⑥ 正定核：核技巧

有两个向量 $\vec{x_1}, \vec{x_2} \in S$，通过一个映射 ϕ 将 $\vec{x_1}, \vec{x_2}$ 映射为高维向量 $\phi(\vec{x_1})$ 和 $\phi(\vec{x_2})$，然后计算其内积 $\langle \phi(\vec{x_1}), \phi(\vec{x_2}) \rangle$

核技巧可以~~减~~简化上述过程，定义核函数 $K(\vec{x}, \vec{y})$ 是 $S \times S \to R$ 的映射，可以根据 $\vec{x_1}\ \vec{x_2}$ 直接算出 $\langle \phi(\vec{x_1})\ \phi(\vec{x_2}) \rangle$，即 $K(\vec{x_1}\ \vec{x_2}) = \langle \phi(\vec{x_1}), \phi(\vec{x_2}) \rangle$ 这省去了把 $\vec{x_1}\ \vec{x_2}$ 映射到高维的过程。

⑦ 正定核的判定准则：什么样的函数可以作为核函数。

▲ $K(\vec{x_1}\ \vec{x_2})$ 可以表示 $\langle \phi(\vec{x_1})\ \phi(\vec{x_2}) \rangle$ 的充要条件是矩阵 $[K(\vec{x_i}\ \vec{x_j})]_{m \times m}$ 半正定。($K(\vec{x_i}\ \vec{x_j})$ 是这个矩阵的 i 行 j 列的元素)

证明：若 $K(\vec{x_1}\ \vec{x_2})$ 可表示为 $\langle \phi(\vec{x_1})\ \phi(\vec{x_2}) \rangle$，则 $[K(\vec{x_i}\ \vec{x_j})]_{m \times m}$ 矩阵半正定。

证：令 $[K(\vec{x_i}\ \vec{x_j})]_{m \times m}$ 矩阵为 $K_{m \times m}$，

对于任意的向量 $\vec{\alpha}$（列向量）

$$\vec{\alpha}^T K_{m \times m} \vec{\alpha} = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j K(\vec{x_i}\ \vec{x_j})$$

$$\xlongequal{K(\vec{x_i}\ \vec{x_j}) = \langle \phi(\vec{x_i})\ \phi(\vec{x_j}) \rangle} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j \langle \phi(\vec{x_i}), \phi(\vec{x_j}) \rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \phi(\vec{x_i}) \sum_{j=1}^{m} \alpha_j \phi(\vec{x_j})$$

$$= \left\| \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \phi(\vec{x_i}) \right\|^2 = \langle \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \phi(\vec{x_i}), \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \phi(\vec{x_i}) \rangle$$

$$\geq 0$$

$\therefore K_{m \times m}$ 矩阵半正定