Reproducing kernel Hilbert C^*-module の データ解析への応用

NTT ネットワーク基盤技術研究所 /
慶應義塾大学大学院 理工学研究科 基礎理工学専攻
橋本悠香 (Yuka HASHIMOTO)

概要

RKHM (再生核 Hilbert C*加群) は RKHS (再生核 Hilbert 空間) の一般化であり，C^* 代数に値を持つ内積の構造を持つ．RKHS は，その表現能力の高さと計算可能性から，データ解析への応用がさかんに研究されてきた．しかし，RKHM はこれまでに理論的な研究がメインであり，データ解析の枠組みで RKHM が用いられたケースは非常に少ない．一方で，C^* 代数に値を持つ関数の近似など，RKHM の応用可能性は広い．そこで，本稿では，RKHM をデータ解析へ応用するための基本的な性質を示す．

1　導入

1.1　再生核 Hilbert 空間 (RKHS)

再生核 Hilbert 空間（RKHS）は，データの非線形性や高次モーメントを扱うために用いられてきた [6, 7]．ここでは，RKHS の基礎について述べる．

$\mathcal{X}$ を，空でない集合とする．$\mathcal{X}$ はデータの集合に対応する．RKHS は，正定値カーネルと呼ばれる複素数値関数から構成される．

定義 1.1（正定値カーネル）　関数 $\tilde{k}:\mathcal{X}\times\mathcal{X}\to\mathbb{C}$ が以下の 2 条件を満たすとき，**正定値カーネル**と呼ばれる．

1. $x,y\in\mathcal{X}$ に対して，$\tilde{k}(x,y)=\overline{\tilde{k}(y,x)}$,
2. $n\in\mathbb{N}$，$\alpha_i\in\mathbb{C}$，$x_i\in\mathcal{X}$ に対して，$\sum_{i,j=1}^{n}\overline{\alpha_i}\alpha_j\tilde{k}(x_i,x_j)\geq 0$.

写像 $\tilde{\phi}:\mathcal{X}\to\mathbb{C}^{\mathcal{X}}$ を，$\tilde{\phi}(x)=\tilde{k}(\cdot,x)$ により定義する．これを用いて以下の関数空間を定義する．

$$\mathcal{H}_{\tilde{k},0}:=\left\{\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\tilde{\phi}(x_i)\,\middle|\,n\in\mathbb{N},\ \alpha_i\in\mathbb{C},\ x_i\in\mathcal{X}\right\}.$$

さらに，写像 $\langle\cdot,\cdot\rangle_{\mathcal{H}_{\tilde{k}}}:\mathcal{H}_{\tilde{k},0}\times\mathcal{H}_{\tilde{k},0}\to\mathbb{C}$ を以下のように定義する．

$$\left\langle\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\tilde{\phi}(x_i),\sum_{j=1}^{l}\beta_j\tilde{\phi}(y_j)\right\rangle_{\mathcal{H}_{\tilde{k}}}:=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{l}\overline{\alpha_i}\beta_j\tilde{k}(x_i,y_j).$$

定義 1.1 より，$\langle\cdot,\cdot\rangle_{\mathcal{H}_{\tilde{k}}}$ は well-defined で，内積の性質を満たし，さらに，$v \in \mathcal{H}_{\tilde{k},0}$ と $x \in \mathcal{X}$ に対して再生性

$$\langle \tilde{\phi}(x), v\rangle_{\mathcal{H}_{\tilde{k}}} = v(x),$$

を満たすことが示せる．

空間 $\mathcal{H}_{\tilde{k},0}$ の完備化は $\tilde{k}$ に関する**再生核** ***Hilbert*** **空間**（*RKHS*）と呼ばれ，本稿では $\mathcal{H}_{\tilde{k}}$ と表す．内積 $\langle\cdot,\cdot\rangle_{\mathcal{H}_{\tilde{k}}}$ は $\mathcal{H}_{\tilde{k}}$ に連続に拡張され，写像 $\mathcal{H}_{\tilde{k}} \ni v \mapsto (x \mapsto \langle\tilde{\phi}(x), v\rangle_{\mathcal{H}_{\tilde{k}}}) \in \mathbb{C}^{\mathcal{X}}$ は単射であることが示せる．よって，$\mathcal{H}_{\tilde{k}}$ は $\mathbb{C}^{\mathcal{X}}$ の部分集合で再生性を満たす．さらに，Moore–Aronszajn の定理 [1] から，$\mathcal{H}_{\tilde{k}}$ は一意に定まることが示せる．

写像 $\tilde{\phi}$ は，データを，一般には無限次元の Hilbert 空間 $\mathcal{H}_{\tilde{k}}$ に移す写像で，**特徴写像**と呼ばれる．データの空間は有限次元であることが多いが RKHS $\mathcal{H}_{\tilde{k}}$ は無限次元の空間であるため，データの非線形な振る舞いを，ϕ により，$\mathcal{H}_{\tilde{k}}$ 上の線形な振る舞いに変換することができる [7].

1.2　C^* 代数・Hilbert C^* 加群

C^* 代数，C^* 加群はそれぞれ，複素数の空間 $\mathbb{C}$，ベクトル空間の一般化になっている．本稿では，C^* 代数を $\mathcal{A}$ により表し，C^* 加群を $\mathcal{M}$ により表す．以下で見るように，複素数に関する多くの概念は $\mathcal{A}$ に拡張される．

定義 1.2（C^* 代数）　集合 $\mathcal{A}$ が以下の条件を満たす時，C^* **代数**と呼ばれる．

1. $\mathcal{A}$ は $\mathbb{C}$ 上の代数であり，全単射な写像 $(\cdot)^* : \mathcal{A} \to \mathcal{A}$ が存在し，$\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ と $c, d \in \mathcal{A}$ に対して以下を満たす．* を，共役と呼ぶ．
   - $(\alpha c + \beta d)^* = \overline{\alpha}c^* + \overline{\beta}d^*$,　• $(cd)^* = d^*c^*$,　• $(c^*)^* = c$.
2. $\mathcal{A}$ はノルム $\|\cdot\|_{\mathcal{A}}$ によるノルム空間で，$c, d \in \mathcal{A}$ に対して $\|cd\|_{\mathcal{A}} \le \|c\|_{\mathcal{A}}\|d\|_{\mathcal{A}}$ が成立する．さらに，$\mathcal{A}$ はノルム $\|\cdot\|_{\mathcal{A}}$ に関して完備である．
3. $c \in \mathcal{A}$ に対して，$\|c^*c\|_{\mathcal{A}} = \|c\|_{\mathcal{A}}^2$ が成立する．

本稿では，C^* 代数の中でも特に von Neumann 代数に焦点を当てる．von Neumann 代数に対しては，Riesz の表現定理 [8] や直交補空間の概念 [5, Proposition 2.5.4] が成立するためである．

定義 1.3（von Neumann 代数）　C*代数 $\mathcal{A}$ がある Banach 空間の双対空間と同型であるとき，$\mathcal{A}$ は *von Neumann* **代数**と呼ばれる．

例 1.4　von Neumann 代数の重要な例は，コンパクトな測度空間 Ω 上の複素数値 L^∞ 関数の空間 $L^\infty(\Omega)$ と，Hilbert 空間 $\mathcal{W}$ 上の有界線形作用素の空間 $\mathcal{B}(\mathcal{W})$ である．

1. $\mathcal{A} = L^\infty(\Omega)$ とすると，$c, d \in \mathcal{A}$ の積は $(cd)(t) = c(t)d(t)$ $(t \in \Omega)$，共役は $c(t) = \overline{c(t)}$, ノルムは L^∞ ノルムにより表される．
2. $\mathcal{A} = \mathcal{B}(\mathcal{W})$ とすると，積は作用素同士の積（合成），共役は随伴，ノルムは作用素ノルムにより表される．

C^* 代数において，「正」は重要な概念のひとつである．

定義 1.5（正） C^* 代数 $\mathcal{A}$ の元 c に対して，ある $d \in \mathcal{A}$ が存在して $c = d^*d$ が成立するとき，c は**正**であると呼ばれる．$c, d \in \mathcal{A}$ に対して，$d - c$ が正であるとき $c \leq_{\mathcal{A}} d$ と表す．

例 1.6
1. $\mathcal{A} = L^\infty(\Omega)$ に対して，$c \in \mathcal{A}$ が正であることは，任意の $t \in \Omega$ に対して $c(t) \geq 0$ であることと同値である．
2. $\mathcal{A} = \mathcal{B}(\mathcal{W})$ に対して，正は，作用素の半正定値と一致する．

正の概念は，$\mathcal{A}$ における半順序を誘導する．これにより，$\mathcal{A}$ における最適化問題を考えることができる．

定義 1.7（上限・下限）
1. $\mathcal{A}$ の部分集合 $\mathcal{S}$ に対して，$a \in \mathcal{A}$ が順序 $\leq_{\mathcal{A}}$ に関する**上界**であるとは，任意の $d \in \mathcal{S}$ に対して $d \leq_{\mathcal{A}} a$ が成立することである．このとき，$c \in \mathcal{A}$ が $\mathcal{S}$ の**上限**であるとは，$\mathcal{S}$ の任意の上界 a に対して $c \leq_{\mathcal{A}} a$ が成立することである．
2. $\mathcal{A}$ の部分集合 $\mathcal{S}$ に対して，$a \in \mathcal{A}$ が順序 $\leq_{\mathcal{A}}$ に関する**下界**であるとは，任意の $d \in \mathcal{S}$ に対して $a \leq_{\mathcal{A}} d$ が成立することである．このとき，$c \in \mathcal{A}$ が $\mathcal{S}$ の**下限**であるとは，$\mathcal{S}$ の任意の下界 a に対して $a \leq_{\mathcal{A}} c$ が成立することである．

ここで，$\mathcal{A}$ 上の C^* 加群を導入する．C^* 加群はベクトル空間の一般化になっている．

定義 1.8（（右）C^* 加群） $\mathcal{M}$ を演算 $+$ に関する abel 群とする．$c, d \in \mathcal{A}$ と $u, v \in \mathcal{M}$ に対して，以下を満たす演算 $\cdot : \mathcal{M} \times \mathcal{A} \to \mathcal{M}$ が定義できるとき，$\mathcal{M}$ を（右）C^* 加群という．

1. $(u + v) \cdot c = u \cdot c + v \cdot c$,
2. $u \cdot (c + d) = u \cdot c + u \cdot d$,
3. $u \cdot (cd) = (u \cdot d) \cdot c$,
4. $u \cdot 1_{\mathcal{A}} = u$.

演算 $u \cdot c$ はしばしば，uc と表される．

1.3 Hilbert C^* 加群

Hilbert C^* 加群は，Hilbert 空間の一般化である．ここでは，まず C^* 代数 $\mathcal{A}$ に値を持つ内積を考え，その上で Hilbert C^* 加群を定義する．

定義 1.9（$\mathcal{A}$ 値内積） 写像 $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{M}} : \mathcal{M} \times \mathcal{M} \to \mathcal{A}$ が $u, v, p \in \mathcal{M}$ と $c, d \in \mathcal{A}$ に対して次の条件を満たす時，**$\mathcal{A}$ 値内積**という．

1. $\langle u, vc + pd \rangle_{\mathcal{M}} = \langle u, v \rangle_{\mathcal{M}} c + \langle u, p \rangle_{\mathcal{M}} d$,
2. $\langle v, u \rangle_{\mathcal{M}} = \langle u, v \rangle_{\mathcal{M}}^*$,
3. $\langle u, u \rangle_{\mathcal{M}} \geq_{\mathcal{A}} 0$,
4. $\langle u, u \rangle_{\mathcal{M}} = 0$ ならば $u = 0$.

定義 1.10（$\mathcal{A}$ 値絶対値とノルム） $u \in \mathcal{M}$ に対して，**$\mathcal{A}$ 値絶対値** $|u|_{\mathcal{M}}$ を，$a^2 = \langle u, u \rangle_{\mathcal{M}}$ を満たす

一意な正な $a \in \mathcal{A}$ により定める．また，$\mathcal{M}$ 上の（実数値）ノルム $\|\cdot\|_{\mathcal{M}}$ を $\|u\|_{\mathcal{M}} = \big\||u|_{\mathcal{M}}\big\|_{\mathcal{A}}$ により定める．

定義 1.11（Hilbert C^* 加群） $\mathcal{M}$ を $\mathcal{A}$ 上の右 C^* 加群で，定義 1.9 の $\mathcal{A}$ 値内積の構造を持つとする．$\mathcal{M}$ がノルム $\|\cdot\|_{\mathcal{M}}$ に関して完備であるとき，$\mathcal{M}$ を $\mathcal{A}$ 上の *Hilbert* C^* **加群**，または，*Hilbert* $\mathcal{A}$ **加群**と呼ぶ．

Hilbert 空間と同様，$\mathcal{A}$ 知内積に関する Cauchy–Schwarz の不等式が成立する [4, Proposition 1.1]．

補題 1.12（Cauchy–Schwarz 不等式） $u, v \in \mathcal{M}$ に対して，以下が成立する．

$$|\langle u, v\rangle_{\mathcal{M}}|_{\mathcal{A}}^2 \ \leq_{\mathcal{A}} \|u\|_{\mathcal{M}}^2 \langle v, v\rangle_{\mathcal{M}}.$$

内積に付随する重要な性質として，正規直交性がある．正規直交基底の構成により最小化問題を解くことが可能となるため，正規直交性はデータ解析においても重要な役割を果たす．

定義 1.13（正規） $q \in \mathcal{M}$ が**正規**であるとは，$0 \neq \langle q, q\rangle_{\mathcal{M}} = \langle q, q\rangle_{\mathcal{M}}^2$ を満たすことである．

定義 1.14（正規直交系・正規直交基底） $\mathcal{I}$ を，添え字集合とする．集合 $\mathcal{S} = \{q_i\}_{i \in \mathcal{I}} \subseteq \mathcal{M}$ が $\mathcal{M}$ の**正規直交系**とは，任意の $i \in \mathcal{I}$ に対して q_i は正規で，$i \neq j$ に対して $\langle q_i, q_j\rangle_{\mathcal{M}} = 0$ であることである．$\mathcal{S}$ が正規直交系でかつ，$\mathcal{M}$ で稠密であるとき，$\mathcal{S}$ を**正規直交基底**と呼ぶ．

2　再生核 Hilbert C^* 加群 (RKHM) のデータ解析への応用

2.1　再生核 Hilbert C^* 加群 (RKHM)

ここでは，例えば [2] などで議論されている，再生核 Hilbert C^* 加群 (RKHM) に関してまとめる．RKHM を構成するために，RKHS と同様正定値カーネルを定義する．

定義 2.1（$\mathcal{A}$ 値正定値カーネル） $\mathcal{A}$ に値を取る写像 $k\colon\ \mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathcal{A}$ が以下の 2 条件を満たすとき，$\mathcal{A}$ **値正定値カーネル**と呼ばれる．

1. $x, y \in \mathcal{X}$ に対して，$k(x, y) = k(y, x)^*$,
2. $n \in \mathbb{N}$, $c_i \in \mathcal{A}$, $x_i \in \mathcal{X}$ に対して，$\sum_{i,j=1}^n c_i^* k(x_i, x_j) c_j \geq_{\mathcal{A}} 0$.

写像 $\phi : \mathcal{X} \to \mathcal{A}^{\mathcal{X}}$ を，k に関する**特徴写像**，つまり，$x \in \mathcal{X}$ に対して $\phi(x) = k(\cdot, x)$ で定義する．RKHS と同様，これを用いて C^* 代数 $\mathcal{A}$ に値を持つ関数により構成される以下の加群を定義する．

$$\mathcal{M}_{k,0} := \left\{ \sum_{i=1}^n \phi(x_i) c_i \,\middle|\, n \in \mathbb{N},\ c_i \in \mathcal{A},\ x_i \in \mathcal{X} \right\}.$$

さらに，$\mathcal{A}$ 値写像 $\langle\cdot,\cdot\rangle_{\mathcal{M}_k} : \mathcal{M}_{k,0} \times \mathcal{M}_{k,0} \to \mathcal{A}$ を以下のように定義する．

$$\left\langle \sum_{i=1}^n \phi(x_i) c_i, \sum_{j=1}^l \phi(y_j) d_j \right\rangle_{\mathcal{M}_k} := \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^l c_i^* k(x_i, y_j) d_j.$$

定義 2.1 より，$\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{M}_k}$ は well-defined で，定義 1.9 で定義される $\mathcal{A}$ 値内積の性質をみたす．さらに，$v \in \mathcal{M}_{k,0}$ と $x \in \mathcal{X}$ に対して再生性

$$\langle \phi(x), v \rangle_{\mathcal{M}_k} = v(x),$$

を満たすことが示せる．

空間 $\mathcal{M}_{k,0}$ の完備化は k に関する**再生核 Hilbert $\mathcal{A}$ 加群** *(RKHM)* と呼ばれ，本稿では $\mathcal{M}_k$ と表す．RKHS の場合と同様，以下の基礎的な性質が成り立つ．

命題 2.2　$\mathcal{M}_{k,0}$ 上の写像 $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{M}_k}$ は $\mathcal{M}_k$ に連続に拡張され，写像 $\mathcal{M}_k \ni v \mapsto (x \mapsto \langle \phi(x), v \rangle_{\mathcal{M}_k}) \in \mathcal{A}^{\mathcal{X}}$ は単射である．よって，$\mathcal{M}_k$ は $\mathcal{A}^{\mathcal{X}}$ の部分集合とみなせ，さらに再生性を満たす．

命題 2.3　$\mathcal{A}$ 上の C^* 加群 $\mathcal{M}$ と写像 $\psi : \mathcal{X} \to \mathcal{M}$ は以下の条件を満たすとする．

1. $x, y \in \mathcal{X}$ に対して，$\langle \psi(x), \psi(y) \rangle_{\mathcal{M}} = k(x, y)$,
2. $\overline{\{\sum_{i=1}^{n} \psi(x_i) c_i \mid \ x_i \in \mathcal{X}, \ c_i \in \mathcal{A}\}} = \mathcal{M}$.

このとき，一意な $\mathcal{A}$ 線形かつ全単射な写像 $\Psi : \mathcal{M}_k \to \mathcal{M}$ が存在して，内積を保ち，以下の可換図式を満たす．

$$\begin{tikzcd} \mathcal{M}_k \arrow[rr, "\Psi"] & & \mathcal{M} \\ & \mathcal{X} \arrow[ul, "\phi"] \arrow[ur, "\psi"'] \arrow[u, phantom, "\circlearrowleft"] & \end{tikzcd}$$

2.2　データ解析への応用に関連する性質

ここでは，RKHM や Hilbert C^* 加群をデータ解析に用いる上で基礎となる性質を示す．以降では，次の仮定を課す．

仮定 2.4　$\mathcal{A}$ は，単位的な von Neumann 代数とする．

まず，直交射影作用素に関する最小性の性質を示す．本性質は Hilbert 空間では基本的な性質であるが，それが Hilbert C^* 加群に一般化できること表している．

定理 2.5　$\mathcal{I}$ を添え字集合とする．$\{q_i\}_{i \in \mathcal{I}}$ を $\mathcal{M}$ の正規直交系とし，$\mathcal{V}$ を，$\{q_i\}_{i \in \mathcal{I}}$ により張られる加群の完備化とする．$u \in \mathcal{M}_k$ に対して，$P : \mathcal{M} \to \mathcal{V}$ を，$Pu := \sum_{i \in \mathcal{I}} q_i \langle q_i, u \rangle_{\mathcal{M}}$ により定義される直交射影作用素とする．このとき，Pu は，以下の最小化問題の一意な解である．ただし，最小値は，$\mathcal{A}$ における半順序に関するものである．

$$\min_{v \in \mathcal{V}} |u - v|_{\mathcal{M}}^2.$$

定理 2.5 は，直交射影された $\mathcal{M}$ の元は，もとの元との差を $\mathcal{V}$ で最小にすることを表している．これにより，Hilbert 空間上の，直交射影作用素を用いた方法を Hilbert C^* 加群に拡張することができる．

次に，RKHM での Representer 定理を示す．Representer 定理は，近似誤差に関する最小化問題

の解が，与えられたデータのみで表せるという点で，重要な役割を果たす．RKHS での Representer 定理は広く利用されている [9] が，その定理が RKHM に拡張できることを示す．

定理 2.6（Representer 定理） $x_1,\ldots,x_n \in \mathcal{X}$，$a_1,\ldots,a_n \in \mathcal{A}$ とする．$h:\mathcal{X}\times\mathcal{A}^2 \to \mathcal{A}_+$ を誤差関数とし，$g:\mathcal{A}_+ \to \mathcal{A}_+$ は $c \le_{\mathcal{A}} d$ に対して $g(c) \le_{\mathcal{A}} g(d)$ を満たすとする．ただし，$\mathcal{A}_+$ は，正である $\mathcal{A}$ の元全てから成る集合である．このとき，$\sum_{i=1}^n h(x_i, a_i, u(x_i)) + g(|u|_{\mathcal{M}_k})$ を最小にする任意の $u \in \mathcal{M}_k$ は，ある $c_1,\ldots,c_n \in \mathcal{A}$ を用いて $\sum_{i=1}^n \phi(x_i)c_i$ という形で表される．

参考文献

[1] N. Aronszajn. Theory of reproducing kernels. *Transactions of the American Mathematical Society*, 68:337–404, 1950.

[2] J. Heo. Reproducing kernel Hilbert C^*-modules and kernels associated with cocycles. *Journal of Mathematical Physics*, 49(10):103507, 2008.

[3] S. Itoh. Reproducing kernels in modules over C^*-algebras and their applications. *Journal of Mathematics in Nature Science*, 37:1–20, 1990.

[4] E. C. Lance. *Hilbert C^*-modules – a toolkit for operator algebraists. London Mathematical Society Lecture Note Series; Volume 210.* Cambridge University Press, 1995.

[5] V. M. Manuilov and E. V. Troitsky. Hilbert C^* and W^*-modules and their morphisms. *Journal of Mathematical Sciences*, 98(2):137–201, 2000.

[6] S. Saitoh and Y. Sawano. *Theory of reproducing kernels and applications.* Springer Singapore, 2016.

[7] B. Schölkopf and A. J. Smola. *Learning with kernels: Support vector machines, regularization, optimization, and beyond.* MIT Press, Cambridge, 2001.

[8] M. Skeide. Generalised matrix C^*-algebras and representations of Hilbert modules. *Mathematical Proceedings of the Royal Irish Academy*, 100A(1):11–38, 2000.

[9] B. Schölkopf, R. Herbrich, and A. J. Smola. A generalized representer theorem. *Computational Learning Theory. Lecture Notes in Computer Science*, 2111:416–426, 2001.