

母数の最尤推定・ベイズ推定

樋口さぶろお <https://hig3.net>

龍谷大学大学院 先端理工学研究科 数理・情報科学コース

計算科学特論 L03(2025-10-08 Wed)

最終更新: Time-stamp: "2025-10-18 Sat 18:34 JST hig"

今日の目標

- 最尤推定 (MLE) ができる
- 母数のベイズ推定 (最大事後確率 MAP) ができる



L02-Q1

Quiz 解答:2次元の確率密度関数

$$\textcircled{1} \quad f_X(x) = \phi(x) \int_{-\infty}^{+\infty} u(y; 0, 1) dy = \phi(x).$$

$$f_Y(y) = u(y; 0, 1) \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(x) dx = u(y; 0, 1).$$

X, Y は独立なので，各因子がそれぞれ得られる．

$$\textcircled{2} \quad f_{X|Y}(x|y) = \frac{u(y; 0, 1)\phi(x)}{u(y; 0, 1)} = \phi(x).$$

$$f_{Y|X}(y|x) = \frac{u(y; 0, 1)\phi(x)}{\phi(x)} = u(y; 0, 1).$$

X, Y は独立なので，それぞれ周辺分布と同じになる．

$$\textcircled{3} \quad u \text{ 用ルーレット, } g \text{ 用ダーツを任意の順に使って, 別々に決めればよい.}$$

L02-Q2

Quiz 解答:2次元の確率密度関数

$$\textcircled{1} \quad f_X(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} u(y; 0, 1) \phi(x - y) dy = \int_0^1 \phi(y - x) dy = \Phi(1 - x) - \Phi(-x).$$

ただし, $\Phi(x)$ は標準正規分布の累積分布関数 $\Phi(x) = \int_{-\infty}^x \phi(x') dx'$.

$$f_Y(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} u(y; 0, 1) \phi(x - y) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} u(y; 0, 1) \phi(x') dx' = u(y; 0, 1)$$

ただし, 途中で積分の変数変換 $x' = x - y$ を行った.

$$\textcircled{2} \quad f_{X|Y}(x|y) = u(y; 0, 1) \phi(x - y) / u(y; 0, 1) = g(x; -y, 1^2).$$

$$f_{Y|X}(y|x) = u(y; 0, 1) \phi(x - y) / (\Phi(1 - x) - \Phi(-x))$$

$$\textcircled{3} \quad f(x, y) = f_{X|Y}(x|y) f_Y(y) \text{ のほうが簡単で, まずルーレット } u(y; 0, 1) \text{ によって } Y \text{ の実現値を得た後, 中心が } -y \text{ だけずれたダーツ } g(x; -y, 1^2) \text{ で } X \text{ の実現値を得ればよい.}$$

L02-Q3

Quiz 解答: 離散-連続混合型分布の周辺分布

$$\textcircled{1} \quad X \sim U(0, 1).$$

- ② $Y \sim B(1, \frac{1}{2})$.
- ③ $f_{X|Y}(x|1) = 2x \cdot u(x; 0, 1)$.
- ④ $Y \sim B(1, \frac{7}{10})$.
- ⑤ まず X をルーレット $u(x; 0, 1)$ で得て，次にコイン $B(1, x)$ で得るのが簡単.

L02-Q4

Quiz 解答: 離散-連続混合型分布の周辺分布

$$\textcircled{1} \quad f_X(x) = \begin{cases} \frac{3}{40} & (1 < x \leq 4) \\ \frac{17}{40} & (4 < x \leq 5) \\ \frac{7}{20} & (5 < x \leq 6) \\ 0 & \text{他} \end{cases}.$$

- ② $Y \sim B(1, \frac{7}{10})$.
- ③ $X|Y = 1 \sim U(4, 6)$.

- ④ $f_{Y|X}(1|4.5) = \frac{\frac{7}{10}u(4.5;4,6)}{\frac{3}{10}u(4.5;1,5) + \frac{7}{10}u(4.5;4,6)} = \frac{\frac{7}{10} \frac{1}{2}}{\frac{3}{10} \frac{1}{4} + \frac{7}{10} \frac{1}{2}} = \frac{14}{17}$. よって，
 $Y|X = 4.5 \sim B(1, \frac{14}{17})$.
- ⑤ $B(1, \frac{7}{10})$ にしたがうコインをまず振り，その実現値に応じて
 $u(x; 0, 1)$ のダーツを， $u(x; 1, 5)$ または $u(x; u; 4, 6)$ に変換して使えばよい.

ここまで来たよ

2 連続型，離散-連続型多次元確率分布

3 母数の最尤推定・ベイズ推定

- 従来の母比率の点推定
- 尤度と最尤推定
- ベイズ推定

頻度主義での母比率の区間推定

ベルヌイ分布 $X \sim B(1, p)$.

$$p(x) = \begin{cases} 1 - p & (x = 0) \\ p & (x = 1) \end{cases}$$

パラメタ p は母平均値に等しい $E[X] = p$.

標本 $X_1, \dots, X_N \sim B(1, p)$ (独立同分布) からパラメタ p を推定したい

確率統計 I(2022)L13 の方針

母平均値の推定量として標本平均値 $\bar{X} = \frac{1}{N}(X_1 + \dots + X_N)$ がある (一般論) のでこれを使おう.

標本平均値は母平均値に対する不偏推定量 $E[\bar{X}] = E[X]$.

疑問 母平均値でない母数の推定は? 例: $U(c, d)$ の c , $B(1, p)$ の p^2 や 母分散 $p(1 - p)$, 母分散. べつべつの理論が必要?

ここまで来たよ

2 連続型，離散-連続型多次元確率分布

3 母数の最尤推定・ベイズ推定

- 従来の母比率の点推定
- 尤度と最尤推定
- ベイズ推定

尤度

赤石 ペイズ推論 p.55

母数 p のベルヌイ分布 $X \sim B(1, p)$ で、実現値 $x = 0, 1$ が得られる確率は、

$$P(X = x) = p^x(1 - p)^{1-x}$$

サイズ N の標本の実現値 $x_1, \dots, x_N$ が得られる確率は、 $X_1, \dots, X_N$ は独立同分布にしたがうので、 $\sum_{i=1}^N x_i = k$ とおくと、

$$\begin{aligned} P(X_1 = x_1, X_2 = x_2, \dots) &= P(X_1 = x_1) \cdot P(X_2 = x_2) \dots \\ &= p^{x_1}(1 - p)^{1-x_1} \cdot p^{x_2}(1 - p)^{1-x_2} \dots \\ &= p^{\sum_{i=1}^N x_i} (1 - p)^{N - \sum_{i=1}^N x_i} \\ &= p^k (1 - p)^{N-k} \end{aligned}$$

これを、母数の関数 $L(p)$ とみなし、標本 $x_1, \dots, x_N$ が得られている（これらは定数とみなす）ときの尤度 (ゆうど) (likelihood) という。 $\log L(p)$ を対数尤度 赤石 ペイズ推論 p.58 という。

尤度=母数が「尤もらしい（もっともらしい）」度

尤度は、何かの確率変数が実現値 p をとる確率ではない

$\int L(p) dp = 1$ でもない

最尤推定

母数 θ (あるいは, $\theta_1, \theta_2, \dots$) に対して, いつでも尤度 $L(\theta)$ ($L(\theta_1, \dots)$) が考えられる.

標本が与えられたときの母数の推定量として, $L(\theta)$ を最大にする $\hat{\theta}$ を考えることができる.

$$\hat{\theta} = \operatorname{argmax}_{\theta} L(\theta)$$

これを最尤推定 (MLE=Maximum Likelihood Estimation), $\hat{\theta}$ を最尤推定量という.

$\frac{d}{d\theta} L(\theta) = 0$ を解けばよいが, 対数尤度 $\log L(\theta)$ に対して $\frac{d}{d\theta} \log L(\theta) = 0$ を考えるほうが楽なことが多い.

L03-Q1

Quiz(ベルヌイ分布の母数の最尤推定)

$X \sim B(1, p)$ のサイズ N の標本として, $x_1, \dots, x_N$ が得られた. ただし, $\sum_{i=1}^n x_i = k \leq N$ だった.
母数 p を最尤推定しよう.

L03-Q2

Quiz(一様分布の母数の最尤推定)

$X \sim U(c, d)$ のサイズ N の標本として, $x_1, \dots, x_N$ が得られた.

- ① 母平均値, 母分散を推定しよう. これらの値となる母数 c, d を求めよう.
- ② 母数 c, d を最尤推定しよう.

ここまで来たよ

2 連続型，離散-連続型多次元確率分布

3 母数の最尤推定・ベイズ推定

- 従来の母比率の点推定
- 尤度と最尤推定
- **ベイズ推定**

ベイズ推定

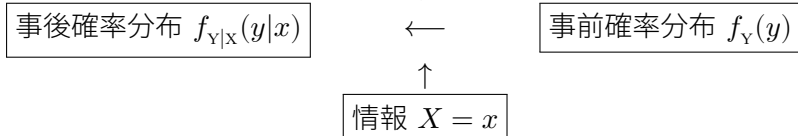
次のような確率変数 X_i, Y の同時分布 $f(x_i, y)$ を考えよう.

(出題者が指定する代わりに仏が) $Y \sim U(0, 1)$ から, 実現値 $Y = y$ を選ぶ. $f_Y(y) = u(y; 0, 1)$.

y が選ばれたとき, $X_i \sim B(1, y)$ で, サイズ N の標本 $x_1, \dots, x_N$ が抽出される. 条件付き分布 $f_{X|Y}(x|y) = y^x(1-y)^{1-x}$.

このとき, 標本 $x_1, x_2, \dots$ から y を推定する.

標本を条件とした条件付き分布 $f_{Y|X}(y|x_1, \dots, x_N)$ が得られる.



追加の情報 x_{N+1} が得られるたびに, 事後確率分布は正確になっていく.

主観確率＝信念 berief の考え方

上では仏の行動を明示したが、仏は推定者の心の中のみにあると考えてもよい。

すなわち、事前確率分布 f_Y は、仏がどんな y を選んだかに対する、推定者の主観的な予想であってよい。

このとき、事後確率分布 $f_{y|x}(y|x_1, \dots, x_N)$ は、標本という追加情報を受け取った上での、推定者の主観的な予想である。

事後確率分布は、 y の確率を定めているので、母数についての確率 $P(c \leq Y \leq d)$ を考えてよい。

↔ 頻度主義では、この確率は 0 または 1.

ベイズ推定のインプットは、‘モデル’ or ‘尤度’ $f_{X|Y}(x|y)$, 事前確率分布 $f_Y(y)$, 標本 $x_1, \dots, x_N$.

ベイズ推定のアウトプットは、事後確率分布 $f_{Y|X}(y|x_1, \dots, x_N)$.

- (点推定のように) 1 個の代表値に集約する
- (四分位範囲や区間推定のように) 1 個の代表的な部分集合に集約する

には複数の方法がありうる. (平均値, 中間値, ...)

1 個の代表値に集約する方法のひとつ

ベイズ MAP 推定 MAP, Maximum a posteriori, 最大事後確率
事後確率 (密度) を最大にする y を選ぶ:

$$\operatorname{argmax}_y f_{Y|X}(y|x_1, \dots, x_N)$$

尤度でなく確率 (密度) なので, 確率最大の値を選ぶ, と言える.

PyMC

PyMC は、 $f(y|x_1, \dots, x_N)$ (複雑だが式は書ける) の値を計算したりグラフを描いたりはないが、多数の y をサンプルすることができる．それでヒストグラムを描くことができる．そこから、代表値や代表的な部分集合を求めることができる．

サンプルする方法は MCMC(Markov Chain Monte Carlo 法．計算科学 II の主題)．

L03-Q3

Quiz(一様事前分布のもとでのベルヌイ分布の母数のベイズ推定)

$X \sim B(1, y)$ の母数 y の事前分布を $Y \sim U(0, 1)$ とする.
サイズ N の標本として, $x_1, \dots, x_N$ が得られた. ただし,
 $\sum_{i=1}^n x_i = k \leq N$ だった.
母数 y の事後分布を求めよう.
事後分布の確率密度関数が最大となる y を求めよう.

L03-Q4

Quiz(ベルヌイ分布のベイズ推定: 非一様事前分布)

$X \sim B(1, y)$ の母数 y の事前分布を $f_Y(y) = 6y(1-y)u(y; 0, 1)$ とする.
サイズ N の標本として, $x_1, \dots, x_N$ が得られた. ただし,

$\sum_{i=1}^n x_i = k \leq N$ だった.

母数 y の事後分布を求めよう.

事後分布の確率密度関数が最大となる y を求めよう.

