

実験セミ (5/30)

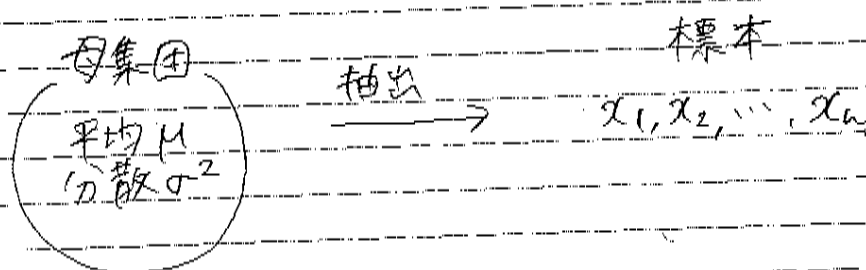
4.4 Sampling and Parameter Estimation

津村

The Maximum Likelihood Method (最尤法)

推定 { (1) 最良推定値を決める
(2) 推定の不確実性を決める

4.4.1 Sample Moment



標本平均 $\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \mu$

標本分散 $s^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \sigma^2$

$(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots$ 等 標本が多次数の場合

x_i, y_i についての標本平均・分散は上と同じ

標本共分散 $\text{cov}(x, y) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} E[(x - \mu_x)(y - \mu_y)]$

$n \rightarrow \infty$ が理論値に近づく

4.4.2 The Maximum Likelihood Method (最尤法)

標本が従うものの分布の形がわかっているとき(にのみ)使える

$f(x|\theta)$ (θ : 推定したいパラメータ)

独立な観測値 $x_1, x_2, \dots, x_n$ を得たとする

② the likelihood function (尤度関数):

$$L(x|\theta) = f(x_1|\theta)f(x_2|\theta) \cdots f(x_n|\theta)$$

一連の $x_1, x_2, \dots, x_n$ の値をとる確率

パラメータ θ は、 L を最大にするようなものであるはず

$$\downarrow$$

$$\frac{dL}{d\theta} = 0 \quad \left(\text{または} \quad \frac{d(\ln L)}{d\theta} = 0 \right) \leftarrow \begin{array}{l} \text{パラメータ複数ある} \\ \text{場合は} \\ \frac{\partial L}{\partial \theta_i} = 0 \cdots (\text{etc.}) \end{array}$$

を解いてその解を $\hat{\theta}$ とすると、

$\hat{\theta}$ は θ の the maximum likelihood estimator (最尤推定量)

③ $\hat{\theta}$ の誤差

$\hat{\theta}$ は $x_i ((x_1, x_2, \dots, x_n))$ の関数 $\rightarrow$ ランダム変数

推定量は確率分布で表せる

$\rightarrow$ $\hat{\theta}$ の誤差は、 $\hat{\theta}$ の分布の標準偏差で与えられる

(4.9) を用いて、

$$\sigma^2(\hat{\theta}) = \int (\hat{\theta} - \theta)^2 \underbrace{L(\theta|x)}_{\substack{\text{mean} \\ \text{確率}}} dx_1 dx_2 \cdots dx_n \quad (4.32)$$

(一般的な式だが単純な場合でしか解析的に解けない)

より簡単には、

$$\sigma^2(\hat{\theta}) \approx - \left(\frac{d^2 \ln L}{d\theta^2} \right)^{-1} \quad (4.33)$$

パラメータが複数個の場合.

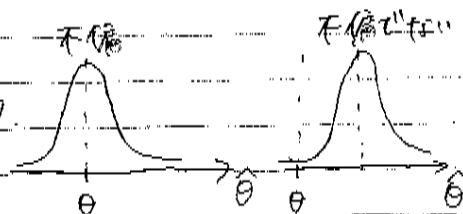
$$\sigma^2(\hat{\theta}_i) \approx (V^{-1})_{ii} \quad (V_{ij} = \frac{2^2 \ln L}{2\theta_i 2\theta_j})$$

※ 最尤推定量は変換のまじり不変

$$u = f(\theta) \text{ とすると、} u \text{ の最尤推定量は } \hat{u} = f(\hat{\theta})$$

※ $\hat{\theta}$ の mean を θ とした.

このような特性をもつ推定量は、"不偏である" という



4.4.3 Estimator for the Poisson Distribution

ポアソン分布に従う標本 $x_1, x_2, \dots, x_n$

尤度関数は、

$$L(\mu|x) = \prod_{i=1}^n \frac{\mu^{x_i}}{x_i!} \exp(-\mu) = \exp(-n\mu) \prod_{i=1}^n \frac{\mu^{x_i}}{x_i!} \quad (4.36)$$

$$L^* = \ln L = -n\mu + \sum_n [x_i \ln \mu - \ln x_i!] \quad (4.37)$$

$$\frac{dL^*}{d\mu} = -n + \frac{1}{\mu} \sum_n x_i = 0 \quad (4.38)$$

$$\text{より、} \hat{\mu} = \frac{1}{n} \sum_n x_i = \bar{x} \quad (4.39)$$

標本平均

$\bar{x}$ の分散は (4.33) から求められるが、ここでは別の方法で求めてみる

$$\sigma^2(\bar{x}) = E[(\bar{x} - \mu)^2] \quad (\text{定義から})$$

$$= E\left[\left(\frac{1}{n} \sum_n x_i - \mu\right)^2\right] \quad ((4.39) \text{ から})$$

$$= \frac{1}{n^2} E\left[\left\{\sum_n (x_i - \mu)\right\}^2\right] \quad (4.41)$$

$$\left\{ \sum_{i=1}^n (x_i - \mu) \right\}^2 = \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2 + \sum_{i \neq j} \sum_{j=1}^n (x_i - \mu)(x_j - \mu) \quad (4.42)$$

であるが、期待値をとると第2項は消えて、

$$\begin{aligned} \sigma^2(\bar{x}) &= \frac{1}{n^2} E\left[\sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2\right] = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n E[(x_i - \mu)^2] \\ &= \frac{n\sigma^2}{n^2} = \frac{\sigma^2}{n} \end{aligned} \quad (4.43)$$

※ (4.43) は、ポアソン分布だけでなく成り立つ一般の式。

$$\boxed{\begin{array}{l} \sigma^2(\bar{x}) = \frac{\sigma^2}{n} \\ \uparrow \\ \text{標本平均の分散} \end{array} \quad \begin{array}{l} \sigma^2 \leftarrow \text{元の分布の分散} \end{array}}$$

ポアソン分布では $\sigma^2 = \mu$ から、

$$\sigma(\hat{\mu}) = \sqrt{\frac{\mu}{n}} \simeq \sqrt{\frac{\hat{\mu}}{n}} = \sqrt{\frac{\bar{x}}{n}} \quad (4.44)$$

4.4.4 Estimators for the Gaussian Distribution

ガウス分布に従う n の標本に於いて、尤度関数は

$$L(\mu, \sigma^2 | x) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x_i - \mu)^2}{2\sigma^2}\right] \quad (4.45)$$

$$L^* = \ln L = -\frac{n}{2} \ln(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - \mu)^2}{\sigma^2} \quad (4.46)$$

μ, σ^2 に関する偏微分を 0 とおくと

$$\left(\begin{array}{l} 0 = \frac{\partial L^*}{\partial \mu} = \sum_{i=1}^n \frac{x_i - \mu}{\sigma^2} \\ 0 = \frac{\partial L^*}{\partial \sigma^2} = -\frac{n}{2\sigma^2} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - \mu)^2}{\sigma^2} \end{array} \right. \quad (4.47)$$

$$\left(\begin{array}{l} 0 = \frac{\partial L^*}{\partial \mu} = \sum_{i=1}^n \frac{x_i - \mu}{\sigma^2} \\ 0 = \frac{\partial L^*}{\partial \sigma^2} = -\frac{n}{2\sigma^2} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - \mu)^2}{\sigma^2} \end{array} \right. \quad (4.48)$$

$$(4.47) \text{ から } \hat{\mu} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i = \bar{x} \quad (4.49)$$

(4.43)の一般に成り立つ式から、ガウス分布についても

$$\sigma(\bar{x}) = \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \quad (4.50) \quad \text{"平均の標準誤差"}$$

↑ 標本の数 n に依存
 n を大きくすると推定値 $\bar{x}$ は正確に近づく
 測定機器は、 σ は機器の精度を表す

また σ が分かっている。

(4.48)式を解くと、

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} \sum_i (x_i - \mu)^2 \approx \frac{1}{n} \sum_i (x_i - \bar{x})^2 = S^2 \quad (4.51)$$

しかし、有限の n については、標本分散 S^2 は 偏った推定値 であることが分かっている。
 $\langle S^2 \rangle \neq \sigma^2$

$$\begin{aligned} \textcircled{+} E[S^2] &= \frac{1}{n} E\left[\sum_i (x_i - \bar{x})^2\right] \\ &= \frac{1}{n} E\left[\sum_i x_i^2 - n\bar{x}^2\right] = E[x_i^2] - E[\bar{x}^2] \\ &= \sigma^2 - \frac{\sigma^2}{n} = \frac{n-1}{n} \sigma^2 \end{aligned}$$

$n \rightarrow \infty$ で $S^2 \rightarrow \sigma^2$ とはなるが、

n が小さい場合、 S^2 を用いると σ^2 を過小評価してしまう。

(標本数が少ない場合、meanから遠くはなれた大きな値をとることは稀) ため、小さい値の方に偏ってしまう

使用的には (4.51) に $\frac{n}{n-1}$ をかけて、

$$\boxed{\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-1} \sum_i (x_i - \bar{x})^2} \quad (4.52)$$

とすればよい。(12の値では $\hat{\sigma}^2$ は求められないことに注意)

$\hat{\sigma}^2$ の分散は

$$\sigma^2(\hat{\sigma}^2) = \frac{2\sigma^4}{n-1} \approx \frac{2\hat{\sigma}^4}{n-1} \quad (4.53)$$

$\hat{\sigma}$ の標準偏差は

$$\sigma(\hat{\sigma}) = \frac{\sigma}{\sqrt{2(n-1)}} \approx \frac{\hat{\sigma}}{\sqrt{2(n-1)}} \quad (4.54)$$

4.4.5 The Weighted Mean

今まで同じ機器を用いた同じ量の一連の測定について扱ってきた。

異なる誤差を持つ同じ量の、何回かの測定を合わせる場合。

→ 誤差の比で重みをつける。

ガウス分布に従う標本 $x_1, x_2, \dots, x_n$

mean は全て等しく μ であるが、標準偏差はそれぞれ異なり、 σ_i

(4.45) の σ を σ_i でおきかえると、

$$L = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_i \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(x_i - \mu)^2}{2\sigma_i^2} \right], \quad L^* = -\frac{1}{2} \sum_i \left[\ln(2\pi\sigma_i^2) + \frac{(x_i - \mu)^2}{\sigma_i^2} \right]$$

$$\frac{2(\ln L)}{2\mu} = \sum \frac{x_i - \mu}{\sigma_i^2} = 0 \quad \text{から、重みつき平均は、} \hat{\mu} = \frac{\sum x_i / \sigma_i^2}{\sum 1 / \sigma_i^2} \quad (4.55)$$

(重みづけの因子は $\frac{1}{\sigma_i^2}$)

(4.33) を用いると、

$$\sigma^2(\hat{\mu}) = -\left(\frac{\partial^2 L^*}{\partial \mu^2} \right)^{-1} = \frac{1}{\sum (1/\sigma_i^2)} \quad (4.56)$$

※ 全ての σ_i が等しい場合は (4.55), (4.56) は通常の式に帰着する。

4.5 Examples of Applications

4.5.1 一連の測定での平均と誤差

例4.1 物体の長さの測定

表のような結果が得られたとき、最良推定値は？

測定の誤差は計器によるもの → ガウス分布

平均の最良推定値は、(4.49) から

$$\bar{x} = \frac{1}{15} \sum x_i = 17.61533$$

標準偏差は、(4.52) から、

$$\hat{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{15-1}} \sqrt{\sum (x_i - \bar{x})^2} = 5.855 \times 10^{-3}$$

よって平均の標準誤差は(4.50)から、

$$\sigma(\bar{x}) = \frac{\hat{\sigma}}{\sqrt{15}} = 0.0015$$

以上より 物体の長さの最良推定値は、 $\bar{x} = 17.616 \pm 0.002$

※ 不確かさは 平均の標準誤差 によって与えられることに注意

4.5.2 異なる誤差をもつデータの結合

例4.2 ミューオン寿命を知りたいが、文献を探すと 別々の実験で得られた表の7つの値が見つかった。best value は？

最も誤差の小さいものを選ぶ、というやり方もあるが、他の結果をムシする理由はない。

→ 重み付き平均を使う

(4.55), (4.56) より、

$$\tau = 2.19696, \quad \sigma(\tau) = 0.00061 \quad \leftarrow \begin{array}{l} \text{個々の値の値が右} \\ \text{誤差が小さい} \end{array}$$

$$\tau = 2.1970 \pm 0.0006 \text{ [}\mu\text{s]} \quad \leftarrow$$

4.5.3 計数率とその誤差の決定

例4.3 ^{22}Na の検出器からの1分あたりのカウント数 (表)

崩壊率とその誤差は?

放射性壊変はポアソン分布に従うから、(4.39), (4.44) より、

$$\hat{\mu} = \bar{x} = 2205.6, \quad \sigma(\hat{\mu}) = \sqrt{\frac{\bar{x}}{n}} = \sqrt{\frac{2205.6}{5}} = 21$$

よって計数率は、 $(2206 \pm 21) \text{ counts/min}$.

○ 1分ずつ5回測ると、止めずに5分間測るとの比較

5分の場合、11208 カウント、標本数 $n=5$.

$$\hat{\mu} = 11208, \quad \sigma(\hat{\mu}) = \sqrt{11208} = 106$$

1分あたりのカウント数は、 $\frac{11208 \pm 106}{5} = 2206 \pm 21 \text{ counts/min}$ ← (1分×5と同じ)

よくある間違い: はじめに1分あたりのカウント数を計算して、その $\sqrt{\quad}$ をとる.

4.5.4 Null Experiments. Setting Confidence Limits When No counts Are Observed

物理では、ある特定の反応や崩壊の有無を実験で調べることによって、その反応・崩壊を禁止する。理論的保存則の妥当性をテストする。そのためには、計測では、観測は、ある一定の時間 T にわたって行われる。明らかに、イベントが観測されれば、理論的な法則は誤りであるが、たとえ観測されなくても、正しいとは言えない。代わりに、反応や崩壊の寿命に制限をつける。

平均反応率 λ の過程を考えよう。

時間 T の間に 0 カウントであるような確率は、

$$P(0|\lambda) = \frac{(\lambda T)^0 e^{-\lambda T}}{0!} = \exp(-\lambda T) \quad (4.57)$$

これは、時間 T の間に 0 カウントであるときの λ の確率分布でも解釈できる。

・では λ が λ_0 以下であるような確率は？

$$P(\lambda \leq \lambda_0) = \int_0^{\lambda_0 T} \exp(-\lambda T) d(\lambda T) = \int_0^{\lambda_0 T} T \exp(-\lambda T) d\lambda = 1 - \exp(-\lambda_0 T) = CL \quad (4.58)$$

この確率は、区間 $[0, \lambda_0]$ の信頼水準 と呼ばれる。

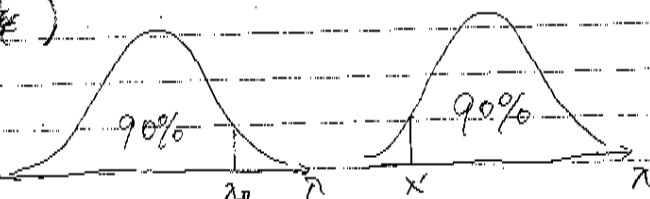
より強い主張をするには、CL を もっと高く選ぶこともできる。

$$CL = 1 - \exp(-\lambda_0 T) \text{ とおくと, } \lambda_0 = -\frac{1}{T} \ln(1 - CL) \quad (4.59)$$

・与えられた CL について、一般に一致する区間はない。

$$\text{例: } P(\lambda' \leq \lambda) = \int_{\lambda'}^{\infty} T \exp(-\lambda T) d\lambda = \exp(-\lambda' T) = 90\%$$

(真の λ が λ' 以上である確率)



例 4.4

50g の ^{82}Se の ニートリノレス 2重ベータ崩壊 を 1000 日間観測。

WFFN 保存則から 禁止されている。

機器の検出効率 ϵ は 20%。

この崩壊モードの寿命について上側信頼限界を設定したい。

CL: 90% とすると、(4.59) から、

$$\lambda \leq \lambda_0 = -\frac{1}{\underbrace{(100 \times 0.2)}_{T \text{ 効率}}} \ln(1 - \underbrace{0.9}_{CL}) = 0.115 / \text{day}$$

原子核の個数 N は、

$$N = N_A \times \frac{50}{82} = 3.67 \times 10^{23} \quad \text{より、}$$

原子核 1 つあたりでは、

$$\lambda \leq \frac{0.115}{3.67 \times 10^{23}} = 3.13 \times 10^{-25} / \text{day}$$

$$\text{おと 寿命 } \tau \geq \frac{1}{\lambda} = 8.75 \times 10^{24} \text{ years} \quad (90\% \text{ CL})$$

ニートリノレス 2重ベータ崩壊は存在するかもしれないが、 $\tau \geq 8.75 \times 10^{24}$ 年

例4.5 パルスを記録する (ほぼ完璧なシステムを考える。
パルスジェネレーターから N のパルスを送って、何コのパルスが記録されるか
観測することによって、機器の効率を測定できる。
 N のパルスが記録されたとすると、この測定から 系の効率について
何が言えるか?

この実験は、効率 ϵ とも良い系の inefficiency を測ることと同じ。
→ 例4.4 と同じように、問いは、

"efficiency の下側信頼限界 (もしくは inefficiency の上側限界) を
いくつに設定できるか?"

系の効率 ϵ とする。

N のパルスを入力した時 r コ記録される確率は二項分布で与えられて、

$$P(N, r) = \frac{N!}{(N-r)! r!} \epsilon^r (1-\epsilon)^{N-r}$$

だから、 N コとも記録される確率は $P(N, N) = \epsilon^N$

ϵ についての確率分布を見せして、規格化すると $\left(\int_0^1 P(\epsilon) d\epsilon = 1 \right)$ 、

$$P(\epsilon) = (N+1) \epsilon^N$$

ある下側限界 ϵ_0 に対して信頼限界が CL であるとする。

$$CL = P(\epsilon_0 \leq \epsilon) = \int_{\epsilon_0}^1 (N+1) \epsilon^N d\epsilon = [-\epsilon_0^{N+1}]$$

$$\therefore \epsilon_0 = (1-CL)^{\frac{1}{N+1}}$$

$N=100$ とすると、 $CL=95\%$ で $\epsilon_0=0.9708 \rightarrow$ "95% の確率で効率 ϵ が 0.97 以上"

4.5.5 カウントの時間間隔の分布 (random source からの)

平均崩壊率 λ の放射線源について、

時間 T の間に 0 カウントである確率は (4.57) $P(0, \lambda) = \exp(-\lambda T)$.

→ カウントの時間間隔 T についての確率分布を見させる。

$$\text{規格化すると } P(T) = \lambda \exp(-\lambda T) \quad (4.60)$$