hetGP

$$\{y_1, \cdots, y_N\} \longrightarrow \{\underbrace{y_1, \cdots y_1}_{a_1}, \cdots, \underbrace{y_n, \cdots y_n}_{a_n}\}$$

$$\sum_{i=1}^{n} a_i = N.$$

$$\mu = k_N^T(x) \cdot (K_N + \Sigma_N)^{-1} \cdot Y = k_n^T(x) \cdot (K_n + A_n^{-1}\Sigma_n)^{-1} \cdot \bar{Y}$$

$$\sigma^2 = k(x,x) + r(x) - k_N^T(x) \cdot (K_N + \Sigma_N)^{-1} \cdot k_N(x)$$

$$= k(x,x) + r(x) - k_n^T(x) \cdot (k_n + A_n^{-1}\Sigma_n)^{-1} \cdot k_n(x)$$

$$\mathrm{IMSPE}(x_1, \cdots, x_N) := \int_{x \in D} (\sigma_N^2(x) - r(x))\, dx. \quad x \sim \mathrm{Unif}$$

$$I_N = E[\hat{\sigma}_N^2(x)]' = E - E[k_n^T (K_n + A_n^{-1}\Sigma_n)^{-1} k_n]$$

$$= E - tr((K_n + A_n^{-1}\Sigma_n)^{-1} \cdot W_n) = E - tr(C_n^{-1} \cdot W_n)$$

$$W_n = \left(\int_{x \in D} k(x_i, x)\, k(x_j, x)\, dx\right)_{ij}$$

$$I_{N+1}(x) = E - 1^T [K_{n+1}^{-1} \circ W_{n+1}] \cdot 1$$

$$= I_N + g_n(x) \quad O(n^2)$$

$$Y_N \sim N(0, \nu K_N)$$

$$l = \log L = -\frac{N}{2}\log 2\pi - \frac{N}{2}\log \nu - \frac{1}{2}\log|K_N| - \frac{1}{2\nu} y_N^T \cdot K_N^{-1} \cdot y_N$$

$$\frac{\partial l}{\partial \nu} = 0 \Rightarrow \hat{\nu} = N^{-1} \cdot y_N^T \cdot K_N^{-1} \cdot y_N$$

$$l|_{\nu=\hat{\nu}} = C_N - \frac{N}{2} \cdot \log y_N^T \cdot K_N^{-1} \cdot y_N - \frac{1}{2}\log|K_N|$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial K_N^{-1}}{\partial \cdot} = -K_N^{-1} \cdot \dfrac{\partial K_N}{\partial \cdot} K_N^{-1} \\ \dfrac{\partial \log|K_N|}{\partial \cdot} = tr\left\{K_N^{-1} \cdot \dfrac{\partial K_N}{\partial \cdot}\right\} \end{cases}$$

$$MSE = k(x_0, x_0) - k^T(x_0, x_n) \cdot (K_n + A_n^{-1}\Sigma_n)^{-1} k(x_0, x_n)$$

$$\frac{\partial MSE}{\partial x_0} = -2 \cdot \frac{\partial k_n^T}{\partial x_0} \cdot K^{-1} \cdot k_n$$

$$= -2 \cdot \sum_{i,j} (K^{-1})_{ij} \cdot \frac{\partial k(x_0, x_i)}{\partial x_0} \cdot k(x_0, x_j)$$

K^{-1} is PSD

$$k(x,y) = v e^{-\frac{1}{\theta}(x-y)^2}$$

$$\frac{\partial k(x_0, x_i)}{\partial x_0} = v e^{-\frac{1}{\theta}(x-y)^2} \cdot \left(-\frac{2}{\theta}\right) \cdot (x-y)$$

$$= -\frac{2}{\theta} \cdot k(x_0, x_i) \cdot (x_0 - x_i).$$

$$\frac{\partial MSE}{\partial x_0} = \frac{4}{\theta} \sum_{i,j} (K^{-1})_{ij} \cdot k(x_0, x_i) \cdot k(x_0, x_j) \cdot (x_0 - x_i)$$

$$= \frac{4}{\theta} \cdot G^T(x_0, x) \, K^{-1} \cdot k(x_0, x)$$

$$G(x_0, x) = \begin{bmatrix} x_0 - x_1 & & \\ & \ddots & \\ & & x_0 - x_n \end{bmatrix} \cdot k(x_0, x_n).$$

$$= \operatorname{diag}(x_0 - x_n) \cdot k(x_0, x_n).$$

MSE

$$\frac{\partial MSE}{\partial x_0} = 0.$$

$$\Rightarrow g_n = k_n^T \cdot \mathrm{diag}(x_0 - x_n) \cdot K_n^{-1} \cdot k_n = 0.$$

$$g_{n+1} = k_{n+1}^T \cdot \mathrm{diag}(x_0 - x_{n+1}) \cdot K_{n+1}^{-1} \cdot k_{n+1}$$

$$= \begin{bmatrix} k_n \\ k(x_{n+1}, x_{n+1}) \end{bmatrix}^T \cdot \begin{bmatrix} \mathrm{diag}(x_0 - x_n) & \\ & \ddots & \\ & & x_0 - x_{n+1} \end{bmatrix} K_{n+1}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} k_n \\ k(x_{n+1}, x_{n+1}) \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} k_n \\ v \end{bmatrix}^T \cdot \begin{bmatrix} \mathrm{diag}(x_0 - x_n) & \\ & \ddots & \\ & & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} K_n^{-1} + g \cdot g^T \sigma_n^2 & g \\ g^T & (\sigma_n^2)^{-1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} k_n \\ v \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} k_n & v \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathrm{diag}(x_0 - x_n) \cdot (K_n^{-1} + g \cdot g^T \sigma_n^2) & \mathrm{diag}(x_0 - x_n) \cdot g \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} k_n \\ v \end{bmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} k_n \cdot d(x_0 - x_n)(K_n^{-1} + g \cdot g^T \cdot \sigma_n^2) & k_n \cdot \mathrm{diag}(x_0 - x_n) \cdot g \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_n \\ v \end{pmatrix}$$

$$= k_n \cdot d(x_0 - x_n)(K_n^{-1} + g \cdot g^T \cdot \sigma_n^2) \cdot k_n + v\, k_n \cdot d(x_0 - x_n) \cdot g$$

$$= k_n \cdot d(x_0 - x_n) \cdot g \cdot g^T \cdot \sigma_n^2 k_n + v\, k_n \cdot d(x_0 - x_n) \cdot g$$

$$g = -\sigma_n^2(x) \cdot K_n^{-1} \cdot k_n(x)$$

$$\ldots \quad k_n^T(x) \cdot K_n^{-1} \cdot k_n(x) = \mu_n$$

$$MSE = k(x_i, x) - k_n(x) \cdot K_n^{-1} \cdot k_n(x)$$

$$\frac{\partial MSE}{\partial x} = -2 \cdot \frac{\partial k_n^T(x)}{\partial x} \cdot K_n^{-1} \cdot k_n(x) = D_n$$

$$\frac{\partial M_n}{\partial x} = D_n$$

$M_{n+1} \ ? \ M_n \qquad D_{n+1} \ ? \ D_n$

$$k_n(x) = [k(x, x_1), \cdots, k(x, x_n)]^T$$

$$k_n(x) = \begin{bmatrix} 1 & & 0 & \\ & \ddots & & \\ 0 & & 1 & 0 \end{bmatrix}_{n \times (n+1)} \cdot k_{n+1}(x)$$

$$K_n = (k(x_i, x_j))_{ij}$$

$$K_{n+1} = \begin{bmatrix} K_n & k_n(x_{n+1}) \\ k_n^T(x_{n+1}) & k(x_{n+1}, x_{n+1}) \end{bmatrix}$$

$$K_{n+1}^{-1} = \begin{bmatrix} K_n^{-1} + g g^T \cdot \sigma_n^2(x_{n+1}) & g \end{bmatrix}$$

$$K_{n+1} = \begin{bmatrix} \cdots & \cdots \\ g^T & \frac{1}{\sigma_n^2(x_{n+1})} \end{bmatrix}$$

$$\sigma_n^2 = \sigma_n^2(x_{n+1}) = k(x_{n+1}, x_{n+1}) - k_n^T(x_{n+1}) K_n^{-1} \cdot k_n(x_{n+1})$$

$$g = -\frac{1}{\sigma_n^2} K_n^{-1} \cdot k_n$$

Proof:

$$K_{n+1} \cdot K_{n+1}^{-1} = I_{n+1}$$

$$\begin{cases} I_n + K_n \cdot g \cdot g^T \cdot \sigma_n^2 + k_n \cdot g^T = I_n \\ K_n \cdot g + \frac{k_n}{\sigma_n^2} = 0. \\ k_n^T (K_n^{-1} + g \cdot g^T \cdot \sigma_n^2) + k(x_{n+1}, x_{n+1}) \cdot g^T = 0 \\ k_n^T \cdot g + \frac{k(x_{n+1}, x_{n+1})}{\sigma_n^2} = 1 \end{cases}$$

if Sequence is $S_n = \{x_1, \cdots x_n\}$.

$$M_n(x) = V - k_n^T(x) \cdot K_n^{-1} \cdot k_n(x)$$

then add x_{n+1} to $S_n \to S_{n+1} = \{S_n, x_{n+1}\}$

$$M_{n+1}(x) = V - k_{n+1}^T(x) \cdot K_{n+1}^{-1} \cdot k_{n+1}(x).$$

$$k_{n+1}(x) = \begin{bmatrix} k(x, x_1) \\ \vdots \\ \vdots \\ k(x, x_{n+1}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_n(x) \\ k(x, x_{n+1}) \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} I_n \\ 0 \cdots\cdots 0 \end{bmatrix}_{(n+1)\times n} \cdot k_n(x) + \begin{bmatrix} 0 \\ k(x, x_{n+1}) \end{bmatrix}$$

$$= U_n \cdot k_n(x) + b_n(x)$$

$$\left(k_n^T(x) U_n^T + b_n^T(x)\right) \begin{bmatrix} K_n^{-1} + g \cdot g^T \cdot \sigma_n^2 & g \\ g^T & \frac{1}{\sigma_n^2} \end{bmatrix} \cdot \left(U_n \cdot k_n(x) + b_n(x)\right)$$

$$= k_n^T(x) \cdot U_n^T \cdot \begin{bmatrix} K_n^{-1} + g \cdot g^T \sigma_n^2 & g \\ g^T & \frac{1}{\sigma_n^2} \end{bmatrix} \cdot U_n \cdot k_n(x)$$

$$+ 2 \cdot b_n^T(x) \cdot \begin{bmatrix} K_n^{-1} + g \cdot g^T \cdot \sigma_n^2 & g \\ g^T & \frac{1}{\sigma_n^2} \end{bmatrix} \cdot U_n \cdot k_n(x)$$

$$+ \; b_n^T(x) \cdot \begin{bmatrix} K_n^{-1} + g \cdot g^T \cdot \sigma_n^2 & g \\ g^T & \frac{1}{\sigma_n^2} \end{bmatrix} \cdot b_n(x)$$

① $U_n^T \cdot K_{n+1}^{-1} U_n$

$$= \begin{bmatrix} I_n & \begin{matrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{matrix} \end{bmatrix}_{n \times (n+1)} \cdot \begin{bmatrix} K_n^{-1} + g \cdot g^T \cdot \sigma_n^2 & g \\ g^T & \frac{1}{\sigma_n^2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} I_n \\ 0 \cdots 0 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} K_n^{-1} + g g^T \cdot \sigma_n^2 & g \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} I_n \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$= K_n^{-1} + g \cdot g^T \cdot \sigma_n^2$$

② $b_n^T(x) \cdot K_{n+1}^{-1} \cdot U_n$

$$= \begin{bmatrix} 0 \cdots 0 & k(x, x_{n+1}) \end{bmatrix}_{1 \times (n+1)} \cdot \begin{bmatrix} K_n^{-1} + g \cdot g^T \cdot \sigma_n^2 \\ g^T \end{bmatrix}_{(n+1) \times n}$$

$$= k(x, x_{n+1}) \cdot g^T$$

③ $b_n^T(x) \cdot K_{n+1}^{-1} \cdot b_n(x)$

② $b_n(x) \cdot k_{n+1} \, b_n(x)$

$$= k(x, x_{n+1}) \cdot \left[g^T \quad \frac{1}{\sigma_n^2} \right] \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ k(x, x_{n+1}) \end{bmatrix}$$

$$= \frac{k^2(x, x_{n+1})}{\sigma_n^2}$$

$$M_{n+1}(x) = V - \Big(k_n^T(x) \left(K_n^{-1} + g \cdot g^T \sigma_n^2 \right) k_n(x)$$

$$+ 2 \cdot k(x, x_{n+1}) \cdot g^T \cdot k_n(x)$$

$$+ \frac{k^2(x, x_{n+1})}{\sigma_n^2} \Big)$$

$$= M_n(x) - k_n^T(x) \cdot g \cdot g^T \sigma_n^2 k_n(x)$$

$$- 2 \cdot k(x, x_{n+1}) \cdot g^T \cdot k_n(x)$$

$$- \frac{k^2(x, x_{n+1})}{\sigma_n^2}$$

$$= M_n(x) - k_n^T(x) \cdot \frac{1}{\sigma_n^4} K_n^{-1} k_n \cdot k_n^T K_n^{-1} \cdot \sigma_n^2 \cdot k_n(x)$$

$$+ 2 \cdot k(x, x_{n+1}) \cdot \frac{1}{\sigma_n^2} k_n^T K_n^{-1} \cdot k_n(x)$$

$12.$

$$- \frac{k^2(x, x_{n+1})}{\sigma_n^2}$$

$$= M_n(x) - \frac{1}{\sigma_n^2}\left(k_n^T(x) \cdot K_n^{-1} \cdot k_n\right)^2$$

$$+ \frac{2k(x, x_{n+1})}{\sigma_n^2} \cdot \left(k_n^T(x) \cdot K_n^{-1} \cdot k_n\right)$$

$$- \frac{k^2(x, x_{n+1})}{\sigma_n^2}$$

$$= M_n(x) - \frac{1}{\sigma_n^2}\left(k(x, x_{n+1}) - k_n^T(x) \cdot K_n^{-1} \cdot k_n\right)^2$$

IMSE

max $M_{n+1}(x)$ is to

$$\begin{cases} \max M_n(x) \\ \min \left| k(x, x_{n+1}) - k_n^T(x) K_n^{-1} k_n \right| \end{cases}$$

if $x = x_{n+1}$

$$\begin{cases} M_n(x_{n+1}) = \max M_n(x). \\ \left| k(x_{n+1}, x_{n+1}) - k_n^T K_n^{-1} k_n \right| = \sigma_n^2 \end{cases}$$

$$M_{n+1}(X_{n+1}) = M_n(X_{n+1}) - \sigma_n^2 = 0.$$

$$\begin{cases} \text{if } k(x, x_{n+1}) - k_n^T K_n^{-1} \cdot k_n(x) = 0 \\ \quad \text{then find } \underset{x}{\operatorname{argmax}} \, M_n(x) \end{cases}$$

$$\frac{1}{\sigma_n^2}\left(k(x, x_{n+1}) - k_n^T(x) K_n^{-1} \cdot k_n\right)^2$$

$$I(x_{n+1}) = \int_D \frac{1}{\sigma_n^2}\left(k(x, x_{n+1}) - k_n^T(x) \cdot K_n^{-1} \cdot k_n\right)^2 dP(x)$$

$$= \frac{1}{\sigma_n^2} \cdot E\left(k(x, x_{n+1}) - k_n^T(x) \cdot K_n^{-1} k_n\right)^2$$

$$\approx \frac{1}{\sigma_n^2} \cdot \left(k(EX, x_{n+1}) - k_n^T(EX) \cdot K_n^{-1} \cdot k_n\right)^2$$