

# 科学机器学习 +HW2 报告

2100012131 蒋鹏

2025 年 11 月 21 日

## 目录

<b>1 问题描述</b>	<b>1</b>
<b>2 问题 1</b>	<b>1</b>
2.1 预期结果	2
2.2 数值方法	2
2.3 数值结果与分析	2
<b>3 问题 2</b>	<b>2</b>
3.1 数值方法	4
3.2 数值结果与分析	4
<b>4 问题 3</b>	<b>5</b>
4.1 数值方法	5
4.2 数值结果与分析	5

## 1 问题描述

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

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

随机地在  $(-8, 8)$  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  $(x_i, f(x_i))$  作为数据保存下来。注意我们的代码指定了随机种子便于分析, 将对应代码注释掉可以得到任意随机数。

## 2 问题 1

使用  $(l, \sigma_f, \sigma) = (1.0, 1.0, 0.1)$ ,  $(l, \sigma_f, \sigma) = (0.3, 1.08, 5e-5)$ ,  $(l, \sigma_f, \sigma) = (3.0, 1.16, 0.89)$  的高斯过程进行回归, 画出  $(-8, 8)$  上的期望和不确定性。

## 2.1 预期结果

第一组参数为真实参数，拟合效果应该最好；第二组参数长度尺度很小，噪声极小，会导致回归曲线剧烈震荡，产生过拟合；第三组参数长度尺度很大，噪声较大，回归曲线平滑，不确定性很大，欠拟合。

## 2.2 数值方法

用 Cholesky 分解求解某些量，然后根据理论结果进行均值与方差的预测。

## 2.3 数值结果与分析

我们展示拟合结果分别如图1、2、3所示，可以看到与预期结果相一致。

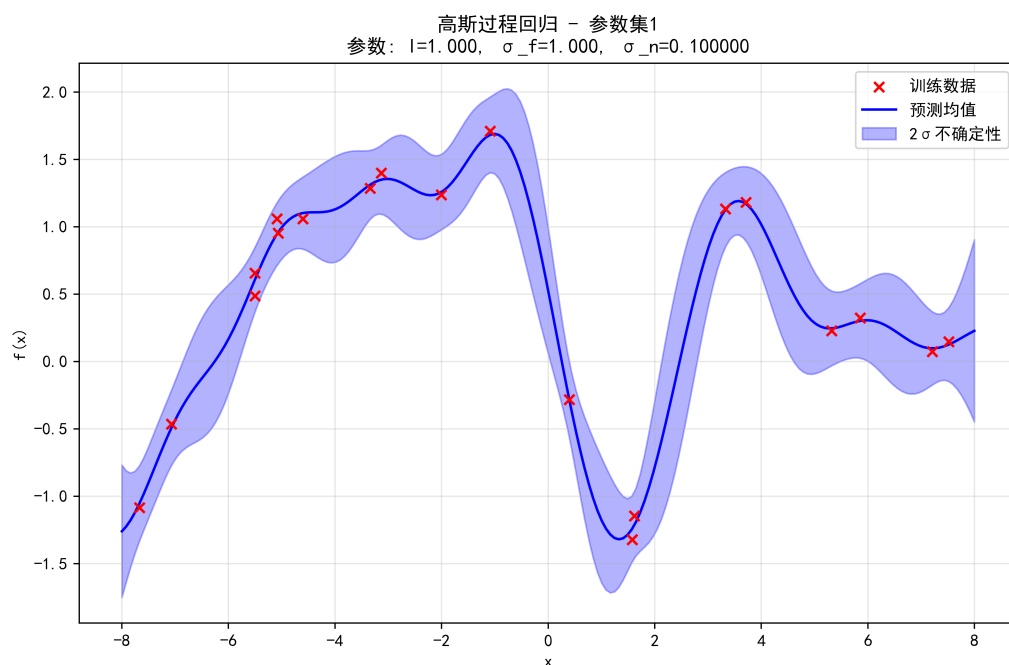


图 1: 高斯过程回归 - 参数集 1

## 3 问题 2

假设我们已知核函数的形式为平方指数核，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检验结果是否合理。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。

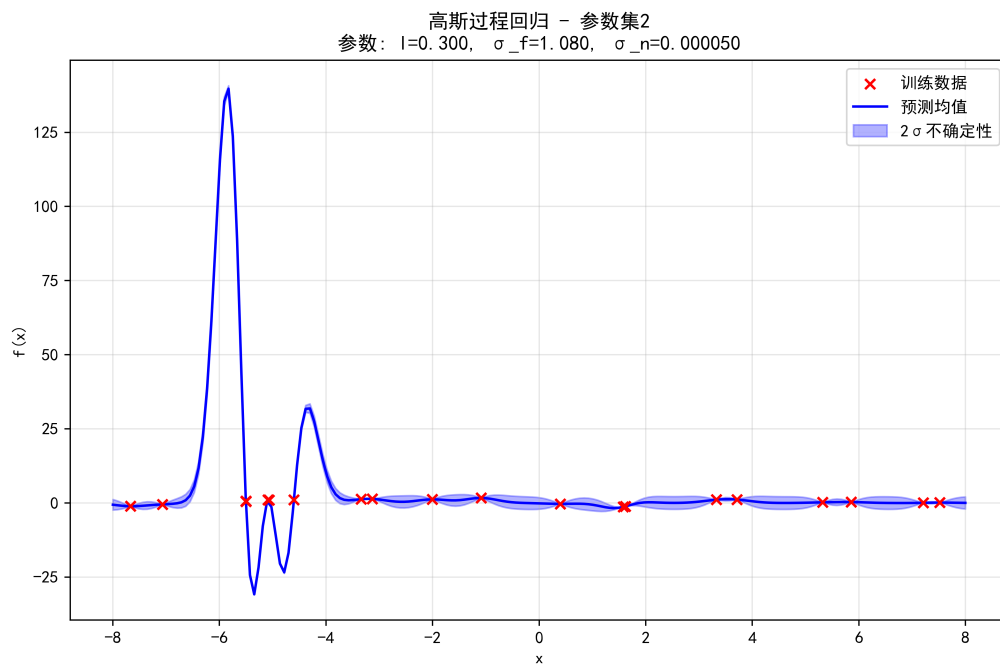


图 2: 高斯过程回归 - 参数集 2

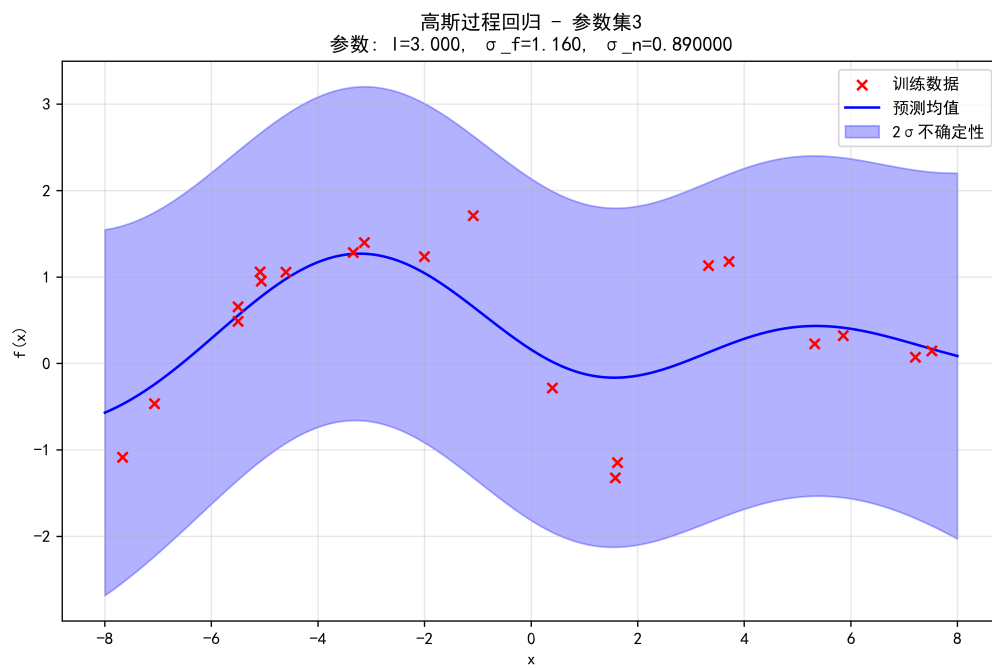


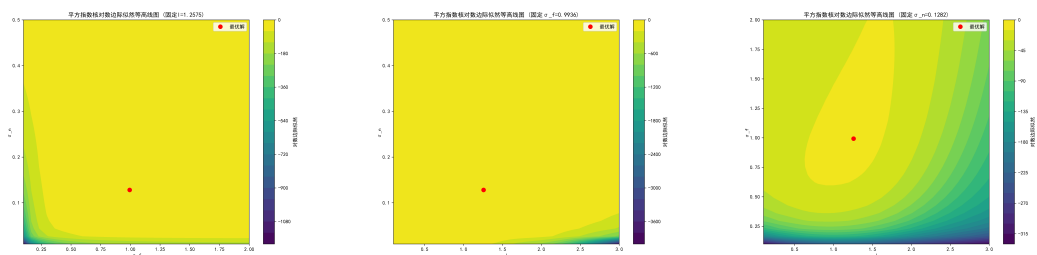
图 3: 高斯过程回归 - 参数集 3

### 3.1 数值方法

根据理论结果，该对数概率具有表达式，用 L-BFGS-B 结合多起点优化进行求解超参数，选择不同优化起点个数为 100。

### 3.2 数值结果与分析

平方指数核最优超参数： $(l, \sigma_f, \sigma) = (1.2575, 0.9936, 0.1282)$ 。首先展示对数概率分别在固定一个参数下的等高线图，如图4所示。



(a) 平方指数核对数边际似然等高线图 (固定  $l$ ) (b) 平方指数核对数边际似然等高线图 (固定  $\sigma_f$ ) (c) 平方指数核对数边际似然等高线图 (固定  $\sigma_n$ )

图 4: 平方指数核对数边际似然等高线图

从图中可以看出：所得超参数为全局最优，并未陷入局部极大。

最后展示在最优超参下的高斯回归，如图5所示。可以看到回归效果与真实参数1相接近，可以认为超参预测效果好。

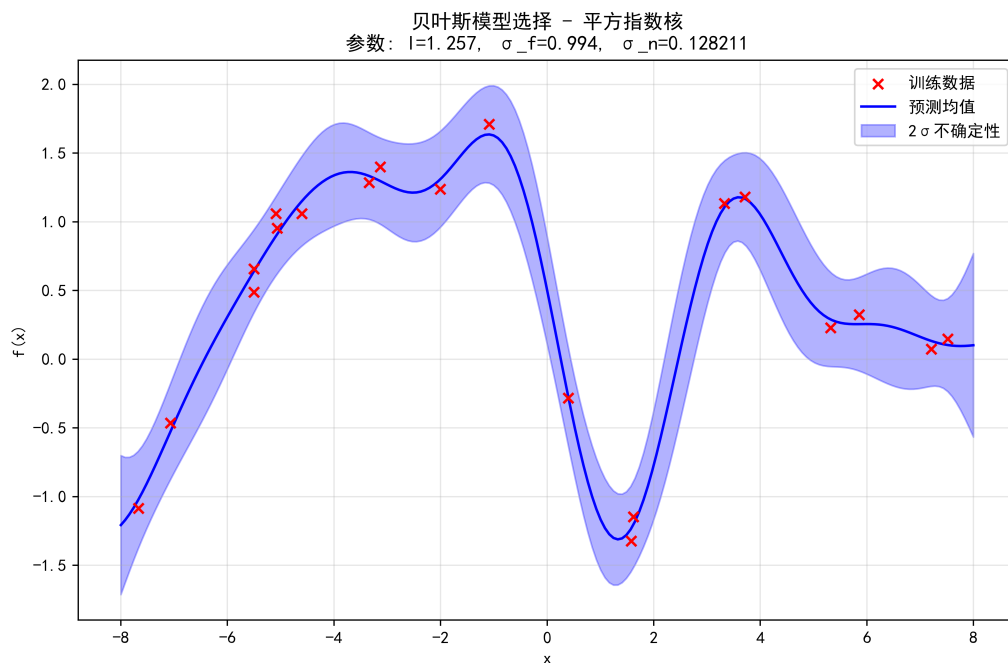


图 5: 贝叶斯模型选择平方指数核

## 4 问题 3

考虑 Matern 类核函数

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

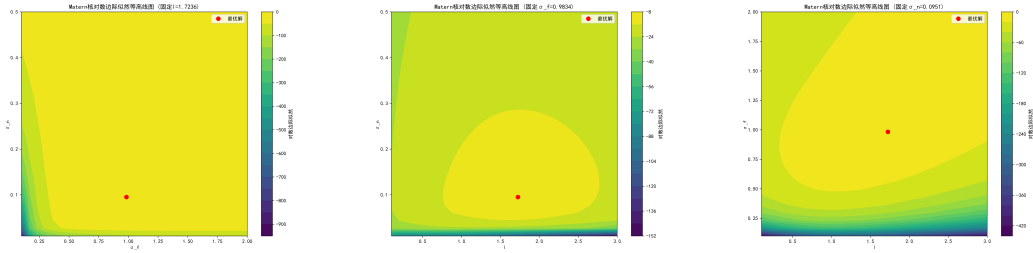
假设我们已知核函数的形式为 Matern 核，使用数据，采用贝叶斯模型选择方法，计算超参数的对数概率  $\log \rho(\theta = (l, \sigma_f, \sigma) | y, X)$ ，优化求解出最好的超参。画出对数概率的等高线图检验结果是否合理。用求出来的超参对应的高斯过程对数据进行回归，画出  $(-8, 8)$  上的期望和不确定性。

### 4.1 数值方法

根据理论结果，该对数概率具有表达式，用 L-BFGS-B 结合多起点优化进行求解超参数，选择不同优化起点个数为 100。

### 4.2 数值结果与分析

平方指数核最优超参数： $(l, \sigma_f, \sigma) = (1.7236, 0.9834, 0.0951)$ 。首先展示对数概率分别在固定一个参数下的等高线图，如图6所示。



(a) Matern 核的对数边缘似然等高线图 (固定  $l$ ) (b) Matern 核的对数边缘似然等高线图 (固定  $\sigma_f$ ) (c) Matern 核的对数边缘似然等高线图 (固定  $\sigma_n$ )

图 6: Matern 核的对数边缘似然等高线图

从图中可以看出：所得超参数为全局最优，并未陷入局部极大。

最后展示在最优超参下的高斯回归，如图7所示。可以看到回归效果与真实参数1相接近，可以认为超参预测效果好。

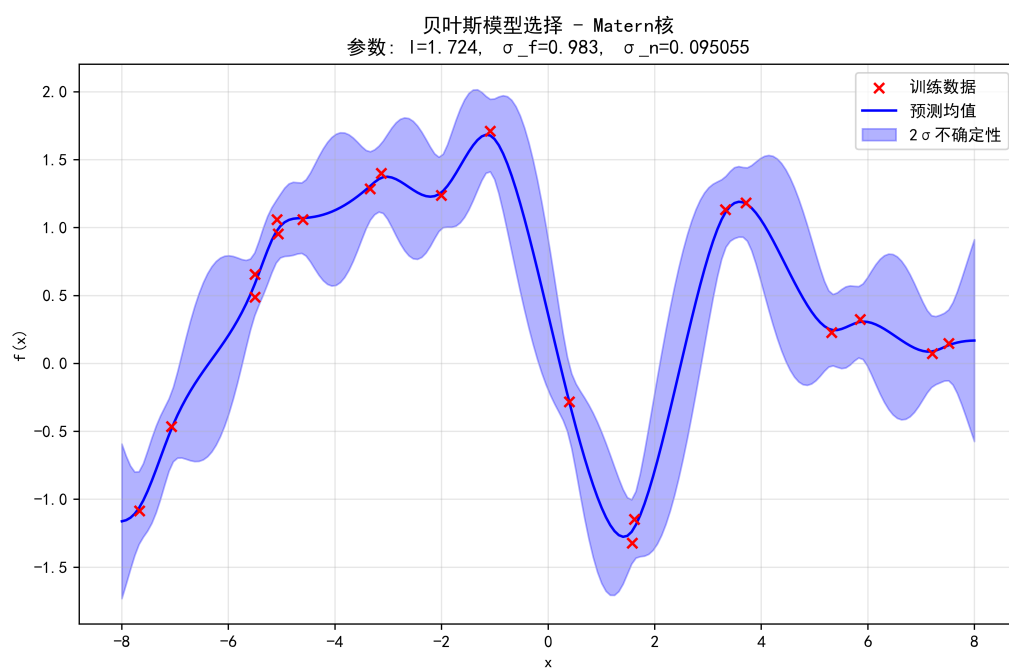


图 7: 贝叶斯模型选择 Matern 核