基于核函数的方法

刘家锋

哈尔滨工业大学

基于核函数的方法

1. 再生核空间
2. 基于核的主成分分析

再生核空间

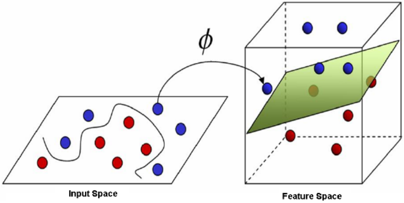
核函数

- **核函数的应用**
  - 核函数是模式识别中常用的一种
  - 应用核函数可以很容易地使用线性方法解决非线性问题
  - 几乎所有线性的流形学习方法都有对应的“核化”版本，如KPCA，KLDA，KICA等等

核函数

- 核机制（Kernel Trick）
  - $\phi(\mathbf{x}):\mathcal{X}\to\mathcal{Z}$，将低维空间$\mathcal{X}$中的矢量$\mathbf{x}$映射为高维空间$\mathcal{Z}$中的矢量$\mathbf{z}$
  - 高维空间中的矢量内积可以由低维空间的**核函数**计算：

$$\kappa(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)=\langle\mathbf{z}_1,\mathbf{z}_2\rangle=\langle\phi(\mathbf{x}_1),\phi(\mathbf{x}_2)\rangle$$



核函数用于SVM

- **线性SVM**

  优化目标：

$$L(\boldsymbol{\alpha}) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j z_i z_j \mathbf{y}_i^t \mathbf{y}_j$$

  判别函数：

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i z_i \mathbf{y}_i^t \mathbf{x} + b$$

核函数用于SVM

- **非线性SVM**

  优化目标：

$$L(\boldsymbol{\alpha}) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j z_i z_j \kappa(\mathbf{y}_i, \mathbf{y}_j)$$

  判别函数：

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i z_i \kappa(\mathbf{y}_i, \mathbf{x}) + b$$

核函数的数学基础

- **再生核希尔伯特空间**
  - 核函数的数学基础来自于泛函中的再生核空间理论（RKHS, Reproducing Kernel Hilbert Space）
  - RKHS本质上是一个函数空间
  - 使用核函数时不需要显示地定义非线性映射$\phi(\mathbf{x}) : \mathcal{X} \to \mathcal{Z}$，但这个映射是存在的
  - 核函数将输入空间$\mathcal{X}$映射到了一个什么样的空间$\mathcal{Z}$？

核函数的数学基础

- **内积空间和Hilbert空间**
  - 内积空间：在矢量空间$\mathcal{X}$上，如果可以定义一个对称的双线性函数，满足
    $$\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle \geq 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{X}$$
    则称$\mathcal{X}$为一个内积空间
  - Hilbert空间：具有可分性和完备性的内积空间

核函数的数学基础

- **平方可积的函数空间**

令$X \subseteq R^d$，平方可积函数空间定义为：

$$\mathcal{F} = L_2(X) = \left\{ f : \int_X f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} < \infty \right\}$$

定义内积：

$$\langle f, g \rangle = \int_X f(\mathbf{x}) g(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

可以证明，平方可积的函数空间是一个Hilbert空间

核函数的数学基础

- 半正定矩阵
  - 半正定矩阵：如果矩阵$\mathbf{M} \in R^{d\times d}$满足

$$\mathbf{x}^t\mathbf{M}\mathbf{x} \geq 0, \quad \forall \mathbf{x} \in R^d$$

    称为半正定矩阵
  - 半正定矩阵的行列式值：$|\mathbf{M}| \geq 0$
  - 半正定矩阵的特征值：$\{\lambda_i \geq 0\}_{i=1,\cdots,d}$
- **Gram矩阵：**
  - 矢量集$S = \{\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_n\}$的Gram矩阵定义为$\mathbf{G}_{ij} = \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \rangle$
  - Gram矩阵是一个实对称矩阵，因此是半正定矩阵

核函数的数学基础

- 有限半正定函数（**Finitely positive semi-definite functions**）
  - 如果函数$\kappa : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \to R$是对称函数
  - 对于$\mathcal{X}$的任意有限子集$S = \{\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_n\} \subset \mathcal{X}$构成的矩阵$\mathbf{K}$为半正定矩阵，$\mathbf{K}_{ij} = \kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$
  - 函数$\kappa(\cdot, \cdot)$称为有限半正定函数

核函数的数学基础

- **Mercer定理**

  令$\kappa : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \to R$为连续函数，当且仅当$\kappa(\cdot, \cdot)$为有限半正定函数时，存在矢量空间$\mathcal{X}$到Hilbert空间$\mathcal{F}$上的映射$\phi : \mathcal{X} \to \mathcal{F}$，满足：

$$\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = \langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{z}) \rangle$$

核函数的数学基础

必要性证明： 因为Gram矩阵是半正定矩阵，必要性是显然的。
充分性证明： 首先构造一个函数空间

$$\mathcal{F} = \left\{ \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \kappa(\mathbf{x}_i, \cdot) : n \in \mathcal{N}, \mathbf{x}_i \in \mathcal{X}, \alpha_i \in R, i = 1, \cdots, n \right\}$$

因为$\forall f, g \in \mathcal{F}$，$af \in \mathcal{F}, (f+g)(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x}) \in \mathcal{F}$，所以$\mathcal{F}$是一个闭集。令$f(\cdot) = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i \kappa(\mathbf{x}_i, \cdot)$，$g(\cdot) = \sum_{j=1}^{n} \beta_j \kappa(\mathbf{x}_j, \cdot)$，定义$\mathcal{F}$上的内积：

$$\langle f, g \rangle = \sum_{i=1}^{l} \sum_{j=1}^{n} \alpha_i \beta_j \kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i g(\mathbf{x}_i) = \sum_{j=1}^{n} \beta_j f(\mathbf{x}_j)$$

显然，$\langle f, g \rangle$是实对称的双线性函数。由于$\kappa(\cdot, \cdot)$为有限半正定函数，因此：

$$\langle f, f \rangle = \sum_{i=1}^{l} \sum_{j=1}^{l} \alpha_i \alpha_j \kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \boldsymbol{\alpha}^t \mathbf{K} \boldsymbol{\alpha} \geq 0$$

所以对$\langle f, g \rangle$的定义符合内积的要求。可以证明这样定义的函数空间$\mathcal{F}$具有完备性和可分性，是一个Hilbert空间。

核函数的数学基础

- 再生核空间（RKHS: Reproducing Kernel Hilbert Space）
  - 由函数$\kappa(\cdot,\cdot)$诱导出的函数空间$\mathcal{F}_\kappa$具有再生性：

$$\langle f, \kappa(\mathbf{x},\cdot)\rangle = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i \kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) = f(\mathbf{x})$$

    $\mathcal{F}_\kappa$称为再生核空间。

  - 核函数$\kappa(\cdot,\cdot)$对应的映射$\phi : \mathcal{X} \to \mathcal{F}$实际上是：

$$\phi(\mathbf{x}) = \kappa(\mathbf{x},\cdot) \in \mathcal{F}_\kappa$$

  - 根据再生性：

$$\langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{z})\rangle = \langle \kappa(\mathbf{x},\cdot), \kappa(\mathbf{z},\cdot)\rangle = \kappa(\mathbf{x},\mathbf{z})$$

核函数的封闭性

- 下列方式得到的函数是核函数
  - $\kappa(\mathbf{x},\mathbf{z}) = \kappa_1(\mathbf{x},\mathbf{z}) + \kappa_2(\mathbf{x},\mathbf{z})$，$\kappa_1$和$\kappa_2$是核函数
  - $\kappa(\mathbf{x},\mathbf{z}) = a\kappa_1(\mathbf{x},\mathbf{z})$，$a \in R^+$
  - $\kappa(\mathbf{x},\mathbf{z}) = \kappa_1(\mathbf{x},\mathbf{z})\kappa_2(\mathbf{x},\mathbf{z})$
  - $\kappa(\mathbf{x},\mathbf{z}) = f(\mathbf{x})f(\mathbf{z})$，$f : \mathcal{X} \to R$
  - $\kappa(\mathbf{x},\mathbf{z}) = \kappa_3\left(\phi(\mathbf{x}),\phi(\mathbf{z})\right)$，$\phi : \mathcal{X} \to R^D$，$\kappa_3$是$R^D \times R^D$上的核函数
  - $\kappa(\mathbf{x},\mathbf{z}) = \mathbf{x}^t\mathbf{B}\mathbf{z}$，$\mathbf{B}$是对称半正定矩阵
  - $\kappa(\mathbf{x},\mathbf{z}) = P\left(\kappa_1(\mathbf{x},\mathbf{z})\right)$，$P(\cdot)$是多项式函数
  - $\kappa(\mathbf{x},\mathbf{z}) = \exp(\kappa_1(\mathbf{x},\mathbf{z}))$

高斯核

可以证明$\kappa(\mathbf{x},\mathbf{z}) = \exp\left(-\frac{||\mathbf{x}-\mathbf{z}||^2}{\sigma^2}\right)$ 是核函数

$\langle \mathbf{x},\mathbf{z}\rangle$是核函数，因此$\kappa_1(\mathbf{x},\mathbf{z})$和$\kappa_2(\mathbf{x},\mathbf{z})$是核函数：

$$\kappa_1(\mathbf{x},\mathbf{z}) = \exp\left(\frac{2\langle \mathbf{x},\mathbf{z}\rangle}{\sigma^2}\right)$$

$$\kappa_2(\mathbf{x},\mathbf{z}) = \exp\left(-\frac{||\mathbf{x}||^2}{\sigma^2}\right)\cdot\exp\left(-\frac{||\mathbf{z}||^2}{\sigma^2}\right)$$

$\kappa(\mathbf{x},\mathbf{z})$也是核函数：

$$\begin{aligned}\kappa(\mathbf{x},\mathbf{z}) &= \exp\left(\frac{2\langle \mathbf{x},\mathbf{z}\rangle}{\sigma^2}\right)\cdot\exp\left(-\frac{||\mathbf{x}||^2}{\sigma^2}\right)\cdot\exp\left(-\frac{||\mathbf{z}||^2}{\sigma^2}\right)\\ &= \exp\left(\frac{2\langle \mathbf{x},\mathbf{z}\rangle}{\sigma^2}-\frac{\langle \mathbf{x},\mathbf{x}\rangle}{\sigma^2}-\frac{\langle \mathbf{z},\mathbf{z}\rangle}{\sigma^2}\right)\\ &= \exp\left(-\frac{||\mathbf{x}-\mathbf{z}||^2}{\sigma^2}\right)\end{aligned}$$

Representer Theorem

- **表示定理**

  令$\mathcal{X}$为非空集合，κ为定义在$\mathcal{X} \times \mathcal{X}$上的核函数，相应的再生核空间$\mathcal{H}_\kappa$。给定单调上升函数$g : [0, \infty) \to R$，训练样本集

$$(\mathbf{x}_1, y_1), \cdots, (\mathbf{x}_n, y_n) \in \mathcal{X} \times R$$

以及任意的经验风险函数

$$E : (\mathcal{X} \times R^2)^n \to R \cup \{\infty\}$$

则下列优化问题的解：

$$f^* = \arg\min_{f \in \mathcal{H}_\kappa} \{E[(\mathbf{x}_1, y_1, f(\mathbf{x}_1)), \cdots, (\mathbf{x}_n, y_n, f(\mathbf{x}_n))] + g(||f||)\}$$

满足：

$$f^*(\cdot) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \kappa(\mathbf{x}_i, \cdot)$$

其中，$\alpha_i \in R, i = 1, \cdots, n$

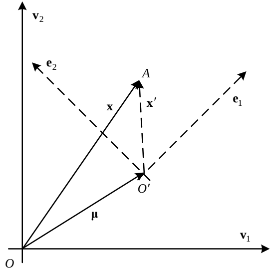
基于核的主成分分析

线性PCA方法回顾

- **线性PCA的目标**

  寻找一组新的基矢量$\{\mathbf{e}_1, \cdots, \mathbf{e}_{d'}\}$，使得样本集$\{\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_n\}$在新的坐标系下表示的误差最小

$$\begin{aligned}\min_{\{\mathbf{e}_i\}} J\left(\{\mathbf{e}_i\}\right) &= \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\left|\left|\mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{x}}_k\right|\right|^2 \\ &= \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\sum_{i=d'+1}^{d}\left\langle \mathbf{x}_k - \boldsymbol{\mu}, \mathbf{e}_i\right\rangle^2\end{aligned}$$

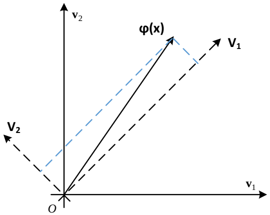


线性PCA方法回顾

- **线性PCA的优化解：**
  - 基矢量$\{\mathbf{e}_i\}$满足：
    $$\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{e}_i = \lambda_i \mathbf{e}_i$$
    其中：
    $$\boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}(\mathbf{x}_k - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_k - \boldsymbol{\mu})^t$$
  - 基矢量$\{\mathbf{e}_i\}$为协方差矩阵$\boldsymbol{\Sigma}$的特征矢量

核化PCA方法

- **KPCA的目标**
  - 将样本集$\{\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_n\}$映射到再生核空间$\mathcal{F}_k$：
    $$\{\phi(\mathbf{x}_1), \cdots, \phi(\mathbf{x}_n)\}$$
    （假设映射之后的样本集均值为0）
  - 在$\mathcal{F}_k$中寻找一组新的基矢量$\{\mathbf{V}_1, \cdots, \mathbf{V}_{d'}\}$，使得样本集在新的坐标系下表示的误差最小
  - 计算矢量$\phi(\mathbf{x})$在$\{\mathbf{V}_1, \cdots, \mathbf{V}_{d'}\}$上的投影



核化PCA方法

- **KPCA的困难**
  - 协方差矩阵的计算：核函数只能计算映射后矢量的内积，无法计算外积

$$\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{y}) \rangle, \quad \mathbf{\Sigma}_{\mathcal{F}_\kappa} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \phi(\mathbf{x}_k) \phi^t(\mathbf{x}_k)$$

  - 特征矢量的计算：$\mathbf{\Sigma}_{\mathcal{F}_\kappa}$的维数为$\infty$
  - **基矢量$\mathbf{V}_i \in \mathcal{F}_\kappa$的表示**
  - $\phi(\mathbf{x})$在基矢量上的投影

核化PCA方法

- **基矢量的表示**

根据**Mercer 定理**，$\mathbf{V}_i \in \mathcal{F}_\kappa$本质上是定义在$\mathcal{X}$上的一个函数(表示为$f_i(\cdot)$)，存在$m, \mathbf{y}_1, \cdots, \mathbf{y}_m \in \mathcal{X}, \alpha_1, \cdots, \alpha_m \in R$使得：

$$f_i(\cdot) = \sum_{l=1}^{m} \alpha_l \kappa(\mathbf{y}_l, \cdot)$$

KPCA的优化目标：（D为特征空间的维数）

$$\begin{aligned} J(\{\mathbf{V}_i\}) &= \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \sum_{i=d'+1}^{D} \langle \phi(\mathbf{x}_k), \mathbf{V}_i \rangle^2 \\ &= \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \sum_{i=d'+1}^{D} \langle \kappa(\mathbf{x}_k, \cdot), f_i(\cdot) \rangle^2 \\ &= \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \sum_{i=d'+1}^{D} f_i^2(\mathbf{x}_k) \quad \text{(核函数的再生性)} \end{aligned}$$

核化PCA方法

- **基矢量的表示**

  结合对基矢量$\{\mathbf{V}_i\}$的单位长度约束，可以构造Lagrange函数：

$$L(\{f_i(\cdot)\}) = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\sum_{i=d'+1}^{D} f_i^2(\mathbf{x}_k) - \sum_{i=1}^{D}\lambda_i\left(||f_i(\cdot)||^2 - 1\right)$$

  根据**表示定理**，基矢量可以表示为：

$$\mathbf{V}_i = f_i(\cdot) = \sum_{k=1}^{n}\alpha_{ik}\kappa(\mathbf{x}_k,\cdot) = \sum_{k=1}^{n}\alpha_{ik}\phi(\mathbf{x}_k)$$

核化PCA方法

- **再生核空间中的优化**

基矢量$\{\mathbf{V}_i\}$的表示代入Lagrange函数：

$$
\begin{aligned}
L(\{\boldsymbol{\alpha}_i\}) &= \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\sum_{i=d'+1}^{D}\left\langle \kappa(\mathbf{x}_k,\cdot), \sum_{l=1}^{n}\alpha_{il}\kappa(\mathbf{x}_l,\cdot)\right\rangle^2 \\
&\quad - \sum_{i=1}^{D}\lambda_i\left(\left\langle \sum_{k=1}^{n}\alpha_{ik}\kappa(\mathbf{x}_k,\cdot), \sum_{l=1}^{n}\alpha_{il}\kappa(\mathbf{x}_l,\cdot)\right\rangle - 1\right) \\
&= \frac{1}{n}\sum_{i=d'+1}^{D}\boldsymbol{\alpha}_i^t\mathbf{K}^t\mathbf{K}\boldsymbol{\alpha}_i - \sum_{i=1}^{D}\lambda_i\boldsymbol{\alpha}_i^t\mathbf{K}\boldsymbol{\alpha}_i
\end{aligned}
$$

其中，$\mathbf{K} = (\kappa(\mathbf{x}_k,\mathbf{x}_l))$称为核矩阵，$\boldsymbol{\alpha}_i = (\alpha_{i1},\cdots,\alpha_{in})^t$ 为基矢量$\mathbf{V}_i$的组合系数矢量

核化PCA方法

- **KPCA的优化解**

计算梯度：

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{\alpha}_i} = \frac{2}{n}\mathbf{K}^t\mathbf{K}\boldsymbol{\alpha}_i - 2\lambda_i\mathbf{K}\boldsymbol{\alpha}_i = \mathbf{0}$$

得到：

$$\mathbf{K}\boldsymbol{\alpha}_i = n\lambda_i\boldsymbol{\alpha}_i$$

$\{\boldsymbol{\alpha}'_1, \cdots, \boldsymbol{\alpha}'_{d'}\}$为核矩阵$\mathbf{K}$的最大$d'$个特征值$\{\lambda'_1, \cdots, \lambda'_{d'}\}$对应的特征矢量，相应的（长度未归一化）基矢量为：

$$\mathbf{V}'_i = \sum_{k=1}^{n} \alpha'_{ik}\kappa(\mathbf{x}_k, \cdot)$$

核化PCA方法

- **归一化基矢量长度**

矢量$\mathbf{V}_i'$的长度平方：

$$\left|\left|\mathbf{V}_i'\right|\right|^2 = \sum_{k,l=1}^{n} \alpha_{ik}'\alpha_{il}'\kappa(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_l) = \boldsymbol{\alpha}_i'^t \mathbf{K}\boldsymbol{\alpha}_i' = \lambda_i' \left|\left|\boldsymbol{\alpha}_i'\right|\right|^2$$

令：

$$\boldsymbol{\alpha}_i = \frac{\boldsymbol{\alpha}_i'}{\sqrt{\lambda_i'}\left|\left|\boldsymbol{\alpha}_i'\right|\right|}$$

则对应的基矢量$\mathbf{V}_i$为单位矢量：

$$\mathbf{V}_i = \sum_{k=1}^{n} \alpha_{ik}\kappa(\mathbf{x}_k, \cdot)$$

核化PCA方法

- **再生核空间中的投影**

  矢量$\phi(\mathbf{x}) = \kappa(\mathbf{x}, \cdot)$在基矢量$\mathbf{V}_i$上的投影：

$$\langle \phi(\mathbf{x}), \mathbf{V}_i \rangle = \left\langle \kappa(\mathbf{x}, \cdot), \sum_{k=1}^{n} \alpha_{ik} \kappa(\mathbf{x}_k, \cdot) \right\rangle = \sum_{k=1}^{n} \alpha_{ik} \kappa(\mathbf{x}_k, \mathbf{x})$$

核化PCA方法

- **再生核空间中的样本中心化**

输入空间的样本均值$\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$，并不能使得特征空间的样本均值$\boldsymbol{\mu}_\kappa$为$\mathbf{0}$：

$$\boldsymbol{\mu}_\kappa = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\phi(\mathbf{x}_k)$$

样本中心化核矩阵$\mathbf{K}'$：

$$\begin{aligned}
\mathbf{K}'_{ij} &= \langle \phi(\mathbf{x}_i) - \boldsymbol{\mu}_\kappa, \phi(\mathbf{x}_j) - \boldsymbol{\mu}_\kappa \rangle \\
&= \left\langle \kappa(\mathbf{x}_i,\cdot) - \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\kappa(\mathbf{x}_k,\cdot), \kappa(\mathbf{x}_j,\cdot) - \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\kappa(\mathbf{x}_k,\cdot) \right\rangle \\
&= \kappa(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j) - \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\kappa(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_k) - \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\kappa(\mathbf{x}_k,\mathbf{x}_j) + \frac{1}{n^2}\sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n}\kappa(\mathbf{x}_k,\mathbf{x}_l)
\end{aligned}$$

写成矩阵形式：（$\mathbf{1}$为元素均为1的$n \times n$方阵）

$$\mathbf{K}' = \mathbf{K} - \frac{1}{n}\mathbf{1}\cdot\mathbf{K} - \frac{1}{n}\mathbf{K}\cdot\mathbf{1} + \frac{1}{n^2}\mathbf{1}\cdot\mathbf{K}\cdot\mathbf{1}$$

核化PCA方法

Algorithm 1 KPCA: Kernel Principal Component Analysis

1: 输入样本集合$\{\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_n\}$
2: 计算核矩阵$\mathbf{K} = (\kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j))$
3: 计算中心化核矩阵：

$$\mathbf{K}' = \mathbf{K} - \frac{1}{n}\mathbf{1}\cdot\mathbf{K} - \frac{1}{n}\mathbf{K}\cdot\mathbf{1} + \frac{1}{n^2}\mathbf{1}\cdot\mathbf{K}\cdot\mathbf{1}$$

4: 计算$\mathbf{K}'$最大d'个特征值$\lambda'_1, \cdots, \lambda'_{d'}$，特征矢量$\boldsymbol{\alpha}'_1, \cdots, \boldsymbol{\alpha}'_{d'}$
5: 基矢量长度归一化：

$$\boldsymbol{\alpha}_i = \frac{\boldsymbol{\alpha}'_i}{\sqrt{\lambda'_i}\,||\boldsymbol{\alpha}'_i||}, \quad i = 1, \cdots, d'$$

6: 样本$\mathbf{x}$的KPCA投影$\mathbf{y}$：

$$y_i = \sum_{k=1}^{n} \alpha_{ik}\kappa(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}), \quad i = 1, \cdots, d'$$