# Chapter 1:

# Theory

Phần này có phần giới thiệu ngắn về các phương pháp Bayes (Gelman và cộng sự, 2014) tập trung vào các bài toán nghịch đảo (Tarantola, 2005; Kaipio và Somersalo, 2005). Một vấn đề nghịch đảo phát sinh khi các tham số chưa biết không thể đo trực tiếp được ước lượng dựa trên dữ liệu thực nghiệm chỉ liên quan gián tiếp đến các tham số thông qua một mô hình tính toán. Vấn đề được gọi là nghịch đảo vì thay vì truyền thông tin về các tham số đầu vào thông qua một mô hình tính toán (được gọi là phương pháp tiếp cận thuận), mục tiêu là truyền thông tin về các quan sát ngược lại để có được cái nhìn sâu sắc về các đầu vào của mô hình. Công thức này bao gồm một loạt các vấn đề trong kỹ thuật và khoa học tự nhiên (Hadidi và Gucunski, 2008; Beck, 2010; Yuen và Kuok, 2011).

# Bayesian inference

Thống kê thường được mô tả là khoa học cho phép người ta xây dựng các mô hình của các hiện tượng phức tạp dựa trên dữ liệu. Suy luân thống kế thường được coi rằng dữ liệu này là được tạo ra từ các nhận thức độc lập của một vector ngẫu nhiên cơ bản với một hàm mật độ xác suất liên quan (PDF) , mà các thuộc tính của chúng phải được thiết lập từ dữ liệu đó. Các mô hình thống kê tham số đưa ra giả định về hình dạng của PDF này (ví dụ: Gaussian, Weibull, lognormal trong trường hợp một chiều) và mục tiêu của suy luận là ước tính các tham số θ của PDF này với dữ liệu hoặc chính thức hơn:

**)**

trong đó Θ là vectơ ngẫu nhiên liên kết với các tham số θ và đường thẳng đứng | được sử dụng để biểu thị sự phụ thuộc có điều kiện của đại lượng ở bên trái vào đại lượng ở bên phải.

Khi có đủ lượng dữ liệu, công cụ ước tính cổ điển có thể được sử dụng: ví dụ, nếu một phân phối Gaussian được trang bị cho một tập dữ liệu đủ lớn X, giá trị trung bình thực nghiệm và độ lệch chuẩn của mẫu có thể được sử dụng làm công cụ ước lượng trong số các thông số là . Tuy nhiên, một ước tính trực tiếp như vậy không đáng tin cậy khi có

chỉ một số ít các điểm dữ liệu. Về mặt kỹ thuật, độ không đảm bảo thống kê của công cụ ước lượng trở nên quá lớn trong trường hợp này. Trong bối cảnh này, thống kê Bayes cho phép người ta phù hợp với mô hình thống kê bằng cách kết hợp một số kiến thức trước đây về các tham số với (có thể là một vài) điểm dữ liệu quan sát được, sử dụng định lý Bayes. Trước khi xem xét dữ liệu, trong mô hình Bayes, các tham số của phân phối tham số được coi là một vectơ ngẫu nhiên ký hiệu là Θ được giả định tuân theo cái gọi là phân phối trước (prior distribution):

Sự lựa chọn chủ quan này phải phản ánh mức độ thông tin hiện có trên các tham số θ trước khi bất kỳ phép đo X nào được thực hiện.. Từ định lý Bayes, phân phối sau của các tham số, được ký hiệu là π (θ|x), thu được bằng:

Bây giờ hãy xem xét một tập dữ liệu gồm các giá trị đo được , những điểm của họ được xem như là những nhận thức độc lập của . Với các phép đo này, hàm khả năng (likelihood function) , một hàm của các tham số θ, có thể được định nghĩa:

Điều này mặc nhiên giả định sự độc lập giữa các phép đo riêng lẻ trong **.** Trực quan hàm khả năng cho một θ nhất định trả về khả năng tương đối để quan sát dữ liệu hiện có, với giả định rằng nó tuân theo phân phối tham số đã quy định .

Theo định lý Bayes, phân phối sau π (θ|) của các tham số θ cho các quan sát trong X bây giờ có thể được viết dưới dạng:

trong đó hệ số chuẩn hóa Z, được gọi là bằng chứng hoặc khả năng cận biên, sẽ đảm bảo rằng phân phối này tích hợp thành 1:

Phân phối sau trong Eq. (1.5) tóm tắt thông tin suy ra về các tham số bằng cách kết hợp kiến thức trước đó và dữ liệu quan sát. Theo nghĩa này, hậu π (θ|X) là một "bản cập nhật" của phân phối trước π (θ).

Tính toán thực tế của các phân phối sau không phải là nhỏ. Các giải pháp phân tích cụ thể chỉ tồn tại cho các kết hợp cụ thể của các phân bố trước trên Θ và hàm khả năng, cái gọi là phân bố liên hợp (Gelman và cộng sự, 2014). Trong trường hợp chung, các phương pháp lấy mẫu sẽ được sử dụng như mô phỏng Markov Chain Monte Carlo (xem Phần 1.3 để biết thêm chi tiết).

Trong các ứng dụng thực tế liên quan đến định lượng độ không đảm bảo, mục đích của suy luận Bayes có thể không chỉ là tìm phân phối sau π (θ|X), mà còn để đề xuất “phân phối tốt nhất” cho các tham số X|X với thông tin và dữ liệu có sẵn. Một khả năng là chọn một công cụ ước lượng điểm , tức là một giá trị cụ thể từ phân phối sau của π (θ|X). Sau đó, phân phối điểm sau của X|X chỉ đơn giản là:

Các lựa chọn phổ biến cho là trung bình sau, là giá trị trung bình của phân phối sau (1.5) và chế độ sau, còn gọi là tối đa posteriori (MAP), là chế độ của phân phối sau này. Các lựa chọn như vậy bỏ qua độ không đảm bảo đo trong các tham số θ.

Ngược lại, cũng có thể kết hợp độ không đảm bảo đo trong θ vào đánh giá trước và sau của X và X|X tương ứng. Điều này dẫn đến cái gọi là phân phối dự đoán. Phân phối dự đoán trước của X có được bằng cách "lấy trung bình" phân phối tham số π (x|θ) trên phân phối trước π (θ):

Phân phối tiên đoán phía sau π (x|X) thu được bằng cách "lấy trung bình" phân phối tham số π (x|θ) trên phân phối phía sau π (θ|X) trong phương trình. (1.5):

**.**

# Hiệu chỉnh mô hình Bayes và các vấn đề nghịch đảo

## Một loạt các bài toán chia sẻ các phương pháp giống nhau.