

11. Spectral Expansions

竹田航太

2020 年 12 月 23 日

1 Karhuen Loéve Expansion

Definition 1.1 (Setting). 11.1 の設定をする.

- $(\Omega, \mathcal{F}, \mu)$, 確率空間.
- $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^d$: 領域.
- $U : \mathcal{X} \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$: 確率過程で以下を満たす.
 - $\forall x \in \mathcal{X}, U(x) \in L^2(\Omega)$
 - $\forall x \in \mathcal{X}, E_\mu[U(x)] = 0$
 - $C_U(x, y) = E_\mu[U(x)U(y)]$ が *well-defined* で (x, y) について連続.

Definition 1.2 (Mercer kernel). \mathcal{X} : 第 1 可算空間とする. $K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ が Mercer kernel $\stackrel{def}{\Leftrightarrow} K$ は以下を満たす.

- (1) K は連続.
- (2) K は対称.
- (3) K は半正定値. (i.e $\forall n \in \mathbb{N}, \forall x_1, \dots, x_n \in \mathcal{X}$ に対して Gram 行列

$$G := \begin{bmatrix} K(x_1, x_1) & \cdots & K(x_1, x_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ K(x_n, x_1) & \cdots & K(x_n, x_n) \end{bmatrix}$$

が半正定値.)

*第 1 可算空間 \mathcal{X} : 位相空間 \mathcal{X} で各点 $x \in \mathcal{X}$ が高々可算の基本近傍系を持つ

Lemma 1.3 (正定値 kernel). $K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ が対称かつ半正定値とする. このとき以下が成り立つ

- (1) $\forall x \in \mathcal{X}, K(x, x) \geq 0$
- (2) $\forall x, y \in \mathcal{X}, K(x, y)^2 \leq K(x, x)K(y, y)$

Proof. (1):半正定値性から $n = 1$ とすると明らか.

(2):半正定値性から $n = 2, x, y \in X$ とすると

$$G = \begin{bmatrix} K(x, x) & K(x, y) \\ K(y, x) & K(y, y) \end{bmatrix}$$

は半正定値なので固有値は非負であり行列式は固有値の積に等しいので非負であり対称性も考慮すると

$$\begin{aligned} \det(G) &\geq 0 \\ \Leftrightarrow K(x, x)K(y, y) - K(x, y)K(y, x) &\geq 0 \\ \Leftrightarrow k(x, y)^2 &\leq K(x, x)K(y, y) \end{aligned}$$

が成り立つ. □

Lemma 1.4. \mathcal{X} : 局所コンパクトハウスドルフ空間, μ : \mathcal{X} 上の測度, $K: \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ が対称かつ連続で $K \in L^2(\mathcal{X} \times \mathcal{X}, \mu \otimes \mu)$ とする. このとき以下が成り立つ

(1) $T_k: L^2(\mathcal{X}) \rightarrow L^2(\mathcal{X})$ を

$$(T_k f)(x) := \int_{\mathcal{X}} K(x, y)f(y)d\mu(y)$$

で定めると $T_k \in B(L^2(\mathcal{X}))$ で特に *Hilbert Schmidt* 作用素.

(2) K が半正定値 $\Leftrightarrow T_k$ が半正定値 (*i.e* $\forall f \in L^2(\mathcal{X}), \langle T_k f, f \rangle_{L^2(\mathcal{X})} \geq 0$)

Proof. (\Rightarrow) について, $f \in C_0(\mathcal{X})$ の場合 Riemann 和は K の半正定値性から非負

$$\sum_{i,j} K(x_i, x_j)f(x_i)f(x_j)\mu(E_i)\mu(E_j) \geq 0$$

$f \in L^2(\mathcal{X})$ の場合 $\tilde{f} \in C_0(\mathcal{X})$ で近似する.

(\Leftarrow) について $x_1, \dots, x_n \in \mathcal{X}$ と $a_1, \dots, a_n \in \mathbb{R}$ に対して $x_i \in E_i (i = 1, \dots, n)$ となるようにとって

$$f(x) = \sum_{i=1}^n \frac{a_i}{\mu(E_i)} \chi_{E_i} \in L^2(\mathcal{X})$$

とおくと

$$\sum_{i,j} K(x_i, x_j)a_i a_j \geq \langle T_k f, f \rangle_{L^2(\mathcal{X})} \geq 0$$

□

Theorem 1.5 (Mercer). (\mathcal{X}, μ) : \mathcal{X} が局所コンパクトハウスドルフであるような完備 Borel 測度を持つ測度空間. $K: \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ を Mercer kernel で $x \mapsto K(x, x) \in L^1(\mathcal{X}, \mu; \mathbb{R})$ とする. このとき以下が成り立つ

(1) 以下で有界線形作用素 $T_k : L^2(\mathcal{X}) \rightarrow L^2(\mathcal{X})$ が定まる.

$$(T_k f)(x) := \int_{\mathcal{X}} K(x, y) f(y) d\mu(y)$$

(2) T_k の固有関数からなる $L^2(\mathcal{X})$ の正規直交基底 $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ が存在し対応する固有値 $(\lambda_n)_{n \in \mathbb{N}}$ は非負となる.

(3) 以下の展開が \mathcal{X} の任意のコンパクト集合上で絶対一様収束する.

$$K(x, y) = \sum_{n \in \mathbb{N}} \lambda_n \psi_n(x) \psi_n(y)$$

Proof. 可積分性と半正定値性:

Lemma 1.3(2) と $x \mapsto K(x, x) \in L^1$ から

$$\int_{\mathcal{X} \times \mathcal{X}} |K(x, y)|^2 dx dy \leq \left(\int_{\mathcal{X}} |K(x, x)| dx \right)^2 < \infty$$

より $K \in L^2(\mathcal{X} \times \mathcal{X})$ なので Lemma 1.4 から $T_k \in B_{HS}(L^2(\mathcal{X})) \cap B_+(L^2(\mathcal{X}))$.

L^2 展開:

Hilbert Schmidt の理論から非負固有値 $(\lambda_n)_{n \in \mathbb{N}}$ と対応する固有関数からなる $L^2(\mathcal{X})$ の正規直交基底 $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ が存在して,

$$T_k = \sum_{n \in \mathbb{N}} \lambda_n \psi_n \otimes \psi_n \quad (1.1)$$

(ただし, $\forall f, g, h \in L^2(\mathcal{X}), (f \otimes g)h = \langle h, g \rangle_{L^2(\mathcal{X})} f$ とする). さらに

$$K(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \psi_n(x) \psi_n(y) \text{ in } L^2(\mathcal{X} \times \mathcal{X}) \quad (1.2)$$

固有関数の連続性と対角での収束:

K の連続性から $\lambda_n \neq 0$ のとき $\psi(x) = \frac{1}{\lambda_n} \int_{\mathcal{X}} K(x, y) \psi_n(y) dy$ は連続. $K_N(x, y)$ を以下で定めると連続である.

$$K_N(x, y) := K(x, y) - \sum_{n=1}^N \lambda_n \psi_n(x) \psi_n(y) = \sum_{n=N+1}^{\infty} \lambda_n \psi_n(x) \psi_n(y)$$

(1.2) から最後の等式は $L^2(\mathcal{X} \times \mathcal{X})$ での収束の意味で成り立つ. K_N から自然に定まる積分作用素を T_{K_N} とかく. 今, $\forall f \in L^2(\mathcal{X})$ に対して固有関数の直交性から

$$\langle T_{K_N} f, f \rangle_{L^2(\mathcal{X})} = \sum_{n=N+1}^{\infty} \lambda_n \langle f, \psi_n \rangle^2 \geq 0$$

これより $\forall x \in \mathcal{X}, K_N(x, x) \geq 0$ がわかる. (\because もし $\exists x_0 \in \mathcal{X}$ s.t. $K_N(x_0, x_0) < 0$ とすると K_N の連続性から $\exists \delta > 0$ s.t. $\forall (x, y) \in (x_0 - \delta, x_0 + \delta)^2, K_N(x, y) < 0$ ここで, $(x_0 - \delta, x_0 + \delta)^2$ で正, その他で 0 となるような $f \in L^2(\mathcal{X})$ をとると $\langle T_{K_N} f, f \rangle_{L^2(\mathcal{X})} < 0$) 以上から

$$K(x, x) - \sum_{n=1}^N \lambda_n \psi_n(x)^2 \geq 0$$

よって各 $x \in \mathcal{X}$ で $\sum_{n=1}^N \lambda_n \psi_n(x)^2$ は $N \rightarrow \infty$ で収束し $\sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \psi_n(x)^2 \leq K(x, x)$

2変数での各点収束:

\mathcal{X} の任意のコンパクト集合 C をとる. $M := \max_{x \in C} K(x, x)$ とすると $(x, y) \in C \times C$ で

$$\begin{aligned} \left| \sum_{n=1}^N \lambda_n \psi_n(x) \psi_n(y) \right|^2 &\leq \sum_{n=1}^N \lambda_n \psi_n(x)^2 \sum_{n=1}^N \lambda_n \psi_n(y)^2 \\ &\leq M \sum_{n=1}^N \lambda_n \psi_n(x)^2 \\ &\leq MK(x, x) \end{aligned}$$

である. この評価は y について一様なので $\sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \psi_n(x) \psi_n(y)$ は各 x で y について一様収束. 収束先を $B(x, y)$ とおく.

一様収束:

$x \in C$ を固定する. $\forall f \in C(\mathcal{X}) \cap L^2(\mathcal{X})$ に対し, $B(x, y)$ の収束は y について一様より

$$\langle B(x, \cdot), f \rangle_{L^2(\mathcal{X})} = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \psi_n(x) \langle \psi_n, f \rangle_{L^2(\mathcal{X})} = \langle K(x, \cdot), f \rangle_{L^2(\mathcal{X})}$$

今, $f = K(x, \cdot) - B(x, y) \in C(\mathcal{X}) \cap L^2(\mathcal{X})$ とおくと $\|K(x, \cdot) - B(x, \cdot)\|_{L^2(\mathcal{X})}^2 = 0$ よって連続性から $\forall y \in \mathcal{X}$ で

$$K(x, y) = B(x, y)$$

特に任意の \mathcal{X} のコンパクト集合 C 上で,

$$K(x, x) = B(x, x) = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \psi_n(x)^2 \quad (\text{各点収束})$$

正値連続関数の級数がコンパクト集合上で各点収束するので Dini の定理から一様収束する. さらに Cauchy-schwarz の不等式から

$$\left| \sum_{n=1}^N \lambda_n \psi_n(x) \psi_n(y) \right|^2 \leq \sum_{n=1}^N \lambda_n \psi_n(x)^2 \sum_{n=1}^N \lambda_n \psi_n(y)^2$$

なので

$$K(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \psi_n(x) \psi_n(y)$$

は \mathcal{X} の任意のコンパクト集合上で一様収束. □

Theorem 1.6 (Karhuen Loève). $U : \mathcal{X} \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, 連続確率過程で $U \in L^2(\mathcal{X})$ $\mu.a.s.$ とする. さらに, $E_{\mu}[U(x)] \equiv 0, C_U \in L^2(\mathcal{X} \times \mathcal{X})$ とする.

2 Winner Hermite Polynomial Chaos

Definition 2.1 (Hermite 多項式). $H_n(x) = (-1)^n e^{-x^2} \frac{d}{dx} e^{-x^2}$ を満たす多項式を *Hermite 多項式* という. 定数倍の自由度があるがここでは最高次数を 1 とする.

Remark 2.2. *Hermite 多項式* の性質をまとめる.

- (1) $(H_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ は $L^2(\mathbb{R}, \gamma; \mathbb{R})$ の直交基底となる. (ただし, $\gamma = N(0, 1)$)
- (2) $\frac{d}{dx} H_n(x) = n H_{n-1}(x)$
- (3) $H_n(x+h) = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} h^{n-k} H_k(x)$

その他, 多数の特筆すべき性質を持つがここでは省略.

Definition 2.3 (Winner-Hermite polynomial chaos expansion). \mathbb{R} 値確率変数 $U \in L^2(\mathbb{R}, \gamma; \mathbb{R})$ の *Winner-Hermite polynomial chaos expansion* は $(H_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ による U の直交展開.

つまり,

$$U = \sum_{n \in \mathbb{N}_0} u_n H_n$$

という展開. ただし, 係数は

$$u_n = \frac{\langle U, H_n \rangle_{L^2}}{\|H_n\|_{L^2}^2} = \frac{1}{n! \sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} U(x) H_n(x) e^{-x^2/2} dx$$

で定まる.

Example 2.4. 対数正規分布を展開.

$X \sim N(m, \sigma^2)$ に対して確率変数 $Y = e^X$ の *Winner-Hermite polynomial chaos expansion* を考える. $x \sim N(0, 1)$ すると $X = m + \sigma x$ と書け, $Y = e^{m+\sigma x}$

$$y_k = \frac{\langle e^{m+\sigma x}, H_k \rangle_{L^2}}{\|H_k\|_{L^2}^2}$$

を計算する．性質 (3) と *Hermite* 多項式の直交性を使うと

$$\begin{aligned}
y_k &= \frac{e^m}{k!} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{\sigma x} H e_k(x) e^{-x^2/2} dx \\
&= \frac{e^{m+\sigma^2/2}}{k!} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} H e_k(x) e^{-(x-\sigma)^2/2} dx \\
&= \frac{e^{m+\sigma^2/2}}{k!} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} H e_k(w + \sigma) e^{-w^2/2} dw \\
&\text{性質 (3)} \\
&= \frac{e^{m+\sigma^2/2}}{k!} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} \sigma^{k-j} H e_j(w) e^{-w^2/2} dw \\
E[Z] &= \langle Z, H e_0 \rangle_{L^2(\gamma)} \text{ とかける.} \\
&= \frac{e^{m+\sigma^2/2}}{k!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} \sigma^{k-j} \langle H e_j, H e_0 \rangle_{L^2(\gamma)} \\
&\text{Hermite 多項式の直交性} \\
&= \frac{e^{m+\sigma^2/2} \sigma^k}{k!}
\end{aligned}$$

がわかる．

3 Wavelet Basis and Besov Space

non-gaussian の sampling を行うための良い関数空間を作りたい．必要なものは良い L^2 の基底と係数の減衰をうまくコントロールしたノルムである．そのために wavelet basis がある．

Definition 3.1 (wavelet basis). $f : \mathbb{R}^d$ or \mathbb{T}^d 上の関数に対し, j scaled, k shifted version を $f_{j,k} := f(2^j x - k)$ で定める．

scaling function $\tilde{\phi} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ と multiresolution analysis $(V_j)_{j \in \mathbb{Z}}$ s.t. V_j : closed sub space of $L^2(\mathbb{R})$ を以下を満たすものとして定める．

- (a) $j \in \mathbb{Z}, V_j \subset V_{j+1}$
- (b) $\overline{\cup_{j \in \mathbb{Z}} V_j} = L^2(\mathbb{R})$ かつ $\cap_{j \in \mathbb{Z}} V_j = \{0\}$
- (c) $j, k \in \mathbb{Z}, f \in V_0 \Rightarrow f_{j,k} \in V_j$
- (d) $V_0 = \text{span}\{\tilde{\phi}_{0,k}; k \in \mathbb{Z}\}$
- (e) $\exists A, B > 0$ s.t. $\forall (c_k)_{k \in \mathbb{Z}} \in \ell^2(\mathbb{Z}), A \|(c_k)\|_{\ell^2} \leq \|\sum_{k \in \mathbb{Z}} c_k \tilde{\phi}_{0,k}\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq B \|(c_k)\|_{\ell^2}$

さらに

$$\tilde{\phi} = \sum_{k \in \mathbb{Z}} c_k \tilde{\phi}(2x - k)$$

という自己相似関係を満たす *scaling function* $\tilde{\phi}$ に対して, *mother wavelet* $\tilde{\psi} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ を

$$\tilde{\psi} := \sum_{k \in \mathbb{Z}} (-1)^k c_{k+1} \tilde{\phi}(2x + k) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} (-1)^k c_{-k+1} \phi(2x - k) \quad (3.1)$$

で定める.

Remark 3.2. (1) *mother wavelet* $\tilde{\psi}$ の *scaled and shifted copies* が求めている $L^2(\mathbb{R})$ の基底である.

$$(2) f, g \in V_0, f \perp g \Rightarrow f_j \perp g_j$$

$$(3) j \in \mathbb{Z} \text{ に対し, } (2^{j/2} \phi_{j,k})_{k \in \mathbb{Z}} \text{ は } V_j \text{ の正規直交基底.}$$

Remark 3.3 (mother wavelet の由来). *multiresolution analysis* $(V_j)_{j \in \mathbb{Z}} \subset L^2(\mathbb{R})$ が与えられたとき

$$W_j := V_j^\perp \text{ in } V_{j+1}$$

と $(W_j)_{j \in \mathbb{Z}}$ を定めると以下が成り立つ.

$$(1) W_j \perp W_{j'} \ (j \neq j')$$

$$(2) L^2(\mathbb{R}) = \bigoplus_{j \in \mathbb{Z}} W_j$$

$$(3) g \in W_j \Rightarrow g_{j,k} \in W_j$$

$$(4) W_j = \text{span}\{\tilde{\psi}_{j,k}; j \in \mathbb{Z}, k = 0, \dots, 2^j - 1\}$$

*mother wavelet $\tilde{\psi}$ は V_j の V_{j+1} に対する直交補空間 W_j の基底を与えるための関数なので定義 (3.1) のように決められる.

次に \mathbb{T} 上の wavelet basis を構成する.

Definition 3.4 ($L^2(\mathbb{T})$ の wavelet basis). *scaling function* $\tilde{\phi} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ と *mother wavelet* $\tilde{\psi} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ に対して

$$\phi_{j,k}(x) := \sum_{s \in \mathbb{Z}} \tilde{\phi}(2^j(x + s) - k)$$

$$\psi_{j,k}(x) := \sum_{s \in \mathbb{Z}} \tilde{\psi}(2^j(x + s) - k)$$

と定め, $\phi = \phi_{0,0}, \psi = \psi_{0,0}$ とする. 関数空間を

$$V_j := \begin{cases} \{\phi\} & (j \in \mathbb{Z} \setminus \mathbb{N}) \\ \text{span}\{\phi_{j,k}; k = 0, \dots, 2^j - 1\} & (j \in \mathbb{N}) \end{cases}$$

$$W_j := \text{span}\{\psi_{j,k}; k = 0, \dots, 2^j - 1\}$$

$\{2^{j/2} \psi_{j,k}; j \in \mathbb{N}_0, k = 0, \dots, 2^j - 1\}$ を *wavelet basis* といい, $L^2(\mathbb{T})$ の正規直交基底となる.

Definition 3.5 ($L^2(\mathbb{T}^d)$ の wavelet basis). *index* をひとつ増やして $\nu \in \{0, 1\}^d \setminus \{(0, \dots, 0)\}$, $j \in \mathbb{N}_0, k \in \{0, 1, \dots, 2^k - 1\}^d$ に対して

$$\psi_{j,k}^\nu := 2^{dj/2} \psi_{j,k_1}^{\nu_1} \cdots \psi_{j,k_d}^{\nu_d}$$

で定める. ただし, $\psi^0 = \phi, \psi^1 = \psi$.

$L^2(\mathbb{T}^d)$ の wavelet basis は $\{\psi_{j,k}^\nu; j \in \mathbb{N}_0, k \in \{0, 1, \dots, 2^k - 1\}^d, \nu \in \{0, 1\}^d \setminus \{(0, \dots, 0)\}\}$ となる.

Definition 3.6 (Besov space). $1 \leq p, q < \infty, s > 0$ に対して, $u = \sum_{j,k,\nu} u_{j,k}^\nu \psi_{j,k}^\nu$ の Besov(p, q, s) ノルムは

$$\begin{aligned} \left\| \sum_{j,k,\nu} u_{j,k}^\nu \psi_{j,k}^\nu \right\|_{B_{p,q}^s(\mathbb{T}^d)} &:= \left\| j \mapsto 2^{js} 2^{jd(\frac{1}{2} - \frac{1}{p})} \|(k, \nu) \mapsto u_{j,k}^\nu\|_{\ell^p} \right\|_{\ell^q(\mathbb{N}_0)} \\ &= \left(\sum_{j \in \mathbb{N}_0} 2^{js} 2^{jd(\frac{1}{2} - \frac{1}{p})} \left(\sum_{k,\nu} |u_{j,k}^\nu|^p \right)^{q/p} \right)^{1/q} \end{aligned}$$

で定まる. Besov 空間 $B_{p,q}^s(\mathbb{T}^d)$ は以下で定義する.

$$B_{p,q}^s(\mathbb{T}^d) := \overline{\{u \in L^2; \|u\|_{B_{p,q}^s(\mathbb{T}^d)} < \infty\}}^{\|\cdot\|_{B_{p,q}^s(\mathbb{T}^d)}}$$

Theorem 3.7 (Fernique like theorem). $1 \leq p < \infty, s > 0, U$ を

$$U := \sum_{l \in \mathbb{N}} l^{-(\frac{s}{d} + \frac{1}{2} - \frac{1}{p})} \kappa^{-\frac{1}{p} \xi_l \psi_l}$$

で定義する. このとき $t \in \mathbb{R}$ に対して以下は同値

- (1) $\|U\|_{X^{s,p}} < \infty$ a.s. ξ
- (2) $\mathbb{E}[\exp(\alpha \|U\|_{X^{s,p}}^p)] < \infty \forall \alpha \in (0, \frac{\kappa}{2})$
- (3) $t < s - \frac{d}{p}$

さらに, 上記の条件が満たされているとき $\exists r^* > 0$ s.t. $\forall \alpha \in (0, \frac{\kappa}{2r^*})$

$$\mathbb{E}[\exp(\alpha \|U\|_{C^t})] < \infty$$

Proof. [3], [4] による. □

4 Generalized Polynomial Chaos

Definition 4.1 (germ など).

Definition 4.2 (多項式系).

参考文献

- [1] Timothy John Sullivan. *Introduction to uncertainty quantification*, volume 63. Springer, 2015.
- [2] Frederic Riesz and Bela Sz Nagy. Functional analysis, translated by leo f. *Boron, Ungar, New York*, 184, 1955.
- [3] Masoumeh Dashti, Stephen Harris, and Andrew Stuart. Besov priors for bayesian inverse problems. *Inverse Problems and Imaging*, 6:183–200, 2012.
- [4] Matti Lassas. Eero Saksman and Samuli Siltanen. Discretization-invariant bayesian inversion and besov space priors. *Inverse Problems and Imaging*, 3:87–122, 2009.