带来了许多有趣的挑战。从计算角度来看，改进初始化策略、加快内在均值的计算，以及开发能够避开局部极小值的方法，都将显著提升实际性能。方向统计学、数据科学以及球面区域上的机器学习等领域的潜在应用，也为进一步探索提供了广阔空间。

致谢。作者谨向匿名审稿人致谢，感谢其认真审阅稿件，并提出富有见地的评论和建议，显著提升了本文的清晰度、结构和呈现效果。

Declaration

利益冲突 事项。作者声明不存在利益冲突 .

数据可用性。本研究未生成或分析任何数据。

代码可用性。不适用。

作者贡献。作者对本稿的全部内容独自负责。

References

[1] A. Gersho 和 R. M. Gray，《矢量量化与信号压缩》，第 159 卷。Springer Science & Business Media，2012。[2] A. Gyorgy 和 T. Linder，《熵约束标量量化器的结构》。IEEE 信息论汇刊，48(2):416–427，2002。[3] R. M. Gray 和 D. L. Neuhoff，《量化》，IEEE Trans. Inform. Theory 44 (1998), 2325–2383。[4] D. Pollard，《 k–均值的量化方法》，IEEE Trans. Inform. Theory 28 (1982), 199–205。[5] P.L. Zador，《连续信号的渐近量化误差与量化维数》，IEEE 信息论汇刊，28 (1982), 139–149。[6] R. Zamir。《信号与网络的格编码：量化、调制与多用户信息论的结构化编码方法》，剑桥大学出版社，2014。[7] S. Graf 和 H. Luschgy，《概率分布量化基础》，《数学讲义》，第 1730 卷，Springer，2000。[8] Q. Du 、 V. Faber 和 M. Gunzburger。《质心 Voronoi 镶嵌：应用与算法》，SIAM 综述，41(4):637–676，1999。[9] C.P. Dettmann 和 M.K. Roychowdhury，《等边三角形上均匀分布的量化》，《实分析交流》，第 42(1) 卷，2017，第 149–166 页。[10] S. Graf 和 H. Luschgy。《康托分布的量化》，《数学新闻》，183(1):113–133，1997。[11] S. Graf 和 H. Luschgy。《关于几何平均误差的概率测度量化》，Math. Proc. Camb. Phil. Soc. (2004), 136, 687–717。[12] M. Kesseb¨ohmer、A. Niemann 和 S. Zhu，《通过 Rényi 维数研究紧支撑概率测度的量化维数》，《美国数学会汇刊》，第 376 卷，第 7 期，2023 年 7 月，第 4661–4678 页。[13] G. Pe˘na、H. Rodrigo、M. K. Roychowdhury、J. Sifuentes 和 E. Suazo，《六边形、半圆形及椭圆曲线上的均匀分布量化》，《优化理论与应用杂志》188 (2021), 113–142。[14] K. P¨otzelberger，《分布的量化维数》，Math. Proc. Camb. Phil. Soc. (2001), 第 131 卷，第 507–519 页。[15] M. K. Roychowdhury，《二进康托集上概率测度的量化与质心 Voronoi 镶嵌》，《分形几何杂志》，4(2):127–146，2017。[16] M. K. Roychowdhury，《某些均匀康托分布最优量化精确公式的最小上界》，《离散与连续动力系统：A辑》，38(9)，2018。[17] M. K. Roychowdhury，《由无限相似变换生成的康托分布的最优量化》，Israel Journal of Mathematics，231:437–466，2019。[18] M. K. Roychowdhury，《混合分布的最优量化》，《实分析交流》，46(2)，2021。[19] M. K. Roychowdhury 和 B. Selmi，《动力系统中的局部维数与量化维数》，《几何分析杂志》，31(6):6387–6409，2021。[20] H. Karcher，《黎曼质心与光滑化子平滑》，Commun. Pure Appl. Math. 30 (1977), 509–541。[21] B. Afsari，《黎曼 L^p 质心：存在性、唯一性与凸性》，Proc. Amer. Math. Soc. 139 (2011), 655–673。[22] X. Pennec，《黎曼流形上的内禀统计：几何测量的基本工具》，Journal of Mathematical Imaging and Vision，25 (2006), 127–154。[23] M. K. Roychowdhury，《球面上的最优量化：连续与离散模型——一项适合初学者的综述性研究》，《数学》14 (2026)，第 1 期，文章编号 63。[24] M. K. Roychowdhury，《球面几何上的离散量化：显式模型、计算与教学性阐述》，arXiv 预印本，2025。

School of Mathematical and Statistical Sciences, University of Texas Rio Grande Valley, 1201 West University Drive, Edinburg, TX 78539-2999, USA.电子邮箱地址: mrinal.roychowdhury@utrgv.edu