カーネル法入門
―正定値カーネルによるデータ解析―

2.2.3 Sobolev空間
2.2.4 定理の証明

茨城大学工学部情報工学科
08T4038G　篠塚 晃一

2.2.3 Sobolev空間

- 閉区間[a,b]上のm次のSobolev空間H^m[a,b]の定義

$$H^m[a,b]=\{f\in L^2[a,b] \mid f,\ldots,f^{(m-1)}\text{は絶対連続で}f^{(m)}\in L^2[a,b]\}$$

- $f\in L^2[a,b]$ が絶対連続であるとは、ある可積分関数hがあって、次の式が表されることをいう。

$$f(x)-f(a)=\int_a^x h(t)dt$$

2.2.3 Sobolev空間

- $H^m[a,b]$に次の内積を導入すると、<f,g>は $H^m[a,b]$ の内積を定める。

$$\left\langle f,g \right\rangle = \sum_{l=0}^{m-1} f^{(l)}(a) g^{(l)}(a) + \int_a^b f^{(m)}(x) f^{(m)}(x) dx$$

- さらに、$H^m[a,b]$はヒルベルト空間となる。完備性は次のように証明される。

2.2.3 Sobolev空間

$\{f_n\}_{n=1}^{\infty}$を$H^m[a,b]$のCauchy列とするとき$\{f_n^{(m)}\}$は$L^2[a,b]$のCauchy列となるので、

ある$g_{(m)}\in L^2[a,b]$が存在して$\| f_n^{(m)}-g_{(m)}\|_{L^2[a,b]}\to 0(n\to\infty)$が成り立つ。

また各$l=0,1,\ldots,m-1$に対して実数列$\{f_n^{(l)}(a)\}_{n=1}^{\infty}$はCauchy列となるので、

ある$\alpha_l\in\Re$が存在して、$f_n^{(l)}(a)\to\alpha_l$となる。

ここで$l=m-1,m-2,\ldots,0$に対して帰納的に$g_{(l)}(x)=\alpha_l+\int_a^x g_{(l+1)}(t)dt$と定義し、

$f=g_{(0)}$とおくと$f\in H^m[a,b]$であり、$f^{(l)}=g_{(l)}(l=0,\ldots,m-1)$

かつ$\| f_n-f\|_{H^m[a,b]}\to 0$が容易に確認できる。

$[a,b]$上の正定値カーネル$k(x,y)$を

$$k(x,y)=\sum_{l=0}^{m-1}\frac{(x-a)^l}{l!}\frac{(y-a)^l}{l!}+\int_a^b\frac{(x-t)_+^{m-1}}{(m-1)!}\frac{(y-t)_+^{m-1}}{(m-1)!}dt(2.2)$$

により定義する。

ここで$(z)_+$は$z\geq 0$のとき$z,z<0$のとき0をとる関数である。

2.2.3 Sobolev空間

- このとき、以下の命題が成り立つ。

命題2.20

$H^m[a,b]$は式(2.2)のkを再生核に持つ
再生核ヒルベルト空間である。

2.2.3 Sobolev空間

- 実数直線上のSobolev空間について、1階のSobolev空間を論じる。
  - Sobolev空間 $H^1(R)$ を以下のように定義する。

    $$H^1(R) = \{ f \in L^2(R) \mid Df \in L^2(R) \}$$

  - αを正の定数とするとき、$H^1(R)$ 上に内積を以下のように定義すると、$H^1(R)$ はヒルベルト空間になる。

    $$\left\langle f, g \right\rangle_\alpha = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) g(x) dx + \frac{1}{\alpha^2} \int_{-\infty}^{\infty} Df(x) Dg(x) dx$$

2.2.3 Sobolev空間

- 次に $k_\alpha(x,y)=\frac{\alpha}{2}e^{-\alpha|x-y|}$ と定義すると k_α が内積$\langle \cdot,\cdot \rangle_\alpha$ のもと $H^1(R)$ の再生核となる。
- fが絶対連続な場合に限って再生性を示す。

$$\frac{\partial}{\partial t}k_\alpha(t,x)=\begin{cases} -\frac{\alpha^2}{2}e^{-\alpha|t-x|}, x<t \\ \frac{\alpha^2}{2}e^{-\alpha|t-x|}, x>t \end{cases}$$

  - 上記の式に注意して部分積分法を用いて、$\left\langle f, k(\cdot,x)\right\rangle_\alpha = f(x)$ となり、再生性が確認される。

2.2.4 定理の証明
a.定理2.11の証明

実数値の場合について証明する。$k \neq 0$と仮定する。

まずX上の関数からなるベクトル空間H_0を

$H_0 := Span\{k(\cdot, x) \mid x \in X\}$により定義する。

H_0の任意の2つの元$f = \sum_{i=1}^{n} a_i k(\cdot, x_i)$と$g = \sum_{j=1}^{m} b_j k(\cdot, y_j)$に対して内積$\langle \cdot, \cdot \rangle$を

$\langle f, g \rangle = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} a_i b_j k(x_i, y_j)$　によって定義する。

$\langle \cdot, \cdot \rangle$は任意の$f \in H_0, x \in X$に対し、$\langle f, k(\cdot, x) \rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i k(x_i, x) = f(x)$　(2.4)を満足する。

また、kの正定値により$\| f \|^2 = \sum_{i,j=1}^{n} a_i a_j k(x_i, x_j) \geq 0$が得られる。

$\| f \| = 0$とすると、式(2.4)と$Cauchy-Schwarz$の不等式より、

任意の$x \in X$に対し、$| f(x) | = | \langle f, k(\cdot, x) \rangle | \leq \| f \| \, \| k(\cdot, x) \| = 0$

が成り立ち、$f = 0$を得るので、$\langle \cdot, \cdot \rangle$は$H_0$上の内積を定める。

2.2.4 定理の証明

a.定理2.11の証明

H_0を完備化して得られるヒルベルト空間を$\tilde{H}$とおく。
完備化$\tilde{H}$の元はH_0の$Cauchy$列の同類値として定義されるので、
定理の再生核ヒルベルト空間を構成するには$\tilde{H}$をX上の関数からなる
空間と同一視する必要があるので、これを示す。
任意の$f = [\{f_n\}] \in \tilde{H}$に対し、$\{f_n\}$は$H_0$の$Cauchy$列であるので、式(2.4)を用いて
$| f_n(x) - f_m(x) | = | \langle f_n - f_m, k(\cdot, x) \rangle | \leq \| f_n - f_m \| \, \| k(\cdot, x) \|$
が成り立ち、任意の$x \in X$に対して$f_n(x)$はRの$Cauchy$列である。そこで、
$f(x) = \lim_{n \to \infty} f_n(x)$とおくと、極限値は同類値の代表元によらない。
実際$[\{f_n\}] = [\{g_n\}]$のとき、$| f_n(x) - g_n(x) | = | \langle f_n - g_n, k(\cdot, x) \rangle | \leq \| f_n - g_n \| \, \| k(\cdot, x) \| \to 0$
により、$\lim_{n \to \infty} f_n(x) = \lim_{n \to \infty} g_n(x)$である。以上により、
$\Psi : \tilde{H} \to R^X, [\{f_n\}] \mapsto f$
という写像が定義される。このとき、$f \in H_0$に対しては$\Psi(f) = f$となる。

2.2.4 定理の証明
a.定理2.11の証明

Ψは線形写像であり、単射である。これをみるには、

$h=[\{f_n\}]\in\tilde{H}$が$\lim_{n\to\infty} f_n(x)=0(\forall x\in X)$を満たすときに$h=0$をいえばよい。

$f_n\to h$であるので、式(2.4)と内積の連続性により

$\langle h,k(\cdot,x)\rangle=\lim_{n\to\infty}\langle f_n,k(\cdot,x)\rangle=\lim_{n\to\infty} f_n(x)=0$となるが、

H_0が$\tilde{H}$で稠密なので、$h=0$を得る。以上より

$H=\Psi(\tilde{H})\subset R^X$とおき、$\Psi$による同一視によって$H$をヒルベルト空間とすると、

HはX上の関数からなるヒルベルト空間でH_0を稠密に含む。

最後に$k(\cdot,x)$がHの再生核となることを示す。

任意の$[\{f_n\}]\in\tilde{H}$に対し、$\Psi([\{f_n\}])=f$とすると、

$\tilde{H}$において$f_n\to[\{f_n\}]$であるので、式(2.4)により

$f(x)=\lim_{n\to\infty} f_n(x)=\lim_{n\to\infty}\langle f_n,k(\cdot,x)\rangle_{\tilde{H}}=\langle[\{f_n\}],k(\cdot,x)\rangle_{\tilde{H}}=\langle f,k(\cdot,x)\rangle_H$を得る。

以上により、定理が証明された。

2.2.4 定理の証明
b.定理2.13の証明

H_kの部分空間H_0を

$H_0=\{f\in H_k \mid$任意の$y\in Y$に対し$f(y)=0\}$により定義すると、

命題2.9($p.17$)によりH_0はH_kの閉部分空間である。

そこでその直交補空間をH'とし、PをH'への正射影とする。

$\tilde{H}=\{f|_Y : Y\to K \mid f\in H_k\}$とおき、

線形写像$\Psi : H'\to\tilde{H}, f\mapsto f_{|Y}$　を定義する。

$f,g\in H'$がY上で同値ととるとき$f-g\in H_0$なので、Ψは単射である。

また、$f\in H_k$に対して$f-Pf\in H_0$なので、fとPfはY上で同値をとり、

$\Psi(Pf)=f_{|Y}$によりΨは全射である。

よってΨによる同一視により、$\tilde{H}$はヒルベルト空間となる。

2.2.4 定理の証明

b.定理2.13の証明

$y \in Y$に対して$\tilde{k}(\cdot, y) = \Psi(Pk(\cdot, y))$とおくと、

$\tilde{k}(\cdot, y)$と$k(\cdot, y)$はY上で同値をとり、$\tilde{k}$はkの$Y \times Y$への制限である。

一方、任意の$g \in \tilde{H}$に対し、$\Psi(f) = g$となる$f \in H'$をとると、

$g(y) = f(y) = \left\langle f, Pk(\cdot, y) \right\rangle_{H_k} = \left\langle \Psi(f), \Psi(Pk(\cdot, y)) \right\rangle_{\tilde{H}} = \left\langle g, \tilde{k}(\cdot, y) \right\rangle_{\tilde{H}}$が

任意の$y \in Y$に対して成り立つので、$\tilde{k}(\cdot, y)$は$\tilde{H}$の再生核である。

よってkのYへの制限に対応する再生核ヒルベルト空間は$\tilde{H}$である。

2.2.4 定理の証明
c.定理2.14の証明

H_1とH_2のヒルベルト空間としての直和$\mathrm{H}_1 \oplus \mathrm{H}_2$を$H$で表す。

このとき$(f_1, f_2) \in H$に対して$\| f \|_H^2 = \| f_1 \|_{\mathrm{H}_1}^2 + \| f_2 \|_{\mathrm{H}_2}^2$である。

Hの部分空間H_0を$H_0 = \{(f, -f) \in H \mid f \in \mathrm{H}_1 \cap \mathrm{H}_2\}$により

定義すると、H_0はHの閉部分空間である。

H_0のHにおける直交補空間を$H_0^{\perp}$とする。すなわち、$H = H_0 \oplus H_0^{\perp}$

また、X上の関数からなるベクトル空間$\tilde{\mathrm{H}}$を

$\tilde{\mathrm{H}} = \{f_1 + f_2 \mid f_1 \in \mathrm{H}_1, f_2 \in \mathrm{H}_2\}$と定める。

このとき、線形写像$H \to \tilde{\mathrm{H}}$が$(f_1, f_2) \mapsto f_1 + f_2$により定まるが、

零核はH_0なので、$\Psi : H_0^{\perp} \to \tilde{\mathrm{H}}, (f_1, f_2) \mapsto f_1 + f_2 \quad (2.5)$

はベクトル空間としての同型であり、

これにより$\tilde{\mathrm{H}}$にヒルベルト空間の構造を与える。

2.2.4 定理の証明
c.定理2.14の証明

$k = k_1 + k_2$に対応する再生核ヒルベルト空間Hが$\tilde{\mathrm{H}}$に一致することを示す。

kが$\tilde{\mathrm{H}}$の再生核であることをいえばよい。

まず任意の$x \in X$に対し、

$k(\cdot, x) = k_1(\cdot, x) + k_2(\cdot, x) \in \tilde{\mathrm{H}}$に対応する$(k'_x, k''_x) = \Psi^{-1}(k(\cdot, x)) \in H_0^{\perp}$をとる。

(k'_x, k''_x)は$(k_1(\cdot, x), k_2(\cdot, x)) \in H$の$H_0^{\perp}$への正射影であることに注意すると、

任意の$f \in \tilde{\mathrm{H}}$に対し、$(f_1, f_2) = \Psi^{-1}(f)$とすると、

$$f(x) = f_1(x) + f_2(x) = \left\langle f_1, k_1(\cdot, x) \right\rangle_{\mathrm{H}_1} + \left\langle f_2, k_2(\cdot, x) \right\rangle_{\mathrm{H}_2}$$

$$= \left\langle (f_1, f_2), (k_1(\cdot, x), k_2(\cdot, x)) \right\rangle_H = \left\langle (f_1, f_2), (k'_x, k''_x) \right\rangle_{H_0^{\perp}} \quad \text{である。}$$

$\tilde{\mathrm{H}}$の内積の定義により末行は$\left\langle f, k(\cdot, x) \right\rangle_{\tilde{\mathrm{H}}}$に他ならない。

2.2.4 定理の証明
c.定理2.14の証明

最後にノルムに関する関係式を示す。

任意の$f \in \tilde{\mathrm{H}}$に対応する$H_0^{\perp}$の元を(g_1, g_2)とする。

$f = f_1 + f_2 \in \tilde{\mathrm{H}} (f_1 \in \mathrm{H}_1, f_2 \in \mathrm{H}_2)$と表されるとき、

$f = f_1 + f_2 = g_1 + g_2$により$f_1 - g_1 = -f_2 + g_2$,

すなわち$(f_1 - g_1, f_2 - g_2) \in H_0$である。すると、

$$\| f_1 \|_{\mathrm{H}_1}^2 + \| f_2 \|_{\mathrm{H}_2}^2 = \| (f_1, f_2) \|_H^2 = \| (g_1, g_2) \|_{H_0^{\perp}}^2 + \| (f_1 - g_1, f_2 - g_2) \|_{H_0}^2$$

において、最終項が0の場合に右辺のノルムが最小になる。

すなわち、以下を得る。

$$\min\{ \| f_1 \|_{\mathrm{H}_1}^2 + \| f_2 \|_{\mathrm{H}_2}^2 \mid f = f_1 + f_2, f_1 \in \mathrm{H}_1, f_2 \in \mathrm{H}_2 \} = \| (g_1, g_2) \|_{H_0^{\perp}}^2 = \| f \|_{\tilde{\mathrm{H}}}^2$$

2.2.4 定理の証明

d.定理2.15の証明

まず$H_1 \tilde{\otimes} H_2$の完備化が次のような具体的表示を持つことを示す。

H_1とH_2の完全正規直交系を$\{\varphi_i\},\{\psi_j\}$とするとき、

$\sum_{i,j} |\alpha_{ij}|^2 < \infty$　を満たす$\alpha_{ij} \in C$によって

$$h(x,y) = \sum_i \sum_j \alpha_{ij} \varphi_i(x) \psi_j(y) \qquad (2.6)$$

と表される関数全体をHとおく。

無限和の場合も

$$\sum_i \sum_j |\alpha_{ij} \varphi_i(x) \psi_j(y)| = \sum_i \sum_j |\alpha_{ij} \langle \varphi_i, k_1(\cdot, x) \rangle \langle \psi_j, k_2(\cdot, y) \rangle|$$

$$\leq \left(\sum_{ij} |\alpha_{ij}|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_i |\langle \varphi_i, k_1(\cdot, x) \rangle|^2 \sum_j |\langle \psi_j, k_2(\cdot, y) \rangle|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= \left(\sum_{ij} |\alpha_{ij}|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \| k_1(\cdot, x) \| \, \| k_2(\cdot, y) \| < \infty$$

により式(2.6)の右辺は絶対収束し、$h(x,y)$の値が定まる。

2.2.4 定理の証明
d.定理2.15の証明

関数空間Hに

$$\left\langle \sum_i \sum_j \alpha_{ij}\varphi_i\psi_j, \sum_i \sum_j \beta_{ij}\varphi_i\psi_j \right\rangle = \sum_i \sum_j \alpha_{ij}\overline{\beta}_{ij}$$により内積を導入すると

Hは$\varphi_i\psi_j$を完全正規直交系とするヒルベルト空間となる。

$f_l^{(1)} \in \mathrm{H}_1, f_l^{(2)} \in \mathrm{H}_2$を

$f_l^{(1)} = \sum_i \beta_{l,i}\varphi_i, f_l^{(2)} = \sum_j \gamma_{l,j}\psi_j \left(\sum_i |\beta_{l,i}|^2 < \infty, \sum_j |\gamma_{l,j}|^2 < \infty\right)$

と展開するとわかるように、任意の$h \in \mathrm{H}_1 \tilde{\otimes} \mathrm{H}_2$は$H$に含まれ、

かつ$\mathrm{H}_1 \tilde{\otimes} \mathrm{H}_2$は$H$の稠密な部分空間である。

よって、完備化$\mathrm{H}_1 \otimes \mathrm{H}_2$は$H$と同型である。

2.2.4 定理の証明
d.定理2.15の証明

次に$k=k_1k_2$がHの再生核であることを示す。$x'\in X, y'\in Y$を固定する。

$k_1(\cdot,x'), k_2(\cdot,y')$の$\{\varphi_i\},\{\psi_j\}$に関する*Fourier*展開を

$k_1(\cdot,x')=\sum_i \beta_i\varphi_i,\qquad k_2(\cdot,y')=\sum_j \gamma_j\psi_j$　　とする。

ここで$\beta_i=\langle k_1(\cdot,x'),\varphi_i\rangle, \gamma_j=\langle k_2(\cdot,y'),\psi_j\rangle$である。このとき

$\sum_{ij}|\beta_i\gamma_j|^2=\sum_i|\beta_i|^2\sum_j|\gamma_j|^2=\|k_1(\cdot,x')\|_{\mathrm{H}_1}^2\|k_2(\cdot,y')\|_{\mathrm{H}_2}^2<\infty$(第2の等号は*Parseval*の等式)

によって$k_1(x,x')k_2(y,y')=\sum_i\sum_j\beta_i\gamma_j\varphi_i(x)\psi_j(y)$が成り立ち、

かつ$k_1(\cdot,x')k_2(\cdot,y')$は$H$の元である。式(2.6)の$h\in H$との内積を考えると、

$$\langle h,k_1(\cdot,x')k_2(\cdot,y')\rangle=\sum_{i,j}\alpha_{ij}\overline{\beta_i\gamma_j}=\sum_{ij}\alpha_{ij}\langle\varphi_i,k_1(\cdot,x')\rangle\langle\psi_j,k_2(\cdot,y')\rangle$$

$$=\sum_{ij}\alpha_{ij}\varphi_i(x')\psi_j(y')=h(x',y')$$

となり、再生性を得る。