で「ブーツ」

リサンプリング統計学
―ブーツストラップとジャックナイフ

三中信宏
minaka@affrc.go.jp
http://cse.niaes.affrc.go.jp/minaka/

計算統計学の 1 つの手法である「ブーツストラップ法」を R で実行するソースプログラムをつくってみました．この手法は，系統推定の業界でも，系統樹の統計学的な誤差を評価するために幅広く用いられています．下記は「リクツをわかってもらう」ためのプログラムですので，冗長なところもあるのですが，ひとつずつ入力すると，ブーツストラップ法やジャックナイフ法などの標本再抽出法が「いったい何をしているのか」がわかるように書いてみました. 余裕のある人は, R を用いて実習してみてください. ※「R でブーツ」というタイトルは，下記を最初に html 化していただいた久保拓弥（北大）さんのネーミングを拝借しました.

ブーツストラップ法：経験的密度関数・信頼区間・誤差評価

「ブーツストラップ」とは計算統計学のひとつの手法で，データからの無作為再抽出を繰り返すことにより，推定量（たとえば標本平均のような）の誤差（バラツキ）を評価したり，密度関数を経験的に推定したりする．特定のパラメトリックな確率分布（たとえば正規分布のような）を前提とせず，むしろデータそのものから推定量の確率分布を導き，誤差評価をしたり，信頼区間をつくろうというノンパラメトリックな「精神」の発露である.

以下では，R を用いて，この「ブーツストラップ精神」なるものを体験してみよう.

●数列テストデータによるブーツストラップ原理の説明

```
> data <- c(0,1,2,3,4,5,6,7,8,9)
  # 数列 {0,1,2,...,9} をテストデータとして data に格納
> var(data)   # data の分散
[1] 9.166667
```

ここで var(data) は分散の不偏推定値（平方和 / 自由度）であることに注意．下記に検算結果を記す.

```
> deviation <- numeric(10)
        # deviation を長さ 10 の数値ベクトルとする
> for (i in 1:10) deviation[i] <- data[i] - mean(data)
        # 偏差＝データ－平均を求め deviation に格納
> ms <- (sum(deviation^2))/(10-1)
        # 分散＝平方和 / 自由度を ms に格納
> ms    # var(data) との一致を確認
[1] 9.166667
> var(data)/10        # data の標本平均の分散
[1] 0.9166667

> sample(data, 10, replace=T)
  # data から重複を許して 10 標本を無作為再抽出（ブーツストラップ）
 [1] 7 7 5 5 3 7 4 8 9 6
  # 以下，再抽出を繰り返してみる
> sample(data, 10, replace=T)
 [1] 2 1 7 3 0 2 4 8 5 0
> sample(data, 10, replace=T)
 [1] 4 6 7 1 4 7 7 8 4 5
> sample(data, 10, replace=T)
 [1] 9 8 1 7 5 0 5 7 5 7
> sample(data, 10, replace=T)
 [1] 3 2 0 8 7 1 2 4 7 7
> sample(data, 10, replace=T)
 [1] 6 7 1 4 9 5 8 5 5 9

> mean(data)          # 元データ（data）の標本平均
[1] 4.5
> mean(sample(data, 10, replace=T))        # ブーツストラップ 1 の平均
[1] 4.8
> mean(sample(data, 10, replace=T))        # ブーツストラップ 2 の平均
[1] 5.7
> mean(sample(data, 10, replace=T))        # 以下，同じ操作.
[1] 3.5
> mean(sample(data, 10, replace=T))
[1] 5.4
```

> bootsrtap <- numeric(10)

bootstrap を長さ 10 の数値ベクトルとしてオブジェクト定義

> for (i in 1:10) bootstrap[i] <- mean(sample(data, 10, replace=T))

10 回のブーツストラップ反復による平均値を bootstrap に格納

> bootstrap

計算結果の表示

[1] 3.4 5.0 5.2 4.4 4.3 4.6 4.8 3.8 5.3 3.8

> mean(bootstrap) # 平均

[1] 4.46

> var(bootstrap) # 分散（上で求めた分散推定値よりもかなり小さい）

[1] 0.4115556

> bootstrap <- numeric(1000)

> for (i in 1:1000) bootstrap[i] <- mean(sample(data, 10, replace=T))

ブーツストラップ反復の回数を 1000 回にしてみる

> var(bootstrap) # 分散（100 回反復のときよりも大きい）

[1] 0.7411788

●正規乱数をデータとする事例――標本平均のブーツストラップ誤差評価

> data <- c(rnorm(1000, mean=0, sd=1))

標準正規分布 N(0,1) からの 1000 無作為標本を data に格納

> data # data の中身

[1] 0.235074605 -1.356050398 0.267868209 0.087841559 1.012879979

//

[996] 1.788910285 -1.358704507 0.035108314 0.708958886 0.359765422

> mean(data)

[1] 0.01827712 # data の標本平均

> sample(data, 1000, replace=T)

data から重複を許して 1000 個の標本を無作為再抽出（ブーツストラップ）

[1] 0.254607843 0.613191045 -1.417716944 -0.008924308 0.223065333

//

[996] 0.474348840 2.061109996 1.757300192 -0.410549785 -0.715952569

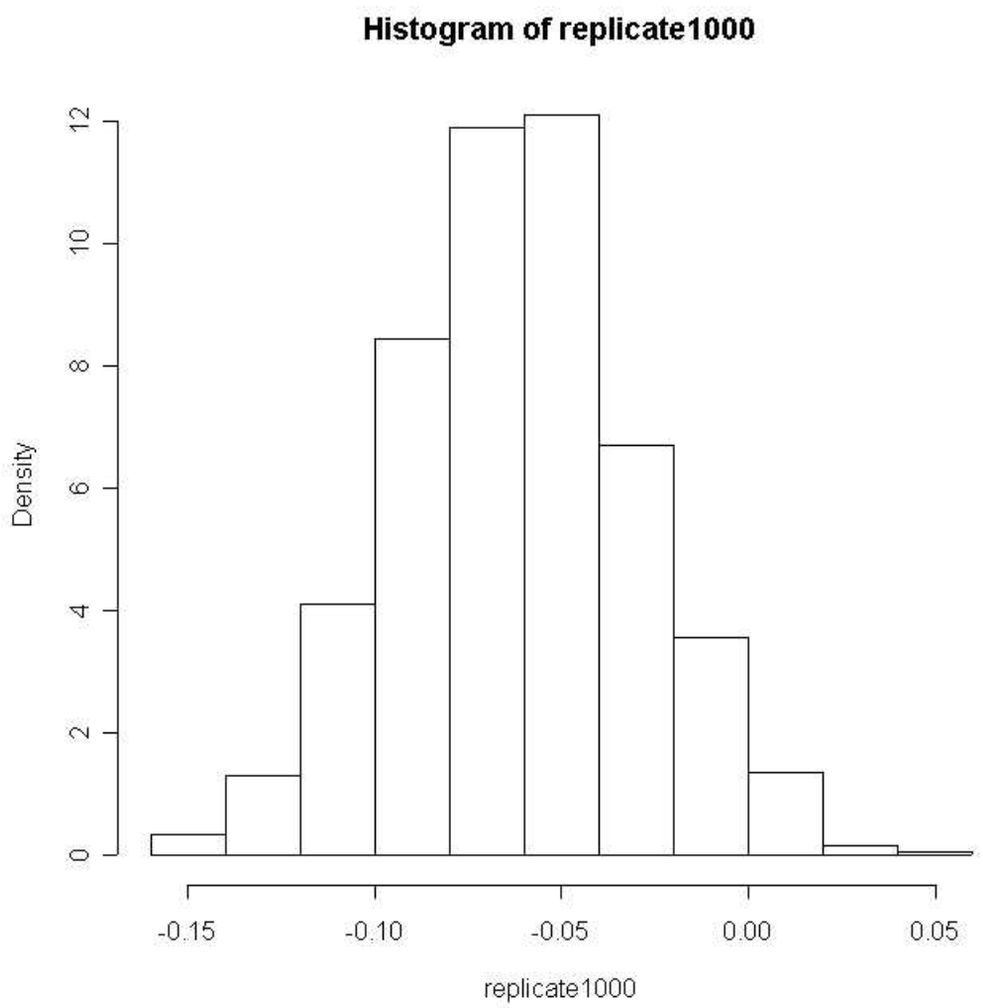
```
> set.seed(101)
  # 擬似乱数の seed を「101」に設定
> m <- 1000
  # ブーツストラップ反復回数を m=1000 に設定
> replicate1000 <- numeric(m)
  # "replicate1000" を長さ 1000 の数値ベクトルとしてオブジェクト定義
> for (i in 1:m) replicate1000[i] <- mean(sample(data, m, replace=T))
  # data からの m 回ブーツストラップを実行し，結果を replicate1000 に格納
> mean(replicate1000)
[1] 0.01801577          # ブーツストラップ平均
> var(replicate1000)
[1] 0.0009630001        # ブーツストラップ分散
> sd(replicate1000)
[1] 0.03103224          # ブーツストラップ標準偏差

> m <- 500              # ブーツストラップ反復を m=500 として実行
> replicate500 <- numeric(m)
> for (i in 1:m) replicate500[i] <- mean(sample(data, m, replace=T))
> mean(replicate500)
[1] 0.01753351
> var(replicate500)
[1] 0.002081382
> sd(replicate500)
[1] 0.04562217

> m <- 100              # ブーツストラップ反復を m=100 として実行
> replicate100 <- numeric(m)
> for (i in 1:m) replicate100[i] <- mean(sample(data, m, replace=T))
> mean(replicate100)
[1] 0.0378861
> var(replicate100)
[1] 0.00949725
> sd(replicate100)
[1] 0.09745383
```

m=100, 500, 1000 の結果をヒストグラム表示

```
> hist(replicate100, freq=F)
> hist(replicate500, density=25, freq=F, add=T)
> hist(replicate1000, density=25, angle=135, freq=F, add=T)
```

●ヒストグラムからの確率密度関数の推定と信頼区間の計算

ブーツストラップによって求められた推定量（ここでは標本平均）のバラツキをヒストグラムとして描画できたならば，それに基づいて確率密度関数を推定することが可能である．得られた経験的密度関数を用いて，推定量の信頼区間を設定することもできる．この密度関数の経験的推定には，ある基底関数（kernel）を用いたヒストグラムの平滑化（smoothing）という手法が用いられている．天下り式の確率密度関数をデータに当てはめるのではなく，むしろデータから逆に密度関数そのものを推定しようというスタンスを取る．



> library(MASS)

ライブラリー MASS をインストールする.

これは "*Modern Applied Statistics with S*" のためのライブラリー

> data <- c(rnorm(1000, mean=0, sd=1))

標準正規分布から 1000 乱数をデータとして data に格納

> set.seed(101)

擬似乱数シードを 101 に設定

> m <- 1000

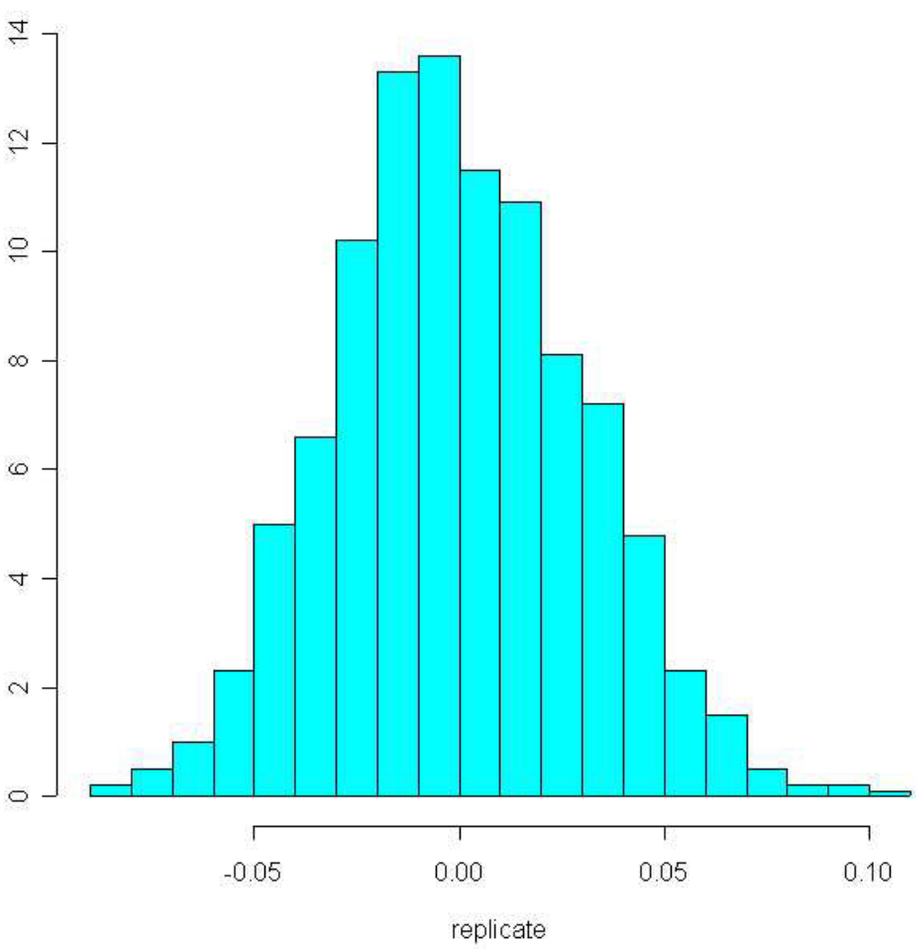
ブーツストラップ反復回数は m=1000 回

> replicate <- numeric(m)

replicate は長さ m のベクトル

> for (i in 1:m) replicate[i] <- mean(sample(data, m, replace=T))

data からのブーツストラップ計算



> mean(replicate) # 平均

[1] -0.008360919

> var(replicate) # 分散

[1] 0.001120811

> sd(replicate) # 標準偏差

[1] 0.03347851

> truehist(replicate, h=0.01)

得られた 1000 個のブーツストラップ値をヒストグラム表示

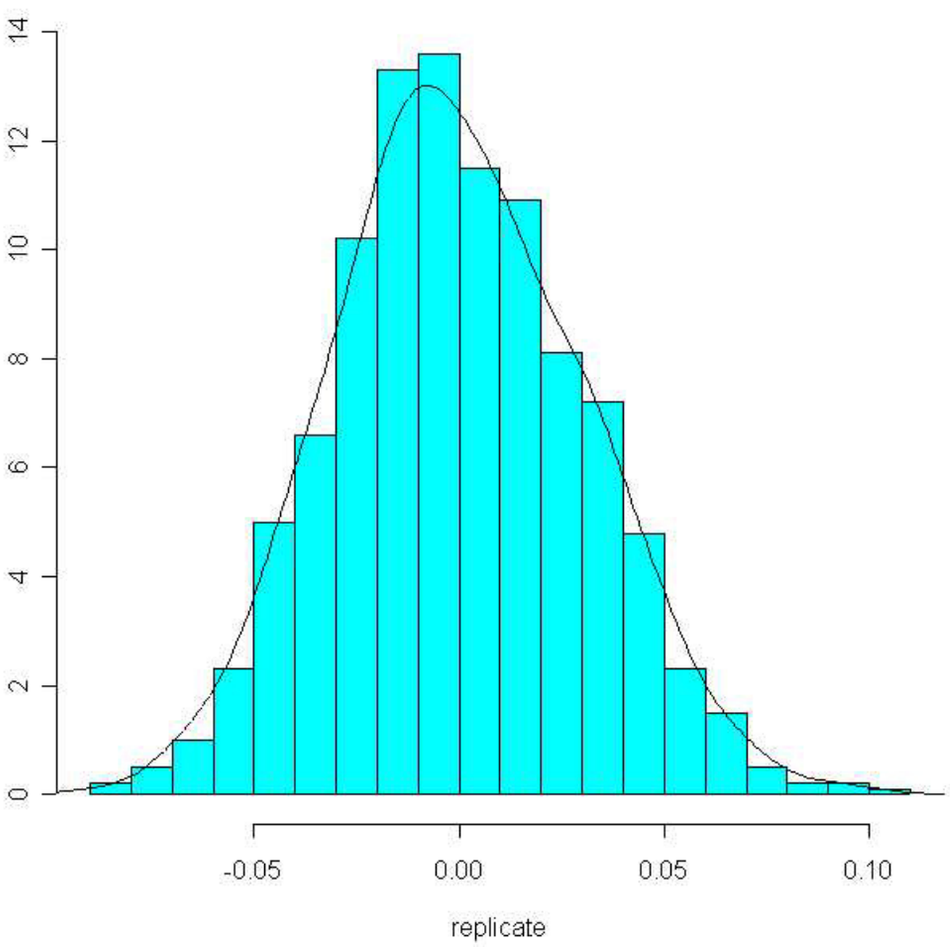
> lines(density(replicate, width="SJ-dpi", n=256))

このヒストグラムから経験的密度関数を推定する

> quantile(replicate, p=c(0.025, 0.975))

推定された密度関数から 5 %信頼区間を求める.

下側 2.5% 点と上側 2.5% 点は下記のように表示される.



```
      2.5%       97.5%
-0.07269752  0.05757690
```

コマンド「density」を用いたこの密度関数推定は，ブーツストラップのみにかぎらず，もっと広く利用できる．

●コマンド「boot」の利用

Ｒにはブーツストラップに特化したコマンド「boot」がライブラリに用意されている．上述の操作は，この「boot」を用いることにより，格段に単純化される．たとえば，数列データを例とする，ブーツストラップ計算は下記の通り：

```
> library(boot)
  # ライブラリ「boot」をインストールする
> data <- c(0,1,2,3,4,5,6,7,8,9)
  # 数列｛0,1,2,...,9｝を data に格納
> set.seed(101)
  # 乱数シードを「101」に設定
> boot(data, function(x, i)mean(x[i]), R=1000)
  # ブーツストラップの設定
```

１）「data」：
　　再抽出対象となるデータ名．ここでは "data".

２）「function(x, i)mean(x[i])」：
　　誤差評価を行なう統計量の関数指定．ここでは標本平均.

３）「R」：
　　ブーツストラップ反復回数．ここでは 1000 回.

以下は，計算結果：

```
ORDINARY NONPARAMETRIC BOOTSTRAP


Call:
boot(data = data, statistic = function(x, i) mean(x[i]), R = 1000)


Bootstrap Statistics :
    original  bias    std. error
t1*      4.5 -0.0101   0.9023204
```

「ブーツストラップ統計量」として出力されるのは，元データの平均（original）・ブーツストラップ反復から得られた平均の original からのバイアス（bias）・ブーツストラップから得られた標本平均の標準誤差（std. error）である．

なお「boot」は他にも多くの機能をもっており，上述のような，ノンパラメトリック・ブーツストラップだけでなく，パラメトリック・ブーツストラップ（モンテ・カルロ法の一種）も実行できる．詳細は help(boot) を参照していただきたい．

ジャックナイフ法による誤差評価

ジャックナイフによる誤差評価は，データからの重複を許さない（replace=F）再抽出の反復に基づく．したがって，反復回数を m，再抽出数を k（＜ m）で指定したとき，

```
> replicate <- numeric(m)
> for (i in 1:m) replicate[i] <- mean(sample(data, k, replace=F))
> var(replicate)
```

によって，標本平均の誤差を求めることができる．たとえば，下記のように：

```
> data <- c(0,1,2,3,4,5,6,7,8,9)
  # データ読みこみ
> m <- 10       # 再抽出回数
> k <- 9        # 除去数 1 の delete-one jackknife
> replicate <- numeric(m)
> for (i in 1:m) replicate[i] <- mean(sample(data, k, replace=F))
> var(replicate)
[1] 0.08079561

> m <- 10       # 再抽出回数
> k <- 5        # 半数除去の delete-half jackknife
> replicate <- numeric(m)
> for (i in 1:m) replicate[i] <- mean(sample(data, k, replace=F))
> var(replicate)
[1] 0.6204444
```

EOF