クロス・バリデーションを用いた平滑化ブートストラップ法による信頼区間に関するシミュレーション分析

難波, 明生

(Citation)
国民経済雑誌,201(4):77-88

(Issue Date)
2010-04

(Resource Type)
departmental bulletin paper

(Version)
Version of Record

(JaLCDOI)
https://doi.org/10.24546/81006929

(URL)
https://hdl.handle.net/20.500.14094/81006929

クロス・バリデーションを用いた平滑化ブートストラップ法による信頼区間に関するシミュレーション分析

難　波　明　生

国民経済雑誌　第201巻　第4号　抜刷
平 成 22 年 4 月

クロス・バリデーションを用いた平滑化ブートストラップ法による信頼区間に関するシミュレーション分析

難　波　明　生

本稿では，平滑化ブートストラップ法（smoothed bootstrap）を用いて平均の信頼区間を求めることを考える。平滑化ブートストラップ法を用いる際にはバンド幅（bandwidth）というパラメータを設定する必要があるが，本稿ではクロス・バリデーション（cross-validation）を用いてバンド幅を選択した場合に，得られた信頼区間がどのような性質を持つのかを，シミュレーションにより分析する。シミュレーションの結果から，バンド幅をクロス・バリデーションで選択すれば，通常のブートストラップ法により得られた信頼区間があまり正確でない場合でも，平滑化ブートストラップ法により得られた信頼区間はかなり正確な可能性があることが示される。

キーワード　ノンパラメトリック法，カーネル密度推定，
クロス・バリデーション，ブートストラップ法

1　は じ め に

母集団の平均に対する信頼区間を求めたい場合，母集団が正規母集団であれば**t** 分布を用いて容易に信頼区間を求めることができる。しかしながら，母集団の分布が複雑である場合や，未知である場合，正確な信頼区間を求めることは容易ではなく，多くの場合正規分布による近似が用いられる。しかし，小標本においては正規分布による近似はあまり正確ではない場合が多い。このような場合に有効なのが Efron（1979）により提案されたブートストラップ法である。ブートストラップ法を用いれば，通常の正規近似よりも正確な信頼区間が得られる可能性があることが Beran（1988), Hall（1992）により示されている。

以上のように，ブートストラップ法を用いればかなり正確な信頼区間が得られるといわれているが，ブートスラップ法にもいくつかの問題がある。その 1 つが，通常のブートストラップ法では手元にある標本からの無作為抽出を行うので，元々手元にある標本以外の標本値は得られないという点である。「手元にある標本からの無作為抽出を行う」という方法は，

「標本の経験分布から無作為抽出を行う」ということを意味する。この事から，経験分布という単純な分布の推定値ではなく，より精密な分布の推定値を用いて，その分布からの無作為抽出を行えば良いのではないかという発想が生じてくるのは極めて自然なことである。このような方法は，経験分布よりも滑らかな分布を用いることから平滑化ブートストラップ法（smoothed bootstrap）と呼ばれている。

平滑化ブートストラップ法においては，母集団の分布を推定しなければならない。母集団の分布が，例えば正規分布であるというように，ある特定の分布であると分かっている場合には，未知パラメータを何らかの方法で推定する事で分布の推定を行うことができる。しかし，実際の問題では，多くの場合母集団の分布が未知である。このような場合に用いられるのが，密度関数の形状に仮定をおかず，密度関数を推定する事ができるカーネル密度推定（kernel density estimate）と呼ばれる方法である。

カーネル密度推定を用いる際に非常に重要になるのが，バンド幅（bandwidth）の選択である。多くの場合，バンド幅は MISE（mean integrated squared error）を最小にするように選ぶ事が望ましいと考えられているが，MISE は推定の対象である未知の確率密度関数に依存した値となる。したがって，推定の対象となっている確率密度関数が分からなければ，最適なバンド幅の値を求める事はできない。そこで，通常は MISE の近似値を最小にする方法として，クロス・バリデーション（cross-validation）によってバンド幅が選択される。クロス・バリデーションによって選択されたバンド幅は MISE を最小化する値に確率収束する事が Hall（1983), Stone（1984), Härdle, Hall and Marron（1988）等によって示されている。つまり，クロス・バリデーションによって選ばれたバンド幅は，カーネル密度推定量の MISE を最小化する値の一致推定量である。

Silverman and Young（1987), Hall, DiCiccio and Romano（1989), De Angelis and Young（1992), Polansky and Schucany（1997）等はバンド幅を適切に選ぶことにより，平滑化ブートストラップ法による推定の精度を高めることができる場合があることを示した。しかし，このようなバンド幅は一般に未知パラメータに依存し，未知パラメータを推定値で置き換えた場合には，平滑化ブートストラップ法の精度はあまり高くないことが Polansky and Schucany（1997）のシミュレーションにより示されている。また，平滑化ブートストラップ法の精度を高める事のできるバンド幅は，クロス・バリデーションで選択されるバンド幅とは一般に全く異なるものである。

しかしながら，MISE を最小化するということは，カーネル密度推定により推定された確率密度関数が全体として真の確率密度関数に近い事を意味する。この事を考えれば，クロス・バリデーションにより得られるバンド幅を用いて平滑化ブートストラップ法を行えば，正規分布による近似や，通常のブートストラップ法を用いた場合よりも良い信頼区間が得られ

る可能性があるのではないかと思われる。

したがって，本稿では，いくつかの分布の平均について，クロス・バリデーションで選択されたバンド幅を用いた平滑化ブートストラップ法による信頼区間が，どのような特性を持つのかをシミュレーションにより分析する。本稿の構成は以下の通りである。第 2 節では，平滑化ブートストラップ法を用いる準備として，カーネル密度推定法とバンド幅の選択方法であるクロス・バリデーションについて説明する。第 3 節ではブートストラップ法を，通常のブートストラップ法と平滑化ブートストラップ法の違いを述べながら説明する。第 4 節でシミュレーションにより，平滑化ブートストラップ法によって得られる信頼区間の精度を分析する。

2　カーネル密度推定法とクロス・バリデーション

2.1　カーネル密度推定

$X_1, X_2, \ldots, X_n$ は確率密度関数 $f(x)$ をもつ確率分布から独立に得られた標本であるとする。$f(x)$ の関数型が，例えば平均 μ，分散 σ^2 の正規分布の確率密度関数

$$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma}\exp\left[-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right] \tag{1}$$

であることが既知であれば，最尤法などの推定法を用いてパラメータ μ, σ^2 を推定することにより，$f(x)$ の推定量を得ることができる。このような推定法は，パラメトリック推定と呼ばれる。パラメトリックな推定法を行う場合は，上の例のように $f(x)$ の関数型を前もって定式化しなければならない。しかし，多くの場合 $f(x)$ の関数型は未知であり，定式化の誤りが生じる可能性がある。

これに対し，ノンパラメトリック推定では，$f(x)$ の関数型を前もって定めることなく推定を行うので，定式化の誤りが生じる可能性は無い。確率密度関数をノンパラメトリックに推定する最も簡単な方法は以下のようなものである。

$F(x)$ を $f(x)$ に対応する分布関数とすると，

$$\begin{aligned}F(x)&=\mathrm{P}(X\leqq x)\\&=\int_{-\infty}^{x} f(x)dx\end{aligned} \tag{2}$$

であるから

$$\begin{aligned}f(x)&=\frac{d}{dx}F(x)\\&\approx\frac{F(x+h/2)-F(x-h/2)}{h}\\&=\frac{\mathrm{P}(x-h/2\leqq X\leqq x+h/2)}{h}\end{aligned}$$

$$=\frac{\mathrm{P}\left(-\frac{1}{2}\leqq\frac{X-x}{h}\leqq\frac{1}{2}\right)}{h} \tag{3}$$

となる。(３)の分子を推定値で置き換えることにより，$f(x)$ は

$$\hat{f}_n(x)=\frac{\left(\left[-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right]\text{に入っている}\ \frac{X_i-x}{h}\ \text{の個数}\right)\Big/ n}{h}$$

$$=\frac{1}{nh}\sum_{i=1}^{n}I\left(-\frac{1}{2}\leqq\frac{X-x}{h}\leqq\frac{1}{2}\right) \tag{4}$$

のように推定される。ただし，$I(A)$ は事象 A が起こったときに１，それ以外では０の値を取る関数であり，indicator function と呼ばれる。また，$h(>0)$ はバンド幅と呼ばれる，分析者が定めるパラメータである。この推定量は naive estimator, local histogram estimator 等と呼ばれている。

（４）で与えられる推定量は，local histogram estimator という名前も示しているように，滑らかな関数ではない。そこで，Rosenblatt（1956）は(４)を拡張し，次のような推定量を考案した。

$$\hat{f}(x)=\frac{1}{nh}\sum_{i=1}^{n}K\left(\frac{X_i-x}{h}\right) \tag{5}$$

h は(４)の場合同様にバンド幅である。また，$K(\cdot)$ はカーネルと呼ばれる関数であり，$\hat{f}(x)$ が一致性を持つために，通常以下の仮定が置かれる。ただし，表記を簡単にするために，今後は積分範囲が明示されていない場合には，積分範囲は積分する変数の定義域全体であるとする。

仮定１　カーネル $K(\cdot)$ は以下の性質を満たすものとする。

(i). $\int K(v)dv=1$

(ii). $K(v)=K(-v)$

(iii). $\int v^2K(v)dv=\kappa_2>0$

ここで，仮定１の内容を簡単に見ておこう。(i)が満たされることにより，

$$\int\hat{f}(x)dx=\int\frac{1}{nh}\sum_{i-1}^{n}K\left(\frac{X_i-x}{h}\right)dx$$

$$=\frac{1}{nh}\sum_{i=1}^{n}\int K\left(\frac{X_i-x}{h}\right)dx$$

$$=\frac{1}{nh}\sum_{i=1}^{n}\int K(\phi_i)hd\phi_i$$

$$=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\int K(\phi_i)d\phi_i=1 \tag{6}$$

となる。ただし，$\phi_i=(X_i-x)/h$ である。このことから，$K(\cdot)\geqq 0$ であれば，$\hat{f}(x)\geqq 0$ かつ $\int\hat{f}(x)dx=1$ となるので，カーネル密度推定量 $\hat{f}(x)$ は確率密度関数であるといえる。また，(ii)は $K(v)$ が $v=0$ について左右対称であることを意味する。(i)，(ii)を満たす $K(\cdot)$ としては $v=0$ について左右対称である確率密度関数を用いれば良い。$K(\cdot)$ としてこのような確率密度関数を用いた場合，(iii)は確率密度関数 $K(\cdot)$ を持つ分布の分散が有限な正の値を持てば良いことを意味している。また，この時，(ii)により確率密度関数 $K(\cdot)$ を持つ分布の平均は 0 である。ただし，仮定 1 では $K(\cdot)\geqq 0$ という仮定は置かれていないので，必ずしも確率密度関数をカーネルとして用いなければならない訳ではない。

$X_i, X_2, \ldots, X_n$ が 3 回微分可能な確率密度関数 $f(x)$ を持つ確率分布から独立に得られた標本であるとすると，仮定 1 のもとで $\hat{f}(x)$ のバイアスは次のように計算される。

$$\begin{aligned}
\mathrm{Bias}[\hat{f}(x)]&=\mathrm{E}[\hat{f}(x)]-\hat{f}(x)\\
&=\mathrm{E}\left[\frac{1}{nh}\sum_{i=1}^{n}K\left(\frac{X_i-x}{h}\right)\right]-f(x)\\
&=h^{-1}\mathrm{E}\left[K\left(\frac{X_1-x}{h}\right)\right]-f(x)\\
&=h^{-1}\int f(x_1)K\left(\frac{x_1-x}{h}\right)dx_1-f(x)\\
&=h^{-1}\int f(x+hv)K(v)hdv-f(x)\\
&=\int\left\{f(x)+f^{(1)}(x)hv+\frac{1}{2}f^{(2)}(x)h^2v^2+O(h^3)\right\}k(v)dv-f(x)\\
&=\frac{h^2}{2}f^{(2)}(x)\kappa_2+O(h^3)
\end{aligned} \tag{7}$$

となる。2 行目から 3 行目の変形では X_i が独立に同一の分布に従う事，4 行目から 5 行目の変形では $(x_1-x)/h=v$ という変数変換，5 行目から 6 行目への変形では $f(x+hv)$ のテーラー展開を用いている。

同様の計算により，$\hat{f}(x)$ の分散は

$$\begin{aligned}
\mathrm{Var}[\hat{f}(x)]&=\mathrm{E}[\{\hat{f}(x)-E[\hat{f}(x)]\}^2]\\
&=\frac{1}{nh}\{\kappa f(x)+O(h)\}
\end{aligned} \tag{8}$$

である事を示す事ができる。ただし，$\kappa=\int K^2(v)dv$ である。(7)と(8)を用いれば，$\hat{f}(x)$ の平均自乗誤差（mean squared error; MSE）は

$$
\begin{aligned}
\mathrm{MSE}[\hat{f}(x)] &= \mathrm{E}[(\hat{f}(x)-f(x))^2] \\
&= \mathrm{Var}[\hat{f}(x)]+(\mathrm{Bias}[\hat{f}(x)])^2 \\
&= \frac{h^4}{4}[\kappa_2 f^{(2)}(x)]^2+\frac{\kappa f(x)}{nh}+o(h^4+(nh)^{-1})=O(h^4+(nh)^{-1}) \qquad (9)
\end{aligned}
$$

となる。したがって，$c>0$，$\beta>1$ を定数とし $h=cn^{-1/\beta}$ のようにバンド幅を選択すれば，$n\to\infty$ の時 $h\to 0$，$nh\to\infty$ となり $\hat{f}(x)$ は $f(x)$ に平均自乗収束する。したがって，バンド幅が以上の条件を満たせば，$\hat{f}(x)$ は $f(x)$ の一致推定量であると言える。

上記のように，カーネル密度推定を用いれば，確率密度関数の一致推定量を得ることができる。しかしカーネル密度推定量の定義からも明らかなように，カーネル密度推定を用いるためには，分析者はカーネル $K(\cdot)$ およびバンド幅 h を選択しなければならない。一般にカーネルの関数型が結果に及ぼす影響はさほど大きくないが，バンド幅が及ぼす影響は非常に大きいと言われている。したがって，以下ではバンド幅の選択方法について説明する。

2.2 Mean Integrated Squared Error

バンド幅の選択基準の一つは，(9)で与えられる MSE を x について積分した mean integrated squared error (MISE)

$$
\begin{aligned}
\mathrm{MISE}[\hat{f}(x)] &= \int \mathrm{MSE}[\hat{f}(x)]\,dx \\
&= \int \left\{ \frac{h^4}{4}[\kappa_2 f^{(2)}(x)]^2+\frac{\kappa f(x)}{nh}+o(h^4+(nh)^{-1}) \right\} dx \\
&= \frac{1}{4}h^4\kappa_2^2\int [f^{(2)}(x)]^2\,dx+\frac{\kappa}{nh}+o(h^4+(nh)^{-1} \qquad (10)
\end{aligned}
$$

を最小にすることである。そのようなバンド幅は(10) を h に関して微分して 0 とおく事で

$$h_{\mathrm{opt}}=c_0 n^{-1/5} \qquad (11)$$

である事が容易に分かる。ただし

$$c_0=\kappa^{1/5}\kappa_2^{-2/5}\left\{\int [f^{(2)}(x)]^2\,dx\right\}^{-1/5} \qquad (12)$$

は正の定数である。したがって，h_{opt} は $f^{(2)}(x)$ に依存する事が分かるが，$f^{(2)}$ は通常未知であるため，実際には h_{opt} をバンド幅として利用する事はできない。このバンド幅を利用する方法の一つは，$f(x)$ に何らかの特定の分布（例えば正規分布）を仮定して(12)の値を計算し，必要に応じて $f(x)$ に含まれるパラメータを推定値で置き換えて利用する事である。例えば，カーネル $K(\cdot)$ として標準正規分布の確率密度関数を用いた場合，$f(x)$ が平均 μ，分散 σ^2 の正規分布の確率密度関数であると仮定すれば，$h\approx 1.06\sigma n^{-1/5}$ となる。したがって，分析者は h として $1.06\hat{\sigma}n^{-1/5}$ を用いる事になる。ただし，$\hat{\sigma}$ は $X_i, X_2, \ldots, X_n$ から得られる

標本標準偏差である。このようなバンド幅の選択方法をプラグ・イン（plug-in）と呼ぶ。この方法の問題点は，$f(x)$ に何らかの分布を仮定するため，この仮定が真の分布からかけ離れている場合には，推定量の精度がかなり落ちる可能性がある事である。

2.3　クロス・バリデーション

データに基づいてバンド幅を選択する基準としてよく用いられるのがクロス・バリデーションと呼ばれる方法である。以下では，クロス・バリデーションについて簡単に説明する。

まず，$\hat{f}(x)$ と $f(x)$ の距離の 2 乗，つまり

$$\int[\hat{f}(x)-f(x)]^2\,dx=\int\hat{f}(x)^2\,dx-2\int\hat{f}(x)f(x)dx+\int f(x)^2\,dx \tag{13}$$

を考える。バンド幅 h はこの値を最小にするように定めるのが望ましい。第 3 項は h に依存しないので，h は最初の 2 項，つまり

$$\int\hat{f}(x)^2\,dx-2\int\hat{f}(x)f(x)dx \tag{14}$$

を最小にするように定めればよい。第 2 項については $\int\hat{f}(x)f(x)dx=\mathrm{E}_X[\hat{f}(X)]$ と考える事ができるが，この値は未知の確率密度関数 $f(x)$ に依存しているので実際に求める事はできない。ただし，$E_X[\cdot]$ は X に関する期待値である。そこで，$E_X[\hat{f}(X)]$ は推定値 $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\hat{f}_{-1}(X_i)$ で置き換える。ただし，

$$\hat{f}_{-1}(X_i)=\frac{1}{(n-1)h}\sum_{j=1,\,j\neq i}^{n}K\left(\frac{X_i-X_j}{h}\right) \tag{15}$$

は $f(x)$ の leave-one-out estimator と呼ばれる。第 1 項については

$$\begin{aligned}\int f(x)^2dx&=\frac{1}{n^2h^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\int K\left(\frac{X_i-x}{h}\right)K\left(\frac{X_j-x}{h}\right)dx\\&=\frac{1}{n^2h}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\int K\left(\frac{X_i-X_j}{h}-t\right)K(t)dt\\&=\frac{1}{n^2h}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(K*K)\left(\frac{X_i-X_j}{h}\right)\end{aligned} \tag{16}$$

と計算される。第 1 行目から 2 行目への変形では $t=(x-X_j)/h$ と変数変換を行っている。また，$(K*K)(u)=\int K(u-t)K(t)dt$ はカーネル $K(\cdot)$ の重畳積分（convolution）である。以上の結果をまとめて

$$\frac{1}{n^2h}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(K*K)\left(\frac{X_i-X_j}{h}\right)-\frac{2}{n(n-1)h}\sum_{j=1,\,j\neq i}^{n}K\left(\frac{X_i-X_j}{h}\right) \tag{17}$$

を最小化するように h を求める方法をクロス・バリデーションと呼ぶ。実際の h はコンピ

ューターを用いて数値的に求める事になる。Hall (1983), Stone (1984) はクロス・バリデーションにより選択された h は $n\to\infty$ の時，(11)で与えられる h_{opt} に確率収束する事を示している。つまり，プラグ・インを用いた場合と違い，クロス・バリデーションを用いた場合は，$f(x)$ の分布型を仮定する必要がなく，MISE を最小化するバンド幅の一致推定量が得られる。

3　ブートストラップ法

ブートストラップ法は，手元にある標本を用いて新たな標本を発生させ，得られた標本を用いて計算された統計量により，元の標本から得られる統計量の分布を近似する方法である。手元にある標本を用いて新たな標本を発生させる事をリサンプリング (resampling) と呼ぶ。ブートストラップ法を用いることにより，統計量の漸近分布しか分かっていない場合でも，小標本特性を改善できる可能性がある。以下では，通常のブートストラップ法と平滑化ブートストラップ法について説明する。

3.1　通常のブートストラップ法

通常のブートストラップ法は以下のような手順で行われる。

1. 手元にある標本 $X_1, X_2, \ldots, X_n$ から重複を許して大きさ n の標本を無作為抽出する。抽出した標本を $X_1^*, X_2^*, \ldots, X_n^*$ とし，ブートストラップ標本と呼ぶ。
2. ステップ 1 で得られた標本 $X_1^*, X_2^*, \ldots, X_n^*$ を用いて，分布を近似したいの統計量の値を計算する。ただし，未知パラメータは $X_1, X_2, \ldots, X_n$ を用いて計算される推定値で置き換える。本稿では，分布の平均に対する信頼区間を求めたいので，t 統計量

$$\frac{\bar{X}-\mu}{\sigma/\sqrt{n}} \tag{18}$$

の分布を近似する事を考える。ただし，μ, σ は $X_i(i=1, \ldots n)$ の平均および標準偏差，$\bar{X}$ は $X_1, X_2, \ldots, X_n$ の標本平均である。従って，

$$\frac{\bar{X}^*-\bar{X}}{s/\sqrt{n}} \tag{19}$$

を計算すれば良い事になる。ただし，$\bar{X}^*$ は $\bar{X}_1^*, X_2^*, \ldots, X_n^*$ の標本平均，s は $X_1, X_2, \ldots, X_n$ の標本標準偏差である。

3. ステップ 1-3 を B 回繰り返し，B 個の(19)の推定値を得る。得られた B 個の推定値の経験分布を用いて統計量の分布を近似する。

上記のステップ 2 のように，t 統計量をブートストラップ法で近似する方法はパーセンタイル t 法と呼ばれている。通常のブートストラップ法を用いる場合，パーセンタイル t 法を用

いることにより信頼区間の精度を上げることができることが Beran (1988), Hall (1992) 等により示されている。

以上のように，通常のブートストラップ法では $X=\{X_1, X_2, \ldots, X_n\}$ を所与として，$X_1, X_2, \ldots, X_n$ の経験分布，つまり $\mathrm{P}(X=X_i)=\frac{1}{n}$ である分布から得られた $X_1^*, X_2^*, \ldots, X_n^*$ を用いて統計量の分布を近似している事になる。つまり，通常のブートストラップ法には，(1)ブートストラップ標本が $X_1, X_2, \ldots, X_n$ 以外の値は取らない，(2)ブートストラップ標本として $X_1, X_2, \ldots, X_n$ が選ばれる確率が真の $f(x)$ に関係なく一定である，等の問題点がある。

3.2 平滑化ブートストラップ法

上記のような通常のブートストラップ法の問題点を避ける事ができるのが，平滑化ブートストラップ法である。通常のブートストラップ法ではブートストラップ標本を $X_1, X_2, \ldots, X_n$ の経験分布から抽出するのに対し，平滑化ブートストラップ法では，ブートストラップ標本は $X_1, X_2, \ldots, X_n$ の確率密度関数のカーネル密度推定量 $\hat{f}(x)$ から抽出する。したがって，平滑化ブートストラップ法は以下のような手順で行われる事になる。

1．$X_1, X_2, \ldots, X_n$ を用いてカーネル密度推定量 $\hat{f}(x)$ を求める。
2．ステップ 1 で求めた $\hat{f}(x)$ を確率密度関数とする分布から大きさ n の標本を無作為抽出する。抽出した標本を $X_1^s, X_2^s, \ldots, X_n^s$ とする。
3．ステップ 2 で得られた標本 $X_1^s, X_2^s, \ldots, X_n^s$ を用いて，分布を近似したいの統計量の値を計算する。通常のブートストラップ法と同様未知パラメータは $X_1, X_2, \ldots, X_n$ を用いて計算される推定値で置き換える。ここでは，分布の平均に対する信頼区間を求めたいので，
$$\bar{X}-\mu \tag{20}$$
の分布を近似する事を考え，
$$\bar{X}^s-\bar{X} \tag{21}$$
を計算する。ただし，$\bar{X}^s$ は $X_1^s, X_2^s, \ldots, X_n^s$ の標本平均である。
4．ステップ 2-3 を B 回繰り返し，B 個の(19)の推定値を得る。得られた B 個の推定値の経験分布を用いて統計量の分布を近似する。

通常のブートストラップ法ではパーセンタイル t 法を用いたが，平滑化ブートストラップ法では単純に $\bar{X}-\mu$ の分布を近似している。これは，平滑化ブートストラップ法では，パーセンタイル t 法を用いなくても，バンド幅の選択によって信頼区間の精度を向上させることができることが Polansky and Schucany (1997) により示されているためである。

ステップ 1 におけるカーネル密度推定を行うためには，バンド幅を選択しなければならな

い。信頼区間の精度を上げるために最適なバンド幅は未知パラメータに依存し，未知パラメータを推定値で置き換えた場合，得られた信頼区間の精度はあまり高くないことが Polansky and Schucany (1997) のシミュレーションにより示されている。本来，MISE を最小化するバンド幅と，信頼区間の精度を上げるために最適なバンド幅は全く異なるものである。しかし，MISE が小さいということは，全体として $\hat{f}(x)$ の推定誤差が小さいことを意味する。そこで，本稿では，バンド幅の選択方法として前節で説明したクロス・バリデーションを用いることにする。

また，ステップ 2 においては $\hat{f}(x)$ を確率密度関数として持つ分布からの標本抽出を行っているが，これは実際には以下のような方法で行うことができる (Silverman (1986) を参照)。

1．$X_1, X_2, \ldots, X_n$ から X_i^* を無作為抽出する。
2．カーネル密度推定で用いたカーネル $K(\cdot)$ を確率密度関数とする分布から標本 ϵ_i を抽出する。$X_i^s = X_i^* + h\epsilon_i$ とすれば X_i^s は $\hat{f}(x)$ を確率密度関数として持つ分布からの無作為標本となる。

つまり X_i^s は通常のブートストラップ法におけるブートストラップ標本 $X_1^*, X_2^*, \ldots, X_n^*$ に $h\epsilon_i$ を加えたものである。

4　シミュレーション分析

本節では，平滑化ブートストラップ法を用いた信頼区間の特性を，正規分布による近似および通常のブートストラップ法を用いた信頼区間の特性とシミュレーションにより比較し，平滑化ブートストラップ法の効果を検証する。

シミュレーションは以下のような設定で行った。まず，比較する信頼区間は，上にも述べたように，(18)式で与えられる t 統計量を正規分布で近似して得られる区間 (normal), t 統計量にブートストラップ法を用いて得られる区間 (per-t) および(20) 式の $\bar{X} - \mu$ に平滑化ブートストラップ法を用いて得られる区間 (s-boot) の 3 つである。平滑化ブートストラップ法を用いる際に必要となるカーネル $K(\cdot)$ は標準正規分布の確率密度関数を用い，バンド幅はクロス・バリデーションで選択した。

信頼区間を求める分布は正規分布 (N), 一様分布 (U), 自由度 2 のカイ 2 乗分布 (X), 自由度 3 の t 分布 (T) を用いた。ただし，全ての分布は平均０，分散 1 となるように変換を行っている。これらの分布から大きさ 20, 30, 50, 100, 200, 500 の標本を抽出し，10000回の繰り返し実験を行い，90%，95%，99%の信頼区間が真の平均 0 を含んでいる比率を計算した。ブートストラップ法における繰り返しの回数は $B = 1000$ とした。

シミュレーションの結果は表 1 の通りである。表では $n = 50$ と $n = 500$ の結果を示してあるが，他の場合の結果も同様である。

表 1　シミュレーションにより得られた検定のサイズ

		$n=50$			$n=500$		
		normal	per-t	s-boot	normal	per-t	s-boot
N	90%	0.8956	0.9134	0.9279	0.9012	0.9036	0.9149
	95%	0.9458	0.9604	0.9664	0.9516	0.9526	0.9581
	99%	0.9878	0.9947	0.9936	0.9893	0.9910	0.9934
U	90%	0.8900	0.9188	0.9113	0.8978	0.8991	0.8983
	95%	0.9373	0.9710	0.9550	0.9524	0.9536	0.9521
	99%	0.9839	0.9992	0.9909	0.9900	0.9930	0.9905
X	90%	0.8867	0.8927	0.8895	0.8989	0.8984	0.8976
	95%	0.9318	0.9279	0.9349	0.9494	0.9455	0.9476
	99%	0.9749	0.9658	0.9781	0.9877	0.9831	0.9880
T	90%	0.8979	0.6675	0.9053	0.9034	0.6606	0.9030
	95%	0.9494	0.7378	0.9536	0.9545	0.7364	0.9536
	99%	0.9901	0.8463	0.9907	0.9904	0.8550	0.9890

まず，標本が正規分布に従う場合は，どの方法を用いても良好な結果が得られている。$n=50$ の場合には，平滑化ブートストラップ法によって得られる信頼区間は，若干高い比率で真値を含む傾向があるようだが，標本が大きくなるにつれ，この傾向は改善されているように見える。

標本が一様分布に従う場合も，正規分布の場合と同様，全て方法で良好な結果が得られている。特に，平滑化ブートストラップ法に基づく信頼区間は，$n=50$ の場合，他の方法より高い精度を持っているようである。

標本がカイ 2 乗分布に従う場合は，どの方法を用いても，信頼区間が真の値を含む比率は若干低いようである。しかしながら，平滑化ブートストラップ法による信頼区間は比較的良好な結果を示している。また，標本が大きくなると，どの信頼区間も良好な性質を持つようである。最後に，標本が t 分布に従う場合は，パーセンタイル t 法によって得られた信頼区間は非常に低い精度しか示していない[1)]。これに対し，平滑化ブートストラップ法を用いた信頼区間は非常に高い精度を示している。

以上のシミュレーション結果と，パーセンタイル t 法が特定の条件の下で正規近似より高い精度を持つことを考えると，クロス・バリデーションにより選択されたバンド幅を用いた平滑化ブートストラップ法による信頼区間は，かなり高い精度を持つと言って良いのではないかと考えられる。

しかしながら，以上の結論は限定されたシミュレーション結果から得られたものであり，理論的な分析は未だ行われていない。したがって，全ての場合にこの方法が有効であると言

えるわけではない。この方法の理論的分析を行い，どのような条件の下でこの方法が有効であるかが明らかにすることは今後の研究課題である。

注

1）パーセンタイル t 法が正規分布による近似よりも高い精度を持つ事を考えれば，これは奇妙な結果に見えるかもしれない。パーセンタイル t 法が有効であるためにはかなり高次のモーメントが存在しなければならない。しかし，t 分布では自由度より小さい次数のモーメントしか存在しなためこのような結果が得られているのではないかと思われる。

参 考 文 献

Beran, R., 1988, “Prepivoting Test Statistics: A Bootstrap View of Asymptotic Refinements,” *Journal of the American Statistical Association,* 83, 687-697.

De Angelis, D., and G. A. Young, 1992, “Smoothing the Bootstrap,” *International Statistical Review,* 60, 45-56.

Efron, B., 1979, “Bootstrap Methods: Another Look at the Jackknife,” *Annals of Statistics,* 7, 1-26.

Hall, P., 1983, “Large Sample Optimality of Least Squares Cross-Validation in Density Estimation,” *The Annals of Statistics,* 11, 1156-1174.

Hall, P., 1992, *The Bootstrap and Edgeworth Expansion,* Springer-Verlag Inc.

Hall, P., T. J. DiCiccio, and J. P. Romano, 1989, “On Smoothing and the Bootstrap,” *The Annals of Statistics,* 17, 692-704.

Härdle, W., P. Hall, and J. S. Marron, 1988, “How Far Are Automatically Chosen Regression Smoothing Parameters from Their Optimum?,” *Journal of the American Statistical Association,* 83, 86-95.

Polansky, A. M., and W. R. Schucany, 1997, “Kernel Smoothing to Improve Bootstrap Confidence Intervals,” *Journal of the Royal Statistical Society, Series B, Methodological,* 59, 821-838.

Rosenblatt, M., 1956, “Remarks on Some Nonparametric Estimates of a Density Function,” *The Annalsof Mathematical Statistics,* 27, 832-837.

Silverman, B. W., 1986, *Density Estimation for Statistics and Data Analysis,* Chapman & Hall Ltd.

Silverman, B. W., and G. A. Young, 1987, “The Bootstrap: To Smooth or Not to Smooth?,” *Biometrika,* 74, 469-479.

Stone, C. J., 1984, “An Asymptotically Optimal Window Selection Rule for Kernel Density Estimates,” *The Annals of Statistics,* 12, 1285-1297.