

科学机器学习作业二

截止日期:2025 年 11 月 30 日。迟一天扣 1 分。

1 问题一: 高斯过程上机练习 (20 分)

考虑一维高斯过程 $f(x) \sim \mathcal{GP}(m(x), \kappa(x, x'))$, 其中期望函数 $m(x) = 0$, 核函数为

$$\kappa(x, x') = \sigma_f^2 \exp\left(-\frac{1}{2l^2}(x - x')^2\right) + \sigma^2 \delta_{x, x'} \quad (1)$$

随机地在 $(-8, 8)$ 上采样 20 个 x_i , 即 $x_i \sim U(-8, 8)$ 。用 $(l, \sigma_f, \sigma) = (1.0, 1.0, 0.1)$ 对应的高斯过程采样相应的点 $f(x_i)$ 。把 $x_i, f(x_i)$ 作为数据存下来。

(6 分) 使用 $(l, \sigma_f, \sigma) = (1.0, 1.0, 0.1)$, $(l, \sigma_f, \sigma) = (0.3, 1.08, 5 \times 10^{-5})$, 和 $(l, \sigma_f, \sigma) = (3.0, 1.16, 0.89)$ 的高斯过程对数据进行回归, 画出 $(-8, 8)$ 上的期望和不确定性 (比如逐点的期望和 2 倍标准差)。

(7 分) 假设我们已知核函数的形式 eq. (1)。使用数据, 采用贝叶斯模型选择方法, 计算超参数的对数概率 $\log \rho(\theta = (l, \sigma_f, \sigma) | y, X)$, 优化求解出最好的超参。画出对数概率的等高线图 (固定一个变量) 检验结果是否合理 (是否陷入局部极大)。用求出来的超参对应的高斯过程对数据进行回归, 画出 $(-8, 8)$ 上的期望和不确定性 (比如逐点的期望和 2 倍标准差)。

(7 分) 考虑 Matern 类核函数

$$\kappa(x, x') = \sigma_f^2 \left(1 + \frac{\sqrt{3}}{l} |x - x'|\right) \exp\left(-\frac{\sqrt{3}}{l} |x - x'|\right) + \sigma^2 \delta_{x, x'} \quad (2)$$

使用数据, 采用贝叶斯模型选择方法, 计算超参数的对数概率 $\log \rho(\theta = (l, \sigma_f, \sigma) | y, X)$, 优化求解出最好的超参。画出对数概率的等高线图 (固定一个变量) 检验结果是否合理 (是否陷入局部极大)。用求出来的超参对应的高斯过程对数据进行回归, 画出 $(-8, 8)$ 上的期望和不确定性 (比如逐点的期望和 2 倍标准差)。