

核函数粗浅的理解

杨航锋

核函数的定义

设 \mathbb{X} 是 \mathbb{R}^n 中的一个子集, 称定义在 $\mathbb{X} \times \mathbb{X}$ 上的函数 $k(x, y)$ 是核函数, 如果存在一个从 \mathbb{X} 到希尔伯特空间(特征空间) \mathbb{H} 的映射 ϕ

$$\phi: x \mapsto \phi(x) \in \mathbb{H}$$

使得对任意的 $x, y \in \mathbb{X}$,

$$k(x, y) = (\phi(x), \phi(y)) = \phi(x)^T \phi(y)$$

都成立。

具体例子

假设 $A = (1, 2)^T$ 、 $B = (3, 4)^T$, 构造一个映射 $\phi(\cdot) = (x_1^2, \sqrt{2}x_1x_2, x_2^2)^T$, 则可知

$$\begin{aligned}\phi(A) &= (1, 2\sqrt{2}, 4)^T \\ \phi(B) &= (9, 12\sqrt{2}, 16)^T\end{aligned}$$

因此通过映射 $\phi(\cdot)$ 将点 A 、 B 从二维平面升维到三维空间。然后计算

$$\begin{aligned}\phi(A)^T \phi(B) &= 1 \times 9 + 2\sqrt{2} \times 12\sqrt{2} + 4 \times 16 \\ &= 9 + 48 + 64 \\ &= 121\end{aligned}$$

上述运算是在映射后的高维空间下做内积, 那么是否能直接在原始的空间中进行相应的运算, 使得低维情况下的运算结果等于高维情况下的运算结果呢? 答案是肯定的可以通过核函数 $k(x, y) = (x^T y)^2$ 来实现

$$\begin{aligned}k(A, B) &= (A^T B)^2 \\ &= (1 \times 3 + 2 \times 4)^2 \\ &= 121\end{aligned}$$

是不是很神奇，低维空间和高维空间居然通过核函数巧妙的联通起来了，这样做最大的优点是避免了维度灾难，也就是说高维空间中的运算计算量很大呈指数级别复杂度，难以解决；低维空间中的运算计算量很小但是两者的最终结果是一致的。例如上述计算过程，高维空间中执行了9次乘法运算和2次加法运算，低维空间中仅执行了3次乘法运算和1次加法运算，要知道这才二维空间映射到三维空间如果映射到 n 维空间呢？

小结

核函数是二元函数，输入是映射之前的两个向量，其输出等价于两个向量映射之后的内积。对于 $\phi(\cdot)$ 你并不需要知道具体对应哪种映射，表达式是什么，你需要知道的是核函数肯定对应于某一种映射 $\phi(\cdot)$ 即可。