正定値核の構成法について

瀬戸 道生（防衛大学校・数学教育室）

Real, Complex and Functional Analysis Seminar
2021 年 12 月 18 日

はじめに

内容

- Aronszajn の理論と Schoenberg の理論に関する短いサーベイ
- 桑原君との共同研究の紹介

はじめに

内容

- Aronszajn の理論と Schoenberg の理論に関する短いサーベイ
- 桑原君との共同研究の紹介

参考文献

- J. Stewart, Rocky Mountain J. Math., Vol. 6 No. 3, 1976.
- 澤野さんと斎藤先生の本
- Paulsen-Raghupathi の本
- Kuwahara-Seto, Canad. Math. Bull., online, 2021.

はじめに

内容

- Aronszajn の理論と Schoenberg の理論に関する短いサーベイ
- 桑原君との共同研究の紹介

参考文献

- J. Stewart, Rocky Mountain J. Math., Vol. 6 No. 3, 1976.
- 澤野さんと斎藤先生の本
- Paulsen-Raghupathi の本
- Kuwahara-Seto, Canad. Math. Bull., online, 2021.

設定

X: 集合（何でもよい）
k: $X \times X$ 上の自己共役な関数 (i.e. $k(y,x) = \overline{k(x,y)}$).

正定値核

半正定値核

$\forall n \in \mathbb{N}$, $\forall x_1, \ldots, x_n \in X$, $\forall (c_1, \ldots, c_n) \in \mathbb{C}^n$ に対し，

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

が成り立つとき，k は半正定値 (PSD) とよばれる．

正定値核

半正定値核

$\forall n \in \mathbb{N}$, $\forall x_1, \ldots, x_n \in X$, $\forall (c_1, \ldots, c_n) \in \mathbb{C}^n$ に対し，

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

が成り立つとき，k は半正定値 (PSD) とよばれる．

狭義正定値核

$\forall n \in \mathbb{N}$, 互いに異なる $\forall x_1, \ldots, x_n \in X$, $\forall (c_1, \ldots, c_n) \in \mathbb{C}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ に対し，

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

が成り立つとき，k は狭義正定値 (SPD) とよばれる．

半正定値核の構成法１（Aronszajn の理論）

基本の構成法

1. $f : X \to \mathbb{C} \Rightarrow k(x, y) = \overline{f(y)} f(x)$ is PSD.
2. k_1 and k_2 are PSD $\Rightarrow k_1 + k_2$ is PSD.
3. k_1 and k_2 are PSD $\Rightarrow k_1 k_2$ is PSD (Schur).
4. k_n is PSD and $k = \lim_{n\to\infty} k_n \Rightarrow k$ is PSD.

半正定値核の構成法１（Aronszajn の理論）

基本の構成法

1. $f: X \to \mathbb{C} \Rightarrow k(x,y) = \overline{f(y)}f(x)$ is PSD.
2. k_1 and k_2 are PSD $\Rightarrow k_1 + k_2$ is PSD.
3. k_1 and k_2 are PSD $\Rightarrow k_1 k_2$ is PSD (Schur).
4. k_n is PSD and $k = \lim_{n\to\infty} k_n \Rightarrow k$ is PSD.

例（ガウス核）

$$k(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = \exp(-\gamma\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2) \quad (\boldsymbol{x},\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^d)$$

は半正定値（実際には狭義正定値）.

$$\because \quad \exp(-\gamma\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2) = e^{-\gamma\|\boldsymbol{x}\|^2} e^{2\gamma\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle} e^{-\gamma\|\boldsymbol{y}\|^2}$$
$$= e^{-\gamma\|\boldsymbol{x}\|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2\gamma\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle)^n}{n!} e^{-\gamma\|\boldsymbol{y}\|^2}$$

半正定値核の構成法２（Aronszajn の理論）

テンソル積

k_1 and k_2 are PSD $\Rightarrow$ $k_1 \otimes k_2$ is PSD.

半正定値核の構成法２（Aronszajn の理論）

テンソル積

k_1 and k_2 are PSD $\Rightarrow$ $k_1 \otimes k_2$ is PSD.

引き戻し構成法

集合 Y と写像 $\varphi : Y \to X$ が与えられたとき，

$$(k \circ \varphi)(y, y') = k(\varphi(y), \varphi(y')) \quad (y, y' \in Y)$$

と定めると，$k \circ \varphi$ は Y 上の半正定値核．

半正定値核の構成法２（Aronszajn の理論）

テンソル積

k_1 and k_2 are PSD $\Rightarrow$ $k_1 \otimes k_2$ is PSD.

引き戻し構成法

集合 Y と写像 $\varphi : Y \to X$ が与えられたとき，

$$(k \circ \varphi)(y, y') = k(\varphi(y), \varphi(y')) \quad (y, y' \in Y)$$

と定めると，$k \circ \varphi$ は Y 上の半正定値核．

使用例

$k(z, \lambda) = 1/(1 - \overline{\lambda} z)$, $\Delta : \lambda \mapsto (\lambda, \lambda)$ $(|\lambda| < 1)$ **に対し，**

$$(k \otimes k)((z, w), (\lambda, \mu)) = \frac{1}{(1 - \overline{\lambda} z)(1 - \overline{\mu} w)}$$

$$((k \otimes k) \circ \Delta)(z, \lambda) = \frac{1}{(1 - \overline{\lambda} z)^2} \quad \text{(Bergman 核)}$$

半正定値核の構成法３（Schoenberg の理論）

条件付き負定値核

$\forall n \in \mathbb{N}$, $\forall x_1, \ldots, x_n \in X$, $\forall c_1, \ldots, c_n \in \mathbb{C}$ **に対し，**

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

が成り立つとき， k **は条件付き負定値とよばれる．**

半正定値核の構成法３（Schoenberg の理論）

条件付き負定値核

$\forall n \in \mathbb{N}$, $\forall x_1, \ldots, x_n \in X$, $\forall c_1, \ldots, c_n \in \mathbb{C}$ **に対し，**

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

が成り立つとき， k **は条件付き負定値とよばれる．**

Schoenberg's embedding theorem

距離空間 (X, d) **がヒルベルト空間に等距離埋め込み可能**
$\Leftrightarrow$ d^2 **は条件付き負定値．**

半正定値核の構成法３（Schoenberg の理論）

条件付き負定値核

$\forall n \in \mathbb{N}$, $\forall x_1, \ldots, x_n \in X$, $\forall c_1, \ldots, c_n \in \mathbb{C}$ **に対し，**

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

が成り立つとき，k は条件付き負定値とよばれる．

Schoenberg's embedding theorem

距離空間 (X, d) がヒルベルト空間に等距離埋め込み可能
$\Leftrightarrow$ d^2 は条件付き負定値．

Schoenberg's generator theorem

k は条件付き負定値 $\Leftrightarrow$ $\exp(-tk)$ $(t > 0)$ は半正定値

半正定値核の構成法４（Schoenberg の理論）

例１ (exercise?)

$|z|, |w| < 1$ に対し，

$$k(z,w) = \exp\left(-t\left|\frac{z-w}{1-\overline{w}z}\right|^2\right) \quad (t>0)$$

は半正定値．

半正定値核の構成法４（Schoenberg の理論）

例１ (exercise?)

$|z|, |w| < 1$ に対し，

$$k(z,w) = \exp\left(-t\left|\frac{z-w}{1-\overline{w}z}\right|^2\right) \quad (t>0)$$

は半正定値．

例２ (Haagerup)

G: a free group with finite generators,
$|g|$: the number of factors in the word for g in G,

$$k(g,h) = \exp(-t|h^{-1}g|) \quad (t>0)$$

は半正定値．

狭義正定値核の構成法１

狭義正定値核

$\forall n \in \mathbb{N}$, **互いに異なる** $\forall x_1, \ldots, x_n \in X$, $\forall (c_1, \ldots, c_n) \in \mathbb{C}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ **に対し，**

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

が成り立つとき，k は狭義正定値とよばれる（ヒルベルトが問題にしたのはこちら？）．

狭義正定値核の構成法 1

狭義正定値核

$\forall n \in \mathbb{N}$, **互いに異なる** $\forall x_1, \ldots, x_n \in X$, $\forall (c_1, \ldots, c_n) \in \mathbb{C}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ **に対し，**

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

が成り立つとき， k **は狭義正定値とよばれる（ヒルベルトが問題にしたのはこちら？）．**

言い換え

$k_y(x) = k(x, y)$ **と表すとき，次は同値**

1. k **は狭義正定値**
2. $\forall n \in \mathbb{N}$, **互いに異なる** $\forall x_1, \ldots, x_n \in X$ **に対し，** $\{k_{x_1}, \ldots, k_{x_n}\}$ **は線形独立．**

狭義正定値核の構成法 2

狭義正定値核の例

- $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^d$ とする．

$$\exp(-\gamma\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|_{\ell^2}^2), \quad \exp(-\gamma\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|_{\ell^1}) \quad (\gamma > 0)$$

  は $\mathbb{R}^d$ 上の狭義正定値核（$\because$ Bochner の定理）．

狭義正定値核の構成法２

狭義正定値核の例

- $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^d$ とする．

$$\exp(-\gamma \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|_{\ell^2}^2), \quad \exp(-\gamma \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|_{\ell^1}) \quad (\gamma > 0)$$

は $\mathbb{R}^d$ 上の狭義正定値核（$\because$ Bochner の定理）．

知られていること

- k_1 and k_2 are SPD $\Rightarrow$ $k_1 k_2$ is SPD (Schur)
- k is a Pick kernel $\Rightarrow$ k is SPD.
- いろいろな分野でそれぞれの結果がありそう（特に確率論？）

狭義正定値核の構成法３

記号

- k: X 上の半正定値核
- $k_y(x) = k(x, y)$
- $\mathcal{H}_k$: k から構成される再生核ヒルベルト空間

狭義正定値核の構成法３

記号

- k: X 上の半正定値核
- $k_y(x) = k(x, y)$
- $\mathcal{H}_k$: k から構成される再生核ヒルベルト空間

補題 (Kuwahara-S)

$x \mapsto k_x$ は単射とし，$\forall n \in \mathbb{N}$ と互いに異なる $\forall x_1, \ldots, x_n \in X$ に対し，

$$\exists \varphi \in \mathcal{H}_k \quad \text{s.t.} \quad \varphi(x_i) \neq \varphi(x_j) \quad (i \neq j)$$

が成り立つとき，$\exp k(x, y)$ は狭義正定値核．

狭義正定値核の構成法 4

定理 (Kuwahara-S)

$\mathbb{D} = \{\lambda \in \mathbb{C} : |\lambda| < 1\}$ **とし，** $\varphi : \mathbb{D} \to \mathbb{D}$ **は正則とする．**
$\varphi(z) \neq e^{i\theta} z$ **のとき，**

$$k(z, w) = \exp\left(t \frac{1 - \overline{\varphi(w)}\varphi(z)}{1 - \overline{w}z} \right) \quad (t > 0)$$

は $\mathbb{D}$ **上の狭義正定値核．**

狭義正定値核の構成法 4

定理 (Kuwahara-S)

$\mathbb{D} = \{\lambda \in \mathbb{C} : |\lambda| < 1\}$ **とし，** $\varphi : \mathbb{D} \to \mathbb{D}$ **は正則とする．**
$\varphi(z) \neq e^{i\theta} z$ **のとき，**

$$k(z,w) = \exp\left(t \frac{1 - \overline{\varphi(w)}\varphi(z)}{1 - \overline{w} z} \right) \quad (t > 0)$$

は $\mathbb{D}$ **上の狭義正定値核．**

Acknowledgement

In the early version, we assumed a condition on the singular part of φ. With help from the referee, it has been removed.

狭義正定値核の構成法 4

定理 (Kuwahara-S)

$\mathbb{D} = \{\lambda \in \mathbb{C} : |\lambda| < 1\}$ **とし，** $\varphi : \mathbb{D} \to \mathbb{D}$ **は正則とする．**
$\varphi(z) \neq e^{i\theta} z$ **のとき，**

$$k(z, w) = \exp\left(t \frac{1 - \overline{\varphi(w)}\varphi(z)}{1 - \overline{w}z} \right) \quad (t > 0)$$

は $\mathbb{D}$ **上の狭義正定値核．**

Acknowledgement

In the early version, we assumed a condition on the singular part of φ. With help from the referee, it has been removed.

系

Segal-Bargmann **核** $k(z, w) = e^{\overline{w}z}$ **は** $\mathbb{C}$ **上の狭義正定値核．**