

確率分布達の解釈

- 黒木玄
- 2022-04-11~2022-04-22

このノートではJulia言語 (<https://julialang.org/>)を使用している:

- [Julia言語のインストールの仕方の一例](https://nbviewer.org/github/genkuroki/msfd28/blob/master/install.ipynb) (<https://nbviewer.org/github/genkuroki/msfd28/blob/master/install.ipynb>)

自明な誤りを見つけたら、自分で訂正して読んで欲しい。大文字と小文字の混同や書き直しが不完全な場合や符号のミスは非常によくある。

このノートに書いてある式を文字通りにそのまま読んで正しいと思ってしまうとひどい目に合う可能性が高い。しかし、数が使われている文献には大抵の場合に文字通りに読むと間違っている式や主張が書いてあるので、内容を理解した上で訂正しながら読んで利用しなければいけない。実践的に数学を使う状況では他人が書いた式をそのまま信じていけない。

このノートの内容よりもさらに詳しいノートを自分で作ると勉強になるだろう。膨大な時間を取られることになるが、このノートの内容に関係することで飯を食っていく可能性がある人にはそのためにかけた時間は無駄にならないと思われる。

目次

- ▼ [1 正規分布](#)
 - [1.1 正規分布のロケーションスケール変換も正規分布](#)
 - [1.2 問題: 正規分布の平均と分散](#)
 - [1.3 問題: 正規分布に従う独立な確率変数達の和も正規分布に従う](#)
 - [1.4 問題: 標準正規分布に従う独立な確率変数の和](#)
 - [1.5 必ず解いて欲しい問題: 正規分布における確率が95%または99%になる区間](#)
 - [1.6 問題: 正規分布のモーメント母関数とキュムラント母関数](#)
 - [1.7 問題: キュムラント母関数と期待値と分散](#)
 - [1.8 問題: 対数正規分布の確率密度関数](#)
 - [1.9 問題: 対数正規分布の期待値と分散](#)
- ▼ [2 \$t\$ 分布の「分散が確率的に揺らいでいる正規分布」という解釈](#)
 - [2.1 分散パラメータが確率分布に従う正規分布について](#)
 - [2.2 問題: 分散が \$\chi^2\$ 分布の \$\nu\$ 分の1に従う正規分布は自由度 \$\nu\$ の \$t\$ 分布になる](#)
 - [2.3 必ず解いて欲しい問題: \$t\$ 分布における確率が95%または99%になる区間](#)
- ▼ [3 Poisson分布の導入とその解釈](#)
 - [3.1 Poisson分布の定義](#)
 - [3.2 Poisson分布における確率の総和が1になることの確認](#)
 - [3.3 問題: Poisson分布のキュムラント母関数と期待値と分散](#)
 - [3.4 二項分布の連続時間極限](#)
 - [3.5 Poisson分布は単位時間内に起こるイベントの回数の分布だとみなされる](#)
 - [3.6 Poisson分布の中心極限定理と二項分布の中心極限定理の関係](#)
 - [3.7 問題: Poisson分布の中心極限定理の直接証明](#)
- ▼ [4 負の二項分布の「期待値=分散が確率的に揺らいでいるPoisson分布」という解釈](#)
 - [4.1 Poisson分布のパラメータがガンマ分布に従っていれば負の二項分布が得られる](#)
 - [4.2 問題: Poisson分布とガンマ分布から負の二項分布が得られる](#)
- ▼ [5 ガンマ分布の解釈](#)
 - [5.1 問題: 標準正規分布に従う確率変数の2乗は自由度1の \$\chi^2\$ 分布に従う](#)
 - [5.2 問題: 標準正規分布に従う \$n\$ 個の独立な確率変数達の2乗は自由度 \$n\$ の \$\chi^2\$ 分布に従う](#)
 - [5.3 負の二項分布の連続時間極限](#)
 - [5.4 負の二項分布の連続時間極限の様子をプロット](#)
 - [5.5 ガンマ分布はイベントが \$\alpha\$ 回起こるまでにかかる時間の分布とみなされる](#)
 - [5.6 Poisson分布の累積分布関数とガンマ分布の累積分布関数の関係](#)
 - [5.7 問題: Poisson分布の累積分布関数とガンマ分布の累積分布関数の関係の直接証明](#)
 - [5.8 必ず解いて欲しい問題: \$\chi^2\$ 分布における確率が95%または99%になる範囲](#)
 - [5.9 問題: 自由度1の \$\chi^2\$ 分布と標準正規分布の関係の数値例](#)
- ▼ [6 ベータ分布の一樣乱数生成の繰り返しによる解釈](#)
 - [6.1 一樣分布のサイズ \$n\$ の標本分布の順序統計量](#)
 - [6.2 一樣分布のサイズ \$n\$ の標本分布の順序統計量が従う分布](#)
 - [6.3 二項分布の累積分布関数のベータ分布の累積分布関数表示](#)
 - [6.4 二項分布とベータ分布の関係のClopper-PearsonのP値関数への応用](#)
 - [6.5 おまけ: 二項分布とベータ分布の関係のBayes統計への応用](#)
 - [6.6 おまけ関連問題: ベータ分布は二項分布の共役事前分布である](#)
 - [6.7 負の二項分布の累積分布関数のベータ分布の累積分布関数表示](#)

[6.8 負の二項分布とベータ分布の関係の非整数パラメータケース](#)
[6.9 二項分布の累積分布関数と負の二項分布の累積分布関数の関係\(まとめ\)](#)
[6.10 Poisson分布の累積分布関数とガンマの累積分布関数の関係\(再掲, まとめ\)](#)

▼ 7 ベータ二項分布

[7.1 ベータ二項分布の定義](#)
[7.2 ベータ二項分布の「成功確率が確率的に揺らいでいる二項分布」という解釈](#)
[7.3 ベータ二項分布での確率の総和が 1 になることの確認](#)
[7.4 問題: ベータ二項分布の期待値と分散](#)
[7.5 問題: ベータ二項分布 = 負の超幾何分布](#)
[7.6 超幾何分布, 二項分布, ベータ二項分布の統一的な理解](#)
[7.7 問題: 超幾何分布, 二項分布, ベータ二項分布の期待値と分散の統一的な公式](#)
[7.8 問題: ベータ二項分布の極限として負の二項分布が得られる](#)
[7.9 問題: 二項分布とベータ二項分布のモーメント母関数](#)

```
In [1]: 1 ENV["LINES"], ENV["COLUMNS"] = 100, 100
2 using BenchmarkTools
3 using Distributions
4 using Printf
5 using QuadGK
6 using Random
7 Random.seed!(4649373)
8 using Roots
9 using SpecialFunctions
10 using StaticArrays
11 using StatsBase
12 using StatsFuns
13 using StatsPlots
14 default(fmt = :png, titlefontsize = 10, size = (400, 250))
15 using SymPy
```

1 正規分布

$\mu, \sigma \in \mathbb{R}, \sigma > 0$ と仮定する. 確率密度関数

$$p(x|\mu, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

で定義される連続分布を平均 μ , 分散 σ^2 (標準偏差 σ) の **正規分布** (normal distribution) と呼び, $\text{Normal}(\mu, \sigma)$ と書くのであった.

さらに, 平均 0, 分散 1^2 の正規分布を **標準正規分布** (standard normal distribution) と呼び, $\text{Normal}()$ と書くのであった. 標準正規分布の密度関数は次の形になる:

$$p(z) = \frac{e^{-z^2/2}}{\sqrt{2\pi}}.$$

1.1 正規分布のロケーションスケール変換も正規分布

$a, b \in \mathbb{R}, a \neq 0$ と仮定する. 一般に確率変数 X について,

$$E[aX + b] = aE[X] + b, \quad \text{var}(aX + b) = a^2 \text{var}(X)$$

が成立するのであった. X が正規分布に従う確率変数の場合には $aX + b$ も正規分布に従うことを示せる. 実際, $X \sim \text{Normal}(\mu, \sigma)$ のとき, $y = ax + b$ すなわち $x = (y - b)/a$ とおくと,

$$\begin{aligned} E[f(aX + b)] &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} f(ax + b) \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} f(y) \exp\left(-\frac{((y-b)/a - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) \frac{dy}{|a|} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi(a^2\sigma^2)}} \int_{-\infty}^{\infty} f(y) \exp\left(-\frac{(y - (a\mu + b))^2}{2a^2\sigma^2}\right) dy \end{aligned}$$

なので, $aX + b$ は平均 $a\mu + b$, 分散 $a^2\sigma^2$ の正規分布に従う: $aX + b \sim \text{Normal}(a\mu + b, |a|\sigma)$.

1.2 問題: 正規分布の平均と分散

分布 $\text{Normal}(u, \sigma)$ の平均と分散がそれぞれ u, σ^2 になることを示せ.

解答例1:すでに標準正規分布 $\text{Normal}(0, 1)$ の平均と分散がそれぞれ 0 と 1^2 になることは示してある。 $X \sim \text{Normal}(\mu, \sigma)$ のとき、 $Z = (X - \mu)/\sigma$ とおくと $Z \sim \text{Normal}((\mu - \mu)/\sigma, \sigma/\sigma) = \text{Normal}(0, 1)$ となるので、 $X = \sigma Z + \mu$ の平均と分散はそれぞれ $\sigma \cdot 0 + \mu = \mu$, $\sigma^2 \cdot 1^2 = \sigma^2$ になる。

解答終

解答例2:直接的に計算してみよう。 $X \sim \text{Normal}(\mu, \sigma)$ のとき、積分変数を $x = \sigma z + \mu$ と変換すると、

$$E[X] = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-(x-\mu)^2/(2\sigma^2)} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (\sigma z + \mu) e^{-z^2/2} dz = \mu.$$

最後の等号で $\int_{-\infty}^{\infty} z e^{-z^2/2} dz = 0$ と $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2/2} dy = \sqrt{2\pi}$ を使った。この結果を使うと、

$$\text{var}(X) = E[(X - \mu)^2] = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu)^2 e^{-(x-\mu)^2/(2\sigma^2)} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \sigma^2 z^2 e^{-z^2/2} dz = \sigma^2.$$

最後の等号で $\int_{-\infty}^{\infty} z^2 e^{-z^2/2} dz = \sqrt{2\pi}$ を使った。この結果は

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha z^2} dz = \sqrt{\pi} \alpha^{-1/2}$$

の両辺を α で微分して -1 倍して $\alpha = 1/2$ とおいても得られるし、ガンマ函数に帰着する方法でも得られる。

解答終

1.3 問題: 正規分布に従う独立な確率変数達の和も正規分布に従う

確率変数達 X, Y は独立で(同時確率密度函数がそれぞれの確率密度函数の積になっており),

$$X \sim \text{Normal}(\mu_X, \sigma_X), \quad Y \sim \text{Normal}(\mu_Y, \sigma_Y)$$

となっているならば、

$$X + Y = \text{Normal}\left(\mu_X + \mu_Y, \sqrt{\sigma_X^2 + \sigma_Y^2}\right)$$

となることを示せ。

解答例: $X \sim \text{Normal}(\mu_X, \sigma_X)$, $Y \sim \text{Normal}(\mu_Y, \sigma_Y)$ でかつ X, Y は独立であると仮定する。

X, Y は独立なので $X + Y$ の平均と分散はそれぞれ $\mu_X + \mu_Y$, $\sigma_X^2 + \sigma_Y^2$ になる。

$X' = X - \mu_X$, $Y' = Y - \mu_Y$ とおくと、 $X' \sim \text{Normal}(0, \sigma_X)$, $Y' \sim \text{Normal}(0, \sigma_Y)$, $X + Y = (X' + Y') + (\mu_X + \mu_Y)$ となるので、 $X' + Y'$ が正規分布に従うことを示せば十分である。ゆえに $\mu_X = 0$, $\mu_Y = 0$ と仮定してよいので、そのように仮定する。

$X + Y$ の確率密度函数を計算して、それが正規分布の密度函数になっていることを示せばよい。

$$E[f(X + Y)] = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^2 \sigma_X^2 \sigma_Y^2}} \iint_{\mathbb{R}^2} f(x + y) \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{x^2}{\sigma_X^2} + \frac{y^2}{\sigma_Y^2}\right)\right) dx dy$$

であり、 $x = x + y$ すなわち $y = z - x$ において、 x について平方完成すると、

$$\frac{x^2}{\sigma_X^2} + \frac{y^2}{\sigma_Y^2} = \frac{x^2}{\sigma_X^2} + \frac{(z - x)^2}{\sigma_Y^2} = \frac{\sigma_X^2 + \sigma_Y^2}{\sigma_X^2 \sigma_Y^2} \left(x - \frac{\sigma_X^2 z}{\sigma_X^2 + \sigma_Y^2}\right)^2 + \frac{z^2}{\sigma_X^2 + \sigma_Y^2}.$$

となる(この計算を自分で実行してみることに)。ゆえに、

$$\begin{aligned} E[f(X + Y)] &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^2 \sigma_X^2 \sigma_Y^2}} \int_{\mathbb{R}} \left(\int_{\mathbb{R}} f(z) \exp\left(-\frac{\sigma_X^2 + \sigma_Y^2}{2\sigma_X^2 \sigma_Y^2} \left(x - \frac{\sigma_X^2 z}{\sigma_X^2 + \sigma_Y^2}\right)^2 - \frac{z^2}{2(\sigma_X^2 + \sigma_Y^2)}\right) dx \right) dz \\ &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^2 \sigma_X^2 \sigma_Y^2}} \sqrt{\frac{2\pi \sigma_X^2 \sigma_Y^2}{\sigma_X^2 + \sigma_Y^2}} \int_{\mathbb{R}} f(z) \exp\left(-\frac{z^2}{2(\sigma_X^2 + \sigma_Y^2)}\right) dz \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi(\sigma_X^2 + \sigma_Y^2)}} \int_{\mathbb{R}} f(z) \exp\left(-\frac{z^2}{2(\sigma_X^2 + \sigma_Y^2)}\right) dz \end{aligned}$$

以上によって $X + Y \sim \text{Normal}\left(\mu_X + \mu_Y, \sqrt{\sigma_X^2 + \sigma_Y^2}\right)$ を示せた。

解答終

別解: $z = x + y, y = z - x$ とおくと密度関数中の指数関数の中身が z についての二次式になることから, $Z = X + Y$ が正規分布に従うことは計算しなくても明らかだと考えることもできる. 上のように z 以外の変数は積分して消せる. そして, $Z = X + Y$ の期待値は X, Y の期待値の和になり, X, Y が独立という仮定からそれらは無相関になるので $Z = X + Y$ の分散は X, Y の分散の和になることもわかる. これだけで $X + Y \sim \text{Normal}(\mu_X + \mu_Y, \sqrt{\sigma_X^2 + \sigma_Y^2})$ を証明できたともみなせる.

上の解答中の最も面倒な部分の計算が正しいことはコンピュータで以下のように確認できる.

$a = \sigma_X^2, b = \sigma_Y^2$ とおくと,

```
In [2]: 1 @vars a b x z
        2 (a+b)/(a*b)*(x - a*z/(a+b))^2 + z^2/(a+b) - x^2/a - (z-x)^2/b > simplify
```

Out[2]: 0

以下のように素朴に計算することもできる.

```
In [3]: 1 @vars a b positive=true
        2 @vars x y z t
        3 expr = x^2/a + y^2/b
```

Out[3]: $\frac{y^2}{b} + \frac{x^2}{a}$

```
In [4]: 1 expr = expr(y=>z-x).expand()
```

Out[4]: $\frac{x^2}{b} - \frac{2xz}{b} + \frac{z^2}{b} + \frac{x^2}{a}$

```
In [5]: 1 A, B = 1/a+1/b, z/b
        2 expr = sympy.poly(expr(x => t + B/A), t)
```

Out[5]: $\text{Poly}\left(\frac{a+b}{ab}t^2 + \frac{z^2}{a+b}, t, \text{domain} = \mathbb{Z}(z, a, b)\right)$

```
In [6]: 1 # 以下のセルでの説明で使う図の準備
        2
        3 μ, σ, c = 2, 3, 1.5
        4 normal = Normal(μ, σ)
        5
        6 P1 = plot(normal, μ - 4σ, μ + 4σ; label="Normal(μ,σ)", xlabel="x = σz + μ")
        7 vline!([μ]; label="x=μ", xtick = ([μ-c*σ, μ, μ+c*σ], ["μ-cσ", "μ", "μ+cσ"]), ytick=false)
        8 plot!(normal, μ - 4σ, μ - c*σ; label="", c=1, frange=0, fc=:red, fa=0.5)
        9 plot!(normal, μ + c*σ, μ + 4σ; label="", c=1, frange=0, fc=:red, fa=0.5)
        10 annotate!(μ - 1.3c*σ, 0.8pdf(normal, μ - c*σ), ("P(X≤μ-cσ)", 10, :red, :right))
        11 annotate!(μ - 1.5c*σ, 0.5pdf(normal, μ - c*σ), ("= α/2", 10, :red, :right))
        12 annotate!(μ + 1.5c*σ, 0.5pdf(normal, μ + c*σ), ("= α/2", 10, :red, :left))
        13 annotate!(μ + 1.3c*σ, 0.8pdf(normal, μ + c*σ), ("1-P(X≤μ+cσ)", 10, :red, :left))
        14
        15 P2 = plot(Normal(), -4, 4; label="Normal(0,1)", xlabel="z = (x - μ)/σ")
        16 vline!([0]; label="z=0", xtick = ([-c, 0, c], ["-c", "0", "c"]), ytick=false)
        17 plot!(Normal(), -4, -c; label="", c=1, frange=0, fc=:red, fa=0.5)
        18 plot!(Normal(), c, 4; label="", c=1, frange=0, fc=:red, fa=0.5)
        19 annotate!(-1.3c, 0.8pdf(Normal(), -c), ("P(Z≤-c)", 10, :red, :right))
        20 annotate!(-1.5c, 0.5pdf(Normal(), -c), ("= α/2", 10, :red, :right))
        21 annotate!( 1.5c, 0.5pdf(Normal(), c), ("= α/2", 10, :red, :left))
        22 annotate!( 1.3c, 0.8pdf(Normal(), c), ("1-P(Z≤c)", 10, :red, :left))
        23
        24 var"P(μ-cσ ≤ X ≤ μ+cσ) = 1-α ⇔ 1 - P(Z ≤ c) = α/2" =
        25     plot(P1, P2; size=(800, 250), bottommargin=4Plots.mm);
```

1.4 問題: 標準正規分布に従う独立な確率変数の和

確率変数 X_1, \dots, X_n の各々は標準正規分布に従い, それらは独立な確率変数達である(すなわちそれらの同時確率密度関数が標準正規分布の確率密度関数の積になっている)と仮定する. このとき

$$Z_n = \frac{X_1 + \dots + X_n}{\sqrt{n}}$$

も標準正規分布に従うことを示せ.

解答例: X_i/\sqrt{n} は平均 0, 分散 $1/n$ の正規分布に従い, $X_1/\sqrt{n}, \dots, X_n/\sqrt{n}$ は独立になるので, 上の問題の結果より, それらの和は平均 $0 + \dots + 0 = 0$, 分散 $1/n + \dots + 1/n = 1$ の正規分布つまり標準正規分布に従う.

解答終

注意: この問題の結果より, 各々が標準正規分布に従う n 個の独立な確率変数達の和の \sqrt{n} 分の 1 が従う分布も標準正規分布になる.

分布 D は平均 0 と分散 1 を持つ分布であるとき, 各々が分布 D に従う n 個の独立な確率変数達の和の \sqrt{n} 分の 1 (以下 Z_n と書く) が従う分布はどうなるだろうか?

その場合にも Z_n の平均と分散はそれぞれ 0 と 1 になるが, Z_n が従う分布は一般に D とは異なる分布になる.

しかし, 応用上無理のないゆるい仮定のもとで, Z_n が従う分布は n を大きくすると標準正規分布に近づくことを示せる.

これが一般的な **中心極限定理** の主張である. もとの分布が標準正規分布なら Z_n が従う分布はぴったり標準正規分布になるが, それ以外の一般の場合にも n を大きくすれば Z_n が従う分布が近似的に標準正規分布になることはいえるのである.

1.5 必ず解いて欲しい問題: 正規分布における確率が95%または99%になる区間

$X \sim \text{Normal}(\mu, \sigma)$ であると仮定する. このとき, X が区間 $[\mu - c\sigma, \mu + c\sigma]$ に含まれる確率

$$P(\mu - c\sigma \leq X \leq \mu + c\sigma)$$

が $1 - \alpha$ に等しくなるような c を誤差関数

$$y = \text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-u^2) du$$

の逆関数 $x = \text{erfinv}(y)$ を使って表せ. (正規分布の定義に戻って地道に計算せよ.)

さらに, 上の確率が 95% になる c と 99% になる c を小数点以下第2桁目まで求めよ.

解答例: 標準正規分布の場合の計算に帰着することを考えよう.

$Z = (X - \mu)/\sigma$ とおくと Z は標準正規分布に従うのであった: $Z \sim \text{Normal}(0, 1)$. このとき,

$$\mu - c\sigma \leq X \leq \mu + c\sigma \iff -c \leq Z = \frac{X - \mu}{\sigma} \leq c$$

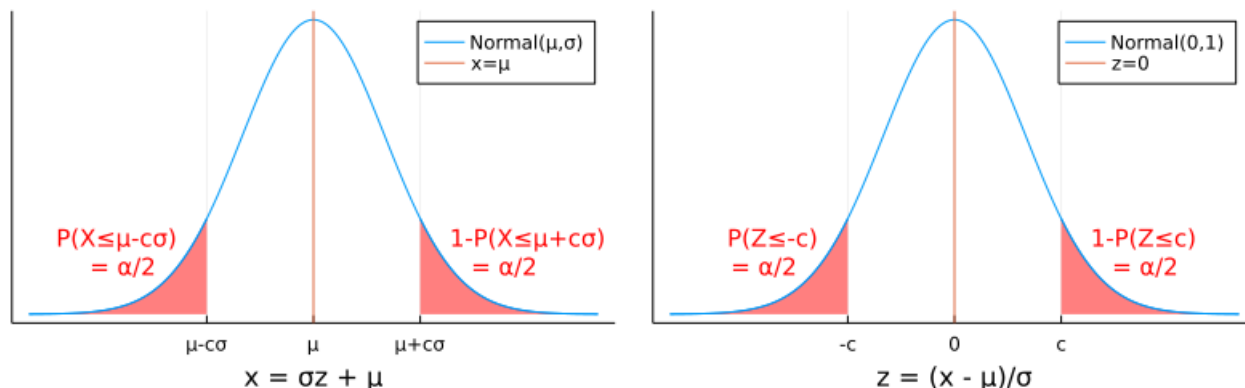
なので, 標準正規分布に従う確率変数 Z について $P(-c \leq Z \leq c)$ が 95% になる c と 99% になる c を求めればよい. 正規分布は左右対称なので, $P(-c \leq Z \leq c) = 1 - \alpha$ となることと, $1 - P(Z \leq c) = \alpha/2$ すなわち

$$P(Z \leq c) = 1 - \alpha/2$$

となることは同値である. 下の図を見よ.

In [7]: 1 var"P($\mu - c\sigma \leq X \leq \mu + c\sigma$) = $1 - \alpha \iff 1 - P(Z \leq c) = \alpha/2$ "

Out[7]:



標準正規分布の累積分布関数

$$F(z) = P(Z \leq z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^z e^{-t^2/2} dt$$

はコンピュータでの基本特殊関数ライブラリに含まれている誤差関数

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-u^2) du$$

を使えば

$$F(z) = P(Z \leq z) = \frac{1 + \operatorname{erf}(z/\sqrt{2})}{2}.$$

と書けるのであった. この公式を証明するためには,

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^0 e^{t^2/2} dt = \frac{1}{2}$$

を使ってから, $t = \sqrt{2}u$ とおけばよい. ゆえに誤差関数の逆関数 $\operatorname{erfinv}(y)$ (これもコンピュータでの基本特殊関数ライブラリに含まれている)を使えば, 標準正規分布の累積分布関数 $p = F(z)$ の逆関数(分位点関数)は

$$z = Q(p) = F^{-1}(p) = \sqrt{2} \operatorname{erfinv}(2p - 1)$$

と書ける. これを使えば $F(c) = P(Z \leq c) = 1 - \alpha/2$ となる c を

$$c = Q(1 - \alpha/2) = \sqrt{2} \operatorname{erfinv}(1 - \alpha)$$

と求めることができる.

- $1 - \alpha = 95\%$ のとき, $c = \sqrt{2} \operatorname{erfinv}(0.95) \approx 1.96$
- $1 - \alpha = 99\%$ のとき, $c = \sqrt{2} \operatorname{erfinv}(0.99) \approx 2.58$

解答終

[Julia言語 \(https://julialang.org/\)](https://julialang.org/)では以下のように計算できる. (ただし, using SpecialFunctions, Distributions が必要.)

```
In [8]: 1 @show √2 * erfinv(0.95)
        2 @show √2 * erfinv(0.99);

√2 * erfinv(0.95) = 1.9599639845400576
√2 * erfinv(0.99) = 2.5758293035489053
```

```
In [9]: 1 @show quantile(Normal(), 0.975)
        2 @show quantile(Normal(), 0.995);

quantile(Normal(), 0.975) = 1.9599639845400576
quantile(Normal(), 0.995) = 2.5758293035489053
```

[WolframAlpha \(https://www.wolframalpha.com/\)](https://www.wolframalpha.com/)では以下のように計算できる:

- $\sqrt{2} \operatorname{erfinv}(0.95)$ (<https://www.wolframalpha.com/input?i=%E2%88%9A2+erfinv%280.95%29>)
- $\sqrt{2} \operatorname{erfinv}(0.99)$ (<https://www.wolframalpha.com/input?i=%E2%88%9A2+erfinv%280.99%29>)
- $\operatorname{quantile}(\operatorname{NormalDistribution}(0,1), 0.975)$ (<https://www.wolframalpha.com/input?i=quantile%28NormalDistribution%280%2C1%29%2C+0.975%29>)
- $\operatorname{quantile}(\operatorname{NormalDistribution}(0,1), 0.995)$ (<https://www.wolframalpha.com/input?i=quantile%28NormalDistribution%280%2C1%29%2C+0.995%29>)

1.6 問題: 正規分布のモーメント母関数とキュムラント母関数

$X \sim \operatorname{Normal}(\mu, \sigma)$ のとき次が成立することを示せ:

$$E[e^{tX}] = e^{\mu t + \sigma^2 t^2/2}, \quad \log E[e^{tX}] = \mu t + \sigma^2 \frac{t^2}{2}.$$

注意: 一般に確率変数 X に対して, $E[e^{tX}]$ を X の **モーメント母関数** (moment generating function, mgf)と呼び, $\log E[e^{tX}]$ を X の **キュムラント母関数** (cumulant generating function, cgf)と呼ぶ.

注意: 正規分布のキュムラント母関数は上のように非常に単純な形になる. キュムラント母関数が t について2次式になることと分布が正規分布であることは同値であり, キュムラント母関数中の t について3次以上の項は分布が正規分布とどのように違うかを表している. 特にそのうちの最初の2つである $t^3/3!$ と $t^4/4!$ の係数はそれぞれ **歪度** (わいど, skewness) と **尖度** (せんど, kurtosis)と呼ばれている.

注意: モーメント母関数とキュムラント母関数は物理での統計力学での分配関数と自由エネルギーの統計学での類似物になっており、極めて便利な母関数になっている。上の t は物理的には逆温度 β の -1 倍の $-\beta$ に対応している。 $(t$ が小さい場合の物理的類似は温度が低い場合になる。 $t = -\beta$ が小さくなると温度の逆数 β は大きくなる。温度の逆数 β が大きくなると温度は小さくなる。注意: 絶対値が大きな負の温度は絶対値が小さな負の逆温度に対応し、絶対温度無限大は $\beta = 0$ の場合に対応しているので、絶対値が大きな負の温度は絶対温度無限大よりも少しだけ高温の場合に対応している。絶対温度ではなく、その逆数の逆温度 $\beta = -t$ で考えた方が混乱が少なくて済む。)

解答例:

$$\begin{aligned} tx - \frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2} &= -\frac{(x - \mu)^2 - 2\sigma^2 tx}{2\sigma^2} = -\frac{x^2 - 2(\mu + \sigma^2 t)x + \mu^2}{2\sigma^2} \\ &= -\frac{(x - (\mu + \sigma^2 t))^2 + \mu^2 - (\mu + \sigma^2 t)^2}{2\sigma^2} \\ &= -\frac{(x - (\mu + \sigma^2 t))^2 - 2\sigma^2 \mu t + \sigma^4 t^2}{2\sigma^2} \\ &= -\frac{(x - (\mu + \sigma^2 t))^2}{2\sigma^2} + \mu t + \sigma^2 \frac{t^2}{2} \end{aligned}$$

より

$$\begin{aligned} E[e^{tX}] &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{tx} e^{-(x-\mu)^2/(2\sigma^2)} dx \\ &= \frac{e^{\mu t + \sigma^2 t^2/2}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-(\mu+\sigma^2 t))^2/(2\sigma^2)} dx = e^{\mu t + \sigma^2 t^2/2}. \end{aligned}$$

これから $\log E[e^{tX}] = \mu t + \sigma^2 t^2/2$ はただちに得られる。

解答終

1.7 問題: キュムラント母関数と期待値と分散

期待値 μ と分散 σ を持つ確率変数 X について次が成立することを示せ:

$$\log E[e^{tX}] = \mu t + \sigma^2 \frac{t^2}{2} + O(t^3)$$

この結果は期待値と分散の計算に有用な場合がある。この結果は今後空気のごとく使われる。

解答例: $e^{tX} = 1 + Xt + X^2 t^2/2 + O(t^3)$ より,

$$E[e^{tX}] = 1 + E[X]t + E[X^2] \frac{t^2}{2} + O(t^3).$$

$\log(1 + a) = a - a^2/2 + O(a^3)$ を使うと,

$$\begin{aligned} \log E[e^{tX}] &= E[X]t + E[X^2] \frac{t^2}{2} - \frac{E[X]t^2}{2} + O(t^3) \\ &= E[X]t + (E[X^2] - E[X]^2) \frac{t^2}{2} + O(t^3) = \mu t + \sigma^2 \frac{t^2}{2} + O(t^3). \end{aligned}$$

解答終

1.8 問題: 対数正規分布の確率密度関数

$X \sim \text{Normal}(\mu, \sigma)$ のときの $Y = e^X$ が従う分布を対数正規分布と呼び,

$$\text{LogNormal}(\mu, \sigma)$$

と表す。対数正規分布の確率密度関数を求めよ。

解答例: $x = \log y$ と積分変数を変換すると, $dx = dy/y$ なので,

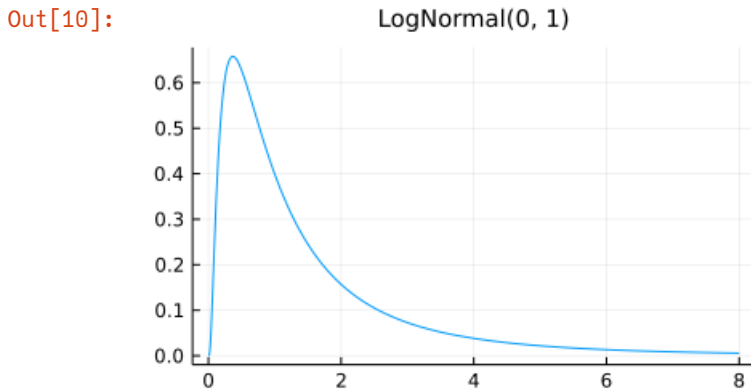
$$E[f(Y)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} f(e^x) \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} f(y) \exp\left(-\frac{(\log y - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) \frac{dy}{y}.$$

ゆえに対数正規分布の確率密度関数は次の形になる:

$$p(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2} y} \exp\left(-\frac{(\log y - \mu)^2}{2\sigma^2}\right).$$

解答終

```
In [10]: 1 plot(LogNormal(0, 1), 0, 8; label="", title="LogNormal(0, 1)")
```



1.9 問題: 対数正規分布の期待値と分散

$Y \sim \text{LogNormal}(\mu, \sigma)$ のとき次が成立することを示せ:

$$E[Y^m] = e^{m\mu + m^2\sigma^2/2}, \quad E[Y] = e^{\mu + \sigma^2/2}, \quad \text{var}(Y) = e^{2\mu + \sigma^2}(e^{\sigma^2} - 1).$$

解答例: $X = \log Y \sim \text{Normal}(\mu, \sigma)$ となるので, $E[Y^m]$ の計算で正規分布のモーメント母関数に関する結果を使え, 次が得られる:

$$E[Y^m] = E[e^{mX}] = e^{m\mu + m^2\sigma^2/2}.$$

ゆえに

$$\begin{aligned} E[Y] &= e^{\mu + \sigma^2/2}, \\ \text{var}(Y) &= E[Y^2] - E[Y]^2 = e^{2\mu + 2\sigma^2} - e^{2\mu + \sigma^2} = e^{2\mu + \sigma^2}(e^{\sigma^2} - 1). \end{aligned}$$

解答終

2 t 分布の「分散が確率的に揺らいでいる正規分布」という解釈

自由度 $\nu > 0$ の t 分布 $\text{TDist}(\nu)$ の確率密度関数は

$$p(t|\nu) = \frac{1}{\sqrt{\nu} B(1/2, \nu/2)} \left(1 + \frac{t^2}{\nu}\right)^{-(\nu+1)/2}$$

であり, これは $\nu \rightarrow \infty$ で標準正規分布の確率密度関数 $e^{-t^2/2}/\sqrt{2\pi}$ に収束するのであった.

2.1 分散パラメータが確率分布に従う正規分布について

Z は標準正規分布に従う確率変数であるとする.

$\sigma > 0$ について, $Z/\sqrt{\sigma^{-2}} = \sigma Z \sim \text{Normal}(0, \sigma)$ となる.

もしも, 値が正の実数になる確率変数 Y の期待値が ν で標準偏差が ν との比較で小さいならば Y/ν の分布はその期待値 1 の近くに集中する. (以下, Z, Y は独立であると仮定する.) そのとき, $Z/\sqrt{Y/\nu}$ が従う分布は分散が 1 の周囲で確率的に揺らぐ「正規分布」に従うことになる.

Y が確率密度関数 $p(y|\nu)$ を持つとき, $z = \sqrt{y/\nu} t$, $dz = \sqrt{y/\nu} dt$ とおくと,

$$\begin{aligned}
E[f(Z/\sqrt{Y/v})] &= \int_0^\infty \left(\int_{-\infty}^\infty f(z/\sqrt{y/v}) \frac{e^{-z^2/2}}{\sqrt{2\pi}} p(y|v) dz \right) dy \\
&= \int_0^\infty \left(\int_{-\infty}^\infty f(t) \frac{e^{-t^2/(2v)}}{\sqrt{2\pi}} p(y|v) \sqrt{\frac{y}{v}} dt \right) dy \\
&= \int_{-\infty}^\infty f(t) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi v}} \int_0^\infty e^{-t^2 y/(2v)} y^{1/2} p(y|v) dy \right) dt
\end{aligned}$$

なので、確率変数 $T = Z/\sqrt{Y/v}$ は確率密度関数

$$p(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi v}} \int_0^\infty e^{-t^2 y/(2v)} y^{1/2} p(y|v) dy$$

を持つことになる。

以上のように複数の確率変数を組み合わせて統計モデルを構築することが多い。実は t 分布もそのような統計モデルの一種とみなせることを次の問題で確認してもらう。以上を踏まえて次の問題を解け。

2.2 問題: 分散が χ^2 分布の v 分の1に従う正規分布は自由度 v の t 分布になる

$v > 0$ だと仮定する。確率変数 Y, Z は独立であるとし(同時確率密度関数がそれぞれの密度関数の積になる),

$$Z \sim \text{Normal}(0, 1), \quad Y \sim \text{Chisq}(v) = \text{Gamma}(v/2, 2)$$

と仮定する。Chisq(v) の期待値は $(v/2)2 = v$ になり、分散は $(v/2)2^2 = 2v$ になり、標準偏差は $\sqrt{2v}$ になるので、 v が 2 より大きければ、標準偏差は期待値よりも小さくなる。このとき、

$$T = \frac{Z}{\sqrt{Y/v}} \sim \text{TDist}(v)$$

となることを示せ。

解答例: $Y \sim \text{Chisq}(v) = \text{Gamma}(v/2, 2)$ の確率密度関数は

$$p(y|v) = \frac{1}{2^{v/2} \Gamma(v/2)} e^{-y/2} y^{v/2-1} \quad (y > 0)$$

になるので、前節の結果より、 T の確率密度関数が以下のように計算される:

$$\begin{aligned}
p(t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi v} 2^{v/2} \Gamma(v/2)} \int_0^\infty e^{-t^2 y/(2v)} y^{1/2} e^{-y/2} y^{v/2-1} dy \\
&= \frac{1}{\sqrt{v} 2^{(v+1)/2} \sqrt{\pi} \Gamma(v/2)} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{1+t^2/v}{2} y\right) y^{(v+1)/2-1} dy \\
&= \frac{1}{\sqrt{v} 2^{(v+1)/2} \Gamma(1/2) \Gamma(v/2)} \left(\frac{1+t^2/v}{2}\right)^{-(v+1)/2} \Gamma((v+1)/2) \\
&= \frac{\Gamma((v+1)/2)}{\sqrt{v} \Gamma(1/2) \Gamma(v/2)} \left(1 + \frac{t^2}{v}\right)^{-(v+1)/2} \\
&= \frac{1}{\sqrt{v} B(1/2, v/2)} \left(1 + \frac{t^2}{v}\right)^{-(v+1)/2}
\end{aligned}$$

3つめの等号で $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$ とガンマ関数のよくある使用法を使い、最後の等号で $\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta) = \Gamma(\alpha+\beta)B(\alpha, \beta)$ を使った。最後の式は t 分布の確率密度関数である。ゆえに $T \sim \text{TDist}(v)$ 。

解答終

以上のような積分の計算をすることがどうしても嫌な人は、以下のようにコンピュータで乱数を発生させてその分布を比較して納得するとよい。上のような数学の計算が得意な人であっても、具体的な計算をコンピュータに大量にさせて、その結果を視覚化して確認した方がよい。「百聞は一見に如かず」は確率分布の世界でも正しい。

```

In [11]: 1 function plot_nct(v; L = 10^6)
2         Z = rand(Normal(), L) # 標準正規分布の乱数を大量に生成
3         Y = rand(Chisq(v), L) #  $\chi^2$  分布で乱数達を大量生成
4         T_nc = @. Z./sqrt(Y/v)
5
6         # 比較のための同時プロット
7         binmin, binmax = round.(quantile.(TDist(v), (0.001, 0.999)))
8         bin = binmin:0.1:binmax
9         histogram(T_nc; norm=true, alpha=0.3, bin, xlim=(-6, 6), label="Z/sqrt(Y/v)")
10        plot!(TDist(v), binmin, binmax; label="TDist(v)", lw=1.5)
11        plot!(Normal(), binmin, binmax; label="Normal(0,1)", lw=1.5, ls=:dash)
12        title!(" $v = $v$ ")
13    end

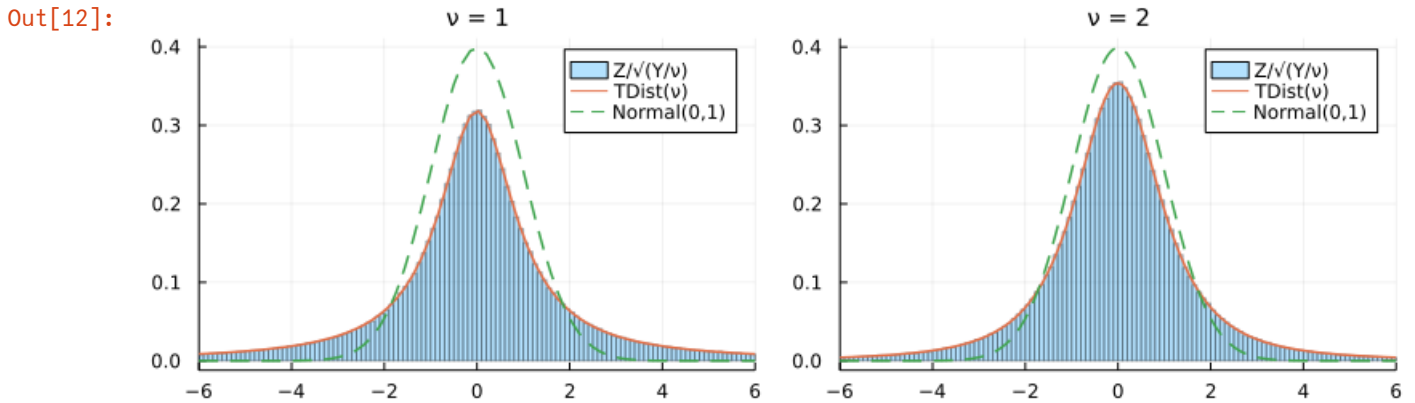
```

Out[11]: plot_nct (generic function with 1 method)

```

In [12]: 1 plot(plot_nct(1), plot_nct(2); size=(800, 250))

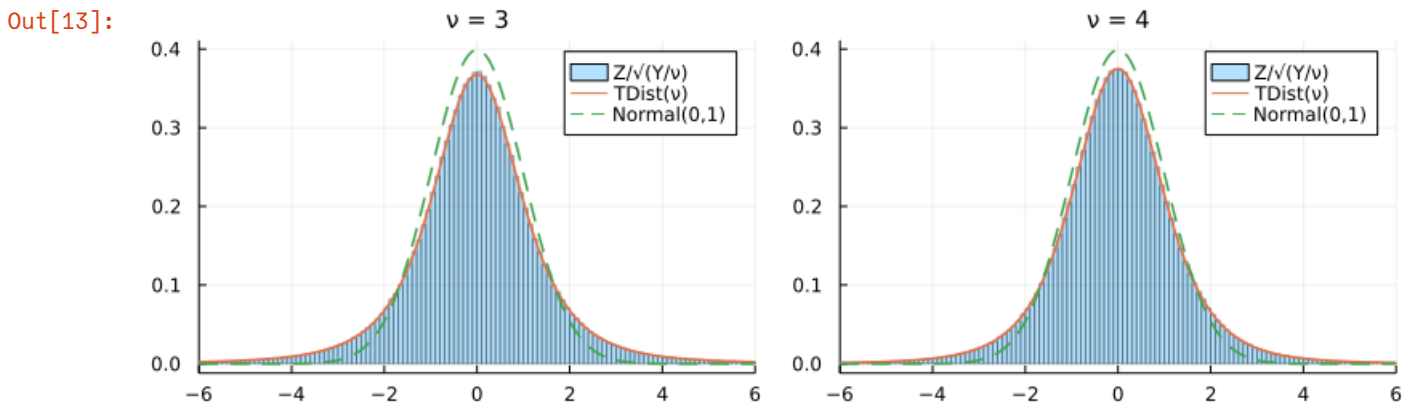
```



```

In [13]: 1 plot(plot_nct(3), plot_nct(4); size=(800, 250))

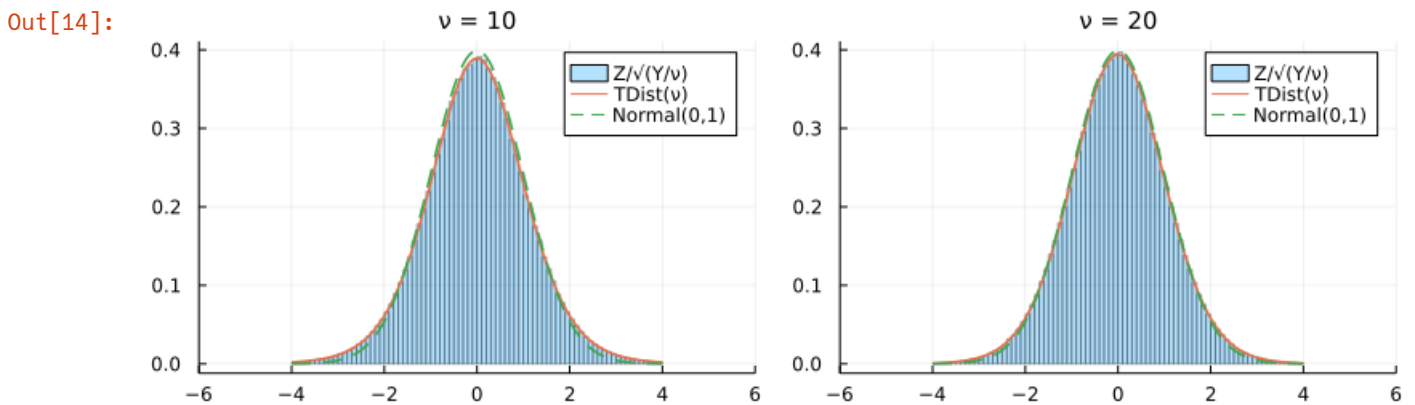
```



```

In [14]: 1 plot(plot_nct(10), plot_nct(20); size=(800, 250))

```

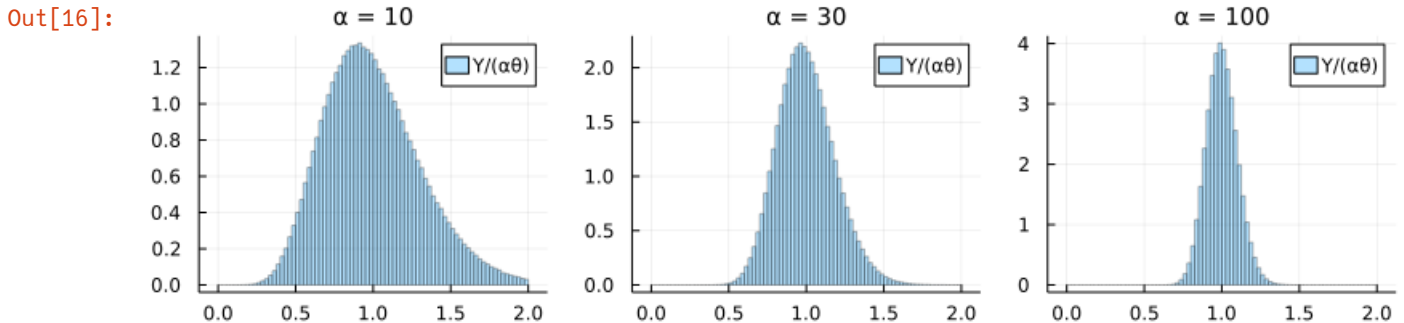


注意: 一般に $Y \sim \text{Gamma}(\alpha, \theta)$ のとき Y の平均と標準偏差はそれぞれ $\alpha\theta$ と $\sqrt{\alpha}\theta$ になるので、 $Y/(\alpha\theta)$ の平均と標準偏差はそれぞれ 1 と $1/\sqrt{\alpha}$ になる。これは α が大きくなると、 $Y/(\alpha\theta)$ の分布は 1 の近くに集中することを意味している。

```
In [15]: 1 function plot_gamox(α, θ = 1; L = 10^6) # Gamma over αθ
2         Y = rand(Gamma(α, θ), L) # χ² 分布で乱数達を大量生成
3         histogram(Y/(α*θ); norm=true, alpha=0.3, bin=0:0.025:2, label="Y/(αθ)")
4         title!("α = $α")
5     end
```

Out[15]: plot_gamox (generic function with 2 methods)

```
In [16]: 1 plot(plot_gamox(10), plot_gamox(30), plot_gamox(100); size=(800, 200), layout=(1, 3))
```



2.3 必ず解いて欲しい問題: t 分布における確率が95%または99%になる区間

$0 < \alpha < 1$, $\nu > 0$ であるとし, $T \sim \text{TDist}(\nu)$ と仮定する. このとき, T が区間 $[-c, c]$ に含まれる確率

$$P(-c \leq T \leq c)$$

が $1 - \alpha$ になるような c を **正則化された不完全ベータ関数**

$$y = I(x|\alpha, \beta) = I_x(\alpha, \beta) = \frac{\int_0^x v^{\alpha-1} (1-v)^{\beta-1} dv}{B(\alpha, \beta)}$$

の逆関数 $x = I^{-1}(y|\alpha, \beta)$ を使って表せ. (注意: $I_x(\alpha, \beta)$ は広く使われている標準的な記号法だが, $I(x|\alpha, \beta)$ と $I^{-1}(y|\alpha, \beta)$ はここだけの記号法である.)

さらに, $\nu = 9$ と $\nu = 19$ と $\nu = 29$ の場合に $P(-c \leq T \leq c)$ が 95% になる c と 99% になる c を小数点以下第2桁目まで求めよ.

お願い: この問題の前半部分は少し難しいかもしれないので, どうしても無理ならば以下の解答例をざっと見るだけでもよい. しかし, 後半の「さらに」以降の具体的な数値を求める部分は必ず解けるようになっておいて欲しい. コンピュータを使ってよい. (より正確に言えばコンピュータを使った計算の仕方を1つ以上マスターしておくこと!)

注意: 正規分布モデルの統計学で t 分布に関する計算が不完全ベータ関数に帰着できるという事実から, 正規分布モデルの統計学においてベータ分布が必須であることがわかる.

解答例: 以下 $t \geq 0$ と仮定する. t 分布の累積分布関数を $F(t) = P(T \leq t)$ と書くと,

$$F(t) = \frac{1}{\sqrt{\nu} B(1/2, \nu/2)} \int_{-\infty}^t \left(1 + \frac{s^2}{\nu}\right)^{-(\nu+2)/2} ds = \frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{\nu} B(1/2, \nu/2)} \int_0^t \left(1 + \frac{s^2}{\nu}\right)^{-(\nu+2)/2} ds.$$

ベータ関数の様々な表示の計算で学んだように, この積分変数を $s = \sqrt{\nu}u$ ($\Leftrightarrow u = s^2/\nu$) とおいて, さらに

$u = \nu/(1-\nu) = 1/(1-\nu) - 1$ ($\Leftrightarrow \nu = u/(1+u)$) とおくとベータ分布の累積分布関数すなわち正則化された不完全ベータ関数に帰着できることがわかる:

$$\begin{aligned} F(t) &= \frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{\nu} B(1/2, \nu/2)} \int_0^{t^2/\nu} (1+u)^{-(\nu+2)/2} \frac{\sqrt{\nu}}{2} u^{-1/2} du \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2B(1/2, \nu/2)} \int_0^{t^2/\nu} \frac{u^{1/2-1} du}{(1+u)^{1/2+\nu/2}} \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2B(1/2, \nu/2)} \int_0^{(t^2/\nu)/(1+t^2/\nu)} \left(\frac{\nu}{1-\nu}\right)^{1/2-1} (1-\nu)^{1/2+\nu/2} \frac{d\nu}{(1-\nu)^2} \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{\int_0^{(t^2/\nu)/(1+t^2/\nu)} \nu^{1/2-1} (1-\nu)^{\nu/2-1} d\nu}{B(1/2, \nu/2)} \\ &= \frac{1}{2} \left(1 + I\left(\frac{t^2/\nu}{1+t^2/\nu} \middle| \alpha, \beta\right)\right). \end{aligned}$$

ゆえに, $p = u/(1+u)$ と $u = p/(1-p) = 1/(1-p) - 1$ が同値であることを使うと, $t \geq 0$ のとき,

$$\begin{aligned} p = F(t) &\iff I^{-1}(2p-1|\alpha, \beta) = \frac{t^2/\nu}{1+t^2/\nu} \\ &\iff \frac{t^2}{\nu} = \frac{I^{-1}(2p-1|\alpha, \beta)}{1-I^{-1}(2p-1|\alpha, \beta)} = \frac{1}{1-I^{-1}(2p-1|\alpha, \beta)} - 1 \\ &\iff t = \sqrt{\nu \left(\frac{1}{1-I^{-1}(2p-1|\alpha, \beta)} - 1 \right)}. \end{aligned}$$

ゆえに $t \geq 0$ における $p = F(t)$ の逆関数である分位点関数は

$$t = Q(p) = F^{-1}(p) = \sqrt{\nu \left(\frac{1}{1-I^{-1}(2p-1|\alpha, \beta)} - 1 \right)}$$

と書ける.

$P(-c \leq T \leq c) = 1 - \alpha$ と $F(c) = P(T \leq c) = 1 - \alpha/2$ は同値なので, そのような $c \geq 0$ は次のように表される:

$$c = Q(1 - \alpha/2) = \sqrt{\nu \left(\frac{1}{1-I^{-1}(2p-1|\alpha, \beta)} - 1 \right)}.$$

$\nu = 9$ のとき,

- $P(-c \leq T \leq c) = 95\%$ となる $c \geq 0$ は $c \approx 2.26$
- $P(-c \leq T \leq c) = 99\%$ となる $c \geq 0$ は $c \approx 3.25$

$\nu = 19$ のとき,

- $P(-c \leq T \leq c) = 95\%$ となる $c \geq 0$ は $c \approx 2.09$
- $P(-c \leq T \leq c) = 99\%$ となる $c \geq 0$ は $c \approx 2.86$

$\nu = 29$ のとき,

- $P(-c \leq T \leq c) = 95\%$ となる $c \geq 0$ は $c \approx 2.05$
- $P(-c \leq T \leq c) = 99\%$ となる $c \geq 0$ は $c \approx 2.76$

ちなみに $Z \sim \text{Normal}(0, 1)$ のとき,

- $P(-c \leq Z \leq c) = 95\%$ となる $c \geq 0$ は $c \approx 1.96$
- $P(-c \leq Z \leq c) = 99\%$ となる $c \geq 0$ は $c \approx 2.58$

解答終

```
In [17]: 1 quantile_tdist(v, p) =  $\sqrt{v * (1/(1 - \text{beta\_inc\_inv}(1/2, v/2, 2p - 1)[1]) - 1))}$ 
2 quantile_stdnormal(p) =  $\sqrt{2} * \text{erfinv}(2p - 1)$ 
3
4 for v in (9, 19, 29)
5     @show v
6     @show quantile_tdist(v, 0.975)
7     @show quantile_tdist(v, 0.995)
8     println()
9 end
10 v = Inf
11 @show v
12 @show quantile_stdnormal(0.975)
13 @show quantile_stdnormal(0.995);
```

```
v = 9
quantile_tdist(v, 0.975) = 2.262157162798204
quantile_tdist(v, 0.995) = 3.2498355415921254
```

```
v = 19
quantile_tdist(v, 0.975) = 2.0930240544083096
quantile_tdist(v, 0.995) = 2.860934606464978
```

```
v = 29
quantile_tdist(v, 0.975) = 2.0452296421327034
quantile_tdist(v, 0.995) = 2.756385903670605
```

```
v = Inf
quantile_stdnormal(0.975) = 1.9599639845400576
quantile_stdnormal(0.995) = 2.5758293035489053
```

```
In [18]: 1 for v in (9, 19, 29)
2     @show v
3     @show quantile(TDist(v), 0.975)
4     @show quantile(TDist(v), 0.995)
5     println()
6 end
7 v = Inf
8 @show v
9 @show quantile(TDist(v), 0.975)
10 @show quantile(TDist(v), 0.995);
```

```
v = 9
quantile(TDist(v), 0.975) = 2.262157162798205
quantile(TDist(v), 0.995) = 3.249835541592126
```

```
v = 19
quantile(TDist(v), 0.975) = 2.093024054408309
quantile(TDist(v), 0.995) = 2.860934606464979
```

```
v = 29
quantile(TDist(v), 0.975) = 2.0452296421327034
quantile(TDist(v), 0.995) = 2.756385903670605
```

```
v = Inf
quantile(TDist(v), 0.975) = 1.9599639845400536
quantile(TDist(v), 0.995) = 2.5758293035489
```

例えば $v = 9$ のとき, WolframAlphaでは以下のように計算できる:

- $\text{sqrt}(n * (1/(1 - \text{InverseBetaRegularized}(0.95, 1/2, n/2)) - 1))$ where $n = 9$ (<https://www.wolframalpha.com/input?i=sqrt%28n+%281%2F%281+-+InverseBetaRegularized%280.95%2C+1%2F2%2C+n%2F2%29%29+-+1%29%29+where+n+%3D+9%29>),
- $\text{sqrt}(n * (1/(1 - \text{InverseBetaRegularized}(0.99, 1/2, n/2)) - 1))$ where $n = 9$ (<https://www.wolframalpha.com/input?i=sqrt%28n+%281%2F%281+-+InverseBetaRegularized%280.99%2C+1%2F2%2C+n%2F2%29%29+-+1%29%29+where+n+%3D+9%29>),
- $\text{quantile}(\text{StudentTDistribution}(9), 0.995)$ (<https://www.wolframalpha.com/input?i=quantile%28StudentTDistribution%289%29%2C+0.995%29>),
- $\text{quantile}(\text{StudentTDistribution}(9), 0.975)$ (<https://www.wolframalpha.com/input?i=quantile%28StudentTDistribution%289%29%2C+0.975%29>).

3 Poisson分布の導入とその解釈

3.1 Poisson分布の定義

$\lambda > 0$ と仮定する. 確率質量函数

$$p(k|\lambda) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^k}{k!} \quad (k = 0, 1, 2, \dots)$$

で定義される無限離散分布を **Poisson分布** (ポアソン分布)と呼び, 次のように表すことにする:

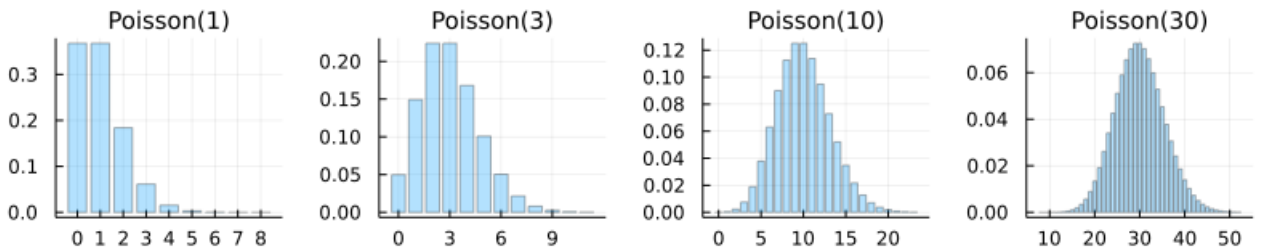
$$\text{Poisson}(\lambda).$$

Poisson分布は一定期間内に起こるイベントの回数の分布のモデル化としてよく使われている.

In [19]:

```
1 PP = []
2 for (λ, s) in ((1, 1), (3, 3), (10, 5), (30, 10))
3     x = max(0, round(λ-4/√λ)):λ+4/√λ+3/√λ
4     P = bar(x, k → pdf(Poisson(λ), k);
5         alpha=0.3, label="", title="Poisson($λ)", xtick=0:s:maximum(x))
6     push!(PP, P)
7 end
8 plot(PP...; size=(800, 150), layout=(1, 4))
```

Out[19]:



以上はPoisson分布 $\text{Poisson}(\lambda)$ の確率質量函数のグラフの例である. ここでは λ が整数の場合のみを扱ったが, λ は整数でなくてもよい. $\text{Poisson}(30)$ のグラフは正規分布のグラフに近くなっている. **パラメータ λ が大きなPoisson分布は正規分布で近似される.**

3.2 Poisson分布における確率の総和が1になることの確認

指数函数のTaylor展開によって,

$$\sum_{k=0}^{\infty} e^{-\lambda} \frac{\lambda^k}{k!} = e^{-\lambda} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\lambda^k}{k!} = e^{-\lambda} e^{\lambda} = 1.$$

Poisson分布は指数函数のTaylor展開から得られる離散分布である.

Poisson分布よりも複雑な負の二項分布は函数 $p^{-\alpha} = (1 - (1 - p))^{-\alpha}$ の $1 - p$ に関するTaylor展開

$$p^{-\alpha} = (1 - (1 - p))^{-\alpha} = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \binom{-\alpha}{m} (1 - p)^m = \sum_{m=0}^{\infty} \binom{\alpha + m - 1}{m} (1 - p)^m$$

から得られるのであった. このパターンはよく現れる.

3.3 問題: Poisson分布のキウムラント母函数と期待値と分散

$K_{\lambda} \sim \text{Poisson}(\lambda)$ のとき次が成立することを示せ:

$$\log E[e^{tK_{\lambda}}] = \lambda(e^t - 1), \quad E[K_{\lambda}] = \text{var}(K_{\lambda}) = \lambda.$$

さらに K_{λ} の標準化 Z_{λ} を $Z_{\lambda} = (K_{\lambda} - \lambda)/\sqrt{\lambda}$ と定めると次が成立することも示せ:

$$\log E[e^{tZ_{\lambda}}] = \log E \left[e^{t(K_{\lambda} - \lambda)/\sqrt{\lambda}} \right] = \frac{t^2}{2} + O(\lambda^{-1/2}).$$

ここで $O(\lambda^{-1/2})$ の部分は $O(\lambda)^{-1/2} = \lambda^{-1/2} \times (\lambda \rightarrow \infty \text{ で有界な量})$ であることを表している. たとえば, $f(\lambda)$ が $\lambda \rightarrow \infty$ で収束するとき, $\lambda^{-1/2} f(\lambda)$ は $O(\lambda^{-1/2})$ と表される. 特に $O(\lambda^{-1/2})$ の部分は $\lambda \rightarrow \infty$ で 0 に収束する.

解答例:

$$E[e^{tK_\lambda}] = e^{-\lambda} \sum_{k=0}^{\infty} e^{tk} \frac{\lambda^k}{k!} = e^{-\lambda} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\lambda e^t)^k}{k!} = e^{\lambda(e^t-1)},$$

$$\log E[e^{tK_\lambda}] = \lambda(e^t - 1) = \lambda \left(t + \frac{t^2}{2} + O(t^3) \right) = \lambda t + \lambda \frac{t^2}{2} + O(t^3).$$

$\log E[e^{tK_\lambda}]$ の展開における $t, t^2/2$ の係数がそれぞれ K_λ の期待値, 分散になるので

$$E[K_\lambda] = \text{var}(K_\lambda) = \lambda.$$

さらに, $Z_\lambda = (K_\lambda - \lambda)/\sqrt{\lambda}$ について

$$\begin{aligned} \log E[e^{tZ_\lambda}] &= \log \left(e^{-\sqrt{\lambda}t} E \left[e^{(t/\sqrt{\lambda})K_\lambda} \right] \right) = \log E \left[e^{(t/\sqrt{\lambda})K_\lambda} \right] - \sqrt{\lambda}t \\ &= \lambda \left(e^{t/\sqrt{\lambda}} - 1 \right) - \sqrt{\lambda}t = \lambda \left(\frac{t}{\sqrt{\lambda}} + \frac{t^2}{2\lambda} + O(\lambda^{-3/2}) \right) - \sqrt{\lambda}t \\ &= \left(\sqrt{\lambda}t + \frac{t^2}{2} + O(\lambda^{-1/2}) \right) - \sqrt{\lambda}t = \frac{t^2}{2} + O(\lambda^{-1/2}). \end{aligned}$$

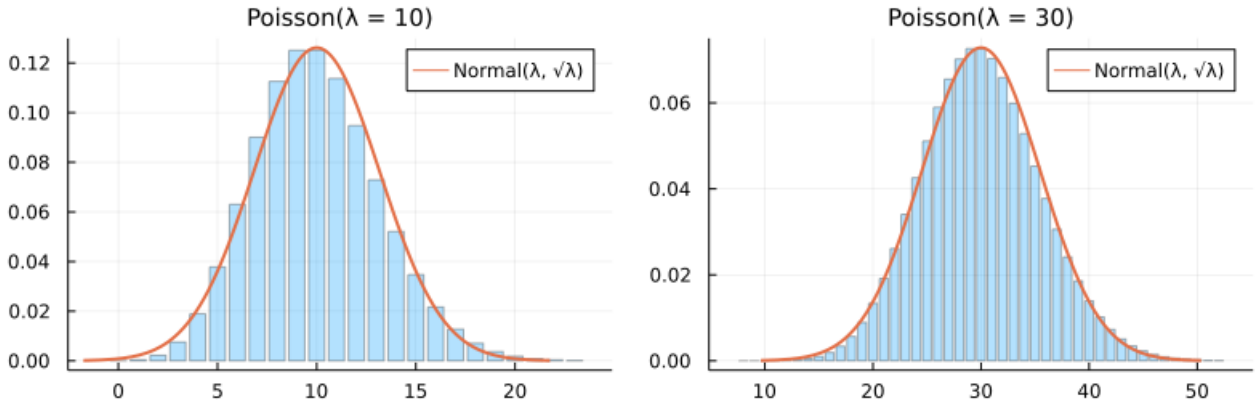
解答終

注意: 上の問題の結果より, $K_\lambda \sim \text{Poisson}(\lambda)$, $Z_\lambda = (K_\lambda - \lambda)/\sqrt{\lambda}$, $Z_\infty \sim \text{Normal}(0, 1)$ のとき, λ を大きくすると $\log E[e^{tZ_\lambda}]$ が $\log E[e^{tZ_\infty}]$ に収束する. (一般に確率変数 X の分布はそのキュムラント母関数 $\log E[e^{tX}]$ から一意に決まる. この点については別のノートで説明する.) これは実は λ が大きくなると, $Z_\lambda = (K_\lambda - \lambda)/\sqrt{\lambda}$ の従う分布が標準正規分布で近似されることを意味している. そのとき, もとの K_λ の分布は平均 λ , 分散 λ の正規分布で近似される. この結果を, **Poisson分布の中心極限定理** と呼ぶ.

In [20]:

```
1 PP = []
2 for λ in (10, 30)
3     P = bar(max(0, round(λ-4/√λ)):λ+4/√λ+3/√λ, k → pdf(Poisson(λ), k);
4         alpha=0.3, label="", title="Poisson(λ = $λ)")
5     plot!(Normal(λ, √λ); label="Normal(λ, √λ)", lw=2)
6     push!(PP, P)
7 end
8 plot(PP...; size=(800, 250), layout=(1, 2))
```

Out[20]:



3.4 二項分布の連続時間極限

期待値 λ のPoisson分布は同じ期待値を持つ p が小さな二項分布によって近似されることを示そう. 二項分布 $\text{Binomial}(n, p)$ の期待値は np なので, $p = \lambda/n$ とおくと期待値は λ になる. そのように p を定めて, $n \rightarrow \infty$ とすると, 以下のように, 二項分布の確率質量関数はPoisson分布の確率質量関数に収束する:

$$\begin{aligned} \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} &= \frac{n(n-1)\cdots(n-k+1)}{k!} \left(\frac{\lambda}{n} \right)^k \left(1 - \frac{\lambda}{n} \right)^{n-k} \\ &= \underbrace{\left(1 - \frac{1}{n} \right) \cdots \left(1 - \frac{k-1}{n} \right)}_{\rightarrow 1} \underbrace{\left(1 - \frac{\lambda}{n} \right)^{n-k}}_{\rightarrow \exp(-\lambda)} \frac{\lambda^k}{k!} \rightarrow e^{-\lambda} \frac{\lambda^k}{k!}. \end{aligned}$$

1つめの等号で二項係数の定義と $p = \lambda/n$ を使い, 2つめの等号で分子の $n(n-1)\cdots(n-k+1)$ を $(\lambda/n)^k = \lambda^k/n^k$ の分母の n^k で割った. 最後に $n \rightarrow \infty$ の極限を取った.

3.5 Poisson分布は単位時間内に起こるイベントの回数の分布だとみなされる

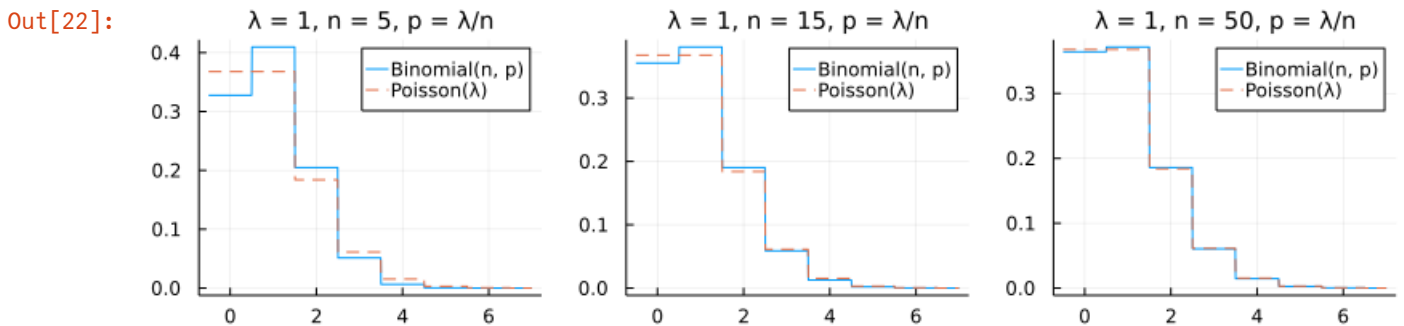
前節の結果は以下のように解釈される。

- (1) 二項分布は n 回のBernoulli試行で出る 1 の個数の分布であった。1 が出ることを「イベントが起こった」と解釈することにする。
- (2) n 回の試行を単位時間内に等間隔で行う状況を考える。これは時間の刻み幅が $1/n$ の離散時間を考えることに相当する。そのとき、二項分布は単位時間のあいだに平均して np 回起こるイベントが単位時間内で何回起こるかに関する分布になっている。
- (3) 単位時間内に起こる二項分布に従うイベントの回数の期待値 np を $np = \lambda$ と固定したままで、 $n \rightarrow \infty$ とすることは、時間の刻み幅を細かくする連続時間極限を取ることで考えられる。この極限によって、二項分布はPoisson分布に収束する。
- (4) Poisson分布は、連続時間の場合に単位時間のあいだに平均して λ 回起こるイベントが単位時間内で起こる回数の分布になっている。

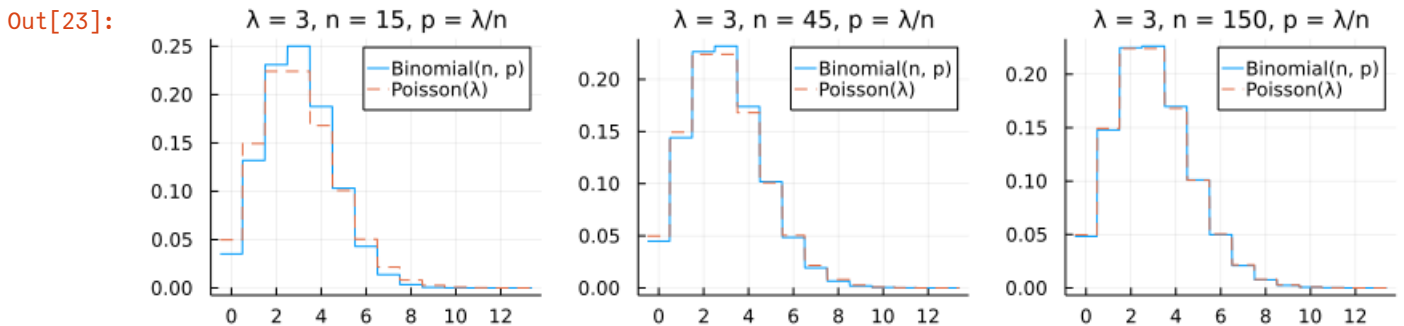
```
In [21]: 1 function plot_binpoi( $\lambda$ , n)
2         @assert n >  $\lambda$ 
3         p =  $\lambda$ /n
4         x = range(max(-0.5,  $\lambda - 5\sqrt{\lambda}$ ),  $\lambda + 6\sqrt{\lambda}$ , 1000)
5         plot(x, x  $\rightarrow$  pdf(Binomial(n, p), round(Int, x)); label="Binomial(n, p)")
6         plot!(x, x  $\rightarrow$  pdf(Poisson( $\lambda$ ), round(Int, x)); label="Poisson( $\lambda$ )", ls=:dash)
7         title!(" $\lambda = \$\lambda$ , n = $n, p =  $\lambda$ /n")
8     end
```

Out[21]: plot_binpoi (generic function with 1 method)

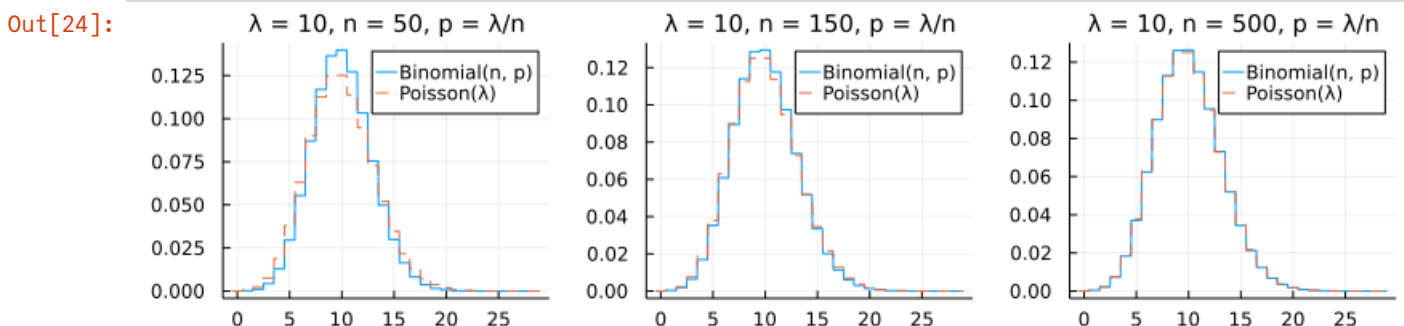
```
In [22]: 1 plot(plot_binpoi(1, 5), plot_binpoi(1, 15), plot_binpoi(1, 50); size=(800, 200), layout=(1, 3))
```



```
In [23]: 1 plot(plot_binpoi(3, 15), plot_binpoi(3, 45), plot_binpoi(3, 150); size=(800, 200), layout=(1, 3))
```



```
In [24]: 1 plot(plot_binpoi(10, 50), plot_binpoi(10, 150), plot_binpoi(10, 500); size=(800, 200), layout=(1, 3))
```



以上のグラフを見れば、 $p = \lambda/n$ とおくと、 n を大きくすると、二項分布が確かにPoisson分布で近似されていることがわかる。

3.6 Poisson分布の中心極限定理と二項分布の中心極限定理の関係

一般に期待値 μ , 標準偏差 σ を持つ確率変数 X の **標準化** Z は $Z = (X - \mu)/\sigma$ と定義される.

そのとき $\log E[e^{tZ}]$ を X の **標準化キウムラント母函数** と呼ぶ.

標準化キウムラント母函数が正規分布の標準化キウムラント母函数 $t^2/2$ にどれだけ近いかは, その分布が正規分布にどれだけ近いことを表している(この点については後で中心極限定理について一般的に説明するときに再度触れる).

Poisson分布のキウムラント母函数に関する問題の結果によれば,

$$K_\lambda \sim \text{Poisson}(\lambda), \quad Z_\lambda = \frac{K_\lambda - \lambda}{\sqrt{\lambda}} \implies \log E[e^{tZ_\lambda}] = \frac{t^2}{2} + O(\lambda^{-1/2}).$$

これより, λ を大きくすると, Poisson分布は正規分布で近似されるようになることがわかる. この結果を **Poisson分布の中心極限定理** と呼ぶことにする.

さらに, 前節の結果より, $\lambda = np$ を一定としたままで, n を大きくすると, 二項分布 $\text{Binomial}(n, p)$ はPoisson分布 $\text{Poisson}(\lambda)$ で近似される.

そのとき注意すべきことは $\text{Binomial}(n, p)$ の分散 $np(1-p)$ は $np = \lambda$ のとき $np(1-p) = \lambda(1-p)$ になり, p が小さくないと, $\text{Poisson}(\lambda)$ の分散 λ と全然違う値になってしまうことである(たとえば $p = 1/2$ だと二項分布の分散が対応するPoisson分布の分散の半分になってしまう). 二項分布によるPoisson分布の近似は p が小さくないと精度が低くなる.

しかし, 以上の2つの結果を合わせると, Poisson分布の正規分布近似(=中心極限定理)を通して, p は小さいが np が大きい場合の二項分布 $\text{Binomial}(n, p)$ が正規分布で近似されるようになることがわかる. 実際には, p が小さくなくても, np と $n(1-p)$ が大きければ, 二項分布は正規分布でよく近似される. 二項分布が正規分布で近似されるという結果を **二項分布の中心極限定理** と呼ぶ.

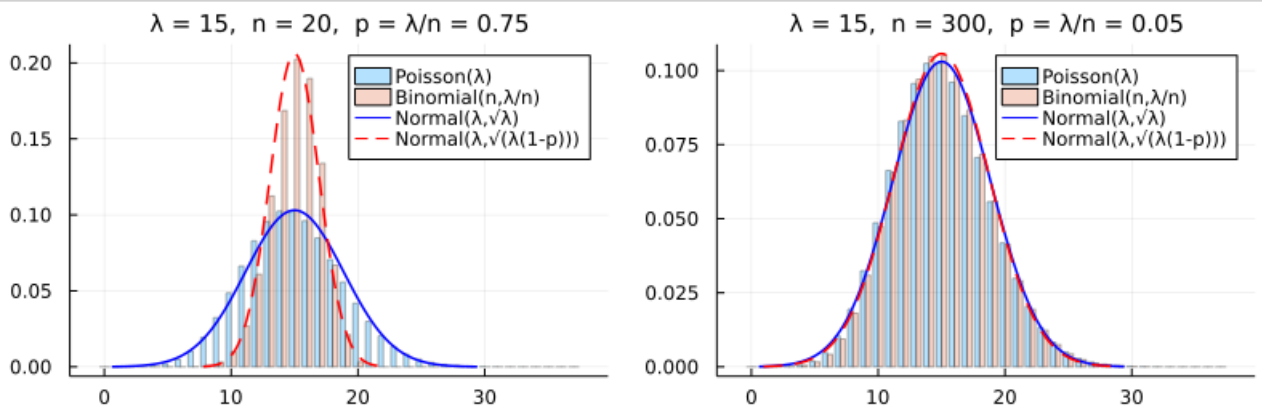
p が小さい場合の二項分布の中心極限定理は応用上あまりににも不完全なので, 後で二項分布を直接正規分布で近似するという p が小さくない場合にも通用する方法で二項分布の中心極限定理を証明する.

注意: 「中心極限定理」は「極限として中心に収束する定理」という意味では **ない**. 「中心極限定理」は「確率論における中心的な極限定理」という意味である. 「中心極限定理」はある種の状況で分布が正規分布で近似されるようになるという結果に付けられた名前である.

In [25]:

```
1 PP = []
2 for (lambda, n) in ((15, 20), (15, 300))
3     p = lambda/n
4     ks = max(0, round(Int, lambda-5.5*sqrt(lambda))):round(Int, lambda+5.5*sqrt(lambda)+3*sqrt(lambda))
5     P = groupedbar(ks,
6         [pdf.(Poisson(lambda), ks) pdf.(Binomial(n, lambda/n), ks)];
7         alpha=0.3,
8         label=["Poisson(lambda)" "Binomial(n, lambda/n)"],
9         title="lambda = $lambda, n = $n, p = lambda/n = $p")
10    plot!(Normal(lambda, sqrt(lambda)); label="Normal(lambda, sqrt(lambda))", lw=1.5, c=:blue)
11    plot!(Normal(lambda, sqrt(lambda*(1-p))); label="Normal(lambda, sqrt(lambda*(1-p)))", lw=1.5, ls=:dash, c=:red)
12    push!(PP, P)
13 end
14 plot(PP...; size=(800, 250), layout=(1, 2))
```

Out[25]:



左側のグラフでは $p = \lambda/n = 3/4$ なので, 二項分布の側の分散はPoisson分布の側の分散の4分の1になっており, 標準偏差については半分になっている.

右側のグラフでは $p = \lambda/n = 1/20$ が小さくなっているため, 二項分布のグラフとPoisson分布のグラフはほとんど一致し, 正規分布による近似もほとんど一致する.

3.7 問題: Poisson分布の中心極限定理の直接証明

パラメータ $\lambda > 0$ を持つPoisson分布の確率質量函数の定義は

$$p(k|\lambda) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^k}{k!} \quad (k = 0, 1, 2, \dots)$$

であった。 k は λ ごとに異なる値を取るものとし、固定された x について

$$k = \lambda + \sqrt{\lambda} x + o(\sqrt{\lambda})$$

を満たしていると仮定する。ここで $o(\sqrt{\lambda})$ は $\sqrt{\lambda}$ で割ると $\lambda \rightarrow \infty$ で 0 に収束する量を表す。このとき次が成立することを示せ:

$$p(k|\lambda) = \frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{\lambda}} (1 + o(1)).$$

ここで $o(1)$ は $\lambda \rightarrow \infty$ で 0 に収束する量である。

注意: 以下の解答例は二項分布の中心極限定理の証明のひな型になる。

解答例: まず、問題文よりも弱い次の条件を仮定する:

$$k = \lambda + o(\lambda) = \lambda(1 + o(1))$$

ここで $o(\lambda)$ は λ で割ると $\lambda \rightarrow \infty$ で 0 に収束する量である。このとき、 $k!$ に Stirling の公式を適用すると、

$$p(k|\lambda) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^k}{k^k e^{-k} \sqrt{2\pi k}} (1 + o(1)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\lambda}} \left(\frac{k}{\lambda}\right)^{-k} e^{k-\lambda} (1 + o(1)).$$

そして、

$$-\log\left(\left(\frac{k}{\lambda}\right)^{-k} e^{k-\lambda}\right) = k \log \frac{k}{\lambda} - (k - \lambda)$$

を $f(k)$ と書くと、 $f(\lambda) = 0$, $f'(k) = \log(k/\lambda)$, $f'(\lambda) = 0$, $f''(k) = 1/k$, $f''(\lambda) = 1/\lambda$, $f'''(k) = -1/k^2$, $f'''(\lambda) = -1/\lambda^2$, etc. なので、 $f(k)$ は $k = \lambda$ で次のように Taylor 展開される:

$$k \log \frac{k}{\lambda} + k - \lambda = f(k) = \frac{1}{2} \frac{(k - \lambda)^2}{\lambda} - \frac{1}{3!} \frac{(k - \lambda)^3}{\lambda^2} + \dots$$

ゆえに、問題文のように

$$k = \lambda + \sqrt{\lambda} x + o(\sqrt{\lambda})$$

と仮定すると、

$$\frac{k - \lambda}{\lambda} = \frac{x}{\sqrt{\lambda}} + o(\lambda^{-1/2}) = O(\lambda^{-1/2}), \quad \frac{(k - \lambda)^2}{\lambda^2} = \frac{x^2}{\lambda} + o(\lambda^{-1}) = O(\lambda^{-1}), \quad \text{etc.}$$

なので

$$\frac{(k - \lambda)^2}{\lambda} = x^2 + o(1), \quad \frac{(k - \lambda)^3}{\lambda^2} = O(\lambda^{-1/2}) = o(1), \quad \text{etc.}$$

となり、次が得られる:

$$k \log \frac{k}{\lambda} + k - \lambda = \frac{x^2}{2} + o(1).$$

したがって、

$$p(k|\lambda) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\lambda}} \exp\left(-\frac{x^2}{2} + o(1)\right) (1 + o(1)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\lambda}} e^{-x^2/2} (1 + o(1)).$$

これで示したい公式が得られた。

解答終

注意: 上の計算の途中で出て来た式

$$\log\left(\left(\frac{k}{\lambda}\right)^{-k} e^{k-\lambda}\right) = -k \log \frac{k}{\lambda} + k - \lambda$$

における $k \log(k/\lambda)$ の部分は **Kullback-Leibler 情報量**

$$D(q||p) = \sum_i q_i \log \frac{q_i}{p_i}$$

の各項に化ける式になっている。

注意: 上の計算の途中で出て来た式

$$\frac{(k - \lambda)^2}{\lambda} = x^2 + o(1)$$

の左辺は、**Pearsonの χ^2 検定量**

$$\sum_i \frac{(\text{observation}_i - \text{expectation}_i)^2}{\text{expectation}_i}$$

の各項に化ける式になっている。

注意: このように、Poisson分布の中心極限定理を直接証明することには、統計学的に重要な数学的対象の構成要素を得る行為にもなっている！

4 負の二項分布の「期待値 = 分散が確率的に揺らいでいるPoisson分布」という解釈

4.1 Poisson分布のパラメータがガンマ分布に従っていれば負の二項分布が得られる

Poisson分布は単位時間内に起こるイベントの回数の分布とみなされるのであった。

Poisson分布でモデル化できると期待される現実の現象のデータを複数の対象について取得したとする。そのとき、そのすべてについて、一定期間のあいだにイベントが起こる回数の期待値 λ が等しいと期待できるならば、Poisson分布モデルを単純に適用すればよい。

しかし、データを取得した対象ごとに、一定期間のあいだにイベントが起こる回数の期待値 λ が異なると考えられる場合にはどうすればよいだろうか？

例えば、野球選手達が年間何本ホームランを打つかについてデータを取得したとする。選手ごとに打つホームランの本数の期待値は大きく異なる。

そのような場合には、ホームランの本数の期待値の選手間でのばらつき方も確率分布でモデル化すればよい。

たとえば一定期間内で打つホームランの本数の期待値の分布をガンマ分布でモデル化するとどうなるだろうか？

実はその場合には、ホームランの本数の分布を負の二項分布でモデル化したのと同じことになる。

次の問題ではそのことを実際に計算して確認してもらおう。

4.2 問題: Poisson分布とガンマ分布から負の二項分布が得られる

$\alpha, \theta > 0$ であるとし、確率変数 Λ は次のようにガンマ分布に従っていると仮定する:

$$\Lambda \sim \text{Gamma}(\alpha, \theta).$$

さらに確率変数 M はパラメータが確率変数 Λ であるようなPoisson分布に従っていると仮定する:

$$M \sim \text{Poisson}(\Lambda).$$

この意味は乱数の生成を考えるとわかりやすい。この確率変数 M に対応する乱数は以下の手続きで生成されると考える:

1. 分布 $\text{Gamma}(\alpha, \theta)$ に従って乱数 Λ を生成する。
2. 分布 $\text{Poisson}(\Lambda)$ に従って乱数 M を生成する。

このとき、 M の分布が従う確率質量関数は次になることを示せ:

$$P(m|\alpha, \theta) = \binom{\alpha + m - 1}{m} \left(\frac{1}{1 + \theta} \right)^\alpha \left(1 - \frac{1}{1 + \theta} \right)^m \quad (m = 0, 1, 2, \dots)$$

これは負の二項分布 $\text{NegativeBinomial}(\alpha, \theta/(1 + \theta))$ の確率質量関数に一致する。これによって、負の二項分布の通常の解釈「 α 回成功するまでに失敗する回数の分布」とは別の解釈が得られた。負の二項分布は「期待値パラメータが固定されてなくてガンマ分布に従っているようなPoisson分布」であるとも考えられる。(この場合には「成功回数」にあたる α は整数でなくても任意の正

の実数になれる.)

ただし, $\text{Gamma}(\alpha, \theta)$ の確率密度関数を $p(\lambda|\alpha, \theta)$ と書き, $\text{Poisson}(\lambda)$ の確率質量関数を $P(m|\lambda)$ と書くとき, 上のような状況における M が従う分布の確率質量関数 $P(m|\alpha, \theta)$ は

$$P(m|\alpha, \theta) = \int_0^\infty P(m|\lambda)p(\lambda|\alpha, \theta) d\lambda$$

と定義される.

解答例: $p(\lambda|\alpha, \theta)$, $P(k|\lambda)$ の定義は次の通り:

$$p(\lambda|\alpha, \theta) = \frac{e^{-\lambda/\theta} \lambda^{\alpha-1}}{\theta^\alpha \Gamma(\alpha)}, \quad P(k|\lambda) = \frac{e^{-\lambda} \lambda^k}{k!}.$$

ゆえに, ガンマ関数の基本的な使い方である

$$\int_0^\infty e^{-\lambda/\eta} \lambda^{\beta-1} d\lambda = \eta^\beta \Gamma(\beta)$$

を $\eta = \theta/(1 + \theta)$, $\beta = \alpha + m$ の場合に使うと,

$$\begin{aligned} P(m|\alpha, \theta) &= \int_0^\infty P(m|\lambda)p(\lambda|\alpha, \theta) d\lambda = \int_0^\infty \frac{e^{-\lambda} \lambda^m}{m!} \frac{e^{-\lambda/\theta} \lambda^{\alpha-1}}{\theta^\alpha \Gamma(\alpha)} d\lambda \\ &= \frac{1}{m! \theta^\alpha \Gamma(\alpha)} \int_0^\infty e^{-((1+\theta)/\theta)\lambda} \lambda^{\alpha+m-1} d\lambda \\ &= \frac{1}{m! \theta^\alpha \Gamma(\alpha)} \left(\frac{\theta}{1+\theta} \right)^{\alpha+m} \Gamma(\alpha+m) \\ &= \frac{(\alpha+m-1) \cdots (\alpha+1)\alpha}{m!} \left(\frac{1}{1+\theta} \right)^\alpha \left(\frac{\theta}{1+\theta} \right)^m \\ &= \binom{\alpha+m-1}{m} \left(\frac{1}{1+\theta} \right)^\alpha \left(1 - \frac{1}{1+\theta} \right)^m. \end{aligned}$$

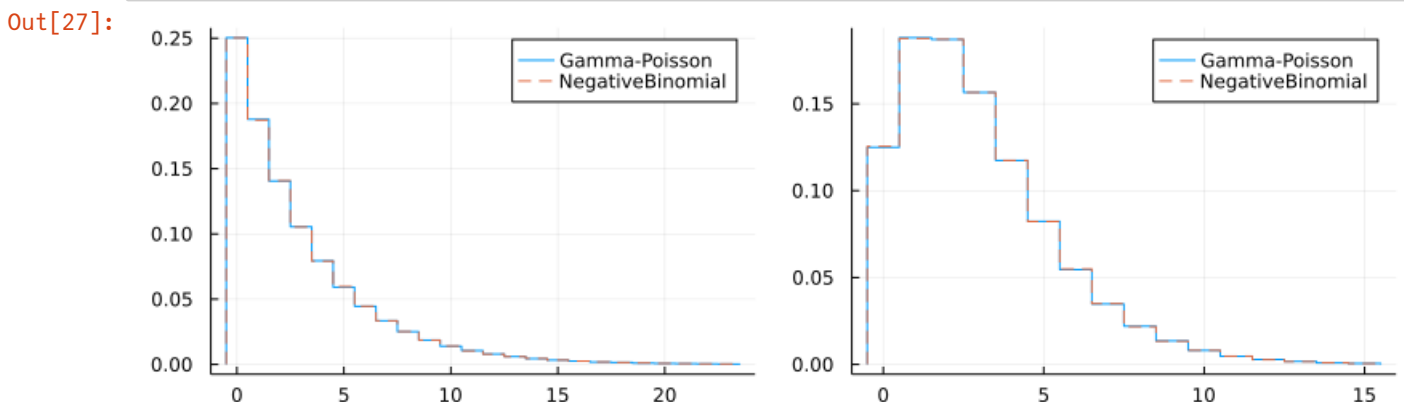
解答終

この手の積分計算をサボりたい人は, 以下のようにコンピュータでガンマ分布の乱数を発生させて, それをパラメータとする Poisson 分布の乱数を発生させることを大量に実行し, それと負の二項分布を直接使って生成した乱数の分布を比較してみるとよい.

```
In [26]: 1 function plot_gampoi(α, θ; L = 10^6)
2         p = 1/(1 + θ)
3         Λ = rand(Gamma(α, θ), L) # ガンマ分布で乱数達を大量生成
4         M_gampoi = @. rand(Poisson(Λ)) # その各々を期待値とする Poisson 分布の乱数を生成
5         M_negbin = rand(NegativeBinomial(α, p), L) # 直接的に負の二項分布の乱数を大量生成
6
7         # 比較のための同時プロット
8         binmin, binmax = round.(quantile.(Ref(M_negbin), (0.001, 0.999)))
9         stephist(M_gampoi; norm=true, bin=binmin-0.5:binmax+0.5, label="Gamma-Poisson")
10        stephist!(M_negbin; norm=true, bin=binmin-0.5:binmax+0.5, ls=:dash, label="NegativeBinomial")
11    end
```

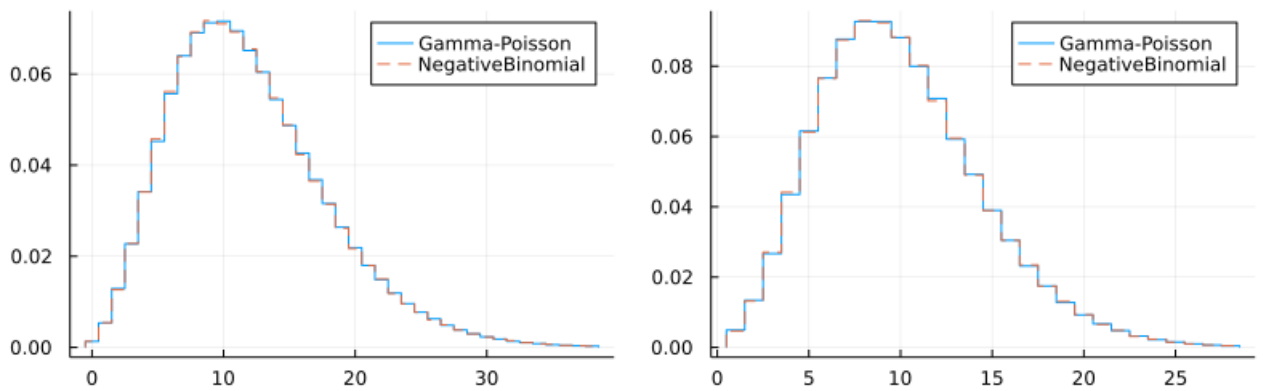
Out[26]: plot_gampoi (generic function with 1 method)

```
In [27]: 1 plot(plot_gampoi(1, 3), plot_gampoi(3, 1); size=(800, 250), layout=(1, 2))
```



```
In [28]: 1 plot(plot_gampoi(6, 2), plot_gampoi(10, 1); size=(800, 250), layout=(1, 2))
```

Out[28]:



このようにMonte Carloシミュレーション(コンピュータで乱数を発生させることによるシミュレーション)でも、期待値パラメータがガンマ分布に従っているようなPoisson分布と負の二項分布はぴったり一致している。

注意: $p = 1/(1 + \theta)$ とおくと、 $1 - p = \theta/(1 + \theta)$ になるので、負の二項分布 $\text{NegativeBinomial}(\alpha, \theta/(1 + \theta))$ の期待値と分散はそれぞれ次のように書ける:

$$E[M] = \frac{\alpha(1 - p)}{p} = \alpha\theta, \quad \text{var}(M) = \frac{\alpha(1 - p)}{p^2} = \alpha\theta(1 + \theta).$$

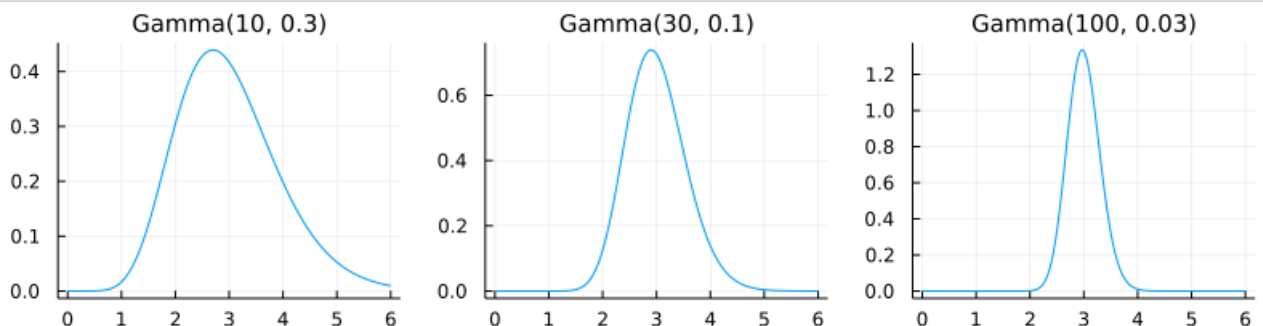
Poisson分布では期待値と分散が等しかったが、この場合には $1 + \theta$ 倍の分だけ分散が期待値よりも大きくなっている。これより、 $\mu = \alpha\theta$ を一定に保ったままで $\theta \searrow 0$ とすると負の二項分布 $\text{NegativeBinomial}(\alpha, \theta/(1 + \theta))$ がPoisson分布 $\text{Poisson}(\mu)$ に収束すると予想されるが実際にそうなる: $\alpha = \mu/\theta$ において、 $\theta \searrow 0$ とすると、

$$\begin{aligned} P(m|\alpha, \theta) &= \binom{\alpha + m - 1}{m} \left(\frac{1}{1 + \theta} \right)^\alpha \left(1 - \frac{1}{1 + \theta} \right)^m \\ &= \frac{(\mu/\theta + m - 1) \cdots (\mu/\theta + 1)(\mu/\theta)}{m!} \left(\frac{1}{1 + \theta} \right)^{\mu/\theta} \left(\frac{\theta}{1 + \theta} \right)^m \\ &= \underbrace{\frac{(\mu + (m - 1)\theta) \cdots (\mu + \theta)\mu}{m!}}_{\rightarrow \mu^m/m!} \underbrace{\left(\frac{1}{1 + \theta} \right)^{\mu/\theta}}_{\rightarrow \exp(-\mu)} \underbrace{\left(\frac{1}{1 + \theta} \right)^m}_{\rightarrow 1} \rightarrow \frac{e^{-\mu} \mu^m}{m!}. \end{aligned}$$

$\alpha = \mu/\theta$ において、 θ を小さくすると、Gamma($\mu/\theta, \theta$) の分布は μ に集中して行くのでこうなるとも考えられる。

```
In [29]: 1 PP = []
2 μ = 3
3 for α in (10, 30, 100)
4     θ = μ/α
5     P = plot(Gamma(α,θ), 0, 6; label="", title="Gamma($α$, $θ$)")
6     push!(PP, P)
7 end
8 plot(PP...; size=(800, 200), layout=(1, 3))
```

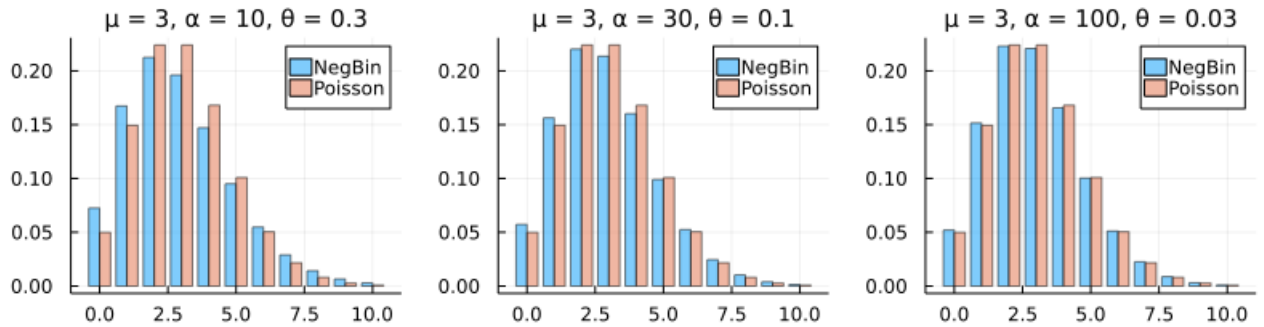
Out[29]:



In [30]:

```
1 PP = []
2 μ = 3
3 for α in (10, 30, 100)
4     θ = μ/α
5     p = 1/(1 + θ)
6     x = max(0, round(Int, μ - 4√μ)):round(Int, μ + 4√μ)
7     y1 = pdf.(NegativeBinomial(α, p), x)
8     y2 = pdf.(Poisson(μ), x)
9     P = groupedbar(x, [y1 y2]; alpha=0.5, label=["NegBin" "Poisson"])
10    title!("μ = $μ, α = $α, θ = $θ")
11    push!(PP, P)
12 end
13 plot(PP...; size=(800, 200), layout=(1, 3))
```

Out[30]:



5 ガンマ分布の解釈

形状パラメータ $\alpha > 0$, スケールパラメータ $\theta > 0$ を持つガンマ分布 $\text{Gamma}(\alpha, \theta)$ の確率密度関数は

$$p(y|\alpha, \theta) = \frac{1}{\theta^\alpha \Gamma(\alpha)} e^{-y/\theta} y^{\alpha-1} \quad (y > 0)$$

であった。我々は別のノートでガンマ分布を「正規分布に関係した分布」として導入したのであった(χ^2 分布はガンマ分布の特別な場合であった)。以下の2つの問題を見よ。その後にガンマ分布の別の解釈を説明する。

5.1 問題: 標準正規分布に従う確率変数の2乗は自由度1の χ^2 分布に従う

標準正規分布に従う確率変数の2乗は自由度1の χ^2 分布に従うことを示せ。

解答例: $Z \sim \text{Normal}(0, 1)$ のとき, $Y = Z^2$ とおくと,

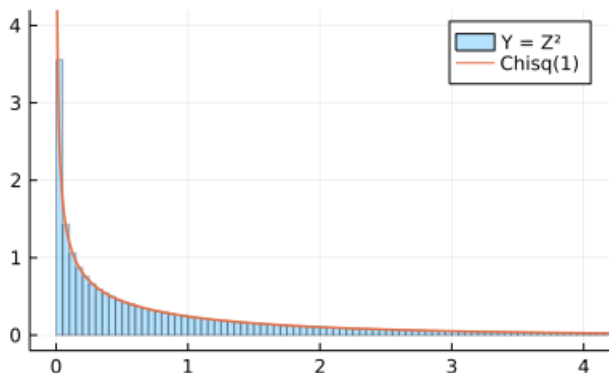
$$\begin{aligned} E[f(Y)] &= \int_{-\infty}^{\infty} f(z^2) \frac{e^{-z^2/2}}{\sqrt{2\pi}} dz = 2 \int_0^{\infty} f(z^2) \frac{e^{-z^2/2}}{\sqrt{2\pi}} dz \\ &= \int_0^{\infty} f(y) \frac{e^{-y/2}}{\sqrt{2\pi}} y^{-1/2} dy = \int_0^{\infty} f(y) \frac{e^{-y/2} y^{1/2-1}}{2^{1/2} \Gamma(1/2)} dy \end{aligned}$$

2つめの等号で被積分関数が偶関数であることを使い, 3つめの等号で $z = \sqrt{y}$ とおき, 最後の等号で $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$ を使った。これは Y が χ^2 分布に従うことを意味している。

解答終

```
In [31]: 1 L = 10^6
2 Z = rand(Normal(), L)
3 Y = @. Z^2
4 histogram(Y; norm=true, alpha=0.3, label="Y = Z^2")
5 plot!(Chisq(1); label="Chisq(1)", lw=1.5)
6 plot!(); xlim=(-0.2, 4.2), ylim=(-0.2, 4.2))
```

Out[31]:



5.2 問題: 標準正規分布に従う n 個の独立な確率変数達の2乗は自由度 n の χ^2 分布に従う

標準正規分布に従う n 個の独立な確率変数達の2乗は自由度 n の χ^2 分布に従うことを示せ.

解答例: Z_1, \dots, Z_n は独立な確率変数達であるとし, $Z_i \sim \text{Normal}(0, 1)$ となっていると仮定する. このとき, 1つ上の問題より, 各 i ごとに $Z_i^2 \sim \text{Chisq}(1) = \text{Gamma}(1/2, 1/2)$ となり, Z_1^2, \dots, Z_n^2 は独立な確率変数達になる.

一般に, X, Y が独立な確率変数達で $X \sim \text{Gamma}(\alpha, \theta)$, $Y \sim \text{Gamma}(\beta, \theta)$ のとき, $X + Y \sim \text{Gamma}(\alpha + \beta, \theta)$, $X/(X + Y) \sim \text{Beta}(\alpha, \beta)$ で $X + Y$, $X/(X + Y)$ は独立になるのであった. この結果を上での状況で使うと,

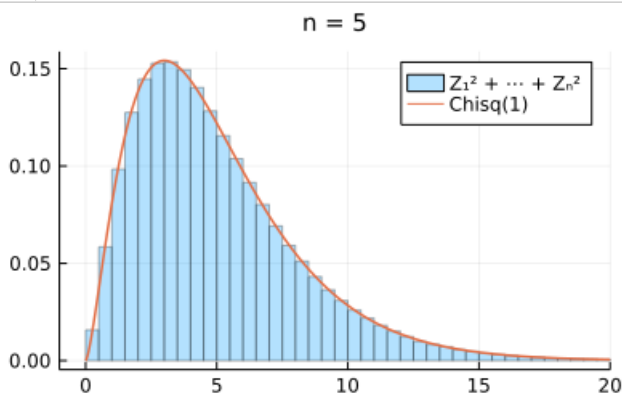
$$Z_1^2 + \dots + Z_n^2 \sim \text{Gamma}(\underbrace{1/2 + \dots + 1/2}_n, 1/2) = \text{Gamma}(n/2, 1/2) = \text{Chisq}(n)$$

となることがわかる.

解答終

```
In [32]: 1 L = 10^6
2 n = 5
3 Z = rand(Normal(), n, L)
4 Y = [sum(z -> z^2, Z) for Z in eachcol(Z)]
5 histogram(Y; norm=true, alpha=0.3, bin=100, label="Z_1^2 + ... + Z_n^2")
6 plot!(Chisq(n); label="Chisq(1)", lw=1.5)
7 plot!(); xlim=(-1, 20))
8 title!("n = $n")
```

Out[32]:



5.3 負の二項分布の連続時間極限

ガンマ分布 $\text{Gamma}(\alpha, \theta)$ が負の二項分布の連続極限になっていることを説明する。以下ではガンマ分布が時間幅に関する確率分布だとみなしたいので、ガンマ分布に従う確率変数を T と書き、対応する通常の変数を t と書くことにする。

負の二項分布は成功確率 $0 < p \leq 1$ のBernoulli試行を $\alpha > 0$ 回成功するまで続けたときに失敗する回数 M が従う分布であり、その確率質量関数は

$$P(m|\alpha, p) = \binom{\alpha + m - 1}{m} p^\alpha (1 - p)^m \quad (m = 0, 1, 2, \dots)$$

と書けるのであった(分布がうまく定義されるために α は整数でなくてもよい)。このときの総試行回数 N は $N = \alpha + M$ と書ける。 N が取り得る値の全体は $\alpha, \alpha + 1, \alpha + 2, \dots$ になる。

一般に二項係数は

$$\binom{\alpha + m - 1}{m} = \frac{\Gamma(\alpha + m)}{\Gamma(m + 1)\Gamma(\alpha)} = \frac{\Gamma(\alpha + m + 1)}{(\alpha + m)\Gamma(m + 1)\Gamma(\alpha)} = \frac{1}{(\alpha + m)B(\alpha, m + 1)}$$

とベータ関数で書けるので、 N が従う分布の確率質量関数は次のように書ける:

$$P(n - \alpha|\alpha, p) = \frac{1}{nB(\alpha, n - \alpha + 1)} p^\alpha (1 - p)^{n - \alpha}$$

$L > 0$ であるとし、単位時間に L 回にBernoulli試行を行い、単位時間内での成功回数(イベントが起こる回数)の期待値 Lp は一定であり、

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

を満たしていると仮定する(p はこれによって L の関数とみなす)。これは固定された θ について、単位時間に平均して $1/\theta$ 回のイベントが起こるといふ仮定であり、この仮定はイベントが起こる間隔の期待値が θ であるといふ仮定と同等である。

さらにこのとき、試行回数を表す通常の変数 n から離散時間変数 t が

$$t = \frac{n}{L}$$

と定義される。このとき単位時間分の試行が行われたとき $n = L$ となり、 $t = 1$ となるのでつじつまが合っている。

以上の設定のもとで、時間の刻み幅を 0 に近付ける $L \rightarrow \infty$ で負の二項分布の確率質量関数がどのように振る舞うかを調べよう。 $n = Lt$ と $p = 1/(L\theta)$ を上の式に代入すると、 $L \rightarrow \infty$ において、

$$\begin{aligned} P(Lt - \alpha|\alpha, 1/(L\theta)) &= \frac{1}{Lt B(\alpha, Lt - \alpha + 1)} \frac{1}{(L\theta)^\alpha} \left(1 - \frac{1}{L\theta}\right)^{Lt - \alpha} \\ &= \frac{1}{(Lt)^\alpha B(\alpha, Lt - \alpha + 1)} \frac{(Lt)^{\alpha - 1}}{(L\theta)^\alpha} \left(1 - \frac{1}{L\theta}\right)^{Lt - \alpha} \\ &= \frac{1}{\theta^\alpha \underbrace{(Lt)^\alpha B(\alpha, Lt - \alpha + 1)}_{\rightarrow \Gamma(\alpha)}} \underbrace{\left(1 - \frac{1}{L\theta}\right)^{Lt - \alpha}}_{\rightarrow \exp(-t/\theta)} t^{\alpha - 1} \frac{1}{L} \\ &= \frac{1}{\theta^\alpha \Gamma(\alpha)} e^{-t/\theta} t^{\alpha - 1} \frac{1}{L} (1 + O(1/L)). \end{aligned}$$

ここで $K^\alpha B(\alpha, K + b) \rightarrow \Gamma(\alpha)$ ($K \rightarrow \infty$) となることを使った。

$1/L$ は離散時間 t の刻み幅なので、この式は時間の刻み幅を 0 に近付ける $L \rightarrow \infty$ の極限で、負の二項分布がガンマ分布に収束することを意味している:

$$\frac{\alpha + \text{NegativeBinomial}(\alpha, p = 1/(L\theta))}{L} \rightarrow \text{Gamma}(\alpha, \theta) \quad (L \rightarrow \infty)$$

5.4 負の二項分布の連続時間極限の様子をプロット

前節の計算より、 L が大きくなると、ガンマ分布 $\Gamma(\alpha, \theta)$ の確率密度関数 $p(t|\alpha, \theta)$ を近似する関数を、負の二項分布の確率質量関数 $P(m|\alpha, p)$ を使って次のように作れることがわかる:

$$p_{\text{approx}}(t|\alpha, \theta, L) = P(\text{round}(Lt - \alpha) | \alpha, 1/(L\theta)) L.$$

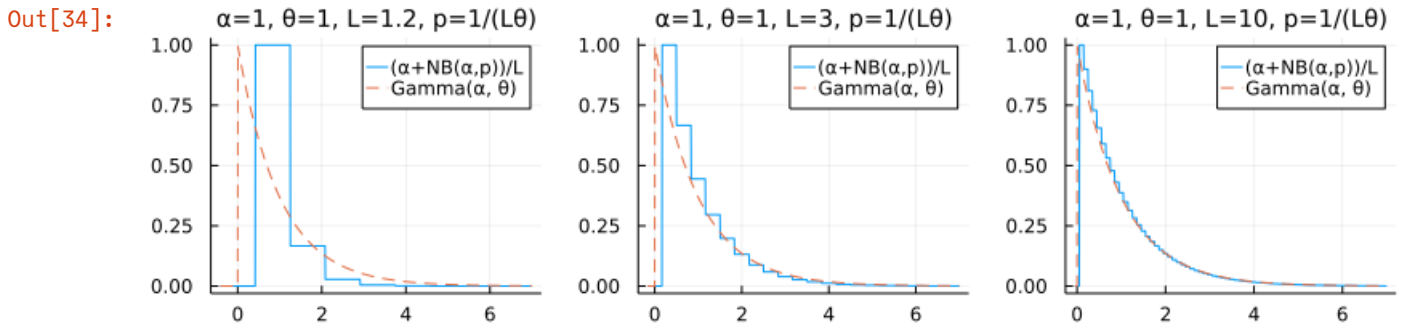
$T = N/L$ を $M = N - \alpha$ について解くと、 $M = (LT - \alpha)$ であることを使った。前節の計算から右辺には L をかけておかばいなければならないことがわかる。ここで $\text{round}(x)$ は x を四捨五入して整数に変換する関数であるとする。

この事実を使って、負の二項分布とガンマ分布を比較するグラフを作成してみよう。

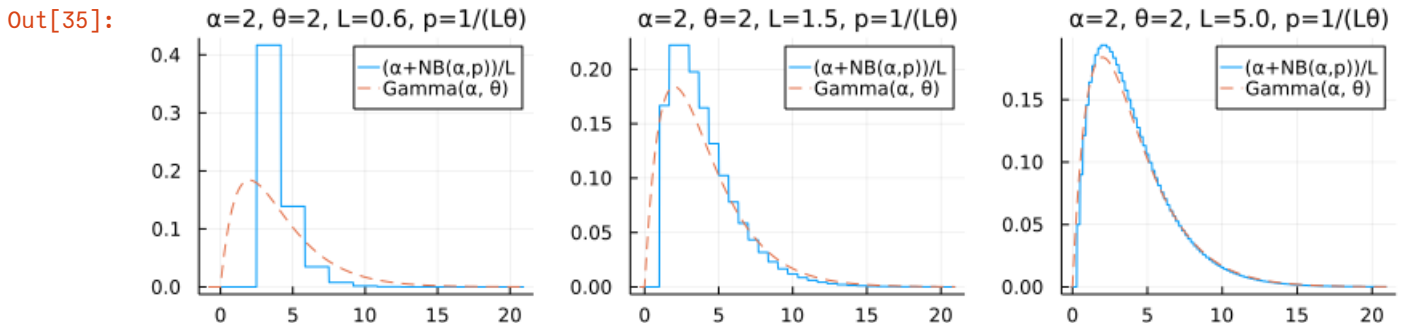
```
In [33]: 1 function plot_nbgam( $\alpha$ ,  $\theta$ , L)
2         p = 1/(L* $\theta$ )
3         t = range(max(-1/(2L),  $\alpha*\theta - 4\sqrt{\alpha*\theta}$ ),  $\alpha*\theta + 6\sqrt{\alpha*\theta}$ , 1000)
4         plot(t, t  $\rightarrow$  pdf(NegativeBinomial( $\alpha$ , p), round(Int, L*t -  $\alpha$ ))*L; label="(α+NB(α,p))/L")
5         plot!(t, t  $\rightarrow$  pdf(Gamma( $\alpha$ ,  $\theta$ ), t); label="Gamma(α, θ)", ls=:dash)
6         title!( $\alpha$ =$ $\alpha$ ,  $\theta$ =$ $\theta$ , L=$L, p=1/(L $\theta$ ))
7     end
```

Out[33]: plot_nbgam (generic function with 1 method)

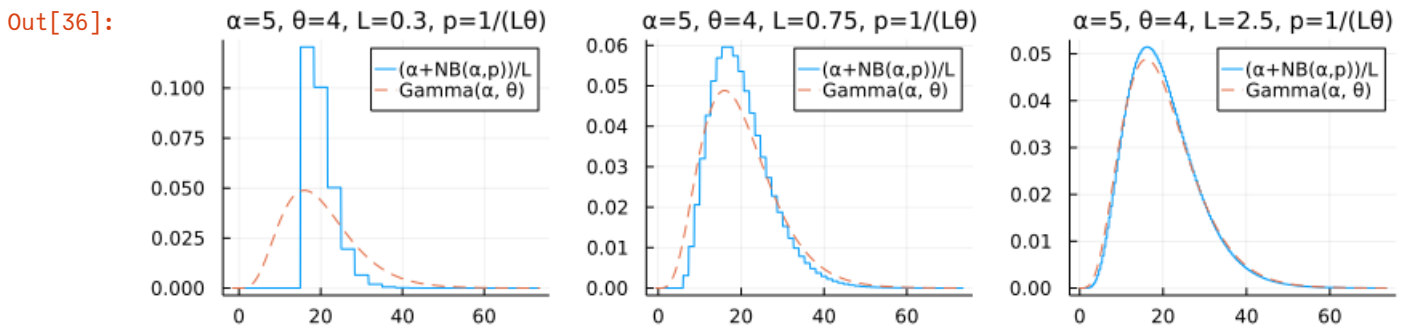
```
In [34]: 1 plot(plot_nbgam.(1, 1, (1.2, 3, 10))...; size=(800, 200), layout=(1, 3))
```



```
In [35]: 1 plot(plot_nbgam.(2, 2, (1.2, 3, 10)./2)...; size=(800, 200), layout=(1, 3))
```



```
In [36]: 1 plot(plot_nbgam.(5, 4, (1.2, 3, 10)./4)...; size=(800, 200), layout=(1, 3))
```



5.5 ガンマ分布はイベントが α 回起こるまでにかかる時間の分布とみなされる

前節の結果は以下のように解釈される。

- (1) 負の二項分布は成功確率 p のBernoulli試行を 1 が α 回出るまでに出た 0 の個数 M の分布であった。以下では 1 が出たことを「イベントが起こった」と解釈することにし、イベントが α 回起こるまでの試行回数 $N = \alpha + M$ の分布を考える。
- (2) さらに、試行を単位時間あたり L 回の等間隔で行う状況を考える。これは刻み幅が $1/L$ の離散時間を考えることに相当する。そのとき、 $T = N/L$ は α 回イベントが起こるまでにかかる時間を意味する。
- (3) 単位時間内に起こるイベントの回数の期待値 $Lp = 1/\theta$ を固定したままで、 $L \rightarrow \infty$ とすることは、イベントが起こる間隔の期待値を θ に固定して連続時間極限を取ることだと考えられる。この極限によって、負の二項分布における $T = N/L$ の分布はガンマ分布に収束する。
- (4) ガンマ分布は、連続時間の場合に、イベント起こる間隔の期待値が θ であるときに、 α 回のイベントが起こるまでにかかる時間の分布になっている。

5.6 Poisson分布の累積分布関数とガンマ分布の累積分布関数の関係

Poisson分布は単位時間内に生じるイベントの回数の分布だと解釈でき、ガンマ分布はイベントが α 回おこるまでにかかる時間の分布だと解釈できるのであった。これらの解釈から、Poisson分布における確率をガンマ分布における確率と解釈したり、その逆向きの解釈をしたりできることがわかる。

Poisson分布 $\text{Poisson}(\lambda)$ は単位時間のあいだに平均して λ 回起こるイベントが単位時間内で起こる回数の分布だと解釈できるのであった。その状況のもとでは、より一般に時間 t のあいだにイベントが起こる回数 K の分布は $\text{Poisson}(\lambda t)$ になる。

ガンマ分布 $\text{Gamma}(\alpha, \theta)$ は、イベントが起こる時間間隔の期待値が θ であるときに、 α 回イベントが起こるまでにかかる時間 T の分布だと解釈できるのであった。

イベントが起こる時間間隔の期待値が θ であることは、単位時間のあいだに平均して $1/\theta$ 回のイベントが起こることと同値である。そこで、以下では次のように仮定する：

$$\lambda = 1/\theta \quad \theta = 1/\lambda.$$

「時間 τ 以内にイベントが起こる回数が κ 回未満であること」と「イベントが κ 回起こるまでにかかる時間が τ より大きいこと」は論理的に同値なので、それらの確率も等しくなるはずである： $\tau > 0, \kappa = 1, 2, \dots$ のとき、

$$K \sim \text{Poisson}(\lambda\tau), \quad T \sim \text{Gamma}(\alpha = \kappa, \theta = 1/\lambda), \quad \implies P(K < \kappa) = P(T > \tau).$$

実際にこれが成立している。それを式で書くと、

$$\sum_{k=0}^{\kappa-1} \frac{e^{-\lambda\tau} (\lambda\tau)^k}{k!} = \frac{\int_{\tau}^{\infty} e^{-\lambda t} t^{\kappa-1} dt}{\Gamma(\kappa)/\lambda^{\kappa}}.$$

注意：この結果より、Poisson分布における累積分布関数の大量の和が必要な計算をガンマ分布における累積分布関数の計算に帰着できることがわかる。ガンマ分布の累積分布関数は基本特殊関数ライブラリに含まれている正規化された(不完全)ガンマ関数を使って効率的に計算できる。

5.7 問題: Poisson分布の累積分布関数とガンマ分布の累積分布関数の関係の直接証明

次の公式を証明せよ：

$$\sum_{k=0}^{\kappa-1} \frac{e^{-\lambda\tau} (\lambda\tau)^k}{k!} = \frac{\int_{\tau}^{\infty} e^{-\lambda t} t^{\kappa-1} dt}{\Gamma(\kappa)/\lambda^{\kappa}} \quad (\lambda, \tau > 0, \kappa = 1, 2, \dots)$$

解答例：左辺を $f(\tau)$ とおく。そのとき、

$$f(t) = \sum_{k=0}^{\kappa-1} \frac{e^{-\lambda t} \lambda^k t^k}{k!}.$$

$t \searrow 0$ のとき $f(t) \rightarrow 0$ となり、

$$\begin{aligned} f'(t) &= \sum_{k \leq \kappa-1} \frac{e^{-\lambda t} \lambda^k k t^{k-1}}{k!} - \sum_{k \leq \kappa-1} \frac{e^{-\lambda t} \lambda \lambda^k t^k}{k!} = \sum_{k \leq \kappa-1} \frac{e^{-\lambda t} \lambda^k t^{k-1}}{(k-1)!} - \sum_{k \leq \kappa-1} \frac{e^{-\lambda t} \lambda^{k+1} t^k}{k!} \\ &= \sum_{k \leq \kappa-1} \frac{e^{-\lambda t} \lambda^k t^{k-1}}{(k-1)!} - \sum_{k \leq \kappa} \frac{e^{-\lambda t} \lambda^k t^{k-1}}{(k-1)!} = \frac{e^{-\lambda t} \lambda^{\kappa} t^{\kappa-1}}{(\kappa-1)!} = \frac{e^{-\lambda t} t^{\kappa-1}}{\Gamma(\kappa)/\lambda^{\kappa}}. \end{aligned}$$

ゆえに

$$f(\tau) = \frac{\int_{\tau}^{\infty} e^{-\lambda t} t^{\kappa-1} dt}{\Gamma(\kappa)/\lambda^{\kappa}}.$$

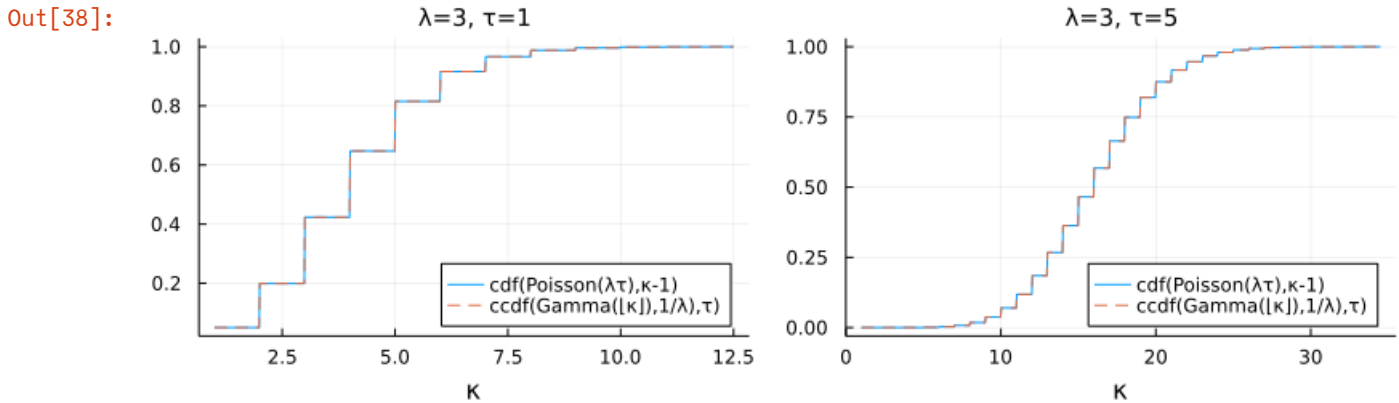
解答終

上のような煩雑な計算をやりたくない人も楽々遂行できる人も以下のように結果が本当に正しいかをコンピュータで計算して確認した方がよい。

```
In [37]: 1 function plot_cdfpoigam(λ, τ)
2         poi = Poisson(λ*τ)
3         gam(κ) = Gamma(κ, 1/λ)
4         κ = range(1, round(mean(poi) + 5*std(poi))+0.5, 1000)
5         plot(κ, κ → cdf(poi, κ-1); label="cdf(Poisson(λτ),κ-1)")
6         plot!(κ, κ → ccdf(gam(floor(κ)), τ); ls=:dash, label="ccdf(Gamma(⌊κ⌋),1/λ),τ)")
7         plot!(); legend=:bottomright, xlabel="κ")
8         title!("λ=$λ, τ=$τ")
9     end
```

Out[37]: plot_cdfpoigam (generic function with 1 method)

```
In [38]: 1 plot(plot_cdfpoigam(3, 1), plot_cdfpoigam(3, 5); size=(800, 250), bottommargin=4Plots.mm)
```



5.8 必ず解いて欲しい問題: χ^2 分布における確率が95%または99%になる範囲

$0 < \alpha < 1, \nu > 0$ であるとし, $Y \sim \text{Chisq}(\nu)$ と仮定する. このとき, Y が c 以下になる確率

$$P(Y \leq c)$$

が $1 - \alpha$ になるような c を **正則化された(不完全)ガンマ関数** (regularized (incomplete) gamma function)

$$y = P(x|\alpha) = P(\alpha, x) = \frac{\int_0^x e^{-u} u^{\alpha-1} du}{\Gamma(\alpha)} \quad (x > 0)$$

の逆関数 $x = P^{-1}(y|\alpha)$ を使って表せ. (注意: $P(\alpha, x)$ は広く使われている標準的な記号法だが, $P(x|\alpha)$ と $P^{-1}(y|\alpha)$ はここだけの記号法である.)

さらに, $\nu = 1$ と $\nu = 2$ と $\nu = 3$ の場合に $P(Y \leq c)$ が 95% になる c と 99% になる c を小数点以下第2桁目まで求めよ.

お願い: 後半の「さらに」以降の具体的な数値を求める部分は必ず解けるようになっておいて欲しい. コンピュータを使ってよい. (より正確に言えばコンピュータを使った計算の仕方を1つ以上マスターしておくこと!)

注意: 正規分布モデルの統計学で χ^2 分布に関する計算が不完全ガンマ関数に帰着できるという事実から, 正規分布モデルの統計学においてガンマ分布が必須であることがわかる.

解答例: $F(y) = P(Y \leq y)$ とおく. $p = F(y)$ の逆関数 $y = Q(p) = F^{-1}(p)$ を正則化された不完全ガンマ関数を使って表そう:

$$\begin{aligned} F(y) = P(Y \leq y) &= \frac{1}{2^{\nu/2} \Gamma(\nu/2)} \int_0^y e^{-x/2} x^{\nu/2-1} dx \\ &= \frac{1}{\Gamma(\nu/2)} \int_0^{y/2} e^{-u} u^{\nu/2-1} du = P(y/2|\nu/2). \end{aligned}$$

2つめの等号で $x = 2u$ とおいた. これより, $p = F(y)$ の逆関数(分位点関数) $y = Q(p) = F^{-1}(p)$ が次のように表されることがわかる:

$$y = Q(p) = 2P^{-1}(p|\nu/2).$$

したがって, $P(Y \leq c) = 1 - \alpha$ となる c は

$$c = 2P^{-1}(1 - \alpha|\nu/2)$$

と表される.

$\nu = 1$ のとき,

- $P(Y \leq c) = 95\%$ となる c は $c \approx 3.84$
- $P(Y \leq c) = 99\%$ となる c は $c \approx 6.63$

$\nu = 3$ のとき,

- $P(Y \leq c) = 95\%$ となる c は $c \approx 5.99$
- $P(Y \leq c) = 99\%$ となる c は $c \approx 9.21$

$\nu = 3$ のとき,

- $P(Y \leq c) = 95\%$ となる c は $c \approx 7.81$
- $P(Y \leq c) = 99\%$ となる c は $c \approx 11.34$

解答終

```
In [39]: 1 quantile_chisq(v, p) = 2gamma_inc_inv(v/2, p, 1-p)
2
3 for v in (1, 2, 3)
4     @show v
5     @show quantile_chisq(v, 0.95)
6     @show quantile_chisq(v, 0.99)
7     println()
8 end
```

```
v = 1
quantile_chisq(v, 0.95) = 3.8414588206941245
quantile_chisq(v, 0.99) = 6.634896601021214
```

```
v = 2
quantile_chisq(v, 0.95) = 5.99146454710798
quantile_chisq(v, 0.99) = 9.21034037197618
```

```
v = 3
quantile_chisq(v, 0.95) = 7.814727903251177
quantile_chisq(v, 0.99) = 11.34486673014437
```

```
In [40]: 1 for v in (1, 2, 3)
2     @show v
3     @show quantile(Chisq(v), 0.95)
4     @show quantile(Chisq(v), 0.99)
5     println()
6 end
```

```
v = 1
quantile(Chisq(v), 0.95) = 3.841458820694124
quantile(Chisq(v), 0.99) = 6.634896601021213
```

```
v = 2
quantile(Chisq(v), 0.95) = 5.99146454710798
quantile(Chisq(v), 0.99) = 9.210340371976182
```

```
v = 3
quantile(Chisq(v), 0.95) = 7.814727903251179
quantile(Chisq(v), 0.99) = 11.34486673014437
```

例えば $\nu = 2$ の場合について, WolframAlphaでは以下のように計算できる:

- [2 InverseGammaRegularized\(n/2, 1 - 0.95\) where n = 2 \(https://www.wolframalpha.com/input?i=2+InverseGammaRegularized%28n%2F2%2C+1+-+0.95%29+where+n+%3D+2\)](https://www.wolframalpha.com/input?i=2+InverseGammaRegularized%28n%2F2%2C+1+-+0.95%29+where+n+%3D+2)
- [2 InverseGammaRegularized\(n/2, 1 - 0.99\) where n = 2 \(https://www.wolframalpha.com/input?i=2+InverseGammaRegularized%28n%2F2%2C+1+-+0.99%29+where+n+%3D+2\)](https://www.wolframalpha.com/input?i=2+InverseGammaRegularized%28n%2F2%2C+1+-+0.99%29+where+n+%3D+2)
- [quantile\(ChisqDistribution\(2\), 0.95\) \(https://www.wolframalpha.com/input?i=quantile%28ChisqDistribution%282%29%2C+0.95%29\)](https://www.wolframalpha.com/input?i=quantile%28ChisqDistribution%282%29%2C+0.95%29)
- [quantile\(ChisqDistribution\(2\), 0.99\) \(https://www.wolframalpha.com/input?i=quantile%28ChisqDistribution%282%29%2C+0.99%29\)](https://www.wolframalpha.com/input?i=quantile%28ChisqDistribution%282%29%2C+0.99%29)

注意: このノートでは分位点関数を $Q(p)$ と書いていて紛らわしいのだが, 不完全ガンマ関数として

$$Q(x|\alpha) = Q(\alpha, x) = 1 - P(\alpha, x) = \frac{\int_x^\infty e^{-u} u^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)}$$

の側が使われることもよくある. $p = Q(x|\alpha)$ の逆関数を $Q^{-1}(p|\alpha)$ と書くとき, $P(Y \leq y) = 2Q^{-1}(1 - p|\alpha)$ となることに注意せよ. 上のWolframAlphaでは実際にそうになっている.

5.9 問題: 自由度1の χ^2 分布と標準正規分布の関係の数値例

$Z \sim \text{Normal}(0, 1)$, $Y \sim \text{Chisq}(1)$ のとき,

$$P(-c \leq Z \leq c) = 0.95, \quad P(Y \leq d) = 0.95$$

を満たす c, d の値はそれぞれ

$$c \approx 1.96, \quad d \approx 3.84$$

であった. このとき

$$c^2 \approx 1.96^2 = 3.8416 \approx 3.84 \approx d$$

となる. これが必然である理由を説明せよ.

In [41]: 1 (196//100)^2 float

Out[41]: 3.8416

解答例1: 実際には正確に $c^2 = d$ となっている. なぜならば, $z > 0$ を $z = \sqrt{y}$ とおくと,

$$\begin{aligned} P(-c \leq Z \leq c) &= \int_{-c}^c \frac{e^{-z^2/2}}{\sqrt{2\pi}} dz = 2 \int_0^c \frac{e^{-z^2/2}}{\sqrt{2\pi}} dz \\ &= 2 \int_0^{c^2} \frac{e^{-y/2}}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{2} y^{-1/2} dy = \int_0^{c^2} \frac{e^{-y/2} y^{1/2-1}}{2^{1/2} \Gamma(1/2)} dy = \\ &= P(Y \leq c^2). \end{aligned}$$

つまり $P(-c \leq Z \leq c) = P(y \leq c^2)$ なので, $P(-c \leq Z \leq c) = 1 - \alpha$ となる c の二乗と $P(Y \leq d) = 1 - \alpha$ となる d は一致する.

解答終

解答例2: $Z^2 \sim \text{Chisq}(1)$ となるのであった. ゆえに

$$P(-c \leq Z \leq c) = P(Z^2 \leq c^2) = P(Y \leq c^2).$$

これより, $P(-c \leq Z \leq c) = 1 - \alpha$ となる c の二乗と $P(Y \leq d) = 1 - \alpha$ となる d は一致することがわかる.

解答終

6 ベータ分布の一樣乱数生成の繰り返しによる解釈

$\alpha, \beta > 0$ と仮定する. ベータ分布は 0 から 1 のあいだに分布する連続確率分布でその確率密度関数は

$$p(t|\alpha, \beta) = \frac{t^{\alpha-1} (1-t)^{\beta-1}}{B(\alpha, \beta)} \quad (0 < t < 1)$$

と書けるのであった. 別のノートで我々はこの確率密度関数を天下り的に与えて, この分布のある種の極限でガンマ分布が得られることや, ガンマ分布からベータ分布を作れることなどを示した. ガンマ分布は正規分布がらみの確率分布なので, この事実は, ベータ分布が正規分布モデルの統計学で大活躍する確率分布であることを示唆し, 実際にそうになっている.

以下ではこれとは別のベータ分布の解釈を紹介する. それによって, ベータ分布を二項分布や負の二項分布と繋げることに成功する. ベータ分布は二項分布モデルの統計学や負の二項分布モデルの統計学でも役に立つ.

6.1 一樣分布のサイズ n の標本分布の順序統計量

独立な確率変数達 T_1, T_2, \dots, T_n のそれぞれは一樣分布 $\text{Uniform}(0, 1)$ に従っていると仮定する. T_1, \dots, T_n の中で下から k 番目に小さなものを $T_{(k)}$ と書く.

$T_{(k)}$ も確率変数になることに注意せよ. $T_{(k)}$ に対応する乱数は次の手続きで作れる:

(1) $\text{rand}()$ を n 回実行してその結果を T_1, \dots, T_n とする. (2) T_1, \dots, T_n の中で下から k 番目に小さな値を $T_{(k)}$ とする.

これによって 0 から 1 のあいだの数値 $T_{(k)}$ で以上の手続きによってランダムに与えられるものが得られる。

$T_{(k)}$ を **一様分布のサイズ n の標本分布の順序統計量** と呼ぶ。

6.2 一様分布のサイズ n の標本分布の順序統計量が従う分布

一様分布のサイズ n の標本分布の順序統計量 $T_{(k)}$ が従う分布はベータ分布 $\text{Beta}(k, n - k + 1)$ になる：

$$T_{(k)} \sim \text{Beta}(k - 1, n - k).$$

このようにパラメータが正の整数のすべてのベータ分布は一様分布の標本分布の順序統計量の分布として得られる。

証明1: $0 < t < t + dt < 1$ と $1, 2, \dots, n$ を並び替えたもの i_1, i_2, \dots, i_n について、

$$P(T_{i_1}, \dots, T_{i_{k-1}} < t < T_{i_k} < t + dt < T_{i_{k+1}}, \dots, T_{i_n}) = t^{k-1} dt (1 - (t + dt))^{n-k}.$$

さらに、 $1, 2, \dots, n$ を $k - 1$ 個の i_1, \dots, i_{k-1} と 1 個の i_k と $n - k$ 個の i_{k+1}, \dots, i_n の 3 グループへの分割の仕方の個数は

$$\frac{n!}{(k-1)!1!(n-k)!} = \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(k)\Gamma(n-k+1)} = \frac{1}{B(k, n-k+1)}$$

と書ける。これと上の確率をかけて、 $dt \rightarrow 0$ のときの dt より高次の微小量を見捨てたものが $T_{(k)}$ が従う分布の密度関数 $\times dt$ になる。(順序統計量 $T_{(k)}$ は T_1, \dots, T_n の中で k 番目に小さなものであった。) ゆえに、 $T_{(k)}$ が従う分布の確率密度関数は

$$p(t|n, k) = \frac{t^{k-1}(1-t)^{n-k}}{B(k, n-k+1)} \quad (0 < t < 1)$$

になる。これはベータ分布 $\text{Beta}(k, n - k + 1)$ の確率密度関数である。これで $T_{(k)}$ が従う分布はベータ分布 $\text{Beta}(k, n - k + 1)$ になることがわかった。

証明終

証明2: 一様分布 $\text{Uniform}(0, 1)$ の累積分布関数と確率密度関数をそれぞれ $F(t) = t$ ($0 < t < 1$)、 $p(t) = F'(t) = 1$ ($0 < t < 1$) と書き、一様分布のサイズ n の標本分布の順序統計量 $T_{(k)}$ の累積分布関数を $G(t)$ と書く：

$$G(t) = P(T_{(k)} \leq t).$$

$T_{(k)} \leq t$ が成立することは、 T_1, \dots, T_n の中の k 個以上が t 以下になることと同値なので、

$$G(t) = \sum_{j=k}^n \binom{n}{j} F(t)^j (1 - F(t))^{n-j}.$$

この導関数が $T_{(k)}$ の確率密度関数になる：

$$\begin{aligned} G'(t) &= \sum_{j \geq k} j \binom{n}{j} F(t)^{j-1} F'(t) (1 - F(t))^{n-j} - \sum_{j \geq k} (n-j) \binom{n}{j} F(t)^j F'(t) (1 - F(t))^{n-j-1} \\ &= \sum_{j \geq k} n \binom{n-1}{j-1} F(t)^{j-1} F'(t) (1 - F(t))^{n-j} - \sum_{j \geq k} n \binom{n-1}{j} F(t)^j F'(t) (1 - F(t))^{n-j-1} \\ &= \sum_{j \geq k} n \binom{n-1}{j-1} F(t)^{j-1} F'(t) (1 - F(t))^{n-j} - \sum_{j \geq k+1} n \binom{n-1}{j-1} F(t)^j F'(t) (1 - F(t))^{n-j} \\ &= n \binom{n-1}{k-1} F(t)^{k-1} F'(t) (1 - F(t))^{n-k} \\ &= \frac{n!}{(k-1)!(n-k)!} F(t)^{k-1} F'(t) (1 - F(t))^{n-k} \\ &= \frac{1}{B(k, n-k+1)} F(t)^{k-1} F'(t) (1 - F(t))^{n-k} \\ &= \frac{1}{B(k, n-k+1)} t^{k-1} (1-t)^{n-k}. \end{aligned}$$

これはベータ分布 $\text{Beta}(k, n - k + 1)$ の確率密度関数である。これで $T_{(k)}$ が従う分布はベータ分布 $\text{Beta}(k, n - k + 1)$ になることがわかった。

証明終

注意: 上の $G'(t)$ の計算は最後の等号を除けば任意の関数 $F(t)$ について成立している。そのことを使えば一様分布に限らない場合にも順序統計量の確率密度関数を計算できる。

6.3 二項分布の累積分布関数のベータ分布の累積分布関数表示

$0 < p < 1$ のとき, 前節の証明2より,

$$P(T_{(k)} \leq p) = \sum_{j=k}^n \binom{n}{j} p^j (1-p)^{n-j}.$$

この右辺は二項分布 $\text{Binomial}(n, p)$ において k 以上になる確率に一致している.

さらに, $T_{(k)}$ が従う分布が $\text{Beta}(k, n-k+1)$ だったので, その確率はベータ分布 $\text{Beta}(k, n-k+1)$ において p 以下になる確率に一致することになる.

これで, 二項分布とベータ分布の累積分布関数の関係が得られた:

$$\begin{aligned} K &\sim \text{Binomial}(n, p), \quad T \sim \text{Beta}(k, n-k+1) \\ \implies P(K \geq k) &= P(T \leq p), \quad P(K \leq k-1) = 1 - P(T \leq p). \end{aligned}$$

k を $k+1$ に置き換えると,

$$\begin{aligned} K &\sim \text{Binomial}(n, p), \quad T \sim \text{Beta}(k+1, n-k) \\ \implies P(K \geq k+1) &= P(T \leq p), \quad P(K \leq k) = 1 - P(T \leq p). \end{aligned}$$

これらの公式の利点は右辺のベータ分布側の確率の計算を基本特殊関数ライブラリによって効率よく可能なことである. 左辺の二項分布における確率は n が大きいときには平均して $n/2$ 個の数値を足し上げる計算が必要になってしまう.

注意: 前節の証明1の結果($T_{(k)}$ の確率密度関数の形)を認めれば, 証明2における $G'(t)$ に関する少し面倒な計算を省略して,

$$P(T_{(k)} \leq p) = \frac{\int_0^p t^{k-1} (1-t)^{n-k} dt}{B(k, n-k+1)}$$

が得られるので, 平易に得られる

$$P(T_{(k)} \leq p) = \sum_{j=k}^n \binom{n}{j} p^j (1-p)^{n-j}$$

と合わせて,

$$\sum_{j=k}^n \binom{n}{j} p^j (1-p)^{n-j} = \frac{\int_0^p t^{k-1} (1-t)^{n-k} dt}{B(k, n-k+1)}$$

が得られる. このことからも上の方で述べた二項分布の累積分布関数がベータ分布の累積分布関数で書けるという結果が得られる.

注意: 以上の結果はBernoulli試行を一様乱数の生成の繰り返しに持ち上げることによって得られたと考えられる. 0 と 1 の間の一様乱数の値が p 以下のときに値 1 を生成し, それ以外のときに 0 を生成するようにすれば, 一様乱数の生成の繰り返しからBernoulli試行が得られる.

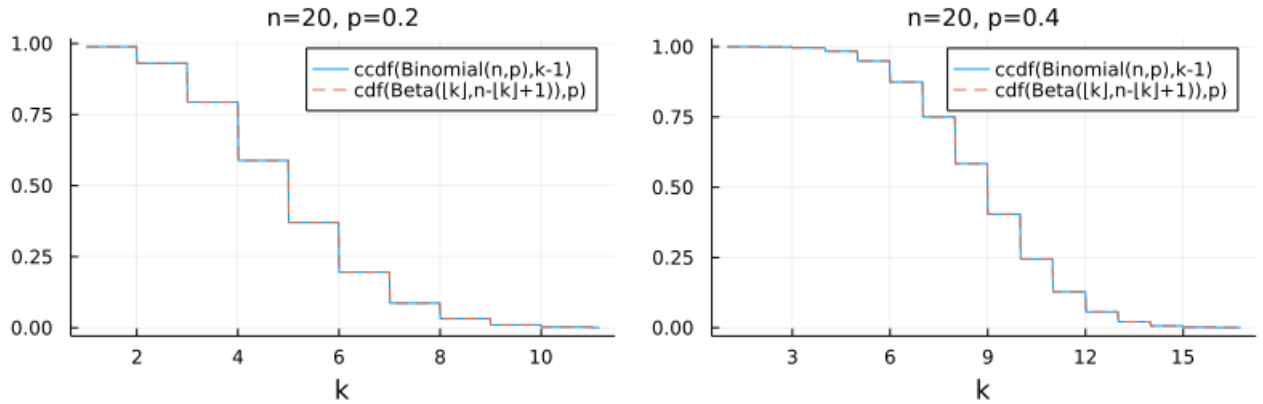
そのときに, n 回分の一様乱数の生成結果の中で k 番目に小さな乱数のなす分布がベータ分布になっていることから, 二項分布とベータ分布の関係が自然に導かれた.

```
In [42]: 1 function plot_cdfbinbeta(n, p)
2         bin = Binomial(n, p)
3         μ, σ = mean(bin), std(bin)
4         beta(k) = Beta(k, n-k+1)
5         k = range(max(1, μ-4σ), min(n, μ+4σ), 1000)
6         plot(k, k → ccdf(bin, k-1); label="ccdf(Binomial(n,p),k-1)")
7         plot!(k, k → cdf(beta(floor(k)), p); ls=:dash, label="cdf(Beta(lk,n-lk+1)),p)")
8         plot!(); legend=:topright, xlabel="k")
9         title!("n=$n, p=$p")
10        end
```

Out[42]: plot_cdfbinbeta (generic function with 1 method)

```
In [43]: 1 plot(plot_cdfbinbeta(20, 0.2), plot_cdfbinbeta(20, 0.4); size=(800, 250), bottommargin=4Plots.
```

Out[43]:



6.4 二項分布とベータ分布の関係のClopper-PearsonのP値関数への応用

二項分布モデルに基づく比率 p (成功確率パラメータと呼んで来た) の **Clopper-Pearsonの信頼区間** を与えるP値関数(以下 **Clopper-PearsonのP値関数** と呼ぶ)の効率的な計算に、前節で述べた二項分布とベータ分布の関係が実際に使われている。

Clopper-PearsonのP値関数は二項分布モデル $\text{Binomial}(n, p)$ と「 n 回中 k 回成功した」というデータの整合性を測る関数である。Clopper-PearsonのP値関数は以下のように定義される。

二項分布 $\text{Binomial}(n, p)$ の累積分布関数を、確率変数 $K \sim \text{Binomial}(n, p)$ を使って

$$F(k) = P(K \leq k) = \sum_{j=0}^k \binom{n}{j} p^j (1-p)^{n-j}$$

と定義する。Clopper-PearsonのP値関数 $\text{pvalue}_{\text{CP}}(k|n, p)$ を次のように定める:

$$\text{pvalue}_{\text{CP}}(k|n, p) = \min(1, 2F(k), 2(1 - F(k-1))) = \min(1, 2P(K \leq k), 2P(K \geq k)).$$

$\min(P(K \leq k), P(K \geq k))$ は二項分布におけるデータの値 k 以上に端側に偏る確率を意味し、その2倍がClopper-PearsonのP値である。P値が小さいほど、二項分布モデル $\text{Binomial}(n, p)$ と「 n 回中 k 回成功した」というデータの整合性が低いと考える。

二項分布の累積分布関数はベータ分布の累積分布関数で書けるのであった。確率変数 $T_k \sim \text{Beta}(k, n-k+1)$ を使えば次が成立している:

$$F(k) = P(K \leq k) = 1 - P(T_{k+1} \leq p), \quad 1 - F(k-1) = P(K \geq k) = P(T_k \leq p).$$

そして、右辺の計算に必要な $P(T_k \leq p)$ は次のように書ける:

$$P(T_k \leq p) = \frac{\int_0^p t^{k-1} (1-t)^{n-k} dt}{B(k, n-k+1)}.$$

この右辺は、基本特殊関数の1つである正規化された不完全ベータ関数になっており、コンピュータで効率的に計算できる。

注意: $0 < \alpha < 1$ のとき、「 n 回中 k 回成功した」というデータが与える信頼度 $1 - \alpha$ のClopper-Pearsonの信頼区間は $\text{pvalue}_{\text{CP}}(k|n, p) \geq \alpha$ を満たすパラメータ p の範囲と定義される:

$$\text{CI}_{\text{CP}}(k|n) = \{ p \in [0, 1] \mid \text{pvalue}_{\text{CP}}(k|n, p) \geq \alpha \}.$$

この辺りの話は後で詳しく説明することになる。

6.5 おまけ: 二項分布とベータ分布の関係のBayes統計への応用

この一連のノートではBayes統計についての詳しい説明はしないつもりでいるのだが、以下では **用語の詳しい定義を一切せずに** 二項分布とベータ分布の関係のBayes統計について説明してみたい。(以下の部分は理解できなくてもよい)

二項分布モデルで事前分布として共役事前分布 $\text{Beta}(a, b)$ を採用したとき、「 n 回中 k 回成功した」(例: 「 n 人中 k 人の病気が治った」、「 n 人中 k 人が商品を購入してくれた」、「 n 個中 k 個が不良品だった」) というデータが得られたときの成功確率 p に関する事後分布は $\text{Beta}(a + k, b + (n - k))$ になる。

特に形式的にimproper共役事前分布 $\text{Beta}(0, 1)$ や $\text{Beta}(1, 0)$ を採用したときの事後分布は前節や前々節で出て来た $\text{Beta}(k, n - k + 1)$ や $\text{Beta}(k + 1, n - k)$ になる。

そして、二項分布の累積分布関数とベータ分布の累積分布関数の関係は以下のようになっていた:

$$K \sim \text{Binomial}(n, p_0)$$

のとき、

$$\begin{aligned} T \sim \text{Beta}(k, n - k + 1) &\implies P(K \geq k) = P(T \leq p_0), \\ T \sim \text{Beta}(k + 1, n - k) &\implies P(K \leq k) = P(T \geq p_0). \end{aligned}$$

これは、以下を意味している:

- 事前分布 $\text{Beta}(0, 1)$ に関する事後分布において「 $p \leq p_0$ 」という仮説が成立する確率は二項分布モデルにおける「 $p \leq p_0$ 」という仮説の片側検定のP値にぴったり等しい。
- 事前分布 $\text{Beta}(1, 0)$ に関する事後分布において「 $p \geq p_0$ 」という仮説が成立する確率は二項分布モデルにおける「 $p \geq p_0$ 」という仮説の片側検定のP値にぴったり等しい。

このように、特定のケースではP値とBayes統計の事後分布において仮説が成立する確率がぴったり等しくなる。事前分布を例えば平坦事前分布 $\text{Beta}(1, 1)$ に変えても、 $(0, 1)$ や $(1, 0)$ と $(1, 1)$ の違いは小さいので、 n が数十程度で差は小さくなる。「 $p \leq p_0$ 」や「 $p \geq p_0$ 」のような仮説の片側検定については、通常のP値を使う統計学と事前事後分布を使うBayes統計学は数学的にはほぼ同じものだと思ってよい。

この事実から、「**Bayes統計は通常の統計学とは異なる主義思想哲学に基く。そしてP値の使用には害がある。P値を使う統計学は捨ててBayes統計を使うべきである**」のような主張をすることによって、**Bayes統計を宣伝している人達が完全に間違っている**ことがわかる。

数学的には同じデータから常に同じ結果が出ることがわかっているのに、主義思想哲学によって結果が変わると主張することは論理的に誤りである。事前事後分布ではなくP値を使った場合にも、数学的に同等だという理由で事前事後分布の場合と同じような解釈をP値についても許すならば論理的に整合性は取れているが、「Bayes統計は通常の統計学とは異なる主義思想哲学に基く」のような主張をする人達はそういう論理的に整合性のある議論を決してしない。

以上の結果から、「怪しげな事前分布を使うのでBayes統計は信用できない」という主張も完全に間違っていることもわかる。通常のP値を使った統計学に価値があるならば、事前分布を適当に選べばそれと完全に同じことをできるBayes統計にも価値があるということは明らかである。むしろ、事前分布という数学的選択肢が増えたおかげで、それなしにはできなかったこともできるようになると予想され、その予想は実際に正しい。

各種の技術には長所と短所の両方があることが普通である。方法Aを方法Bに切り替える場合には、それで失われる方法A側の相対的長所とそれによって得られる方法Bの側の相対的長所のどちらを選ぶかになることが多い。所謂「トレードオフ」の問題になる。P値を使う方法を使うか、Bayes統計の方法を使うかの問題も典型的なトレードオフの問題に過ぎない。そこに「主義思想哲学」を持ち込む必要はない。

6.6 おまけ関連問題: ベータ分布は二項分布の共役事前分布である

現実から「 n 回中 k 回成功」の型のデータが得られる状況を考える(「 n 人中 k 人が病気になる」、「 n 人中 k 人が商品を購入した」など)。

そのデータと成功確率 p の二項分布 $\text{Binomial}(n, p)$ の整合性がどうなっているかを見たいとする。その確率質量関数を次のように書く:

$$P(k|n, p) = \binom{n}{k} p^k (1 - p)^{n-k}$$

Bayes統計では、成功確率パラメータ p に関する確率密度関数 $\varphi(p)$ で与えられる確率分布(事前分布 (prior)と呼ぶ)をさらに与えて、統計モデル内部では次のようになっていると考える:

- 最初に成功確率パラメータの値 p が事前分布に従ってランダムに決まる。
- その p の値を採用した二項分布 $\text{Binomial}(n, p)$ に従って k がランダムに決まる。

この統計モデル内における k と p の同時分布は $P(k|n, p)\varphi(p)$ によって与えられ、モデル内での k, p のすべての組み合わせに関する確率の総和が 1 になることは次のようにして確認される:

$$\underbrace{\int_0^1 \sum_{k=0}^n P(k|n, p) \varphi(p) dp}_{=1} = \int_0^1 \varphi(p) dp = 1.$$

現実のデータを取得における成功確率 p に対応する値はこのモデル内設定のように確率分布しておらず、定数かもしれない。例えば、S市の住人をランダムに選んだときのBMI(=体重/身長²)の値が25以上である確率は、S市におけるBMIが25以上である人達の割合に一致し、確率分布しているわけではない。そういう状況であっても、統計モデル内では成功確率パラメータ p がランダムに決まっていると考えてもよい。(その理由を一般的な主義思想哲学に求めることはよく見る典型的な誤りである。Bayes統計に限らず一般的に、統計モデルとして現実にぴったり一致する可能性があるものを選ぶ必要はない。)

「 n 人中 k 人成功」の型のデータが得られたとき、データとモデルを比較するために、その統計モデル内でデータと同じ数値が生成されたという条件で制限された **条件付き確率分布** (条件付き確率については後で説明したい) を考える。統計モデルと現実から得たデータを比較するために、数学的フィクションであるモデル内で現実から得たデータと同じ数値がランダムに生成されたという状況を考えるのである。Bayes法とは異なる最尤法の予測分布もそのような条件付き確率分布になっているので、そのような条件付き確率分布を考えるか否かはBayes統計であるか否かとは無関係である。

そのモデル内条件付き確率分布におけるパラメータ p の分布は **事後分布** (posterior) と呼ばれる。条件付き確率の定義より、「 n 回中 k 回成功」というデータに関する事後分布 $\varphi(p|n, k)$ の確率密度関数は次の形になる:

$$\varphi(p|n, k) = \frac{P(k|n, p)\varphi(p)}{\int_0^1 P(k|n, p)\varphi(p) dp}.$$

事後分布は統計モデルとデータの整合性を見るために使われる。例えば、事後分布に従う確率変数 P について $P \leq 0.3$ となる確率が小さいならば、その統計モデル+仮説「成功確率は 0.3 以下である」の組み合わせとデータとの整合性は低いと考える。注意すべきことは「成功確率は 0.3 以下である」という仮説単体とデータの整合性を見ているのではなく、統計モデル+仮説とデータの整合性しかわからないということである。統計モデルを適切に与えないと仮説とデータの整合性について信頼できる結果は得られない。

問題: 以上の設定のもとで、事前分布がベータ分布 $\text{Beta}(a, b)$ で与えられたとき、「 n 回中 k 回成功」というデータに関する事後分布はベータ分布 $\text{Beta}(a + k, b + n - k)$ になることを示せ。

解答例: 事前分布がベータ分布 $\text{Beta}(a, b)$ で与えられているという設定は事前分布 $\varphi(p)$ が次のように書いているということを意味する:

$$\varphi(p) = \frac{p^{a-1}(1-p)^{b-1}}{B(a, b)}.$$

このとき、

$$C = \binom{n}{k} / B(a, b)$$

とおくと、

$$\begin{aligned} P(k|n, p)\varphi(p) &= C p^k (1-p)^{n-k} \cdot p^{a-1} (1-p)^{b-1} = C p^{a+k-1} (1-p)^{b+n-k-1} \\ \int_0^1 P(k|n, p)\varphi(p) dp &= C \int_0^1 p^{a+k-1} (1-p)^{b+n-k-1} dp = C B(a+k, b+n-k). \end{aligned}$$

ゆえに、事後分布 $\varphi(p|n, k)$ は次のようになる:

$$\varphi(p|n, k) = \frac{P(k|n, p)\varphi(p)}{\int_0^1 P(k|n, p)\varphi(p) dp} = \frac{C p^{a+k-1} (1-p)^{b+n-k-1}}{C B(a+k, b+n-k)} = \frac{p^{a+k-1} (1-p)^{b+n-k-1}}{B(a+k, b+n-k)}.$$

これは事後分布がベータ分布 $\text{Beta}(a + k, b + n - k)$ になることを意味している。

解答終

```
In [44]: 1 function plot_betaposterior(a, b, n, k; kwargs...)
          2     beta = Beta(a+k, b+n-k)
          3     plot(beta, -0.01, 1.01; label="", xtick=0:0.1:1)
          4     title!("posterior Beta(a+k, b+n-k)\n(a,b)=($a,$b), n=$n, k=$k")
          5     plot!(; kwargs...)
          6 end
```

Out[44]: plot_betaposterior (generic function with 1 method)

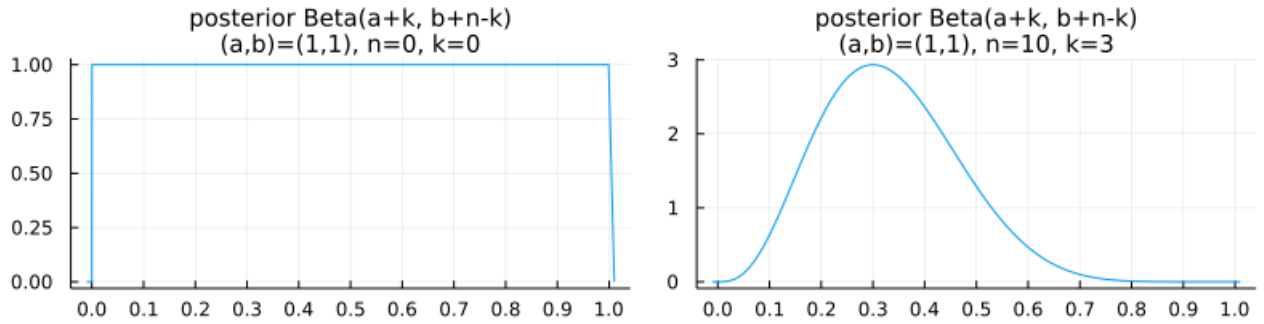
事後分布 $\text{Beta}(a + k, b + n - k)$ を色タブロットしてみよう。

データが「 n 回中 3 割成功」の場合を $n = 0, 10, 100, 1000$ の場合にプロットしてみる。

以下は事前分布が一様分布 $\text{Beta}(1, 1) = \text{Uniform}(0, 1)$ の場合。

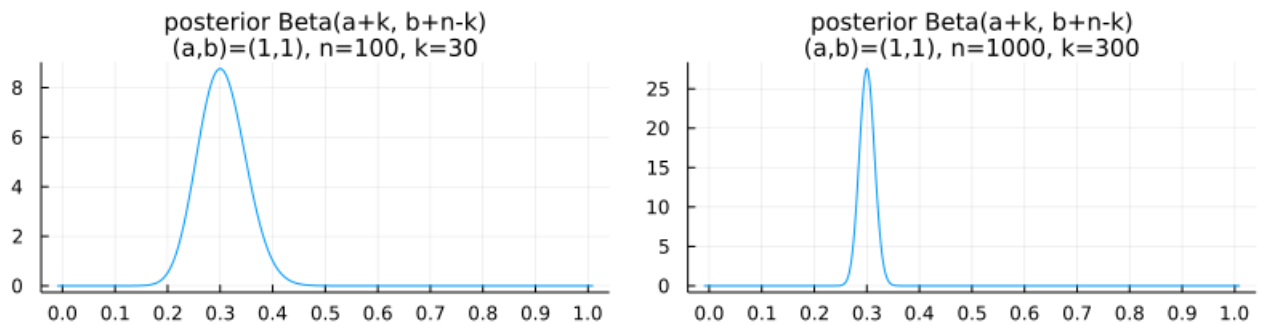
```
In [45]: 1 a, b = 1, 1
2 plot(plot_betaposterior(a, b, 0, 0),
3       plot_betaposterior(a, b, 10, 3);
4       size=(800, 200), layout=(1, 2), topmargin=4Plots.mm)
```

Out[45]:



```
In [46]: 1 a, b = 1, 1
2 plot(plot_betaposterior(a, b, 100, 30),
3       plot_betaposterior(a, b, 1000, 300);
4       size=(800, 200), layout=(1, 2), topmargin=4Plots.mm)
```

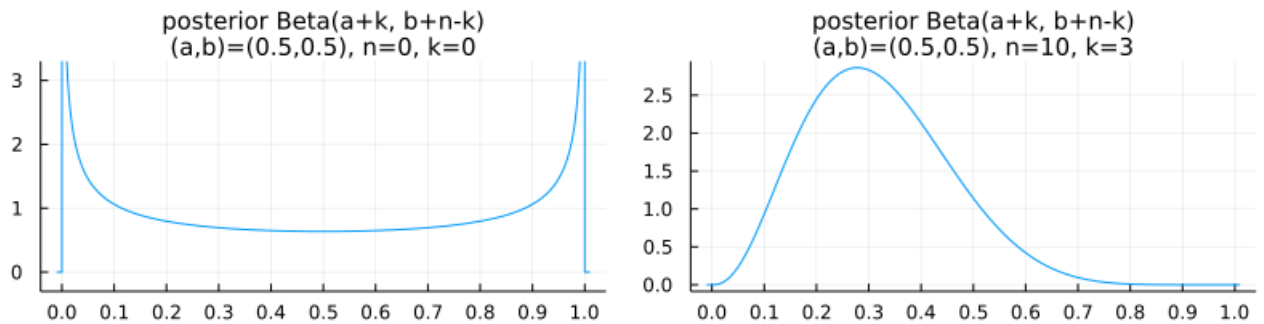
Out[46]:



以下は事前分布がJeffreys事前分布 $\text{Beta}(0.5, 0.5)$ の場合だが、上の一様事前分布の場合とほとんど同じになっている。

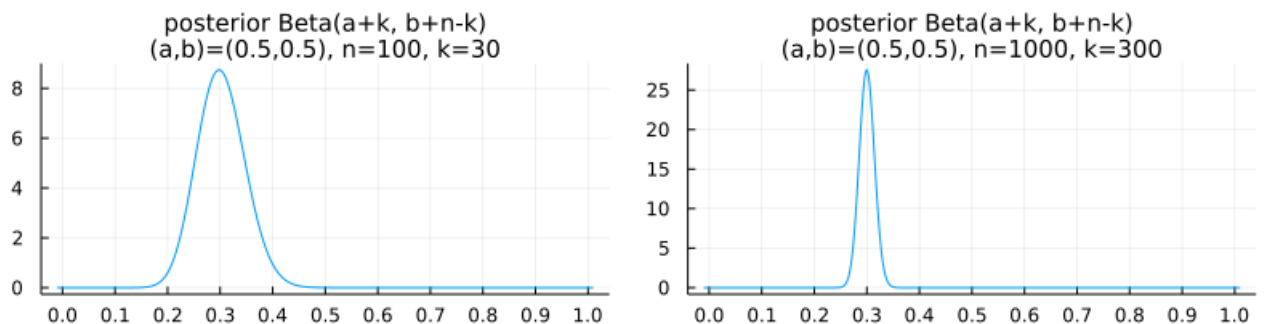
```
In [47]: 1 a, b = 0.5, 0.5
2 plot(plot_betaposterior(a, b, 0, 0; ylim=(-0.3, 3.3)),
3       plot_betaposterior(a, b, 10, 3);
4       size=(800, 200), layout=(1, 2), topmargin=4Plots.mm)
```

Out[47]:



```
In [48]: 1 a, b = 0.5, 0.5
2 plot(plot_betaposterior(a, b, 100, 30),
3       plot_betaposterior(a, b, 1000, 300);
4       size=(800, 200), layout=(1, 2), topmargin=4Plots.mm)
```

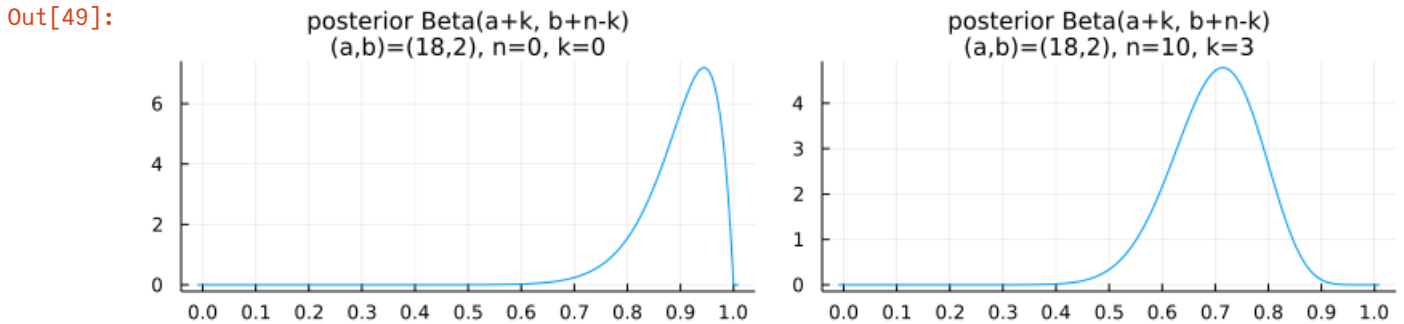
Out[48]:



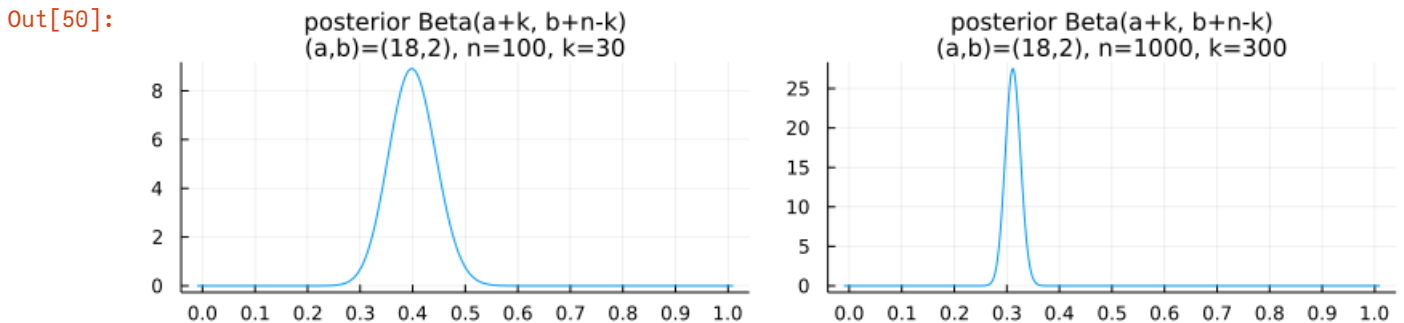
以下では違いを出すために事前分布を $\text{Beta}(18, 2)$ にしてみた。

この事前分布を採用するとデータがない状態では「 p は 0.9 に近い」という仮説と(事前分布を含めての)統計モデルの整合性が高いということになる。しかし、データが「 n 回中3割成功」の形をしている場合には n を大きくすると、「 p は 0.3 は高い」という仮説と統計モデル+データの整合性が高くなる。

```
In [49]: 1 a, b = 18, 2
2 plot(plot_betaposterior(a, b, 0, 0),
3       plot_betaposterior(a, b, 10, 3);
4       size=(800, 200), layout=(1, 2), topmargin=4Plots.mm)
```



```
In [50]: 1 a, b = 18, 2
2 plot(plot_betaposterior(a, b, 100, 30),
3       plot_betaposterior(a, b, 1000, 300);
4       size=(800, 200), layout=(1, 2), topmargin=4Plots.mm)
```



6.7 負の二項分布の累積分布関数のベータ分布の累積分布関数表示

独立な確率変数達 T_1, T_2, T_3, \dots のそれぞれは一様分布 $\text{Uniform}(0, 1)$ に従っていると仮定する。その最初の n 個 T_1, \dots, T_n の中で下から k 番目に小さなものをこの節では $T_{(n,k)}$ と書くことにする。 $T_{(n,k)}$ はベータ分布に従うのであった:

$$T_{(n,k)} \sim \text{Beta}(k, n - k + 1).$$

$0 < p < 1$ と仮定する。このとき、 $T_i \leq p$ ならば $X_i = 1$ とし、そうでないならば $X_i = 0$ とすることによって、成功確率 p の Bernoulli 分布に従う独立な確率変数達 X_1, X_2, X_3, \dots が得られる。これは Bernoulli 試行そのものである。

Bernoulli 試行を 1 がちょうど k 回出るまで続けたときの試行回数 N (これは確率変数になる) が n 以下になる確率は負の二項分布の確率質量関数を使って次のように書ける:

$$P(N \leq n) = \sum_{j \leq n} \binom{j-1}{j-k} p^k (1-p)^{j-k}.$$

この確率は T_1, \dots, T_n の中に p 以下のものが k 個以上存在する確率に一致し、さらにその確率は T_1, \dots, T_n の中で k 番目に小さな値 $T_{(n,k)}$ が p 以下になる確率に一致する。

以上より以下が成立することがわかる:

$$\begin{aligned} N - k &\sim \text{NegativeBinomial}(k, p), \quad T \sim \text{Beta}(k, n - k + 1) \\ \implies P(N \leq n) &= P(T \leq p), \quad P(N > n) = 1 - P(T \leq p). \end{aligned}$$

6.8 負の二項分布とベータ分布の関係の非整数パラメータケース

前節の議論では k は正の整数でなければいけない。以下では正の整数 k を正の実数 α に置き換えても同様の結果が成立することを前々節の証明2の方法で示そう。

$M \sim \text{NegativeBinomial}(\alpha, p)$ であるとし、

$$H(p) = P(M \leq m) = \sum_{i \leq m} \binom{\alpha + i - 1}{i} p^\alpha (1 - p)^i$$

とおく. このとき,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial p}(p^\alpha (1 - p)^i) &= \alpha t^{\alpha-1} (1 - t)^i - i t^\alpha (1 - p)^{i-1} \\ &= \alpha t^{\alpha-1} (1 - t)^i - i(t^{\alpha-1}(-(1 - t) + 1)(1 - t)^{i-1}) \\ &= \alpha t^{\alpha-1} (1 - t)^i + i t^{\alpha-1} (1 - t)^i - i t^{\alpha-1} (1 - t)^{i-1} \\ &= (\alpha + i) t^{\alpha-1} (1 - t)^i - i t^{\alpha-1} (1 - t)^{i-1} \end{aligned}$$

より

$$\begin{aligned} H'(t) &= \sum_{i \leq m} (\alpha + i) \binom{\alpha + i - 1}{i} t^{\alpha-1} (1 - t)^i - \sum_{i \leq m} i \binom{\alpha + i - 1}{i} t^{\alpha-1} (1 - t)^{i-1} \\ &= \sum_{i \leq m} (i + 1) \binom{\alpha + i}{i + 1} t^{\alpha-1} (1 - t)^i - \sum_{i \leq m} i \binom{\alpha + i - 1}{i} t^{\alpha-1} (1 - t)^{i-1} \\ &= \sum_{i \leq m+1} i \binom{\alpha + i - 1}{i} t^{\alpha-1} (1 - t)^{i-1} - \sum_{i \leq m} i \binom{\alpha + i - 1}{i} t^{\alpha-1} (1 - t)^{i-1} \\ &= (m + 1) \binom{\alpha + m}{m + 1} t^{\alpha-1} (1 - t)^m \\ &= -\frac{\Gamma(\alpha + m + 1)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(m + 1)} t^{\alpha-1} (1 - t)^m \\ &= -\frac{1}{B(\alpha, m + 1)} t^{\alpha-1} (1 - t)^m. \end{aligned}$$

これはベータ分布 $\text{Beta}(\alpha, m + 1)$ の確率密度関数の形をしている. $H(0) = 0$ より,

$$P(M \leq m) = H(p) = \int_0^p H'(t) dt = \frac{\int_0^p t^{\alpha-1} (1 - t)^m dt}{B(\alpha, m + 1)}.$$

以上より, 整数とは限らない $\alpha > 0$ についても以下が成立することがわかった:

$$\begin{aligned} M &\sim \text{NegativeBinomial}(\alpha, p), \quad T \sim \text{Beta}(\alpha, m + 1) \\ \implies P(M \leq m) &= P(T \leq p), \quad P(M > m) = 1 - P(T \leq p). \end{aligned}$$

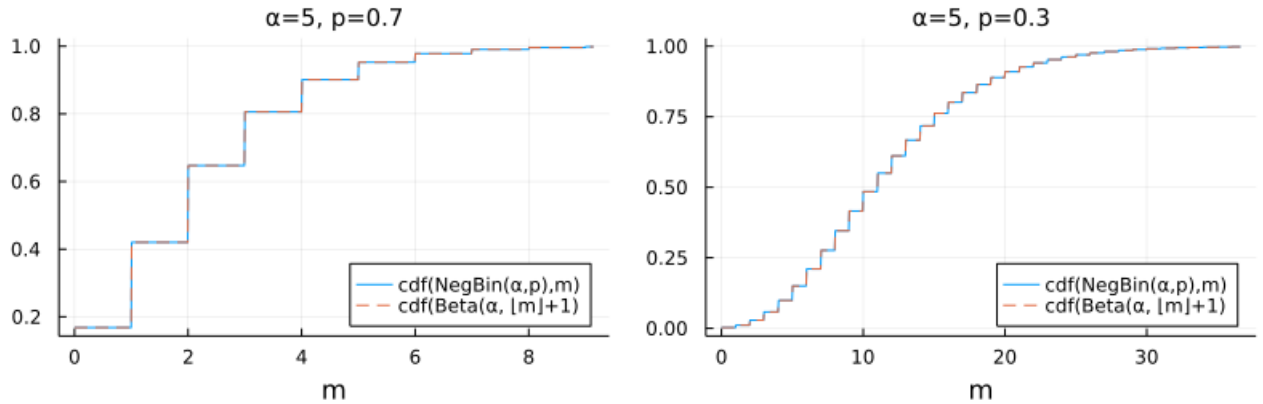
注意: 負の二項分布の累積分布関数 $P(M \leq m)$ の計算を定義通りに行うと, $m + 1$ 個の数値の和を取る計算をすることになる. しかし, 以上の結果を使って, $P(M \leq m)$ の計算をベータ分布の累積分布関数 $P(T \leq p)$ の値として計算すれば, 基本特殊関数ライブラリの中に含まれている正規化された(不完全)ガンマ関数を使って効率的に計算できる.

```
In [51]: 1 function plot_cdfnegbinbeta(α, p)
2         negbin = NegativeBinomial(α, p)
3         μ, σ = mean(negbin), std(negbin)
4         beta(m) = Beta(α, m+1)
5         m = range(max(0, μ-4σ), μ+4σ, 1000)
6         plot(m, m → cdf(negbin, m); label="cdf(NegBin(α,p),m)")
7         plot!(m, m → cdf(beta(floor(m)), p); ls=:dash, label="cdf(Beta(α, m+1))")
8         plot!(); legend=:bottomright, xlabel="m")
9         title!("α=$α, p=$p")
10        end
```

Out[51]: plot_cdfnegbinbeta (generic function with 1 method)

```
In [52]: 1 plot(plot_cdfnegbinbeta(5, 0.7), plot_cdfnegbinbeta(5, 0.3); size=(800, 250), bottommargin=4Pl
```

Out[52]:



6.9 二項分布の累積分布関数と負の二項分布の累積分布関数の関係(まとめ)

以上によって、以下が示された:

$$K \sim \text{Binomial}(n, p), \quad T \sim \text{Beta}(k, n - k + 1), \quad N - k \sim \text{NegativeBinomial}(k, p)$$

のとき,

$$P(K \geq k) = P(T \leq p) = P(N \leq n), \quad P(K < k) = P(T > p) = P(N > n).$$

これを具体的な式で書くと,

$$\sum_{i=k}^n \binom{n}{i} p^i (1-p)^{n-i} = \frac{\int_0^p t^{k-1} (1-t)^{n-k} dt}{B(k, n-k+1)} = \sum_{j=k}^n \binom{j-1}{j-k} p^k (1-p)^{j-k},$$

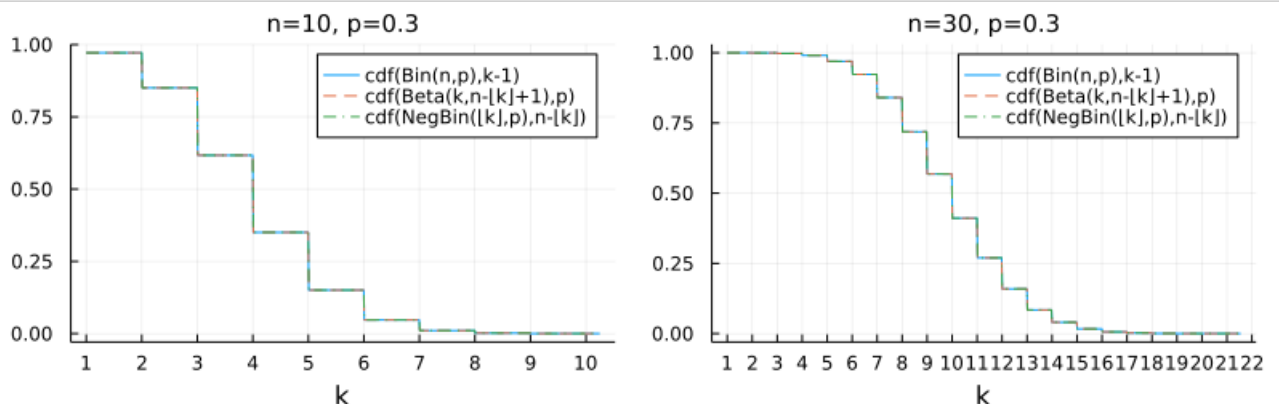
$$\sum_{i=0}^{k-1} \binom{n}{i} p^i (1-p)^{n-i} = \frac{\int_p^1 t^{k-1} (1-t)^{n-k} dt}{B(k, n-k+1)} = \sum_{j=n+1}^{\infty} \binom{j-1}{j-k} p^k (1-p)^{j-k}.$$

```
In [53]: 1 function plot_cdf_bin_beta_nb(n, p; xtick=0:n)
2     bin = Binomial(n, p)
3     beta(k) = Beta(k, n-k+1)
4     nb(k) = NegativeBinomial(k, p)
5     mu, sigma = mean(bin), std(bin)
6     k = range(max(1, mu-4sigma), mu+5sigma, 1000)
7     plot(k, k -> ccdf(bin, k-1); label="cdf(Bin(n,p),k-1)")
8     plot!(k, k -> cdf(beta(floor(k)), p); ls=:dash, label="cdf(Beta(k,n-[k]+1),p)")
9     plot!(k, k -> cdf(nb(floor(k)), n - floor(k)); ls=:dashdot, label="cdf(NegBin([k],p),n-[k])")
10    plot!(); xlabel="k", xtick
11    title!("n=$n, p=$p")
12 end
```

Out[53]: plot_cdf_bin_beta_nb (generic function with 1 method)

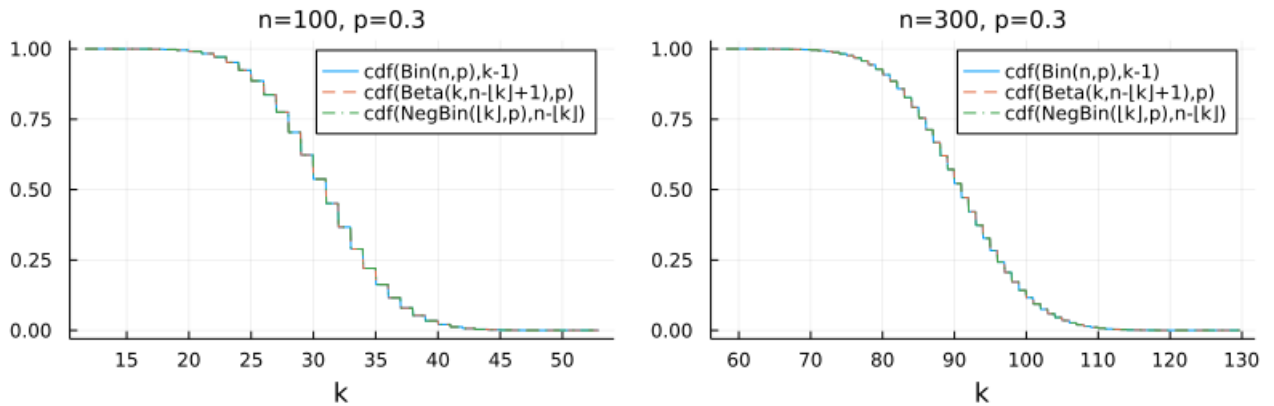
```
In [54]: 1 plot(plot_cdf_bin_beta_nb(10, 0.3), plot_cdf_bin_beta_nb(30, 0.3);
2     size=(800, 250), bottommargin=4Plots.mm)
```

Out[54]:



```
In [55]: 1 plot(plot_cdf_bin_beta_nb(100, 0.3; xtick=0:5:100), plot_cdf_bin_beta_nb(300, 0.3; xtick=0:10:
2         size=(800, 250), bottommargin=4Plots.mm)
```

Out[55]:



6.10 Poisson分布の累積分布関数とガンマの累積分布関数の関係(再掲, まとめ)

二項分布と負の二項分布の連続時間極限でそれぞれPoisson分布とガンマ分布が得られるのであった. ゆえに, 前節でまとめた結果は以下の連続時間版の結果の離散時間版だとみなされる:

$$K \sim \text{Poisson}(\lambda\tau), \quad T \sim \text{Gamma}(\alpha = \kappa, \theta = 1/\lambda)$$

のとき,

$$P(K \geq \kappa) = P(T \leq \tau), \quad P(K < \kappa) = P(T > \tau).$$

これを具体的な式で書くと,

$$\sum_{j=\kappa}^{\infty} \frac{e^{-\lambda\tau} (\lambda\tau)^j}{j!} = \frac{\int_0^{\tau} e^{-\lambda t} t^{\kappa-1} dt}{\lambda^{-\kappa} \Gamma(\kappa)},$$

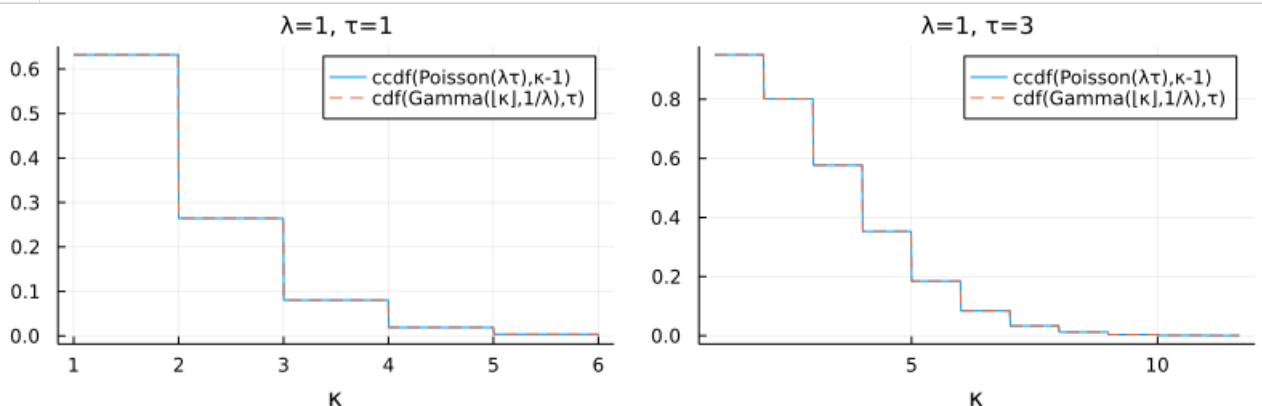
$$\sum_{j=0}^{\kappa-1} \frac{e^{-\lambda\tau} (\lambda\tau)^j}{j!} = \frac{\int_{\tau}^{\infty} e^{-\lambda t} t^{\kappa-1} dt}{\lambda^{-\kappa} \Gamma(\kappa)}.$$

```
In [56]: 1 function plot_cdf_poi_gam(λ, τ; xtick=0:round(Int, λ*τ+10√(λ*τ)))
2     poi = Poisson(λ*τ)
3     gam(κ) = Gamma(κ, 1/λ)
4     μ, σ = mean(poi), std(poi)
5     κ = range(max(1, μ-4σ), μ+5σ, 1000)
6     plot(κ, κ → ccdf(poi, κ-1); label="ccdf(Poisson(λτ),κ-1)")
7     plot!(κ, κ → cdf(gam(floor(κ)), τ); label="cdf(Gamma(⌊κ⌋,1/λ),τ)", ls=:dash)
8     plot!(); xlabel="κ", xtick)
9     title!("λ=$λ, τ=$τ")
10 end
```

Out[56]: plot_cdf_poi_gam (generic function with 1 method)

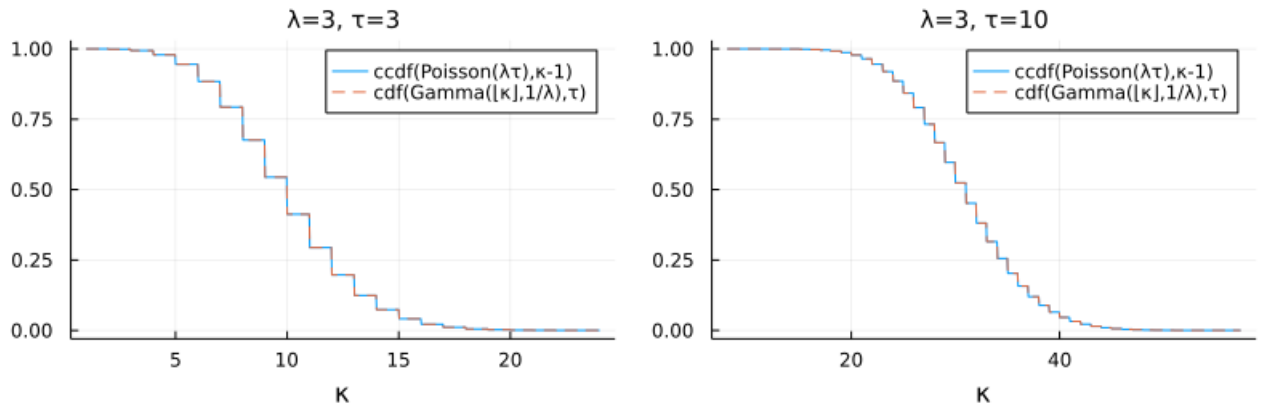
```
In [57]: 1 plot(plot_cdf_poi_gam(1, 1), plot_cdf_poi_gam(1, 3; xtick=0:5:100);
2         size=(800, 250), bottommargin=4Plots.mm)
```

Out[57]:



```
In [58]: 1 plot(plot_cdf_poi_gam(3, 3; xtick=0:5:1000), plot_cdf_poi_gam(3, 10; xtick=0:20:1000);
2         size=(800, 250), bottommargin=4Plots.mm)
```

Out[58]:



7 ベータ二項分布

我々は以下が成立することを知っている:

(a) 期待値パラメータ λ がガンマ分布 $\text{Gamma}(\alpha, \theta)$ に従う確率変数になっているようなPoisson分布 $\text{Poisson}(\lambda)$ に従う確率変数が従う分布は負の二項分布 $\text{NegativeBinomial}(\alpha, 1/(1 + \theta))$ になる.

そしてさらに

(1) 二項分布 $\text{Binomial}(n, \lambda/n)$ は $n \rightarrow \infty$ でPoisson分布 $\text{Poisson}(\lambda)$ に収束する.

(2) $T_n \sim \text{Beta}(\alpha, n + b)$ のとき $\theta n T_n$ が従う分布は $n \rightarrow \infty$ でガンマ分布 $\Gamma(\alpha, \theta)$ に収束する.

以上の結果から, まだ埋まっていない穴を埋めるとベータ二項分布が自然に得られる. 結果的に以下が成立することになる:

(b) 二項分布における成功確率パラメータ p がベータ分布 $\text{Beta}(\alpha, \beta)$ に従う確率変数になっているような二項分布 $\text{Binomial}(n, p)$ に従う確率変数が従う分布は **ベータ二項分布** になる.

(3) ベータ二項分布の連続時間極限として, 負の二項分布が得られる. しかも, その極限は(1), (2)と整合的である.

7.1 ベータ二項分布の定義

次の確率質量関数で定義される有限離散分布を **ベータ二項分布** (Beta-binomial distribution)と呼び,

$$\text{BetaBinomial}(n, \alpha, \beta)$$

と表す:

$$P(k|n, \alpha, \beta) = \binom{n}{k} \frac{B(\alpha + k, \beta + n - k)}{B(\alpha, \beta)} \quad (k = 0, 1, \dots, n)$$

次が成立していることに注意せよ:

$$P(k|n, \alpha, \beta) = \int_0^1 \binom{n}{k} p^k (1 - p)^{n-k} \frac{p^{\alpha-1} (1 - p)^{\beta-1}}{B(\alpha, \beta)} dp.$$

この式は二項分布 $\text{Binomial}(n, p)$ の成功確率パラメータ p がベータ分布 $\text{Beta}(\alpha, \beta)$ に従って確率的に揺らいでいる場合の分布を表す確率質量関数になっている.

ベータ二項分布の乱数は以下の手続きで生成可能である:

1. ベータ分布 $\text{Beta}(\alpha, \beta)$ に従って乱数 p を生成する.
2. その p を採用した二項分布 $\text{Binomial}(n, p)$ に従って乱数 k を生成する.

このように k を大量に生成したときの k の分布がベータ二項分布になる.

以下はその確認である.


```

In [59]: 1 function plot_bb(n, α, β; L = 10^6, kwargs...)
2         # Monte Carlo シミュレーション
3         P = rand(Beta(α, β), L) # ベータ分布の乱数を大量に生成
4         K = @. rand(Binomial(n, P)) # 各p∈Pごとに二項分布Binomial(n,p)で乱数を生成
5
6         # 比較のための同時プロット
7         kmin, kmax = round.(Int, quantile.(BetaBinomial(n, α, β), (0.001, 0.999)))
8         x = range(kmin-0.6, kmax+0.6, 1000)
9         histogram(K; norm=true, alpha=0.3, bin=kmin-0.5:kmax+0.5, label="mc sim")
10        plot!(x, x → pdf(BetaBinomial(n, α, β), round(Int, x)); label="BetaBin(n,α,β)", lw=1.5)
11        plot!(x, x → pdf(Binomial(n, α/(α+β)), round(Int, x)); label="Bin(n,α/(α+β))", ls=:dash)
12        title!("n=$n, α=$α, β=$β")
13        plot!(); kwargs...
14    end
15
16    function plot_beta(α, β)
17        plot(Beta(α, β); label="", title="Beta(α=$α, β=$β)", xtick=0:0.1:1)
18    end

```

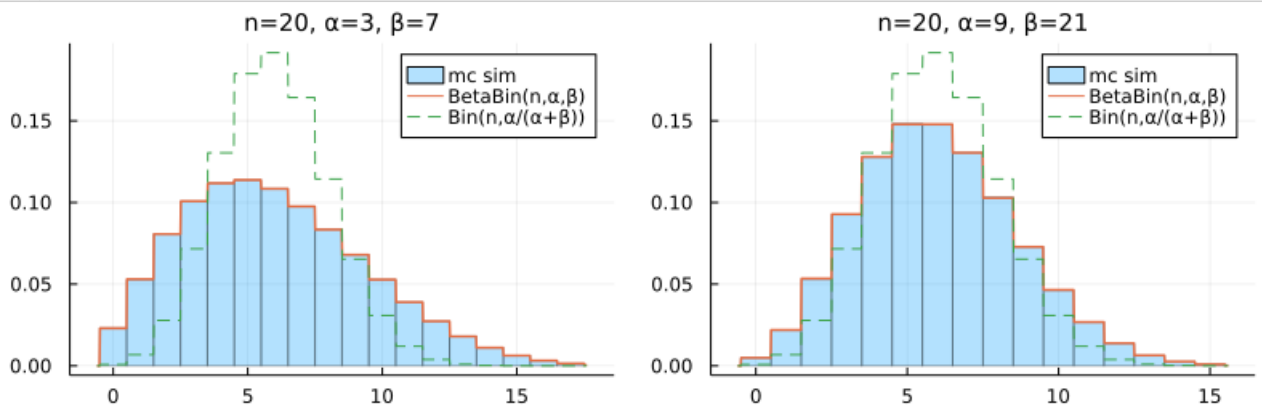
Out[59]: plot_beta (generic function with 1 method)

```

In [60]: 1 plot(plot_bb(20, 3, 7), plot_bb(20, 9, 21); size=(800, 250))

```

Out[60]:

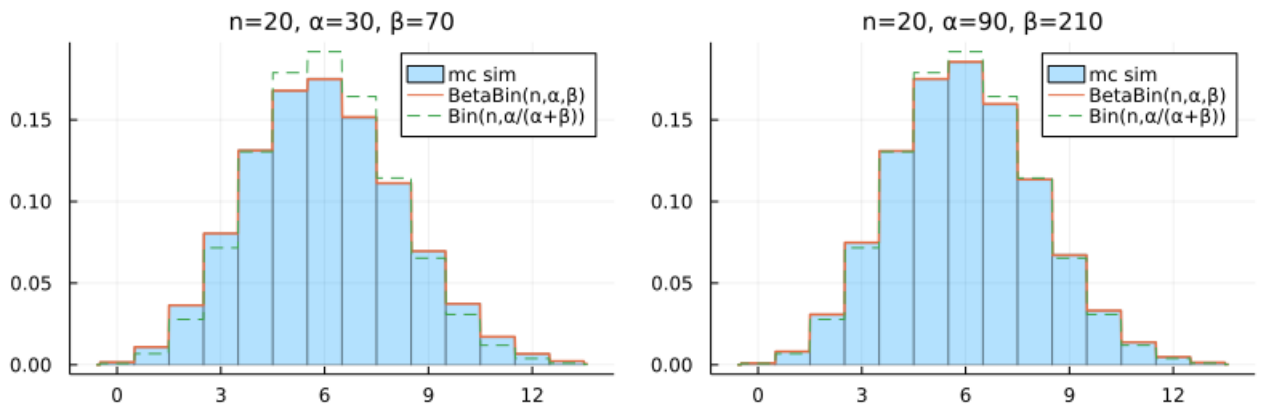


```

In [61]: 1 plot(plot_bb(20, 30, 70), plot_bb(20, 90, 210); size=(800, 250))

```

Out[61]:

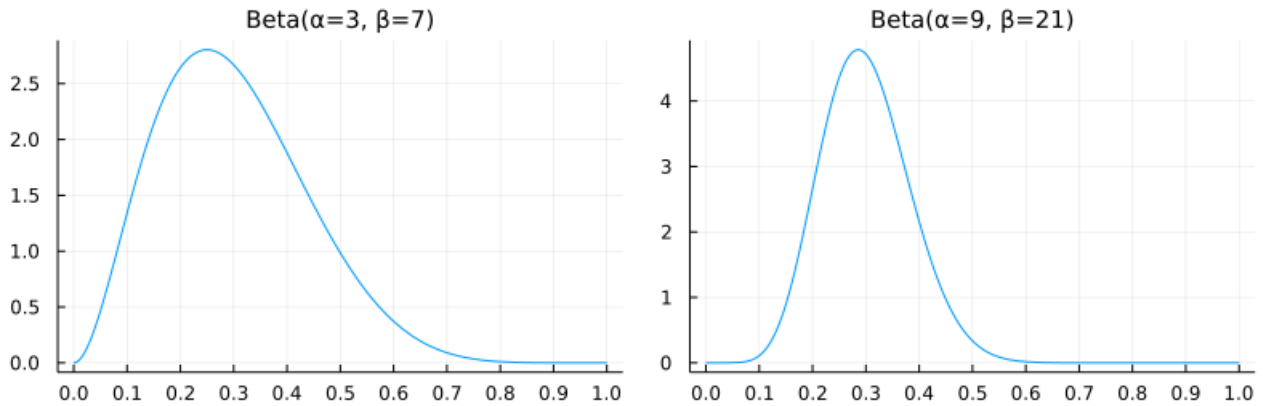


ベータ分布で p をランダムに生成して、その p を採用した二項分布で k をランダムに生成することを繰り返した Monte Carloシミュレーション(mc sim)の結果と、ベータ二項分布の確率質量関数のプロット(BetaBin(α, β))がぴったり一致している。破線は二項分布のグラフである。

$\alpha/(\alpha + \beta)$ を保ったまま α, β を大きくすると分布 BetaBinomial(n, α, β) は分布 Binomial($n, \alpha/(\alpha + \beta)$) に近づく。そうなる理由は $\alpha/(\alpha + \beta)$ を保ったまま α, β を大きくすると、分布 Beta(α, β) が $\alpha/(\alpha + \beta)$ に集中するようになるからである。

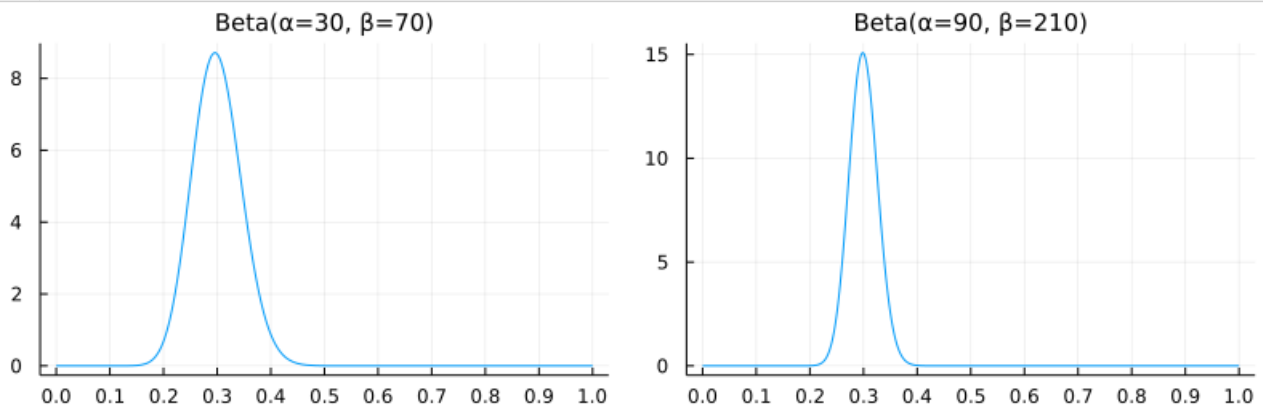
```
In [62]: 1 plot(plot_beta(3, 7), plot_beta(9, 21); size=(800, 250))
```

Out[62]:



```
In [63]: 1 plot(plot_beta(30, 70), plot_beta(90, 210); size=(800, 250))
```

Out[63]:



7.2 ベータ二項分布の「成功確率が確率的に揺らいでいる二項分布」という解釈

ある母集団に含まれる医師を無作為に選んで n 人の無作為に選んだ患者を方法Aで治療してもらい、何らかの基準で治療が成功したか否かを客観的に判断し、成功した人数 k を記録したとする。

このとき n 回中の治療成功数 k の最も単純なモデル化は、無作為に選んだ医師によらずに共通の治療成功確率 p が決まっていて、成功回数 k は二項分布に従ってランダムに決まると考えることである(これは治療の繰り返しをBernoulli試行でモデル化しているのと同じことである)。

統計モデルは現実には確実に一致しないことが明らかなものを選ぶことが多い。例えば、この二項分布モデルの前提である試行の独立性と毎回の成功確率が一定であるという仮定は現実には多くの場合に疑わしい。

しかし、目的に十分な精度で現実の状況をうまく把握できれば統計モデルの設定は成功したことになる。

上の二項分布モデル採用は、無作為に選んだ医師によらずに方法Aによる共通の治療成功確率 p が決まっているという仮定が極めて疑わしい状況では失敗に終わる可能性が高い。医師達のあいだで方法Aによる治療技術が違っている可能性を考慮する必要があるかもしれない。

そのような場合には、「無作為に選んだ医師達全員に共通の成功確率 p が決まっている」という設定を、「無作為に選んだ医師ごとに成功確率は違っていて、各医師固有の成功確率はある確率分布にしたがってばらついている」という設定に緩めれば良さそうである。

そのときの有力候補の1つがベータ二項分布である。ベータ二項分布における成功回数 k は以下のように生成されるのであった:

1. ベータ分布 $\text{Beta}(\alpha, \beta)$ に従って乱数 p を生成する。
2. その p を採用した二項分布 $\text{Binomial}(n, p)$ に従って乱数 k を生成する。

これは、ベータ分布で乱数 p を生成するところは、医師を無作為に選んだときに成功確率 p がベータ分布に従ってランダムに決まるというモデル内設定になっている。現実の医師達についてはそう単純ではないことは確かだが、このようなモデル設定を試せることも知っている、統計分析の成功可能性が上がるだろう。

上で見たように、 α, β が大きくなると、ベータ分布がランダムに生成する成功確率 p のばらつきの幅が小さくなり、ベータ二項分布はただの二項分布に近づく。このような場合にはよりシンプルな二項分布モデルを採用した方が合理的な可能性も出て来る。

7.3 ベータ二項分布での確率の総和が 1 になることの確認

ベータ二項分布の確率質量関数の次の表示を使う：

$$P(k|n, \alpha, \beta) = \int_0^1 \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \frac{p^{\alpha-1} (1-p)^{\beta-1}}{B(\alpha, \beta)} dp.$$

これを使うと、

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^n P(k|n, \alpha, \beta) &= \int_0^1 \underbrace{\sum_{k=0}^n \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}}_{=1} \frac{p^{\alpha-1} (1-p)^{\beta-1}}{B(\alpha, \beta)} dp \\ &= \int_0^1 \frac{p^{\alpha-1} (1-p)^{\beta-1}}{B(\alpha, \beta)} dp = 1. \end{aligned}$$

一般にパラメータ θ を持つ確率質量関数 $P(x|\theta)$ と θ に関するパラメータ η を持つ確率密度関数 $p(\theta|\eta)$ に対して、

$$\tilde{P}(x|\eta) = \int P(x|\theta) p(\theta|\eta) d\theta$$

によって、パラメータ η を持つ確率質量関数 $\tilde{P}(x|\eta)$ を構成できる。確率の総和が 1 になることは上の計算と同様で以下のようにして示される：

$$\sum_x \tilde{P}(x|\eta) = \int \underbrace{\sum_x P(x|\theta) p(\theta|\eta)}_{=1} d\theta = \int p(\theta|\eta) d\theta = 1.$$

確率質量関数 $P(x|\theta)$ を確率密度関数 $p(x|\theta)$ で置き換えた場合も同様である。

7.4 問題: ベータ二項分布の期待値と分散

ベータ二項分布 $\text{Beta}(n, \alpha, \beta)$ の期待値と分散が以下になることを示せ: $K \sim \text{Beta}(n, \alpha, \beta)$ とすると、

$$E[K] = \frac{n\alpha}{\alpha + \beta}, \quad \text{var}(K) = \frac{n\alpha\beta(\alpha + \beta + n)}{(\alpha + \beta)^2(\alpha + \beta + 1)}.$$

注意: これらを二項分布と比較するために仮に $p = \alpha/(\alpha + \beta)$ とおくと、

$$E[K] = np, \quad \text{var}(K) = np(1-p) \left(1 + \frac{n-1}{\alpha + \beta + 1} \right).$$

期待値の方は二項分布と同じ形になったが、分散の方は二項分布の場合の分散 $np(1-p)$ よりも $1 + (n-1)/(\alpha + \beta + 1)$ 倍に大きくなっている。大雑把に言うと、 $\alpha + \beta$ が n よりずっと大きい場合にはベータ二項分布は二項分布でよく近似されるようになる。

解答例: $K \sim \text{Binomial}(n, p)$ について

$$\begin{aligned} E[K(K-1)\cdots(K-m+1)] &= \sum_k k(k-1)\cdots(k-m+1) \frac{n!}{k!(n-k)!} p^k (1-p)^{n-k} \\ &= n(n-1)\cdots(n-m+1) p^m \underbrace{\sum_k \frac{(n-m)!}{(k-m)!(n-k)!} p^{k-m} (1-p)^{n-k}}_{=(p+(1-p))^{n-m}=1} \\ &= n(n-1)\cdots(n-m+1) p^m. \end{aligned}$$

$P \sim \text{Beta}(\alpha, \beta)$ について

$$\begin{aligned}
E[P^m] &= \int_0^1 p^m \frac{p^{\alpha-1}(1-p)^{\beta-1} dp}{B(\alpha, \beta)} = \frac{\int_0^1 p^{\alpha+m-1}(1-p)^{\beta-1} dp}{B(\alpha, \beta)} \\
&= \frac{B(\alpha+m, \beta)}{B(\alpha, \beta)} = \frac{\Gamma(\alpha+m)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha+\beta+m)} \frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \\
&= \frac{\alpha(\alpha+1)\cdots(\alpha+m-1)}{(\alpha+\beta)(\alpha+\beta+1)\cdots(\alpha+\beta+m-1)}.
\end{aligned}$$

ゆえに, $K \sim \text{BetaBinomial}(n, \alpha, \beta)$ について,

$$\begin{aligned}
E[K(K-1)\cdots(K-m+1)] &= \sum_k k(k-1)\cdots(k-m+1) \int_0^1 \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \frac{p^{\alpha-1}(1-p)^{\beta-1} dp}{B(\alpha, \beta)} \\
&= \int_0^1 \left(\sum_k k(k-1)\cdots(k-m+1) \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \right) \frac{p^{\alpha-1}(1-p)^{\beta-1} dp}{B(\alpha, \beta)} \\
&= \int_0^1 n(n-1)\cdots(n-m+1) p^m \frac{p^{\alpha-1}(1-p)^{\beta-1} dp}{B(\alpha, \beta)} \\
&= n(n-1)\cdots(n-m+1) \int_0^1 p^m \frac{p^{\alpha-1}(1-p)^{\beta-1} dp}{B(\alpha, \beta)} \\
&= n(n-1)\cdots(n-m+1) \frac{\alpha(\alpha+1)\cdots(\alpha+m-1)}{(\alpha+\beta)(\alpha+\beta+1)\cdots(\alpha+\beta+m-1)}.
\end{aligned}$$

特に,

$$E[K] = \frac{n\alpha}{\alpha+\beta}, \quad E[K(K-1)] = \frac{n(n-1)\alpha(\alpha+1)}{(\alpha+\beta)(\alpha+\beta+1)}.$$

ゆえに

$$E[K] - E[K]^2 = E[K](1 - E[K]) = \frac{n\alpha}{\alpha+\beta} \left(1 - \frac{n\alpha}{\alpha+\beta} \right) = \frac{n\alpha(\alpha+\beta-n\alpha)}{(\alpha+\beta)^2}$$

なので

$$\begin{aligned}
\text{var}(K) &= E[K^2] - E[K]^2 = E[K(K-1)] + E[K] - E[K]^2 \\
&= \frac{n(n-1)\alpha(\alpha+1)}{(\alpha+\beta)(\alpha+\beta+1)} + \frac{n\alpha(\alpha+\beta-n\alpha)}{(\alpha+\beta)^2} \\
&= \frac{n\alpha((n-1)(\alpha+1)(\alpha+\beta) + (\alpha+\beta-n\alpha)(\alpha+\beta+1))}{(\alpha+\beta)^2(\alpha+\beta+1)} \\
&= \frac{n\alpha(\alpha\beta + \beta^2 + n\beta)}{(\alpha+\beta)^2(\alpha+\beta+1)} = \frac{n\alpha\beta(\alpha+\beta+n)}{(\alpha+\beta)^2(\alpha+\beta+1)}.
\end{aligned}$$

解答終

```
In [64]: 1 @vars a b n
2 var"E[K]" = n*a/(a+b)
3 var"E[K(K-1)]" = n*(n-1)*a*(a+1)/((a+b)*(a+b+1))
4 var"var(K)" = var"E[K(K-1)]" + var"E[K]" - var"E[K]"^2 > factor
```

```
Out[64]: 
$$\frac{abn(a+b+n)}{(a+b)^2(a+b+1)}$$

```

7.5 問題: ベータ二項分布 = 負の超幾何分布

ベータ二項分布の確率質量関数

$$P(k|n, \alpha, \beta) = \binom{n}{k} \frac{B(\alpha+k, \beta+n-k)}{B(\alpha, \beta)} \quad (k = 0, 1, \dots, n)$$

は以下のように書き換えられることを示せ:

$$\begin{aligned}
P(k|n, \alpha, \beta) &= \binom{\alpha+k-1}{k} \binom{\beta+(n-k)-1}{n-k} \bigg/ \binom{\alpha+\beta+n-1}{n} \\
&= \binom{-\alpha}{k} \binom{-\beta}{n-k} \bigg/ \binom{-\alpha-\beta}{n}.
\end{aligned}$$

注意: この形の確率質量関数は別に定義される有限離散分布のパラメータ $s, f, n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}, n \leq s+f$ に関する **超幾何分布** $\text{Hypergeometric}(s, f, n)$ の確率質量関数

$$k \mapsto \binom{s}{k} \binom{f}{n-k} / \binom{s+f}{n}.$$

における s, f に負の値 $-\alpha, -\beta$ を形式的に代入したものに一致しているので、ベータ二項分布は **負の超幾何分布** と呼ばれることがある。

注意: 上に書いた超幾何分布の確率は、 s 個の赤い球と f 個の白い球が入っている袋から n 個をまとめて無作為に取り出したとき、その中にちょうど k 個の赤い球が含まれる確率になっている(s は success の、 f は failure の頭文字)。実際、分母の $\binom{n+m}{n}$ は $s + f$ 個から n 個を選ぶときの組み合わせの数であり、分子は s 個の赤い球から k 個を選び、 f 個の白い球から $n - k$ 個選ぶ組み合わせの個数であり、分子を分母で割れば、 n 個中ちょうど k 個が赤い球である確率になる。超幾何分布自体は「超幾何」という難しそうな形容詞が付いているが、初等的に理解できる確率分布である。

注意: 負の二項分布の確率質量関数は

$$P(m|\alpha, p) = \binom{\alpha+m-1}{m} p^\alpha (1-p)^m = (-1)^m \binom{-\alpha}{m} p^\alpha (1-p)^m$$

と書けるのであった。二項分布と負の二項分布の関係は超幾何分布と負の超幾何分布=ベータ二項分布の関係に似ている。

解答例:

$$\begin{aligned} P(k|n, \alpha, \beta) &= \binom{n}{k} \frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha+\beta+n)} \frac{\Gamma(\alpha+k)}{\Gamma(\alpha)} \frac{\Gamma(\beta+n-k)}{\Gamma(\beta)} \\ &= \frac{n!}{k!(n-k)!} \frac{\alpha(\alpha+1) \cdots (\alpha+k-1) \cdot \beta(\beta+1) \cdots (\beta+n-k-1)}{(\alpha+\beta)(\alpha+\beta+1) \cdots (\alpha+\beta+n-1)} \\ &= \frac{\alpha(\alpha+1) \cdots (\alpha+k-1)}{k!} \frac{\beta(\beta+1) \cdots (\beta+n-k-1)}{(n-k)!} \\ &\quad \times \frac{n!}{(\alpha+\beta)(\alpha+\beta+1) \cdots (\alpha+\beta+n-1)} \\ &= \binom{\alpha+k-1}{k} \binom{\beta+(n-k)-1}{n-k} / \binom{\alpha+\beta+n-1}{n} \end{aligned}$$

さらに、

$$\begin{aligned} (-1)^k \binom{-a}{k} &= (-1)^k \frac{(-a)(-a-1) \cdots (-a-k+1)}{k!} \\ &= \frac{a(a+1) \cdots (a+k-1)}{k!} = \binom{a+k-1}{k} \end{aligned}$$

なので、

$$P(k|n, \alpha, \beta) = \binom{-\alpha}{k} \binom{-\beta}{n-k} / \binom{-\alpha-\beta}{n}.$$

解説終

7.6 超幾何分布, 二項分布, ベータ二項分布の統一的な理解

この節の内容は本質的に [Pólya urn model \(https://www.google.com/search?q=P%C3%B3lya+urn+model\)](https://www.google.com/search?q=P%C3%B3lya+urn+model) の話である。この節では α と β は 0 以上の整数であると仮定する。

最初の状態では袋の中に赤い球が α 個、白い球が β 個入っているとし、以下の操作を n 回繰り返そう:

1. 袋の中から玉を無作為に取り出し、その色を記録する。
2. その玉が赤いならば袋の中に赤い球を $\delta + 1$ 個戻し(袋の中の赤い球は δ 個増える)、白いならば袋の中に白い球を $\delta + 1$ 個戻す(袋の中の白い球は δ 個増える)。

このとき、 n 回中 k 回赤い球が取り出される確率は次のように書ける:

$$P(k|n, \alpha, \beta, \delta) = \binom{n}{k} \frac{\alpha(\alpha+\delta) \cdots (\alpha+(k-1)\delta) \cdot \beta(\beta+\delta) \cdots (\beta+(n-k-1)\delta)}{(\alpha+\beta)(\alpha+\beta+\delta) \cdots (\alpha+\beta+(n-1)\delta)}.$$

注意: $\delta \neq 0$ ならば分子分母を $|\delta|^k |\delta|^{n-k} = |\delta|^n$ で割ることによって形式的に δ の部分を ± 1 にできる。だから、 $\delta = -1, 0, 1$ の場合が基本的であると考えられる。

袋に取り出した玉を戻さない非復元抽出の場合 ($\delta = -1$): n 回中 k 回赤い球が取り出される確率の分布は超幾何分布 $\text{Hypergeometric}(\alpha, \beta, n)$ になる:

$$P(k|n, \alpha, \beta, -1) = \binom{n}{k} \frac{\alpha(\alpha-1) \cdots (\alpha-(k-1)) \cdot \beta(\beta-1) \cdots (\beta-(n-k-1))}{(\alpha+\beta)(\alpha+\beta-1) \cdots (\alpha+\beta-(n-1))}$$

$$= \binom{\alpha}{k} \binom{\beta}{n-k} / \binom{\alpha+\beta}{n}.$$

これを超幾何分布 $\text{Hypergeometric}(\alpha, \beta, n)$ の定義だと考えてよい。

袋に取り出した玉をそのまま玉を戻す復元抽出の場合 ($\delta = 0$): n 回中 k 回赤い球が取り出される確率の分布は二項分布 $\text{Binomial}(n, \alpha/(\alpha+\beta))$ になる:

$$P(k|n, \alpha, \beta, 0) = \binom{n}{k} \frac{\alpha^k \beta^{n-k}}{(\alpha+\beta)^n} = \binom{n}{k} \left(\frac{\alpha}{\alpha+\beta} \right)^k \left(1 - \frac{\alpha}{\alpha+\beta} \right)^{n-k}.$$

袋に取り出した玉と同じ色の玉を2個戻して袋の中のその色の玉が1個増えるようにした場合 ($\delta = 1$): n 回中 k 回赤い球が取り出される確率の分布はベータ二項分布 $\text{BetaBinomial}(n, \alpha, \beta)$ になる:

$$P(k|n, \alpha, \beta, 1) = \binom{n}{k} \frac{\alpha(\alpha+1) \cdots (\alpha+(k-1)) \cdot \beta(\beta+1) \cdots (\beta+(n-k-1))}{(\alpha+\beta)(\alpha+\beta+1) \cdots (\alpha+\beta+(n-1))}$$

$$= \binom{n}{k} \frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha+\beta+n)} \frac{\Gamma(\alpha+k)}{\Gamma(\alpha)} \frac{\Gamma(\beta+n-k)}{\Gamma(\beta)}$$

$$= \binom{n}{k} \frac{B(\alpha+k, \beta+n-k)}{B(\alpha, \beta)}.$$

袋の中の赤い球の個数と白い球の個数の初期値である α, β が n よりも非常に大きい場合には上の3つの場合の確率はほぼ同じになる。

ベータ二項分布の場合には、赤い球を引けた人はその次に赤い球を引く確率が少し上がる。この意味でベータ二項分布は "[The rich get richer and the poor get poorer.](https://www.google.com/search?q=the+rich+get+richer+and+the+poor+get+poorer) (<https://www.google.com/search?q=the+rich+get+richer+and+the+poor+get+poorer>)" (「金持ちはより金持ちに、貧乏人はより貧乏に」) という状況のモデル化になっていることがわかる。

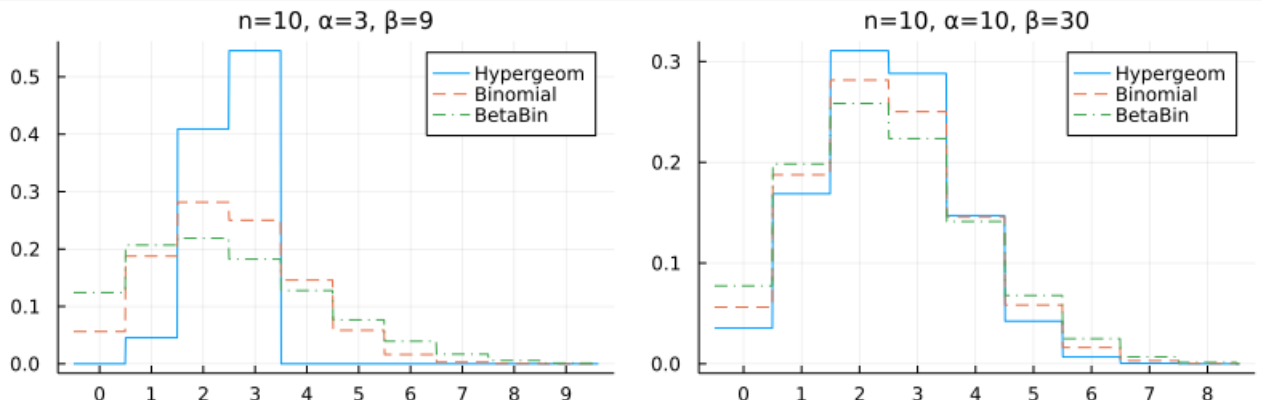
```
In [65]: 1 function plot_hg_bin_bb(n, α, β; xtick=0:n)
2         @assert n < α + β "n must be less than α + β."
3         hg = Hypergeometric(α, β, n)
4         bin = Binomial(n, α/(α+β))
5         bb = BetaBinomial(n, α, β)
6         μ, σ = mean(bb), std(bb)
7         x = range(max(-0.5, μ-4σ), min(n+0.5, μ+4σ), 1000)
8         plot(; xtick)
9         plot!(x, x → pdf(hg, round(Int, x)); label="Hypergeom")
10        plot!(x, x → pdf(bin, round(Int, x)); label="Binomial", ls=:dash)
11        plot!(x, x → pdf(bb, round(Int, x)); label="BetaBin", ls=:dashdot)
12        title!("n=$n, α=$α, β=$β")
13    end
```

Out[65]: plot_hg_bin_bb (generic function with 1 method)

以下は $\alpha/(\alpha+\beta) = 1/4$ を保ったまま α, β を大きくして行った場合の超幾何分布, 二項分布, ベータ二項分布の比較である。 α, β を大きくして行くと, 3つの分布は一致して行く。

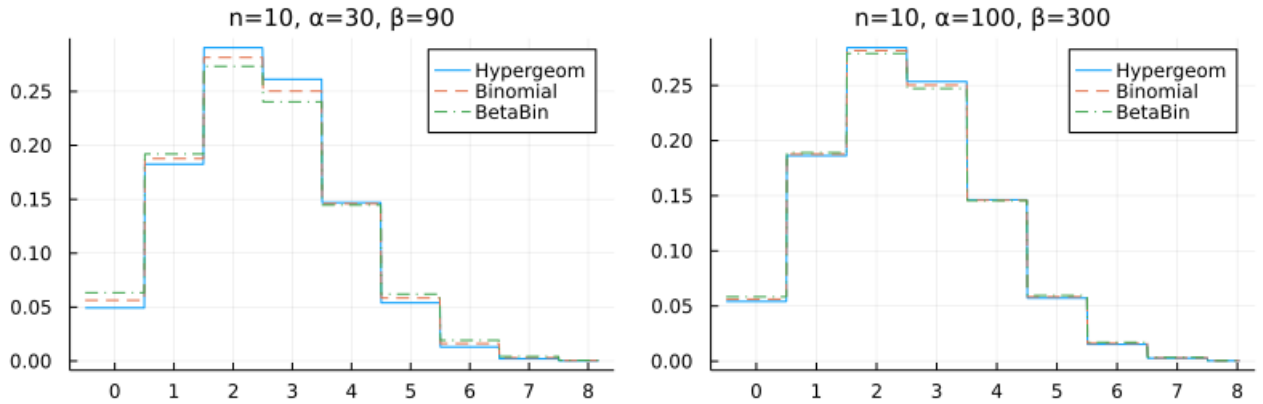
```
In [66]: 1 plot(plot_hg_bin_bb(10, 3, 9), plot_hg_bin_bb(10, 10, 30); size=(800, 250))
```

Out[66]:



```
In [67]: 1 plot(plot_hg_bin_bb(10, 30, 90), plot_hg_bin_bb(10, 100, 300); size=(800, 250))
```

Out[67]:



7.7 問題: 超幾何分布, 二項分布, ベータ二項分布の期待値と分散の統一的な公式

前節の確率質量関数 $P(k|n, \alpha, \beta, \delta)$ を持つ確率変数 K について次が成立することを示せ:

$$E[K] = \frac{n\alpha}{\alpha + \beta}, \quad \text{var}(K) = \frac{\alpha\beta n(\alpha + \beta + n\delta)}{(\alpha + \beta)^2(\alpha + \beta + \delta)}.$$

注意: 特にこれの $\delta = -1, \alpha = s, \beta = f$ の場合より, 超幾何分布 $\text{Hypergeometric}(s, f, n)$ の期待値と分散が次のようになることがわかる: 確率変数 $K \sim \text{Hypergeometric}(s, f, n)$ について

$$E[K] = \frac{ns}{s + f}, \quad \text{var}(K) = \frac{sf n(s + f - n)}{(s + f)^2(s + f - 1)}.$$

解答例: 問題を一般化して, 前節の確率質量関数

$$P(k|n, \alpha, \beta, \delta) = \binom{n}{k} \frac{\alpha(\alpha + \delta) \cdots (\alpha + (k-1)\delta) \cdot \beta(\beta + \delta) \cdots (\beta + (n-k-1)\delta)}{(\alpha + \beta)(\alpha + \beta + \delta) \cdots (\alpha + \beta + (n-1)\delta)}.$$

を持つ確率変数 K について考える. このとき,

$$\begin{aligned} & E[K(K-1) \cdots (K-m+1)] \\ &= \sum_k k(k-1) \cdots (k-m+1) \binom{n}{k} \frac{\alpha(\alpha + \delta) \cdots (\alpha + (k-1)\delta) \cdot \beta(\beta + \delta) \cdots (\beta + (n-k-1)\delta)}{(\alpha + \beta)(\alpha + \beta + \delta) \cdots (\alpha + \beta + (n-1)\delta)} \\ &= n(n-1) \cdots (n-m+1) \frac{\alpha(\alpha + \delta) \cdots (\alpha + (m-1)\delta)}{(\alpha + \beta)(\alpha + \beta + \delta) \cdots (\alpha + \beta + (m-1)\delta)} \\ &\quad \times \underbrace{\sum_k \binom{n-m}{k-m} \frac{(\alpha + m\delta)(\alpha + (m+1)\delta) \cdots (\alpha + (k-1)\delta) \cdot \beta(\beta + \delta) \cdots (\beta + (n-k-1)\delta)}{(\alpha + \beta + m)(\alpha + \beta + (m+1)\delta) \cdots (\alpha + \beta + (n-1)\delta)}}_{=\sum_k P(k|n-m, \alpha+m\delta, \beta)=1} \\ &= n(n-1) \cdots (n-m+1) \frac{\alpha(\alpha + \delta) \cdots (\alpha + (m-1)\delta)}{(\alpha + \beta)(\alpha + \beta + \delta) \cdots (\alpha + \beta + (m-1)\delta)}. \end{aligned}$$

例えば,

$$E[K] = \frac{n\alpha}{\alpha + \beta}, \quad E[K(K-1)] = \frac{n(n-1)\alpha(\alpha + \delta)}{(\alpha + \beta)(\alpha + \beta + \delta)}.$$

これを使って少し計算すると,

$$\text{var}(K) = E[K^2] - E[K]^2 = E[K(K-1)] + E[K] - E[K]^2 = \frac{\alpha\beta n(\alpha + \beta + n\delta)}{(\alpha + \beta)^2(\alpha + \beta + \delta)}$$

となることがわかる(以下のセルでのコンピュータによる代数計算も参照せよ).

解答終

```
In [68]: 1 @vars a b d n
2 var"E[K]" = n*a/(a+b)
3 var"E[K(K-1)]" = n*(n-1)*a*(a+d)/((a+b)*(a+b+d))
4 var"var(K)" = var"E[K(K-1)]" + var"E[K]" - var"E[K]"^2 ► factor
```

Out[68]: $\frac{abn(a+b+dn)}{(a+b)^2(a+b+d)}$

7.8 問題: ベータ二項分布の極限として負の二項分布が得られる

$\alpha, \theta > 0$ であるとし, ベータ二項分布 $\text{BetaBinomial}(L, \alpha, \beta)$ の確率質量関数

$$P(m|L, \alpha, \beta) = \binom{L}{m} \frac{B(\alpha + m, \beta + L - m)}{B(\alpha, \beta)} \quad (m = 0, 1, \dots, L)$$

は, $\beta = L/\theta$ において, $L \rightarrow \infty$ とすると,

$$P(m|L, \alpha, L/\theta) \rightarrow \binom{\alpha + m - 1}{m} \left(\frac{1}{1 + \theta} \right)^\alpha \left(1 - \frac{1}{1 + \theta} \right)^m$$

と負の二項分布 $\text{NegativeBinomial}(\alpha, 1/(1 + \theta))$ の確率質量関数に収束することを示せ.

解答例1: $n \rightarrow \infty$ で $n^\alpha B(\alpha, n + b) \rightarrow \Gamma(\alpha)$ となることを使うと, $L \rightarrow \infty$ のとき,

$$\begin{aligned} P(m|L, \alpha, L/\theta) &= \binom{L}{m} \frac{B(\alpha + m, L/\theta + L - m)}{B(\alpha, L/\theta)} \\ &= \frac{L(L-1) \cdots (L-m+1)}{m!} \frac{(L/\theta)^\alpha}{((1+\theta)/\theta)L^{\alpha+m}} \\ &\times \frac{(((1+\theta)/\theta)L)^{\alpha+m} B(\alpha + m, ((1+\theta)/\theta)L - m)}{(L/\theta)^\alpha B(\alpha, L/\theta)} \\ &= \underbrace{\frac{L(L-1) \cdots (L-m+1)}{L^m}}_{\rightarrow 1} \\ &\times \underbrace{\frac{(((1+\theta)/\theta)L)^{\alpha+m} B(\alpha + m, ((1+\theta)/\theta)L - m)}{m! (L/\theta)^\alpha B(\alpha, L/\theta)}}_{\rightarrow \Gamma(\alpha+m)/(m!\Gamma(\alpha))} \left(\frac{1}{1+\theta} \right)^\alpha \left(\frac{\theta}{1+\theta} \right)^m \\ &\rightarrow \frac{\Gamma(\alpha+m)}{m!\Gamma(\alpha)} \left(\frac{1}{1+\theta} \right)^\alpha \left(\frac{\theta}{1+\theta} \right)^m \\ &= \binom{\alpha + m - 1}{m} \left(\frac{1}{1+\theta} \right)^\alpha \left(1 - \frac{1}{1+\theta} \right)^m. \end{aligned}$$

解答終

解答例2: せっかくなので, 積を取って積分してベータ二項分布の確率質量関数を作る前の二項分布の確率質量関数とベータ分布の確率密度関数の連続時間極限との整合性も確認してみよう.

ベータ分布 $\text{Beta}(\alpha, \beta)$ の確率密度関数 $\times dp$ については,

$$\beta = L/\theta, \quad p = \lambda/L, \quad dp = d\lambda/L$$

とおくと, $L \rightarrow \infty$ のとき以下が成立している:

$$\begin{aligned} \frac{p^{\alpha-1}(1-p)^{\beta-1}}{B(\alpha, \beta)} dp &= \frac{(\lambda/L)^{\alpha-1}(1-\lambda/L)^{L/\theta-1}}{B(\alpha, L/\theta)} \frac{d\lambda}{L} \\ &= \frac{\lambda^{\alpha-1}(1-\lambda/L)^{L/\theta-1}}{L^\alpha B(\alpha, L/\theta)} d\lambda \\ &= \frac{1}{\theta^\alpha \underbrace{(L/\theta)^\alpha B(\alpha, L/\theta)}_{\rightarrow \Gamma(\alpha)}} \underbrace{\left(1 - \frac{\lambda}{L} \right)^{L/\theta-1}}_{\rightarrow \exp(-\lambda/\theta)} \lambda^{\alpha-1} d\lambda \\ &\rightarrow \frac{1}{\theta^\alpha \Gamma(\alpha)} e^{-\lambda/\theta} \lambda^{\alpha-1} d\lambda. \end{aligned}$$

$L \rightarrow \infty$ のとき, ベータ分布はこのように λ に関するガンマ分布 $\text{Gamma}(\alpha, \theta)$ に近づく. p は 0 と 1 のあいだを動くが, $\lambda = Lp$ なので $L \rightarrow \infty$ の極限で λ は正の実数全体を動くことになる.

二項分布 $\text{Binomial}(n, p)$ の確率質量関数については,

$$n = L, \quad p = \lambda/L, \quad k = m$$

とおくと, $L \rightarrow \infty$ のとき以下が成立している:

$$\begin{aligned} \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} &= \binom{L}{m} \left(\frac{\lambda}{L}\right)^m \left(1 - \frac{\lambda}{L}\right)^{L-m} \\ &= \underbrace{\frac{L(L-1)\cdots(L-m+1)}{L^m}}_{\rightarrow 1} \underbrace{\left(1 - \frac{\lambda}{L}\right)^{L-m}}_{\rightarrow \exp(-\lambda)} \frac{\lambda^m}{m!} \\ &\rightarrow e^{-\lambda} \frac{\lambda^m}{m!}. \end{aligned}$$

$L \rightarrow \infty$ のとき, 二項分布はこのように m に関するPoisson分布 $\text{Poisson}(\lambda)$ に近づく.

したがって, ベータ二項分布 $\text{Beta}(L, \alpha, L/\theta)$ の確率質量関数

$$P(m|L, \alpha, L/\theta) = \int_0^1 \binom{L}{m} p^m (1-p)^{L-m} \frac{p^{\alpha-1} (1-p)^{L/\theta-1}}{B(\alpha, L/\theta)} dp$$

について, $p = \lambda/L$ とおくことによって, $L \rightarrow \infty$ で以下が成立することがわかる:

$$\begin{aligned} P(m|L, \alpha, \beta) &\rightarrow \int_0^\infty e^{-\lambda} \frac{\lambda^m}{m!} \frac{e^{-\lambda/\theta} \lambda^{\alpha-1}}{\theta^\alpha \Gamma(\alpha)} d\lambda \\ &= \frac{1}{m! \theta^\alpha \Gamma(\alpha)} \int_0^\infty e^{-((1+\theta)/\theta)\lambda} \lambda^{\alpha+m-1} d\lambda \\ &= \frac{1}{m! \theta^\alpha \Gamma(\alpha)} \left(\frac{\theta}{1+\theta}\right)^{\alpha+m} \Gamma(\alpha+m) \\ &= \frac{\Gamma(\alpha+m)}{m! \Gamma(\alpha)} \left(\frac{1}{1+\theta}\right)^\alpha \left(\frac{\theta}{1+\theta}\right)^m \\ &= \binom{\alpha+m-1}{m} \left(\frac{1}{1+\theta}\right)^\alpha \left(1 - \frac{1}{1+\theta}\right)^m. \end{aligned}$$

$L \rightarrow \infty$ のとき, ベータ二項分布はこのように m に関する負の二項分布 $\text{NegativeBinomial}(\alpha, 1/(1+\theta))$ に近づく.

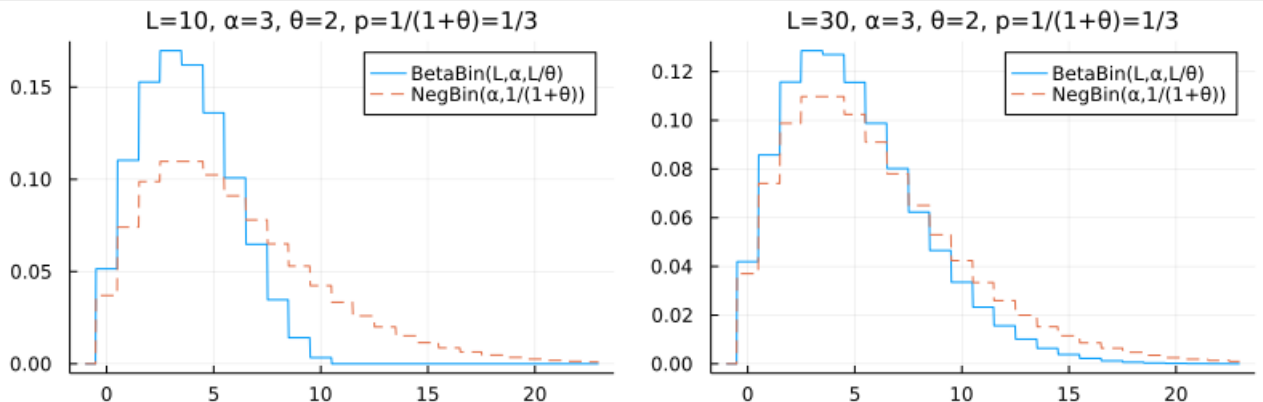
解答終

```
In [69]: 1 function plot_bbnb(L, α, θ; kwargs...)
2         bb = BetaBinomial(L, α, L/θ)
3         nb = NegativeBinomial(α, 1/(1+θ))
4         μ, σ = mean(nb), std(nb)
5         m = range(max(-1, μ-4σ), μ+4σ, 1000)
6         plot(m, m → pdf(bb, round(m)); label="BetaBin(L,α,L/θ)")
7         plot!(m, m → pdf(nb, round(m)); label="NegBin(α,1/(1+θ))", ls=:dash)
8         title!("L=$L, α=$α, θ=$θ, p=1/(1+θ)=1/$(1+θ)")
9         plot!(; kwargs...)
10      end
```

Out[69]: plot_bbnb (generic function with 1 method)

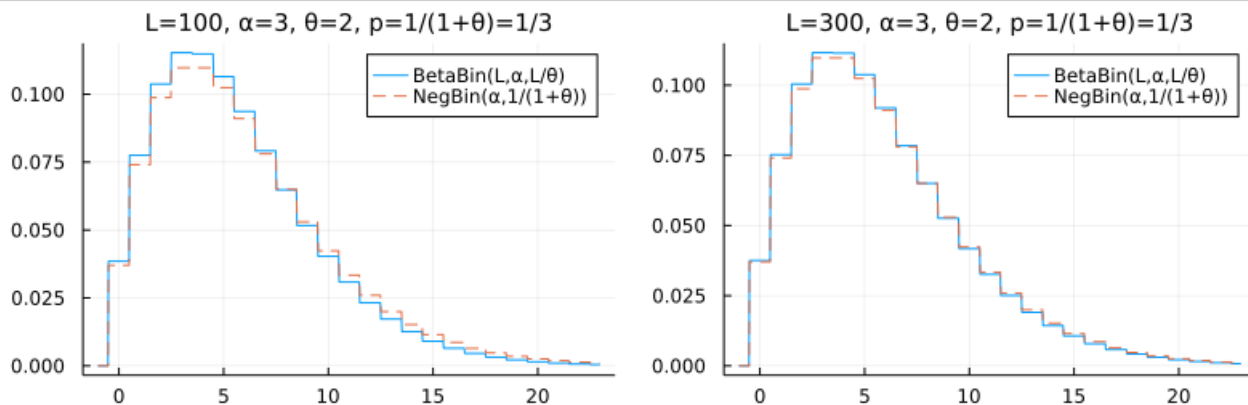
```
In [70]: 1 plot(plot_bbnb.((10, 30), 3, 2)...; size=(800, 250))
```

Out[70]:



```
In [71]: 1 plot(plot_bbnb.((100, 300), 3, 2)...; size=(800, 250))
```

Out[71]:



7.9 問題: 二項分布とベータ二項分布のモーメント母関数

(1) 二項分布のモーメント母関数: 次が成立することを示せ:

$$K \sim \text{Binomial}(n, p) \implies E[e^{tK}] = (1 - (1 - e^t)p)^n.$$

(2) ベータ二項分布のモーメント母関数が本質的にGaussの超幾何関数になっていることを示せ. すなわち, 次が成立することを示せ:

$$K \sim \text{BetaBonomial}(n, \alpha, \beta) \implies E[e^{tK}] = {}_2F_1(-n, \alpha; \alpha + \beta; 1 - e^t).$$

ここで, ${}_2F_1(a, b; c; z)$ はGaussの超幾何関数で次のように定義される:

$${}_2F_1(a, b; c; z) = \frac{1}{B(b, c-b)} \int_0^1 (1-zt)^{-a} t^{b-1} (1-t)^{c-b-1} dt, \quad (\text{Re } c > \text{Re } b > 0)$$

解答例: (1) $K \sim \text{Binomial}(n, p)$ のとき, 二項定理より,

$$E[e^{tK}] = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} e^{tk} p^k (1-p)^{n-k} = (e^t p + 1 - p)^n = (1 - (1 - e^t)p)^n.$$

(2) $K \sim \text{BetaBonomial}(n, \alpha, \beta)$ と仮定する. 負の二項分布の確率質量関数の

$$P(k|n, \alpha, \beta) = \int_0^1 \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \frac{p^{\alpha-1} (1-p)^{\beta-1}}{B(\alpha, \beta)} dp$$

という表示を使うと, (1)の計算より,

$$\begin{aligned} E[e^{tK}] &= \sum_{k=0}^n e^{tk} \int_0^1 \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \frac{p^{\alpha-1} (1-p)^{\beta-1}}{B(\alpha, \beta)} dp \\ &= \int_0^1 \left(\sum_{k=0}^n \binom{n}{k} e^{tk} p^k (1-p)^{n-k} \right) \frac{p^{\alpha-1} (1-p)^{\beta-1}}{B(\alpha, \beta)} dp \\ &= \int_0^1 (1 - (1 - e^t)p)^n \frac{p^{\alpha-1} (1-p)^{\beta-1}}{B(\alpha, \beta)} dp \\ &= \frac{1}{B(\alpha, \beta)} \int_0^1 (1 - (1 - e^t)p)^n p^{\alpha-1} (1-p)^{\beta-1} dp \\ &= {}_2F_1(-n, \alpha; \alpha + \beta; 1 - e^t). \end{aligned}$$

解答終

注意: 二項分布もベータ分布も統計学における最も基本的な確率分布である. それらを組み合わせて作ったベータ二項分布から, モーメント母関数の形式でGaussの超幾何関数の積分表示式が自然に出て来ることはちょっと面白い. 超幾何関数のような特殊関数は主に微分方程式との関連で自然に現れて来ることが多いのだが, この場合には微分方程式と全く無関係に超幾何関数が自然に出て来ている. 統計学によく出て来る特殊関数達に関する話題は「微分方程式抜きの特異関数論」というような趣がある.

文献: 超幾何関数から作られる確率分布については以下の文献を参照せよ:

- 清水良一. 一般超幾何分布. 統計数理研究所彙報, 第16巻, 第2号, 147-165, 1968-12. [[link \(https://ismrepo.ism.ac.jp/?action=pages_view_main&active_action=repository_view_main_item_detail&item_id=32361&item_no=1&page_id=13&block_id=](https://ismrepo.ism.ac.jp/?action=pages_view_main&active_action=repository_view_main_item_detail&item_id=32361&item_no=1&page_id=13&block_id=)

- Shibuya, Masaaki and Shimizu, Ryoichi. Classification of the Generalized Hypergeometric family of distributions. Keio Science and Technology Reports 34 (1), 1-38, 1981-09. [[Google Scholar \(https://scholar.google.co.jp/scholar?cluster=14585775532723000776\)](https://scholar.google.co.jp/scholar?cluster=14585775532723000776)]
- Shibuya, Masaaki and Shimizu, Ryoichi. The generalized hypergeometric family of distributions. Annals of the Institute of Statistical Mathematics, volume 33, pages 177–190 (1981). [[Google Scholar \(https://scholar.google.co.jp/scholar?cluster=5536931452160381057\)](https://scholar.google.co.jp/scholar?cluster=5536931452160381057)]



In []:

1