

双対平坦空間におけるダイバージェンスを使った Voronoi 図

大西 建輔 *, 今井 浩 **

* 神戸大学自然科学研究科, ** 東京大学理学部情報科学科

概要

Voronoi 図は計算幾何においてよく研究されている対象というだけでなく, その実際上の応用として CAD や VLSI 設計などに応用できる幾何構造である. この構造をユークリッド空間の拡張であるリーマン多様体上へ拡張することを考える. 特に, 本稿では, 双対平坦な座標系を持つリーマン多様体に計算幾何的な考えを適用し, その空間に適した“距離”を定義することにより, Voronoi 図を定義した. その結果, この多様体上には, 2つの Voronoi 図を定義することになる.

さらに, 双対平坦空間の実例として, 指数型分布族の統計パラメタ空間を考え, その空間上の Voronoi 図の構造を解析している.

Voronoi Diagram for the Dually Flat Space by Divergence

Kensuke Onishi *, Hiroshi Imai **

* Graduate School of Science and Technology, Kobe University,

** Dept. of Information Science, Faculty of Science, University of Tokyo

Abstract

Voronoi Diagram is not only a main object of computational geometry but also is useful for applications such as VLSI CAD and Computer Graphics. This paper investigates generalized Voronoi diagrams on some Riemannian space, an extension of the Euclidean space, specifically on a dually flat space in information geometry. In this space, the distance-like divergence is determined, and this divergence is used to define the generalized Voronoi diagram. As the divergence does not satisfy the symmetry of distance, two Voronoi diagrams (∇ -, ∇^* -Voronoi diagram) can be defined by the direction of divergence in that space.

As an example of the dually flat space, a statistical parametric space of exponential family is considered. In that space we define the Voronoi diagram and the structure is analyzed. The combinatorial and computational complexity of the Voronoi diagram is bounded.

1 始めに

情報幾何 [1] は, 確率密度関数のパラメタ空間に微分幾何的な構造を導入している. その研究は, さらに進み [2, 6] という多くの研究成果が得られている. この理論は, 統計的推量だけでなく, 制御システム論や内点法にまで応用されている. ここで, 新しい一つの見方として, 計算幾何的な観点からこのパラメタ空間を考察してみたい.

Onishi[7], Onishi-Takayama[9] では, ある種のリーマン多様体上での幾何構造を定義し, その解析を行なっている. ただし, [9] での Voronoi 図は, Devillers, Boissonnat, Cérézp, Teillaud [4] でも触れられている. そのリーマン多様体は, [7] では正規分布の統計パラメタ空間となっており, [9] では特殊な多次元正規分布の統計パラメタ空間となっている.

Onishi-Imai[8] では, 特にパラメタ空間上での幾何構造に話を限定し, その空間上で Kullback-Leibler ダイバージェンス ([3] 参照) により構成できる Voronoi 図を定義し, その組合せ的複雑度の解析をおこなった.

本稿では、双対平坦空間での Voronoi 図を考え、定義を行なっている。この空間では、“距離”が定義でき、それはダイバージェンスとなる。しかし、このダイバージェンスは、対称性を満たさない量なので、構造の違う 2 つの Voronoi 図 (∇ -, ∇^* -Voronoi 図) を定義することができる。

さらに、このような双対平坦空間の実例として、指数型分布族のパラメタ空間での Voronoi 図の組合せ的複雑度の解析を行なった。この指数型分布族は、正規分布や Poisson 分布など含む確率密度関数のクラスである。つまり、指数型分布族のパラメタ空間は、2 つの平坦な座標系をもち、その空間に導入できる“距離”は Kullback-Leibler ダイバージェンス [3] となる。この Voronoi 図も e,m-Voronoi 図が考えられるが、そのどちらの組合せ複雑度と計算複雑度は、 $O(n^{\lfloor (d+1)/2 \rfloor})$ と $O(n^{\lfloor (d+1)/2 \rfloor} \log n)$ となる。

2 リーマン多様体と統計パラメタ空間

まず、リーマン多様体を定義する。

定義 1 (リーマン多様体): R を多様体とし、その空間上の任意の点で内積 g が定義されている空間をリーマン多様体 (R, g) と呼ぶ。

例 1: 1. ユークリッド空間: $R = \mathbb{R}^d$, g を I_d (d 次元単位行列)。

2. 上半平面: 多様体を

$$R = \{(x, y) \mid y > 0, x, y \in \mathbb{R}\}$$

とし、内積を $g = y^{-2} I_2$ とする。

次に、情報幾何 [1, 2] などと考えられている統計パラメタ空間を次のように定義する。

定義 2 (統計パラメタ空間): $[\xi_1, \dots, \xi_d]$ でパラメタ表示される確率分布の集合を考える。すなわち、

$$\{[\xi_1, \dots, \xi_d] \in \mathbb{R}^d \mid [\xi_1, \dots, \xi_d] \text{ は、ある確率分布と一対一対応がある} \}$$

という集合を考える。この集合のことを統計パラメタ空間と定義する。

このパラメタ空間に次に定義する計量を入れて、リーマン多様体であるとする。

定義 3 (Fisher 情報行列): 任意の確率密度関数 $p(x; \xi)$ に対して、次のような行列を考える。

$$g_{ij} = \int \frac{\partial \log p(x; \xi)}{\partial \xi_i} \cdot \frac{\partial \log p(x; \xi)}{\partial \xi_j} \cdot p(x; \xi) dx \quad (i, j = 1, \dots, d).$$

ただし、 $\xi = [\xi_1, \dots, \xi_d]$ とする。

例 2: 1. 正規分布の統計パラメタ空間: 正規分布の確率密度関数は平均 μ と標準偏差 σ を使って次のように表される。

$$p(x; \xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left\{ -\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2} \right\}.$$

この統計パラメタ空間は、

$$R = \{(\mu, \sigma) \mid \sigma > 0, \mu, \sigma \in \mathbb{R}\}$$

となる。さらに、その Fisher 情報行列は、次のようになる。

$$(g_{ij}) = \frac{1}{\sigma^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

2. 指数型分布族: 確率密度関数 $p(x; \theta)$ が次のように表される確率分布である (x は確率変数であり, θ はパラメタである).

$$p(x; \theta) = \exp \left(C(x) + \sum_{i=1}^d \theta^i F_i(x) - \psi(\theta) \right) \quad (1)$$

この統計パラメタ空間は,

$$R = \{ \theta = [\theta^1, \dots, \theta^d] \mid \theta_i \in \mathbb{R} \}$$

となる. この Fisher 情報行列は次のようになる.

$$g_{ij} = \int F_i(x) F_j(x) p(x; \theta) dx - \frac{\partial}{\partial \theta_i} \psi(\theta) \eta_j - \frac{\partial}{\partial \theta_j} \psi(\theta) \eta_i + \frac{\partial}{\partial \theta_i} \psi(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta_j} \psi(\theta)$$

3 多様体上の座標系

さて, リーマン多様体 (R, g) 上に次の条件を満たす座標系 $[\theta^i], [\eta_j]$ が存在するとする.

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial \theta^i}, \frac{\partial}{\partial \eta_j} \right\rangle := \sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial \theta^i} \cdot g_{ij} \cdot \frac{\partial}{\partial \eta_j} = \delta_i^j \quad (2)$$

条件 (2) を満たすような座標系が存在する場合には, それぞれに対して接続が決まり, 双対平坦空間 (R, g, ∇, ∇^*) になる. この座標系を双対座標系と呼ぶ.

[注意] 同じ上付きと下付きの添字を書いた場合には, その和をとるものと仮定する (Einstein の規約).

また, 以下では, 次のような記法を用いる

$$\partial_i := \frac{\partial}{\partial \theta^i}, \quad \partial^i := \frac{\partial}{\partial \eta_i}, \quad g_{ij} := \langle \partial_i, \partial_j \rangle, \quad g^{ij} := \langle \partial^i, \partial^j \rangle.$$

例 3: 1. ユークリッド空間: $[\theta^i] = [\eta_i]$ とすることにより上の条件を満たす.

2. 指数型分布族: 定義にある座標系 $[\theta]$ をそのまま利用する (自然パラメタと呼ぶ). また, $[\eta]$ を次のように定義する.

$$\eta_i = \int F_i(x) p(x; \theta) dx \quad (3)$$

この座標系を期待値パラメタと呼ぶ. このとき, この二つの座標系は, 条件を満たすので双対座標系となる.

定義 4: 双対座標系 $[\theta], [\eta]$ を考える. 次の条件を満たす関数 $\varphi: R \rightarrow \mathbb{R}$ を考える.

- $\partial_i \psi = \eta_i, \quad \partial^i \varphi = \theta^i$
- $\partial_i \partial_j \psi = g_{ij}, \quad \partial^i \partial^j \varphi = g^{ij}$

ただし, $\psi = \theta^i \eta_i - \varphi$ とする. この条件式で表される座標変換を Legendre 変換という. また, φ, ψ をポテンシャルという.

定義 5: $p, q \in R$ に対して, $D: R \times R \rightarrow \mathbb{R}$ を次で定義する.

$$D(p||q) = \psi(p) + \varphi(q) - \theta^i(p) \eta_i(q)$$

これを ∇ -ダイバージェンスという.

補題 1: ∇ -ダイバージェンスは, 双対平坦空間 (R, g, ∇, ∇^*) に対して一意に決まる. また,

$$D(p||q) = D^*(q||p)$$

も成り立つ. ただし, D^* は, ∇ と ∇^* を交換して定義した ダイバージェンスである.

さて, このような ダイバージェンスを考えたが, この ダイバージェンスに関して次のような 興味深い定理が成り立つ.

定理 2 (双対平坦空間上での Pythagoras の定理 [2]): 双対平坦空間 (R, g, ∇, ∇^*) 上の 3 点 p, q, r を考える. このとき, p, q を結ぶ ∇ -測地線と q, r を結ぶ ∇^* -測地線が g に関して, 直行するならば, 次の式が成り立つ (図 1 左).

$$D(p||r) = D(p||q) + D(q||r)$$

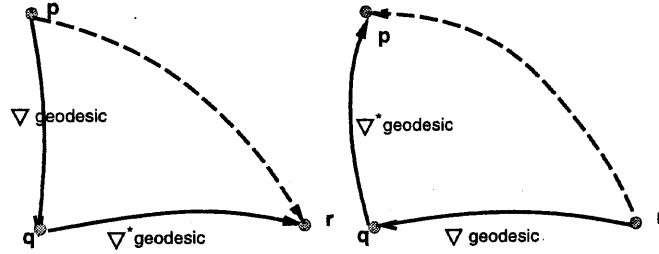


図 1: 双対平坦空間上の Pythagoras の定理

[注意] 上の定理において, ∇ と ∇^* を取り替えることにより,

$$D^*(p||r) = D^*(p||q) + D^*(q||r)$$

が成り立つ (図 1 右参照).

例 4: 1. ユークリッド空間: ポテンシャルは, $\psi = \varphi = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d (\theta^i)^2$ であり, そこから計算できる ダイバージェンスは,

$$D(p||q) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d \{(\theta^i(p))^2 + (\theta^i(q))^2 - 2\theta^i(p)\theta^i(q)\}$$

となり, ユークリッド距離の平方の $1/2$ となる. すなわち, 先の定理はユークリッド空間での Pythagoras の定理となる.

2. ∇, ∇^* -接続がそれぞれ

$$\Gamma_{ij,k}^{(n)} = \int \partial_i \partial_j \log p(x; \theta) \cdot \partial_k \log p(x; \theta) \cdot p(x; \theta) dx$$

$$\Gamma_{ij,k}^{(e)} = \int (\partial_i \partial_j \log p(x; \theta) + \partial_i \log p(x; \theta) \partial_j \log p(x; \theta)) \cdot \partial_k \log p(x; \theta) \cdot p(x; \theta) dx$$

で与えられている双対空間を考える (前者を m-接続, 後者を e-接続という).

$$\partial_i \partial_j \log p(x; \theta) = 0$$

を満たす R 上の座標系があるとするこの空間は, 双対平坦空間になり, 双対座標系を持つ. なぜならば, この条件は

$$\log p(x; \theta) = C(x) + \theta^i F_i(x)$$

と同値であり, $[\theta]$ という座標系をとることができる. さらに, ここからもう一つの座標系である $[\eta]$ を

$$\eta_i = \int F_i(x) p(x; \theta) dx$$

と定義することにより双対平坦座標系となる.

$$\psi(\theta) = \int p(x; \theta) dx$$

とするとここから, ダイバージェンスが計算できる.

$$D^{(e)}(p||q) = D^{(m)}(q||p) = \int p(x) \log \frac{p(x)}{q(x)} dx$$

となる. このダイバージェンスは, Kullback-Leibler ダイバージェンスといい, 情報理論で良く利用される量である [3]. このような座標系をもつ実例として指数型分布族がある.

4 Voronoi 図

ここでは, 双対平坦空間 (R, g, ∇, ∇^*) 上の Voronoi 図を定義する.

定義 6 (∇ -Voronoi 図): 双対平坦空間 (R, g, ∇, ∇^*) 上の n 個の点 $p^{(j)}$ を考える. このとき, $p^{(j)}$ の Voronoi 領域 $V(p^{(j)})$ を次で定義する.

$$V(p^{(j)}) = \bigcap_{k \neq j} \left\{ q \mid D(q||p^{(j)}) < D(q||p^{(k)}) \right\}$$

$V(p^{(j)})$ は空間を分割するので, これを ∇ -Voronoi 図とよぶ. ただし, $D(\cdot||\cdot)$ は, ∇ -ダイバージェンスとする.

定義 7 (∇^* -Voronoi 図): ∇ -Voronoi 図の定義の次の部分

$$D(q||p^{(j)}) < D(q||p^{(k)})$$

を

$$D^*(q||p^{(j)}) < D^*(q||p^{(k)})$$

で置き換えた幾何構造と定義する.

[注意] ∇^* -Voronoi 図を上のように定義したが, $D(p||q) = D^*(q||p)$ が成り立つので, ∇^* -Voronoi 図は,

$$D(p^{(j)}||q) < D(p^{(k)}||q)$$

と同値であることがわかる. もっと言い替えると, 母点 (もともと R 上に与えられた点, $p^{(j)}$ で表す) からのダイバージェンスを計るか, 母点へのダイバージェンスを計るかによって 2 種類の構造を定義したことになる.

- 例 5: 1. ユークリッド空間: ダイバージェンスが距離の平方の定数倍になっているので, ユークリッド距離を使った Voronoi 図になる. これは, [5, 10] などと考えられてきた構造である.
2. 例 4 の 2 で考えた双対平坦空間を考える. この空間は, 統計パラメタ空間に Fisher 計量と双対な接続をいれた空間となっている. ∇ -ダイバージェンスが Kullback-Leibler ダイバージェンスになるので, 点からの距離をどちらから計るかにより 2 種類の Voronoi 図が定義できる. ∇ -Voronoi に対応するものを e-Voronoi, ∇^* -Voronoi に対応するものを m-Voronoi と呼ぶ.

5 指数型分布族における構造

ここでは, 例 2 の 2. で定義した指数型分布族のパラメタ空間での Voronoi 図を考える. 式 (1) におけるパラメタ $[\theta]$ を自然パラメタ, 式 (3) で定義される座標系 η を期待値パラメタと呼んでいた.

まず, 指数型分布族に対する Fisher 情報行列を計算する.

$$g_{ij} = \int F_i(x) F_j(x) p(x; \theta) dx - \partial_i \psi(\theta) \eta_j - \partial_j \psi(\theta) \eta_i + \partial_i \psi(\theta) \partial_j \psi(\theta).$$

さらに, この空間に e-接続と m-接続を導入することにより統計パラメタ空間が双対平坦空間 (R, g, ∇, ∇^*) となる. その空間上の ダイバージェンスが Kullback-Leibler ダイバージェンスになるので実際に計算を行なう.

$$\begin{aligned} D(p(x; \theta) \| p(x; \tilde{\theta})) &= \sum_{i=1}^d (\theta^i - \tilde{\theta}^i) \eta_i - (\psi(\theta) - \psi(\tilde{\theta})) \\ &= - \left\{ \psi(\theta) - \sum_{i=1}^d \theta^i \eta_i \right\} + \left\{ \psi(\tilde{\theta}) - \sum_{i=1}^d \tilde{\theta}^i \eta_i \right\}. \end{aligned} \quad (4)$$

さて, この空間上での ダイバージェンスを定義が計算できたので, その m-Voronoi 図と e-Voronoi 図を定義することができた.

今, 点集合 $P = \{\theta^{(j)} | p(x; \theta^{(j)}) \text{ は指数型分布}, 1 \leq j \leq n\}$ が双対平坦空間 (R, g, ∇, ∇^*) 上に与えられているとする. この集合に対する m-Voronoi 図と e-Voronoi 図をそれぞれ考える. 以下では, それぞれの構造の解析を行なう.

5.1 m-Voronoi 図

まず, m-Voronoi 図について考える. 双対平坦空間 R に対して, さらにもう一つ軸 y を加えて, $[R, y]$ という空間を考える. その空間において, 超曲面 $y = D(p(x; \theta) \| p(x; \theta^{(j)}))$ をすべての点 $\theta^{(j)}$ ($j = 1, \dots, n$) に対して考える. この超曲面の下側エンベロップを R に射影することで m-Voronoi 図を得ることができる.

式 (4) を書き直すと, 次のように表せる.

$$D(p(x; \theta) \| p(x; \theta^{(j)})) = \varphi(\eta) - \left\{ \sum_{i=1}^d \theta^{(j)i} \eta_i - \psi(\theta^{(j)}) \right\}.$$

ここで, $[\eta]$ 座標系を利用して, $[\eta, y]$ という空間を考える. この空間で次のような写像を考える.

$$[\eta, y] \mapsto [\eta, y - \varphi(\eta)]$$

この写像により、超曲面はつぎのような超曲面に移る。

$$y = - \left\{ \sum_{i=1}^d \theta^{(j)i} \eta_i - \psi(\theta^{(j)}) \right\}.$$

この曲面は、 $[\eta, y]$ の超平面である。なぜなら、 $\theta^{(j)}$ の部分は、母点なので定数と考えてもいいので。この写像は、 y に関する上下関係を替えないので次のことがいえる。

定理 3: m-Voronoi 図は、次の n 枚の超平面の下側エンベロープの R への射影で得ることができる。

$$y = - \left\{ \sum_{i=1}^d \theta^{(j)i} \eta_i - \psi(\theta^{(j)}) \right\} \quad (j = 1, \dots, n).$$

さらに、その組合せ複雑度は、 $O(n^{\lfloor (d+1)/2 \rfloor})$ であり、計算複雑度は $O(n^{\lfloor (d+1)/2 \rfloor} \log n)$ である。

このように射影を行ない Voronoi 図を構成するが、もともとの空間 S にないところへ射影される部分がある。すなわち、持ち上げた空間での超平面は含まれていても $[\eta]$ の空間では、含まれないような Voronoi 図の一部が存在し、その部分を削除しなければならない。

点-超平面変換を考えると、次の定理を得ることができる。

定理 4: $[R, y] = [\theta, y]$ の空間上の n 点集合 $[-\theta^{(j)}, \psi]$ のユークリッド空間での凸包を考える。この凸包の面束から支持超平面を

$$- \sum_{i=1}^d \eta_i \theta^i + c$$

の形で持たない面を削除する。ただし、 $\eta = \eta(q)$, $q \in R$, c は定数である。

5.2 e-Voronoi 図

この章では、e-Voronoi 図について述べる。 $[\theta]$ と $[\eta]$ は双対なので、m-Voronoi で行なった議論で 2 つを入れ換える。つまり、式 (4) を次のように書き直す。

$$D(p(x; \eta^{(j)}) || p(x; \eta)) = \psi(\theta) - \left\{ \sum_{i=1}^d \eta_i^{(j)} \theta^i - \psi(\eta^{(j)}) \right\}$$

この場合の写像は、

$$[\theta, y] \mapsto [\theta, y - \psi]$$

となり、超平面は、

$$y = - \left\{ \sum_{i=1}^d \eta_i^{(j)} \theta^i - \psi(\eta^{(j)}) \right\}$$

となり次の定理が成り立つ。

定理 5: e-Voronoi 図は、次の n 枚の超平面の下側エンベロープとして得ることができる。

$$y = - \left\{ \sum_{i=1}^d \eta_i^{(j)} \theta^i - \psi(\eta^{(j)}) \right\} \quad (j = 1, \dots, n)$$

さらに、その組合せ複雑度は、 $O(n^{\lfloor (d+1)/2 \rfloor})$ であり、計算複雑度は、 $O(n^{\lfloor (d+1)/2 \rfloor} \log n)$ である。

6 まとめ

本稿では、双対平坦空間上に2つの構造の異なる ∇ -, ∇^* -Voronoi 図を定義した。これらの構造については、あまり詳しいことはわかっていないが、次のことはわかっている。

系 6: 双対平坦空間で ∇ -(∇^* -)Voronoi 図を考える。その面は、 ∇^* -(∇ -) 測地線の集合になっている。

これは、定理 2 から明らかである。しかしながら、指数型分布族で行なった組合せ複雑度や計算複雑度の評価を行なうことは、今のところできていない。

また、双対平坦空間だけでなく、一般のリーマン多様体に対しても何らかの意味のある”距離”を考えることにより、Voronoi 図を定義できると考えられる。それ以外にも双対平坦空間に限っても、この空間はよい性質を持っているので、凸包や三角形分割など幾何的な構造を定義することもできると考えられる。

参考文献

- [1] S. Amari: *Differential Geometrical Methods in Statistics*. Lecture Notes in Statistics, Vol.28, Springer-Verlag, New York, 1985.
- [2] 甘利 俊一, 長岡 浩司: 情報幾何の方法. 岩波書店, 東京, 1993.
- [3] T. M. Cover and J. A. Thomas: *Elements of Information Theory*. Wiley-Interscience, New York, 1991.
- [4] O. Devillers, J. D. Boissonnat, A. Cérézo and M. Teillaud: Output-Sensitive Construction of the 3-D Delaunay Triangulation of Constrained Sets of Points. *Tech. Report 1415*, INRIA, 1991.
- [5] H. Edelsbrunner: *Algorithms in Combinatorial Geometry*. Springer-Verlag, Berlin, 1987.
- [6] M. K. Murray and J. W. Rice: *Differential Geometry and Statistics*. Monographs on Statistics and Applied Probability, Vol.48. Chapman & Hall, London, 1993.
- [7] K. Onishi: Voronoi Diagram in the d -Dimensional Hyperbolic Space. *Proc. of the International Symposium on Combinatorics and Applications*, Tianjin, Nankai University, 1996, pp.314-324.
- [8] K. Onishi and H. Imai: Voronoi Diagram in Statistical Parametric Space by Kullback-Leibler Divergence. *Proc. 13th ACM Symposium on Computational Geometry*, Communication Session, 1997, to appear.
- [9] K. Onishi and N. Takayama: Construction of Voronoi Diagram on the Upper Half-Plane. *IEICE Trans. on Fundamentals*, Vol.E79-A, No.4, 1996, pp.533-539.
- [10] F. P. Preparata and M. I. Shamos: *Computational Geometry*. Springer-Verlag, New York, 1985.