

# Calculus4 Partial differentiation

ryamada

2017年1月22日

- 正規分布のパラメタ推定 Estimation of parameters of normal distribution
  - $m = 0$
  - $m = 1$
  - $m = ?$
  - Exercise 1
    - Exercise 1-1
    - Exercise 1-3
    - Exercise 1-4
    - Exercise 1-5
    - Exercise 1-6

## 正規分布のパラメタ推定 Estimation of parameters of normal distribution

$k$ 個の実数  $X = (x_1, \dots, x_k)$  が観察されたとする。

Assume  $k$  real values  $X = (x_1, \dots, x_k)$ , are observed.

これらが平均  $m$ 、SD  $s$  の正規分布からの独立標本であるとする、その尤度関数は

The likelihood function under the hypothesis where they are from normal dist with mean  $m$  and SD  $s$  is;

$$L(m, s|x) = \prod_{i=1}^k \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi}s} e^{-\frac{1}{2} \frac{(x_i - m)^2}{s^2}} \right)$$

である。

対数をとって、定数部分を省略すれば

Taking logarithm,

$$\log L = -k \log s - \frac{1}{2} \frac{1}{s^2} \sum_{i=1}^k (x_i - m)^2 + C$$

これを、 $m, s$  の関数らしく変形すると

Transform the function so that it appears a function of  $m$  and  $s$ ,

$$\log L = -k \log s - \frac{1}{2} \frac{1}{s^2} (km^2 - 2(\sum_{i=1}^k x_i)m + \sum_{i=1}^k x_i^2) + C$$

この対数尤度に準じた関数を、横軸に  $m$ 、縦軸に  $s$  をとって描いてみる。

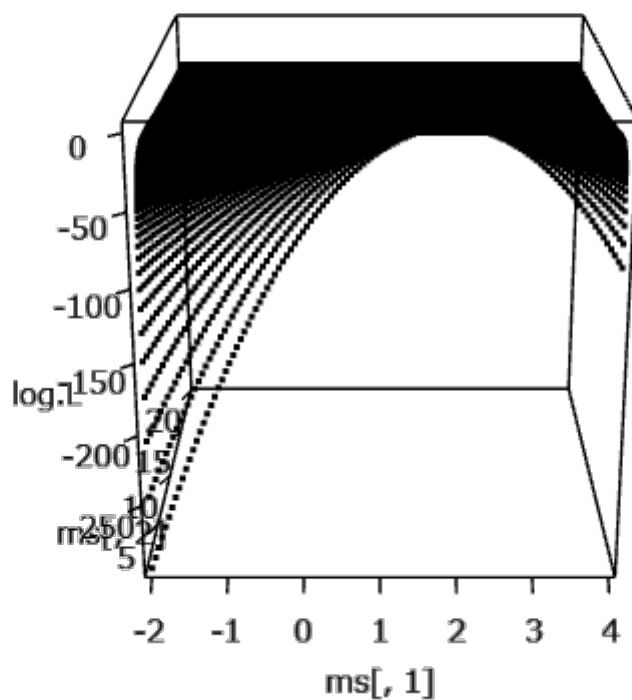
Draw the function with  $m$  horizontal and  $s$  vertical axes;

```

k <- 10
m0 <- 2
s0 <- 1
x <- rnorm(k, m0, s0)

m <- seq(from=-2, to=4, by=0.05)
s <- seq(from=0.5, to=20, by=0.05)
ms <- as.matrix(expand.grid(m, s))
log.L <- -k*log(ms[, 2]) - 1/2 * (1/ms[, 2]^2) * (k*ms[, 1]^2 - 2*sum(x)*ms[, 1] + sum(x^2))
plot3d(ms[, 1], ms[, 2], log.L)

```



## m = 0

平均が0の正規分布からのサンプルであることがわかっているなら

Under the assumption where mean is 0,

```

id <- which(ms[, 1]==0)
plot3d(ms[, 1], ms[, 2], log.L)
spheres3d(ms[id, 1], ms[id, 2], log.L[id], radius=3, color=2)

```

$m = 0$ の下での、 $s$ の最尤推定値は、対数尤度(に準じた)関数の $m$ に0を代入した尤度関数を微分すればよい

The function with  $m = 0$  should be differentiate to tell the MLE of  $s$ .

$$\begin{aligned}\log L &= -k \log s - \frac{1}{2} \frac{1}{s^2} (km^2 - 2(\sum_{i=1}^k x_i)m + \sum_{i=1}^k x_i^2) + C \\ &= -k \log s - \frac{1}{2} \frac{1}{s^2} \sum_{i=1}^k x_i^2 + C \\ \frac{d}{ds}(\log L) &= -\frac{k}{s} + \frac{1}{s^3} \sum_{i=1}^k x_i^2 \\ &= -\frac{1}{s^3} (ks^2 - \sum_{i=1}^k x_i^2)\end{aligned}$$

結局 then,

$$s = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^k x_i^2}{k}}$$

```
id <- which(ms[,1]==0)
plot3d(ms[,1],ms[,2],log.L)
spheres3d(ms[id,1],ms[id,2],log.L[id],radius=3,color=2)
s. <- sqrt(sum(x^2)/k)
log.L. <- -k*log(s.)-1/2 * (1/s.^2) * (sum(x^2))
spheres3d(0,s.,log.L.,radius=5,color=3)
```

# m=1

$m = 1$ で同じことをするなら

In the case of  $m = 1$ ,

$$\begin{aligned}\log L &= -k \log s - \frac{1}{2} \frac{1}{s^2} (km^2 - 2(\sum_{i=1}^k x_i)m + \sum_{i=1}^k x_i^2) + C \\ &= -k \log s - \frac{1}{2} \frac{1}{s^2} (k - 2 \sum_{i=1}^k x_i + \sum_{i=1}^k x_i^2) + C \\ \frac{d}{ds}(\log L) &= -\frac{k}{s} + \frac{1}{s^3} (k - 2 \sum_{i=1}^k x_i + \sum_{i=1}^k x_i^2) \\ &= -\frac{1}{s^3} (ks^2 - \sum_{i=1}^k (k - 2 \sum_{i=1}^k x_i + \sum_{i=1}^k x_i^2)) \\ s &= \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^k (k - 2 \sum_{i=1}^k x_i + \sum_{i=1}^k x_i^2)}{k}}\end{aligned}$$

```
id <- which(ms[, 1]==0)
plot3d(ms[, 1], ms[, 2], log.L)
spheres3d(ms[id, 1], ms[id, 2], log.L[id], radius=3, color=2)
s. <- sqrt(sum(x^2)/k)
log.L. <- -k*log(s.)-1/2 * (1/s.^2) * (sum(x^2))
spheres3d(0, s., log.L., radius=5, color=3)

id <- which(ms[, 1]==1)
spheres3d(ms[id, 1], ms[id, 2], log.L[id], radius=3, color=4)
s.. <- sqrt((k-2*sum(x)+sum(x^2))/k)
log.L. <- -k*log(s..)-1/2 * (1/s..^2) * (k-2*sum(x)+sum(x^2))
spheres3d(1, s., log.L., radius=5, color=5)
```

## \$m = ? \$

$m = 0, m = 1$ の場合では、 $m$ を固定して $\log L$ を $s$ で微分した。

For the cases of  $m = 0$  and  $m = 1$ ,  $\log L$  was differentiated with  $s$  with  $m$  as constant.

このように変数を固定して残りの変数で微分するのが偏微分。 This is partial differentiation.

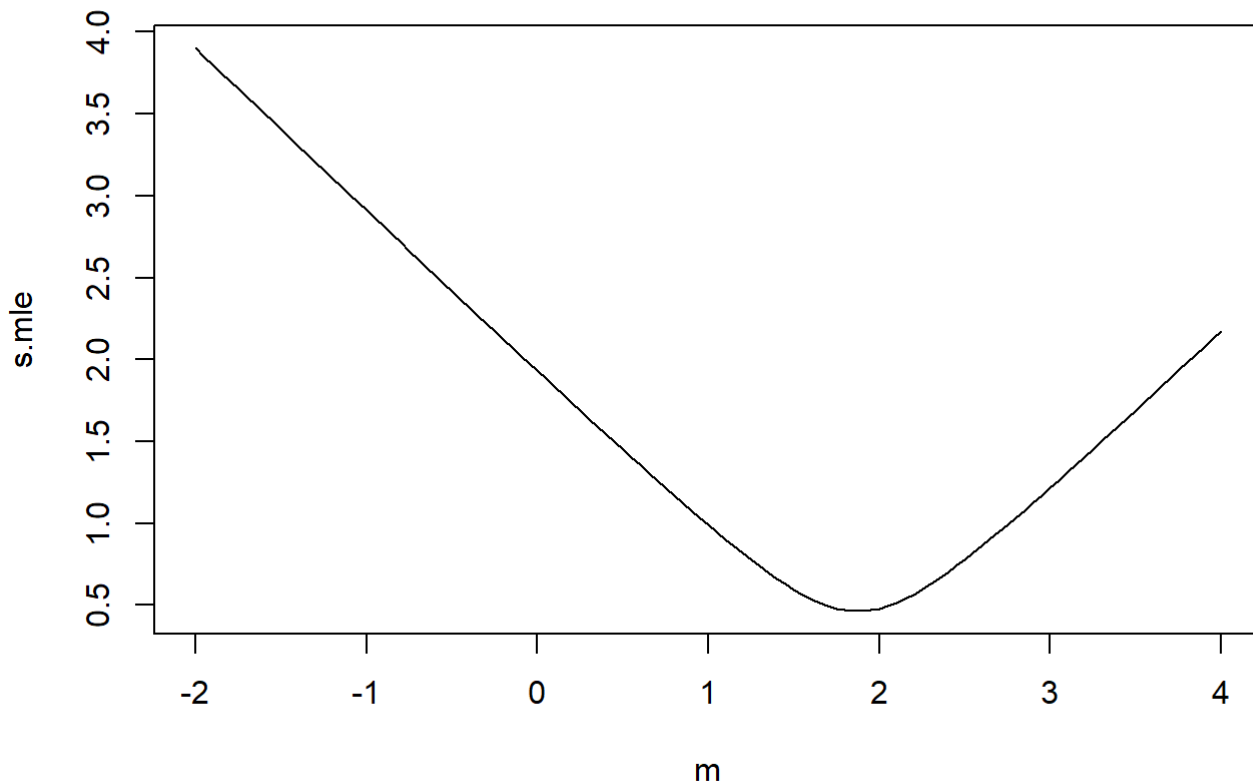
$$\frac{\partial}{\partial s} \log L = -\frac{k}{s} + \frac{1}{s^3} (km^2 - 2(\sum_{i=1}^k x_i)m + \sum_{i=1}^k x_i^2)$$

$m$ の値に応じて、 $s$ の最尤推定値は次のような値をとることがわかる

Partial differentiation tells MLE for arbitrary  $m$ .

$$\sqrt{\frac{(km^2 - 2(\sum_{i=1}^k x_i)m + \sum_{i=1}^k x_i^2)}{k}}$$

```
s.mle <- sqrt((k*m^2-2*sum(x)*m+sum(x^2))/k)
plot(m, s.mle, type="l")
```



## Exercise 1

### Exercise 1- 1

$m$ に関する偏微分をして、 $s$ とそれに対応する $m$ の最尤推定値の関係をプロットせよ1

Partially differentiate  $\log L$  with  $m$  and draw the relation between  $s$  and MLE of  $m$ .

### Exercise 1-3

常染色体上のSNPは3種類のディプロタイプを作る。そのディプロタイプ頻度を $(p_{MM}, p_{Mm}, p_{mm})$ とする。

SNP in autosomal chromosome makes 3 diplotypes, whose frequency is  $(p_{MM}, p_{Mm}, p_{mm})$ .

今、3ディプロタイプ人数が $(n_{MM}, n_{Mm}, n_{mm})$ と観察されたとする。

Assume  $(n_{MM}, n_{Mm}, n_{mm})$  are the observed number of individuals of three diplotypes.

この観察の下での、集団のディプロタイプ頻度  $(p_{MM}, p_{Mm}, p_{mm})$  の尤度関数は

The likelihood function of diplotype frequency for the observation follows.

$$L((p_{MM}, p_{Mm}, p_{mm}) | (n_{MM}, n_{Mm}, n_{mm})) = \binom{n_{MM} + n_{Mm} + n_{mm}}{n_{MM}, n_{Mm}, n_{mm}} p_{MM}^{n_{MM}} p_{Mm}^{n_{Mm}} p_{mm}^{n_{mm}}$$

尤度関数の対数を取り、定数部分を省略すると以下ようになる。

Taking logarithm,

$$\log L((p_{MM}, p_{Mm}, p_{mm}) | (n_{MM}, n_{Mm}, n_{mm})) = n_{MM} \log p_{MM} + n_{Mm} \log p_{Mm} + n_{mm} \log p_{mm} + C$$

$p_{mm} = 1 - p_{MM} - p_{Mm}$  であることを利用して、 $\log L$ を $(p_{MM}, p_{Mm})$ の2変数関数であるとみなし、 $p_{MM}, p_{Mm}$ でそれぞれ偏微分せよ。

Using  $p_{mm} = 1 - p_{MM} - p_{Mm}$ , handle the function as the function with two parameters  $p_{MM}, p_{Mm}$  and partially differentiate the function with both.

## Exercise 1-4

Exercise 1-3 の偏微分を利用して、 $(p_{MM}, p_{Mm}, p_{mm})$ の最尤推定値を求めよ

Using the result of Exercise 1-4, answer MLE of  $(p_{MM}, p_{Mm}, p_{mm})$ .

## Exercise 1-5

アレル頻度を $(p, 1-p)$ とすると、Hardy-Weinberg 平衡の下でのディプロタイプ頻度は

Under the condition of Hardy-Weinberg equilibrium, three diplotype freq when allele frequencies are  $(p, 1-p)$ ,

$$(p_{MM}, p_{Mm}, p_{mm}) = (p^2, 2p(1-p), (1-p)^2)$$

である。HWEを仮定すると、尤度関数は、1変数関数となる。

Under the assumption of HWE, the likelihood function is a function with one parameter.

HWE仮定の下での、尤度関数を示し、それを微分することでアレル頻度 $p$ の最尤推定値を求めよ。

Show the likelihood function and differentiate it and answer MLE.

## Exercise 1-6

Hardy-Weinberg不均衡を許せば

Under the assumption of HW-disequilibrium,

$$(p_{MM} + \delta, p_{Mm} - 2\delta, p_{mm} + \delta)$$

と表せる。

これにより、尤度関数は $p, \delta$ の2変数関数となる

2変数で偏微分し、その結果を示せ

Now the likelihood function has two parameters. Partially differentiate it and show the results.