ĐẠI HỌC QUỐC GIA TPHCM

TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC TỰ NHIÊN

KHOA CÔNG NGHỆ THÔNG TIN

23TNT1

Mô hình thay thế xác suất

Đề tài: Mô hình thay thế xác suất

Môn học: Cơ sở Trí tuệ nhân tạo

Sinh viên thực hiện:

23122006 - Lưu Thượng Hồng

23122020 - Nguyễn Thiên Ấn

23122034 - Lê Nguyên Khang

23122036 - Nguyễn Ngọc Khoa

Giáo viên hướng dẫn:

GS.TS. Lê Hoài Bắc

ThS. Lê Nhựt Nam

Ngày 26 tháng 12 năm 2025

Mục lục

1 Mô hình thay thế

Trước khi đi vào nội dung của Chương 18 - Mô hình thay thế xác suất, ta cần biết mô hình thay thế (surrogate model) là gì. (Kochenderfer and Wheeler, 2019)

Mô hình thay thế $\hat{f}$ là một hàm xấp xỉ toán học được thiết kế để mô phỏng hành vi của hàm mục tiêu thực f nhưng với đặc tính mịn hơn và chi phí tính toán thấp hơn rất nhiều. Các mô hình này đóng vai trò quan trọng khi việc đánh giá hàm mục tiêu thực tế cực kỳ tốn kém, chẳng hạn như qua các thử nghiệm vật lý, mô phỏng siêu máy tính phức tạp hoặc huấn luyện mạng thần kinh sâu.

Quá trình xây dựng một mô hình thay thế thường tuân theo các bước:

- Lấy mẫu: Sử dụng các kế hoạch lấy mẫu (sampling plans) để thu thập dữ liệu ban đầu từ hàm mục tiêu thực.
- Khớp mô hình (Fitting): Sử dụng các kỹ thuật hồi quy (regression) để điều chỉnh các tham số của mô hình sao cho sai số giữa giá trị dự đoán và giá trị thực tế là nhỏ nhất.
- Sử dụng hàm cơ sở: Các mô hình phổ biến thường là tổ hợp tuyến tính của các hàm cơ sở (basis functions) như đa thức (polynoverfittingomial), hình sin (sinusoidal) hoặc các hàm hướng tâm (radial basis functions - RBF).
- Lựa chọn mô hình: Để đảm bảo mô hình có khả năng dự đoán tốt trên dữ liệu mới (không bị overfitting), các kỹ thuật như kiểm chuẩn chéo (cross-validation) hoặc bootstrap được sử dụng để ước lượng sai số tổng quát hóa.

2 Phân phối Gaussian (Phân phối chuẩn)

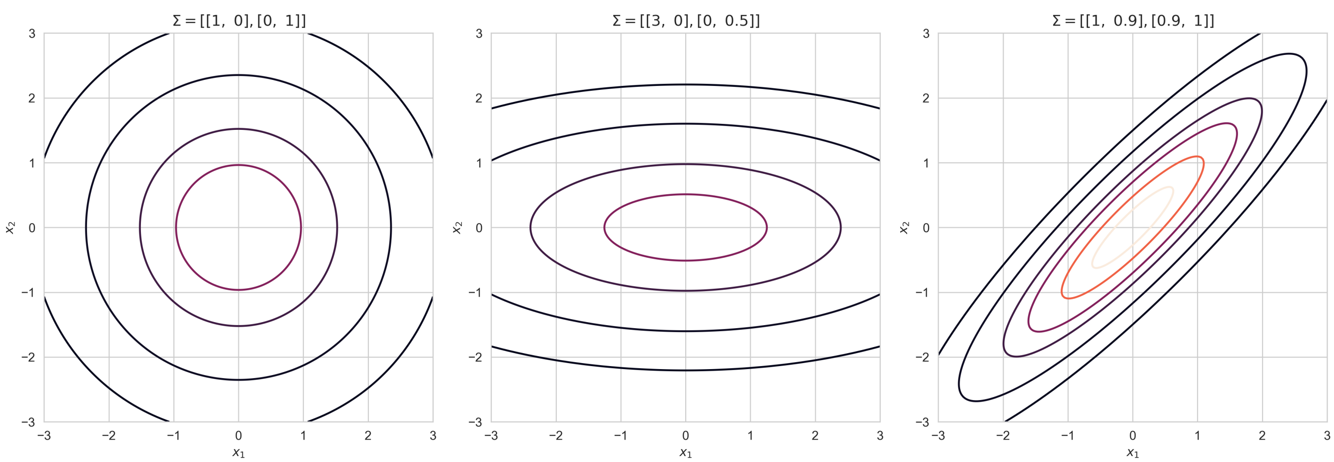
Một phân phối chuẩn n-biến được đặc trưng bởi vector kỳ vọng $\boldsymbol{\mu}$ và ma trận hiệp phương sai $\boldsymbol{\Sigma}$. Mật độ xác suất tại $\mathbf{x}$ được định nghĩa là:

$$\mathcal{N}(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = (2\pi)^{-n/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})\right)$$

Một vector ngẫu nhiên $\mathbf{x}$ tuân theo phân phối chuẩn được ký hiệu là:

$$\mathbf{x} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$$

Hình 1 minh họa các đường đồng mức của các hàm mật độ xác suất với các ma trận hiệp phương sai khác nhau. Ma trận hiệp phương sai luôn là ma trận nửa xác định dương (positive semidefinite).



Hình 1: Các phân phối Gaussian đa biến với các ma trận hiệp phương sai khác nhau

Xét hai vector ngẫu nhiên Gaussian đồng thời (jointly Gaussian) $\mathbf{a}$ và $\mathbf{b}$, phân phối đồng thời của chúng có dạng:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \end{bmatrix} \sim \mathcal{N}\left(\begin{bmatrix} \boldsymbol{\mu}_\mathbf{a} \\ \boldsymbol{\mu}_\mathbf{b} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{C} \\ \mathbf{C}^\top & \mathbf{B} \end{bmatrix}\right)$$

Trong đó $\mathbf{A}$ và $\mathbf{B}$ là ma trận hiệp phương sai của riêng $\mathbf{a}$ và $\mathbf{b}$, còn $\mathbf{C}$ là ma trận hiệp phương sai chéo.

Phân phối biên (marginal distribution) của từng vector thành phần được xác định bởi:

$$\mathbf{a} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{a}}, \mathbf{A}), \quad \mathbf{b} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{b}}, \mathbf{B})$$

Phân phối có điều kiện (conditional distribution) của **a** khi biết trước **b** cũng là một phân phối Gaussian:

$$\mathbf{a} \mid \mathbf{b} \sim \mathcal{N}\left(\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{a}|\mathbf{b}}, \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{a}|\mathbf{b}}\right)$$

Các tham số của phân phối này được tính theo công thức dạng đóng (closed-form):

- Vector kỳ vọng có điều kiện:

$$\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{a}|\mathbf{b}} = \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{a}} + \mathbf{C}\mathbf{B}^{-1}(\mathbf{b} - \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{b}})$$

- Ma trận hiệp phương sai có điều kiện:

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{a}|\mathbf{b}} = \mathbf{A} - \mathbf{C}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{C}^{\top}$$

3 Gaussian Process

Xét tập dữ liệu huấn luyện $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_i, y_i) \mid i = 1, \ldots, n\}$, trong đó $X = [\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n]^\top$ là ma trận các vector đầu vào và $\mathbf{y} = [y_1, \ldots, y_n]^\top$ là vector các giá trị mục tiêu (targets) tương ứng.

Một Gaussian Process (GP) được định nghĩa là một phân phối trên các hàm số (distribution over functions). Một GP được xác định hoàn toàn bởi hàm kỳ vọng (mean function) $m(\mathbf{x})$ và hàm hiệp phương sai (covariance function/kernel) $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$:

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \sim \mathcal{N}\left(\begin{bmatrix} m(\mathbf{x}_1) \\ \vdots \\ m(\mathbf{x}_n) \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) & \cdots & k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_1) & \cdots & k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_n) \end{bmatrix} \right)$$

hay viết gọn hơn là:

$$f(\mathbf{x}) \sim \mathcal{GP}(m(\mathbf{x}), k(\mathbf{x}, \mathbf{x}'))$$

Trong đó:

- Hàm kỳ vọng $m(\mathbf{x})$ là giá trị trung bình của hàm số tại điểm đầu vào $\mathbf{x}$:

  $$m(\mathbf{x}) = \mathbb{E}[f(\mathbf{x})]$$

  Hàm kỳ vọng có thể thể hiện kiến thức tiên nghiệm (prior knowledge) về hàm số, thường được giả định là hàm không (zero function) trong nhiều ứng dụng.

- Hàm hiệp phương sai $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ biểu diễn mối quan hệ giữa các giá trị hàm số tại hai điểm đầu vào khác nhau:

  $$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbb{E}\left[(f(\mathbf{x}) - m(\mathbf{x}))(f(\mathbf{x}') - m(\mathbf{x}'))\right]$$

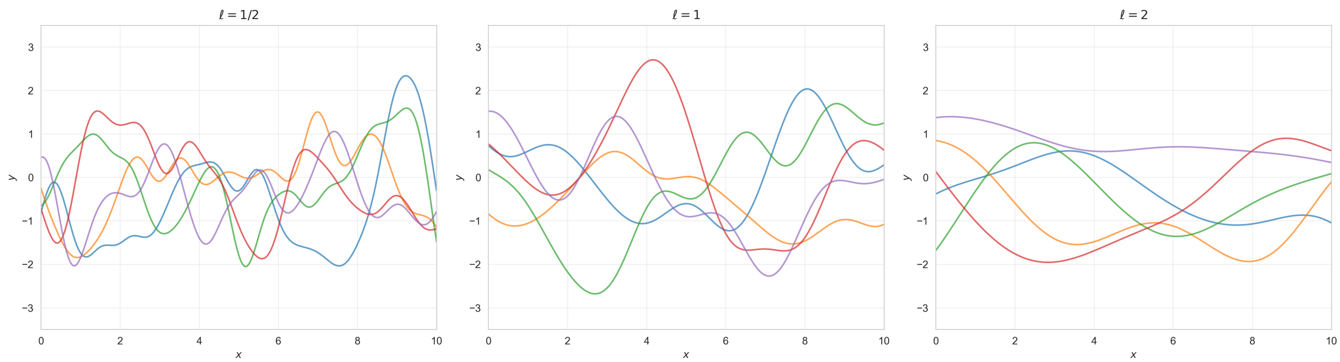
  Hàm hiệp phương sai quyết định độ mượt (smoothness) và cấu trúc của các hàm số được mô hình hóa bởi GP.

Hàm hiệp phương sai

Một hàm hiệp phương sai thường dùng là hàm mũ bình phương (squared exponential kernel):

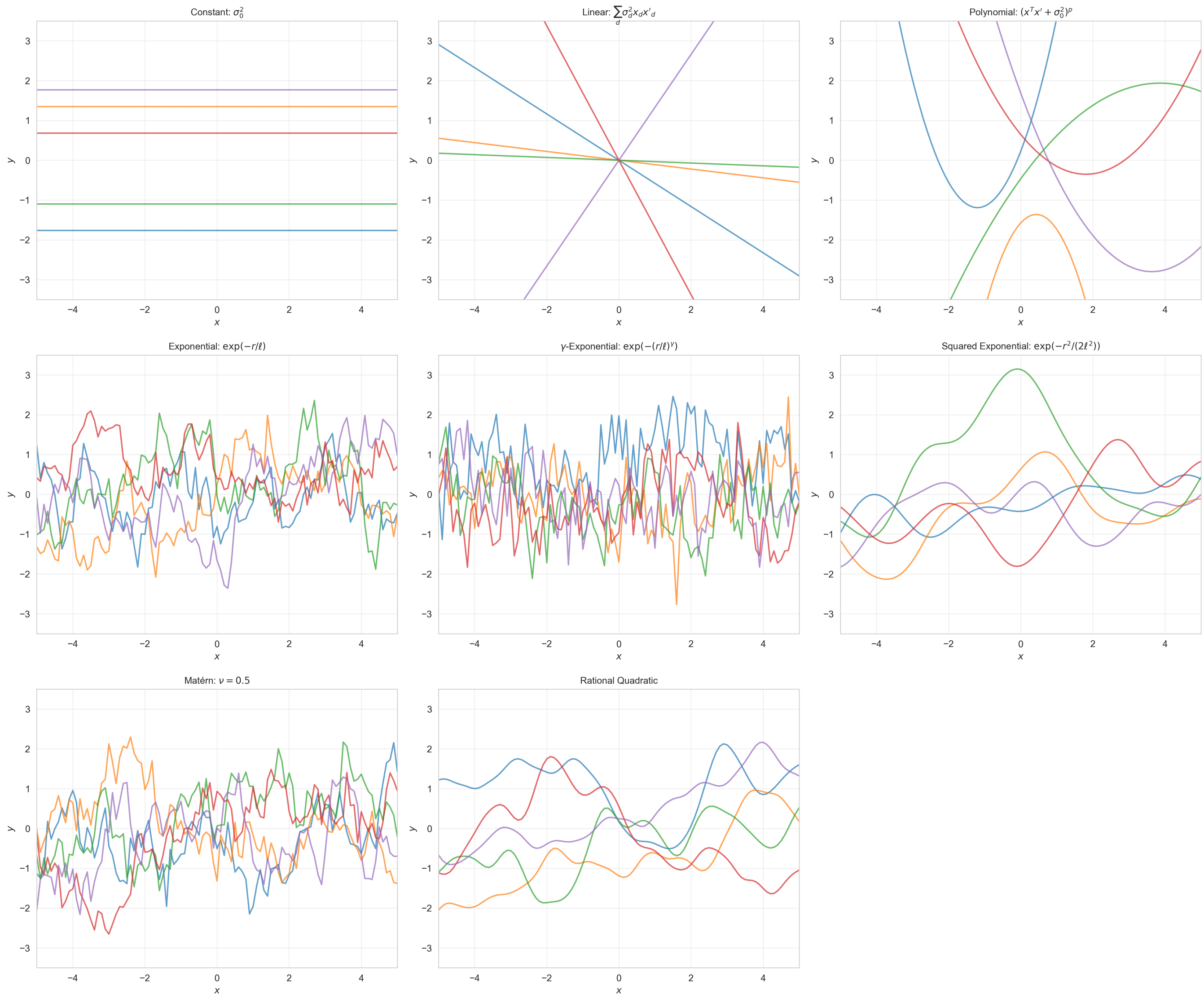
$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^2}{2\ell^2} \right)$$

Trong đó, ℓ là chiều dài đặc trưng (length-scale) điều khiển mức độ ảnh hưởng của các điểm dữ liệu lân cận đến giá trị hàm số tại một điểm cụ thể. ℓ càng nhỏ thì hàm số càng biến động nhanh, trong khi ℓ càng lớn thì hàm số càng mượt (xem Hình 2).



Hình 2: Các mẫu hàm số được sinh từ Gaussian Process với các giá trị chiều dài đặc trưng ℓ khác nhau

Ngoài ra, còn có nhiều hàm hiệp phương sai khác như hàm tuyến tính (linear kernel), hàm Matern (Matern kernel), và hàm thừa số (periodic kernel), mỗi hàm có các đặc tính riêng phù hợp với các loại dữ liệu và ứng dụng khác nhau. Hình 3 minh họa các mẫu hàm số được sinh từ GP với các hàm hiệp phương sai khác nhau.



Hình 3: Các mẫu hàm số được sinh từ Gaussian Process với các hàm hiệp phương sai khác nhau

4 Dự đoán với Gaussian Process

Một mô hình GP cho bài toán hồi quy thường bao gồm thành phần nhiễu (noise) trong quá trình quan sát. Cụ thể, mô hình được định nghĩa bởi các thành phần sau:

1. Hàm kỳ vọng (mean function) $m(\mathbf{x})$: Xu hướng chung của dữ liệu (thường giả định $m(\mathbf{x}) = 0$ để đơn giản hóa).

2. Hàm hiệp phương sai (covariance function/kernel) $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$: Quy định độ trơn và hình dáng của các hàm số.

3. Dữ liệu huấn luyện $\mathcal{D} = (X, \mathbf{y})$: Các cặp input-output đã quan sát được.

4. Phương sai nhiễu ν: Độ lớn của nhiễu quan sát.

Phân phối đồng thời (Joint Distribution)

Giả sử ta muốn dự đoán giá trị đầu ra $\hat{\mathbf{y}}$ tại tập điểm X^*. Phân phối đồng thời giữa dữ liệu quan sát $\mathbf{y}$ và giá trị dự đoán $\hat{\mathbf{y}}$ được mô hình hóa như sau:

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{y}} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix} \sim \mathcal{N}\left(\begin{bmatrix} \mathbf{m}\left(X^*\right) \\ \mathbf{m}(X) \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \mathbf{K}\left(X^*, X^*\right) & \mathbf{K}\left(X^*, X\right) \\ \mathbf{K}\left(X, X^*\right) & \mathbf{K}(X, X) \end{bmatrix} \right)$$

Trong đó:

- $\mathbf{m}(X)$ và $\mathbf{m}(X^*)$ là các vector kỳ vọng tại các điểm trong tập huấn luyện và tập dự đoán.
- $\mathbf{K}(X, X)$, $\mathbf{K}(X^*, X)$, $\mathbf{K}(X, X^*)$, và $\mathbf{K}(X^*, X^*)$ là các ma trận hiệp phương sai được xây dựng từ hàm hiệp phương sai $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$.

Cụ thể, các hàm trên được tính như sau:

$$\mathbf{m}(X) = \left[m\left(\mathbf{x}_1\right), \ldots, m\left(\mathbf{x}_n\right)\right]$$

$$\mathbf{K}\left(X, X'\right) = \begin{bmatrix} k\left(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1'\right) & \cdots & k\left(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_{|X'|}'\right) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ k\left(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_1'\right) & \cdots & k\left(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_{|X'|}'\right) \end{bmatrix}$$

Phân phối hậu nghiệm (Posterior Distribution)

Tài liệu

Kochenderfer, M. J., & Wheeler, T. A. (2019). *Algorithms for optimization*. The MIT Press.