

Простейшие примеры задач анализа данных.

Принцип максимума правдоподобия

Опрос на втором туре выборов

На втором туре президентских выборов борьба идёт между двумя кандидатами, — назовём их условно A и B . До дня голосования социологическая служба проводит опрос: выбирает случайным образом n избирателей и спрашивает каждого, за кого тот собирается голосовать. Допустим, k человек из n ответили «за A ».

Какую долю голосов в итоге наберёт кандидат A во всей стране?

Вероятностная модель. Предположим, что:

- истинная (нам неизвестная!) доля сторонников A среди всех избирателей равна $p \in (0, 1)$;
- опрашиваемые отбираются *независимо* друг от друга;
- каждый отвечает честно — то есть с вероятностью p говорит «за A », с вероятностью $1 - p$ говорит «за B ».

Тогда ответ i -го опрошенного — это случайная величина X_i , принимающая значение 1 (за A) с вероятностью p и значение 0 (за B) с вероятностью $1 - p$. Такие величины называют *бернуллиевскими*, а описанную модель — *схемой испытаний Бернулли*.

i Определение 3.1. Схема испытаний Бернулли

Эксперимент, в котором n раз независимо повторяется испытание с двумя исходами («успех» с вероятностью p и «неудача» с вероятностью $1 - p$), называется **схемой испытаний Бернулли**. Число успехов $S_n = X_1 + \dots + X_n$ имеет *биномиальное распределение*:

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

Наблюдаемые данные — это вектор ответов $X = (X_1, \dots, X_n)$ или, эквивалентно, число «единиц» в нём: $S_n = X_1 + \dots +$

$X_n = k$. Параметр p нам неизвестен — это и есть **то, что мы хотим оценить** по данным.

Идея метода максимума правдоподобия. Запишем вероятность того, что данные оказались именно такими, как мы их наблюдаем, — как функцию неизвестного параметра p :

$$L(p) = \Pr(X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n | p) = \prod_{i=1}^n p^{x_i} (1-p)^{1-x_i} = p^k (1-p)^{n-k},$$

где $k = \sum_i x_i$ — наблюдаемое число «единиц». Функция $L(p)$ называется **функцией правдоподобия**. Метод максимума правдоподобия (*maximum likelihood estimation*, сокращённо **ОМП**) состоит в выборе того $\hat{p}$, при котором $L(p)$ достигает максимума:

$$\hat{p} = \arg \max_{p \in (0,1)} L(p). \quad (3)$$

i Почему именно максимум правдоподобия?

Идея, на которой держится метод, очень житейская: *из всех возможных значений параметра выбираем то, при котором наблюдаемые данные были бы наиболее правдоподобными*. Если выпало 600 единиц из 1000, было бы странно объявить $p = 0, 1$ — ведь при таком p событие $S_n = 600$ почти невозможно. Здравый смысл подсказывает: правдоподобнее всего гипотеза $p \approx 0,6$. Метод максимума правдоподобия и есть формализация этого здравого смысла.

Вычисление оценки. Удобнее искать максимум *логарифма* правдоподобия — это сводит произведение к сумме, не меняя точку максимума (логарифм монотонен):

$$\ln L(p) = k \ln p + (n - k) \ln(1 - p). \quad (4)$$

Дифференцируем по p и приравняем нулю (принцип Ферма):

$$\frac{d}{dp} \ln L(p) = \frac{k}{p} - \frac{n-k}{1-p} = 0 \Leftrightarrow k(1-p) = (n-k)p \Leftrightarrow p = \frac{k}{n}.$$

Чтобы убедиться, что это именно максимум, посмотрим на вторую производную: $\frac{d^2}{dp^2} \ln L(p) = -k/p^2 - (n-k)/(1-p)^2 < 0$ для всех $p \in (0, 1)$. Значит, $\ln L$ — строго вогнутая функция, и найденная точка — её единственный максимум.

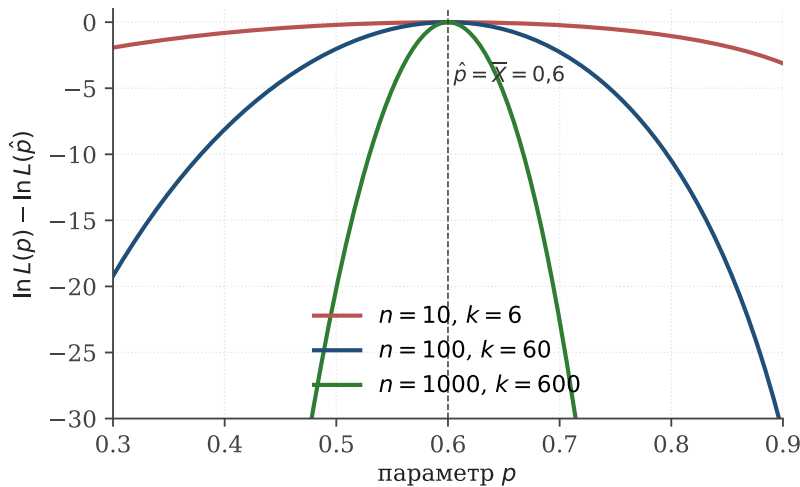
⚠ Теорема 3.2. ОМП в схеме Бернулли

Оценкой максимума правдоподобия параметра p в схеме испытаний Бернулли по выборке $X_1, \dots, X_n$ является **выборочное среднее**:

$$\hat{p} = \frac{S_n}{n} = \bar{X} = \frac{X_1 + \dots + X_n}{n}. \quad (6)$$

Это очень житейский ответ: «доля сторонников A оценивается долей ответивших “за A ”». Тем интереснее, что этот же ответ выводится из общего, абсолютно формального принципа — ОМП. На рис. 3.1 видно, что чем больше выборка, тем «острее» становится максимум функции правдоподобия — то есть тем точнее данные «локализуют» неизвестный параметр.

Функция правдоподобия становится острее с ростом n



Логарифм функции правдоподобия $\ln L(p) - \ln L(\hat{p})$ для трёх выборок одинаковой пропорции $k/n = 0,6$, но разного размера ($n = 10, 100, 1000$). С ростом n функция концентрируется всё плотнее вокруг истинного значения; ширина характерной зоны падает как $1/\sqrt{n}$.

Почему ОМП хорош: теоретические результаты Фишера и Ле Кама

Естественный вопрос: является ли $\hat{p} = \bar{X}$ лучшей возможной оценкой — или, может, существует ещё более точный способ извлечь p из данных?

Ответ на этот вопрос получили в первой половине XX века Р. Фишер и затем Л. Ле Кам. Изложим главные результаты на популярном уровне, без полных доказательств (они выходят за рамки школьной программы).

🔍 Историческая справка

Рональд Эймлер Фишер (1890–1962) в работе 1922 г. «On the mathematical foundations of theoretical statistics» ввёл понятие функции правдоподобия и предложил метод её максимизации как универсальный способ оценивания. Он же ввёл термины «оценка», «параметр», «статистика» и доказал, что метод максимума правдоподобия обладает *асимптотической эффективностью* — его оценки имеют наименьшую возможную (по неравенству информации) дисперсию при больших размерах выборки.

Люсьен Ле Кам (1924–2000) в серии работ 1950-х–1970-х гг. построил общую теорию *асимптотически нормальных* статистических экспериментов и доказал, что оценка максимума правдоподобия является, в очень широком смысле, *оптимальной*: для гладких параметрических семейств никакая другая разумная оценка не может быть точнее.

Аналог теоремы об асимптотической эффективности в более общем бесконечномерном случае независимо изучал советский статистик **Илья Александрович Ибрагимов** (р. 1932) с соавторами (Ибрагимов, Хасьминский, ЛОМИ, 1970-е).

Главную мысль можно сформулировать так:

і Кратко об оптимальности ОМП

При $n \rightarrow \infty$ оценка максимума правдоподобия $\hat{p}_n$ для гладкого параметрического семейства распределений:

1. *состоятельна*: $\hat{p}_n \rightarrow p$ при $n \rightarrow \infty$ (в смысле сходимости по вероятности);
2. *асимптотически нормальна*: распределение нормированной разности $\sqrt{n}(\hat{p}_n - p)$ при $n \rightarrow \infty$ стремится к нормальному распределению с нулевым средним и определённой дисперсией;

3. *асимптотически эффективна*: эта предельная дисперсия — **наименьшая** среди всех «разумных» (несмещённых, регулярных) оценок. Соответственно, доверительный интервал, построенный по ОМП, оказывается *кратчайшим* среди всех таких интервалов, то есть наиболее точно локализует неизвестный параметр.

Иначе говоря, в очень широком классе задач ОМП — это *асимптотически наилучшее* из всего, на что можно надеяться при росте n . Этот результат лежит в основе огромной части современной математической статистики и машинного обучения.

Доверительные интервалы: Чебышёв и центральная предельная теорема

Получив точечную оценку $\hat{p} = k/n$, мы хотим понимать, насколько ей можно доверять. Социологи говорят: «46 % за кандидата A с погрешностью $\pm 3\%$ ». Откуда берётся это $\pm 3\%$?

Подход 1: неравенство Чебышёва

Поскольку $S_n = X_1 + \dots + X_n$ — сумма независимых одинаково распределённых случайных величин с математическим ожиданием p и дисперсией $p(1-p)$, для $\hat{p}_n = S_n/n$:

$$\mathbb{E}[\hat{p}_n] = p, \quad \mathbb{D}[\hat{p}_n] = \frac{p(1-p)}{n}. \quad (7)$$

Применим неравенство Чебышёва: для любого $\varepsilon > 0$

$$\Pr(|\hat{p}_n - p| \geq \varepsilon) \leq \frac{\mathbb{D}[\hat{p}_n]}{\varepsilon^2} = \frac{p(1-p)}{n\varepsilon^2} \leq \frac{1}{4n\varepsilon^2}, \quad (8)$$

где мы воспользовались тем, что $p(1-p) \leq 1/4$ для всех $p \in [0, 1]$.

Если потребовать, чтобы вероятность ошибки не превышала α (например, $\alpha = 0,05$), достаточно взять

$$\varepsilon = \frac{1}{2\sqrt{\alpha n}}. \quad (9)$$

Тогда с вероятностью $1 - \alpha$

$$\hat{p}_n - \frac{1}{2\sqrt{\alpha n}} \leq p \leq \hat{p}_n + \frac{1}{2\sqrt{\alpha n}}. \quad (10)$$

Подход 2: центральная предельная теорема

Неравенство Чебышёва справедливо при минимальных предположениях и потому *очень грубое*. Центральная предельная теорема (ЦПТ) — а её мы примем сейчас без доказательства — утверждает, что распределение нормированной суммы независимых одинаково распределённых случайных величин с конечной дисперсией стремится к нормальному.

⚠ Теорема 3.3. Центральная предельная теорема (ЦПТ)

Пусть $X_1, X_2, \dots$ — независимые одинаково распределённые случайные величины с математическим ожиданием μ и конечной дисперсией $\sigma^2 > 0$, $S_n = X_1 + \dots + X_n$. Тогда при $n \rightarrow \infty$

$$\Pr\left(\frac{S_n - n\mu}{\sigma\sqrt{n}} \leq x\right) \rightarrow \Phi(x) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-t^2/2} dt \quad (11)$$

(функция стандартного нормального распределения).

Применим ЦПТ к нашей задаче: $\mu = p$, $\sigma^2 = p(1-p)$, и при больших n

$$\frac{\hat{p}_n - p}{\sqrt{p(1-p)/n}} \approx \mathcal{N}(0, 1). \quad (12)$$

Если $z_{1-\alpha/2}$ — квантиль уровня $1 - \alpha/2$ стандартного нормального распределения, то с вероятностью $1 - \alpha$

$$|\hat{p}_n - p| \leq z_{1-\alpha/2} \cdot \sqrt{p(1-p)/n} \leq \frac{z_{1-\alpha/2}}{2\sqrt{n}}. \quad (13)$$

Получаем **доверительный интервал по ЦПТ**:

$$\hat{p}_n - \frac{z_{1-\alpha/2}}{2\sqrt{n}} \leq p \leq \hat{p}_n + \frac{z_{1-\alpha/2}}{2\sqrt{n}}. \quad (14)$$

При $\alpha = 0,05$ имеем $z_{0,975} \approx 1,96$.

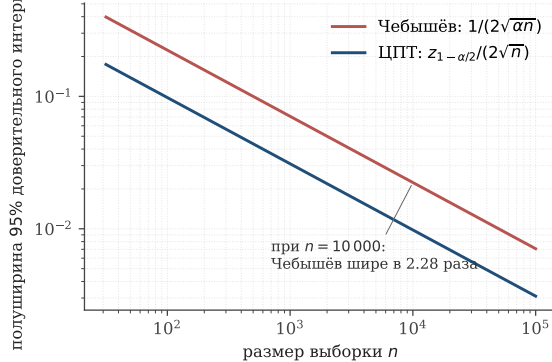
Сравнение двух подходов

Сравним полуширины интервалов (3.6) и (3.7) при $\alpha = 0,05$:

$$\varepsilon_{\text{Чеб.}} = \frac{1}{2\sqrt{0,05n}} = \frac{2,236}{2\sqrt{n}} = \frac{1,118}{\sqrt{n}}, \quad \varepsilon_{\text{ЦПТ}} = \frac{1,96}{2\sqrt{n}} = \frac{0,98}{\sqrt{n}} \quad (15)$$

Отношение $\varepsilon_{\text{Чеб.}}/\varepsilon_{\text{ЦПТ}} \approx 2,28$ — интервал Чебышёва шире более чем вдвое (рис. 3.2). Этим проиллюстрирована важная мысль: *неравенство Чебышёва — это универсальная, но очень консервативная оценка*; знание формы распределения (в нашем случае — асимптотической нормальности) позволяет её существенно улучшить.

Ширина доверительного интервала: Чебышёв > ЦПТ (чем меньше, тем лучше)



Полуширина 95 % доверительного интервала как функция размера выборки n . Обе кривые убывают как $1/\sqrt{n}$, но ЦПТ-интервал примерно вдвое уже интервала Чебышёва: ЦПТ учитывает форму распределения, тогда как Чебышёв использует лишь дисперсию.

💡 Пример 3.4. Числовой пример

Опрошено $n = 1000$ избирателей; за кандидата A высказалось $k = 460$. Точечная оценка — $\hat{p} = 0,46$. Полуширина 95 % ДИ:

$$\varepsilon_{\text{Чеб.}} \approx \frac{1,118}{\sqrt{1000}} \approx 0,0354, \quad \varepsilon_{\text{ЦПТ}} \approx \frac{0,98}{\sqrt{1000}} \approx 0,0310. \quad (16)$$

По ЦПТ: с уверенностью 95 % истинная доля сторонников A лежит в интервале $[0,429, 0,491]$, то есть точно меньше половины. *Можно с большой уверенностью утверждать, что кандидат A проиграет* — даже несмотря на то, что точечная оценка 0,46 не сильно ниже 0,5.

Из неравенства Чебышёва мы бы получили интервал $[0,425, 0,495]$ — его правый конец заметно ближе к 0,5, вывод об исходе выборов был бы менее уверенным.

Оценка площади множества: метод Монте-Карло

То, что мы сделали в задаче с выборами, имеет красивое геометрическое обобщение. Заметим: доля «успехов» k/n есть не что иное, как **доля точек выборки, попавших в фиксированное множество**. В нашем случае множество — это «множество всех избирателей, голосующих за A »; но точно так же мы можем оценивать, например, *площадь* криволинейной фигуры.

Пример: оценка числа π

Впишем в единичный квадрат $Q = [0, 1]^2$ круг D радиуса $1/2$ с центром в точке $(1/2, 1/2)$. Площадь квадрата равна 1; площадь круга равна

$$S(D) = \pi \cdot (1/2)^2 = \pi/4. \quad (17)$$

Бросим в квадрат N случайных точек, равномерно распределённых по Q (для каждой точки независимо генерируем координаты $x, y \sim U(0, 1)$). Пусть K — число точек, попавших в круг D . Тогда для каждой брошенной точки вероятность оказаться в D равна

$$p = \Pr((x, y) \in D) = \frac{S(D)}{S(Q)} = \pi/4. \quad (18)$$

Мы оказались в той же схеме испытаний Бернулли. По теореме 3.2 оценкой p является доля K/N , а оценкой числа π :

$$\hat{\pi}_N = 4 \cdot \frac{K}{N}. \quad (19)$$

Этот приём называется **методом Монте-Карло**.

💡 Историческая справка

Идея использовать случайные точки для приближённого вычисления определённых интегралов восходит к работам Энрико Ферми (конец 1930-х), а в современном виде была развита Станиславом Уламом, Джоном фон Нейманом и Николасом Метрополисом в Лос-Аламосе в 1946–1949 гг. при расчётах прохождения нейтронов сквозь вещество. Название «Монте-Карло» дал Метрополис —

в честь известного казино, по аналогии: расчёты с розыгрышем случайных чисел напомнили коллегам игру в рулетку.

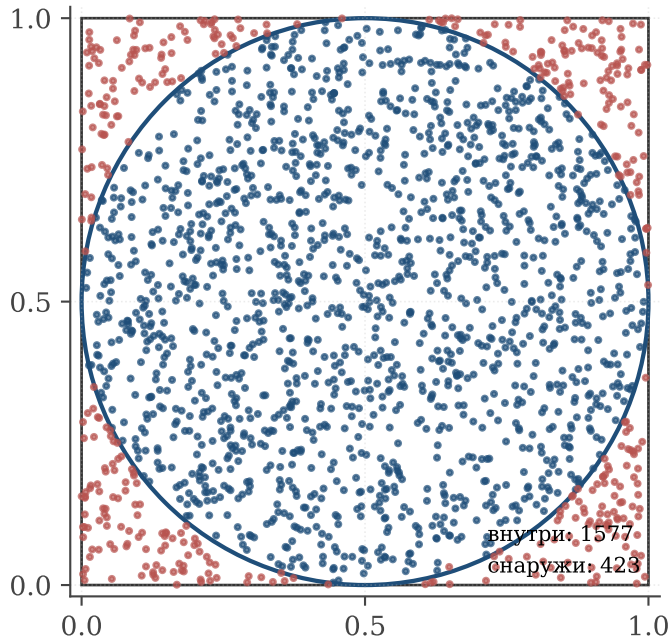
Стоит сразу отделить главное от второстепенного. На примере вычисления π метод Монте-Карло выглядит *медленным*: ошибка убывает лишь как $1/\sqrt{N}$, и любая школьная формула численного интегрирования (трапеций, Симпсона) даёт куда быстрее куда более точный ответ. Так зачем же о нём говорить?

Сила метода — не в скорости, а в *универсальности*. Обычные квадратурные формулы плохо переносятся на функции *многих* переменных: чтобы посчитать интеграл по d -мерному кубу с точностью ε , узлов сетки требуется $\sim (1/\varepsilon)^d$ — то самое «*проклятие размерности*», экспоненциальный рост с числом переменных. Монте-Карло же сохраняет свою скорость $1/\sqrt{N}$ *независимо* от размерности: для интеграла в 100 переменных он работает примерно так же хорошо (или плохо), как для одной.

Именно поэтому Монте-Карло сегодня применяется там, где размерность велика: в физике частиц (расчёты столкновений), квантовой химии (многоэлектронные интегралы), финансовой математике (опционы на много активов), байесовской статистике, а также при обучении нейронных сетей — например, при оценке градиента стохастическим спуском.

Численный эксперимент. На рис. 3.3 показан результат одного запуска при $N = 2000$: красные точки попали *вне* круга, синие — *внутри*. По формуле (3.8), $\hat{\pi}_{2000} \approx 3,154$ — ошибка около 0,4 %.

$N = 2000$, $\hat{\pi} = 4\hat{p} = 3.1540$, **истина** $\pi \approx 3.1416$

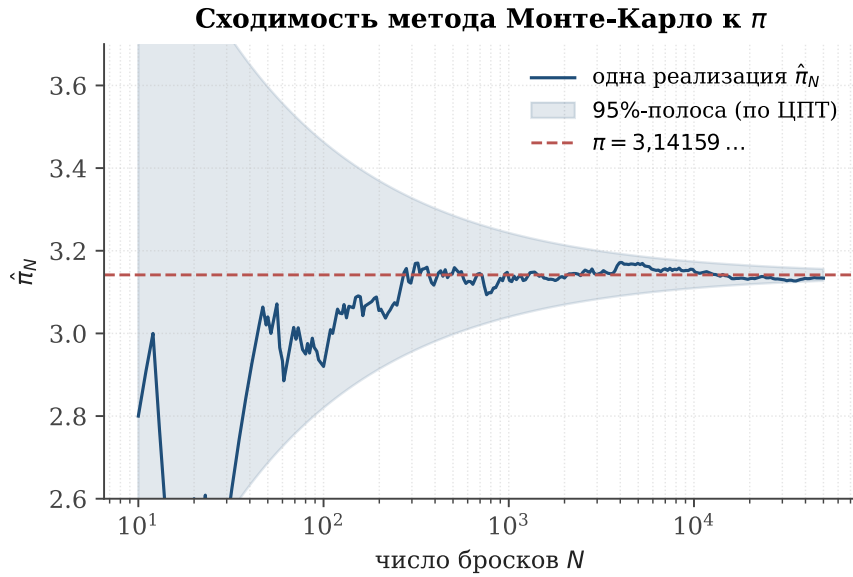


$N =$

2000 случайных точек, равномерно распределённых в единичном квадрате. Точки внутри круга диаметра 1 закрашены синим, снаружи — красным. Доля синих, умноженная на 4, даёт оценку $\pi \approx 3.154$. Графика одной реализации, конечно, мало: при другом значении начального состояния генератора случайных чисел получится немного другой результат. Поэтому естественно изучать *сходимость* — как ведёт себя оценка $\hat{\pi}_N$ при росте N . По формулам выше,

$$\mathbb{E}[\hat{\pi}_N] = \pi, \quad \mathbb{D}[\hat{\pi}_N] = 16 \cdot \frac{p(1-p)}{N} = \frac{4\pi(4-\pi)}{N} \approx \frac{10.79}{N} \quad (20)$$

Стандартное отклонение оценки убывает как $1/\sqrt{N}$. На рис. 3.4 это видно отчётливо: точка пересекает горизонтальную прямую $y = \pi$ туда-сюда, а 95 % «коридор» сужается как $1/\sqrt{N}$.



Сходимость метода Монте-Карло для оценки π . Сплошная синяя линия — одна реализация процесса $\hat{\pi}_N$ для N от 10 до $5 \cdot 10^4$; красная пунктирная — точное значение π ; заштрихованная полоса — 95 % полоса, предсказываемая ЦПТ. К $N = 50\,000$ ошибка не превосходит $\approx 0,015$. **Сколько точек нужно для трёх знаков после запятой?** Чтобы получить $\hat{\pi}_N$ с точностью $\varepsilon = 10^{-3}$ с уверенностью 95 %, нужно по (3.7), $z = 1,96$: $1,96 \cdot \sqrt{10,79/N} \leq 10^{-3}$, откуда $N \geq (1,96)^2 \cdot 10,79 \cdot 10^6 \approx 4,14 \cdot 10^7$. *Сорок миллионов* точек ради трёх знаков — это и впрямь не самый эффективный способ вычислять π .

i Самый быстрый «школьный» способ вычислить π

Из всех способов, доступных читателю, не выходя за рамки школьной программы, очень быстро сходится формула Мэчина (1706):

$$\frac{\pi}{4} = 4 \arctan \frac{1}{5} - \arctan \frac{1}{239}, \quad \arctan x = x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - \dots \quad (21)$$

Уже первые 10 членов рядов для $\arctan(1/5)$ и $\arctan(1/239)$ дают *больше десяти* верных знаков числа π . Сравним: метод Монте-Карло потребовал бы для тех же 10 знаков порядка 10^{20} точек — астрономическое число.

Формула Мэчина и её обобщения (формулы Эйлера, Гаусса, Шторма) были основным инструментом ручных вычислений π с XVIII по середину XX века. К началу

1970-х были найдены формулы, дающие десятки знаков на итерацию (Брент, Саламин); современные миллиарды знаков π считаются именно такими методами и алгоритмом БПФ — но это уже совсем другая история.

Итак, метод Монте-Карло — это *плохой* способ считать π , но *отличный* способ считать многомерные объёмы и интегралы. Принципиально важно: он опирается на тот же приём, что и опрос избирателей — выборочное среднее с границами, заданными ЦПТ.

Вторая задача: оценка скалярного параметра при гауссовом шуме

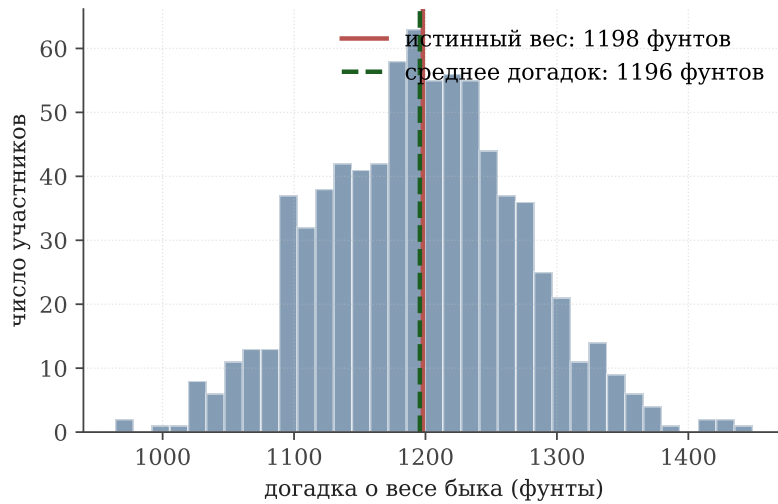
Перейдём ко второй классической задаче, в которой работает тот же принцип максимума правдоподобия. Теперь данные — не «нули и единицы», а вещественные числа с погрешностями.

💡 Историческая справка

В 1906 г. английский антрополог **Фрэнсис Гальтон** (1822–1911) посетил сельскохозяйственную выставку в Плимуте, где проходил традиционный конкурс: посетители угадывали вес выставленного быка после того, как его освежевали и взвесили. Гальтон собрал 787 заполненных бланков и обнаружил поразительный факт: *среднее* (а точнее, медиана) догадок участников совпало с истинным весом быка с точностью до фунта (1198 lb).

Этот эпизод — классический пример «мудрости толпы»: несмотря на то что каждый отдельный участник ошибался на десятки фунтов в обе стороны, их *усреднение* оказалось неожиданно точным. С точки зрения математической статистики, перед нами модель «истинное значение плюс шум», и среднее — это и есть оценка максимума правдоподобия при предположении о *гауссовом* шуме. Эту связь мы сейчас установим формально.

Эксперимент Гальтона (1906, Плимут, $n = 787$ участников)



Гистограмма догадок $n = 787$ участников плимутской ярмарки (стилизованная реконструкция распределения, которое описал Гальтон в журнале *Nature*, 1907). Истинный вес быка — 1198 фунтов; среднее догадок — 1196 фунтов. Хотя отдельные оценки ошибаются на сотню фунтов, их усреднение исключительно близко к истине. **Модель.** Пусть мы хотим оценить неизвестную величину μ (вес быка; масса звезды; ускорение свободного падения — неважно). Мы располагаем n независимыми измерениями

$$X_i = \mu + \xi_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (22)$$

где ξ_i — *ошибки измерения*. О них естественно предположить, что:

- они *независимы* (разные измерения не влияют друг на друга),
- *симметричны* относительно нуля (нет систематического сдвига вверх или вниз) и
- имеют *одинаковое* распределение.

Какое именно? Самым «канонически» правильным является **нормальное (гауссовское) распределение** (рис. 3.6).

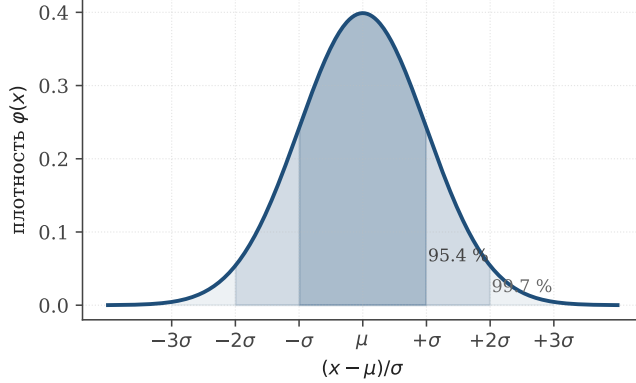
i Определение 3.5. Нормальное (гауссовское) распределение

Случайная величина ξ имеет **нормальное распределение** с параметрами $\mu \in \mathbb{R}$ и $\sigma^2 > 0$, если её плотность вероятности задаётся формулой

$$\varphi_{\mu, \sigma^2}(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right), \quad x \in \mathbb{R}. \quad (23)$$

Обозначение: $\xi \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$. Параметр μ — математическое ожидание (среднее значение), σ^2 — дисперсия; σ называют *стандартным отклонением*.

Плотность нормального распределения $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ и правило трёх сигм



Плотность нормального распределения $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$. Закрашены 1σ -, 2σ - и 3σ -окрестности среднего: они содержат соответственно 68,3 %, 95,4 % и 99,7 % всей массы распределения. Это знаменитое **правило трёх сигм**. **Принцип максимума правдоподобия для гауссова шума.** Согласно модели (3.9), $X_i \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ независимы. Совместная плотность выборки:

$$L(\mu) = \prod_{i=1}^n \varphi_{\mu, \sigma^2}(x_i) = \frac{1}{(\sigma\sqrt{2\pi})^n} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2\right), \quad (24)$$

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

Параметр σ^2 можно считать на этом этапе известным или несущественным (мы оцениваем только μ). Тогда из всех слагаемых от μ зависит лишь сумма квадратов:

$$\mu \mapsto S(\mu) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2. \quad (25)$$

Максимизация правдоподобия эквивалентна минимизации суммы квадратов отклонений. Это краеугольный камень всего, что последует дальше, поэтому отметим его в рамке:

ОМП при гауссовом шуме $\Leftrightarrow$ метод наименьших квадратов (МНК)

Минимизация суммы квадратов. Найдём $\hat{\mu} = \arg \min_{\mu} S(\mu)$. Дифференцируем (3.12) по μ и приравняем нулю:

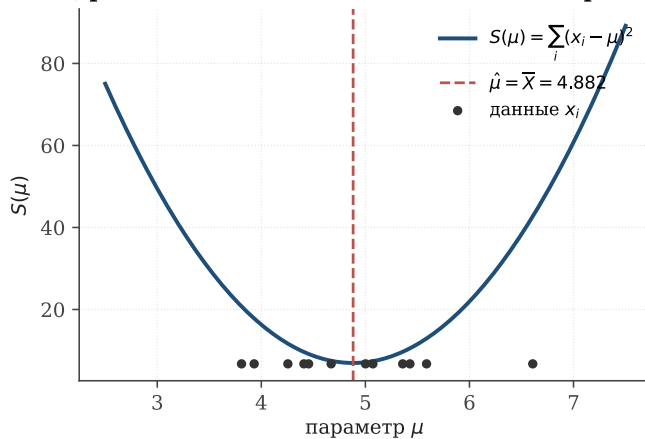
$$\frac{dS}{d\mu} = -2 \sum_{i=1}^n (x_i - \mu) = 0 \Leftrightarrow \sum_{i=1}^n x_i = n\mu. \quad (27)$$

Откуда

$$\hat{\mu} = \frac{x_1 + \dots + x_n}{n} = \bar{X}. \quad (28)$$

Это снова выборочное среднее — теперь уже в задаче с непрерывными данными. Вторая производная $S''(\mu) = 2n > 0$, поэтому это действительно минимум, причём единственный (рис. 3.7).

Сумма квадратов отклонений минимальна в выборочном среднем



Функция $S(\mu) = \sum (x_i - \mu)^2$ для модельной выборки $n = 12$ точек. Минимум достигается в точке $\hat{\mu} = \bar{X}$ (пунктир). Чёрные точки на нижней оси — сами данные x_i ; видно, как $\bar{X}$ «балансирует» их.

Теорема Гаусса: симметричный шум должен быть нормальным

В рассуждении выше мы *приняли* нормальность шума как гипотезу. Поразительный факт — доказанный самим К. Ф. Гауссом, в чью честь и названо это распределение, — состоит в том, что эту гипотезу можно было бы и не принимать: она *вытекает* из требования, чтобы оценкой максимума правдоподобия было именно выборочное среднее.

⚠ Теорема 3.6. Характеризация Гаусса (1809)

Пусть случайные величины $\xi_1, \dots, \xi_n$ независимы, одинаково распределены и имеют плотность f , симметричную относительно нуля ($f(-x) = f(x)$), дважды дифференцируемую, не обращающуюся в ноль. Если для любого $n \geq 2$ и любой реализации $X_i = \mu + \xi_i$ оценкой максимума правдоподобия параметра μ является выборочное среднее $\bar{X}$, то f есть плотность нормального распределения с нулевым средним.

Доказательство. Логарифмическая производная плотности $\rho(x) = -f'(x)/f(x)$ играет роль «силы», возвращающей оценку к точке. Условие максимума ОМП

$$\sum_{i=1}^n \rho(X_i - \hat{\mu}) = 0 \quad (29)$$

должно совпадать с уравнением для среднего $\sum_{i=1}^n (X_i - \hat{\mu}) = 0$ при любых наблюдениях. Отсюда вытекает, что $\rho(x) = cx$ для некоторой константы $c > 0$, то есть $f'(x)/f(x) = -cx$. Интегрирование даёт $\ln f(x) = -cx^2/2 + \text{const}$, то есть $f(x)$ — плотность нормального распределения с нулевым средним и дисперсией $1/c$. Полный вывод и обсуждение этого свойства Гаусса (*характеризации нормальности через оптимальность среднего*) можно найти в стандартных университетских курсах математической статистики. ▫

💡 Пример 3.7. Применение к эксперименту Гальтона

В стилизованной реконструкции (рис. 3.5) среднее по $n = 787$ ответам составило $\bar{X} \approx 1196$ фунтов при истинном весе $\mu = 1198$ фунтов. Это не означает, что отдельный наблюдатель угадывает вес быка точно: разброс отдельных оценок составляет около $\sigma \approx 75$ фунтов. Однако стандартная погрешность *среднего*

$$\sigma_{\bar{X}} = \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \approx \frac{75}{\sqrt{787}} \approx 2,7 \quad (30)$$

фунта, и расхождение в 2 фунта вполне укладывается в одну стандартную погрешность. «Мудрость толпы» —

ℹ Замечание

Теорема Гаусса показывает: предположение о нормальности шума и использование среднего арифметического в качестве оценки — это *одно и то же*, две стороны одной медали. Если в практической задаче мы по каким-то соображениям усредняем измерения — мы неявно соглашаемся, что наши ошибки имеют гауссов характер.

следствие закона больших чисел, оформленного как ОМП для гауссовой модели (3.9).

Резюме параграфа

Что мы увидели. Две очень разные задачи — оценка доли голосов в опросе и оценка истинного значения по зашумлённым измерениям — решаются по *одной и той же схеме*:

1. Выписываем *вероятностную модель* порождения данных (Бернулли — в первой задаче; гауссов шум — во второй).
2. Записываем *функцию правдоподобия* $L(\theta)$ — вероятность наблюдать имеющиеся данные при параметре θ .
3. Находим точку максимума $\hat{\theta} = \arg \max L(\theta)$ дифференцированием по параметру.
4. Строим вокруг $\hat{\theta}$ *доверительный интервал* — с помощью неравенства Чебышёва (грубо, но универсально) или центральной предельной теоремы (точно, но при больших n).

В обеих задачах оценкой максимума правдоподобия оказалось одно и то же выражение — *выборочное среднее*. Это не случайно: за этим стоит теорема Гаусса (3.6), связывающая среднее арифметическое с гауссовым шумом, а в более общем плане — работы Фишера и Ле Кама об асимптотической оптимальности ОМП.

Что дальше. Возникающая задача минимизации суммы квадратов перестаёт быть тривиальной, как только величина μ перестаёт быть скалярной и начинает зависеть от других переменных — скажем, мы хотим найти, *как время падения связано с высотой* (Галилей), *как период обращения планеты связан с радиусом её орбиты* (Кеплер) или, в общем случае, *какова наилучшая линейная зависимость между y и вектором признаков $x \in \mathbb{R}^d$* . Этот сюжет — *линейная регрессия* — будет в следующем параграфе. А затем мы шаг за шагом, не теряя нити, дойдём до глубоких нейронных сетей.

! Задачи для самостоятельной работы

1. В социологическом опросе $n = 400$, за кандидата A ответили $k = 220$. Постройте 90 % доверительный интервал для доли p (а) по неравенству Чебышёва; (б) по ЦПТ. Можно ли утверждать, что A победит с вероятностью ≥ 90 %?
2. Игральную кость подбросили $n = 600$ раз. Выпало $k = 120$ шестёрок. Найдите оценку максимума правдоподобия вероятности p выпадения шестёрки и постройте 95 % ДИ. Согласуется ли результат с гипотезой «кость честная»?
3. Запрограммируйте метод Монте-Карло для оценки числа π . Постройте график зависимости абсолютной ошибки $|\hat{\pi}_N - \pi|$ от N в двойной логарифмической шкале и убедитесь, что наклон близок к $-1/2$.
4. Покажите, что для случайных величин $X_1, \dots, X_n$ с плотностью Лапласа $f(x; \mu) = \frac{1}{2} \exp(-|x - \mu|)$ оценкой максимума правдоподобия параметра μ является *выборочная медиана*, а не среднее. (Указание: суммируйте $-\ln f$ и минимизируйте.) Чем это объясняет известную «робастность» медианы по отношению к выбросам?
5. * Докажите теорему 3.6 полностью. Указание: подставьте $X_2 = \dots = X_n = 0$, тогда из условия $\sum \rho(X_i - \hat{\mu}) = 0$ при $\hat{\mu} = X_1/n$ выведите функциональное уравнение для ρ .
6. * Метод Монте-Карло для интеграла. Пусть требуется оценить $I = \int_0^1 g(x) dx$, где g — известная функция. Покажите, что оценкой максимума правдоподобия в подходящей вероятностной модели является $\hat{I}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(U_i)$, $U_i \sim U(0, 1)$. Применяя ЦПТ, оцените сверху число точек, при котором ошибка приближённого вычисления $\int_0^1 e^{-x^2} dx$ не превзойдёт 10^{-3} с уверенностью 95 %.