JMP情報局 2024年4月9日 14:00-14:30

予測区間と許容区間について

~単変量の計量値に対する

頻度主義的手法に話を限定して~

SAS Institute Japan株式会社 JMPジャパン事業部 テクニカルグループ 小野裕亮(シニアテスター)



自己紹介

小野裕亮



自己紹介

小野裕亮(おのゆうすけ)

- 現在: JMPのテスター
 - 動作確認·不具合報告
 - ソフトウェア本体とドキュメントの日本語校正
- ・ 職歴: SASジャパン → フリーター → 15年程前, SASジャパンへ出戻り
- 教育的背景:社会学(学士)
- 資格
 - RSS/JSS Graduate Diploma (日本初;この資格は,現在,廃止されています。)
 - 統計検定 I級(医薬生物学)
- 共訳本
 - Tourangeau, R.T., Conrad, F.G. and Couper, M.P.著(2013) 大隅昇・鳰真紀子・井田潤治・小野裕亮 訳(2019) 『ウェブ調査の科学』朝倉書店
 - Le Roux, B. and Rouanet, H. 著(2010) 大隅昇・小野裕亮・鳰真紀子 訳(2021) 『多重対応分析』オーム社



本番組の内容



予測区間と許容区間について

~単変量の計量値に対する頻度主義的手法に話を限定して~

番組内容:予測区間と許容区間の大まかなイメージを説明し,JMPで実演

- ・ 3つの方向に関して話を限定
 - 単変量だけに話を限定
 - 計量値だけに話を限定(特に,パラメトリックな分析としては正規分布を仮定)
 - 頻度主義だけに話を限定
- ・番組の構成
 - 信頼区間では駄目な状況の例
 - 3種の区間のイメージ
 - JMP「一変量の分布」の実演
- ・ おまけ(資料には書いたが,本日話さない内容)



信頼区間では駄目な状況の例



信頼区間では駄目な状況の例

- ある化学工程で薄膜(はくまく,うすまく)を生産する予定がある。
- ・試験運用の工程で、その薄膜を50枚だけ製造した。
- ・ 薄膜の中心位置での測定値を得たところ, 標本平均が0.5 μm, 標本標準偏差が0.0 l μmであった。
- ・ 将来の本番運用の工程にて…
 - (a) | 枚の薄膜の薄さは,だいたいどれぐらいの幅に収まるのか?
 - (b) 薄膜の薄さが99.0%以上の確率で含まれる区間は,だいたい,どれぐらいの幅か?
- ・これらの疑問について、母平均に対する信頼区間を用いるのは"不適切"



信頼区間では駄目な状況の例

なぜ, 先ほどの例で母平均に対する信頼区間は"不適切"なのか?

・話を簡単にするために,真の母平均と母標準偏差が既知だとして,かつ,母集団分布が正規分布であり,かつ,その母集団分布も既知だとする。

$$Y \sim N(0.5, 0.01^2)$$

- この場合の母平均に対する信頼区間は,[0.5,0.5](0.5以上0.5以下)。
- 一方, Yが99%で含まれる区間は, 0.5 ± 2.576×0.01。
- (Neyman流の頻度主義に立てば)母平均は固定された定数。
- 一方,たとえ母平均が固定されていたとしても,個々のYはばらつく。
- 前頁の疑問に答えるには、Yのばらつきを考慮した区間が必要。



信頼区間・予測区間・許容区間の使い分け

信頼区間

母集団分布のパラメータがどれぐらいか?
 母集団分布のパラメータ:母平均,母標準偏差,母分位点 …etc

予測区間

- 将来の母集団から抽出される | 個の観測値がどれぐらいか?
 - (a) | 枚の薄膜の薄さは,だいたいどれぐらいの幅に収まるのか?

許容区間

- ・将来の母集団から抽出される観測値の99%以上が含まれる区間がどれぐらいなのか?
 - (b) 薄膜の薄さが99.0%以上の確率で含まれる区間は,だいたい,どれぐらいの幅か?
- 注) 母平均の信頼区間を除き,正規性を仮定して求められた区間は,正規性からのズレに対して頑健(ロバスト)ではない。母平均の信頼区間は,正規性からのズレに対して頑健。

3種の区間のイメージ



捕まえようとしているものが違う

喩え:投げ縄の輪のなかに捕獲対象が含まれるようにしたい



小野裕亮・画(2024年3月28日)

信頼区間

ネズミの巣穴の入り口

予測区間

• | 匹のネズミ

許容区間

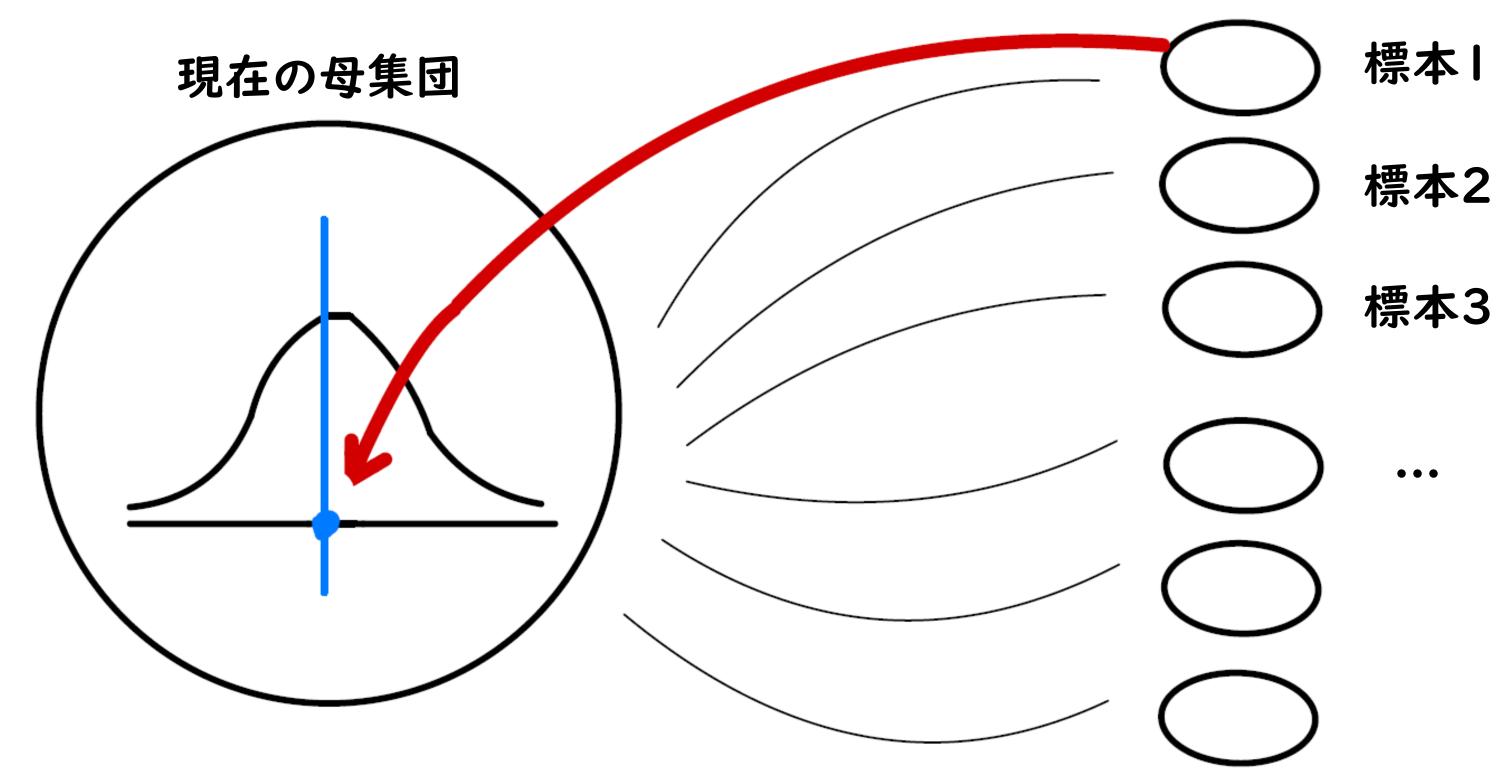
• 100万匹中99万匹のネズミをごっそり

魚を捕まえる網に信頼区間を喩える説明は、いくつかの入門書で散見される。たとえば、Rumsey(2011:2nd ed., p.204)。

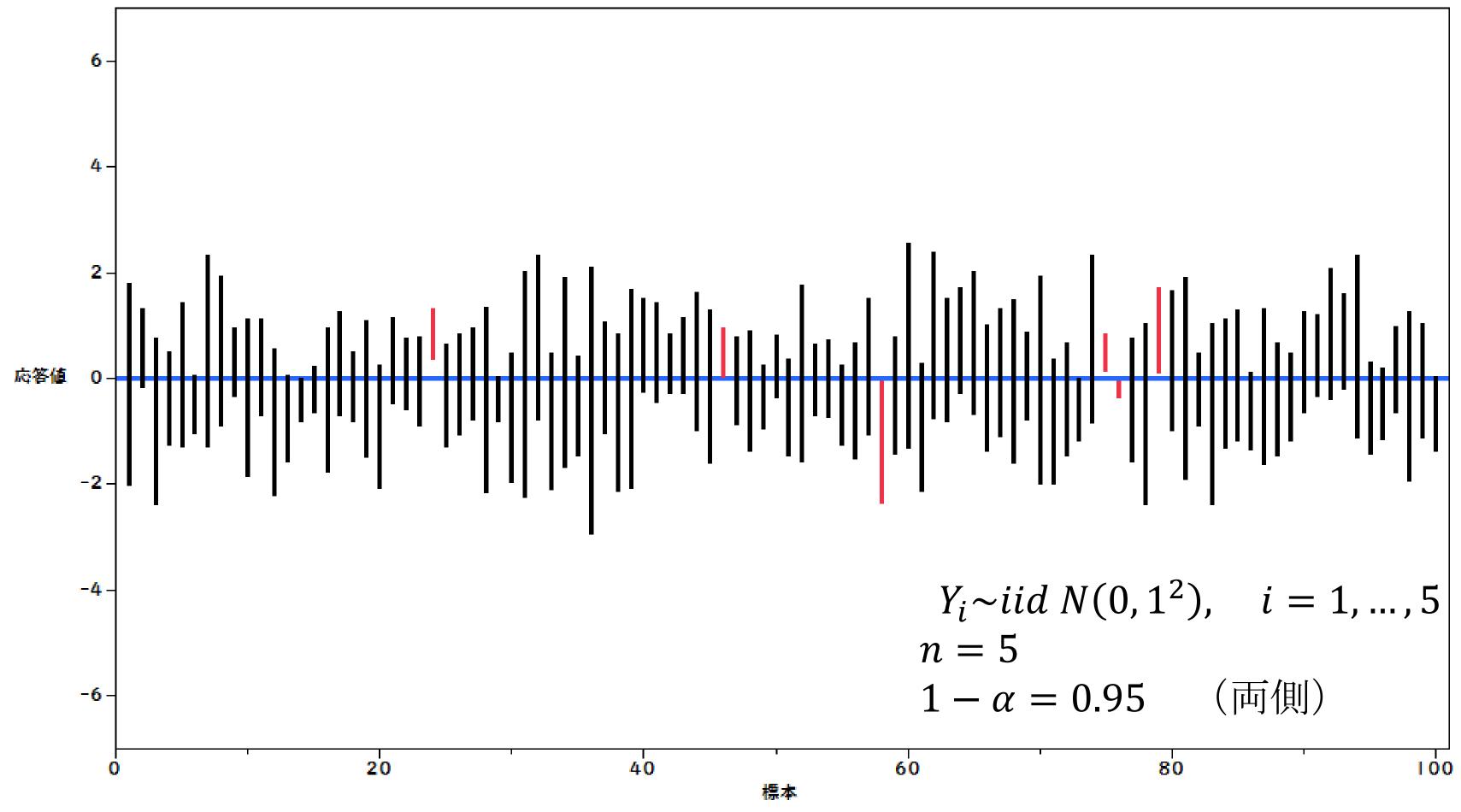


信頼区間のイメージ①

Neyman流の教科書的なイメージ:同一母集団からの繰り返し抽出





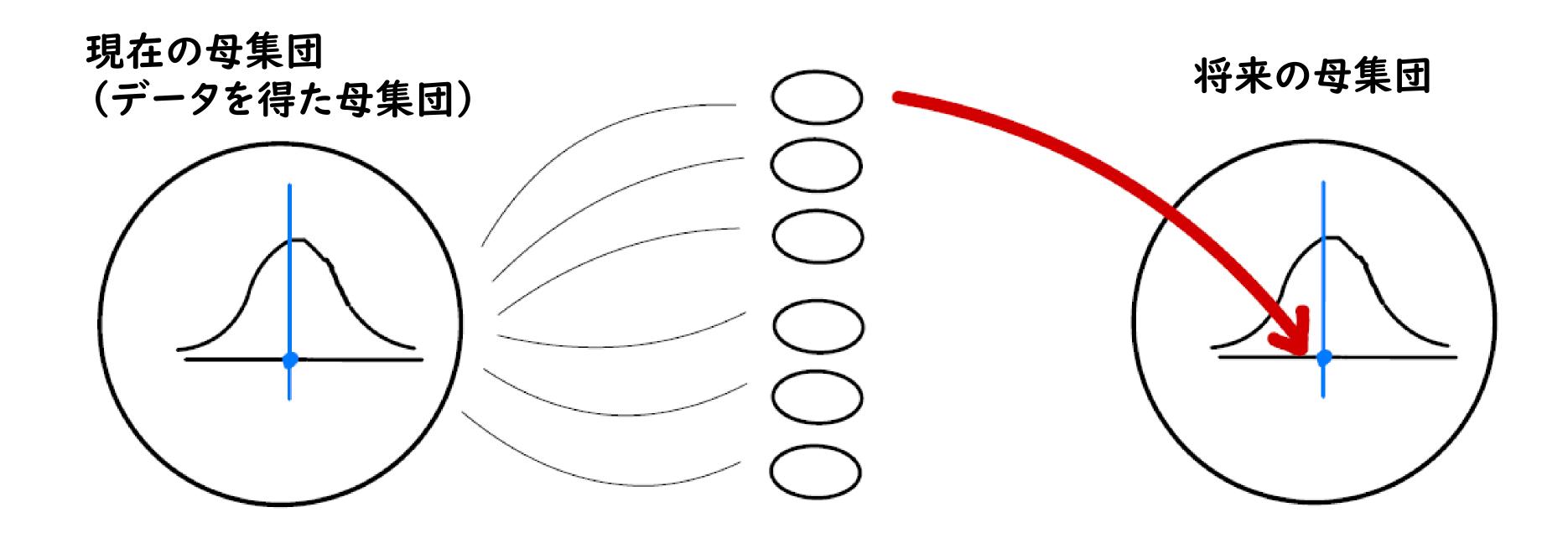


注1: "iid" とは, independent and identically distributed (独立同分布) 注2: この種のイメージ図は,いまや高校教科書にも

の略語。 JMP

信頼区間のイメージ②

「統計的管理状態(=安定状態)」や「自然の斉一性」が成り立っているならば...

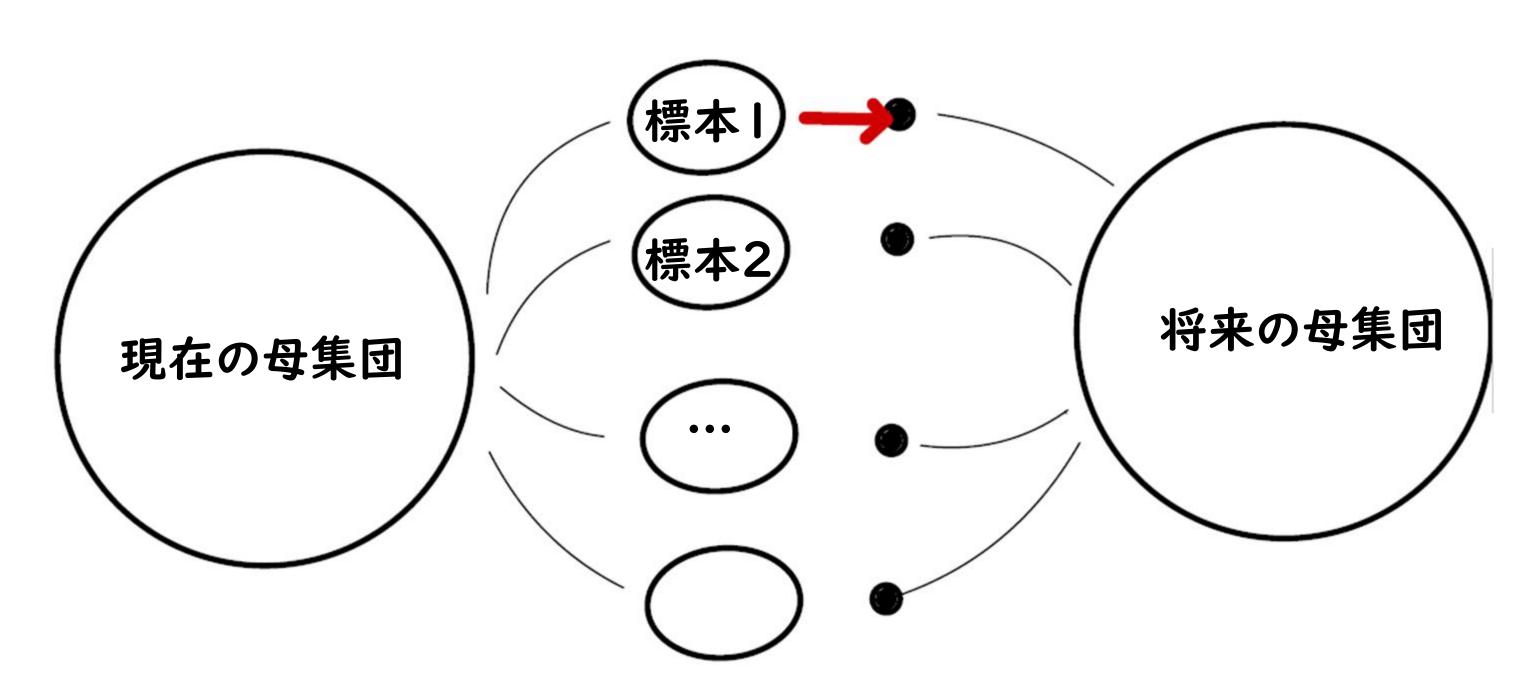




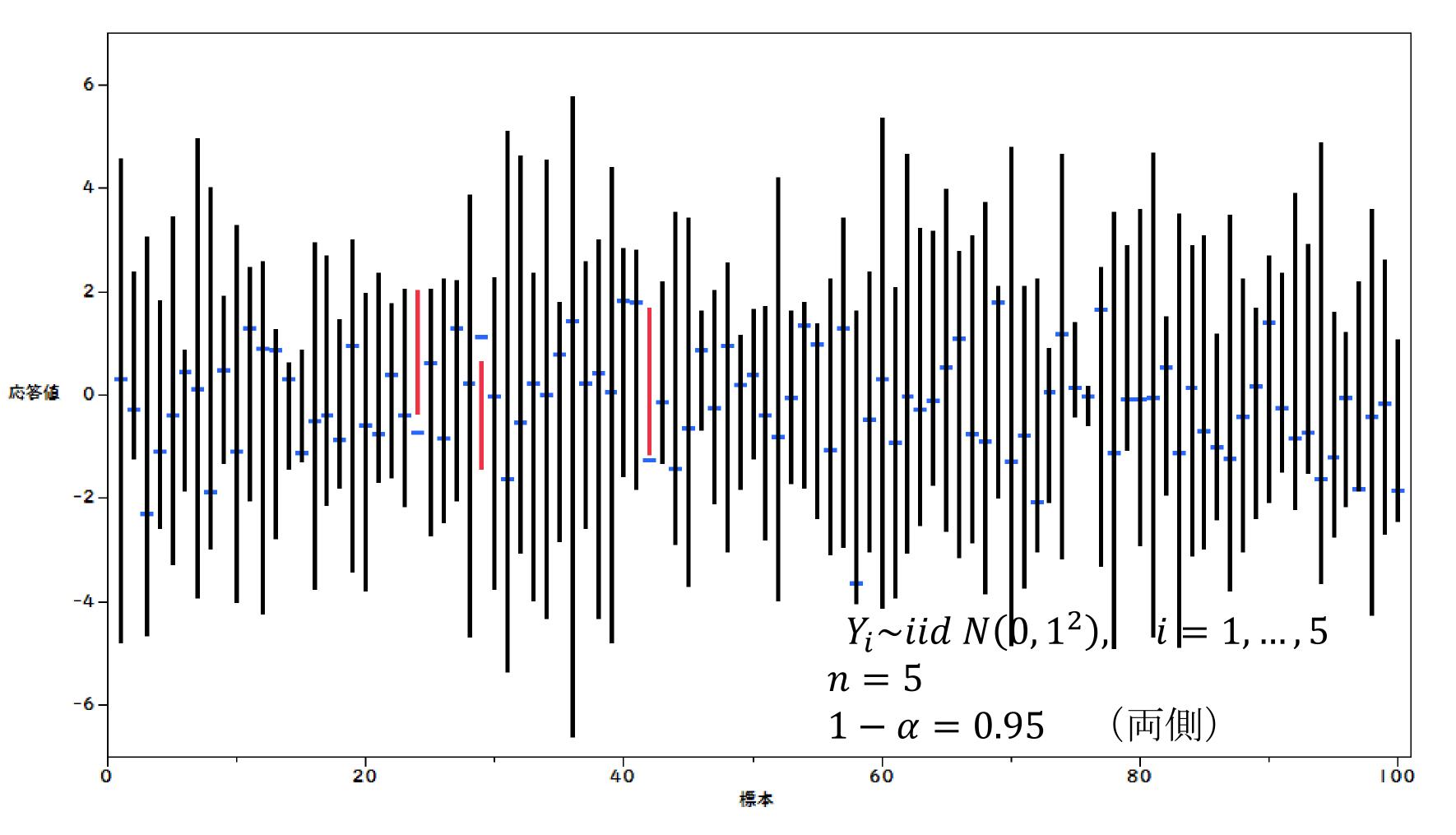
予測区間のイメージ

Neyman流頻度主義でのイメージ

• I個の観測に対する予測区間(「I個」以外のものは後述)



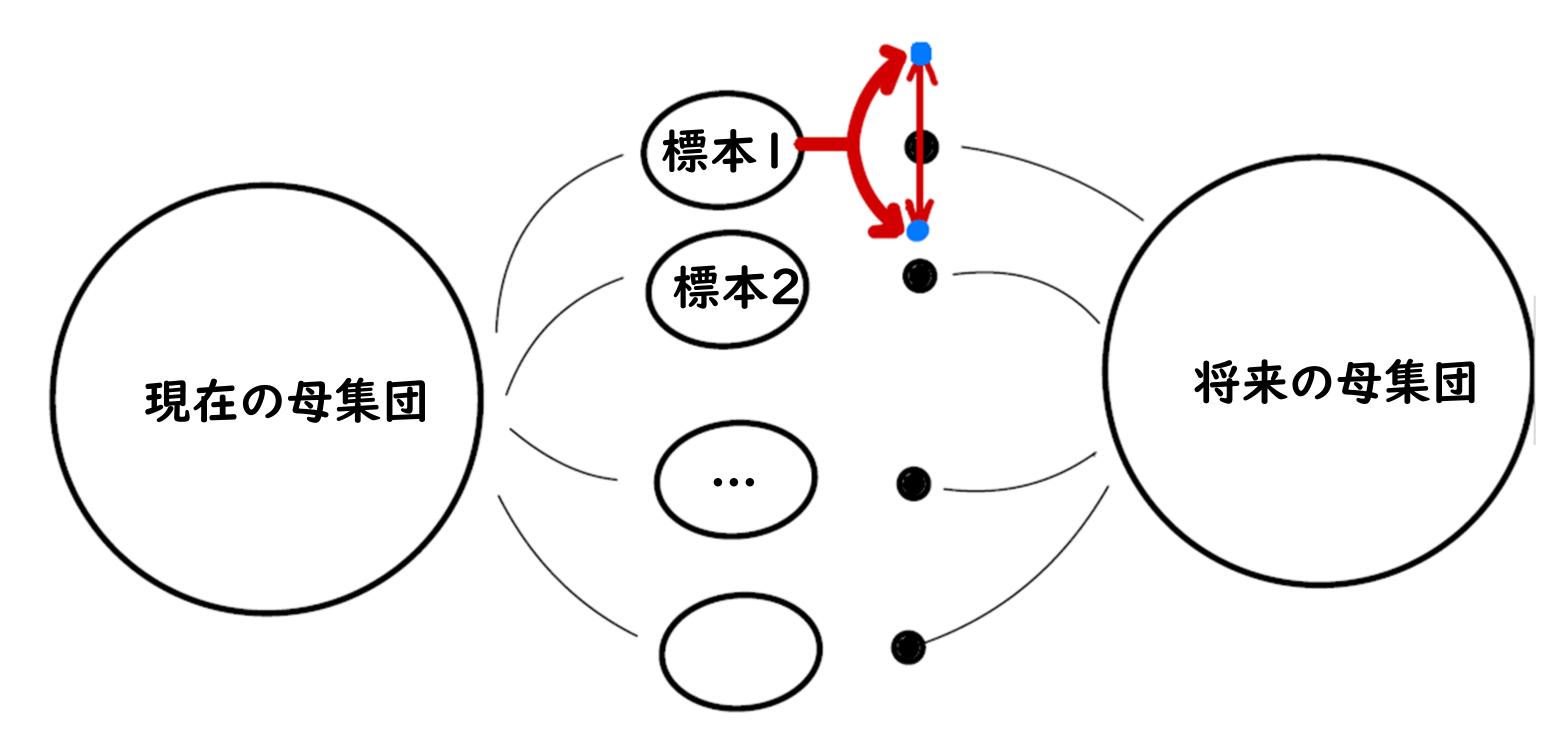




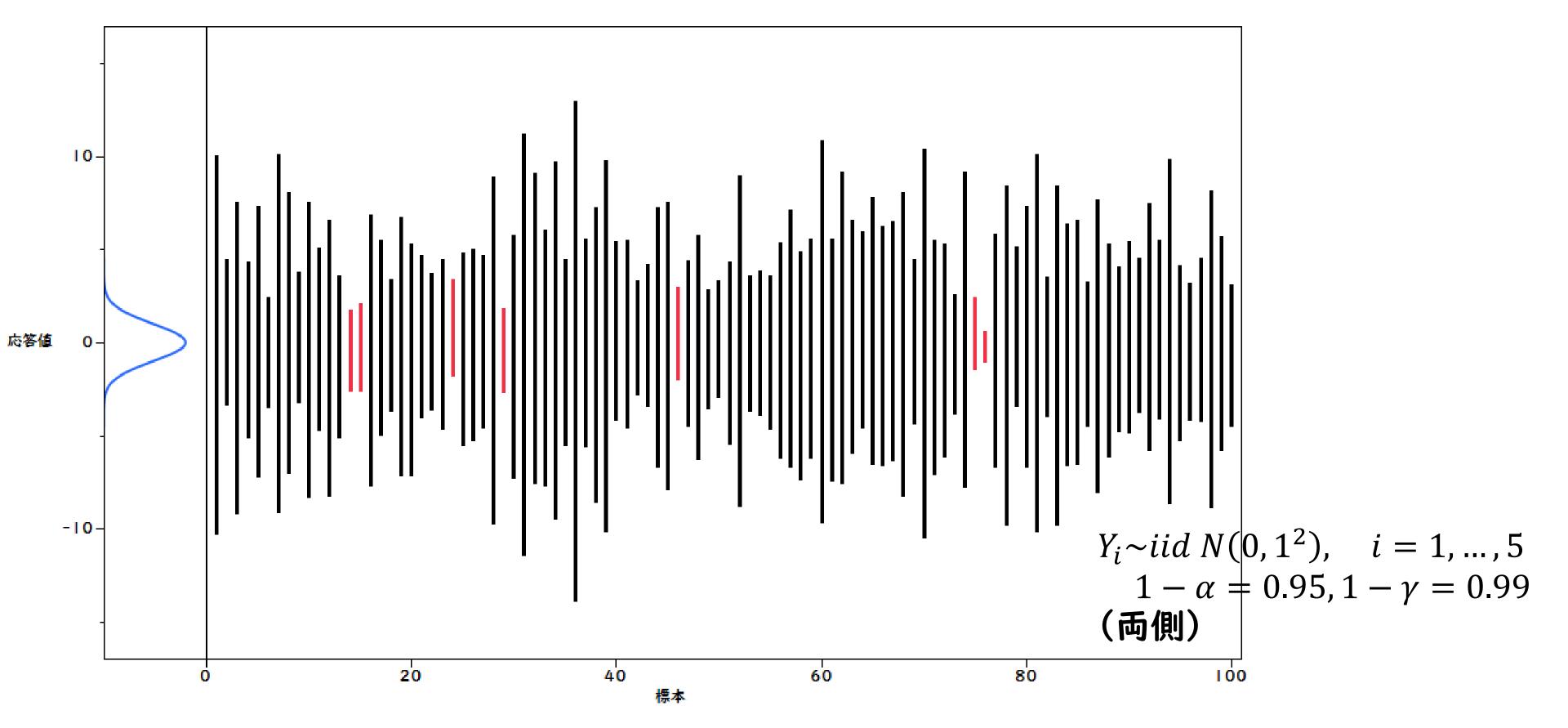


許容区間のイメージ①

Neyman流頻度主義でのイメージ





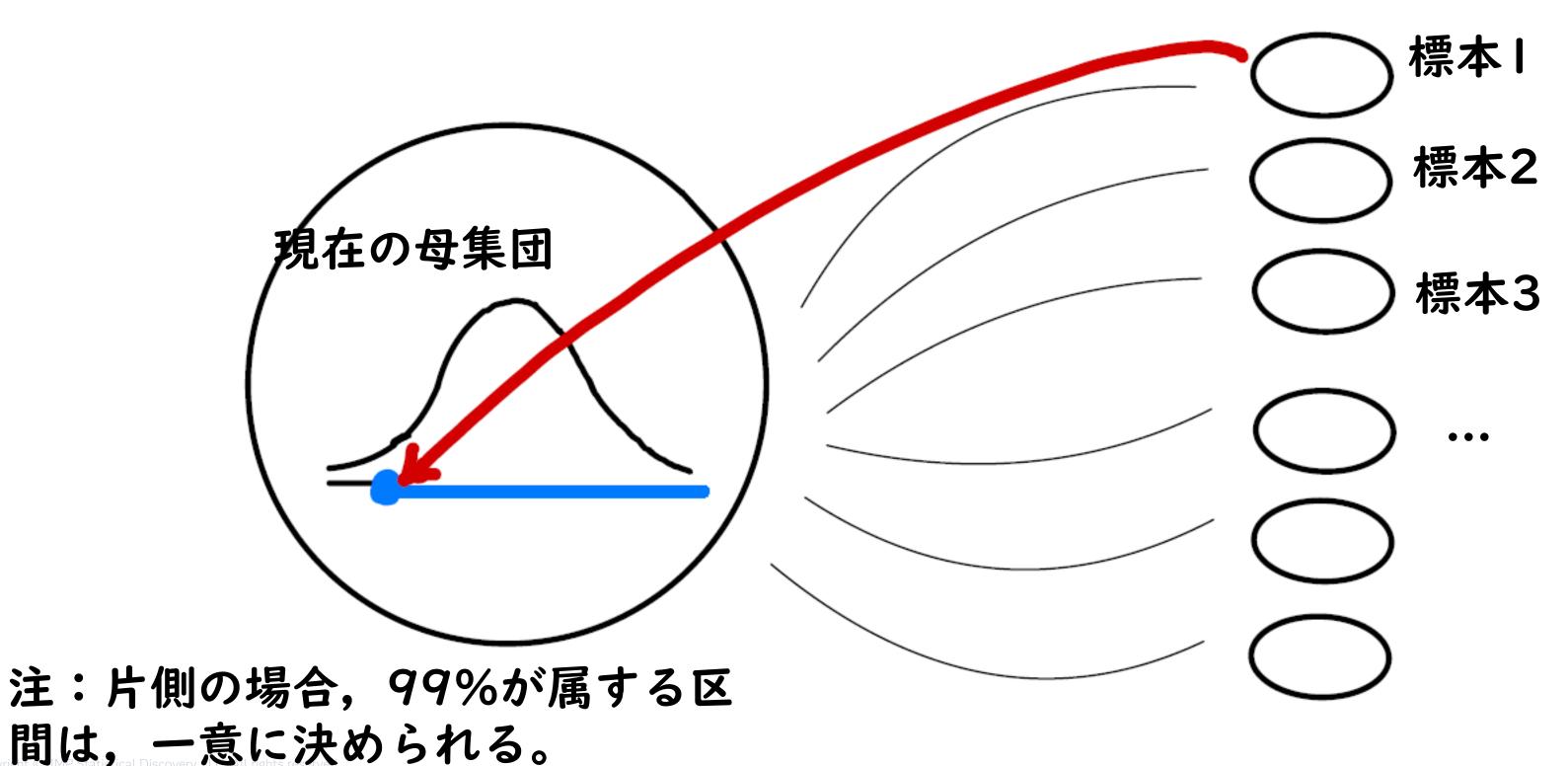


注:Y軸のスケールは、前2つの図から変更している



許容区間のイメージ②:片側許容区間に限り

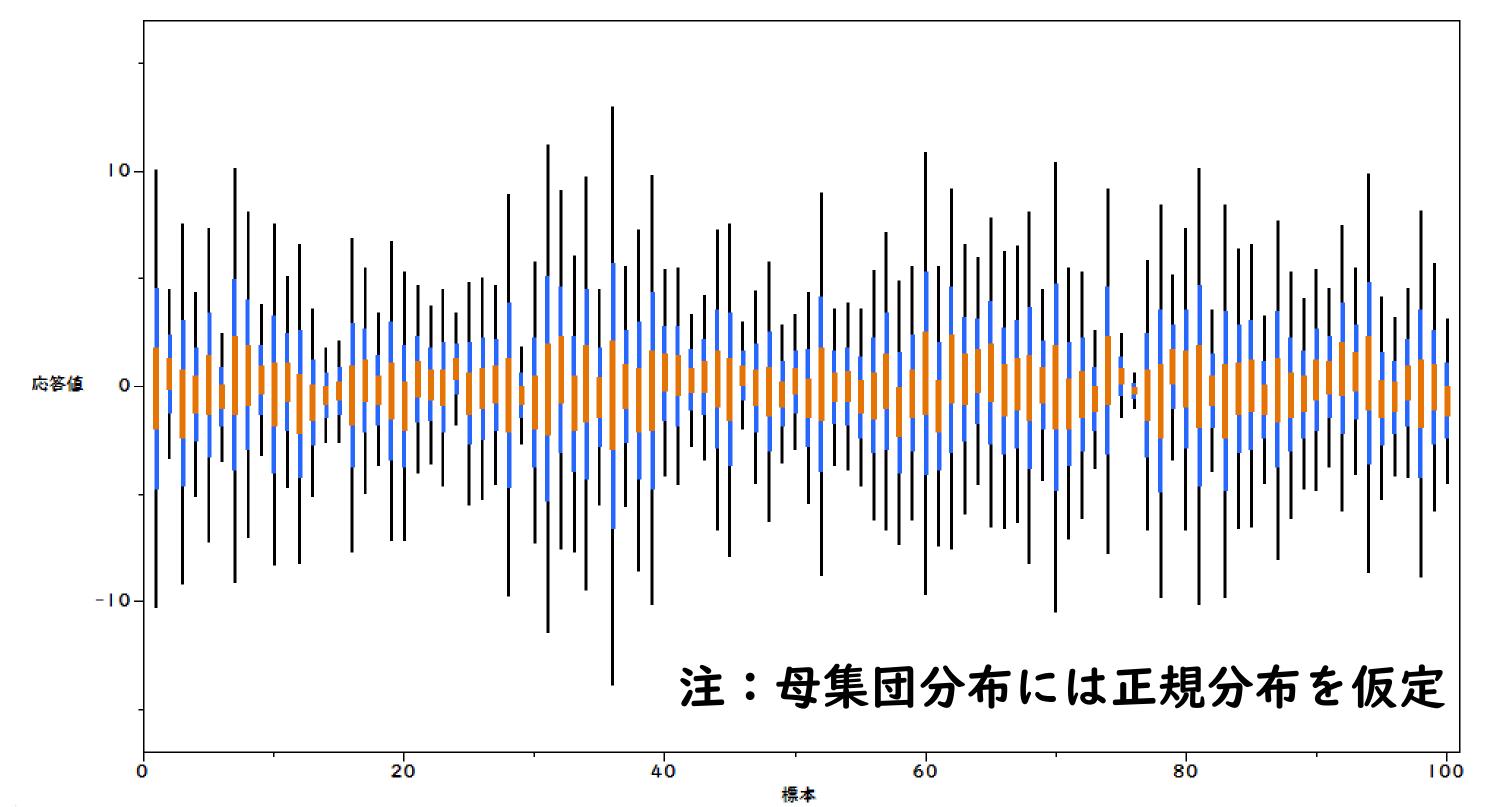
Neyman流頻度主義でのイメージ





3種の区間の比較

オレンジ:母平均の95%信頼区間,青:95%予測区間,黒:(95%,99%)許容区間









- JMPの「一変量の分布」プラットフォーム
 - 予測区間
 - ・ 正規分布を仮定したときの予測区間
 - 欠点:正規分布からのズレに対して、頑健(ロバスト)ではない。母平均に対する信頼区間とは異なり、中心極限定理が働かない。(注:ただし、将来のm個から計算される標本平均に対する予測区間でmが大きい時は、中心極限定理が働き、正規分布からのズレに頑健になる。)
 - 先ほど説明した予測区間は,
 - ・ 将来の | 個の観測が含まれる予測区間

である。他にも、JMPの「一変量の分布」では次のような予測区間を求めることもできる

- · 将来のm個の観測すべてが含まれる予測区間
- 将来のm個の観測から計算される標本平均が含まれる予測区間
- · 将来のm個の観測から計算される標本標準偏差が含まれる予測区間



- JMPの「一変量の分布」プラットフォーム
 - 許容区間
 - (a) 正規分布を仮定したときの許容区間
 - 欠点:予測区間と同じ欠点をもつ。正規分布からのズレに対して、頑健(ロバスト)ではない。母平均に対する信頼区間とは異なり、中心極限定理が働かない。
 - (b) 特定の分布をしないときの許容区間
 - 以下のような欠点がある
 - I) 正規分布を仮定したときよりも, 幅が広めになる
 - 2) 実質的な信頼水準が,実質的な信頼水準よりも保守的
 - 3) 標本サイズが少なく, I-γが大きめのときには, 計算ができない (外挿をしない)



まとめ



まとめ

信頼区間

- ・母集団分布のパラメータがどれぐらいか?この工程の薄膜の厚さの母平均は、0.497~0.503ぐらい(信頼係数95%)予測区間
- ・将来の母集団から取り出した | 個の観測値がどれぐらいか?この工程の | 枚の薄膜の厚さは, 0.480~0.520ぐらい(信頼係数95%)

許容区間

将来の母集団から取り出した観測値の99%がある区間はどれぐらいか? この工程の99%の薄膜の厚さが含まれる区間は,0.469~0.53 I ぐらい(信頼係数95%)

注) 今回のデータ例は, 母集団分布は正規分布であった。



Q&Aの時間



ありがとうございました

小野裕亮(おのゆうすけ)





おまけ

これ以降のスライドは、放送では触れません



注意:JMPでの用語



注意:JMPでの用語

「個別の信頼区間」(Individual Confidence Interval)

- JMPのなかで予測区間が、「予測区間」と呼ばれていない個所がある
- JMPの「モデルのあてはめ」で最小2乗推定したときの[列の保存]
 - ここでは,予測区間が,「個別の信頼区間」(Individual Confidence Interval)と呼ばれている
 - 平均(Xで条件付けたときの平均)に対する信頼区間は,「平均の信頼区間」と呼ばれている
- 同じ「モデルのあてはめ」でも、予測プロファイルでは「予測区間」と呼ばれている
 - JMPI8での新機能
 - JMP18から,予測プロファイルにて平均に対する信頼区間のほかに,予測区間も描かれるように



3種の区間の定義



信頼区間の定義

- まず,同一母集団から標本 $Y=(Y_1,...,Y_n)^T$ を繰り返し抽出することを想像する。
- 各標本から特定の計算方法で区間(L(Y), U(Y))を計算したときに、その区間に真の母集団パラメータ θ が含まれる確率が $(1-\alpha)$ %以上となるようにする (= "確率"信頼区間)。

$$\Pr(L(Y) < \theta < U(Y)) \ge 1 - \alpha$$

• そのように得られた区間に対して、現在のデータ $y = (y_1, ..., y_n)^T$ を代入する(= "実現"信頼区間)。



予測区間の定義(将来の1個の観測に対する予測区間)

- まず,同一母集団から標本 $Y = (Y_1, ..., Y_n)^T$ を繰り返し抽出することを想像する。
- さらに、その同じ母集団から、追加の標本 Y_{n+1} も繰り返し抽出することを想像する。
- 各標本から特定の計算方法で区間(L(Y), U(Y))を計算したときに、その区間に Y_{n+1} が含まれる確率が $(1-\alpha)$ %以上となるようにする (="確率"予測区間)。

$$\Pr(L(\mathbf{Y}) < Y_{n+1} < U(\mathbf{Y})) \ge 1 - \alpha$$

- (この確率は、 $Y_1, ..., Y_n, Y_{n+1}$ の同時分布におけるもの)
- そのように得られた区間に対して、現在のデータ $y = (y_1, ..., y_n)^T$ を代入する (= "実現" 予測区間)。



予測区間の定義 (将来のm個の観測に対するもの)

- まず,同一母集団から標本 $Y=(Y_1,...,Y_n)^T$ を繰り返し抽出することを想像する。
- さらに、その同じ母集団から、追加の標本 $Y_{new}=(Y_{n+1},...,Y_{n+m})^T$ も繰り返し抽出することを想像する。
- 各標本から特定の計算方法で区間(L(Y),U(Y))を計算したときに、その区間に Y_{new} のすべてが含まれる確率が $(1-\alpha)$ %以上となるようにする(="確率"予測区間)。

$$\Pr(Y_{new})$$
のすべての要素が(L(Y), U(Y)に属する) $\geq 1 - \alpha$

- (この確率は、 $Y_1, ..., Y_n, Y_{n+1}, ..., Y_{n+m}$ の同時分布におけるもの)
- そのように得られた区間に対して、現在のデータ $y = (y_1, ..., y_n)^T$ を代入する (= "実現" 予測区間)。

補足:JMPの「一変量の分布」では、Bonferroni近似でこれを計算。



予測区間の定義 (将来のm個から計算される統計量に対するもの)

- まず,同一母集団から標本 $Y=(Y_1,...,Y_n)^T$ を繰り返し抽出することを想像する。
- さらに、その同じ母集団から、追加の標本 $Y_{new} = (Y_{n+1}, ..., Y_{n+m})^T$ も繰り返し抽出することを想像する。この追加の標本から計算される何かしらの統計量を $T(Y_{new})$ と記す。
- ・各標本から特定の計算方法で区間(L(Y), U(Y))を計算したときに、その区間に $T(Y_{new})$ が含まれる確率が $(1-\alpha)$ %以上となるようにする (= "確率"予測区間)。

$$\Pr(L(\mathbf{Y}) < T(\mathbf{Y}_{new}) < U(\mathbf{Y})) \ge 1 - \alpha$$

- (この確率は、 $Y_1, ..., Y_n, Y_{n+1}, ..., Y_{n+m}$ の同時分布におけるもの)
- そのように得られた区間に対して、現在のデータ $y = (y_1, ..., y_n)^T$ を代入する (= "実現"予測区間)。



許容区間の定義①

- ・まず,同一母集団から標本 $Y=(Y_1,...,Y_n)^T$ を繰り返し抽出することを想像する。
- ・さらに、その同じ母集団から、追加の標本 Y_{n+1} も繰り返し抽出することを想像する。各標本から特定の計算方法で区間(L(Y),U(Y))を計算したときに、「その区間に X_{n+1} が含まれる確率が $(1-\gamma)$ %以上となる」ようになる確率が $(1-\alpha)$ %以上となるような区間を求める(= "確率"許容区間)。

$$\Pr_{\mathbf{Y}} \left(\Pr_{\mathbf{Y}_{n+1} | \mathbf{Y}} (\mathbf{L}(\mathbf{Y}) < Y_{n+1} < U(\mathbf{Y}) | \mathbf{Y}) > 1 - \gamma \right) \ge 1 - \alpha$$

• そのように得られた区間に対して、現在のデータ $y = (y_1, ..., y_n)^T$ を代入する(="実現"許容区間)。 (L(y), U(y))



許容区間のもうひとつの定義② (片側許容区間に限る)

- まず,同一母集団から標本 $Y=(Y_1,...,Y_n)^T$ を繰り返し抽出することを想像する。
- ・この母集団の下側累積確率 γ の分位点を θ_{γ} とする。
- ・ 各標本から特定の計算方法で区間 $(L(Y), +\infty)$ を計算したときに、その区間に θ_{γ} が含まれる確率が $(1-\alpha)$ %以上となるような区間を求める (= "確率"許容区間)。

$$\Pr\left(L(Y) < \theta_{\gamma}\right) \ge 1 - \alpha$$

• そのように得られた区間に対して、現在のデータ $y = (y_1, ..., y_n)^T$ を代入する (= "実現"許容区間)。

$$(L(y), +\infty)$$



JIS Z8 I 0 I - I:20 I 5 (ISO 3534-I:2006) での3種の区間の説明



1.28 (両側)信頼区間

「母数(2.9) θ の区間推定(1.25)で,統計量(1.8) T_0, T_1 が $P[T_0 < \theta < T_1] \ge 1 - \alpha$ を満たす区間(T_0, T_1)」

この後,注記 I にて「信頼区間は,観測された信頼区間が母数の真値を含む確率(2.5)を意味するものではない(真値は,観測された信頼区間に含まれるか,含まれないかのいずれかである。)」と強調されている。←これは,現在で主流であるNeyman流解釈。



1.30 予測区間

「連続値の母集団(I.I)から追加的にランダムサンプル(I.6)を抽出したときに、少なくとも与えられた個数より多くの個数が、所定の信頼率で含まれることが主張可能な変量値の範囲。」

この定義は、" $k \ of \ m$ " (m個中のk個) に対する予測区間の定義となっている。

今回の発表では、"1of1"の予測区間しか触れていない。



1.26 統計的許容区間

「ランダムサンプル(I.6)から決定され,所定の信頼率で,その母集団(I.I)の定められた割合を少なくとも含むような区間。」





実際には, 信頼区間に対してはいろいろな解釈がある。

入門書でよくみられるものは,(I)。

実用上でひそかに使われているのは,(2)←真面目な人には「誤用」

- (I)2者間における行動を決めるルール
- ・(2)パラメータに対する不確実性を表現する
- (3) 帰無仮説値が決まっていない時の検定結果を提示する
- ・この発表では、どちらかというと(2)の解釈に基づいた。しかし、教科書的には主流ではない。



- (1)2者間における行動を決めるルール
- ・ 求められた信頼区間にパラメータが含まれる確率は0%か100%かである。
- しかし、母集団からの繰り返し抽出を行った場合、この行動ルールに従えば95%で真値を含む。よって、とりあえず、この信頼区間のなかに真値が含まれているように振る舞おう。

- たとえば、供給業者と顧客との取引での取り決め。
- → Neyman流



- (2)パラメータに対する不確実性を表現するもの
- ・パラメータの真値が含まれているかどうかは分からないが、100回中95回は真値が含まれているのだから、まあ、この求められた信頼区間に真値が含まれていると解釈してもいいんじゃない。
- · → Fisher流

- 過去にNeymanとFisherの間で激しい議論が行われた。
- 現在では、Neyman流の解釈のほうが教科書的であり、この解釈は誤用とされる。
- しかし,実用ではFisher流の解釈がひそかに使われている。



- (3) 帰無仮説値が決まっていない時の検定結果を提示するためのもの
- ・(多重比較検定などではない)単純な状況では,信頼区間は検定を裏返したもの。
- ・検定における帰無仮説 H_0 : $\theta = \theta_0$ の θ_0 をいくつにするかが人によって違う場合で、かつ、有意水準が固定されている場合に、検定結果を表示するには、信頼区間を提示したのでOK。
- 95%信頼区間に含まれていれば5%有意じゃなく,95%信頼区間に含まれていなければ5%有意。

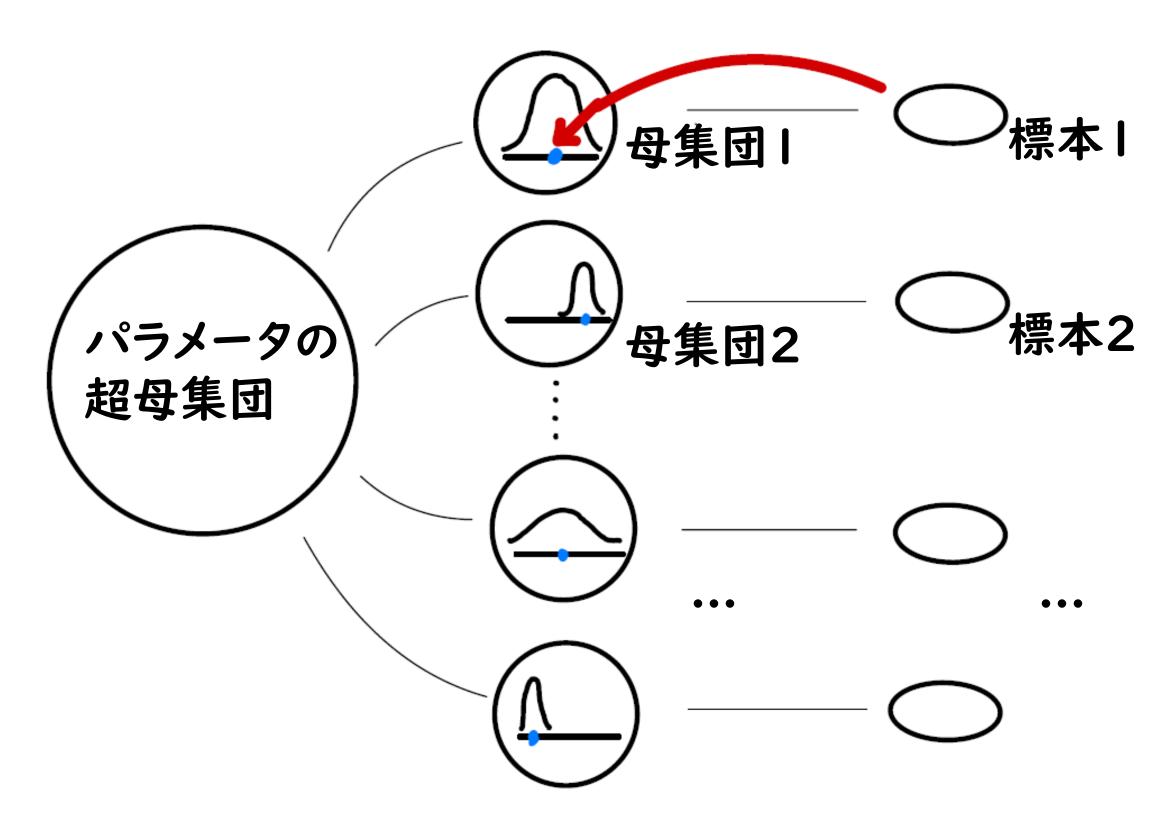


Fisher流推測区間(六信頼区間)のイメージ

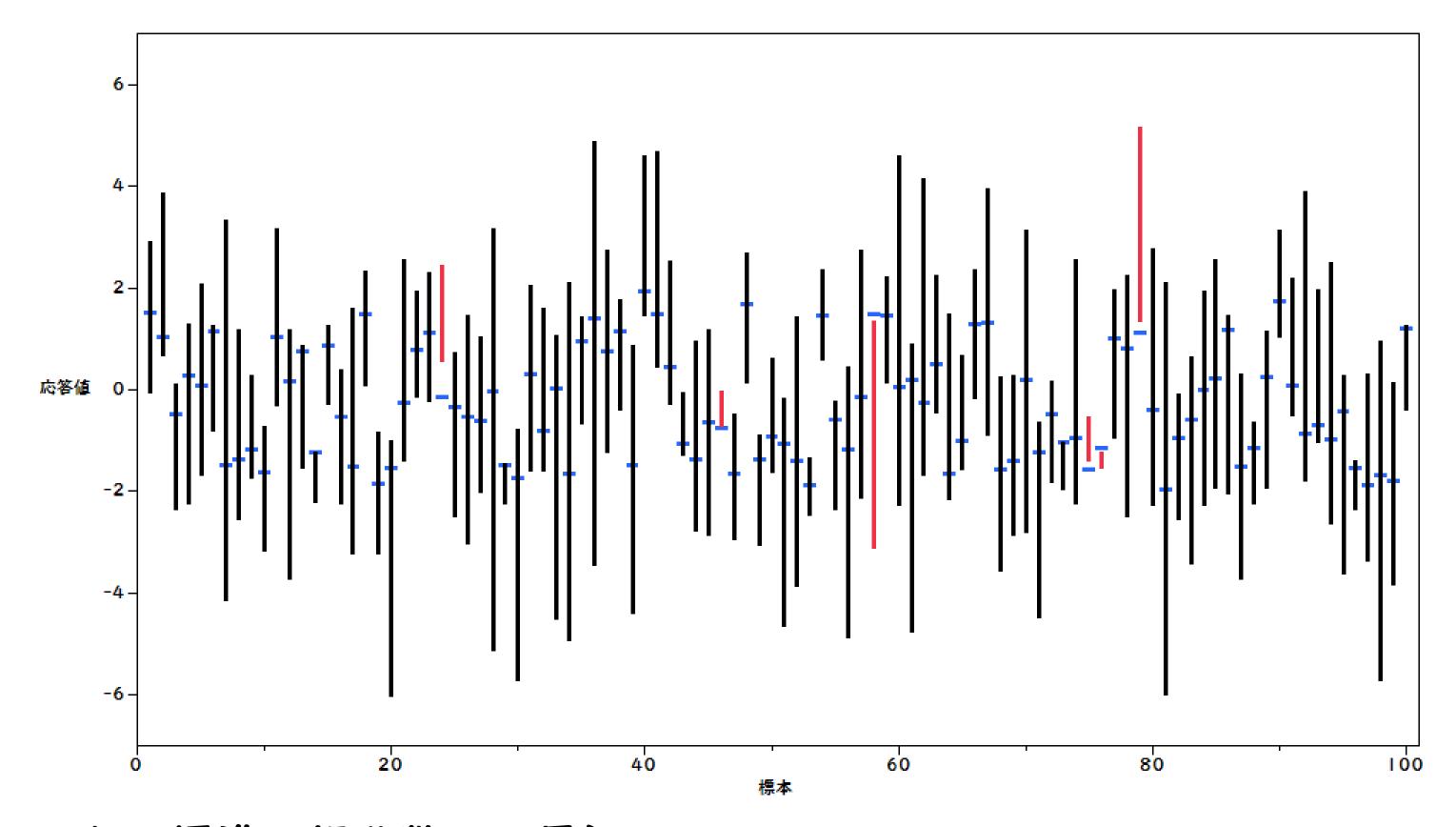


余談:推測区間(≒信頼区間)のイメージ

Fisher流推測区間のイメージ(かなりマイナー)







元になる標準正規乱数は、最初の信頼区間の例と同じものを利用

$$X_i | (\mu, \sigma) \sim iid N(\mu, \sigma^2), \quad i = 1, ..., 5$$

 $\mu \sim \text{Unif}(-2, 2), \sigma \sim \text{Unif}(0.7, 2.5)$
 $1 - \alpha = 0.95$ (両側)



3種の区間における相互の関係



3種の区間における相互の関係

- 母平均に対する信頼区間
 - $-m \rightarrow +\infty$ としたときの標本平均に対する予測区間
- ・母標準偏差に対する信頼区間
 - $-m \rightarrow +\infty$ としたときの標本標準偏差に対する予測区間
- 1 γの片側許容区間
 - 上側累積確率(もしくは下側累積確率)が1-γの分位点に対する信頼区間
- 1 γの許容区間
 - $-\frac{k}{m}=1-\gamma$ で, $m\to +\infty$ としたときの"k of m"予測区間("k of m"予測区間は今回,触れていない。また,JMPで未サポート)



統計的推測全般を利用する上での注意点



Demingによる記述的試験と予測的試験の区別

参考: Meeker et al. (2017: 2nd ed.)

- · 記述的試験(enumerative study)
 - データを得た母集団に対する推測を行う
 - ロットの抜き取り検査(ロットから一部を抜き出し,ロットの合否を決める)
 - 選挙当日の出口調査(投票所にて一部の人に誰に投票したかを聞く)
 - 内閣支持率調査
- 予測的試験(analytical study)
 - 将来の母集団に対する推測を行う
 - 工程の試験運用から、本番運用を推測する
 - 試作品をいくつか作って実験し、その結果から本番の工程を設計する
 - 選挙投票日前の情勢調査
- 実務で必要とされるのはほとんどが予測的試験
- 予測的試験は、記述的試験よりも固有技術や固有知識が必要



従来の統計的推測に関する批判

- Kass, R.E.(2011) Statistical Inference: The Big Picture. Statistical Science, 26(1), 1-9.
- 今回の話に関係する主な主張:
- 頻度主義的な信頼区間にしろ、Bayes主義的な信用区間にしろ、それらは 理論的世界(theoretical world)で算出されたものであり、現実世界 (real world)ではない。
- 「母集団 vs 標本」の枠組みで、かつ、それらが現実世界での話のように 教えるのはやめよう。



統計的推測におけるいくつかの誤り

- 統計的推測での前提がすべて正しくても生じる誤り
 - 第1種の誤り: 真値の一点について,求めた区間が,その点を含まない誤り。
 - 第2種の誤り: 真値ではないある一点について、求めた区間が、その点を含む誤り。
 - 前提がすべて正しく、その前提が既知ならば、これら2種の誤りは定量化できる
- 実務上は、ほかにもいろいろな誤りがある
 - 母集団分布の型が間違えている
 - 母集団分布として正規分布を仮定したが、実際には対数正規分布。→ 予測区間や許容区間は、正規分布からのズレに対してロバスト(頑健)ではない
 - 予測的調査において、将来の母集団が現在の母集団と異なっている
 - 試験環境と本番環境が全然,違う
 - 記述的調査において、外的妥当性がない
 - 駅前アンケートの結果から、日本全体を推測



許容区間や予測区間を利用する上での注意点



正規分布以外の分布でのパラメトリックな許容区間

- ・近似的(漸近的)な片側許容区間は、「寿命の一変量」で求めることができる
 - 「寿命の一変量」では、さまざまな位置-尺度分布および対数-位置-尺度分布を最尤推定にて推定することができる。
 - また、「寿命の一変量」では、分位点に対する信頼区間が求められる。
 - 片側許容区間は,分位点に対する片側信頼区間であることを利用して,計算。
 - 両側許容区間は,保守的なものであれば,上下の1-lpha/2の片側許容区間を2回,求めることで得られる。
 - $\Pr(Y_{new} \le L(\mathbf{Y}) \text{ or } U(\mathbf{Y}) \le Y_{new}) \le \Pr(Y_{new} \le L(\mathbf{Y})) + \Pr(U(\mathbf{Y}) \le Y_{new})$



母集団分布を決めることの難しさ

- 予測分布や許容分布は,仮定する母集団分布によって結果が変わりやすい。
- 一方で、特に標本サイズが小さい場合、AICcなどがそれほど違わず、どの分布が適切であるか判断できずらいことが多い(=羅生門効果)
- どう対処するかは難しい
 - 標本サイズを大きくする?
 - いくつかの分布で最悪の結果を採用する?
 - ノンパラメトリックな方法にする?
 - そもそも予測区間や許容区間を求めるのをあきらめる? (君子危うきに近寄らず)



区間には、いろいろな避けがたい問題や落とし穴がある…

- ・ 統計分析をするならば, 不確かしかさを定量的に表現したい
- しかし,統計的区間には,第3種・第4種・… の誤りという定量化できずらい誤り を避けることができない…
- 君子危うきに近寄らず
 - 「区間はあてにならない。点推定値だけですませよう」
 - 「そもそも,統計分析をしなければいいじゃん」
 - 「そもそも, データを見なければいいじゃん」
- 虎穴に入らざれば虎子を得ず
 - 「いくつか問題はあるかもしれないが,不確かしさを区間で評価できる!」
 - 「何か分からないが,見栄えがいいので区間をだしてみました」



…とは言っても…

石橋を叩いて渡る

- 信頼区間が,本当に求めたい区間になっているかを改めて考える。本当に求めたいのは,予測区間や許容区間なのでは?
- 区間は,ある理想的な前提で求められたものに過ぎないことに留意する。
- 標本から母集団に一般化できることが,区間を求めるときの基本となる大前提。
- 予測的試験の場面では、「データを収集する現在の母集団が、将来の母集団を 予測するのに使える」ことは、非常に重要な前提。
- 予測的試験の場面では,振り返り・検証試験・確認実験が重要。
- ・とは言っても,区間に問題があるからといって点推定値しか見なかったり,データに基づく判断をしないのは、「蛇に噛まれて朽ち縄(くちなわ)におじている」のでは?



Neyman流のイメージ図が記載されている高校数学Bの教科書



Neyman流のイメージ図が記載されている教科書

小野が確認したもののみ

啓林館 『数学B 令和4年 | 月28日検定済』p.87 数研出版『数学B 令和4年 | 月28日検定済』p.100 東京書籍『数学B Advanced 令和4年 | 月28日検定済』p.93 第一学習社『新編 数学B令和4年 | 月28日検定済』p.7 |



参考文献



参考文献

予測区間や許容区間について

Meeker, W.Q., Hahn, G.J. and Escobar, L.A. (2017:2nd ed.) *Statistical Intervals: A Guide for Practitioners and Researchers (2nd ed.).* John Wiley & Sons.

永田靖(2009)『統計的品質管理:ステップアップのためのガイドブック』朝倉書店(11章および12章)

信頼区間を魚を使える網に喩えている入門書

Rumsey, D.J.(2011:2nd ed.) *Statistics for Dummies(2nd ed.)* Wiley.

統計的プラグマティズムについて

Kass, R.E.(2011) Statistical Inference: The Big Picture. Statistical Science, 26(1), 1-9.

統計学での「自然の斉一性」仮定について

大塚淳(2020)『統計学を哲学する』名古屋大学出版会

製造業での用語定義

日本規格協会(2022)『JISハンドブック(57) 品質管理 2022』(← 注:やや古い)

