

Tuyệt vời! 🎉

Cảm ơn bạn đã thống nhất về cách định dạng toán nhé — mình sẽ tiếp tục dùng kiểu quen của mình là:

- $(\text{inline math: } \text{LaTeX})$  với  $(\dots)$
- $[\text{block math: } \text{LaTeX}]$  với  $[\dots]$

✅ Bây giờ, chúng ta chính thức **bắt đầu Giai đoạn 4.1: Independent Multi-output GP Classification!**

## Bố cục hướng dẫn Giai đoạn 4.1

Mình sẽ bám đúng phong cách mấy file trước:

Phần	Nội dung
1	Hiểu bản chất Multi-output GP Classification
2	Công thức tổng quát
3	Sơ đồ luồng (Flowchart)
4	Pseudo-code cấp cao
5	Dự kiến cấu trúc thư mục/code
6	Checklist nhỏ cho Giai đoạn 4.1

## 1. Hiểu bản chất: Independent Multi-output GP Classification

### ? Bài toán đặt ra:

- Input:  $(\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times d})$  ( $n$  samples,  $d$  features).
- Output:  $(\mathbf{Y} \in \{0,1\}^{n \times T})$  ( $n$  samples,  $T$  labels).

👉 Tức là mỗi input  $(\mathbf{x}_i)$  có **T** nhãn nhị phân tương ứng.

### ! Ý tưởng then chốt:

- Với mỗi label  $(t \in \{1, \dots, T\})$ :
  - Huấn luyện **một mô hình GP Classification độc lập**.
- Sau đó khi dự đoán:
  - Dự đoán xác suất từng label riêng rẽ.
  - Gom thành vector output.

## So sánh nhanh:

GP Regression	GP Classification (binary)	Multi-output GP Classification
Predict 1 real value	Predict 1 label (0/1)	Predict T labels (0/1)
Gaussian likelihood	Bernoulli likelihood	Bernoulli likelihood cho mỗi task
Single GP model	Single GP model	T GP models

## 2. Công thức tổng quát

### Latent function cho task ( t ):

$$[ f^{(t)}(x) \sim \text{mathcal{GP}}(0, k(x, x')) ]$$

(kernel có thể shared hoặc riêng — ở đây ta dùng **shared kernel** cho đơn giản.)

### Likelihood cho mỗi output:

$$[ p(y^{(t)}_i = 1 | f^{(t)}(x_i)) = \sigma(f^{(t)}(x_i)) ]$$

trong đó (  $\sigma(\cdot)$  ) là hàm sigmoid hoặc probit.

### Posterior xấp xỉ cho mỗi task (Laplace Approximation):

Sau khi tối ưu:

$$[ p(f^{(t)} | X, y^{(t)}) \approx \text{mathcal{N}}(\hat{f}^{(t)}, \Sigma^{(t)}) ]$$

với:

- (  $\hat{f}^{(t)}$  ): Mode của posterior cho task ( t ).
- (  $\Sigma^{(t)} = (K^{-1} + W^{(t)})^{-1}$  ).

(  $W^{(t)}$  ) là Hessian matrix của negative log-likelihood cho task ( t ).

### Predictive distribution:

Với một điểm test (  $x_*$  ):

Predictive mean latent function:

$$\begin{aligned} &[ \\ \mu_{\hat{f}}(t) &= k_{\text{top}}(K + W^{(t-1)})^{-1} \hat{f}^{(t)} \\ &] \end{aligned}$$

Predictive variance latent function:

$$\begin{aligned} &[ \\ \sigma^2(t) &= k(x_{\cdot}, x_{\cdot}) - k_{\text{top}}(K + W^{(t-1)})^{-1} k_{\cdot}^* \\ &] \end{aligned}$$

## Chuyển sang xác suất phân loại:

Ví dụ với sigmoid link:

$$\begin{aligned} &[ \\ p(y_{\hat{f}}(t) = 1 | x_{\cdot}) &= \sigma\left(\frac{\mu_{\hat{f}}(t)}{\sqrt{1 + \frac{\pi}{8} \sigma^2(t)}}\right) \\ &] \end{aligned}$$

(Công thức này sử dụng xấp xỉ logistic function khi predict.)

## 3. Flowchart Giai đoạn 4.1

```

Start
  ↓
Input (X, Y multi-label)
  ↓
For each output (task t):
  ↓
  Create Single GP Classifier (with shared kernel)
  ↓
  Train (Laplace Approximation)
  ↓
  Store model parameters
  ↓
Predict:
  ↓
For each output (task t):
  ↓
  Predict latent mean, variance
  ↓
  Compute probability
  ↓
Stack all outputs
  ↓
Output (multi-label prediction)
  
```



## 4. Pseudo-code cấp cao (Full Pipeline)

```

class SingleTaskGPClassifier:
    def __init__(self, kernel):
        ...

    def train(self, X, y, epochs=100):
        # Laplace Approximation Training
        ...

    def predict(self, X_test):
        # Predict latent mean and variance
        # Then compute probability
        return probas # shape (n_test, )

class MultiOutputGPClassifier:
    def __init__(self, num_outputs, kernel):
        self.models = [SingleTaskGPClassifier(kernel) for _ in
range(num_outputs)]

    def train(self, X, Y, epochs=100):
        for t in range(self.num_outputs):
            self.models[t].train(X, Y[:, t], epochs)

    def predict(self, X_test):
        outputs = []
        for t in range(self.num_outputs):
            outputs.append(self.models[t].predict(X_test))
        return np.stack(outputs, axis=1) # shape (n_test, num_outputs)

```



## 5. Dự kiến cấu trúc code

Folder/File	Nội dung
models/single_task_gp_classifier.py	Class SingleTaskGPClassifier
models/multioutput_gp_classifier.py	Class MultiOutputGPClassifier
trainers/train_multioutput_gp.py	Hàm train MultiOutputGPClassifier
predictors/predict_multioutput_gp.py	Hàm predict MultiOutputGPClassifier
utils/kernels.py	Kernel function (RBF Kernel)



## 6. Checklist nhỏ cho Giai đoạn 4.1

STT	Việc cần làm	Trạng thái
1	Viết SingleTaskGPClassifier	<input type="checkbox"/>
2	Viết MultiOutputGPClassifier	<input type="checkbox"/>
3	Viết trainer cho MultiOutput	<input type="checkbox"/>
4	Viết predictor cho MultiOutput	<input type="checkbox"/>
5	Test trên toy multi-label dataset	<input type="checkbox"/>

## Checkpoint 2:

Bạn xác nhận nhé:

- ☒ Flow tổng thể đã rõ ràng?
- ☒ Bắt đầu từ việc mình viết `SingleTaskGPClassifier` trước, rồi build `MultiOutputGPClassifier` dựa trên nó?

👉 Nếu bạn OK, mình sẽ lập tức **bắt tay vào viết file `models/single_task_gp_classifier.py` đầu tiên** theo đúng phong cách dễ đọc như các phase trước.

💬 Bạn trả lời nhanh:

- "OK, viết `SingleTaskGPClassifier` trước"
- hoặc "Khoan, mình có câu hỏi về kernel sharing / khác biệt outputs"

Chờ lệnh của bạn! 🚀

(Đang sẵn sàng code sạch siêu chi tiết luôn!)