

Ước lượng Bayes (tiếp):

1. Ước lượng điểm (tiếp):

- Sau khi tìm hiểu về ước lượng hàm Bayes quadratic Loss, ta sẽ tìm hiểu về một số loại ước lượng điểm khác.
- Có các dạng ước lượng khác như:
 - ❖ Ước lượng tuyệt đối.
 - ❖ Ước lượng 0-1.

a) Ước lượng tuyệt đối:

- Ta sẽ tìm hiểu về ước lượng tuyệt đối.
- Xét hàm loss:

$$L(\hat{\theta}, \theta) = |\hat{\theta} - \theta|$$

- Ở đây θ là tham số của bài toán và $\hat{\theta}$ là điểm cần xét.

- Như vậy ta có làm loss kì vọng là:

$$\rho(\hat{\theta}, \theta) = E \left(L(\hat{\theta}, \theta) \right) = \int |\hat{\theta} - \theta| p(\theta | D) d\theta$$

Chú ý rằng ở dạng tổng quát thì θ và $\hat{\theta}$ là các vector ngẫu nhiên.

- Ta sẽ tìm hiểu bài toán trong trường hợp θ và $\hat{\theta}$ là các số thực dương.
- Trước tiên ta lấy khoảng (m, n) cho giá trị θ :

$$\rho(\hat{\theta}, \theta) = \int_m^n |\hat{\theta} - \theta| p(\theta|D) d\theta$$

- Trong đó $m, n > 0$.

- Như vậy, ta sẽ có phân tích:

$$\int_m^n |\theta - \hat{\theta}| p(\theta|D) d\theta$$

$$= \int_{\hat{\theta}}^n (\theta - \hat{\theta}) p(\theta|D) d\theta + \int_{\hat{\theta}}^m (\hat{\theta} - \theta) p(\theta|D) d\theta$$

- Biểu thức trên bằng với:

$$H(\theta) = \hat{\theta}F(\hat{\theta}) - \int_{\hat{\theta}}^n \theta \cdot p(\theta|D)d\theta + \int_{\hat{\theta}}^m \theta \cdot p(\theta|a)d\theta + \hat{\theta} \left(1 - F(\hat{\theta})\right)$$

Trong đó $\int_m^n p(\theta|D)d\theta = F(\theta)$

- Ở đây, ta cần tìm cực trị của hàm số trên để xác định xem với θ như thế nào thì hàm Loss sẽ đạt min.
- Vì đây là hàm một biến nên ta hoàn toàn có thể áp dụng các kiến thức tìm cực trị hàm số cơ bản.
- Chú ý rằng $F(\theta)$ là một đại lượng độc lập vì đã được tính toán dựa trên các khoảng bị chặn nên ta không phải để ý đến nó.

Bước tìm min.

- Tính $H'(\hat{\theta})$:

Với $H(\hat{\theta}) = \hat{\theta}F(\hat{\theta}) - \int_{\hat{\theta}}^n \theta \cdot (\theta|D)d\theta + \int_{\hat{\theta}}^m \theta \cdot p(\theta|D)d\theta + \hat{\theta}(1 - F(\hat{\theta}))$, ta có:

$$\begin{aligned} H'(\theta) &= F(\hat{\theta}) + \hat{\theta}F'(\hat{\theta}) + 1 - F(\theta) - \hat{\theta}F'(\hat{\theta}) \\ &= 1 - 2F(\hat{\theta}) \end{aligned}$$

- Như vậy để hàm $H(\hat{\theta})$ đạt cực trị, ta cần có:

$$H'(\hat{\theta}) = 0$$

- Nói cách khác, ta cần $F(\theta) = \frac{1}{2}$.
- Hàm này đạt cực tiểu tại một giá trị $\hat{\theta}$ sao cho $F(\hat{\theta}) = \frac{1}{2}$.

- Lưu ý:

Ta có hàm:

$$\begin{aligned} H(\theta) &= \hat{\theta}F(\hat{\theta}) - \int_{\hat{\theta}}^n \theta \cdot p(\theta|D)d\theta + \int_{\hat{\theta}}^m \theta \cdot p(\theta|a)d\theta + \hat{\theta}(1 - F(\theta)) \\ &= \hat{\theta}F(\hat{\theta}) + \hat{\theta}(1 - F(\hat{\theta})) + a - b \end{aligned}$$

Là một hàm lồi.

- Như vậy ta thấy $H(\theta)$ là hàm lồi và đạt cực tiểu tại $\hat{\theta}$ sao cho $F(\hat{\theta}) = \frac{1}{2}$.
- Giá trị $\hat{\theta}$ sao cho hàm mật độ xác suất $F(\hat{\theta}) = \frac{1}{2}$ còn được gọi là giá trị trung vị - “median”.
- Như vậy trong trường hợp sử dụng hàm loss tuyệt đối, nó sẽ đạt cực tiểu nếu θ là median của phân phối hậu nghiệm $\theta|D$.

Định lý:

- Ta có một định lý tổng quát hơn:

Định lý: Cho mẫu ngẫu nhiên X_1, X_2, \dots, X_n với hàm mật độ xác suất $f(X|\theta)$ trong đó θ là tham số cần ước lượng. Nếu ta sử dụng hàm loss là hàm loss tuyệt đối, thì ước lượng Bayes $\hat{\theta}$ chính là median (trung vị) của phân phối xác suất hậu nghiệm.

Ví dụ minh họa:

- Cho biến ngẫu nhiên X có phân phối nhị thức với $n = 3$ và tham số θ . Ta có phân phối xác suất của bộ dữ liệu này là:

$$p(X|\theta) = C_3^x \theta^x (1 - \theta)^{3-x}$$

- Bước 1: chọn phân phối xác suất tiên nghiệm cho θ . Giả sử ta có phân phối đều:

$$\begin{cases} p(\theta) = 1; \theta \in (1/2, 1) \\ p(\theta) = 0; \theta \notin (1/2, 1) \end{cases}$$

- Khi đó tại $x = 3$, ta có tử của phân phối xác suất hậu nghiệm:

$$P(X, \theta) = p(\theta) \cdot p(X_3 | \theta) = \theta^3; \quad \frac{1}{2} < \theta < 1$$

- Lưu ý ta hoàn toàn có thể tính toán theo từng biến ngẫu nhiên trong quá trình trên.

- Bước 2: tính $F(\theta|D)$ (chính là $F(\theta|X_3)$).

$$P(X_3) = \int_{1/2}^1 p(\theta, X) d\theta = \int_{1/2}^1 \theta^3 d\theta = ?$$

Hãy tính con số theta.

- Ta tính được: $F(X_3) = \frac{15}{64}$
- Như vậy ta có hàm mật độ:

$$\begin{cases} F(X_3) = \frac{15}{64}, \forall \theta \in (\frac{1}{2}, 1) \\ 0 \end{cases}$$

- Như vậy ta có:

$$P(\theta|x = 3) = \frac{P(X_3, \theta)}{F(X_3)} = \frac{15}{64} \theta^3, \frac{1}{2} < \theta < 1$$
$$P(\theta|x = 3) = 0, \theta \notin \left(\frac{1}{2}, 1\right)$$

- Bước 3: tính ước lượng Bayes.
- Theo định lý ở trên, ta có

$$\hat{\theta} = \text{med}(P(\theta|x = 3))$$

- Ta có:

$$\frac{1}{2} = \int_{\frac{1}{2}}^{\hat{\theta}} \frac{64}{15} \theta^3 d\theta = \frac{64}{15} \left(\hat{\theta}^4 - \frac{1}{16} \right)$$

- Ta tính được ước lượng Bayes:

$$\hat{\theta} = 0,8537$$

- Như vậy ta tìm được ước lượng cho trường hợp $X = 3$.
- Bài tập: tìm ước lượng trong trường hợp tổng quát (tính với $X=0$, $X=1$, $X=2$)

b) Ước lượng 0 – 1:

- Xét hàm loss:

$$L(\hat{\theta}, \theta) = 0, \text{ nếu } |\hat{\theta} - \theta| < a; \quad L(\hat{\theta}, \theta) = 1, \text{ nếu } |\hat{\theta} - \theta| \geq a$$

- Ở đây θ là tham số của bài toán và θ mũ là điểm cần xét.

- Ta sẽ được hàm loss kì vọng:

$$\rho(\hat{\theta}, \theta) = E \left(L(\hat{\theta}, \theta) \right) = \int p(\theta|D) d\theta \text{ nếu } |\hat{\theta} - \theta| \geq a,$$

$$\rho(\hat{\theta}, \theta) = 0 \text{ nếu } |\hat{\theta} - \theta| < a.$$

- Ta không để ý tới trường hợp bằng 0.

- Ta sẽ tìm hiểu bài toán trong trường hợp $\hat{\theta}, \theta$ và a là các số thực dương.
- Trước tiên ta lấy khoảng (m, n) cho giá trị θ :

$$\rho(\hat{\theta}, \theta) = \int_m^n a \cdot p(\theta|D) d\theta =$$

- Trong đó $m > 0$.

- Phân tách biểu thức trên, ta có:

$$\begin{aligned}\rho(\hat{\theta}, \theta) &= \int_m^n p(\theta|D) d\theta \\ &= \int_m^{\hat{\theta}-a} p(\theta|D) d\theta + \int_n^{\hat{\theta}+a} p(\theta|D) d\theta\end{aligned}$$

- Biểu thức vừa rồi sẽ bằng:

$$\rho(\hat{\theta}, \theta) = 1 - \int_{\hat{\theta}-a}^{\hat{\theta}+a} p(\theta|D)d\theta$$

- Bài toán ước lượng điểm yêu cầu ta tìm cực tiểu của $\rho(\hat{\theta}, \theta)$, cũng chính là tìm cực đại của $\int_{\hat{\theta}-a}^{\hat{\theta}+a} p(\theta|D)d\theta$.

- Làm thế nào để tìm cực đại của hàm :

$$F(\hat{\theta}, \theta) = \int_{\hat{\theta}-a}^{\hat{\theta}+a} p(\theta|D)d\theta ?$$

- Chú ý rằng ta sẽ tìm $\hat{\theta}$ sao cho $F(\hat{\theta}, \theta)$ đạt max.

- Khi $a \rightarrow 0$, ta được :

$$F(\hat{\theta}, \theta) = F(\hat{\theta} + a|D) - F(\hat{\theta} - a|D) \rightarrow 0$$

Biểu thức trên tương đương với:

$$\frac{F(\hat{\theta}, \theta)}{2a} = \frac{F(\hat{\theta} + a|D) - F(\hat{\theta} - a|D)}{\hat{\theta} + a - (\hat{\theta} - a)} \sim F'(\hat{\theta}|D) = p(\hat{\theta}, D)$$

- Mà ta có:

$$\hat{\theta} = \underset{\hat{\theta}}{\operatorname{Argmax}} F(\hat{\theta}, \theta)$$

$$= \underset{\hat{\theta}}{\operatorname{Argmax}} \frac{F(\hat{\theta}, \theta)}{2a}$$

$$= \underset{\hat{\theta}}{\operatorname{Argmax}} p(\hat{\theta} | D)$$

- Như vậy, trong trường hợp sử dụng hàm loss 0-1 để ước lượng, bài toán ước lượng Bayes lại trở thành bài toán tìm MAP.
- Bài toán tìm MAP có thể xem lại ở các slide đầu tiên.
- Như vậy ta có định lý:
Định lý: Cho mẫu ngẫu nhiên X_1, X_2, \dots, X_n với hàm mật độ xác suất $p(X|\theta)$ trong đó θ là tham số cần ước lượng. Nếu ta sử dụng hàm loss là hàm loss 0-1, thì ước lượng Bayes $\hat{\theta}$ chính là MAP của phân phối xác suất hậu nghiệm.

Ví dụ:

- Ta sẽ tìm hiểu với bài toán với phân phối bernouli (mức độ đơn giản nhất).
- Một học viên cao học nộp đơn tìm vị trí tiến sĩ sau khi tốt nghiệp. Biết rằng trước anh thì rất nhiều người đã nộp đơn ở 5 nơi, và đa số chỉ có 1 lần thành công và 4 lần thất bại. Hiện tại anh vẫn đang tiếp tục thử ở những nơi khác để tìm ra trường Đại Học phù hợp nhất. Anh ta nộp ở 3 nơi, và bản thân anh ấy dự đoán rằng mình chỉ có thể có 1 lần thành công. Hãy sử dụng hàm loss 0-1 để ước lượng khả năng thành công 1 trong 3 lần thử sắp tới của anh ấy.

- Gọi θ là tham số “xác suất thành công” của thực sĩ trên.
- Bài toán theo phân phối Bernoulli, nhưng khi sử dụng phương pháp Bayes thì ta sẽ cho phân phối xác suất Beta cho tham số.
- Khi đó: $\theta \sim \beta(1,4)$. Theo công thức của phân phối beta, ta có:

$$P(\theta) = \frac{\Gamma(\alpha_1 + \alpha_0)}{\Gamma(\alpha_1)\Gamma(\alpha_0)} \cdot \theta^{\alpha_1-1}(1 - \theta)^{\alpha_0} = 4 \cdot \theta^0 \cdot (1 - \theta)^3$$

- Theo mô tả của bài toán, ta có $D|\theta \sim B(1,2)$:

$$P(D|\theta) = C_3^1 \cdot \theta \cdot (1 - \theta)^2$$

- Như vậy, ta có xác suất hậu nghiệm:

$$P(\theta|D) \sim P(\theta) \cdot P(D|\theta) = 12 \cdot \theta(1 - \theta)^5$$

- Vì sử dụng hàm loss 0-1, theo định lý vừa có, ta được:

$$\hat{\theta} = \operatorname{Argmax}_{\theta} \theta(1 - \theta)^5$$

- Đây chính là bài toán tìm cực trị của $\theta(1 - \theta)^5$.
- Bài toán tìm cực trị đa thức với $\theta \in [0,1]$.

- Ta xét đa thức:

$$P(\theta) = -\theta^6 + 5\theta^5 - 10\theta^4 + 10\theta^3 - 5\theta^2 + \theta$$

- $P'(\theta) = -6\theta^5 + 25\theta^4 - 40\theta^3 + 30\theta^2 - 10\theta + 1$.
- Cho $P'(\theta) = 0$. Tìm θ để $P(\theta)$ đạt cực đại.

- Ta tìm được:

$$\theta = \frac{1}{6}$$

- Lưu ý: $\theta = \frac{1}{6} = \frac{1+1-1}{3+1+4-2} = \frac{1+\alpha-1}{3+\alpha+\beta-2}$
- Ta cũng có $P(\theta|D) \sim \text{Beta}(2, 6) = \text{Beta}(\alpha + 1, \beta + 2)$

- Như vậy về mặt tổng quát, trong trường hợp ta có phân phối tiên nghiệm là $\theta \sim \beta(m, n)$; $D|\theta \sim B(a, b)$. Ước lượng bằng phương pháp Bayes với hàm Loss 0-1, ta được:

$$\hat{\theta} = \frac{m - 1 + a}{m + n + a + b - 2}$$

2. Sửa một vài bài tập:

- Bài tập: Chứng minh định lý ước lượng hàm loss bình phương trong trường hợp θ là một biến số thực.
- Định lý: Cho mẫu ngẫu nhiên X_1, X_2, \dots, X_n với hàm mật độ xác suất $f(X|\theta)$ trong đó θ là tham số cần ước lượng. Nếu ta sử dụng hàm loss là hàm loss bình phương, thì ước lượng Bayes $\hat{\theta} = E(\theta|x_1, x_2, \dots, x_n)$.

Chứng minh:

- Xét hàm loss bình phương:

$$L(\hat{\theta}, \theta) = (\hat{\theta} - \theta)^2$$

- Khi đó ta có hàm loss kì vọng:

$$E[L(\hat{\theta}, \theta)] = \int (\hat{\theta} - \theta)^2 p(\theta|D) d\theta$$

- Theo như chứng minh định lý của bài trước, ta có:

$$\begin{aligned} E[L(\hat{\theta}, \theta)] &= \int (\hat{\theta} - \theta)^2 p(\theta|D) d\theta \\ &= \int (\{\hat{\theta} - E(\theta|D)\} - \{\theta - E(\theta|D)\})^2 p(\theta|D) d\theta \quad (1) \end{aligned}$$

- (1) trở thành:

$$\int [\theta - E(\theta|D)]^2 p(\theta|D) d\theta + 2 \left(\hat{\theta} - E(\theta|D) \right) \int (\theta - E(\theta|D)) p(\theta|D) d\theta + (E(\theta|D) - \hat{\theta})^2$$

- Ta đã biết:

$$\begin{aligned} & 2 \left(\hat{\theta} - E(\theta|D) \right) \int (\theta - E(\theta|D)) p(\theta|D) d\theta \\ &= 2 \left(\hat{\theta} - E(\theta|D) \right) E[\theta - E(\theta|D)] = 0 \end{aligned}$$

Với $E[\theta - E(\theta|D)] = 0, E[\theta - E(\theta)] = 0$.

- Và ta được:

$$E[L(\hat{\theta}, \theta)]$$

$$= \int [\theta - E(\theta|D)]^2 p(\theta|D) d\theta + (E(\theta|D) - \hat{\theta})^2$$

- Vì $\int [\theta - E(\theta|D)]^2 p(\theta|D) d\theta$ không phụ thuộc vào giá trị của tham số cần ước lượng $\hat{\theta}$, nên $E[L(\hat{\theta}, \theta)]$ đạt cực trị khi:

$$(E(\theta|D) - \hat{\theta})^2 = 0$$

Hay $E(\theta|D) = \hat{\theta}$.

Bài tập (tiếp):

- Bài tập 2: Ước lượng tham số $\hat{\theta}$ trong trường hợp $D|\theta$ có phân phối Poisson và hàm loss là một hàm bình phương tổn thất.

Lời giải bài 2:

- Giả sử ta có bộ dữ liệu $D = (X_1, \dots, X_n)$ với:

$$p(x_i|\theta) = \frac{\theta^{x_i} \cdot e^{-\theta}}{x_i!}$$

- Ta xét hàm likelihood:

$$p(D|\theta) = \prod_i p(x_i|\theta) = \frac{\theta^{\sum_i x_i} \cdot e^{-n\theta}}{\prod_i x_i!} = \frac{\theta^{n\bar{x}} \cdot e^{-n\theta}}{\prod_i x_i!}$$

- Ta cho phân phối tiên nghiệm là $\theta \sim \text{Gamma}(\alpha, \beta)$ và:

$$p(\theta) = \frac{\theta^{\alpha-1} \beta^{\alpha} \cdot e^{-\beta\theta}}{\Gamma(\alpha)}$$

- Từ đây, ta có xác suất hợp:

$$P(X_1, \dots, X_n; \theta) = P(D|\theta) \cdot P(\theta) = \frac{\beta^{\alpha} \theta^{n\bar{x} + \alpha - 1} \cdot e^{-(n+\beta)\theta}}{\prod_i x_i! \cdot \Gamma(\alpha)}$$

- Sử dụng xác suất biên, ta có:

$$\begin{aligned} P(D) &= \int_0^{+\infty} P(D, \theta) d\theta \\ &= \int_0^{+\infty} \frac{\beta^\alpha \theta^{n\bar{x} + \alpha - 1} \cdot e^{-(n+\beta)\theta}}{\prod_i x_i! \cdot \Gamma(\alpha)} d\theta \end{aligned}$$

- Tính toán với tích phân, ta có:

$$P(D) = \frac{\beta^\alpha \cdot \Gamma(n\bar{x} + \alpha)}{\prod_i x_i! \cdot (n + \beta)^{n\bar{x} + \alpha}}$$

- Xét công thức:

$$P(\theta|D) = \frac{P(D, \theta)}{P(D)}$$

- Ta được:

$$P(\theta|D) = \frac{(n + \beta)^{n\bar{x} + \alpha}}{\Gamma(n\bar{x} + \alpha)} \theta^{n\bar{x} + \alpha - 1} \cdot e^{-\theta(n + \beta)}$$

- Vậy $\theta|D \sim \text{Gamma}(n\bar{x} + \alpha, n + \beta)$

- Như vậy, áp dụng định lý ước lượng Bayes dành cho hàm loss bình phương, ta được tham số $\hat{\theta}$:

$$\hat{\theta} = E(\theta|D) = \frac{\alpha'}{\beta'} = \frac{n\bar{x} + \alpha}{n + \beta}$$

Bài tập: cho $D = (X_1 = 3, X_2 = 5, X_3 = 1)$ và $D|\theta$ có phân phối Poisson. Biết $\theta \sim \text{Gamma}(3,2)$. Tính $\hat{\theta}$.

Bài tập (tiếp)

- Bài tập 3: Ước lượng tham số θ trong trường hợp $D|\theta$ có phân phối chuẩn và hàm loss là một hàm bình phương tổn thất.

Lời giải:

- Giả sử ta có bộ dữ liệu $D = (X_1, \dots, X_n)$ với $X_i \sim N(\theta, 1)$:

$$p(x_i|\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}(x-\mu)^2}$$

- Khi đó, hàm likelihood sẽ là:

$$p(D|\theta) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} e^{\sum_{i=1}^n \left(-\frac{1}{2}(x_i-\mu)^2\right)}$$

- Ta xét xác suất tiên nghiệm $\theta \sim N(0,1)$:

$$P(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\theta^2}$$

- Từ đó ta được phân phối hợp:

$$P(\theta, D) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n+1}{2}}} e^{-\frac{1}{2}(\sum_{i=1}^n x_i^2 - 2\theta n\bar{x} + (n+1)\theta^2)}$$

- Xác suất biên của D sẽ là:

$$P(D) = \int_{-\infty}^{+\infty} P(D, \theta) d\theta$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n+1}(2\pi)^{\frac{n+1}{2}}} e^{-\frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^n x_i^2 - \frac{n^2(\bar{x})^2}{n+1}\right)}$$

- Như vậy ta được phân phối hậu nghiệm:

$$P(\theta|D) = \frac{P(\theta, D)}{P(D)}$$

$$= \frac{\sqrt{n+1}}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{-(n+1)}{2} \left(\theta - \frac{n\bar{x}}{n+1} \right)^2}$$

- Ta sẽ áp dụng định lý ước lượng tham số cho hàm loss bình phương để tính $\hat{\theta}$.
- Ta có:

$$\hat{\theta} = E(\theta|D) = \int_{-\infty}^{+\infty} \theta P(\theta|D) d\theta = \frac{n\bar{x}}{n+1}$$

- Lưu ý: Ta có thể kết luận rằng là $\hat{\theta} = \frac{n\bar{x}}{n+1}$, vì nó có phân phối xác suất:

$$\theta|D \sim N\left(\frac{n\bar{x}}{n+1}, \sqrt{\frac{1}{n+1}}\right)$$

Khi đó $\hat{\theta} = E = \frac{n\bar{x}}{n+1}$