第 4 章　標準偏差の区間推定

標準偏差の推定値 s が, シリーズ実験毎にどのようにばらつくかをモンテカルロシミュレーションで調べます。

4.1　χ^2 分布のヒストグラム

ある実験データが正規分布に従うと仮定し，n 個のデータの平均を m（式（1.1)），標準偏差を s（式（1.4)）とすると， χ^2（カイ 2 乗）は

$$\chi^2 = \frac{(n-1)s^2}{\sigma^2} \tag{4.1}$$

と定義されます。 σ は真の標準偏差を表します。式（4.1）が従う分布を，自由度 n－1 の χ^2 分布といいます。同じ系で実験をくり返した場合，n と σ は一定と仮定できますが，標準偏差 s はシリーズ毎に違いますから，χ^2 が分布することになります。

正規乱数（平均 5，標準偏差 1）を使って，5 回のくり返し実験（n=5）から平均 m と標準偏差 s を推定し，式（4.1）からχ^2 を計算します。1 シリーズの実験（5 回のくり返し実験）から 1 つのχ^2 値が得られます。ここでは，5000 シリーズの実験から，5000 個のχ^2 値を計算し，そのヒストグラムを作ります。

図 4.1 に示されているように，行 1 に,「シリーズ」,「標準偏差」,「分散」,「カイ 2 乗」,「区間配列」,「度数」,「90%CI 下」,「90%CI 上」,「root 下」,「root 上」,「差」とタイプします。シリーズは，列 A に A2～A5001 まで 1 から順に番号を入力します。列 B は 5 回のくり返し実験から得られた標準偏差推定値 s を入力します[1]。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	シリーズ	標準偏差	分散	カイ2乗	区間配列	度数	90%CI下	90%CI上	root下	root上	差
2	1	1.068644	1.142	4.567999	0	0	0.48145	6.424753	0.693866	2.53471	1.840844
3	2	1.049826	1.102135	4.408539	0.5	115	0.464644	6.200477	0.681648	2.490076	1.808428
4	3	0.864545	0.747438	2.98975	1	286	0.315109	4.204994	0.561345	2.050608	1.489263
5	4	0.643483	0.41407	1.65628	1.5	420	0.174566	2.329507	0.417811	1.526272	1.108462
6	5	0.848867	0.720576	2.882303	2	496	0.303784	4.053872	0.551166	2.013423	1.462257
7	6	0.538333	0.289802	1.159209	2.5	460	0.122176	1.630393	0.349537	1.276868	0.927331
8	7	0.569655	0.324507	1.298026	3	440	0.136807	1.825634	0.369874	1.35116	0.981286
9	8	1.567703	2.457691	9.830765	3.5	411	1.036126	13.82667	1.017903	3.718423	2.700521
10	9	0.629051	0.395705	1.582821	4	366	0.166823	2.226189	0.40844	1.492042	1.083602
11	10	1.049639	1.101742	4.406967	4.5	282	0.464478	6.198265	0.681526	2.489632	1.808105
12	11	0.548852	0.301239	1.204956	5	262	0.126998	1.694734	0.356368	1.30182	0.945452
13	12	0.982137	0.964593	3.858373	5.5	248	0.406658	5.426685	0.637698	2.329525	1.691827
14	13	1.06069	1.125063	4.500254	6	189	0.47431	6.329471	0.688702	2.515844	1.827142

図 4.1　データの入力

[1] ここでは，3.3 で t 分布を作るとき使った 5000 個のデータ（図 3.2 の列 H）をそのままコピーし，張り付けます。ただし，[貼り付け]→[形式を選択した貼り付け（S）…]→[値ラジオボタン]の順で，値だけを貼り付けます。

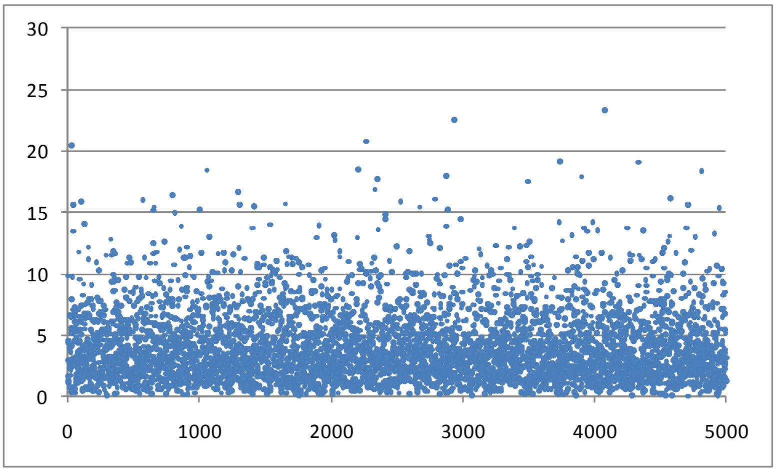

図 4.2　χ^2 の値

列 C に分散推定値を入力します。セル C2 には「=B2*B2」と数式を書きます。列 D には χ^2 を入力します。n=5 で$\sigma=1$ ですから，セル D2 には「=4*C2」と数式を書きます。次に，これらの数式を，それぞれ，列 5001 までコピーします。列 D をグラフ表示すると，図 4.2 のようになります。図 4.2 のヒストグラムは図 4.3 です。ヒストグラムの区間配列（列 E）は，0~30 まで 0.5 間隔で設定します。

図 4.3 と図 3.4 を比べると，χ^2 と t との違いがよくわかります。t は正と負と両方の値を取り，分布は t＝0 を中心とした対称形をしています。一方，χ^2 は正の値だけを取り，分布は非対称です。

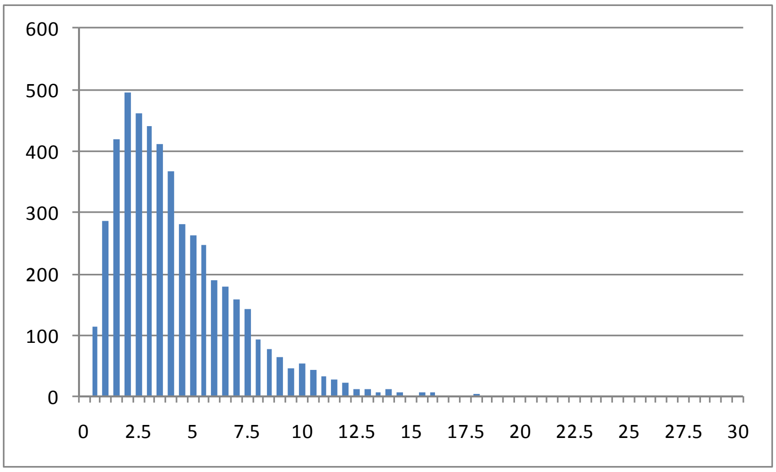

図 4.3　χ^2 のヒストグラム（n＝5）

4.2　χ^2 分布の確率密度

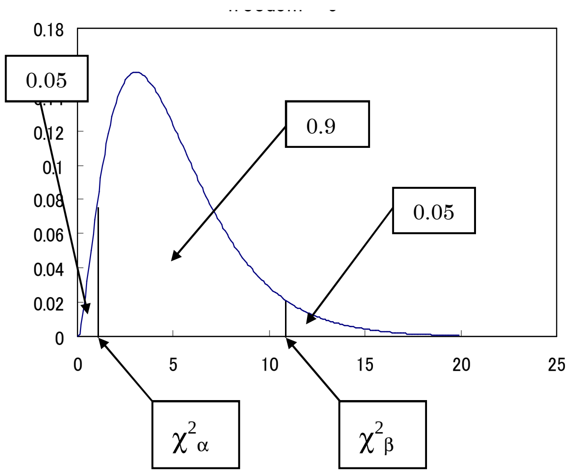

図 4.3　χ^2 分布と確率

χ^2 が，次の範囲

$$\chi^2_\alpha \leq \frac{(n-1)s^2}{\sigma^2} \leq \chi^2_\beta \tag{4.2}$$

に存在する確率は，χ^2 分布により定まります。すると，真の分散が存在する信頼区間は

$$\frac{(n-1)s^2}{\chi^2_\alpha} \geq \sigma^2 \geq \frac{(n-1)s^2}{\chi^2_\beta} \tag{4.3}$$

と表されます[2]。

4.3　分散の区間推定

100 個の 90%信頼区間を式（4.3）から求め，グラフ表示します。式（4.3）の右辺が信頼区間の下限，左辺が信頼区間の上限になります。図 4.1 では，列 G に前者，列 H に後者を入力しています。自由度 4（n=5）の分布から，χ^2_α=0.711，χ^2_β=9.488 ですから，セル G2 は「=D2/9.488」，セル H2 は「=D2/0.711」と入力します。これらを行 101 までコピーすれば，90%信頼区間の計算は完了です。

式（4.3）は分散の表示ですが，分かりやすくするために，標準偏差で 100 個の信頼区間を表示します。そのために，式（4.3）の各項の平方根を計算します。列 I と列 J に，それ

[2] 式（4.2）を$(n-1)s^2$で割り，逆数にすれば，式（4.3）が得られます。

ぞれ，90%信頼区間の下限と上限を入力します。セル I2 は「=SQRT(G2)」，セル J2 は「=SQRT(H2)」と入力し，行 101 までコピーします。列 K で，列 I と列 J の差を計算します。図 4.4 のグラフは，積み上げ縦棒のグラフであり，下の棒の長さが 90%信頼区間の下限（列 I），上の棒の長さが 90%信頼区間の幅（列 K）です[3]。

図 4.4 では，100 個の 90%信頼区間の中で，12 個の信頼区間が真の標準偏差σを含むことに失敗しています（赤で示してあります）。理論値が 90%ですから，図 4.4 はそれに近い値です。信頼区間の意味については，項 3.6 で既に述べてあります。信頼区間の位置と幅が，シリーズ実験ごとに大きく異なることに驚くのではないでしょうか。

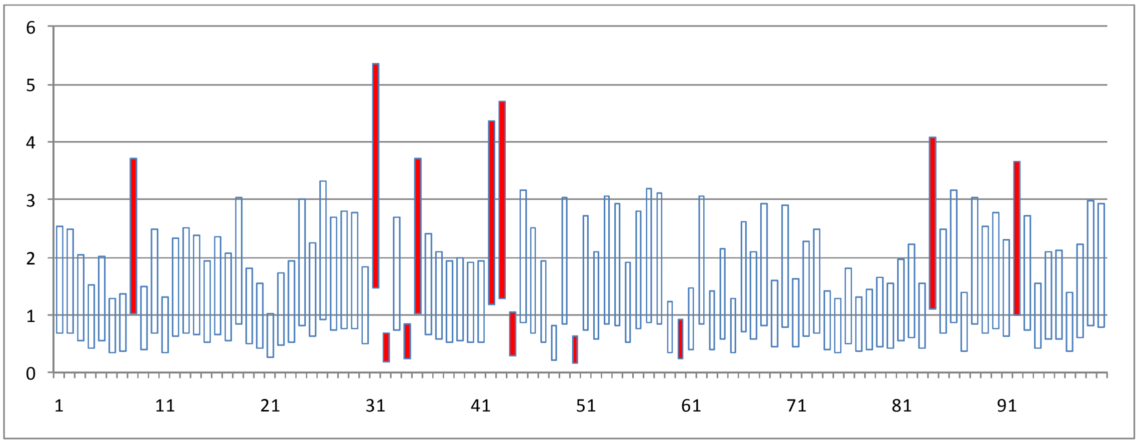

図 4.4　90%信頼区間のグラフ表示

4.4　信頼区間のくり返し数 n に対する依存性

信頼区間を表す式（4.3）を，次のように書き変えます：

$$\sqrt{\frac{(n-1)}{\chi_{\alpha}^{2}}}s \geq \sigma \geq \sqrt{\frac{(n-1)}{\chi_{\beta}^{2}}}s \qquad (4.4)$$

この式は，真の標準偏差が存在する信頼区間と言えます。実験から推定した標準偏差 s に係数，$\sqrt{(n-1)/\chi_{\alpha}^{2}}$または$\sqrt{(n-1)/\chi_{\beta}^{2}}$，を掛けた値が，信頼区間の下限または上限になっています。くり返し数 n が大きくなるに従って，推定値 s は真の値σに近づきますから，これらの係数，$\sqrt{(n-1)/\chi_{\alpha}^{2}}$と$\sqrt{(n-1)/\chi_{\beta}^{2}}$，は 1 に近づくはずです。これをグラフで確かめます。

[3] グラフの描き方は 3.11 を参照。

図 4.5 にあるように，行 1 に，「自由度」，「n」，「χα__5」，「χβ__95」，「coeff1」，「coeff2」とタイプします。自由度の列（列 A）には，A2~A30 に 2~30 の整数を順番に入力し，くり返し数 n の列（列 B）には，B2~B30 に 3~31 の整数を順番に入力します。列 C には 5%となるχ^2の値（$=\chi_\alpha^2$），列 D には 95%となるχ^2の値（$=\chi_\beta^2$）を入力します。セル C2 には，自由度 2 で左側確率が 5%となるχ^2の値 ($=\chi_\alpha^2$) を入力するために，「=CHISQ.INV(0.05,A2)」と，これを C3 から C30 までコピーします。セル D2 には，「=CHISQ.INV(0.95,A2)」と入力し，これを D3 から D30 までコピーします。

	A	B	C	D	E	F
1	自由度	n	χα_5	χβ_95	coeff1	coeff2
2	2	3	0.102587	5.991465	4.415396	0.577761
3	3	4	0.351846	7.814728	2.920009	0.619589
4	4	5	0.710723	9.487729	2.372356	0.649305
5	5	6	1.145476	11.0705	2.089257	0.67205
6	6	7	1.635383	12.59159	1.915428	0.690296
7	7	8	2.16735	14.06714	1.797151	0.705417
8	8	9	2.732637	15.50731	1.711016	0.718252
9	9	10	3.325113	16.91898	1.645198	0.729347
10	10	11	3.940299	18.30704	1.593072	0.739079
11	11	12	4.574813	19.67514	1.550635	0.747717
12	12	13	5.226029	21.02607	1.515321	0.75546
13	13	14	5.891864	22.36203	1.485406	0.762458
14	14	15	6.570631	23.68479	1.459689	0.768828
15	15	16	7.260944	24.99579	1.437306	0.774662
16	16	17	7.961646	26.29623	1.417616	0.780034
17	17	18	8.67176	27.58711	1.400138	0.785003
18	18	19	9.390455	28.8693	1.3845	0.78962
19	19	20	10.11701	30.14353	1.37041	0.793926
20	20	21	10.85081	31.41043	1.357638	0.797954
21	21	22	11.59131	32.67057	1.345995	0.801736
22	22	23	12.33801	33.92444	1.33533	0.805295
23	23	24	13.09051	35.17246	1.325518	0.808654
24	24	25	13.84843	36.41503	1.316453	0.81183
25	25	26	14.61141	37.65248	1.308049	0.814842
26	26	27	15.37916	38.88514	1.300231	0.817702
27	27	28	16.1514	40.11327	1.292935	0.820423
28	28	29	16.92788	41.33714	1.286109	0.823017
29	29	30	17.70837	42.55697	1.279705	0.825494
30	30	31	18.49266	43.77297	1.273682	0.827861
31						

図 4.5　90%信頼区間の係数の計算

列 E は$\sqrt{(n-1)/\chi_\alpha^2}$，列 F は$\sqrt{(n-1)/\chi_\beta^2}$を入力します。1 セル E2 は「=SQRT(A2/C2)」と入力し，これを E30 までコピーします。セル F2 は「=SQRT(A2/D2)」と入力し，これを F30 までコピーします。

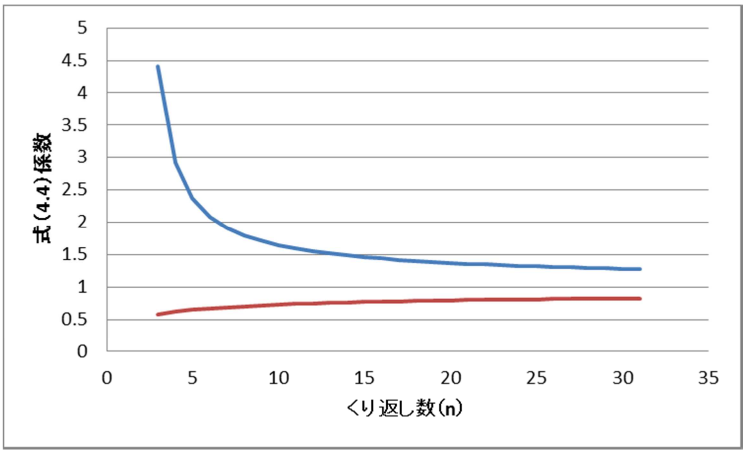

図 4.6　式（4.4）における 90%信頼区間の係数

4.5　くり返し数と統計量の信頼性

くりかえし数を固定しても，解析方法を工夫すれば平均や標準偏差の推定値の信頼性を向上させる方法があると思う読者もいるかもしれません。残念ながら，現実は違います。統計学で用いられている平均や標準偏差の推定法は最良のものであり，この方法の統計的信頼性とくりかえし数の関係は数学的に決まっています。

幸運なことに，くり返し実験は統計量を求める唯一の方法ではありません。たとえば，量子力学では粒子の位置を確率で表しますが，この分布はくり返し実験から直接求めたものではありません。理論から誘導されるものです。統計力学も同様の体系を持っています。分析化学では，1 回の測定から測定値の標準偏差を推定する方法が提案されています[3]。統計量をくり返し実験以外から求める問題は，科学の範疇にあります。統計学の問題ではありません。

科学に従事する人は，統計的方法を正しく且つ効率よく使うために統計学を勉強します。統計学に頼りすぎてはいけません。統計学の限界を勉強することにより，科学に頼らなければならない問題が見えてくるでしょう。たとえば，実験方法によってデータのばらつき方は変わりますから，もっとも信頼できるデータが得られるような実験計画を立てることは通常行われていることです。科学に従事している人にとって，統計学は手段であり，目的は科学であると私は考えています。