2. 正定値カーネルと再生核ヒルベルト空間

2.1 正定値カーネル

08T4083T 真下飛瑠

2.1.1 定義と基本的性質

- 実数値の正定値カーネルの定義

Xを集合とするとき、次の2条件を満たすカーネル
$k: X \times X \to \mathbf{R}$を
（X上の）正定値カーネルという

1.(対称性)任意の$x, y \in X$に対し$k(x, y) = k(y, x)$
2.(正値性)任意の$n \in \mathbf{N}, x_1, \ldots, x_n \in X, c_1, \ldots, c_n \in \mathbf{R}$に対し

$$\sum_{i,j=1}^{n} c_i c_j k(x_i, x_j) \geq 0$$

- つまり次の対称行列（グラム行列）が半正定値であること

$$(k(x_i, x_j))_{i,j=1}^{n} = \begin{pmatrix} k(x_1, x_1) & \cdots & k(x_1, x_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ k(x_n, x_1) & \cdots & k(x_n, x_n) \end{pmatrix}$$

- **複素数値の正定値カーネルの定義**

$k : X \times X \to \mathbf{C}$が

（複素数値）正定値カーネルであるとは

任意の$n \in \mathbf{N}, x_1, \ldots x, x_n \in X, c_1, \ldots, c_n \in \mathbf{C}$に対し

$$\sum_{i,j=1}^{n} c_i \overline{c_j} k(x_i, x_j) \geq 0$$

を満たすことをいう（正値性）

- 定義からわかる性質

命題2.1　集合X上の正定値カーネルkに対し以下が成り立つ

(1) $k(x,x) \geq 0 \quad (\forall x \in X)$

(2) $\left|k(x,y)\right|^2 \leq k(x,x)k(y,y) \quad (\forall x,y \in X)$

(3) Xの任意の部分集合 Yに対し、kの$Y \times Y$への制限はY上の正定値カーネル

命題2.2　$k_1, k_2 \ldots$を集合X上の(複素数値)正定値カーネルとする
このとき以下で定義されるカーネルは正定値

(1)(非負結合)　$ak_1 + bk_2 \qquad (a,b \geq 0)$

(2)(積)　$k_1 k_2$　(積は値による積$k_1(x,y)k_2(x,y)$)

(3)(極限)　$\lim_{i\to\infty} k_i(x,y)$　(極限の存在を仮定する)

定義2.3　2つの$l\times m$行列AとBに対し、$C_{ij} = A_{ij}B_{ij}$により定まる行列をAとBの$Hadamard$積という

補題2.4　AとBを半正定値な$p\times p$　$Hermite$行列とするとき、そのHadamard積もまた半正定値である

命題2.5

(1)非負の定数関数は正定値カーネルである

(2)$k : X\times X \to \mathbf{C}$を$X$上の正定値カーネルとし、$f : X \to \mathbf{C}$を任意の関数とするこのとき、

$$\tilde{k}(x,y) = f(x)k(x,y)\overline{f(y)}$$

で定まるカーネル$\tilde{k}$は正定値である

命題2.6　Vを内積$\langle\cdot,\cdot\rangle$を持つ内積空間とする

写像　$\Phi : X \to V, \quad x \mapsto \Phi(x)$

が与えられたとき、

$$k(x, y) = \left\langle \Phi(x), \Phi(y) \right\rangle$$

はX上の正定値カーネルである

2.1.2 正定値カーネルの例

以下にm次元ユークリッド空間$\mathbf{R}^m$上の正定値カーネルの例を示す

- 線形カーネル($\mathbf{R}^m$上の通常のユークリッド内積)

$$k_0(x, y) = x^T y$$

- 指数型

$$k_E(x, y) = \exp(\beta x^T y) \qquad (\beta > 0)$$

- ガウスRBF($radial\ basis\ function$)カーネル

$$k_G(x, y) = \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\|x - y\|^2\right) \qquad (\sigma > 0)$$

- ラプラスカーネル

$$k_L(x,y) = \exp(-\alpha \sum_{i=1}^{n} |x_i - y_i|) \qquad (\alpha > 0)$$

- 多項式カーネル

$$k_P(x,y) = (x^T y + c)^d \qquad (c \geq 0, d \in \mathbf{N})$$