不偏分散は、どうしてn-1で割るの?*

浜田 宏

登場人物

**** 青葉: 大学生。数学が苦手

花京院は作業机の隅で、本を読んでいる。

広い机の上には、論文のコピーと計算用紙が散乱している。

青葉は授業課題のリポートを書くために、パソコンのモニタに向かっている。

数理行動科学研究室の分析室には、青葉と花京院の2人だけがいた。 「ねえ、花京院くん。いま時間ある?」花京院の読書が一段落したのを 見計らって、青葉は声をかけた。

「うん、まあ暇と言えば暇だし、暇でないと言えば暇じゃない」花京院 は、壁の時計で時間を確認した。

「どっちなのよ」

「ごめん、暇だった。なに?」

「えっとね、統計学の授業で《不偏分散》って、習ったでしょ・・・・・。 よくわかんないから教えてほしいなと思って」

^{*} ver1.0. 2022 年 6 月 20 日

「不偏分散? なにそれ」

「ほら、あのn-1で割るやつだよ」

「ああ、この推定量のことかな」

花京院は机のうえの計算用紙に式を書いた。

$$\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (X_i - \bar{X})^2$$

「そうそう。これこれ」

「これ、不偏分散っていう名前なんだ」

「いま自分で式を書いたじゃん。名前覚えてないの?」と青葉が聞いた。

「うーん、式はなんとなく覚えてるけど、名前まで覚えてなかった」 「この式って、すごく変じゃない?」

「30分」

「え?」

「ちゃんと説明するのに、30分」

そう言うと花京院はパソコンの前に座ると、キーボードをたたき始めた。

1 青葉の疑問

「君は不偏分散のどこが変だと思うの?」

「えーっとね、n 個の項を足してるのに、n-1 で割るところ」

「そうだね。おかしいね」

「でしょ? 花京院君だって、おかしいと思うでしょ?」

「そうだね。最初に見たときは、なんでだろうと思ったよ。でも理由を 考えたら納得したよ」

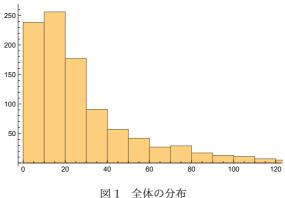
「理由あるんだ」

「ちゃんと理由があるんだよ。実験して確かめてみよう」

「実験?」

花京院は、キーボードでなにやら謎のコードを書くと、ヒストグラム

を一つ画面に描いた。



凶 1 主体の力布

「これをね、観察する対象の《全体》としよう。1000 個の数値をヒストグラムにまとめたものだよ」

「わかった。なんのデータなの?」

「いや、特に意味はないよ。テキトーにコンピュータに作らせたから」 「なにか意味がないと、イメージ湧かないよー」

「しょうがないな。じゃあ柿ピー」

「は?」

「大体 0~120 くらいで分布しているから、1 日に食べる柿ピーのグラム数ってことにしよう。柿ピーの小袋って 30g なんだよ」花京院は机のうえに置いてあったお菓子の袋をひとつ手に取った。

「わかった。じゃあこれは《1日に食べる柿ピーのグラム数》のデータ だね」

「そういうこと。この 1000 人は M 町に住む成人男性全員の数としよう。全員ってところが重要だよ。この《全体》のデータからまず平均値を計算してみよう。1000 人分のデータを

$$x_1, x_2, \ldots, x_{1000}$$

で表すと、その平均は

$$\frac{1}{1000} \sum_{i=1}^{1000} x_i$$

で計算できる。実際に計算してみると 31.91 だから、1 人平均 32g ほど 柿ピーを食べることが分かる。

「意外と少ないんだね。私なら2袋はいけるよ」

「もちろん、そういう人もいるだろう。そういう食べる量の《バラつき》を表すのが分散だったね。《全体》データから分散を計算してみよう。さきほど計算した平均値を μ とおけば分散は

$$\frac{1}{1000} \sum_{i=1}^{1000} (x_i - \mu)^2$$

だね。計算した結果は1287.11 だよ」

「これは n で割ったね」

「そう。いま計算したのは《全体》の分散。これを《母集団》の分散と もいう。もし観察対象全てのデータが手元にあるのなら、分散を計算す るときただnで割ればいい」

「うん。それは分かる。じゃあいつ *n* - 1 で割るの?」 「標本から《全体》のパラメータを推定するときだよ」

「ちょっとなに言ってるかわからない」

「実例で示そう」

2 標本をつかった推定

「いま《全体》から 20 個だけデータをランダムに抜き出したとしよう。 たとえばこんな感じ」

$$65.06, 11.44, 13.08, \ldots, 145.86$$

「うん」

「省略して書いたけど、いまここに 20 個の数値がある。この 20 個を使って平均値を計算してみよう。全部足して 20 で割るだけだよ。結果は

$$(65.06 + 11.44 + 13.08 + \dots + 145.86)/20 = 28.46$$

だよ。ここまではいいかな? |

「うん、まあ平均値の計算くらい分かるよ」

「さらにこの標本平均値を使って、不偏分散を計算する*1。つまり

全ての値から標本平均値 28.46 を引いて 2 乗した数を全部足し、最後に 19 で割る。

という操作をする。こんな感じだ。

$$\{(65.06 - 28.46)^2 + (11.44 - 28.46)^2 + \dots + (145.86 - 28.46)^2\}/19$$

= 1183.32

比較のために n=20 で割った数も計算しておこう。

$$\{(65.06 - 28.46)^2 + (11.44 - 28.46)^2 + \dots + (145.86 - 28.46)^2\}/20$$

= 1124.15

となる」

「うーん、計算方法は分かるよ。でもどうしてn-1で割ったり、nで割ったりするの?」

 $\lceil n-1 \rceil$ で割った推定値と、n で割った推定値を比べてみよう。どっちが《全体》の分散に近い?」

「えーっと、さっき計算した《全体》の分散は、1287.11 だったね。と いうことは、

n-1 で割った場合: 1183.32 n で割った場合: 1124.15

だから、n-1で割った場合のほうが、本当の値に近いよ」

「そのとおり。実験の結果、標本から《全体》の分散を推測するときに、n で割るより n-1 で割った《不偏分散》を使うほうが、本当の値に近い値になった」

「でも、いまのは偶然かもしれないじゃん」

^{*1} 不偏分散という確率変数(推定量)の実現値(推定値)を計算する、とも表現できます

青葉は怪しそうに計算結果を見比べた。

「いいねえ。その注意深さ。じゃあ計算を繰り返してみよう。手続き はこうだよ」

- 1.《全体》から20個の標本を抜き出す
- 2. 標本から「n で割る推定値」と「n-1 で割る推定値」を計算する
- 3. この操作を 100 回繰り返した後でそれぞれの推定値の平均を求める
- 4. どちらが本当の値に近いかを比較する

「いいかな?」

[OK]

「それじゃあ計算するよ。100回ほど標本抽出と計算を繰り返してみよう」花京院は、計算用のコードを書き足した。

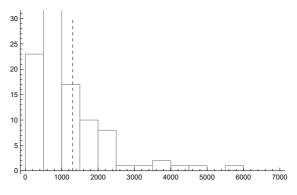


図2 nで割った場合の結果

「まずこれがn で割った場合。100 回分の計算結果のヒストグラムだ。 点線の位置が本当の値だよ」

「うーん、まあ微妙だね」

「次いこう」

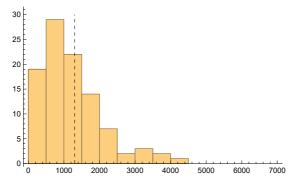


図 3 n-1 で割った場合の結果

「これがn-1で割った場合」 「うーん、これも結構ズレてるね」 「二つ並べてみよう」

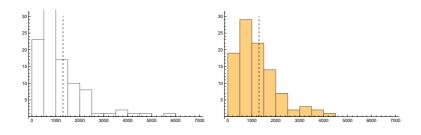


図 4 計算結果の比較。左がn、右がn-1で割った場合の結果

「うーん、微妙だけど、右の方が本当の値に近い数値を推測できてるの かなあ」

「ちょっと見た目では分からないね。それぞれの平均を計算して、本当 の値と比較してみよう

n で割った推定値の平均 : 1184.31

n-1 で割った推定値の平均: 1279.28

本当の値: 1287.11

この結果を見ると、

標本から《全体》の分散を推測するときに、n で割るより n-1 で割った《不偏分散》を使うほうが、平均的に本当の値に近い値になる

ことが分かる」

「ちょっと待ってよ。まだなんかしっくりこないなー」

青葉は計算結果を見比べながら、つぶやいた。

「どこが?」

「なな」

「《全体》の分散を計算する式は

$$\frac{1}{1000} \sum_{i=1}^{1000} (x_i - \mu)^2 = 1287.11$$

でしょ。標本の分散を同じ式で計算すると、どうしてズレちゃうの? 同じ式なら同じ値になるんじゃないの?」

「いい疑問だ。その疑問に答えるために、確率変数という考え方を導入しよう」

「確率変数?」

3 標本平均と確率分布

「まず《全体》の平均を計算する式

$$\frac{1}{1000} \sum_{i=1}^{1000} x_i$$

と、標本の平均を計算する式

$$\frac{1}{20} \sum_{i=1}^{20} X_i$$

は、よく似ているけど概念的に少し異なるところがある。」

「データの個数が違うね」

「全体のデータ数は 1000 だから、1 つ 1 つの数値は 1/1000 の確率で生じていると見なせる。表で書くとこんな感じだよ。

この確率分布表を確率変数 X で表す。どういう値がどういう確率で現れるかの対応を示したものだよ。確率を具体的に書くとこうなる」

$$X$$
が 65.06 になる確率 $\iff P(X = 65.06) = \frac{1}{1000}$
 X が 11.44 になる確率 $\iff P(X = 11.44) = \frac{1}{1000}$

「ふむ」

「確率変数 X の期待値は

$$E[X] = \sum_{i=1}^{1000} P(X = x_i) x_i$$

と定義される。いま

$$P(X = x_i) = \frac{1}{1000}$$

だから

$$E[X] = \sum_{i=1}^{1000} P(X = x_i) x_i = \sum_{i=1}^{1000} \frac{1}{1000} x_i = \frac{1}{1000} \sum_{i=1}^{1000} x_i$$

となり、《全体》の平均値は、《全体》に対応する確率変数 X の期待値と 完全に一致する」

「そうだね」

「次に、標本から平均を計算する操作を考えてみよう。サイズ 20 の標本を $X_1, X_2, X_3, \ldots, X_{20}$ という記号で表す。標本から平均を計算する操作を確率変数を使って書けば

$$\frac{X_1 + X_2 + X_3 + \dots + X_{20}}{20}$$

となる。これは期待値ではなく、《複数の確率変数を、しかじかの演算に よって 1 つの確率変数として合成しますよ》という計算方法だ。この操作を記号 \bar{X} で表すことにする。つまり

$$\frac{X_1 + X_2 + X_3 + \dots + X_n}{n} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i = \bar{X}$$

だ。標本を使って計算するので《標本平均》と呼ばれることが多い。こ の《標本平均》は平均という名前がついているけど、

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i$$

という、ひとかたまりで確率変数なんだよ。だから1つの定まった値 じゃなくて、確率的にいろいろな値をとる。つまり分布をもっている」

「うーん、ややこしくなってきた。標本平均なのに1つの値じゃないって、どういうこと?」

「《全体》の平均値を考えてみよう。これは1つしか存在しない。1000個のデータを足して1000で割った数だから、必ず一つの定まった値となる。その値を記号 μ で表すと約束した」

「そうだったね」

「でも $ar{X}$ は、 $X_1,X_2,X_3,\ldots,X_{20}$ という標本の実現値によって、値が異なる。だから分布を持つ」

「ああなるほど。1 回目にとりだした 20 個の値と、2 回目にとりだした 20 個の値は違うから、 \bar{X} の実現値は毎回違う値になるんだ」

「そういうこと。

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i$$

は、これ自体が確率変数だってことがポイントだよ」

4 確率変数としての不偏分散

「次に《標本平均(確率変数)》をつかい、《不偏分散》を定義する。ここでn-1が登場するよ

《不偏分散》 =
$$\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (X_i - \bar{X})^2$$

さてこの不偏分散は確率変数かな? 定数かな?」

「うーん、どっちかな。 \bar{X} は確率変数だったけど、それをさらに足し合わせるとどうなるのかな」青葉は首をかしげた。

「じゃあ、ヒントを出そう。かく」

「かく?」

「り.....っ.....」

「りつ?」

「へん・・・・・・す・・・・・」

「確率変数? ヒントの出しかた下手すぎるでしょ」

「さて準備は整った。さっき僕らはサイズ 20 の標本を何度もとりだし、不偏分散を計算して、さらにその平均を求めた。あの実験は、じつは不偏分散という確率変数の《期待値》を計算する作業に対応している」

「ちょっとなに言ってるかわからない」

「実際に《不偏分散》という確率変数の期待値を計算してみよう」

一般的に、分散の定義を

$$V[X] = E[(X - E[X])^2]$$

とする。

以下では《全体》を表す確率変数 X の平均と分散を具体的に

$$E[X] = \mu$$
$$V[X] = \sigma^2$$

とおく。また標本 X_1, X_2, \ldots, X_n は X と同一であり、独立であるとする。

次にいくつか補題を導入するよ。補題は証明の論理構造を明確にする ための命題だよ。

補題 1.

$$E[X^2] = V[X] + E[X]^2$$

証明.

$$V[X] = E[(X - E[X])^2]$$
 $= E[X^2 - 2XE[X] + E[X]^2]$ 展開する $= E[X^2] - 2E[X]E[X] + E[E[X]^2]$ 定数を出す $= E[X^2] - 2E[X]^2 + E[X]^2$ まとめる $= E[X^2] - E[X]^2$

言い換えると

$$E[X^2] = V[X] + E[X]^2$$

補題 2.

$$E[X_i^2] = V[X] + E[X]^2$$

証明. 定義により X_1, X_2, \ldots, X_n は《全体》の分布 X と同じだから、任意の i について

$$E[X] = E[X_i], \quad V[X] = V[X_i]$$

が成立する。

補題 3.

$$E[\bar{X}^2] = \frac{1}{n}V[X] + E[X]^2$$

証明. 補題1のXを \bar{X} に置き換える。

$$E[\bar{X}^2] = V[\bar{X}] + E[\bar{X}]^2$$

次に

$$V[\bar{X}] = V\left[\frac{X_1 + X_2 + \dots + X_n}{n}\right]$$

$$= \frac{1}{n^2}V[X_1 + X_2 + \dots + X_n]$$

$$= \frac{1}{n^2}\{V[X_1] + V[X_2] + \dots + V[X_n]\}$$

$$= \frac{1}{n^2}nV[X] = \frac{1}{n}V[X]$$

および

$$E[\bar{X}] = E\left[\frac{X_1 + X_2 + \dots + X_n}{n}\right]$$

$$= \frac{1}{n}E[X_1 + X_2 + \dots + X_n]$$

$$= \frac{1}{n}\{E[X_1] + E[X_2] + \dots + E[X_n]\}$$

$$= \frac{1}{n}nE[X] = E[X]$$

より

$$E[\bar{X}^2] = V[\bar{X}] + E[\bar{X}]^2 = \frac{1}{n}V[X] + E[X]^2$$

これで準備は整った。あとは不偏分散の期待値を変形していけば証明 完了だよ。

$$\begin{split} E\left[\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2\right] &= E\left[\sum_{i=1}^n (X_i^2 - 2X_i \bar{X} + \bar{X}^2)\right] \\ &= E\left[\sum_{i=1}^n X_i^2 - 2\bar{X}\sum_{i=1}^n X_i + \sum_{i=1}^n \bar{X}^2\right] \\ &= E\left[\sum_{i=1}^n X_i^2 - 2n\bar{X}^2 + n\bar{X}^2\right] \\ &= E\left[\sum_{i=1}^n X_i^2 - n\bar{X}^2\right] \\ \end{split}$$
 期待値をばらす

П

$$=\sum_{i=1}^n E\left[X_i^2\right] - nE[ar{X}^2]$$
 期待値をばらす
$$=nE\left[X^2\right] - nE[ar{X}^2]$$
 補題を適用
$$=n(V[X]+E[X]^2) - nE[ar{X}^2]$$
 補題を適用
$$=n(V[X]+E[X]^2) - n(\frac{1}{n}V[X]+E[X]^2)$$
 補題を適用
$$=n(V[X]+E[X]^2) - (V[X]+nE[X]^2)$$

$$=nV[X]-V[X]=(n-1)V[X]$$
 まとめる
$$=(n-1)\sigma^2$$
 仮定より

まとめると、

$$E\left[\sum_{i=1}^{n} (X_i - \bar{X})^2\right] = (n-1)\sigma^2$$

であることが分かった。これを使って

$$E\left[\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(X_i-\bar{X})^2\right] = \left(\frac{1}{n-1}\right)E\left[\sum_{i=1}^{n}(X_i-\bar{X})^2\right]$$
$$= \left(\frac{1}{n-1}\right)(n-1)\sigma^2 = \sigma^2$$

つまり不偏分散 (確率変数) の期待値は《全体》の分散 σ^2 と一致する。

「おー、なんだかややこしい計算をしたけど、結果はスッキリしたね」 「もしnで割るとしたら

$$E\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \bar{X})^2\right] = \frac{1}{n}E\left[\sum_{i=1}^{n}(X_i - \bar{X})^2\right]$$
$$= \frac{1}{n}(n-1)\sigma^2$$
$$= \frac{n-1}{n}\sigma^2 < \sigma^2$$

だから、推定量の平均は必ず《全体》の分散 σ^2 よりも小さくなる。さきほどの実験結果は

n で割った推定値の平均:1184.31

n-1 で割った推定値の平均: 1279.28

本当の値: 1287.11

だから、たしかに n で割った推定量は n-1 で割った推定量より小さくなっている

「なるほどー」

「不偏分散のように、期待値が推定の目的であるパラメータと一致する 推定量を不偏推定量っていうんだよ。ちなみに不偏だからといって、よ い推定量とは限らない。有効性と言って・・・・・」

「それはまた今度でいいよ」

「OK。ちょうど 30 分だし、このへんで説明を終わろう。 じゃあ柿ピーでも食べようか」

花京院は柿の種の小袋を一つ開封した。

おわり

まとめ

- Q 不偏分散はどうして n-1 で割るの?
- A n-1 で割る推定量を使うと、その期待値が《全体》の分散と一致するからです。
- パラメータの推定に用いる確率変数(の関数)を推定量といいます。特に期待値がパラメータと一致する推定量を不偏推 定量と言います。
- 標本平均 $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i$ や不偏分散 $\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (X_i \bar{X})^2$ は不偏推定量の一種です。
- 確率変数(不偏推定量)としての不偏分散は分布を持っています。標本のデータから計算した不偏推定値は、不偏推定量の分布の実現値と考えることができます。