数理解析研究所講究録
992巻 1997年 106-113

統計パラメタ空間における Voronoi diagram の離散構造

大西 建輔*

神戸大学自然科学研究科

Abstract

本稿では, 確率分布をパラメタライズした空間における Voronoi diagram について定義をおこなっている. さらに, その Voronoi diagram の辺数の評価を行なっている.

1 始めに

計算幾何は, ユークリッド空間とユークリッド幾何を基礎として発達してきた. このユークリッド空間をリーマン空間に置き換えることにより, 何が定義でき, 何が構成可能なのかを考察したい. 本稿では, 計算幾何のもっとも基本的な幾何構造であり, 離散構造でもある Voronoi diagram を研究対象として取り上げる. そして, Voronoi diagram の新しい応用の範囲として, 情報幾何における統計パラメタ空間を考える. この空間では, それぞれの点がある確率分布に対応しており, ユークリッド距離よりもふさわしい距離を適用すべきであろう.

一つの選択としては, Fisher 情報行列から導かれる距離 ([1]) がある. [7] において, 正規分布の統計パラメタ空間における Voronoi diagram について述べている. この Voronoi diagram は良い性質を持っているので, ユークリッド平面上の Voronoi diagram と同様に効率的に構成できる. すなわち, $O(n \log n)$ 時間と $O(n)$ 領域を使うことにより構成可能である. さらに, この結果をある種の多次元正規分布に拡張した結果を [8] において述べている. この多次元正規分布は, 分散共分散行列が $\sigma^2 \cdot I$ となるものである.

"距離" のもう一つの選択肢としては, 情報理論で良く知られている Kullback-Leibler divergence である. Kullback-Leibler divergence を距離とみなし, Voronoi diagram を定義する (5 章). この Voronoi diagram を 5.1 章では, 正規分布のパラメタ空間上で, 5.2 章では, 多次元正規分布のパラメタ空間上で考え, その辺数を評価している. これら評価には, linearization の手法 [4] を適用している.

本稿では, 計算機のモデルとして, real RAM を考えている. 特に, 対数計算が定数時間でできるものを考えている ([9] 参照).

2 Voronoi diagram

この章では, Voronoi diagram を定義し, その性質などを述べる.

Definition 1 $P = \{p_1, \ldots, p_n\}$ を d 次元ユークリッド空間 $\mathbb{R}^d$ 上の点集合とする. それぞれの点を母点と呼ぶ. P に対する *Voronoi* 領域 $\mathrm{Vor}(p_i)$ を次で定義する.

$$\mathrm{Vor}(p_i) = \{x \in \mathbb{R}^d \mid D(x, p_i) \leq D(x, p_j)\ \forall j \neq i\} \tag{1}$$

ただし, $D(\cdot, \cdot)$ は, ユークリッド空間上の距離関数とする.

この *Voronoi* 領域の全体は, 空間を分割する. この分割を *Voronoi diagram* と呼ぶ. *Voronoi* 領域の頂点を *Voronoi* 点, *Voronoi* 領域の k 次元 *face* を *Voronoi k-face* と呼ぶ.

*Graduate School of Science and Technology, Kobe University, Kobe, Japan ,Email: onishi@math.s.kobe-u.ac.jp

ユークリッド距離を使った Voronoi diagram の性質を述べる.

- それぞれの Voronoi 領域は, その母点を含む凸包となる.
- もともとの点集合が d 次元に含まれると仮定すると, 各点を $d+1$ 次元に適当に持ち上げた $d+1$ 次元点集合の凸包の下側凸包を射影することで, Voronoi 図が構成できる. このアルゴリズムを利用することにより, $O(n^{\lfloor d/2 \rfloor})$ 時間で構成可能である.
- Voronoi diagram の双対構造は, Delaunay 三角形分割になっている.

3 統計パラメタ空間

この章では, 統計パラメタ空間の定義とその応用について述べる.

Definition 2 確率密度関数 $p(x;\xi)$ に対して, x を確率変数として, $\xi=[\xi_1,\ldots,\xi_d]$ により, 確率分布が決まっている場合, ξ のなす空間を統計パラメタ空間という. その独立な変数の数を統計パラメタ空間の次元とする.

Example

- [正規分布] 確率密度関数が以下のように定義できる.

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

  この統計パラメタ空間は, $[\xi]=[\mu,\sigma],\quad \sigma>0$ となりその次元は 2 となる.

- [多次元正規分布]

$$p(x|\xi)=(2\pi)^{-\frac{d}{2}}|\Sigma|^{-\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu)\Sigma^{-1}\,{}^t(x-\mu)\right), \tag{3}$$

  ただし, $\mu\in\mathbb{R}^d$ は平均, Σ は d 次元正値対称行列で分散共分散行列と呼ばれる. このとき, この確率パラメタ空間は, $[\xi]=[\mu_1,\cdots,\mu_d,\sigma_{11},\sigma_{12},\cdots,\sigma_{22},\cdots,\sigma_{dd}]$ となり, その次元は $d(d+3)/2$ となる.

さて, これらの空間を考えた場合にその空間上での " 近接関係" を考える. "近接関係" を考えることにより確率密度関数の推定などに役立つ. しかしながら, ここで考えるべき "近接関係" は, 確率論の立場からみて意味のあるものである必要がある. 一つの選択としては, 情報幾何 [1] において研究がなされているようにこの空間をリーマン多様体であると考え, その計量を Fisher 情報行列で導入するものである. また, 別の選択肢としては, 情報理論で良く使われる Kullback-Leibler divergence を距離として導入することである.

4 Fisher 情報行列から導かれる距離の場合 [7, 8]

この章では, 統計パラメタ空間上で Fisher 情報行列から導かれる距離を使った Voronoi diagram を考える. まず, Fisher 情報行列を定義する.

Definition 3 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.

$$g_{ij}=\int\frac{\partial}{\partial\xi_i}\log p(x;\xi)\cdot\frac{\partial}{\partial\xi_j}\log p(x;\xi)\cdot p(x;\xi)dx. \tag{4}$$

この行列のことを *Fisher* 情報行列という.

この行列を次のようにして計量とみなす.

$$ds^2 = (d\xi_1, \ldots, d\xi_d) \cdot \{g_{ij}\} \cdot {}^t(d\xi_1, \ldots, d\xi_d)$$

統計パラメタ空間にこの計量を導入することにより, リーマン空間と考えることができる.

ここで, 話を正規分布に制限する. 正規分布 (2) に対して, この Fisher 情報行列を計算すると,

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

となる.

これを用いて, 正規分布の統計パラメタ空間をリーマン空間と考えた時, 次の補題が成り立つ.

Lemma 4 正規分布の統計パラメタ空間は, *Fisher* 情報行列を計量としたときに *Poincaré* の上半空間モデルとみなせる.

また, その空間での 2 点 $p^{(1)}(x;\mu^{(1)},\sigma^{(1)}), p^{(2)}(x;\mu^{(2)},\sigma^{(2)})$ 間の距離が計算でき, それは次のように計算できる.

$$D(p^{(1)},p^{(2)}) = \left|\log\frac{A+\sqrt{A^2-4(\sigma^{(1)})^2(\sigma^{(2)})^2}}{A-\sqrt{A^2-4(\sigma^{(1)})^2(\sigma^{(2)})^2}}\right|, \tag{5}$$

ただし $A = (\mu^{(1)}-\mu^{(2)})^2 + \{(\sigma^{(1)})^2 + (\sigma^{(2)})^2\}$.

この距離を使うことにより正規分布の確率パラメタ空間上に Voronoi diagram を定義することができる. すなわち, 数式 (1) を 数式 (5) と置き換えることにより, 定義 1 を統計パラメタ空間での Voronoi diagram の定義と考えることができる. リーマン空間上では, 直線の代わりに測地線 ([6]) を利用する. 特にこの空間では, 測地線は次のように表される.

$$(x-a)^2 + y^2 = R^2, \quad (a, R \in \mathbb{R}, R > 0).$$

さらに, 2 点 $p^{(1)}(x;\mu^{(1)},\sigma^{(1)}), p^{(2)}(x;\mu^{(2)},\sigma^{(2)})$ から等距離にある点の集合 (X, Y) は次のようになる.

$$\begin{cases} X = \dfrac{\mu^{(1)}+\mu^{(2)}}{2}, & \sigma^{(1)} = \sigma^{(2)}, \\ \left(X - \dfrac{\mu^{(1)}\sigma^{(2)} - \sigma^{(1)}\mu^{(2)}}{\sigma^{(2)}-\sigma^{(1)}}\right)^2 + Y^2 = \sigma^{(1)}\sigma^{(2)}\left\{\left(\dfrac{\mu^{(1)}-\mu^{(2)}}{\sigma^{(1)}-\sigma^{(2)}}\right)^2 + 1\right\}, & \sigma^{(1)} \neq \sigma^{(2)}. \end{cases} \tag{6}$$

結局, 次の定理が証明できる [7].

Theorem 5 [7] 正規分布の統計パラメタ空間において *Fisher* 情報行列から導かれる距離を使った *Voronoi diagram* の *face lattice* は, ユークリッド空間においてユークリッド距離で構成した *Voronoi diagram* の *face lattice* と見た場合に部分グラフとなっている.

特殊な多次元正規分布に対しても同様の定理が成り立つ ([8]). それは, 分散共分散行列が次のように表される場合である.

$$\Sigma = \sigma^2 \cdot I_d \quad (I_d \text{ は } d \text{ 次元単位行列である}).$$

5 Kullback-Leibler divergence の場合

本章では, "距離" として Kullback-Leibler divergence を考える. まず, Kullback-Leibler divergence を定義する.

Definition 6 [3, 5] 任意の確率密度関数 $p(x), q(x)$ に対して, $p(x)$ から $q(x)$ への *Kullback-Leibler divergence* D_K を次で定義する.

$$D_K(p(x), q(x)) = \int p(x)\log\frac{p(x)}{q(x)}dx.$$

この Kullback-Leibler divergence には, 次のような性質がある.

- $D_K(p(x), q(x)) \geq 0$ (Shannon の不等式として良く知られている)
- $D_K(p(x), q(x)) = 0 \iff p(x) = q(x)$,
- $p(x) \neq q(x)$ の場合, 必ずしも $D_K(p(x), q(x)) = D_K(q(x), p(x))$ が成り立たない.

すなわち, この divergence は, 距離の対称性を満たさない. しかし, Voronoi diagram を定義することができればいいので次のように考える. "統計パラメタ空間上の 2 点に対して, その点への divergennce が等しいような点集合を考える." この方法により, 対称性の不成立を考慮に入れる必要がなくなる.

[注意] この divergece を使うことは, ある種の convex distance function ([2]) を考えることと同じである. 論文 [2] では, 母点から任意の点への convex distance function として取り扱われているが, 本稿では, 任意の点から母点への divergence を考えている.

結局, 統計パラメタ空間での Voronoi diagram を定義することができた.

Definition 7 $P = \{\tilde{p}^{(1)}, \ldots, \tilde{p}^{(n)}\}$ を統計パラメタ空間上の点集合とする. すなわち, それぞれの点 $\tilde{p}^{(\alpha)}$ は, 確率密度関数を表し, その点を母点と呼ぶ. P に対する Voronoi 領域 $\mathrm{Vor}(\tilde{p}^{(\alpha)})$ を次で定義する.

$$\mathrm{Vor}(\tilde{p}^{(\alpha)}) = \{x \in \mathbb{R}^d \mid D_K(x, \tilde{p}^{(\alpha)}) \leq D_K(x, \tilde{p}^{(\beta)})\ \forall\beta \neq \alpha\}, \tag{7}$$

ただし, $D_K(x, y)$ は x から y への *Kullback-Leibler divergence* とする. P に対する *Voronoi* 領域の全体は, 統計パラメタ空間を分割する. それを *Kullback-Leibler divergence* に対する *Voronoi diagram* と呼ぶ.

本稿の後の章では, $\tilde{p}$ で母点を表す. つまり, Kullback-Leibler divergence $D_K(p^{(1)}, \tilde{p}^{(2)})$ を考えると, 最初の点 $p^{(1)}$ は変数であり, 後ろの点 $\tilde{p}^{(2)}$ は母点であるとすればよい.

5.1 正規分布

ここでは, 話を正規分布に制限する.

まず, (2) で定義されている確率分布関数を使い, Kullback-Leibler divergence を計算する.

$p^{(1)}(x; \mu^{(1)}, \sigma^{(1)}), p^{(2)}(x; \mu^{(2)}, \sigma^{(2)})$ を統計パラメタ空間の点とする. このとき, 正規分布に限定した Kullback-Leibler divergence は,

$$D_K\left(p^{(1)}(x; \mu^{(1)}, \sigma^{(1)}), p^{(2)}(x; \mu^{(2)}, \sigma^{(2)})\right) = \log\sigma^{(2)} - \log\sigma^{(1)} + \frac{\left(\sigma^{(1)}\right)^2 + \left(\mu^{(1)} - \mu^{(2)}\right)^2}{2(\sigma^{(2)})^2} - \frac{1}{2}. \tag{8}$$

と計算ができる.

この Kullback-Leibler divergence を利用し, $\tilde{p}^{(1)}(x; \mu^{(1)}, \sigma^{(1)})$ と $\tilde{p}^{(2)}(x; \mu^{(2)}, \sigma^{(2)})$ への divergence が等しい点の集合 (X, Y) を計算すると次のようになる.

$$\begin{cases} X = \dfrac{\mu^{(1)} + \mu^{(2)}}{2}, & \sigma^{(1)} = \sigma^{(2)}, \\ \left(X - \dfrac{(\sigma^{(1)})^2\mu^{(2)} - (\sigma^{(2)})^2\mu^{(1)}}{(\sigma^{(1)})^2 - (\sigma^{(2)})^2}\right)^2 + Y^2 = R, & \sigma^{(1)} \neq \sigma^{(2)}, \end{cases} \tag{9}$$

ただし,

$$R = \frac{(\sigma^{(2)})^2(\sigma^{(1)})^2}{\left\{(\sigma^{(1)})^2 - (\sigma^{(2)})^2\right\}^2}\left\{(\mu^{(1)} - \mu^{(2)})^2 + \left((\sigma^{(1)})^2 - 2(\sigma^{(2)})^2\right)\log\frac{\sigma^{(2)}}{\sigma^{(1)}}\right\},$$

この曲線を "垂直二等分線" という. また, この曲線の一部がこの空間での Voronoi 辺となる.

この曲線 (6) と曲線 (9) を比べると, 良く似ていることがわかる.

- $\sigma^{(1)} = \sigma^{(2)}$ ならば, 同じ曲線となる.
- $\sigma^{(1)} \neq \sigma^{(2)}$, どちらの曲線も $(X-p)^2 + Y^2 = R^2$ となる (これは, この空間上の測地線である).

[**Remark**] $\tilde{p}^{(1)}(x;\mu^{(1)},\sigma^{(1)})$ と $\tilde{p}^{(2)}(x;\mu^{(2)},\sigma^{(2)})$ からの距離が等しいような点集合 (X,Y) を考える. その方程式は次のようになる.

$$\begin{cases} X = \dfrac{\mu^{(1)}+\mu^{(2)}}{2}, & \sigma^{(1)} = \sigma^{(2)}, \\ Y^2 = \dfrac{2(\mu^{(1)}-\mu^{(2)})X + (\sigma^{(1)})^2 - (\sigma^{(2)})^2 + (\mu^{(1)})^2 - (\mu^{(2)})^2}{\log\sigma^{(2)} - \log\sigma^{(1)}}, & \sigma^{(1)} \neq \sigma^{(2)}. \end{cases}$$

次に, この Voronoi diagram の face の数を評価する.

Lemma 8 *正規分布の統計パラメタ空間上にある 3 点を考える. この 3 点への Kullback-Leibler divergence が等しい点は, 存在するとしても高々 1 つである.*

Proof. 2 本の "垂直二等分線" を考える. どちらも円弧の一部となっているので, 高々2 回しか交わらない. しかし, その交点の一部は, この空間には含まれない. なぜなら, どちらの円弧も中心が $\sigma = 0$ 上にあり, この円が定義されるのは, $\sigma > 0$ の領域だけなので. □

この補題を使い, 正規分布の統計パラメタ空間の Voronoi 辺の数を評価する.

Theorem 9 *正規分布の統計パラメタ空間の n 点集合に対する Voronoi 辺の数は, $O(n)$ で押えられる.*

Proof. それぞれの Voronoi 領域は連結であり, その双対構造は平面グラフになっている. さらに, Voronoi digram は平面分割であり, 上の Lemma が証明できている. すなわち, 平面グラフの有名な定理より, その双対構造の辺数は高々 $3n-6$ である. 双対構造の変数と Voronoi diagram の辺数は等しいので, その数は, $O(n)$ で評価できる. □

5.2 多次元正規分布

ここでは, (3) で定義した多次元正規分布の統計パラメタ空間上の Voronoi diagram について考える. さらにこの場合を次の分散共分散行列 Σ の違いで 3 つに分けて考察する.

- $\Sigma = \sigma \cdot I(I$ は単位行列),
- Σ が対角行列.
- Σ が一般の正値対称行列.

5.2.1 単位行列タイプ

ここでは, 確率密度関数が (3) で分散共分散行列が

$$\Sigma = \sigma^2 \cdot I_d \tag{10}$$

と表される場合を考える. この確率分布に対応する統計パラメタ空間は, $[\mu_1, \cdots, \mu_d, \sigma]$ であり, その次元は $d+1$ 次元である.

$p^{(1)}(x; \mu_1^{(1)}, \ldots, \mu_d^{(1)}, \sigma^{(1)})$ から $p^{(2)}(x; \mu_1^{(2)}, \ldots, \mu_d^{(2)}, \sigma^{(2)})$ への Kullback-Leibler divergence は次のように表される.

$$D_K(p^{(1)}, p^{(2)}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{d}\left(\frac{(\mu_i^{(1)})^2 - (\mu_i^{(2)})^2}{\sigma^{(2)}}\right)^2 + \frac{d}{2}\left(\left(\frac{\sigma^{(1)}}{\sigma^{(2)}}\right)^2 - 2\log\frac{\sigma^{(1)}}{\sigma^{(2)}} - 1\right).$$

さらに, 2 点 $\tilde{p}^{(1)}(x; \mu_1^{(1)}, \ldots, \mu_d^{(1)}, \sigma^{(1)}), \tilde{p}^{(2)}(x; \mu_1^{(2)}, \ldots, \mu_d^{(2)}, \sigma^{(2)})$ への divergence が等しい "垂直二等分面" を計算すると, 次のようになる.

$$(X_1 - a_1)^2 + \cdots + (X_d - a_d)^2 + dY^2 = b \quad (a_i, b \in \mathbb{R}).$$

ただし, a_i, b は点に依存した実数である. 実際に計算をすると "垂直二等分面" は次のようになる.

$$\sum_{i=1}^{d}\left(X_i - \frac{(\sigma^{(1)})^2\mu_i^{(2)} - (\sigma^{(2)})^2\mu_i^{(1)}}{(\sigma^{(1)})^2 - (\sigma^{(2)})^2}\right)^2 + dY^2 = \sum_{i=1}^{d}(\sigma^{(1)})^2(\sigma^{(2)})^2\left\{\left(\frac{\mu_i^{(1)} - \mu_i^{(2)}}{(\sigma^{(1)})^2 - (\sigma^{(2)})^2}\right)^2 + \frac{\log\sigma^{(1)} - \log\sigma^{(2)}}{(\sigma^{(1)})^2 - (\sigma^{(2)})^2}\right\}.$$

ここで, この空間での Voronoi diagram の 辺数の評価をする. 評価のために linearization の手法を使うが, まずその説明をする. linearization とは, もともとの構造を崩さずに別の空間への埋め込みを行なう手法である. この手法を使うことにより, その空間での構造としての評価をすることができる.

ここでは, 次のような変換を考える.

$$\mathcal{X}_i := X_i, \quad \mathcal{Y} := {X_1}^2 + \cdots + {X_d}^2 + dY^2.$$

この変換を行なうことにより, 上の Kullback-Leibler divergence を線形化することができる ($\log\sigma^{(1)}$の部分はそれぞれの母点に対して同じ持ち上げになっているので考えなくてもよい). さらに, "垂直二等分面は次のようになる.

$$2a_1\mathcal{X}_1 + \cdots + 2a_d\mathcal{X}_d + \mathcal{Y} = 0.$$

すなわち, 凸包の上限定理を使うことにより次の結果を得ることができる.

Theorem 10 多次元正規分布で確率密度関数が (3), 分散共分散行列が $\sigma^2 I_d$ で表される確率分布の統計パラメタ空間を考える. *n に対する Voronoi diagram の* 辺数は, 高々 $O(n^{\lfloor\frac{d+1}{2}\rfloor})$ で押えられる.

5.2.2 対角行列タイプ

次に, 分散共分散行列が

$$\Sigma = \mathrm{diag}\left[(\sigma_1)^2, (\sigma_2)^2, \cdots, (\sigma_d)^2\right], \tag{11}$$

で表される多次元正規分布を考える. このパラメタ空間は, $2d$ 次元で $[\xi] = [\mu_1, \ldots, \mu_d, \sigma_1, \ldots, \sigma_d] = [X_1, \ldots, X_d, Y_1, \ldots, Y_d]$ と表される.

$p^{(1)}(x; \mu_1^{(1)}, \ldots, \mu_d^{(1)}, \sigma_1^{(1)}, \ldots, \sigma_d^{(1)})$ から $p^{(2)}(x; \mu_1^{(2)}, \ldots, \mu_d^{(2)}, \sigma_1^{(2)}, \ldots, \sigma_d^{(2)})$ への Kullback-Leibler divergence は, 次のように計算できる.

$$D_K(p^{(1)}, p^{(2)}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{d}\left\{\frac{(\sigma_i^{(1)})^2}{(\sigma_i^{(2)})^2} + \left(\frac{\mu_i^{(2)} - \mu_i^{(1)}}{\sigma_i^{(2)}}\right)^2 - 2\log\frac{\sigma_i^{(1)}}{\sigma_i^{(2)}} - 1\right\}.$$

ここから, "垂直二等分面"(facet となる) を計算すると次のようになる.

$$a_1 \left\{ (X_1 - b_1)^2 + Y_2^2 \right\} + \cdots + a_d \left\{ (X_d - b_d)^2 + Y_d^2 \right\} = c$$

ただし, $a_i, b_i, c \in \mathbb{R}$.

この場合, この曲面が一般にどのような形状をしているかは, 決まらない. しかしながら, ここでも linearization の手法を持ちいて 辺数の評価ができる.

ここでは, 次のような変換を用いる.

$$\mathcal{X}_i := X_i = \mu_i, \quad \mathcal{Y}_i := {X_i}^2 + {Y_i}^2 = {\mu_i}^2 + {\sigma_i}^2.$$

この変換により, "垂直二等分面" は次のようになる.

$$(a_1 \mathcal{Y}_1 - 2a_1 b_1 \mathcal{X}_1) + \cdots + (a_d \mathcal{Y}_d - 2a_d b_d \mathcal{X}_d) = c \quad (a_i, b_i, c \in \mathbb{R}).$$

つまり, この曲線は $2d$ 次元の空間の超平面と考えられる. 結局, $2d$ 次元の Voronoi diagram とみなすことができ, その 辺数の評価を行なうことができる.

Theorem 11 確率分布が (3) で表され, その分散共分散行列が (11) で表される確率分布の統計パラメタ空間を考える. その空間に n 点集合があるとすると, *Voronoi diagram* の 辺数は, $O(n^d)$ で押えられる.

5.2.3 正値対称行列タイプ (2 次元)

この章では, Σ が 2 次元の正値対称行列について考える.

$$\Sigma = \begin{pmatrix} (\sigma_{11})^2 & (\sigma_{12})^2 \\ (\sigma_{12})^2 & (\sigma_{22})^2 \end{pmatrix}$$

となる場合を考える. この場合, パラメタ空間は, 5 次元の空間となる. すなわち,$[\xi] = [\mu_1, \mu_2, \sigma_{11}, \sigma_{12}, \sigma_{22}]$ である.

始めに, $(\mu_1^{(1)}, \mu_2^{(1)}, \sigma_{11}^{(1)}, \sigma_{12}^{(1)}, \sigma_{22}^{(1)})$ から $(\mu_1^{(2)}, \mu_2^{(2)}, \sigma_{11}^{(2)}, \sigma_{12}^{(2)}, \sigma_{22}^{(2)})$ までの Kullback-Leibler divergence を計算する. ただし, この 2 点の分散共分散行列を次のように書く.

$$\Sigma = \begin{pmatrix} (\sigma_{11}^{(1)})^2 & (\sigma_{12}^{(1)})^2 \\ (\sigma_{12}^{(1)})^2 & (\sigma_{22}^{(1)})^2 \end{pmatrix}, \quad \Sigma' = \begin{pmatrix} (\sigma_{11}^{(2)})^2 & (\sigma_{12}^{(2)})^2 \\ (\sigma_{12}^{(2)})^2 & (\sigma_{22}^{(2)})^2 \end{pmatrix}.$$

Kullback-Leibler divergence を計算すると次のようになる.

$$\begin{aligned} D_K(p^{(1)}, p^{(2)}) &= \frac{1}{2} \log \frac{|\Sigma'|}{|\Sigma|} + \frac{(\sigma_{22}^{(2)})^2}{2|\Sigma'|} \left\{ (\sigma_{11}^{(1)})^2 + (\mu_1^{(1)} - \mu_1^{(2)})^2 \right\} \\ &+ \frac{(\sigma_{11}^{(2)})^2}{2|\Sigma'|} \left\{ (\sigma_{22}^{(1)})^2 + (\mu_2^{(1)} - \mu_2^{(2)})^2 \right\} - \frac{(\sigma_{12}^{(2)})^2}{|\Sigma'|} \left\{ (\sigma_{12}^{(1)})^2 + (\mu_1^{(1)} - \mu_1^{(2)})(\mu_2^{(1)} - \mu_2^{(2)}) \right\} - 1 \end{aligned}$$

$(X_1, X_2, Y_{11}, Y_{12}, Y_{22})$ を 2 点への Kullback-Leibler divergence が等しい点とすると, その点の満たす方程式は次のようになる.

$$\sum_{i=1}^{2} \left\{ a_i((X_i)^2 + (Y_{ii})^2) + b_i X_i \right\} + c_1(X_1 X_2 + (Y_{12})^2) + c_2 = 0,$$

ただし, $a_i, b_i, c_i \in \mathbb{R}$ である.

この場合も linearization の手法が適用できるので, 次のような変換を考える.

$$\mathcal{X}_i^1 := X_i, \mathcal{X}_i^2 := (X_i)^2 + (Y_{ii})^2, \mathcal{X}_{12} = X_1 \cdot X_2, \mathcal{Y}_{ij} := Y_{ij}.$$

この変換により, すべての構造が 6 次元に埋め込まれ, 先の "垂直二等分面" も次のように変換できる.

$$\sum_{i=1}^{2}\{a_i\mathcal{X}_i^2+b_i\mathcal{X}_i^1\}+c_1(\mathcal{X}_{12}+\mathcal{Y}_{12})+c_2=0 \quad (a_i,b_i,c_i\in\mathbb{R})$$

Theorem 12 一般の *2* 次元正規分布の統計パラメタ空間に n 点からなる点集合があるとする. この点集合に対する *Voronoi diagram* の 辺数は, $O(n^3)$ で押えられる.

6 まとめ

本稿では, 統計パラメタ空間上での Voronoi diagram について述べた. それらの Voronoi の辺数に関して次のことがわかった.

	正規分布	多次元正規分布		
距離		単位行列	対角行列	対称行列 (2 次元)
Fisher	$O(n)$[7]	$O(n^{(d+1)/2})$[8]	-	-
Kullback	$O(n)$	$O(n^{(d+1)/2})$	$O(n^d)$	$O(n^3)$
空間の次元	2	$d+1$	$2d$	5

また, ここで得られた上限は, すべて tight な上限である.

本稿では, Kullback-Leibler divergence ついて考察をおなったが, それ以外の divergence [10] にあるような divergence について考えることも大切である. また, 話を正規分布に制限しておこなったが, それ以外の確率分布に対してもこれらのことを考察することも重要である.

参考文献

[1] S. Amari *Differential Geometrical Methods in Statistics,* Lecture Notes in Statistics. 28, Springer-Verlag, New York, 1985.

[2] L. P. Chew and R. L. (Scote) Drysdale. Voronoi Diagrams Based on Convex Distance Function. *Proc. of ACM Computational geometry,* Baltimore, Maryland, pp. 235-244, 1985.

[3] T. M. Cover and J. A.Thomas. *Elements of Information Theory.* Wiley-Interscience Publication, New York, 1991.

[4] H. Edelsbrunner. *Algorithms in Combinatorial Geometry.* Springer-Verlag, Berlin, 1987.

[5] 韓 太瞬, 小林 欣吾. 情報と符号の数理 (岩波講座 応用数学 [対象 11]). 岩波出版, 1994.

[6] S.Kobayashi and K.Nomizu. *Foundations of differential geometry.* Interscience Publishers, 1969.

[7] K. Onishi and N. Takayama. Construction of Voronoi Diagram on the Upper Half-plane. *IEICE Trans. on Fundamentals,* Vol.E79-A, No.4, pp. 533-539, 1996.

[8] K. Onishi. Voronoi Diagram in the *d*-dimensional Hyperbolic Space. *Proc. of the International Symposium on Combinatorics and Applications*, Nankai University, Tianjin, pp. 314-324, 1996.

[9] F. P. Preparata and M. I. Shamos. *Computational Geometory.* Springer-Verlag, New York, 1985.

[10] 塩谷 浩之, 伊達 享, Lin 情報量の一般化および新しい情報量の導出. 電子情報通信学会論文誌, A Vol.J77-A No.12, pp. 1733-1737, 1994.