**高斯过程公式推导**

假设有一个训练集，其中，我们用来表示输入向量，用来表示一个标量输出，其中的尺寸为，的尺寸为，那么相应的。

以标准的线性模型为例，对于：

是输入向量，是权重向量，是观察到的目标值，一般来说在中会有偏置向量，但是因为偏置部分可通过来完成，因此此处将偏置隐去。其中为在上的噪声，我们假设它是独立分布的，相应的均值为0，方差为，那么对应的分布符合：

相应的分布如下：

即：

在贝叶斯分布中，我们需要对于参数设置一个先验分布，对于权重，我们假设它的分布为：

根据贝叶斯定律：

那么：

由于边际概率与权重无关，因此相当于的一个常系数，于是：

由于：

令，有，并记上式为：

即：

那么有，即：

值得注意的是，当我们用传统神经网络MSE的方式来表示误差：

那么对于loss求导之后：

这样求得的与高斯分布中对应的均值相同。

综上分析可以看出：

那么相应的

以上所有分析都基于线性模型，那么当我们先把输入向量通过函数映射到维的特征空间:

相应的分布为：

进一步推导可知，相应的核函数为：

那么对应的协方差矩阵为：

那么对应的概率分布为：

根据《Gaussian Processes for Machine Learning》书中Appendix.3可知：

令，有：

以上值得注意的是，在建模的过程中，需要模型尽可能地拟合训练集，目标函数为：

也就是要求：

完成建模后，目标更换为含条件约束的目标优化问题：

暂时先不考虑约束条件，假设目前已经求得的目标函数最小值为，那么求解更小值的概率可以求得，由于之前我们已经对于进行了高斯过程建模，已知其对应的和，improvement function可以表示为：

那么相应的Expected Improvement(EI)为：

对于，GP会预测，令，则为标准正态分布，令，进一步令为CDF(cumulative distribution function)函数，令为PDF(probability distribution function)函数，可以进一步推导：

其中

以上Expected Improvement对应没有考虑约束条件的情况，当将约束条件纳入考虑时，可以采用weighted Expected Improvement(wEI)计算方式来构造目标函数:

对于每一个约束条件都构造一个相应的高斯过程模型，那么每一个都有，那么约束满足的概率为：

相应的期望为：

为了求得最佳需要求。

值得注意的是公式中，我们假设了约束之间相互独立，在实际问题中往往约束之间存在某种关系，使得其并不相互独立。