再生核希尔伯特空间

$$\langle k(\cdot, x'), k(\cdot, x)\rangle_{\mathcal{H}} = k(x, x')$$

$$\Rightarrow k(x, x') = k(x', x)$$ 对称性

$$\langle \sum_{i=1}^{n} c_i k(\cdot, x_i) \sum_{i=1}^{n} c_j k(\cdot, x_i)\rangle \geq 0$$

$$= \sum_{i,j=1}^{n} c_i c_j k(x_i, x_j) \geq 0$$

等于0 当且仅当 $\sum_{i=1}^{n} c_i k(\cdot, x_i) = 0$

i) 对于 $L_2(\Omega)$ 空间

$$\int k(x', x) f(x') \, dx' = f(x)$$

$$k(x', x) = \delta(x - x')$$ 不是 L_2 函数

ii) 构造可再生 Hilbert 空间

$$k(x, x') = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \phi_i(x) \phi_i(x')$$

$$\int \phi_i(x) \phi_j(x) \, d\mu(x) = \delta_{ij}$$

$$f(x) = \sum_{i=1}^{N} f_i \phi_i(x) \qquad \sum_{i=1}^{N} \frac{f_i}{\lambda_i} < +\infty$$

- $k(\cdot, x') = \sum_i \lambda_i \phi_i(x') \phi_i(\cdot) = \sum_i f_i \phi_i(\cdot)$
- $\langle k(\cdot, x'), f(\cdot)\rangle = \sum_{i=1}^{N} \frac{\lambda_i \phi_i(x') f_i}{\lambda_i} = f(x')$

完备性： $f^{(m)} \to f$ 那么 $f \in \mathcal{H}$

Cauchy 列 $\|f^{(m)}-f^{(n)}\|_{\mathcal{H}}^2 = \sum_{i=1}^{N} \frac{(f_i^{(m)}-f_i^{(n)})(f_i^{(m)}-f_i^{(n)})}{\lambda_i} \to 0$

$$|f_i^{(m)}-f_i^{(n)}| \longrightarrow 0$$

$$f_i^{(m)} \to f_i^*$$

$$f = \sum f_i^* \phi_i(x)$$

① Moore - Aronszajn 定理

给定了正定的核函数

$f(x) = \sum_{i=1}^{n} a_i k(\cdot, x_i)$, $\forall i$ 构成内积空间 $\mathcal{H}_0$

$$g(x) = \sum_{j=1}^{n} b_j k(\cdot, x_j')$$

$$\langle f(x), g(x) \rangle_{\mathcal{H}_0} = \sum_{i,j} a_i b_j k(x_i, x_j')$$

$$\langle f(\cdot), k(\cdot, x) \rangle_{\mathcal{H}_0} = \sum a_i k(x, x_i) = f(x)$$

完备性

$$f(x) = \langle f(\cdot), k(\cdot, x) \rangle_{\mathcal{H}_0}$$

$$\leq \|f(\cdot)\|_{\mathcal{H}_0} \|k(\cdot, x)\|_{\mathcal{H}_0}$$

$$= \|f(\cdot)\|_{\mathcal{H}_0} k(x, x)^{\frac{1}{2}}$$

因此 $\|f\|_{\mathcal{H}_0} \to 0$ $\quad f \xrightarrow{\text{逐点}} 0$

对于 Cauchy 列

$$\|f_m(x) - f_n(x)\| \to 0$$

$$|f_m(x) - f_n(x)| \le \|f_m - f_n\|_{H_0} K(x,x)^{\frac{1}{2}}$$

$$|f_m(x) - f_n(x)| \xrightarrow{\text{逐点}} 0$$

$$f(x) = \lim_{n\to\infty} f_n(x)$$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \cup \{f(x)\}$$

$\boxed{H_0 \text{ 中 Cauchy 列且逐点收敛的函数}}$

引理：H_0 中的 Cauchy 列 f_n，且 f_n 逐点收敛到 0，那么 $\|f_n\|_{\mathcal{H}_0} \to 0$。

$$\|f_n\|_{H_0} \le B \quad \|f_n - f_N\|_{H_0} < \frac{\varepsilon}{B} \quad \text{当 } n \ge N$$

$$f_N = \sum_{i=1}^{p} \alpha_i K(x, x_i)$$

$$\begin{aligned} \|f_n\|_{H_0}^2 &= \langle f_n - f_N, f_n\rangle_{H_0} + \langle f_N, f_n\rangle_{H_0} \\ &\le \varepsilon + \sum_{i=1}^{p} \alpha_i f_n(x_i) \\ &< 2\varepsilon \quad \text{当 } n \text{ 足够大} \end{aligned}$$

下面证明 $\mathcal{H}$ 是 RKHS

i) $\langle f, g\rangle_{\mathcal{H}} = \lim_{n\to\infty} \langle f_n, g_n\rangle_{\mathcal{H}_0}$, $\quad f_n, g_n \xrightarrow[\text{逐点}]{\text{Cauchy 列}} f, g$

需要说明极限存在且唯一

$$|\langle f_n, g_n\rangle_{H_0} - \langle f_m, g_m\rangle_{H_0}|$$

$$= |\langle f_n - f_m, g_n\rangle_{H_0} + \langle f_m, g_n - g_m\rangle_{H_0}|$$

$$= \|g_n\|_{H_0} \|f_n - f_m\|_{H_0} + \|f_m\|_{H_0} \|g_n - g_m\|_{H_0} \to 0$$

$$|\langle f_n, g_n\rangle_{H_0} - \langle f_n', g_n'\rangle_{H_0}|$$

$$= \|g_n\|_{H_0}\|f_n - f_n'\|_{H_0} + \|f_n'\|_{H_0}\|g_n - g_n'\|_{H_0} \to 0$$

ii) 此内积是双线性的，若 $\|f\|_H = 0$

$$|f(x)| = \lim_{n\to\infty}|f_n(x)| = \lim_{n\to\infty}\langle f_n(\cdot)\ k(\cdot, x)\rangle_{H_0}$$

$$\leq k(x,x)^{\frac{1}{2}} \lim_{n\to\infty}\|f_n\|_{H_0}$$

$$= 0$$

$f(x) = 0$

iii) 完备性 Cauchy 列 $\{f_n\}$ 在 H 中

$f_n' \in H_0$, $\|f_n' - f_n\|_H \to 0$

$$\|f_n' - f_m'\|_{H_0} = \|f_n' - f_m'\|_H$$

$$\leq \|f_n' - f_n\|_H + \|f_n - f_m\|_H + \|f_m - f_m'\|_H$$

$$\to 0$$

$f_n' \to f$

iv) RKHS

$$f(x) = \lim_{n\to\infty} f_n(x)$$

$$= \lim_{n\to\infty}\langle f_n(\cdot), k(\cdot, x)\rangle_{H_0}$$

$$= \langle f, k(, x)\rangle_H$$

$\square$

② 核岭回归

$$\hat{f} = \arg\min_{f \in \mathcal{H}_K} \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(f(x_i) - y_i\right)^2 + \lambda \|f\|_{\mathcal{H}_K}$$

表示定理：

空间 $\mathrm{span}\{k(\cdot, x_i) : 1 \le i \le n\}$

$\forall f$，投影进这个空间

$$f = f_s + f_\perp$$

$$\|f\|_{\mathcal{H}} = \|f_s\|_{\mathcal{H}} + \|f_\perp\|_{\mathcal{H}}$$

$$f(x_i) = \langle f, k(\cdot, x_i)\rangle$$
$$= \langle f_s + f_\perp, k(\cdot, x_i)\rangle$$
$$= f_s(x_i)$$

那么 f_s 的损失函数 $\le$ f 的损失函数

$$f = \sum_{i=1}^{n} a_i k(x, x_i)$$

$$\frac{1}{n}\|K_{xx}\alpha - Y\|^2 + \lambda a^T K_{xx} a$$

$$\Longleftrightarrow \frac{2}{n} K_{xx}(K_{xx}\alpha - Y) + 2\lambda K_{xx} a = 0$$

$$\Longleftrightarrow K_{xx}\left((K_{xx} + n\lambda)\alpha - Y\right) = 0$$

$$\hat{f} = \arg\min \|f\|_{H_k} \qquad f(x_i) = y_i \quad 1 \le i \le n$$

$$\min \ \alpha^T K_{xx} \alpha \qquad K_{xx}\alpha = Y$$

核岭回归 vs 高斯回归

$$\hat{f} = k_{xX}(K_{XX} + n\lambda I_n)^{-1} Y$$

③ 误差估计

引理

$$\Big\|\sum_{i=1}^{m} c_i k(\cdot, x_i)\Big\|_{H_k} = \sup_{f\in H_k,\ \|f\|_{H_k}\le 1} \sum c_i f(x_i)$$

因为

$$\sup_{f\in H_k\ \|f\|_{H_k}\le 1} \sum c_i f(x_i) = \sup_{f\in H_k\ \|f\|_{H_k}\le 1} \Big\langle \sum_{i=1}^{m} c_i k(\cdot, x_i), f(\cdot) \Big\rangle$$

$$\le \Big\|\sum_{i=1}^{m} c_i k(\cdot, x_i)\Big\|_{H_k} \underline{\|f\|_{H_k}} \to 1$$

$$\sup_{f\in H_k\ \|f\|_{H_k}\le 1} \Big\langle \sum_{i=1}^{m} c_i k(\cdot, x_i), f(\cdot) \Big\rangle \qquad f = \frac{\sum_i c_i k(\cdot, x_i)}{\|\sum_i c_i k(\cdot, x_i)\|_{H_k}}$$

$$\ge \Big\|\sum_{i=1}^{m} c_i k(\cdot, x_i)\Big\|_{H_k}$$

回到误差估计

$$\sup_{f\in H_k^b\ \|f\|_{H_k^b}\le 1} \underset{c_0}{1}\, f(\underset{x_0}{x}) - \sum_{i=1}^{n} \underbrace{w_i^b(x)}_{-c_i} f(x_i) = \sup_{\substack{f\in H_k^b \\ \|f\|_{H_k^b}\le 1}} \sum_{i=0} c_i f(x_i)$$

$$= \| c_i k^b(\cdot, x_i) \|_{H_k^b}$$

$$= \Big\| k^b(\cdot, x) - \sum_{i=1}^{n} w_i^b(x) k^b(\cdot, x_i) \Big\|_{H_k^b}$$

$$= k^b(x, x) - 2\sum_{i=1}^{n} w_i^b(x) k^b(x, x_i) + \sum w_i^b(x) w_j^b(x) k^b(x_i, x_j)$$

$$= k^{\sigma}(x,x) - 2\, k_{*X}(K_{XX}+\sigma^2 I_n)^{-1} k_{*X}^T +$$

$$k_{*X}(K_{XX}+\sigma^2 I)^{-1} K^{\sigma}_{XX}(K_{XX}+\sigma^2 I)^{-1} k_{*X}^T$$

$$= k^{\sigma}(x,x) - k_{*X}(K_{XX}+\sigma^2 I)^{-1} k_{*X}^T$$

$$= \bar{k}(x,x) + \sigma^2$$

$\square$

④计算

$$K_{XX} = \begin{bmatrix} K_{mm} & K_{m\,n-m} \\ K_{n-m\,m} & K_{n-m\,n-m} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} L_m & 0 \\ A & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_m^T & A^T \\ 0 & I \end{bmatrix}$$

B

$$= \begin{bmatrix} L_m L_m^T & L_m A^T \\ A L_m^T & AA^T + B \end{bmatrix}$$

$$A = K_{n-m\,m} L_m^{-T} \qquad B = K_{n-m\,n-m} - AA^T$$