再生核ヒルベルト空間への準備

吉田 英樹

2024年1月18日

概要

本稿は,再生核ヒルベルト空間に入門するための関数解析について解説する.

1 はじめに

図1のように,カーネル回帰[1][2]とガウス過程回帰[3]は非線形なデータでも最小二乗法で回帰することができ,データサイセンスの分野で強力なツールとして注目されている。カーネル回帰とガウス過程回帰を理解するには、再生核ヒルベルト空間について知る必要がある。

本稿では、再生核ヒルベルト空間の入門書 [1][2] を読めるように、関数解析におけるヒルベルト空間 [4][5][6][7] を簡単に紹介する.

Comparison between kernel ridge and gaussian process regressor

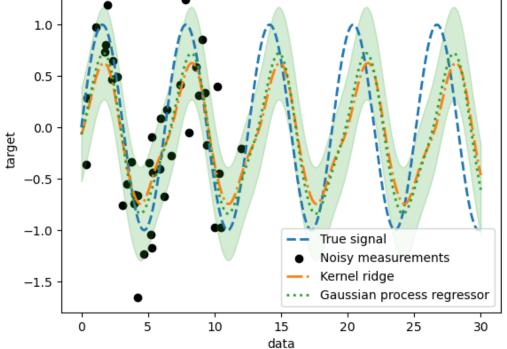


図 1: sklearn によるガウス過程回帰とカーネルリッジ回帰の比較

2 有限次元ベクトル空間

2.1 エルミート行列

固有値問題を考えるうえで、エルミート行列には重要な性質がある.

- 1. エルミート行列 A の随伴行列 A^* は A そのものである.
- 2. エルミート行列の固有値は実数である.
- 3. エルミート行列の相違なる固有値に対応する固有ベクトルは直交する.
- 4. エルミート行列は固有値展開ができる.

エルミート行列の重要な性質を、例題を通して確認してみる. 理論の詳細は線形代数の専門書に譲る.

例 1. エルミート行列

エルミート行列 A が与えられているとする. このとき, エルミート行列 A の随伴行列 A^* は A そのものであることを示せ. エルミート行列 A の固有値は実数であり, 相違なる固有値に対する固有ベクトルは直交することを示せ. また, エルミート行列は直交分解できることを示せ.

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1+i \\ 1-i & 3 \end{pmatrix} \tag{1}$$

証明. エルミート行列 A の随伴行列 A^* は A そのものであることを示す.

エルミート行列の定義より $A = A^*$ であるので、

$$\langle Ax, x \rangle = \langle x, A^*x \rangle = \langle x, Ax \rangle$$
 (2)

エルミート行列 Aの固有値は実数であることを示す.

固有方程式を解くと固有値が求まる.

$$|A - \lambda I| = (2 - \lambda)(3 - \lambda) - (1 + i)(1 - i) = 0 \tag{3}$$

$$\lambda = 1, 4 \tag{4}$$

相違なる固有値に対する固有ベクトルは直交することを示す.

 $\lambda = 1$ に対する固有ベクトルは.

$$(A - \lambda I)x = \begin{pmatrix} 1 & 1+i \\ 1-i & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = 0$$
 (5)

これを解くと,

$$x = k \begin{pmatrix} -1 - i \\ 1 \end{pmatrix} \tag{6}$$

正規化すると,

$$u_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -1 - i \\ 1 \end{pmatrix} \tag{7}$$

 $\lambda = 4$ に対する固有ベクトルは、同様にして、

$$u_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1\\ 1-i \end{pmatrix} \tag{8}$$

よって,

$$\langle u_1, u_2 \rangle = u_1^T \bar{u}_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(-1 - i, 1 \right) \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1\\ 1+i \end{pmatrix} = 0$$
 (9)

エルミート行列 A は固有値展開ができることを示す.

ユニタリ行列 $U = (u_1, u_2)$ により、エルミート行列は対角化できる.

$$U^{-1}AU = \bar{U}^T AU = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix} \tag{10}$$

よって,

$$A = U \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix} U^{-1} = (u_1, u_2) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{u}_1^T \\ \bar{u}_2^T \end{pmatrix} = 1u_1 \bar{u}_1^T + 4u_2 \bar{u}_2^T$$
 (11)

よって,

$$Ax = 1u_1 \bar{u}_1^T x + 4u_2 \bar{u}_2^T x = 1 \langle x, u_1 \rangle u_1 + 4 \langle x, u_2 \rangle u_2$$
(12)

3 ヒルベルト空間

線形代数における固有値問題では、行列式を中心に理論を展開するが、関数解析における固有値問題では内積を中心に理論を展開する.線形代数におけるエルミート行列の性質は、関数解析における固有値問題を考察するうえで、ヒントを与えてくれる.

表 1: エルミート行列と線形作用の性質の比較

項目	エルミート行列	自己共役作用素	コンパクト自己共役作用素
作用素 A の随伴作用素 A^* は A である.	0	0	0
作用素に固有値があれば, 実数である.	0	0	0
相違なる固有値の固有ベクトルは直交する.	0	-	0
作用素は固有値展開ができる.	0	-	0

エルミート行列に対応する線形作用素は、自己共役作用素であり、性質 $1 \ge 2$ に相当する性質を有する. しかし、これだけでは、線形作用素が離散的な加算個の固有値からなることは保証できない。自己共役作用素にコンパクト性を要請することで、はじめて性質 1,2,3,4 に相当する性質をもつ.

コンパクト作用素の重要な例として、Hilbert-Schmidt 積分作用素がある。Hilbert-Schmidt 積分作用素の積分核が正定値核のとき、コンパクト自己共役作用素となるので、性質 1,2,3,4 に相当する性質をもつ。Hilbert-Schmidt 積分作用素は Mercer の定理の証明に用いる。

3.1 ヒルベルト空間

代数的構造である線形空間から紹介する.

定義 1. 線形空間

集合 X の任意の 2元 f,g と、任意の複素数または実数 a に対し、和 $f+g \in X$ および積 $af \in X$ と呼ばれる演算が定義されている。以下の条件を満たすとき、X は線形空間という。ただし、f,g,h は X の任意の元であり、a. b は任意の複素数または実数である。

- 1. (f+g) + h = f + (g+h)
- 2. 任意の $f \in X$ に対して, $f + \theta = f$ となる元 $\theta \in X$ が存在する
- 3. 各元 $f \in X$ に対して, $f + f' = \theta$ となる元 $f' \in X$ が存在する.
- 4. (ab)f = a(bf)
- 5. 1f = f
- $6. \ a(f+g) = af + ag$
- 7. (a+b)f = af + bf

線形空間に近さの概念を導入する.

定義 2. ノルム

線形空間 X の任意の元 f に対して、ひとつの実数を対応させる関数 $\|f\|$ が次の条件を満たすとき、関数 $\|\cdot\|$ をノルムという.

1. $||f|| \ge 0$, かつ, 等号成立するのは f = 0 の場合に限る.

2. 任意の複素数 a に対して, 次の関係が成立する.

$$||af|| = |a|||f|| \tag{13}$$

3. X の任意の元 f,g に対して、次の三角不等式が成立する.

$$||f + g|| \le ||f|| + ||g|| \tag{14}$$

ノルムの定義された線形空間をノルム空間という.

定義 3. 内積

複素線形空間 \mathcal{H} の任意の $2 \pi f, g \in \mathcal{H}$ に対して,1 つの複素数を対応させる関数 $\langle f, g \rangle$ が次の条件を満たすとき,関数 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ を内積という.ただし,f, g, h は \mathcal{H} の任意の元であり,a, b は任意の複素数である.

- 1. $\langle g, f \rangle = \overline{\langle f, g \rangle}$
- 2. $\langle af + bg, h \rangle = a \langle f, h \rangle + b \langle g, h \rangle$
- $3. \langle f, f \rangle \ge 0$ かつ等号が成立するのは, f = 0 の場合に限る.

内積の定義される線形空間を内積空間という. 内積 $\langle f,f\rangle\geq 0$ であるので, $\langle f,f\rangle\geq 0$ の平方根を考えることができる.

定理 3.1. Cauchy-Schwartz の不等式

内積空間 \mathcal{H} の任意の元 f に対して,

$$||f|| = \sqrt{\langle f, f \rangle} \tag{15}$$

とおけば.

$$|\langle f, g \rangle| \le ||f|| ||g|| \tag{16}$$

となる. 等号は g = 0 か, f と g が一次従属のときに限る.

証明. g = 0 の場合は明らかである.

 $q \neq 0$ の場合を証明する. 任意の複素数 λ に対して,

$$0 \le \|f - \lambda g\|^2 = \langle f - \lambda g, f - \lambda g \rangle = \|f\|^2 - \overline{\lambda} \langle f, g \rangle - \lambda \langle g, f \rangle + |\lambda|^2 \|g\|^2 \tag{17}$$

となる. この式で、 $\lambda = \langle f, g \rangle / \|g\|^2$ とおけば、

$$0 \le ||f||^2 - \frac{|\langle f, g \rangle|^2}{||g||^2} \tag{18}$$

不等式が成立する. 等号成立は明らかである.

定理 3.2. 内積空間は、式 (15) の ||f|| に関してノルム空間になる.

証明. ノルムの公理1と2が成立することは明らかである.

$$||f+g||^2 = \langle f+g, f+g \rangle \tag{19}$$

$$= \langle f, f \rangle + \langle f, g \rangle + \langle g, f \rangle + \langle g, g \rangle \tag{20}$$

$$\leq ||f||^2 + 2|\langle f, g \rangle| + \leq ||g||^2$$
 (21)

$$\leq \|f\|^2 + 2\|f\|\|g\| + \leq \|g\|^2$$
 (22)

$$= (\|f\| + \|g\|)^2 \tag{23}$$

ノルムの公理3である三角不等式が成立する.

内積空間はノルム空間になる. 完備な内積空間をヒルベルト空間といい、升で表す.

3.2 線形作用素

ノルム空間 X の部分集合 D の各元をノルム空間 Y の元に対応させる変換 A を、

$$g = Af: f \in \mathcal{D} \subset X, g \in Y$$
 (24)

と表し、X から Y への作用素という。D を A の定義域といい, $\mathcal{D}(A)$ で表す。特に断らない限り, $\mathcal{D}=X$ の場合を扱う。したがって, \mathcal{D} は線形空間になっている。Y がスカラー空間のとき,A を汎関数という。 X から Y への作用素 A が,任意の $f_1, f_2 \in X$ と任意の a, b に対して,

$$A(af_1 + bf_2) = aAf_1 + bAf_2 (25)$$

を満たすとき、A は線形であるという.

線形作用素は、同次性と加法性の性質をもつ.

$$\begin{cases}
A(af) = a(Af) \\
A(f_1 + f_2) = Af_1 + Af_2
\end{cases}$$
(26)

X の部分集合 S のさまざまな元を A で変換していくと、対応する Y の元が次々と得られる.そのような Y の元の全体,すなわち $Af(f \in S)$ の全体を,A による S の像といい,AS で表す.特に S = X のとき,AX を A の値域といい, $\mathcal{R}(A)$ で表す.

A で変換すると Y の零元になるような X の元の全体, すなわち, Af=0 となる $f\in X$ の全体を A の零空間といい, $\mathcal{N}(A)$ で表す.

3.3 有界線形作用素

ノルム空間 X からノルム空間 Y への作用素 A は, $f_n \to f_0$ のとき, $Af_n \to Af_0$ ならば, 点 $f \in X$ で連続であるという. より厳密には次のように定義される. 任意の $\varepsilon > 0$ に対して, 実数 $\delta = \delta(\varepsilon) > 0$ が存在し,

$$||f - f_0|| < \delta \tag{27}$$

となる任意の f に対して、

$$||Af - Af_0|| < \varepsilon \tag{28}$$

が成立するとき, A は点 f_0 で連続であるという. すべての $f \in X$ で連続な A を連続作用素という. 作用素 A に対して, ある定数 M が存在し, 任意の $f \in X$ に対して

$$||Af|| \le M||f|| \tag{29}$$

が成立するとき, A は有界であるという. 有界作用素は, X の有界集合を Y の有界集合に変換するものとして特徴づけることができる. X から Y への有界線形作用素の全体を $\mathcal{B}(X,Y)$ で表す. Y=X の場合を $\mathcal{B}(X)$ で表す.

有界性と連続性は本来別の概念である.しかし,線形作用素に対しては,次に示すように密接な関係で結ばれている.

定理 3.3. ノルム空間 X からノルム空間 Y への線形作用素 A が有界になるための必要十分条件は, A が連続になることである.

証明. A を有界線形作用素とする. X で $f_n \to f(n \to \infty)$ であるとすれば, $||f_n - f|| \to 0$ である. A の線形性より、

$$||Af_n - Af|| = ||A(f_n - f)|| \le M||f_n - f|| \to 0 \quad (n \to \infty)$$
(30)

ゆえに, $Af_n \rightarrow Af$. すなわち, A は連続である.

逆を示す. Aを連続とする.

任意の $\varepsilon > 0$ に対して, 実数 $\delta = \delta(\varepsilon) > 0$ が存在し,

$$||f - f_0|| < \delta \tag{31}$$

となる任意の f に対して、

$$||Af - Af_0|| < \varepsilon \tag{32}$$

が成立する.

 $f_0=0$ でも連続である. そこで, $f_0=0$ とおけば, 任意の $\varepsilon>0$ に対して, 実数 $\delta=\delta(\varepsilon)>0$ が存在し,

$$||g|| < \delta \tag{33}$$

となる任意の f に対して,

$$||Ag|| < \varepsilon \tag{34}$$

が成立する. そこで, 任意の $f \neq 0$ に対して,

$$g = \frac{\delta}{2\|f\|} f \tag{35}$$

とおけば, $\|g\| = \frac{\delta}{2} < \delta$ となるから,

$$\frac{\delta}{2\|f\|}\|Af\| = \|Ag\| < \varepsilon \tag{36}$$

となる. よって,

$$||Af|| \le \frac{2\varepsilon}{\delta} ||f|| \tag{37}$$

となり、Aは有界になる.

定理 3.4. 有界線形作用素の零空間は閉集合である.

証明. $f_n \in \mathcal{N}(A)$ が $f \in X$ に収束したとする. $f \in \mathcal{N}(A)$ となることを示せばよい.

$$||Af|| = ||Af - Af_0|| = ||A(f - f_0)|| \le M||f - f_0||$$
(38)

よって, $n \to \infty$ とすれば, Af = 0 となり, $f \in \mathcal{N}(A)$ となる.

3.4 作用素のノルム

式 (29) の M の下限を作用素の A ノルムといい, ||A|| で表す. ノルムの定義より,

$$||Af|| \le ||A|| ||f|| \tag{39}$$

は不等式が成立する. ||A|| はまた, 次のように表すこともできる.

$$||A|| = \sup_{\|f\|=1} ||Af|| \tag{40}$$

式 (40) は, X のノルム 1 の元を A で変換して得られる元の大きさの上限が $\|A\|$ であることを表している. すなわち, A のノルムは A のある意味での増幅率とみなすことができる.

3.5 有界線形汎関数

有界線形汎関数は有界線形作用素の特別の場合であるから、いままでに得られた有界線形作用素の結果はすべて、有界線形汎関数に対してもそのまま成立する。有界線形汎関数のノルムは、

$$||J|| = \sup_{\|f\|=1} |J[f]| \tag{41}$$

で与えられる.

定理 3.5. Riesz の定理

ヒルベルト空間 \mathcal{H} 上の有界線形汎関数 J はすべて,

$$J[f] = \langle f, u \rangle \tag{42}$$

の形に表される. ここで, u は J によって一意に定まる H の元であり, 次式が成立する.

$$||J|| = ||u|| \tag{43}$$

証明. J を \mathcal{H} 上の任意の有界線形汎関数とする. J の零空間, すなわち, J[f]=0 となる $f\in\mathcal{H}$ の全体を S で表す. 有界線形作用素の零空間は閉集合であるので, S は \mathcal{H} の閉じた部分空間になる.

J=0 のときは, u=0 に対して成立する.

 $J \neq 0$ と仮定する. よって, $S \neq H$ である.

S の直交補空間 S^{\perp} の中から、0 でない元 f_0 を任意に一つ選び出す. $S \neq H$ よりそれは可能である. この $f_0 \in S^{\perp}$ に対して、

$$a = J[f_0] (44)$$

とおく. $f_0 \neq 0$ かつ $f_0 \in S^{\perp}$ より $a \neq 0$ であるから,

$$f_1 = -\frac{1}{a}f_0 \tag{45}$$

とおけば, f_1 は S^{\perp} の非零となり, $J[f_1] = 1$ となる.

任意の $f \in H$ に対して、

$$b = J[f] (46)$$

とおけば,

$$J[f] - bJ[f_1] = 0 (47)$$

となり,

$$J[f - bf_1] = 0 (48)$$

となる.

$$g = f - bf_1 \tag{49}$$

とおけば, $g \in S$ となり.

$$f = bf_1 + g \quad f_1 \in S^{\perp}, g \in S$$
 (50)

 $\langle f_1, g \rangle$ であるから,

$$\langle f, f_1 \rangle = \langle bf_1 + g, f_1 \rangle = b \|f_1\|^2 \tag{51}$$

となる. したがって, b = J[f] より,

$$J[f] = b = \frac{\langle f, f_1 \rangle}{\|f_1\|^2} = \langle f, \frac{f_1}{\|f_1\|^2} \rangle \tag{52}$$

となる. そこで,

$$u = \frac{f_1}{\|f_1\|^2} \tag{53}$$

とおけば、結論をえる.

u の一意性を示す. $J[f] = \langle f, v \rangle$ と表されたとすれば, 任意の $f \in H$ に対して,

$$\langle f, u - v \rangle = 0 \tag{54}$$

2xb, v = u 2x3.

最後に,

$$|J[f]| = |\langle f, u \rangle| \le ||f|| ||u||$$
 (55)

となり,

$$||J|| \le ||u|| \tag{56}$$

となる. f = u とおけば, $J[u] = ||u||^2$ となる. 結論をえる.

3.6 共役作用素

 H_1 , H_2 をヒルベルト空間とし, g を H_2 の固定した元, A を $\mathcal{B}(H_1, H_2)$ の固定した元とする.

$$J[f] = \langle Af, g \rangle \tag{57}$$

とおけば, J は H_1 上の汎関数になる. J の線形性は明らかである.

また、Cauchy-Schwartz の不等式と作用素のノルムより、

$$|J[f]| = |\langle Af, g \rangle| \le ||Af|| ||g|| \le ||A|| ||f|| ||g|| \tag{58}$$

となる. よって, J は有界になり,

$$||J|| \le ||A|| ||g|| \tag{59}$$

となる. すなわち, J は H_1 上の有界線形汎関数となる. したがって, リースの定理より,

$$J[f] = \langle f, g^* \rangle \tag{60}$$

すなわち,

$$\langle Af, g \rangle = \langle f, g^* \rangle \tag{61}$$

となる $g^* \in H_1$ が存在する. g^* は J に対して一意に定まるから, g に対して一意に定まる. したがって, $g \in H_2$ を $g^* \in H_1$ に対応させる作用素 A^* を考えることができ,

$$g^* = A^*g \quad : \quad g \in H_2 \tag{62}$$

となる. A^* を A の共役作用素という.

$$\langle Af, q \rangle = \langle f, A^*q \rangle \tag{63}$$

となる.

3.7 自己共役作用素

 $A^* = A$ となる作用素 A を, 自己共役作用素 A という.

もし自己共役作用素の固有値が存在すれば、実数であることをみる.

定理 3.6. 複素ヒルベルト空間 H 上の有界線形作用素 A が自己共役になるための必要十分条件は, 任意の $f \in H$ に対して $\langle Af,f \rangle$ が実数になることである.

証明. (必要性を示す.)

$$\overline{\langle Af, f \rangle} = \langle f, Af \rangle = \langle A^*f, f \rangle = \langle Af, f \rangle \tag{64}$$

となり、 $\langle Af, f \rangle$ は実数になる.

(十分性を示す.)

任意の $f \in H$ に対して、 $\langle Af, f \rangle$ が実数であるとする。 $\langle Af, f \rangle$ が実数であるので、 $\langle Af, f \rangle = \langle f, Af \rangle$ である.

$$\langle A(f+g), f+g \rangle = \langle f+g, A(f+g) \rangle \tag{65}$$

$$\langle A(f+ig), f+ig \rangle = \langle f+ig, A(f+ig) \rangle \tag{66}$$

となる. この両辺を分解していけば、

$$\langle Af, f \rangle + \langle Af, g \rangle + \langle Ag, f \rangle + \langle Ag, g \rangle = \langle f, Af \rangle + \langle f, Ag \rangle + \langle g, Af \rangle + \langle g, Ag \rangle \tag{67}$$

$$\langle Af, g \rangle + \langle Ag, f \rangle = \langle f, Ag \rangle + \langle g, Af \rangle \tag{68}$$

$$\langle Af, f \rangle - i \langle Af, g \rangle + i \langle Ag, f \rangle - \langle Ag, g \rangle = \langle f, Af \rangle - i \langle f, Ag \rangle + i \langle g, Af \rangle - \langle g, Ag \rangle \tag{69}$$

$$\langle Af, g \rangle - \langle Ag, f \rangle = \langle f, Ag \rangle - \langle g, Af \rangle \tag{70}$$

定理 3.7. 自己共役作用素の固有値は、存在すれば実数である.

証明. $A\varphi = \lambda \varphi$ とすれば,

$$\langle A\varphi, \varphi \rangle = \langle \lambda\varphi, \varphi \rangle = \lambda \|\varphi\|^2 \tag{71}$$

より,

$$\lambda = \frac{\langle A\varphi, \varphi \rangle}{\|\varphi\|^2} \tag{72}$$

となる. よって, λ は実数である.

定理 3.8. 自己共役作用素 $A \in \mathcal{B}(H)$ のノルムは,

$$||A|| = \sup_{||f||=1} |\langle Af, f \rangle| \tag{73}$$

と表すことができる.

証明. 右辺を C とおく. Cauchy Schwarz の不等式から,

$$C = \sup_{\|f\|=1} |\langle Af, f \rangle| \le \sup_{\|f\|=1} \|Af\| \|f\| = \sup_{\|f\|=1} \|Af\| = \|A\|$$
 (74)

となり, $C \le ||A||$ となる.

逆を示す. $f \neq 0$ なる $f \in H$ に対して,

$$\frac{\langle Af, f \rangle}{\|f\|^2} \le \frac{|\langle Af, f \rangle|}{\|f\|^2} \le \sup_{f \in H} \frac{|\langle Af, f \rangle|}{\|f\|^2} = C \tag{75}$$

となり,

$$\langle Af, f \rangle \le C \|f\|^2 \tag{76}$$

となる. そこで, $Ag \neq 0$ なる $g \in H$ に対して,

$$\lambda = \left(\frac{\|Ag\|}{\|g\|}\right)^{1/2}, h = \frac{1}{\lambda}Ag\tag{77}$$

とおけば、 $\lambda > 0$ であるから、

$$||Ag||^2 = \langle Ag\lambda h\rangle \tag{78}$$

$$= \langle A\lambda g, h \rangle \tag{79}$$

$$= \frac{1}{4} \left(\langle A(\lambda g + h), \lambda g + h \rangle - \langle A(\lambda g - h), \lambda g - h \rangle \right) \tag{80}$$

$$\leq \frac{C}{4} (\|\lambda g + h\|^2 + \|\lambda g - h\|^2)$$
(81)

$$= \frac{C}{2} (\|\lambda g\|^2 + \|h\|^2)$$
 (82)

$$= \frac{C}{2} \left(\lambda^2 ||g||^2 + ||Ag||^2 / \lambda^2 \right)$$
 (83)

$$= C||Ag|||g|| \tag{84}$$

となり,

$$||Ag|| \le C||g|| \tag{85}$$

となる. よって, $||A|| \le C$ となる.

自己共役作用素だけでは最大固有値を求められないことがある

有限次元と無限次元を比較して考える. C^n の単位球面 $S_C^n = \{v = (v_1, \dots, v_n) : |v_1|^2 + \dots + |v_n|^2 = 1\}$ はコンパクトであるが, $S_H = \{f \in H : \|f\| = 1\}$ はコンパクトではない. 結論から言うと, 有限次元では コンパクトであるため固有値をもつが、無限次元ではコンパクトでないことがあるため固有値を持つとは 限らない.

有限次元の自己共役作用素の場合 3.8.1

有限次元について考える. $\sup_{v \in S^n_C} \|Av\| = \lambda$ を考えたとき, S^n_C の中の系列 $\{v_1, v_2, \cdots v_n\}$ が存在し て, sup の定義から,

$$\lambda - \langle Av_n, v_n \rangle < \frac{1}{n} \quad (n = 1, 2, \cdots)$$
(86)

が成り立つ. $n \to \infty$ としたとき, $\langle Av_n, v_n \rangle$ は λ に近づく.

単位球面 S_C^n はコンパクトであるので、単位球面 S_C^n は点列コンパクトである. 単位球面 S_C^n は点列コン パクトであるので, $n_i \to \infty$ のとき, $v_{n_i} \to v_0$ になる部分列 $\{v_{n_i}\}$ をとることができる. よって, 部分列

$$\langle Av_0, v_0 \rangle = \lambda \tag{87}$$

となる部分列 $\{v_{n_i}\}$ が存在する. $x_0 := Av_0$ とすれば, $Av_{n_i} \to x_0 \ (i \to \infty)$ になることに注意して,

$$||Av_{n_i} - \lambda v_{n_i}||^2 = ||Av_{n_i}||^2 + \lambda^2 ||v_{n_i}||^2 - \lambda \langle Av_{n_i}, v_{n_i} \rangle - \lambda \langle v_{n_i}, Av_{n_i} \rangle$$
(88)

$$= \|Av_{n_i}\|^2 + \lambda^2 \|v_{n_i}\|^2 - 2\lambda \langle Av_{n_i}, v_{n_i} \rangle$$
 (89)

$$\to \|x_0\|^2 + \lambda^2 - 2\lambda^2 = \|x_0\|^2 - \lambda^2 \tag{90}$$

 $||Av_{n_i} - \lambda v_{n_i}||^2 \ge 0$ であるから,

$$||x_0||^2 > \lambda^2 > 0 \tag{91}$$

となり, $x_0 \neq 0$ である.

$$\lim_{i \to \infty} ||Av_{n_i} - \lambda v_{n_i}||^2 = \lim_{i \to \infty} ||Av_{n_i}||^2 + \lambda^2 \lim_{i \to \infty} ||v_{n_i}||^2 - 2\lambda \lim_{i \to \infty} \langle Av_{n_i}, v_{n_i} \rangle$$

$$\leq \lim_{i \to \infty} ||A||^2 ||v_{n_i}||^2 + \lambda^2 - 2\lambda^2$$
(93)

$$\leq \lim_{i \to \infty} ||A||^2 ||v_{n_i}||^2 + \lambda^2 - 2\lambda^2$$
(93)

$$< 0 \tag{94}$$

したがって,

$$\lim_{i \to \infty} ||Av_{n_i} - \lambda v_{n_i}|| = 0 \tag{95}$$

A の連続性から $A(Av_{n_i} - \lambda v_{n_i}) = 0 \ (i \to \infty)$ となる.

$$\lim A(Av_{n_i}) = \lambda \lim Av_{n_i} \tag{96}$$

よって,

$$Ax_0 = \lambda x_0 \tag{97}$$

を示しており、 λ が固有値であることを表している.

3.8.2 無限次元の自己共役作用素の場合

無限次元について考える. $\sup_{f\in S_H}\|Af\|=\lambda$ を考えたとき, S_H の中の系列 $\{f_1,f_2,\cdots f_n\}$ が存在して, \sup の定義から,

$$\lambda - \langle Af_n, f_n \rangle < \frac{1}{n} \quad (n = 1, 2, \dots)$$
(98)

が成り立つ. $n \to \infty$ としたとき, $\langle Af_n, f_n \rangle$ は λ に近づく.

しかし、単位球面 S_H はコンパクトではないので、単位球面 S_C^n は点列コンパクトではない、単位球面 S_C^n は点列コンパクトでないので、 $n_i\to\infty$ のとき、 $v_{n_i}\to v_0$ $(n\to\infty)$ になる部分列 $\{v_{n_i}\}$ が存在するとは限らない.

よって,無限次元の自己共役作用素では,固有値を求められるとは限らない.

3.9 コンパクト自己共役作用素

無限次元の自己共役作用素では固有値を求められないこともあったが,自己共役作用素にコンパクト性を要請したコンパクト自己共役作用素では固有値と固有ベクトルを求められる.

定義 4. ノイマン・シャッテン積

f をヒルベルト空間 H_1 の元とし、g をヒルベルト空間 H_2 の元とする. 任意の $h \in H_2$ に対して、

$$(f \otimes \overline{g})h = \langle h, g \rangle f \tag{99}$$

で定義される作用素 $f \otimes \overline{g}$ を, f と g のノイマン・シャッテン積という.

補題 3.9. A を H 上の完全連続作用素とし, $\{u_n\}_{n=1}^{\infty}$ を H の正規直交系とする.

$$Au_k = \sum_{n=0}^k a_{kn} u_n \tag{100}$$

ならば,

$$\lim_{k \to \infty} a_{kk} = 0 \tag{101}$$

となる.

定理 3.10. A を H 上の完全連続作用素とする. 絶対値が任意の定数 $\rho > 0$ を超えるようなすべての固有値に対応する固有元全体の中で 1 次独立なものの個数は有限である.

定理 3.11. 完全連続作用素の固有値が無限個存在すれば、それは加算無限個になり、0に収束する.

定理 3.12. 完全連続自己共役作用素 A は, 0 と異なる固有値 λ および対応する固有元 φ を少なくともひとつもつ.

さらに強い次の命題が成り立ち、コンパクト自己共役作用素の相違なる固有値に対応する固有ベクトルは直交し、コンパクト自己共役作用素は固有値展開ができる

定理 3.13. ヒルベルト空間 H 上の完全連続自己共役作用素 A に対して, 非零固有値 λ_1, λ_2 ,

3.10 Hilbert-Schmidt 積分作用素

コンパクト作用素の重要な例として、Hilbert-Schmidt 積分作用素がある. Hilbert-Schmidt 積分作用素は Mercer の定理の証明に用いる.

定義 5. Hilbert-Schmidt 積分作用素

 (Ω,μ) は σ -有限測度空間で, $\mathcal{H}=L^2(\Omega,\mu)$ は可分であると仮定する. Ω 上の可測関数 f,g に対して, $(f\otimes g)(\xi,\eta)=f(\xi)g(\eta)$ とする. $k\in L^2(\Omega\times\Omega,\mu\otimes\mu)$ とする.このとき, $f\in L^2(\Omega)$ に対して,

$$A_k f(\xi) = \int_{\Omega} k(\xi, \eta) f(\eta) d\mu(\eta)$$
(102)

と定める. A_k を Hilbert-Schmidt 積分作用素と呼び, k をその積分核とよぶ.

$$||A_k|| \le ||A_k||_{HS} := ||k||_{L^2} = \left(\int_{\Omega \times \Omega} |k(\xi, \eta)|^2 d\mu(\eta) d\mu(\eta)\right)^{1/2}$$
 (103)

k の共役核を $k^*(\xi,\eta) = \overline{k(\eta,\xi)}$ と定めると, $A_k^* = A_{k^*}$ が成り立つ.

定理 3.14. $A_k \in \mathcal{B}(L^2(\Omega))$ である.

証明. $k \in L^2(\Omega \times \Omega, \mu \otimes \mu)$ より、

$$\int_{\Omega} \int_{\Omega} |k(\xi, \eta)|^2 d\mu(\eta) d\mu(\xi) < \infty \tag{104}$$

$$\int_{\Omega} |f(\eta)|^2 \mu(\eta) < \infty \tag{105}$$

である.

Cauchy-Schwarz の不等式より,

$$|A_k f(\xi)| \le \int_{\Omega} |k(\xi, \eta) f(\eta)| d\mu(\eta) \le \left(\int_{\Omega} |k(\xi, \eta)|^2 d\mu(\eta)\right)^{1/2} \left(\int_{\Omega} |f(\eta)|^2 d\mu(\eta)\right)^{1/2} < \infty \tag{106}$$

 $A_k f$ はほとんどすべての $\xi \in \Omega$ で意味を持つ.

さらに、この不等式から

$$||A_k f||_{L^2}^2 = \int_{\Omega} |A_k f(\xi)|^2 d\mu(\xi) \le \left(\int_{\Omega} |k(\xi, \eta)|^2 d\mu(\eta)\right) \left(\int_{\Omega} |f(\eta)|^2 d\mu(\eta)\right) = ||k||_{L^2}^2 ||f||_{L^2}^2$$
(107)

となるので,
$$A_k \in \mathcal{B}(L^2(\Omega))$$
 となる.

Hilbert-Schmidt 積分作用素は、コンパクト作用素である.

補題 3.15. 弱収束する点列は有界である. すなわち, $x_n \to x \in \mathcal{H}$ ならば, 点列 $(x_n)_{n=1}^\infty$ は有界である. **証明**. 任意の $\epsilon > 0$ に対して、ある $N \ge 1$ が存在して、

$$n > N \implies |\langle x_n, y \rangle - \langle x, y \rangle| < \epsilon$$

 $K \mathcal{E}$

$$K = \max\{|\langle x_1, y \rangle|, |\langle x_2, y \rangle|, \cdots, |\langle x_{N-1}, y \rangle|, |\langle x, y \rangle| + \epsilon\}$$

のように定めると、三角不等式から

$$|\langle x_n, y \rangle| - |\langle x, y \rangle| \le |\langle x_n, y \rangle - \langle x, y \rangle| \tag{108}$$

$$|\langle x_n, y \rangle| \leq |\langle x_n, y \rangle - \langle x, y \rangle| + |\langle x, y \rangle| \tag{109}$$

$$< \varepsilon + |\langle x, y \rangle|$$
 (110)

$$= K \tag{111}$$

よって、有界である。

定理 3.16. *Hilbert-Schmidt* 積分作用素は、コンパクト作用素である.

証明. $\{f_i\}$ はある $f \in L^2(\Omega)$ に弱収束するとする.

$$h_i = A_k f_i, h = A_k f$$
 とおいて、

$$h_j \to h \in L^2(\Omega) \tag{112}$$

を示せばよい.

仮定より,

$$h_i(\xi) = A_k f_i(\xi) = \langle k(\xi, \cdot), f_i \rangle = \langle k(\xi, \cdot) f \rangle = A_k f(\xi) = h(\xi) \quad (j \to \infty)$$
(113)

よって, $h_i \to h \ (j \to \infty)$ である.

弱収束する点列は有界であるので、

$$|(h_j - h)(\xi)|^2 = |A_k(f_j(\xi) - f(\xi))|^2 \le \left(\sup_i ||f_j - f||^2\right) \int_{\Omega} |k(\xi, \eta)|_{L^2}^2 d\mu(\eta) < \infty$$
 (114)

Lebesgue の収束定理より,

$$\lim_{j \to \infty} \|h_j - h\|_{L^2}^2 = \lim_{j \to \infty} \int_{\Omega} |h_j(\xi) - h(\xi)|^2 d\mu(\xi) = \int_{\Omega} \lim_{j \to \infty} |h_j(\xi) - h(\xi)|^2 d\mu(\xi) = 0$$
 (115)

Hilbert-Schmidt 積分作用素の積分核が、特に正定値核であるとき、コンパクト自己共役作用素となる.

定義 6. 正定值核

 $k \in C(\Omega^2)$ が正定値核であるとは、任意の $n \in \mathbb{N}$ と、任意の相違なる n 点 $\omega_1, \omega_2, \cdots, \omega_n \in \Omega$ と、任意の $c_1, c_2 \cdots, c_n \in \mathbb{C}$ に対して、

$$\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} k(\omega_i, \omega_j) c_i \bar{c}_j \ge 0$$
(116)

が成り立つときをいう.

 $\langle kc, c \rangle \in \mathbb{R}$ から k は自己共役作用素となり, $k = k^*$ となる.

$$k(\xi, \eta) = k^*(\xi, \eta) = \overline{k(\eta, \xi)}$$
(117)

このとき, A_k は自己共役作用素となる.

$$\langle A_k f, g \rangle = \int_{\Omega} \left(\int_{\Omega} k(\xi, \eta) f(\eta) d\mu(\eta) \right) \overline{g(\xi)} d\mu(\xi)$$
 (118)

$$= \int_{\Omega} \int_{\Omega} k(\xi, \eta) f(\eta) \overline{g(\xi)} d\mu(\eta) d\mu(\xi)$$
 (119)

$$= \int_{\Omega} f(\eta) \left(\int_{\Omega} k(\xi, \eta) \overline{g(\xi)} d\mu(\xi) \right) d\mu(\eta)$$
 (120)

$$= \int_{\Omega} f(\eta) \left(\int_{\Omega} \overline{k(\eta, \xi)g(\xi)} d\mu(\xi) \right) d\mu(\eta)$$
 (121)

$$= \int_{\Omega} f(\eta) \overline{\left(\int_{\Omega} k(\eta, \xi) g(\xi) d\mu(\xi)\right)} d\mu(\eta) \tag{122}$$

$$= \langle f, A_k g \rangle \tag{123}$$

参考文献

- [1] 福水健次, "カーネル法入門," 朝倉書店, 2018.
- [2] 赤穂昭太郎, "カーネル多変量解析," 岩波書店, 2015.
- [3] 持橋大地 and 大羽成征, "ガウス過程と機械学習," **講談社**, 2019.
- [4] 志賀浩二, "固有値問題 30 講," 朝倉書店, 1991.
- [5] 小川英光, "工学系の関数解析," 森北出版, 2010.
- [6] 泉正己, "数理科学のための関数解析," サイエンス社, 2021.
- [7] 伊藤健一, "関数解析 講義スライド," 2023.

4 付録

Dini の定理は、Mercer の定理で用いる.

定理 4.1. Dini の定理

a

証明. a □