# 比率のP値函数達

- 黒木玄
- 2022-09-08
- nbviewer版 (https://nbviewer.org/github/genkuroki/public/blob/main/0036/P-value%20functions%20of%20proportions.ipynb)
- repository版 (https://github.com/genkuroki/public/blob/main/0036/P-value%20functions%20of%20proportions.ipynb)
- ダウンロードPDF (https://github.com/genkuroki/public/raw/main/0036/P-value%20functions%20of%20proportions.pdf)
- PDF版(repository) (https://github.com/genkuroki/public/blob/main/0036/P-value%20functions%20of%20proportions.pdf)

このノートでは A の確率を P(A) と表し、確率変数 X の函数 f(X) の期待値を E[f(X)] と表す.

予備知識: 二項分布, 正規分布, ベータ分布. 終わりの方ではベイズ統計.

# 目次

- 1 データと統計モデルの設定
- 2 P値函数と信頼区間の一般論
- ▼ 3 累積分布函数 cdf と分位点函数 quantile
  - 3.1 補累積分布函数 ccdf と補分位点函数 cquantile
- ▼4 WilsonのP値と信頼区間
  - 4.1 WilsonのP値
  - 4.2 Wilsonの信頼区間
  - 4.3 WilsonのP値と信頼区間の実装例
- ▼ 5 WaldのP値と信頼区間
  - 5.1 WaldのP値
  - 5.2 Waldの信頼区間
  - 5.3 WaldのP値と信頼区間の実装例
- ▼ 6 Clopper-PearsonのP値と信頼区間
  - 6.1 Clopper-PearsonのP値
  - 6.2 二項分布とベータ分布の関係
  - 6.3 Clopper-Pearsonの信頼区間
  - 6.4 Clopper-PearsonのP値と信頼区間の実装例
- ▼7 SterneのP値と信頼区間
  - 7.1 SterneのP値と信頼区間
  - 7.2 SterneのP値と信頼区間の実装例
  - 8 4種のP値函数と信頼区間を同時にプロット
- ▼ 9 ベイズ統計での信用区間に対応するP値函数
  - 9.1 二項分布モデルのHDI版信用区間
  - 9.2 HDI版信用区間に対応するP値函数
  - 9.3 HDI版の信用区間とそれに対応するベイズ版P値函数の実装例
  - 9.4 WilsonのP値函数とベイズ版P値函数のHDI版の比較
  - 9.5 ETI版の信用区間とそれに対応するP値函数
  - 9.6 ETI版の信用区間とそれに対応するベイズ版P値函数の実装例
  - 9.7 WilsonのP値函数とベイズ版P値函数のETI版の比較
  - 9.8 「主義の押し付け」をやめよう

```
In [1]:

1 using Distributions
2 using StatsPlots
default(fmt=:png, size=(500, 300),
4 titlefontsize=10, tickfontsize=6, guidefontsize=9)

6 # Sterneの信頼区間の定義で使用
7 using Roots
8 using StatsFuns: logit
9

10 # highest density interval (HDI) の構成で使用
11 using Optim
```

# 1 データと統計モデルの設定

当たりまたは外れの目が出るルーレットを n 回まわしたとき当たりが k 回出たと仮定する.

このとき  $\lceil n \mid$  回中当たりが  $k \mid$  回」をこのルーレットに関するデータと呼ぶ.

そのデータの確率的揺らぎのモデルとして、二項分布を考える。

すなわち、次の確率質量函数で定義される k に関する確率分布を考える:

$$P(k|n,p) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \quad (k = 0, 1, \dots, n).$$

ここで,  $0 \le p \le 1$  であり,  $\binom{n}{k}$  は次で定義される二項係数である:

$$\binom{n}{k} = \frac{n(n-1)\cdots(n-k+1)}{k!} = \frac{n!}{k!(n-k)!}.$$

## 2 P値函数と信頼区間の一般論

以下では具体的な数値  $p_0$  に関する仮説「当たりが出る確率は p である」と「n 回中当たりが k 回」というデータの **両立性** (compatibility)もしくは **整合性** (consistency)の指標の1つである(両側検定の) **P値** (P-value)を複数定義して比較してみる.

以下ではそのP値を pvalue( $k|n, p = p_0$ ) のように書くことにする.

データ  $\lceil n \rceil$  回中当たりが  $k \rceil$  が与えられたときに、パラメータ値  $p \rceil$  に p value  $(k \mid n, p = p_0)$  を対応させる函数

$$p \mapsto \text{pvalue}(k|n, p)$$

をデータ「n 回中当たりが k 回」に関する **P値函数** (P-value function)と呼ぶ.

P値函数のグラフは、与えられたデータとパラメータ値 p の両立性の様子の全体の視覚化になっている.

 $0 \le \alpha \le 1$  と仮定する.  $\alpha$  は **有意水準** (significance level)と呼ばれる.

データ  $\lceil n \rceil$  回中当たりが  $k \rceil$  回」のP値函数が与えられたとき、パラメータ p に関する **信頼度** (confidence level)  $1-\alpha$  の **信頼区間** (confidence interval)が次によって定義される:

$$confint(k|n, \alpha) = \{ p \mid pvalue(k|n, p) \ge \alpha \}.$$

すなわち、データ  $\lceil n \rceil$  回中当たりが  $k \rceil$  回」に関するパラメータ p の信頼度  $1-\alpha$  の信頼区間は、データの数値とパラメータ値 p の 両立性の指標であるP値が最初に決めておいた閾値  $\alpha$  以上になるような値  $p=p_0$  全体の集合である.

この集合が区間にならない場合には、この集合を含む最小の区間を信頼区間と定義することもある.

# 3 累積分布函数 cdf と分位点函数 quantile

確率分布 D に従う確率変数 X に対して,  $x \in \mathbb{R}$  の函数

$$cdf(D, x) = P(X < x)$$

を分布 D の **累積分布函数** (cumulative distribution function,  $\mathbf{cdf}$ )と呼ぶ.

例えば、試行回数 n、成功確率 p の二項分布 Binomial(n,p) の累積分布函数は次のように表される:

$$\operatorname{cdf}(\operatorname{Binomial}(n, p), x) = \sum_{k \le x} \binom{n}{k} p^k (1 - p)^{n - k}.$$

例えば、平均  $\mu$ 、標準偏差  $\sigma$  の正規分布  $Normal(\mu,\sigma)$  の累積分布函数は次のように表される:

$$\operatorname{cdf}(\operatorname{Normal}(\mu, \sigma), x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{t} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) dt.$$

もしも、累積分布函数  $p = \operatorname{cdf}(D, x)$  の逆函数が存在するならば、それを

$$x = \text{quantile}(D, p)$$

と表し, 分布 D の 分位点函数 (quantile function)と呼ぶ.

例えば、正規分布の累積分布函数は狭義単調増加函数なので、分位点函数  $x={
m quantile}({
m Normal}(\mu,\sigma),p)$  が定義される.

累積分布函数の逆函数が存在しない場合にも、その代わりとなる便利な函数が定義可能な場合には、それも分位点函数と呼び、同じ記号で表す.

```
In [2]:
          1 plot(x \rightarrow cdf(Binomial(10, 0.3), x), -1.5, 11.5; label="")
          Out[2]:
                               p = cdf(Binomial(10, 0.3), x)
            1.00
0.95
0.90
0.85
            0.80
            0.70
            0.60
            0.55
            0.45
            0.35
0.30
0.25
            0.20
            0.10
            0.05
                                                                 10
In [3]:
             plot(z \rightarrow cdf(Normal(0,1), z), -4.5, 4.5; label="")
             plot!(xtick=-10:10, ytick=0:0.1:1)
           3
             plot!(xguide="z", yguide="p")
           4 title!("p = cdf(Normal(0,1), z)")
Out[3]:
                                 p = cdf(Normal(0,1), z)
            1.0
            0.9
            0.8
            0.7
            0.6
          Q 0.5
            0.4
            0.3
            0.2
            0.1
            0.0
In [4]:
             plot(p \rightarrow quantile(Normal(0,1), p), 0, 1; label="")
             plot!(ylim=(-4.5, 4.5))
             plot!(ytick=-10:10, xtick=0:0.1:1)
           3
             plot!(yguide="z", xguide="p")
            title!("z = quantile(Normal(0,1), p)")
Out[4]:
                               z = quantile(Normal(0,1), p)
             4
             2
             0
            -1
```

1.0

0.7

0.8

0.9

0.4

0.5

0.6

0.3

0.2

-2

0.0

0.1

 $\operatorname{ccdf}(D,x)=1-\operatorname{cdf}(D,x)=P(X>x)$  を 補累積分布函数 (complementary cumulative distribution function,  $\operatorname{ccdf}$ ) と呼ぶ.

補累積分布函数は単調減少函数になる.

補累積分布函数  $p = \operatorname{ccdf}(D, x) = 1 - \operatorname{cdf}(D, x)$  の逆函数を

$$x = \text{cquantile}(D, p) = \text{quantile}(D, 1 - p)$$

と表し, 補分位点函数 (complementary quantile function)と呼ぶ.

補分位点函数も単調減少函数になる.

例えば,

cquantile(Normal(0, 1), 
$$0.05/2$$
) =  $1.95996398454 \dots \approx 1.96$ 

は非常に有名である。実践的にはこれの値が1.96にぴったり等しいとして扱って問題ない。

In [5]: 1 cquantile(Normal(0,1), 0.05/2)

Out[5]: 1.9599639845400592

## 4 WilsonのP値と信頼区間

WilsonのP値と信頼区間は二項分布の正規分布近似によって定義される.

### 4.1 WilsonのP値

k を二項分布 Binomial(n, p) に従う確率変数とするとき、

$$\hat{p} = \frac{k}{n}$$

とおくと, np と n(1-p) が十分に大きいならば, 中心極限定理より次の近似が成立している:

$$\frac{k - np}{\sqrt{np(1 - p)}} = \frac{\hat{p} - p}{\sqrt{p(1 - p)/n}} \sim \text{Normal}(0, 1), \text{ approximately.}$$

これを用いて、データ「n 回中当たりは k 回」に関する「当たりが出る確率は p である」という仮説の **WilsonのP値** を次のよう に定義する:

$$pvalue_{Wilson}(k|n, p) = 2ccdf\left(Normal(0, 1), \left| \frac{\hat{p} - p}{\sqrt{p(1 - p)/n}} \right| \right).$$

## 4.2 Wilsonの信頼区間

WilsonのP値に対応する信頼度  $1-\alpha$  の Wilsonの信頼区間

$$confint_{Wilson}(k|n, \alpha) = \{ p \mid pvalue_{Wilson}(k|n, p) \ge \alpha \}$$

がどうなるかを計算してみよう. これはP値函数から信頼区間がどのように得られるかを理解するために手頃な複雑さを持つ良い練習問題になっている.

 $z_{\alpha/2}$  を次のように定義する:

$$z_{\alpha/2} = \text{cquantile}(\text{Normal}(0, 1), \alpha/2).$$

例えば,  $\alpha=5\%$  のとき,  $z=z_{5\%/2}\approx 1.96$  になることは非常に有名である. このとき

$$p \in \operatorname{confint}_{\operatorname{Wilson}}(k|n,\alpha) \iff \operatorname{pvalue}_{\operatorname{Wilson}}(k|n,p) \geq \alpha$$

$$\iff \operatorname{2ccdf}\left(\operatorname{Normal}(0,1), \left|\frac{\hat{p}-p}{\sqrt{p(1-p)/n}}\right|\right) \geq \alpha$$

$$\iff \operatorname{ccdf}\left(\operatorname{Normal}(0,1), \left|\frac{\hat{p}-p}{\sqrt{p(1-p)/n}}\right|\right) \geq \frac{\alpha}{2}$$

$$\iff \left|\frac{\hat{p}-p}{\sqrt{p(1-p)/n}}\right| \leq \operatorname{cquantile}\left(\operatorname{Normal}(0,1), \frac{\alpha}{2}\right) = z_{\alpha/2}$$

$$\iff \frac{(p-\hat{p})^2}{p(1-p)/n} \leq z_{\alpha/2}^2$$

$$\iff (p-\hat{p})^2 \leq \frac{z_{\alpha/2}^2}{n} p(1-p)$$

$$\iff \left(1 + \frac{z_{\alpha/2}^2}{n}\right) p^2 - 2\left(\hat{p} + \frac{z_{\alpha/2}^2}{2n}\right) p + \hat{p}^2 \leq 0.$$

ゆえに,

$$a = 1 + \frac{z_{\alpha/2}^2}{n}, \quad b = \hat{p} + \frac{z_{\alpha/2}^2}{2n}, \quad c = \hat{p}^2$$

とおき,

$$p_{\pm} = \frac{b \pm \sqrt{b^2 - ac}}{a}$$

とおくと、Wilsonの信頼区間は次のように表される:

$$confint_{Wilson}(k|n,\alpha) = [p_-, p_+].$$

**注意**: f(p) を

$$f(p) = \left(1 + \frac{z_{\alpha/2}^2}{n}\right)p^2 - 2\left(\hat{p} + \frac{z_{\alpha/2}^2}{2n}\right)p + \hat{p}^2 = ap^2 - 2bp^2 + c$$

とおくと,

$$f(0) = \hat{p}^2 \ge 0$$
,  $f(1) = (1 - \hat{p})^2 \ge 0$ 

となるので、Wilsonの信頼区間は区間 [0,1] に自然に含まれることがわかる.

### 4.3 WilsonのP値と信頼区間の実装例

```
In [6]: 

1 function pvalue_wilson(k, n, p) \hat{p} = k/n se = \sqrt{(p*(1 - p)/n)} 2ccdf(Normal(0,1), abs(\hat{p} - p)/se) end 

6 function confint_wilson(k, n, \alpha) z = cquantile(Normal(0,1), <math>\alpha/2) \hat{p} = k/n a, b, c = 1 + z^2/n, \hat{p} + z^2/(2n), \hat{p}^2 sqrtD = \sqrt{(b^2 - a*c)} (b - sqrtD)/a, (b + sqrtD)/a end
```

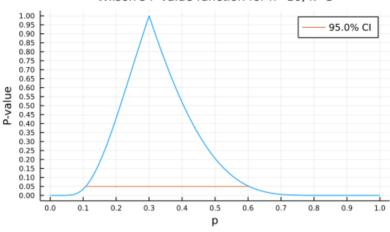
Out[6]: confint\_wilson (generic function with 1 method)

## 

 $(n, k, \alpha) = (10, 3, 0.05) = (10, 3, 0.05)$  $ci = confint_wilson(k, n, \alpha) > collect = [0.10779126740630075, 0.6032218525388553]$ 

### Out[7]:





このように信頼度  $1-\alpha$  の信頼区間はP値函数のグラフを高さ  $\alpha$  で切断して得られる区間になる.

上のグラフは次のように解釈される.

- データ  $\lceil n = 10 \rceil$  回中当たりが  $k = 3 \rceil$  回」と最も 相性がよい パラメータ値は p = 0.3 である(点推定).
- 0 近くの p や 0.8 以上の p は  $\lceil n = 10$  回中当たりが k = 3 回」というデータと **両立しない**.
- 閾値を  $\alpha = 5\%$  に定めておいて、P値が  $\alpha$  未満になったときに「パラメータ値とデータの数値が両立しなさすぎる」と判断することにしたとき、そのように判断されずにすむ p の範囲はおおよそ 10.8% から 60.3% になる(信頼区間).

これが 95% 信頼区間の穏健な(自信過剰にならずにすむ)解釈になる.

# 5 WaldのP値と信頼区間

WaldのP値と信頼区間は、WilsonのP値と信頼区間の構成における二項分布における  $\hat{p}=k/n$  の分散 p(1-p)/n をその推定値  $\hat{p}(1-\hat{p})/n$  で置き換えることによって定義される.

これによって、WaldのP値と信頼区間の誤差はWilsonのP値と信頼区間よりも大きくなってしまう.

その代わりに、Waldの信頼区間はWilsonの信頼区間と違って二次方程式を解くことなく容易に計算可能になる.

### 5.1 WaldのP値

データ  $\lceil n \rceil$  回中当たりは  $k \rceil$  に関する「当たりが出る確率は p である」という仮説の **WaldのP値** を次のように定義する:

$$pvalue_{Wald}(k|n, p) = 2ccdf\left(Normal(0, 1), \left| \frac{\hat{p} - p}{\sqrt{\hat{p}(1 - \hat{p})/n}} \right| \right).$$

### 5.2 Waldの信頼区間

がどうなるかを計算してみよう、以下のようにWilsonの信頼区間の場合よりもずっと簡単になる.

$$\begin{split} p &\in \operatorname{confint}_{\operatorname{Wald}}(k|n,\alpha) \iff \operatorname{pvalue}_{\operatorname{Wald}}(k|n,p) \geq \alpha \\ &\iff \operatorname{2ccdf}\left(\operatorname{Normal}(0,1), \left|\frac{\hat{p}-p}{\sqrt{\hat{p}(1-\hat{p})/n}}\right|\right) \geq \alpha \\ &\iff \operatorname{ccdf}\left(\operatorname{Normal}(0,1), \left|\frac{\hat{p}-p}{\sqrt{\hat{p}(1-\hat{p})/n}}\right|\right) \geq \frac{\alpha}{2} \\ &\iff \left|\frac{\hat{p}-p}{\sqrt{\hat{p}(1-\hat{p})/n}}\right| \leq \operatorname{cquantile}\left(\operatorname{Normal}(0,1), \frac{\alpha}{2}\right) = z_{\alpha/2} \\ &\iff \hat{p}-z_{\alpha/2}\sqrt{\frac{p(1-p)}{n}} \leq p \leq \hat{p}+z_{\alpha/2}\sqrt{\frac{p(1-p)}{n}}. \end{split}$$

すなわち.

$$\operatorname{confint}_{\operatorname{Wald}}(k|n,\alpha) = \left[\hat{p} - z_{\alpha/2}\sqrt{\frac{p(1-p)}{n}}, \ \hat{p} + z_{\alpha/2}\sqrt{\frac{p(1-p)}{n}}\right].$$

Waldの信頼区間は区間 [0,1] をはみ出すこともある.

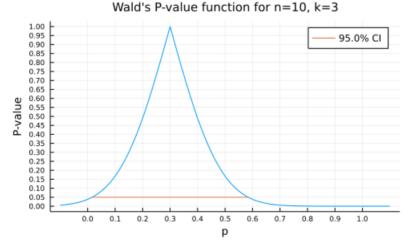
## 5.3 WaldのP値と信頼区間の実装例

```
In [8]:
            function pvalue_wald(k, n, p)
                     \hat{p} = k/n
            3
                     sehat = \sqrt{(\hat{p}*(1 - \hat{p})/n)}
            4
                     2ccdf(Normal(0,1), abs(\hat{p} - p)/sehat)
                function confint_wald(k, n, \alpha)
                     z = cquantile(Normal(0,1), \alpha/2)
                     \hat{p} = k/n
            9
           10
                     sehat = \sqrt{(\hat{p}*(1 - \hat{p})/n)}
                     p̂ - z*sehat, p̂ + z*sehat
           11
           12
              end
```

Out[8]: confint\_wald (generic function with 1 method)

 $(n, k, \alpha) = (10, 3, 0.05) = (10, 3, 0.05)$  $ci = confint_wald(k, n, \alpha) \triangleright collect = [0.0159742349106739, 0.5840257650893261]$ 

Out[9]:



WaldのP値函数とそれに付随する信頼区間はこのように誤差が大きくなってしまうものだが、信頼区間の計算が簡単になるという利点がある。

np と n(1-p) が非常に大きければ、Waldの信頼区間はWilsonの信頼区間とほぼぴったり一致するようになり、二次方程式を解いてWilsonの信頼区間を求めるメリットはなくなる。

コンピュータで自動的に計算するならば、Wilsonの信頼区間の方を計算するべきだが、暗算でどんぶり勘定したい場合にはWaldの信頼区間の方が便利である。

このように統計学的道具にはそれぞれ異なる利点と欠点があり、適材適所で使い分けるのがよい.

# 6 Clopper-PearsonのP値と信頼区間

二項分布における確率を正規分布で近似せずに正確に求めることによって定義されるP値と信頼区間の一種がClopper-PearsonのP値と信頼区間である.

## 6.1 Clopper-PearsonのP値

データ  $\lceil n \rceil$  回中当たりは  $k \rceil$  回」に関する「当たりが出る確率は  $p \rceil$  である」という仮説の  $\mathbf{Clopper-Pearson}$  を次のように定義する:

$$\operatorname{pvalue}_{\operatorname{CP}}(k|n,p) = \min \left( \begin{array}{c} 1 \\ 2\operatorname{cdf}(\operatorname{Binomial}(n,p),k) \\ 2\operatorname{ccdf}(\operatorname{Binomial}(n,p),k-1) \end{array} \right).$$

ここで、 $\operatorname{cdf}(\operatorname{Binomial}(n,p),k)$  と  $\operatorname{ccdf}(\operatorname{Binomial}(n,p),k-1)$  はそれぞれ、二項分布において k 以下になる確率と k 以下になる確率なので、この定義はおおよそ「片側検定のP値の2倍」になっている。その定義のままだと 1 より大きくなる場合があるので、1 以下になるようにしてある。

## 6.2 二項分布とベータ分布の関係

Clopper-PearsonのP値に対応する信頼度  $1-\alpha$  のClopper-Pearsonの信頼区間を計算するためには、二項分布とベータ分布の素晴らしい関係が必要になる。次が成立している:

$$\operatorname{cdf}(\operatorname{Binomial}(n, p), k) = \operatorname{ccdf}(\operatorname{Beta}(k + 1, n - k), p) \quad (0 \le k < n),$$
  
  $\operatorname{ccdf}(\operatorname{Binomial}(n, p), k - 1) = \operatorname{cdf}(\operatorname{Beta}(k, n - k + 1), p) \quad (0 < k \le n).$ 

前者は後者でkをk+1に置き換えれば得られるので,後者のみを示そう.

後者は具体的には次が成立するということを意味している:

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

両辺の p=0 での値は 0 になる.

ゆえに両辺のpに関する導函数が等しいことを示せば、両辺が等しいことがわかる.

左辺を p で微分すると以下のようになる:

$$\frac{\partial}{\partial p} \sum_{i \ge k} \binom{n}{i} p^{i} (1-p)^{n-i} = \sum_{i \ge k} \binom{n}{i} i p^{i-1} (1-p)^{n-i} - \sum_{i \ge k} \binom{n}{i} (n-i) p^{i-1} (1-p)^{n-i-1} \\
= \sum_{i \ge k} \frac{n!}{(i-1)!(n-i)!} p^{i-1} (1-p)^{n-i} - \sum_{i \ge k} \frac{n!}{i!(n-i-1)!} p^{i-1} (1-p)^{n-i-1} \\
= \sum_{i \ge k} \frac{n!}{(i-1)!(n-i)!} p^{i-1} (1-p)^{n-i} - \sum_{i \ge k+1} \frac{n!}{(i-1)!(n-i)!} p^{i-1} (1-p)^{n-i-1} \\
= \frac{n!}{(k-1)!(n-k)!} p^{k-1} (1-p)^{n-k}$$

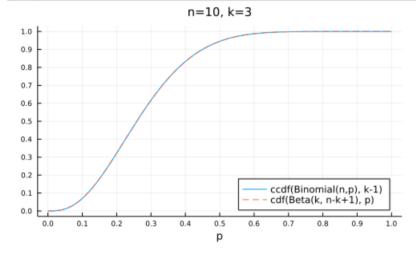
右辺を p で微分すると

$$\begin{split} \frac{1}{B(k,n-k+1)} \frac{\partial}{\partial p} \int_0^p t^{k-1} (1-t)^{n-k} \, dt &= \frac{1}{B(k,n-k+1)} p^{k-1} (1-p)^{n-k} \\ &= \frac{\Gamma(k+(n-k+1)}{\Gamma(k)\Gamma(n-k+1)} p^{k-1} (1-p)^{n-k} \\ &= \frac{n!}{(k-1)!(n-k)!} p^{k-1} (1-p)^{n-k}. \end{split}$$

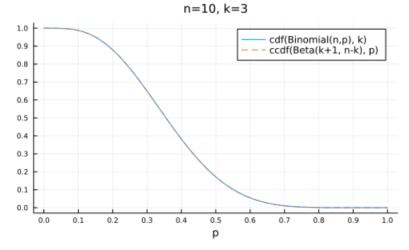
これで左辺と右辺の導函数が等しいことが証明された.

注意: 二項分布の累積分布函数と補累積分布函数は素朴に和で実装するよりも, 上の公式を用いて, ベータ分布の補累積分布函数と 累積分布函数で計算するようにした方が効率がよい. ベータ分布の累積分布函数は regularized incomplete Beta function としてコンピュータの基本特殊函数ライブラリで効率的に実装されている.

Out[10]:



Out[11]:



## 6.3 Clopper-Pearsonの信頼区間

```
\operatorname{confint}_{\operatorname{CP}}(k|n, \alpha) = \{ p \mid \operatorname{pvalue}_{\operatorname{CP}}(k|n, p) \ge \alpha \}
```

がどうなるかを計算してみよう.

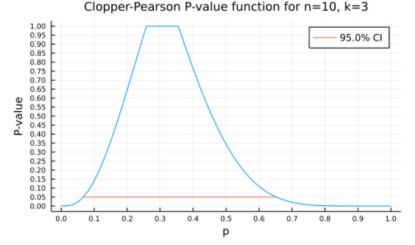
```
p \in \operatorname{confint}_{\operatorname{CP}}(k|n,\alpha)
\iff \operatorname{pvalue}_{\operatorname{CP}}(k|n,p) \geq \alpha
\iff \operatorname{cdf}(\operatorname{Binomial}(n,p),k) \geq \alpha/2 \text{ and } \operatorname{ccdf}(\operatorname{Binomial}(n,p),k-1) \geq \alpha/2
\iff \operatorname{ccdf}(\operatorname{Beta}(k+1,n-k),p) \geq \alpha/2 \text{ and } \operatorname{cdf}(\operatorname{Beta}(k,n-k+1),p) \geq \alpha/2
\iff p \leq \operatorname{cquantile}(\operatorname{Beta}(k+1,n-k),\alpha/2) \text{ and } p \geq \operatorname{quantile}(\operatorname{Beta}(k,n-k+1),\alpha/2),
ゆえに
p_L = \operatorname{quantile}(\operatorname{Beta}(k,n-k+1),\alpha/2), \quad p_U = \operatorname{cquantile}(\operatorname{Beta}(k+1,n-k),\alpha/2)
とおくと,
\operatorname{confint}_{\operatorname{CP}}(k|n,\alpha) = [p_L,p_U].
```

## 6.4 Clopper-PearsonのP値と信頼区間の実装例

Out[12]: confint\_cp (generic function with 1 method)

 $(n, k, \alpha) = (10, 3, 0.05) = (10, 3, 0.05)$  $ci = confint_cp(k, n, \alpha) \triangleright collect = [0.06673951117773438, 0.6524528500599971]$ 

Out[13]:



Clopper-Pearsonの信頼区間は小さめのnについては過剰に保守的になることが多い.

しかし、上のコードを見れば分かるように、実装は極めてシンプルである.

そして、 さらにデータが二項分布 Binomial(n,p) に従ってランダムに生成されているとき、  $P値が \alpha$  以下になる確率が確実に  $\alpha$  以下になってくれるという利点もある.

## 7 SterneのP値と信頼区間

SterneのP値と信頼区間も、二項分布における確率を正規分布で近似せずに正確に求めることによって定義される。Sterneの信頼区間の方がClopper-Pearsonの信頼区間よりも概ね狭くなってくれるという利点があるが、Clopper-Pearsonの信頼区間の場合と違ってシンプルな公式がないので、実装はかなり面倒になる。

## 7.1 SterneのP値と信頼区間

データ  $\lceil n \rceil$  回中当たりは  $k \rceil$  に関する「当たりが出る確率は p である」という仮説の Sterne を次のように定義する:

$$\operatorname{pvalue}_{\operatorname{Sterne}}(k|n,p) = \sum_{P(i|n,p) \leq P(k|n,p)} P(i|n,p).$$

ここで,

$$P(i|n,p) = \binom{n}{i} p^i (1-p)^{n-i} \quad (i=0,1,\ldots,n).$$

SterneのP値は二項分布 Binomial(n,p) 内でデータの数値よりも生じる確率が低い値の確率の総和になる.

これに対応するSterneの信頼区間は

$$confint_{Sterne}(k|n, \alpha) = \{ p \mid pvalue_{Sterne}(k|n, p) \ge \alpha \}$$

であるが、この定義のままだと区間にならない場合があるので、実装時にはこの集合を含む最小の区間として実装することにする、

## 7.2 SterneのP値と信頼区間の実装例

効率的でない実装でよいならば、P値函数の定義は、

Out[14]: pvalue\_sterne\_naive (generic function with 1 method)

で十分だが、次のセルのように計算は非常に遅くなる.

2.947470 seconds 2.931515 seconds 2.997767 seconds

Out[15]: 5.354898851685295e-12

```
In [16]: | 1 | x \leq y = x < y | | x \approx y
           3 - pdf_{e(x, (dist, y))} = pdf(dist, x) \lesssim y
             function _search_boundary(f, x0, Δx, param)
                  x = x0
           7
                  if f(x, param)
           8
                      while f(x - \Delta x, param) x -= \Delta x end
           9
                  else
          10
                      x += \Delta x
          11
                      while !f(x, param) x += \Delta x end
          12
                  end
          13
                  Х
          14 end
          15
          16 function pvalue_sterne(dist::DiscreteUnivariateDistribution, x)
          17
                  Px = pdf(dist, x)
          18
                  Px == 0 && return Px
          19
                  Px == 1 && return Px
          20
                  m = mode(dist)
          21
                  Px \approx pdf(dist, m) \&\& return one(Px)
          22
                  if x < m
          23
                      y = _search_boundary(_pdf_le, 2m - x, 1, (dist, Px))
          24
                      cdf(dist, x) + ccdf(dist, y-1)
          25
                  else \# x > m
          26
                      y = \_search\_boundary(\_pdf\_le, 2m - x, -1, (dist, Px))
          27
                      cdf(dist, y) + ccdf(dist, x-1)
          28
                  end
          29 end
          30
          31
              function pvalue_sterne(k, n, p)
          32
                  pvalue_sterne(Binomial(n, p), k)
          33
          34
          35 function confint_sterne(k, n, α)
          36
                  a, b = confint_cp(k, n, \alpha/10)
                  ps = find_zeros(a-\sqrt{eps}(), b+\sqrt{eps}()) do p
          37
          38
                      logit(0 
          39
          40
                  first(ps), last(ps)
Out[16]: confint_sterne (generic function with 1 method)
In [17]:
           1 @time pvalue_sterne(3*10^6, 10*10^6, 0.301)
           2 @time pvalue_sterne(3*10^6, 10*10^6, 0.301)
3 @time pvalue_sterne(3*10^6, 10*10^6, 0.301)
            0.000042 seconds (8 allocations: 1.875 KiB)
            0.000009 seconds (8 allocations: 1.875 KiB)
            0.000009 seconds (8 allocations: 1.875 KiB)
Out[17]: 5.354898860502031e-12
           1 @time confint_sterne(3*10^6, 10*10^6, 0.001)
In [18]:
           2 @time confint_sterne(3*10^6, 10*10^6, 0.001)
           3 @time confint_sterne(3*10^6, 10*10^6, 0.001)
            0.143188 seconds (51.68 k allocations: 3.764 MiB, 98.08% compilation time)
            0.002847 seconds (11.48 k allocations: 2.402 MiB)
            0.002846 seconds (11.48 k allocations: 2.402 MiB)
```

Out[18]: (0.2995232976841354, 0.30047704792862706)

```
In [19]: 
    1 @show n, k, \alpha = 10, 3, 0.05
    2 @show ci = confint_sterne(k, n, \alpha) \triangleright collect
    3
    4 P_Sterne = plot(p \rightarrow pvalue_sterne(k, n, p), 0, 1; label="")
    5 plot!(xguide="p", yguide="p-value")
    6 plot!(xtick=0:0.1:1, ytick=0:0.05:1)
    7 plot!(ci, fill(\alpha,2); label="$(100(1-\alpha))% CI")
    8 title!("Sterne's P-value function for n=$n, k=$k")

(n, k, \alpha) = (10, 3, 0.05) = (10, 3, 0.05)
    ci = confint_sterne(k, n, \alpha) \triangleright collect = [0.0872644339141502, 0.6194106589132863]

Out[19]: Sterne's P-value function for n=10, k=3

Out[19]: Out[19]: Sterne's P-value function for n=10, k=3
```

# 8 4種のP値函数と信頼区間を同時にプロット

0.0

0.1

0.2

0.3

0.4

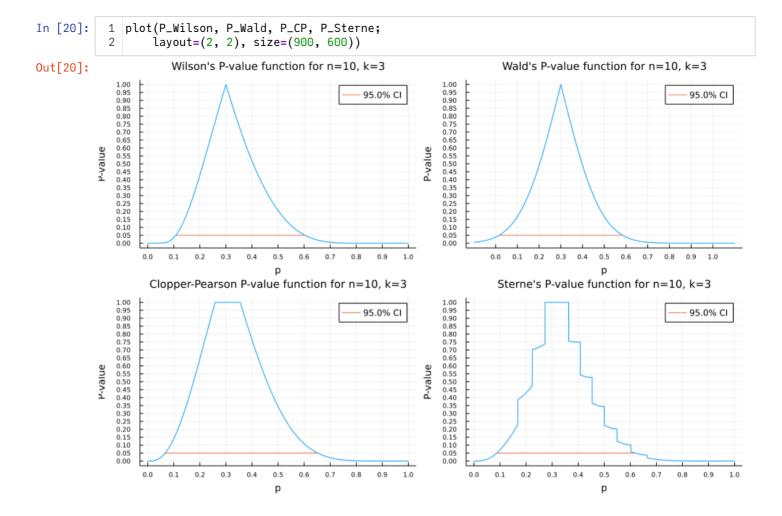
0.5

0.6

0.7

0.8

1.0



## 9 ベイズ統計での信用区間に対応するP値函数

P値函数と区間推定の表裏一体性については、私のツイログの検索を参照せよ:

• <u>P値信頼区間表裏一体 (https://twilog.org/genkuroki/search?</u> word=P%E5%80%A4%20%E4%BF%A1%E9%A0%BC%E5%8C%BA%E9%96%93%20%E8%A1%A8%E8%A3%8F%E4%B8%

ゆえに、P値函数と区間推定の表裏一体性より、ベイズ統計の方法を使っても、P値函数を構成することができる.

ベイズ版のP値函数と通常のP値函数を比較したい.

## 9.1 二項分布モデルのHDI版信用区間

簡単のため共役事前分布の場合のみを扱おう.

二項分布モデルのベイズ統計では以下の手続きでパラメータ p の事後分布が得られる.

- (1) パラメータ p の事前分布 prior = Beta(a, b) (a, b > 0)を任意に用意する.
- (2)  $\lceil n \rceil$  回中当たりが  $k \rceil$  回」の型のデータを取得する.
- (3) パラメータ p の事後分布 posterior = Beta(k + a, n k + b) が得られる.

この手続きの中身については任意のベイズ統計に関する教科書を参照せよ.

このとき、パラメータ p に関する  $100(1-\alpha)\%$  信用区間が次のように定義される.

(4) 事後分布を

4

[0,1] に含まれる区間  $[p_I,p_{II}]$  で事後分布で測ったその区間に含まれる確率が

$$\operatorname{cdf}(\operatorname{posterior}, p_U) - \operatorname{cdf}(\operatorname{posterior}, p_L) = 1 - \alpha$$

となるものの中で長さ  $p_U-p_L$  が最小のものを highest density interval (HDI)として定義された信用度  $1-\alpha$  の **信用区間** と呼び、次のように表す:

$$\operatorname{credint}_{HDI}(k|n, p, a, b) = [p_L, p_U].$$

ベータ分布の確率密度函数を

$$pdf(Beta(a, b), t) = \frac{1}{B(a, b)} t^{a-1} (1 - t)^{b-1}$$

と書くと、 $HDI版信用区間[p_L, p_U]$ について、

$$pdf(Beta(k + a, n - k + b), p_L) = pdf(Beta(k + a, n - k + b), p_U)$$

が成立しており、この条件と上の確率に関する条件でHDI版信用区間は一意に特徴付けられる.

注意: 実際の実装では.

$$p_L = \text{quantile}(\text{posterior}, t), \quad p_U = \text{quantile}(\text{posterior}, t + (1 - \alpha))$$

のあいだの長さ,

$$f(t) = p_U - p_L = \text{quantile}(\text{posterior}, t + (1 - \alpha)) - \text{quantile}(\text{posterior}, t)$$

を最小化する t を求め、それに対応する区間  $[p_L, p_U]$  としてHDI版信用区間を計算する.

### 9.2 HDI版信用区間に対応するP値函数

HDI版信用区間に対応するP値函数  $pvalue_{HDI}(k|n,p,a,b)$  は以下のように定義される.

与えられた値pに対して,tに関する方程式

$$pdf(Beta(k+a, n-k+b), t) = pdf(Beta(k+a, n-k+b), p)$$

の2つの解を  $p_L \leq p_U$  と書き,

$$pvalue_{HDI}(k|n, p, a, b) = cdf(Beta(k + a, n - k + b), p_L) + ccdf(Beta(k + a, n - k + b), p_U).$$

これを, ベイズ版P値函数 (Bayesian P-value function)のHDI版と呼ぶ.

## 9.3 HDI版の信用区間とそれに対応するベイズ版P値函数の実装例

```
1 function hdi(dist::ContinuousUnivariateDistribution, \alpha = 0.05; alg = Brent())
In [21]:
                   f(p) = quantile(dist, p + (1 - \alpha)) - quantile(dist, p)
           3
                   o = optimize(f, 0, \alpha, alg)
           4
                  p = o.minimizer
           5
                   quantile.(dist, (p, p + (1 - \alpha)))
           6
           7
           8
              function pvalue_hdi(dist::ContinuousUnivariateDistribution, x0; xlim = extrema(dist))
           9
                   p_0 = pdf(dist, x_0)
          10
                   m = mode(dist)
          11
                   f(x) = pdf(dist, x) - p_0
          12
                   if x_0 == m
          13
                       1.0
          14
                   elseif x_0 > m
                       x<sub>1</sub> = find_zero(f, (xlim[begin], m))
          15
          16
                       cdf(dist, x_1) + ccdf(dist, x_0)
          17
          18
                       x_1 = find\_zero(f, (m, xlim[end]))
          19
                       cdf(dist, x_0) + ccdf(dist, x_1)
          20
                   end
          21
              end
          22
          23
              function pvalue_hdi(k, n, p; a=1, b=1)
                   posterior = Beta(k+a, n-k+b)
          24
          25
                   pvalue_hdi(posterior, p)
          26
              end
          27
          28
              function credint_hdi(k, n, α; a=1, b=1)
          29
                   posterior = Beta(k+a, n-k+b)
          30
                   hdi(posterior, \alpha)
          31
              end
```

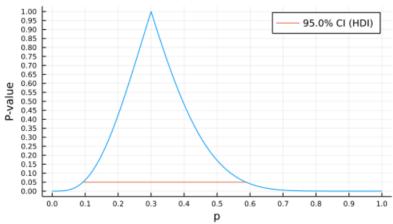
### Out[21]: credint\_hdi (generic function with 1 method)

```
In [22]:
            1
              Qshow n, k, \alpha = 10, 3, 0.05
               @show a, b = 1, 1
            3
               @show ci = credint_hdi(k, n, \alpha; a, b) \triangleright collect
             P_{HDI} = plot(p \rightarrow pvalue_hdi(k, n, p; a, b), 0, 1; label="")
              plot!(xguide="p", yguide="P-value")
               plot!(xtick=0:0.1:1, ytick=0:0.05:1)
               plot!(ci, fill(\alpha,2); label="$(100(1-\alpha))% CI (HDI)")
              title!("Bayesian P-value function for n=$n, k=$k, a=$a, b=$b")
```

```
(n, k, \alpha) = (10, 3, 0.05) = (10, 3, 0.05)
(a, b) = (1, 1) = (1, 1)
ci = credint_hdi(k, n, \alpha; a, b) \triangleright collect = [0.09337233320249291, 0.5879525593275807]
```

## Out[22]:

## Bayesian P-value function for n=10, k=3, a=1, b=1



このグラフも通常のP値函数と信頼区間と同様に,

• データの数値とパラメータ値の相性の良さ(両立性, compatibility)

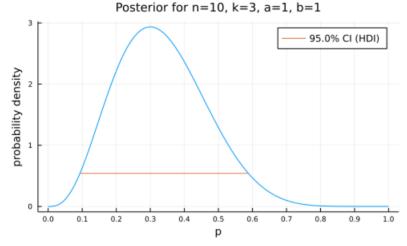
を表すグラフだと解釈可能である. この解釈は次の事後分布のグラフにもそのまま一般化される.

```
(n, k, \alpha) = (10, 3, 0.05) = (10, 3, 0.05)

(a, b) = (1, 1) = (1, 1)

ci = credint_hdi(k, n, \alpha; a, b) \triangleright collect = [0.09337233320249291, 0.5879525593275807]
```

Out[23]:



## 9.4 WilsonのP値函数とベイズ版P値函数のHDI版の比較

この節の目的は通常のP値函数とベイズ版P値函数を比較することであった.

以下では、通常のP値函数の代表例としてWilsonのP値函数を選び、ベイズ版P値函数の代表例として一様事前分布 Beta(1,1) から得られるベイズ版P値函数を選んで比較することにする.

上のベイズ版P値函数をWilsonのP値函数と重ねてプロットしてみよう.

```
In [24]: 1 @show n, k, \alpha = 10, 3, 0.05

2 @show a, b = 1, 1

4 plot(p \rightarrow pvalue_hdi(k, n, p; a, b), 0, 1; label="Bayesian (HDI)")

5 plot!(p \rightarrow pvalue_wilson(k, n, p); label="Wilson", ls=:dash)

6 plot!(xguide="p", yguide="P-value")

7 plot!(xtick=0:0.1:1, ytick=0:0.05:1)

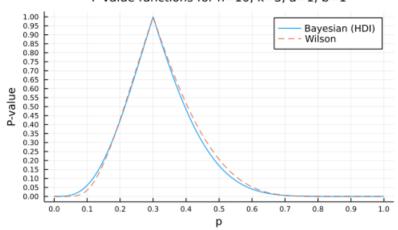
8 title!("P-value functions for n=$n, k=$k, a=$a, b=$b")

(n, k, \alpha) = (10, 3, 0.05) = (10, 3, 0.05)

(a, b) = (1, 1) = (1, 1)
```

## Out[24]:

### P-value functions for n=10, k=3, a=1, b=1



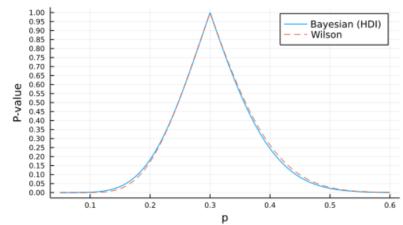
ベイズ版P値函数が通常のWilsonのP値函数によく一致していることが確認された.

n, k を大きくすると違いはさらに小さくなる.

```
In [25]:  \begin{array}{c} 1 \\ 2 \\ 3 \\ \end{array}  (Gshow a, b = 1, 1)  \begin{array}{c} 4 \\ 5 \\ \end{array}  plot(p \rightarrow pvalue_hdi(k, n, p; a, b), 0.05, 0.6; label="Bayesian (HDI)")  \begin{array}{c} 5 \\ 5 \\ \end{array}  plot!(p \rightarrow pvalue_wilson(k, n, p); label="Wilson", ls=:dash)  \begin{array}{c} 6 \\ \end{array}  plot!(xguide="p", yguide="P-value")  \begin{array}{c} 7 \\ \end{array}  plot!(xtick=0:0.1:1, ytick=0:0.05:1)  \begin{array}{c} 8 \\ \end{array}  title!("P-value functions for n=$n, k=$k, a=$a, b=$b")  \begin{array}{c} (n, k, \alpha) = (30, 9, 0.05) = (30, 9, 0.05) \\ (a, b) = (1, 1) = (1, 1) \end{array}
```

### Out[25]:

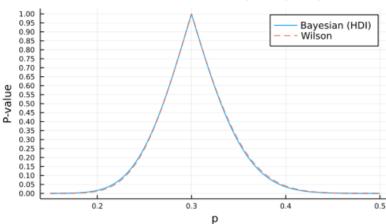
### P-value functions for n=30, k=9, a=1, b=1



 $(n, k, \alpha) = (100, 30, 0.05) = (100, 30, 0.05)$ (a, b) = (1, 1) = (1, 1)

### Out[26]:

P-value functions for n=100, k=30, a=1, b=1



n = 100, k = 30 ではほぼぴったり重なっている!

## 9.5 ETI版の信用区間とそれに対応するP値函数

HDI版ではなく, equal tailed interval (ETI)版の信用区間も定義しておこう:

 $credint_{ETI}(k|n, p, a, b) = [quantile(posterior, \alpha/2), cquantile(posterior, \alpha/2),]$ .

 $\angle \angle \angle C$ , posterior = Beta(k + a, n - k + b).

これに対応するP値函数は次になる:

$$pvalue_{ETI}(k|n, p, a, b) = min \begin{pmatrix} 1\\ 2cdf(posterior, p)\\ 2ccdf(posterior, p) \end{pmatrix}$$

### 9.6 ETI版の信用区間とそれに対応するベイズ版P値函数の実装例

Out[27]: credint\_eti (generic function with 1 method)

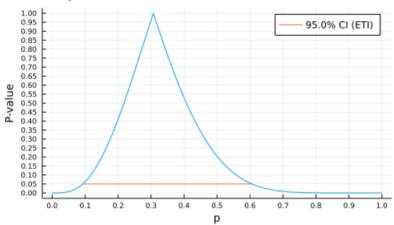
```
(n, k, \alpha) = (10, 3, 0.05) = (10, 3, 0.05)

(a, b) = (1 / 2, 1 / 2) = (0.5, 0.5)

ci = credint_eti(k, n, \alpha; a, b) \triangleright collect = [0.09269459393815314, 0.6058183181486713]
```

### Out[28]:





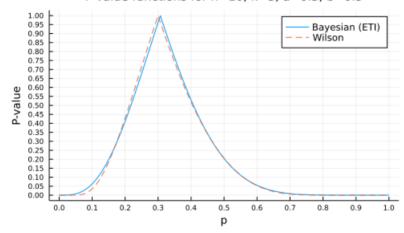
## 9.7 WilsonのP値函数とベイズ版P値函数のETI版の比較

ベイズ版P値函数のETI版は、Jeffreys事前分布 Beta(1/2, 1/2) の場合にWilsonのP値とよく一致することを確認しよう.

Jeffreys事前分布は一様事前分布と共に 無情報事前分布 の代表例である.

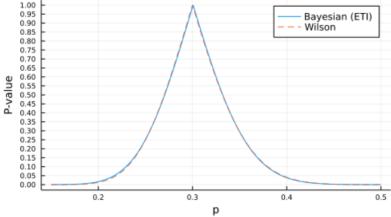
Out[29]:

P-value functions for n=10, k=3, a=0.5, b=0.5



```
In [30]:
           1 @show n, k, \alpha = 30, 9, 0.05
              Qshow a, b = 1/2, 1/2
           3
              plot(p \rightarrow pvalue\_eti(k, n, p; a, b), 0.05, 0.6; label="Bayesian (ETI)")
              title!("P-value functions for n=$n, k=$k, a=$a, b=$b")
          (n, k, \alpha) = (30, 9, 0.05) = (30, 9, 0.05)
          (a, b) = (1 / 2, 1 / 2) = (0.5, 0.5)
                       P-value functions for n=30, k=9, a=0.5, b=0.5
Out[30]:
             1.00
0.95
                                                            Bayesian (ETI)
             0.90
                                                            Wilson
             0.85
             0.80
             0.75
             0.65
0.60
0.55
0.50
0.45
           P-value
             0.40
             0.30
             0.25
             0.20
             0.15
             0.05
                      0.1
                                0.2
                                          0.3
                                                    0.4
                                                              0.5
                                                                       0.6
```

```
In [31]:
               Qshow n, k, \alpha = 100, 30, 0.05
             1
                Qshow a, b = 1/2, 1/2
             3
             4
               plot(p \rightarrow pvalue\_eti(k, n, p; a, b), 0.15, 0.5; label="Bayesian (ETI)")
               plot!(p \rightarrow pvalue\_wilson(k, n, p); label="Wilson", ls=:dash)
               plot!(xguide="p", yguide="P-value")
plot!(xtick=0:0.1:1, ytick=0:0.05:1)
                title!("P-value functions for n=$n, k=$k, a=$a, b=$b")
           (n, k, \alpha) = (100, 30, 0.05) = (100, 30, 0.05)
           (a, b) = (1 / 2, 1 / 2) = (0.5, 0.5)
                       P-value functions for n=100, k=30, a=0.5, b=0.5
Out[31]:
              1.00
0.95
                                                                 Bayesian (ETI)
                                                                  Wilson
```



р

n = 100, k = 30 ではほぼぴったり重なっている!

## 9.8 「主義の押し付け」をやめよう

所謂「ベイズ主義」にこだわったベイズ統計の解説では、通常の信頼区間とベイズ版の信用区間は解釈が異なり、まったく違うものであるかのように説明されている.

しかし、上で確認したように、二項分布モデルのような統計学入門の教科書でよく説明されているシンプルなモデルの場合には、ベイズ版の信用区間は通常の信頼区間と実用的には区別する必要がないほどよく一致する.

そのことは、対応するP値函数がよく一致することと数学的には同値である.

むしろ、通常の4種のP値函数のあいだの違いの方が、ベイズ版P値函数とWilsonのP値函数の違いよりも大きいと言える。

この事実は、ベイズ版信用区間が通常の信頼区間の近似計算法だとみなせ、逆に、通常の信頼区間は無情報事前分布のベイズ版信用区間の近似計算法だとみなせることを意味している.

実践的には「同じもの」とみなしても害がないのに、主義の違いによって異なる解釈を強制しようとすることは、「かけ算の意味によって、3×4は正解だが、4×3は誤りになる」と教えている困った人達と同じ立場に立つことになる。

そういうことはもうやめた方がよいだろう.

「シンプルなモデルにおいては無情報事前分布のベイズ統計と通常のP値を使う方法は実践的には同等だとみなされる」という事実を理解して、使える道具の幅を気軽に広げた方が生産的だと思われる。

それを妨げているのは「主義の押し付け」であり、極めて有害だと思われる.

**注意**: 以上では統計モデルが単独の二項分布の場合に通常のP値函数とベイズ版P値函数の近似的一致を確認した. 同様のことは, 2 つの二項分布モデルにおける「オッズ比」「リスク比」「比率の差」に関するP値函数についても成立していることを比較的容易に確認できる.

**注意:** 1標本のt検定の信用区間と予測区間は、正規分布モデルで事前分布を  $d\mu d(\sigma^2)/\sigma^2$  のimproper事前分布とした場合のベイズ 統計によって、exactに(誤差無しに)再現される. ゆえに、その事前分布を近似する事前分布について、正規分布モデルのベイズ統計 は1標本のt検定を近似することになる.

注意: 通常の線形回帰の信用区間と予測区間も、事前分布を回帰係数  $\beta$  と分散の対数  $\log \sigma^2$  について平坦なimproper事前分布とした場合のベイズ版線形回帰によってexactに(誤算無しに)再現される. ゆえに、その事前分布を近似する事前分布について、ベイズ版線形回帰は通常の線形回帰を近似することになる.

**注意**: このように、ベイズ統計では統計モデルの構築において事前分布の分だけ自由度が増えており、シンプルなモデルでは事前分布を特別な場合に取れば、通常のP値を使う統計分析法をベイズ統計の方法によって再現できるので、シンプルなモデルにおいてベイズ統計は通常のP値を使う方法の上位互換だと考えられる.