Kernel Method 02 The Definition of Positive Kernel Function

Chen Gong

21 November 2019

上一节中，我们已经讲了什么是核函数，也讲了什么是核技巧，以及核技巧存在的意义是什么。我们首先想想，上一小节我们提到的核函数的定义。

对于一个映射 K，我们有两个输入空间 $\mathcal{X} \times \mathcal{X}, \mathcal{X} \in \mathbb{R}^p$，可以形成一个映射 $\mathcal{X} \times \mathcal{X} \mapsto \mathbb{R}$。对于，$\forall\ x, z \in \mathcal{X}$，存在一个映射 $\phi : \mathcal{X} \mapsto \mathbb{R}$，使得 $K(x, z) =< \phi(x), \phi(z) >$。那么这个 $K(\cdot)$，就被我们称为核函数。(<> 代表内积运算)

这既是我们上一节中将的核函数的定义，实际上这个核函数的精准定义，应该是正定核函数。在本小节中，我们将会介绍核函数的精准定义，什么是正定核函数? 并介绍内积和希尔伯特空间 (Hilbert Space) 的定义。这一小节虽然看着会有些枯燥，实际上非常的重要。

1 核函数的定义

核函数的定义，也就是对于一个映射 K，存在一个映射 $\mathcal{X} \times \mathcal{X} \mapsto \mathbb{R}$，对于 $x, z \in \mathcal{X}$ 都成立，则称 $K(x, z)$ 为核函数。

对比一下，我们就会发现，这个定义实际上比我们之前学的定义要简单很多。好像是个阉割版，下面我们来介绍两个正定核的定义方法。

2 正定核的定义

正定核函数的定义有两个，我首先分别进行描述一下：

2.1 第一个定义

现在存在一个映射 $K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \mapsto \mathbb{R}$。对于 $\forall x, z \in \mathcal{X}$。如果存在一个 $\phi : \mathcal{X} \mapsto \mathbb{R}^p$，并且 $\phi(x) \in \mathcal{H}$，使得 $K(x, z) =< \phi(x), \phi(z) >$，那么称 $K(x, z)$ 为正定核函数。

2.2 第二个定义

对于一个映射 $K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \mapsto \mathbb{R}$，对于 $\forall x, z \in \mathcal{X}$，都有 $K(x, z)$。如果 $K(x, z)$ 满足，1. 对称性；2. 正定性；那么称 $K(x, z)$ 为一个正定核函数。

我们来分析一个，首先什么是对称性？这个非常的好理解，也就是 $K(x, z) = K(z, x)$。那么什么又是正定性呢？那就是任取 N 个元素，$x_1, x_2, \cdots, x_N \in \mathcal{X}$，对应的 Gram Matrix 是半正定的，其中 Gram Matrix 用 K 来表示为 $K = [K(x_i, x_j)]$。

对于第一个对称性，我们其实非常好理解，不就是内积嘛！有一定数学功底的同学一定知道，内积和距离是挂钩的，距离之间一定是对称的。那么正定性就要好好讨论一下了。我们知道这两个定义之间是等价的，为什么会有正定性呢？我们需要进行证明，这个证明可以被我们描述为：

$$K(x,z) =< \phi(x), \phi(z) > \Longleftrightarrow \text{Gram Matrix 是半正定矩阵}$$

这个等式的证明我们留到下一节再来进行，这里我们首先需要学习一个很重要的概念叫做，希尔伯特空间 ($\mathcal{H}$:Hilbert Space)。小编之前被这个概念搞得头晕，特别还有一个叫再生核希尔伯特空间的玩意，太恶心了。

3 Hilbert Space ($\mathcal{H}$)

Hilbert Space 是一个完备的，可能是无限维的，被赋予内积运算的线性空间。下面我们对这个概念进行逐字逐句的分析。

线性空间：也就是向量空间，这个空间的元素就是向量，向量之间满足加法和乘法的封闭性，实际上也就是线性表示。空间中的任意两个向量都可以由基向量线性表示。

完备的：完备性简单的认为就是对极限的操作是封闭的。我们怎么理解呢？若有一个序列为 $\{K_n\}$，这里强调一下 Hilbert Space 是一个函数空间，空间中的元素就是函数。所以，K_n 就是一个函数。那么就会有：

$$\lim_{n\longrightarrow+\infty} K_n = K \in \mathcal{H} \tag{1}$$

所以，我们理解一下就是会和无限维这个重要的概念挂钩。我理解的主要是 Hilbert Space 在无限维满足线性关系。

内积：内积应该满足三个定义，1. 正定性；2. 对称性；3. 线性。下面我们逐个来进行解释：

1. 对称性：也就是 $f,g\in\mathcal{H}$，那么就会有 $<f,g>=<g,f>$。其中，f,g 是函数，我们可以认为 Hilbert Space 是基于函数的，向量是一个特殊的表达。其实，也就是函数可以看成一个无限维的向量。大家在这里是不是看到了无限维和完备性的引用，他们的定义之间是在相互铺垫的。

2. 正定性：也就是 $<f,f>\leq 0$，等号当且仅当 $f=0$ 是成立。

3. 线性也就是满足：$<r_1f_1+r_2f_2,g>=r_1<f_1,g>+r_2<f_2,g>$。

描述上述三条性质的原因是什么呢？也就是我们要证明一个空间中加入一些运算。如果，判断这个运算是不是内积运算，我们需要知道这个运算满不满足上述三个条件。

现在我们介绍了大致的基本概念了，我们回到这样一个问题，对于正定核我们为什么要有两个定义？这个思想和我们之前学到的 Kernel Trick 非常的类似了，Kernel Trick 跳过了寻找 ϕ 这个过程。因为，直接用定义不好找，$\phi(x)$ 非常的难找，特别是将函数看成一个无限维的向量。这个 $\phi(x)$ 怎么找？找的到个鬼。那么，我们也想跳过这个寻找 $\phi(x)$ 这个过程。那么这就是第二个定义存在的意义，虽然，第二个定义没有第一个定义那么简洁。第二个定义给了我们一个判断核函数的好办法，直接跳过了寻找 $\phi(x)$ 这个过程。那么这两定义之间是否等价？废话，肯定是等价的呀，哈哈哈。那么，我们下一小节中来证明一下。