作用素のベクトルへの作用に関する Krylov 部分空間法

NTT ネットワークサービスシステム研究所 /
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

近年，時系列データ解析の手法のひとつとして，データが非線形力学系から生じたものと考え，その力学系の時間発展を表す線形作用素（Perron-Frobenius 作用素）を推定することで解析を行う方法が注目を集めている．Perron-Frobenius 作用素は，Hilbert 空間上の線形作用素として定義されるため，これを推定するための Krylov 部分空間法が利用できる．一般的には，線形作用素をあるベクトルへ作用させたものを Krylov 部分空間上で近似する問題となる．本稿では，Krylov 部分空間法として Shift-invert Arnoldi 法を適用した場合の収束性解析を行う．

本稿は慶應義塾大学の野寺隆氏との共同研究 [1] に基づく．

1 序論

Krylov 部分空間法は，線形作用素の振る舞いを近似する方法として様々な研究が行われてきた．Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上の線形作用素 A とベクトル $v \in \mathcal{H}$ に対して，m 次元 Krylov 部分空間 $\mathcal{K}_m(A, v)$ は以下のように定義される．

$$\mathcal{K}_m(A, v) = \mathrm{Span}\{v, Av, \ldots, A^m v\}$$

ただし，$\{v, Av, \ldots, A^m v\}$ は一次独立であるとする．

一方，近年，時系列データ解析の手法のひとつに，データが非線形力学系から生じたものと考え，力学系の時間発展を表す Perron-Frobenius 作用素を推定する方法が注目を集めている．例えば，状態空間 $\mathcal{X}$ 上の離散力学系 $x_{t+1} = h(x_t)$ に対する Perron-Frobenius 作用素 K は，RKHS と呼ばれる無限次元 Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上の線形作用素として，次式のように定義できる [2, 3]．

$$K\phi(x) = \phi(h(x))$$

ただし，$\phi : \mathcal{X} \to \mathcal{H}$ は特徴写像と呼ばれ，通常，有限次元空間である $\mathcal{X}$ を無限次元空間 $\mathcal{H}$ へ移すものである．Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ の元 $\phi(x)$ と $\phi(y)$ の内積は positive definite kernel と呼ばれる関数により，厳密に計算が可能となる．また，力学系 $x_{t+1} = h(x_t)$ から生じた観測データ $x_0, \ldots, x_{m-1}$ に対して，$\phi(x_0), \phi(x_1) = K\phi(x_0), \ldots, \phi(x_{m-1}) = K^{m-1}\phi(x_0)$ が張る空間 $\mathcal{K}_m(K, \phi(x_0))$ は，Krylov 部分空間となる．このため，無限次元空間上で定義された Perron-Frobenius 作用素 K を推定するための Krylov 部分空間法が，与えられた有限個のデータのみから実行可能となる [2, 4]．すなわち，ある時刻における観測データから，将来の時刻に観測されるであろうデータ予測に利用できる．これは，観測データ z に対して，作用素ベクトル積 $K^n\phi(z)$ を $\mathcal{K}_m(K, \phi(x_0))$ 上で近似する問題となる．

Perron-Frobenius 作用素 K は非有界になる例も知られており [5]，その場合，空間 $\mathcal{K}_m(K, \phi(x_0))$ を用いる方法（Arnoldi 法）は収束性が保証されない．そこで，K の代わりに有界作用素 $(\gamma I - K)^{-1}$ に対する Kryov 部分空間を構成する Shift-invert Arnoldi 法が提案されている [4]．ただし，γ は，K のスペクトル集合に含まれない複素数である．本稿では，作用素ベクトル積の Shift-invert Arnoldi 法による近似の収束性解析を行う．

2　作用素ベクトル積のための Shift-invert Arnoldi 法

$\mathcal{H}$ を可分な Hilbert 空間とし，K を $\mathcal{H}$ 上の線形作用素，$v \in \mathcal{H}$ とする．本節では，自然数 n に対して，$K^n v$ を近似する Shift-invert Arnoldi 法 [4] を考える．γ を K のスペクトル集合に含まれない複素数，$Z = (\gamma I - K)^{-1}$ とし，初期ベクトル $u_0 \in \mathcal{H}$，$i = 1, \ldots, m$ に対して，$u_i = Z u_{i-1}$ とする．QR 分解により $u_0, \ldots, u_{m-1}$ を正規直交化し，$[u_0, \ldots, u_{m-1}] = Q_m R_m$ を満たす $Q_m : \mathbb{C}^m \to \mathcal{H}$，$R_m \in \mathbb{C}^{m \times m}$ を求める．ただし，Q_m は，正規直交基底 $\{q_0, \ldots, q_{m-1}\}$ により，$Q_m = [q_0, \ldots, q_{m-1}]$ となる．線形作用素 $Q_m Q_m^*$ は，$\mathcal{H}$ から $u_0, \ldots, u_{m-1}$ の張る空間（Krylov 部分空間）への射影作用素になる．よって，$\tilde{L}_m = Q_m^* Z Q_m$ とすると，$\tilde{L}_m$ は，Z を Krylov 部分空間へ射影した作用素の行列表現で，R_m が可逆ならば，次式が得られる．

$$\tilde{L}_m = Q_m^* [u_1, \ldots, u_m] R_m^{-1}$$

Shift-invert Arnoldi 法による $K^n v$ の近似は，$\tilde{L}_m$ が可逆な時，次式で与えられる．

$$K^n v \approx Q_m f(\tilde{L}_m) Q_m^* v := a_m^{\mathrm{SIA}} \tag{1}$$

ただし，$f(x) = (\gamma - x^{-1})^n$ である．

3　収束性解析

本節では，Shift-invert Arnoldi 法による近似 (1) の収束性解析を行う．線形作用素 K が非有界であるとき，0 は Z のスペクトルである．一方で，f は 0 において解析的ではないので，$f(\tilde{L}_m)$ を K の近似と考えて直接的に解析するのは難しい．そこで，f の代わりに，0 において解析的な関数 $g(x) = x^n(\gamma x - 1)^{-n}$ を用いる．ベクトル $K^n v$ の近似 a_m の残差を $\mathrm{res}(a_m) = \|K^{-n} a_m - v\|$ と定める．Krylov 部分空間を修正し，$w_0 \in \mathcal{H}$ に対して，$Z^{m-n-1} w_0, \ldots, Z w_0, w_0, K^{-1} w_0, \ldots, K^{-n} w_0$ が張る空間 $\mathcal{V}$ 上での Shift-invert Arnoldi 法を考える．残差の $\mathcal{V}$ 上の最小値を r_m とすると，定理 3.1 を得る．ただし，$W(Z)$ は Z の値域を表し，$\rho > 0$ と $r > \rho$ に対して $\overline{\mathbb{C}} \backslash W(Z)$ から $\overline{\mathbb{C}} \backslash \{|x| \le \rho\}$ への等角写像 α を用いて，Γ_r を $\alpha = r$ の等高線の内部とする．さらに，$\|f\|_\infty = \sup_{x \in \Gamma_r} |f(x)|$ と定めることにする．

定理 3.1　$m \geq 2n+1$ とする．また，0 は K のスペクトル集合に含まれないとする．n 次 多項式 q_n と $m-n-1$ 次多項式 $\tilde{q}_{m-n-1}$ を，$q_n(K^{-1}) w_0 + \tilde{q}_{m-n-1}(Z) w_0 = a_m^{\mathrm{SIA}}$ により定める．関数 g は Γ_r で解析的とし，ある $C > 0$ が存在して $\|q_n(K^{-1}) w_0\| \leq C$ を満たすものとする．このとき，ある

$C' > 0$ が存在して，a_m^{SIA} の残差と残差の最小値 r_m との差は，次式のように評価できる．

$$\|\operatorname{res}(a_m^{\mathrm{SIA}}) - r_m\| \le C' \frac{(\rho/r)^m}{1-\rho/r}$$

残差の最小値 r_m は m の増加と共に減少していくため，m を十分大きくとれば，a_m^{SIA} の残差は m の増加とともに減少することになる．

4　結 論

本稿では，作用素ベクトル積の Shift-invert Arnoldi 法による近似の収束性解析を行い，残差が Krylov 部分空間の次元の増加とともに減少していくことを示した．

参考文献

[1] Hashimoto, Y. and Nodera, T., Krylov subspace methods for estimating operator-vector multiplications in Hilbert spaces, Japan J. Indust. Appl. Math. Vol. 38 (2021) 781–803.

[2] Kawahara, Y., Dynamic Mode Decomposition with Reproducing Kernels for Koopman Spectral Analysis, In NeurIPS 2016 (2016) 911–919.

[3] Klus, S., Schuster, I., and Muandet, K, Eigendecompositions of Transfer Operators in Reproducing Kernel Hilbert Spaces, J. Nonlinear. Sci. Vol. 30 (2020) 283–315.

[4] Hashimoto, Y., Ishikawa, I., Ikeda, M., Matsuo, Y., and Kawahara, Y., Krylov Subspace Method for Nonlinear Dynamical Systems with Random Noise, JMLR Vol. 21 (2020) 172:1–29.

[5] Ikeda, M., Ishikawa, I., and Sawano, Y., Composition Operators on Reproducing Kernel Hilbert Spaces with Analytic Positive Deinite Functions, arXiv:1911.11992 (2019).