2.2　再生核ヒルベルト空間
2.2.1 再生核ヒルベルト空間と正定値カーネル
2.2.2 再生核ヒルベルト空間の具体的構成

08T4067L　横田 翔

再生核ヒルベルト空間

- カーネル法における特徴空間を与える重要な概念。
- 関数空間の一種で、一般的に無限次元ベクトル空間となる。

- 内積空間$(H, (\cdot, \cdot))$がヒルベルト空間であるとは、$\|x - y\|$により誘導されるHの距離が完備であることをいう。

2.2.1　再生核ヒルベルト空間と正定値カーネル

【定義】

- ヒルベルト空間は、実数対Rまたは複素数体C上で定義されているとし、これをまとめてKで表す。
- ヒルベルト空間内の内積は$\langle \cdot, \cdot \rangle_H$で表す。
- 体K上のベクトル空間Vに対し、部分集合$A \subset V$の張る線形部分空間$\{\sum_{i=1}^{n} c_i v_i \in V \mid n \in N, c_i \in K, v_i \in A\}$をSpanAで表す。

集合X上の再生核ヒルベルト空間とは
X上の関数からなるヒルベルト空間Hで、任意の
$x \in X$ に対して$k_x \in H$ があって
（再生性） $\langle f, k_x \rangle_H = f(x) \qquad (\forall f \in H)$
を満たすものを言う。

上の定義のk_xに対して、$k(y, x) = k_x(y)$により定まるkをHの再生核と呼ぶ。

【定理2.11】

集合X上の正定値カーネルkに対し、X上の再生核ヒルベルト空間Hで以下の3条件を満たすものが一意的に存在する。

（1）任意の$x \in X$ に対して$k(\cdot, x) \in H$

（2）$Span\{k(\cdot, x) \mid x \in X\}$ はH内で稠密。

（3）kはHの再生核、すなわち

$$\langle f, k(\cdot, x) \rangle_H = f(x) \qquad (\forall x \in X, \forall f \in H)$$

【定理2.13】

　kを集合X上の正定値カーネルとし、kの定める再生核ヒルベルト空間をHとする。$Y \subset X$ に対しkの$Y \times Y$への制約をk´とするとき、k´の定める再生核ヒルベルト空間 $H_{k'}$は $\{ f \mid y : Y \to K \mid f \in H_k \}$である。

【定理2.14】

　k1、k2を集合X上の正定値カーネルとし、対応する再生核ヒルベルト空間をそれぞれH_1, H_2とする。正定値カーネルの和の定める再生核ヒルベルト空間をHとすると、H はベクトル空間として $\{ f_1 + f_2 \mid f_1 \in H_1, f_2 \in H_2 \}$　で与えられ、そのノルムは

$$\| f \|_H^2 = \min\{ \| f_1 \|_{H_1}^2 + \| f_2 \|_{H_2}^2 \mid f = f_1 + f_2, f_1 \in H_1, f_2 \in H_2 \}$$

を満たす。

【定理2.15】

k_1, k_2 をそれぞれ集合X_1, X_2上の正定値カーネルとし、対応する再生核ヒルベルト空間をそれぞれをH_1, H_2とする。

正定値カーネルの積$k = k_1 k_2$の定める再生核ヒルベルト空間は、テンソル積 $H_1 \otimes H_2$に一致する。

2.2.2 再生核ヒルベルト空間の具体的構成

【a. 線形カーネルの再生核ヒルベルト空間】

R^n 上定義される線形カーネル$k(x, y) = x^T y$ が定める再生核ヒルベルト空間Hがユークリッド空間 R^nと同型となることをみる。

まず、定理2.11から、Hは $\{x \mapsto k(x,a) = a^T x \mid a \in R^n\}$ の形の線形写像全体に一致する。その内積は、

$$\langle k(\cdot,a), k(\cdot,b) \rangle_H = k(a,b) = a^T b$$

により与えられる。したがって

$$R^n \mapsto H, \qquad a \mapsto k(x,a) = a^T x$$

により定義すると内積を保ち、ヒルベルト空間として同型を与える。

この正定値カーネルを用いると、1章のカーネルPCAは、$(X - \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} X_i)(X - \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} X_i)^T$ の固有値分解を行うこととなり、データ X_i の主成分は通常の（線形）主成分分析の与えるものと一致する。

【b. 有限集合上の再生核ヒルベルト空間】

有限集合上の正定値カーネルは $K(i, j)$ はn行n列の半定値Hermite行列 $(K(i, j))_{i, j=1}^{n}$ である。

Kが狭義の正定値行列（0固有値を持たない）と仮定しその再生核ヒルベルト空間の陽な表示を求める。

行列Kの固有値展開を

$$K = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i u_i \overline{u}_i^T$$

とする。ここで $\lambda_i > 0$ は固有値、u_i は対応する単位固有ベクトルである。

$u_1,\dots,u_n$はK^nの正規直交基底をなすので、
任意の $f=(f_1,\dots,f_n)\in K^n$は$f=\sum_{i=1}^n a_i u_i (a_i\in K)$ と表される。
K^nの2つの元 $f=\sum_{i=1}^n a_i u_i, g=\sum_{i=1}^n b_i u_i$ に対しての
その内積を

$$\langle f,g\rangle = f^T K^{-1}\overline{g} = \sum_{i=1}^n \frac{a_i \overline{b_i}}{\lambda_i}$$

によって定義。このときK^nに内積$\langle\cdot,\cdot\rangle$を与えた空間$K$
に対する再生核ヒルベルト空間となる。
実際に、$k_i=(\overline{K_{i1}},\dots,\overline{K_{in}})^T\in K^n$に対して

$$\langle f,k_i\rangle = f^T K^{-1}\overline{k_i} = f_i$$

となり再生性を満たす。

【c．多項式カーネルの再生核ヒルベルト空間】

[命題2.17]

R上のd次多項式カーネル

$$k(x,y)=(xy+c)^d \qquad (c>0, d\in N)$$

の定める再生核ヒルベルト空間 H_k は、ベクトル空間として、d次以下の多項式からなるd+1次元ベクトル空間に一致する。

[証明]　d次以下の多項式からなるベクトル空間をGとおく。

$$k(x,z) = z^d x^d + \binom{d}{1} c z^{d-1} x^{d-1} + \binom{d}{2} c^2 z^{d-2} x^{d-2} + \cdots + \binom{d}{d-1} c^{d-1} z x + c^d$$

により、$k(x,z)$ はxの関数としてd次の多項式であるので

$$Span\{k(\cdot, z) \mid z \in R^m\} \subset G$$

したがって

$$H_k \subset G$$

である。

$f=\sum_{i=0}^{d} a_i x^i$をGの任意の元とするとき

$$\sum_{i=0}^{d} b_i k(x, z_i) = \sum_{i=0}^{d} a_i x^i$$

を満たす $b_i \in R, z_i \in R$ が存在する。

実際、$z_o, z_1, \cdots, z_d$を異なる実数にとると、Vandermonde

の行列式が非零になることから

$$\begin{pmatrix} z_0^d & \cdots & z_0 & 1 \\ z_1^d & \cdots & z_1 & 1 \\ \vdots & \ddots & & \vdots \\ z_d^d & \cdots & z_d & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_0 / c^d \\ a_0 / c^{d-1} \ {}_dC_{d-1} \\ \vdots \\ a_d \end{pmatrix}$$

を満たす $b_0, \cdots, b_d$が存在する。このb_iとz_iを用いればよい

【d. ヒルベルト埋め込み写像による構成】

関数空間C^xにおいて、集合X上の関数列f_nがfに収束するとは、任意の$x \in X$に対して$f_n(x)$が$f(x)$に収束することと定義する。

(T, μ)を測度空間とし、$T \times X$上の可測関数Hが、任意の$x \in X$に対して$H(\cdot, x) \in L^2(T, \mu)$であり、かつ$Span\{H(\cdot, x) \mid x \in X\}$が$L^2(T, \mu)$で稠密であると仮定する。

このとき、$L^2(T,\mu)$ から C^{x} への写像Jを

$$J : L^2(T,\mu) \to C^x, F \mapsto \int F(t)\overline{H(t;x)}du(t) = (F, H(\cdot;x))_{L^2(T,\mu)}$$

により定義すると、Jは連続写像であり、また稠密性の仮定より、単射である。

したがって、Jは $L^2(T,\mu)$ の C^x への連続な埋め込みを定義する。

ここでJの像で与えられる C^x の部分空間をHとし、Hの内積を

$\langle f, g\rangle_H := (F,G)_{L^2(T,\mu)}$ ただし $f = J(F), g = J(G)$

によって定義する。

この内積によって $L^2(T,\mu)$ とHは内積空間として同一視できるので、Hはヒルベルト空間であり、Jは $L^2(T,\mu)$ とHの間のヒルベルト空間として同形を与える。

ヒルベルト空間Hは

$$H = \{ f \in C^x \mid \exists F \in L^2(T,\mu), f(x) = \int F(t)\overline{H(t;x)}du(t) \}$$

という具体的表示を持つ。