

ブートストラップ法

樋口さぶろお <https://hig3.net>

龍谷大学大学院 先端理工学研究科 数理・情報科学コース

計算科学特論 L16(2026-08-03 Mon)

最終更新: Time-stamp: "2026-08-03 Mon 17:46 JST hig"

今日の目標

- ブートストラップ法のアイデアを説明できる
- ブートストラップ法でバイアス補正できる
- 基本的ブートストラップ信頼区間を求められる



L15-Q1

TA Prob and Sol: 母分散の両側カイ二乗検定

あるファーストフードチェーンのポテトフライ S の重さは、母分散が 4g^2 であることが定められているという。

トレーニング中のアルバイトの人に、ポテトフライ S サイズを 9 個作ってもらったところ、重さは下のようだった (単位は g)。

76, 76, 76, 76, 80, 84, 84, 84, 84.

このアルバイトの作るポテトフライ S の重さの母分散 σ^2 は、 2^2 と異なるか？ 重さが正規分布にしたがうと仮定し、有意水準 $\alpha = 0.05$ で、母分散のカイ二乗検定で判定しよう。

略解

- ① 有意水準 $\alpha = 0.05$ で、母分散の両側カイ二乗検定を行う。

- ② 帰無仮説を, 「アルバイトの…重さの正規分布の母分散 σ^2 は, 2^2 に等しい」とする
- ③ サイズ n の標本の不偏標本分散を s^2 とすると, 量 $Y = (n-1) \times \frac{s^2}{2^2}$ は, 自由度 $n-1$ のカイ二乗分布に従う. この量を検定統計量として用いる.
- ④ この標本に対して $Y = (n-1) \times \frac{s^2}{2^2} = (9-1) \cdot \frac{16}{2^2} = 32$.
- ⑤ カイ二乗分布表より, この値は, 棄却域 $Y < \chi^2_{n-1, 1-\frac{\alpha}{2}} = 2.180$, $Y > \chi^2_{n-1, \frac{\alpha}{2}} = 17.53$ に含まれるので帰無仮説を棄却する. 母分散は 2^2 と異なると結論する.

棄却域に含まれなかったときの書き方は、「棄却域に含まれないので帰無仮説は棄却できない. 母分散と 2^2 が異なるとは結論できない.」

L15-Q2

TA Prob and Sol:F 検定

同じチェーン店のドーナツ屋さんの、各支店で製造されるオールドファッションドーナツの重さは正規分布にしたがうという (母平均値や母分散は支店によってことなるかも).

支店1でオールドファッションドーナツのサイズ10の標本を得たところ、不偏標本分散は $28g^2$ だった.

支店2でオールドファッションドーナツのサイズ5の標本を得たところ、不偏標本分散は $4g^2$ だった.

2つの支店で、分布の母分散が異なるかどうか、有意水準 $\alpha = 0.05$ で検定しよう.

略解

- ① 有意水準 $\alpha = 0.05$ で,
- ② 母分散の比の両側 F 検定を行う
- ③ 帰無仮説 H_0 を, 「…ドーナツの重さの母分散は等しい: $\sigma_1^2/\sigma_2^2 = 1$ 」とする. すなわち, 対立仮説 H_1 を, $\sigma_1^2/\sigma_2^2 \neq 1$ とする.
- ④ 標本サイズを n_1, n_2 , 不偏標本分散を S_1^2, S_2^2 とすると, 量 $F = \frac{S_1^2}{S_2^2}$ は, 帰無仮説のもとで自由度 $(n_1 - 1, n_2 - 1)$ の F 分布に従う. この量を検定統計量として用いる.
- ⑤ この標本に対して $F = \frac{28}{4} = 7$ である.
- ⑥ F 分布表より, $F_{\alpha/2}(10 - 1, 5 - 1) = 8,905 > 7 = F$. また, $F_{1-\alpha/2}(10 - 1, 5 - 1) < 7$. よって帰無仮説は棄却できない. 母分散が異なるとは結論できない.

L15-Q3

TA Prob and Sol: 分散分析

次のデータに対して、1元配置の分散分析表を作ろう．有意水準 $\alpha = 0.05$ でF検定しよう．

水準

A_1	11	9	12	9	9
A_2	10	17	18	20	10
A_3	25	23	21	22	24

略解

水準の数は $\ell = 3$ ，各水準の繰り返し数は $r = 5$ である．

$$\bar{y}_{1\bullet} = 10, \bar{y}_{2\bullet} = 15, \bar{y}_{3\bullet} = 23, \bar{y}_{\bullet\bullet} = 16.$$

級間平方和（級間変動）は

$$S_A = \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^5 (\bar{y}_{j\bullet} - \bar{y}_{\bullet\bullet})^2 = 5 \sum_{j=1}^3 (\bar{y}_{j\bullet} - \bar{y}_{\bullet\bullet})^2 = 430 \text{ である.}$$

$$\text{残差平方和（誤差変動）は } S_E = \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^5 (y_{ji} - \bar{y}_{j\bullet})^2 = 106 \text{ である.}$$

全平方和（全変動）は $S_T = \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^5 (y_{ji} - \bar{y}_{..})^2 = 430 + 106 = 536$ である．

分散分析表は次の通りである．

要因	平方和	自由度	平均平方	F_0
級間 A	430	$3 - 1 = 2$	$430/2 = 215$	$215/(53/6) = 24.34$
残差 E	106	$15 - 3 = 12$	$106/12 = 53/6$	
全 T	536	$15 - 1 = 14$		

各水準のデータが互いに独立で，共通の分散をもつ正規分布に従うと仮定する．帰無仮説を $H_0: \mu_1 = \mu_2 = \mu_3$ とする． H_0 のもとで，検定統計量 $F = \frac{S_A/2}{S_E/12}$ は自由度 $(2, 12)$ の F 分布に従い，その実現値は $F_0 = 24.34$ である． $F_0 = 24.34 > F_{0.05}(2, 12) = 3.885$ より，帰無仮説は棄却される．したがって，少なくとも 1 つの水準の母平均値が他と異なると結論する．

L15-Q4

TA Prob and Sol:1 元分散分析

次のデータに対して、1元配置の分散分析表を作ろう．有意水準 $\alpha = 0.05$ で、F 分布を用いた水準間の差の検定を行おう．

水準

A_1	10	10	10	10	10
A_2	11	17	18	18	11
A_3	25	23	21	22	24

略解

水準の数は $\ell = 3$ ，各水準の繰り返し数は $r = 5$ である．

$$\bar{x}_{1\bullet} = 10, \bar{x}_{2\bullet} = 15, \bar{x}_{3\bullet} = 23, \bar{x}_{\bullet\bullet} = 16.$$

級間平方和（級間変動）は

$$S_A = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^5 (\bar{x}_{i\bullet} - \bar{x}_{\bullet\bullet})^2 = 5 \sum_{i=1}^3 (\bar{x}_{i\bullet} - \bar{x}_{\bullet\bullet})^2 = 430 \text{ である.}$$

残差平方和（誤差変動）は $S_E = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^5 (x_{ij} - \bar{x}_{i\bullet})^2 = 64$ である．

全平方和（全変動）は $S_T = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^5 (x_{ij} - \bar{x}_{\bullet\bullet})^2 = 430 + 64 = 494$ である．

分散分析表は次の通りである．

要因	平方和	自由度	平均平方	F_0
A	430	$3 - 1 = 2$	$430/2 = 215$	$215/(16/3) = 40.31$
E	64	$3 \times (5 - 1) = 12$	$64/12 = 16/3$	
計	494	$15 - 1 = 14$		

各水準のデータが互いに独立で、共通の分散をもつ正規分布に従うと仮定する．帰無仮説を $H_0: \mu_1 = \mu_2 = \mu_3$ とする． H_0 のもとで、検定統計量 $F = \frac{S_A/2}{S_E/12}$ は自由度 (2, 12) の F 分布に従い、その実現値は $F_0 = 40.31$ である． $F_0 = 40.31 > F_{0.05}(2, 12) = 3.885$ より、帰無仮説は棄却される．したがって、少なくとも 1 つの水準の母平均値が他と異なると結論する．

ここまで来たよ

15 分散分析と多変量分散分析 ANOVA and MANOVA

16 ブートストラップ法

- 経験分布・差込推定量
- ブートストラップ法
- 標準誤差とバイアス補正
- パーセンタイルブートストラップ信頼区間
- 基本的ブートストラップ信頼区間
- ライブラリとその他の手法

経験累積分布関数 (empirical cumulative distribution function)

統計量 θ が、確率密度関数 $f(x)$ を使って書かれてるなら、とりあえず標本から $\hat{f}$ を作れば、 θ の標本での対応物が計算できる。

確率密度関数より相手にしやすい累積分布関数で考える。

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(x') \, dx' = P(X \leq x)$$

定義 (経験分布)

サイズ n の標本 $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ に対して、次を**経験累積分布関数**という。
これの定める分布を経験分布という。

$$\hat{F}(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \begin{cases} 1 & (x \geq x_i) \\ 0 & (\text{他}) \end{cases}$$

$\hat{F} \rightarrow F$ as $n \rightarrow +\infty$.

$\hat{f}(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \delta(x - x_i)$ といったくなるが、これは $n \rightarrow +\infty$ で $f(x)$ に

Quiz(経験分布)

未知の母分布から、 X のサイズ $n = 4$ の標本 9, 9, 10, 12 を得た.

- ① 経験累積分布関数のグラフを描こう.
- ② '経験確率密度関数' のグラフを雰囲気描こう.
- ③ 経験分布の母平均値を求めよう.
- ④ 経験分布の母中央値を求めよう.

例: へんな分布とへんな量 I

例として, 次の確率密度関数 (偶関数でない!) を持つ連続型確率変数 X を考える (この分布の特殊性は使わない).

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{4} & (-2 \leq x < 0) \\ \frac{1}{2} & (0 \leq x < 1) \\ 0 & (\text{他}) \end{cases}.$$

推定したい, 母分布の量 θ として, 母平均値, 母分散, 母中央値を考える. これらに対応する推定量を $\hat{\theta}$ と書く.

$$\begin{aligned} E[X] &= -\frac{1}{4}, \\ V[X] &= \frac{5}{6} - \left(-\frac{1}{4}\right)^2 = \frac{37}{48}, \\ \text{Median}[X] &= 0. \end{aligned}$$

うまくいってるところ！

$\hat{\theta}$ が θ の不偏推定量であるとは、 $E[\hat{\theta}] = \theta$ であること。

- X の標本平均値 $\bar{X} = \frac{1}{n}(X_1 + \dots + X_n)$ は、母平均値 $E[X]$ の不偏推定量。すなわち、 $E[\bar{X}] = E[X]$ 。
- X の不偏標本分散 $S^2 = \frac{1}{n-1}[\dots]$ は、母分散 $V[X]$ の不偏推定量。すなわち、 $E[S^2] = V[X]$ 。

定義 (母ナントカ θ の推定量 $\hat{\theta}$ のバイアス)

バイアス=差の母期待値 $b = E[\hat{\theta} - \theta] = E[\hat{\theta}] - \theta$ 。

推定量が**不偏** unbiased $\Leftrightarrow$ バイアス $b = 0$

うまくいってないところ

- $\bar{X}$ ってどのくらいの精度? → 区間推定があればいい → 厳密な区間推定は母分布が正規分布のときしかできない! いま左右対称になる?
- S^2 ってどのくらいの精度? → 区間推定があればいい → 厳密な区間推定は母分布が正規分布のときしかできない!
- なにが 母 $\text{Median}[X]$ の不偏推定量? 標本 Median でいいの? 左にずれそうな気がする
 - ▶ バイアス $\text{bias } b = E[\text{標本 Median}] - \text{Median}[X]$.
 - ▶ 不偏 $\Leftrightarrow b = 0$.
- 標準誤差
 - ▶ $\text{SE}^2 = E[(\text{標本 Median} - E[\text{標本 Median}])^2]$.
 - ▶ 標本平均値, 標本期待値の標準誤差なら, 不偏標本分散で書けるけど, それ以外はわからない.
- 母ナントカの信頼区間 正規分布じゃないから理論がない. 母平均値母分散以外には理論がない.
 - ▶ 母 Median の信頼区間はたぶん左右非対称になる

経験分布の母期待値は Monte Carlo 近似できる

X_i が独立に経験累積分布 $\hat{F}$ にしたがうとき,

$$E_{\hat{F}}[g(X_1, \dots, X_k)] = \frac{1}{n^k} \sum_{i_1=1}^n \cdots \sum_{i_k=1}^n g(x_{i_1}, \dots, x_{i_k})$$

を, もとの分布 F に対する $E_F[g(X_1, \dots, X_k)]$ の**差込推定量**, **プラグイン推定量**という.

命題 (Monte Carlo 近似)

母期待値は, 標本のサイズが大きいとき, 大数の法則により次で近似できる. $N \rightarrow +\infty$ で, 真の値に収束する.

$$E_{\hat{F}}[g(X_1, \dots, X_k)] \approx \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N g(x_1(j), \dots, x_k(j))$$

$(x_1(j), \dots, x_k(j))$ は経験分布から抽出した (n^k 項から等確率で抽出した) j 個目の組.

ここまで来たよ

15 分散分析と多変量分散分析 ANOVA and MANOVA

16 ブートストラップ法

- 経験分布・差込推定量
- **ブートストラップ法**
- 標準誤差とバイアス補正
- パーセンタイルブートストラップ信頼区間
- 基本的ブートストラップ信頼区間
- ライブラリとその他の手法

ブートストラップ法の主要アイデア I

母分布の情報を使いたい. 母分布は経験分布と似ているだろう, 推定量の分布は, 標本からさらに繰り返し標本抽出して Monte Carlo 近似で求めちゃえ, というのがブートストラップ法のアイデア.

ブートストラップ標本 I

ブートストラップ標本とは, 経験分布から抽出したサイズ $k = n$ の標本 (n は経験分布の元になった標本のサイズ).

別の言い方: 標本を母集団と思い直して復元抽出して孫標本.

ふつう, 多数個 (B 個) のブートストラップ標本を考える.

(母集団) : (標本) $\approx$ (標本) : (ブートストラップ標本)

親 : 子 $\approx$ 子 : 孫

親 $\xrightarrow{\text{標本抽出}}$ 子

真のパラメタ θ – 標本からの推定値 $\hat{\theta}$

$\approx$ 標本からの推定値 $\hat{\theta}$ – ブートストラップ推定値 $\hat{\theta}^*$

ブートストラップ標本
サイズ n $b=1$ $\hat{\theta}_1^*$

母集団

標本 サイズ n θ $\hat{\theta}$

2

 $\hat{\theta}_2^*$ $\vdots$ $\vdots$ B $\hat{\theta}_B^*$ B

ブートストラップ推定値とその推定

定義 (ブートストラップ推定値)

ブートストラップ標本を抽出する試行を考えたとき, その母期待値 $E[\hat{\theta}^*]$ をブートストラップ推定値という.

命題 (ブートストラップ推定値の Monte Carlo 近似)

ブートストラップ推定値は, Monte Carlo 近似できる. B 個のブートストラップ標本 b の統計量 $\hat{\theta}_b^*$ を求めて, 標本期待値をとる.

$$\hat{\theta}^* = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^B \hat{\theta}_b^*$$

B : ブートストラップ反復回数

ここまで来たよ

15 分散分析と多変量分散分析 ANOVA and MANOVA

16 ブートストラップ法

- 経験分布・差込推定量
- ブートストラップ法
- 標準誤差とバイアス補正
- パーセンタイルブートストラップ信頼区間
- 基本的ブートストラップ信頼区間
- ライブラリとその他の手法

推定値の標準誤差

ブートストラップ推定値の標準誤差は、ブートストラップ標本から Monte Carlo 近似で一律に計算できちゃう.

命題

$$(\text{標準誤差})^2 = \frac{1}{B-1} \sum_{b=1}^B (\hat{\theta}_b^* - \hat{\theta}^*)^2.$$

バイアス, バイアス補正值

母集団のパラメタ θ の推定量 $\hat{\theta}$ を考える.

バイアス $b := E[\hat{\theta} - \theta] = E[\hat{\theta}] - \theta$.

真の値 $\theta = E[\hat{\theta}] - b$

$\approx \hat{\theta} - (\text{ブートストラップ推定値 } \hat{\theta}^* - \text{標本推定値 } \hat{\theta})$

$= 2 \times \hat{\theta} - \hat{\theta}^* \dots$ バイアス補正 (された) 値

ブートストラップ推定値 $\hat{\theta}^*$ は, ブートストラップ反復回数 $B = 50-300$ の Monte Carlo 近似で求める.

ブートストラップ推定値が標本推定値より左に出たら, 補正值は標本推定値より右に置け. 標本推定値がもともと左にでちゃってただろうから, その分戻す, という考え方.

L16-Q1

Quiz(ブートストラップ標本抽出)

ある未知の母集団の中央値 θ を考える．サイズ $n = 6$ の標本抽出した．

$$\{8, 8, 8, 10, 13, 13\}.$$

$B = 3$ のブートストラップ標本を生成したところ，

$\{8, 8, 10, 10, 13, 13\}, \{8, 8, 8, 8, 8, 13\}, \{8, 8, 8, 8, 10, 13\}$ となった．

- ① 標本中央値 $\hat{\theta}$ を求めよう．
- ② ブートストラップ標本の標本中央値 $\hat{\theta}_1^*, \hat{\theta}_2^*, \hat{\theta}_3^*$ を求めよう．
- ③ ブートストラップ標本の標本中央値 $\hat{\theta}_b^*$ のブートストラップ標本平均値 $\hat{\theta}^*$ を求めよう．
- ④ バイアス補正を行った母中央値の推定値を求めよう．
- ⑤ 母中央値の推定値の標準誤差を推定しよう

L16-Q2

Quiz(ブートストラップ法)

(理解チェックのための不自然なブートストラップ標本です)

標本で, 推定量 $\hat{\theta} = 10$ となった. $B = 20$ ブートストラップ標本で, 推定量 $\hat{\theta}^*$ は, 大きさの順に,

8, 8, 11, 11, 11, 11, 11, 11, 11, 11, 11, 11, 11, 11, 11, 11, 11, 11, 12, 12, 13, 13
となった.

- ① バイアスを推定しよう.
- ② バイアス修正を行った推定値を求めよう.
- ③ 標準誤差を推定しよう.
- ④ $\alpha = 0.1$ のパーセンタイルブートストラップ信頼区間を求めよう.
- ⑤ $\alpha = 0.1$ の基本的ブートストラップ信頼区間を求めよう.

ここまで来たよ

15 分散分析と多変量分散分析 ANOVA and MANOVA

16 ブートストラップ法

- 経験分布・差込推定量
- ブートストラップ法
- 標準誤差とバイアス補正
- パーセンタイルブートストラップ信頼区間
- 基本的ブートストラップ信頼区間
- ライブラリとその他の手法

パーセンタイルブートストラップ信頼区間

パーセンタイルブートストラップ信頼区間を求める手続き

パラメタ θ の推定値 $\hat{\theta}$ の信頼係数 $1 - \alpha = 0.99$ の信頼区間を求める.

- ① 標本からブートストラップ標本 $b = 1, \dots, B$ を作り, ブートストラップ推定値 $\hat{\theta}_b^*$ を得る.
- ② $\hat{\theta}_b^*$ を大きさの順に並べかえたものを, $\hat{\theta}_{(1)}^* \leq \dots \leq \hat{\theta}_{(B)}^*$ のように添字に括弧をつけて書く.
- ③ 両側の極端な $B \cdot \frac{\alpha}{2}$ 個を取り除いた

$$\hat{\theta}_{(B \cdot \frac{\alpha}{2})}^* \leq \theta \leq \hat{\theta}_{(B \cdot (1 - \frac{\alpha}{2}))}^*$$

がパーセンタイルブートストラップ信頼区間 (percentile bootstrap confidence interval) である.

パーセンタイルブートストラップ信頼区間の根拠

- 母分布=経験分布 と思うと, 得られる $\hat{\theta}$ のうち $1 - \alpha$ が収まる区間を与えている.
- バイアスの推定のときに使った, 「子から親の性質を知るには, 子と孫の関係を逆に使う」ことをしていない.
 - ▶ その結果, 真の θ のまわりの $\hat{\theta}$ の分布が左右対称であるときのみ, 正確と期待できる.
 - ▶ パラメタを $\xi = h(\theta)$ のように変換するときの性質がよいので, 上の欠点にもかかわらず使われることがある.
- 歴史的には, 当初, 深く考えずに提案された (?)

ここまで来たよ

15 分散分析と多変量分散分析 ANOVA and MANOVA

16 ブートストラップ法

- 経験分布・差込推定量
- ブートストラップ法
- 標準誤差とバイアス補正
- パーセンタイルブートストラップ信頼区間
- 基本的ブートストラップ信頼区間
- ライブラリとその他の手法

基本的ブートストラップ信頼区間 I

母分布で、区間内が $1 - \alpha$ になるように調節された、両端の位置を $t(\frac{\alpha}{2}), t(1 - \frac{\alpha}{2})$ とおく.

$$1 - \alpha = P(t(\frac{\alpha}{2}) \leq \hat{\theta} - \theta \leq t(1 - \frac{\alpha}{2})).$$

不等式を母分布の量 θ について解いて,

$$1 - \alpha = P(\hat{\theta} - t(1 - \frac{\alpha}{2}) \leq \theta \leq \hat{\theta} - t(\frac{\alpha}{2})).$$

を, $\hat{\theta}_b^* - \hat{\theta}$ の下側 $\frac{\alpha}{2}$ の位置の値で置き換える.

$$t(\frac{\alpha}{2}) = (\hat{\theta} - \theta) \text{ の下側 } \frac{\alpha}{2} = \hat{\theta} \text{ の下側 } \frac{\alpha}{2} - \theta \simeq \hat{\theta}_{(B, \frac{\alpha}{2})}^* - \hat{\theta}$$

定義 (基本的ブートストラップ信頼区間)

$$\hat{\theta} - (\hat{\theta}_{(B \cdot (1 - \frac{\alpha}{2}))}^* - \hat{\theta}) \leq \theta \leq \hat{\theta} - (\hat{\theta}_{(B \cdot \frac{\alpha}{2})}^* - \hat{\theta})$$

ブートストラップ標本で左にでがちだったら, もともとの標本推定値が左にでてるだろうから, そのずれくらい, 右に信頼区間を広げておかなければいけない.

ここまで来たよ

15 分散分析と多変量分散分析 ANOVA and MANOVA

16 ブートストラップ法

- 経験分布・差込推定量
- ブートストラップ法
- 標準誤差とバイアス補正
- パーセンタイルブートストラップ信頼区間
- 基本的ブートストラップ信頼区間
- ライブラリとその他の手法

ライブラリと、ブートストラップと関係する手法

Python ライブラリ

- resample NumPy 配列向けの resampling ユーティリティ 自分で統計量を定義したい場合
- ブートストラップ信頼区間の計算 <https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.stats.bootstrap.html>, method='percentile', 'basic', or 'BCa'
- https://ogrisel.github.io/scikit-learn.org/sklearn-tutorial/modules/generated/sklearn.cross_validation.Bootstrap.html

ブートストラップと関係する手法

- jack knife 法
- cross validation
- bagging, b for bootstrap