統計数理研究所彙報
第29巻 第2号 (1982)

カイ二乗分布をめぐって

統計数理研究所 松 縄 規

(1982年1月 受付)

要　　旨

カイ二乗分布の導出に関する若干の考察をまとめて報告する．筆者は最近この分布の直接的な誘導をディリクレ＝リューヴィル積分を利用して行えることをみつけたのでこれも示す．つぎに分布の生誕について調べたことを解説的に記す．恐らくはカイ二乗分布の最初の発見者であったと思われるE.アッベの見事な仕事を筆者なりの誘導法と知見も加えて紹介する．また，この分布を用いたカイ二乗適合度検定の提唱者であるK.ピアソンの仕事について若干考察する．更に，物理学の分野に於てこの分布に本質的に到達していたマクスウェル，ボルツマン，レイリー及び仲上の関連する仕事の紹介と検討を行い，併せて n 次元熱伝導方程式のある初期値問題と n 次元正規分布，自由度 n のカイ分布及びカイ二乗分布との間の密接な関係について述べる．

1. 序

統計に於てカイ二乗分布は正規分布に次いで重要な分布であると屢々言われる．これは尤度比基準や情報量基準の漸近分布がカイ二乗分布に密接に関連することからも当然であろう．ところで数多い統計の文献で何故カイ二乗分布が重要なのか，またこの分布に対峙する物理現象としてどういうものがあるのかといった点についての説明をしたものを余り見掛けない．通常の文献では互に独立に標準正規分布する n 個の確率変数 $Z_1, Z_2, \cdots, Z_n$ の二乗和 $\chi_n{}^2 = Z_1{}^2 + Z_2{}^2 + \cdots + Z_n{}^2$ が従う分布が自由度 n のカイ二乗分布であるという定義を述べた後，その密度関数を例えば積率母関数などを使って間接的に誘導することが多い．このような導入のため，カイ二乗分布は何か人工的な色彩の強い分布であるという印象を与えてしまう．しかも推定や検定の問題で頻繁に使われ t-分布，F-分布とも関連するので，とに角重要な分布らしいということを我々に感じさせてきた．しかし，カイ二乗分布の背後にある測定論的・物理的意義に触れることなしに，天下り的にこの分布を導入することはその重要性を我々に理解させないまゝ形式的にカイ二乗分布を使わせる結果になっているように思える．この形式的な解釈は，例えばカイ二乗分布が一般ガンマ分布の特別な場合であるとして片付ける場合などに現れる．この考えは解析的な議論をする上で確かに楽ではあるが，カイ二乗分布の持つ本来の意味が浮上って来ないように思われる．

ところで，正規分布 $N(\mu, \sigma^2)$ からの大きさ n の標本 $X_1, \cdots, X_n$ に基づく変量 $T_n = \sum_{i=1}^{n} (X_i - \mu)^2/\sigma^2$ は自由度 n のカイ二乗分布に従うことは周知の事実であるが，実はこの事の中にカイ二乗分布の重要な意味が含まれている．即ち $X_i - \mu\ (i=1, \cdots, n)$ を n 個の観測誤差と見る時，大雑把に言うと，T_n は n 個の観測値からなる（平均二乗誤差に基づく）観測精度の二乗を表現する変量である．そしてその分布が自由度 n のカイ二乗分布で記述できるということである．但し σ^2 は $X_i - \mu\ (i=1, \cdots, n)$ が従うガウスの誤差分布の精密度を表す指数 h と関連

する量で $\sigma^2=(2h^2)^{-1}$ の関係がある．h が大きい程（σ が小さい程）誤差分布の形は尖り，観測の精度が良いことになる．分散 σ^2 ではなく精度定数 h を用いて誤差分布を表現する方が物理的な観点及び修辞学的な点に於ても，カイ二乗分布の意味を明確にするかもしれない．

本論文は上述のカイ二乗分布の背後にあって，この分布の意味を理解する上で多少とも役立つと思われるいくつかの事柄についてまとめたものである．

次の二節ではカイ二乗分布の密度関数を積率母関数や特性関数を使わずに計算で求め得ることを示す．第4節ではカイ二乗分布の発見者と思われる E. アッベの 1863 年の論文を筆者流に解説し，これに関連した筆者自身の知見をいくつか述べる．またアッベの人物像は興味深いものであり，それについても触れる．第5節では，K. ピアソン (1900) によって発表されたカイ二乗適合度検定について，その意味と問題点を若干考察する．

第6節ではカイ二乗分布が対峙する物理的な事柄について，マクスウェルとボルツマンの気体分子運動論，レイリーの振動論からの誘導について検討した結果を述べる．また我が国の仲上氏がカイ分布を雑音解析の実験を通じて発見し，理論を展開していたことについても触れる．同じ節の最後に，熱伝導方程式

$$\frac{\partial\theta}{\partial t}=\kappa\left(\frac{\partial^2\theta}{\partial x_1{}^2}+\frac{\partial^2\theta}{\partial x_2{}^2}+\cdots+\frac{\partial^2\theta}{\partial x_n{}^2}\right)$$

の一つの初期値問題の解と n 次元正規分布更には自由度 n のカイ二乗分布との関連について述べる．

2. ディリクレ＝リューヴィル積分

$p_i>0\,(i=1,\cdots,n)$ とする．領域 $A=\{x_i\geq 0\,(i=1,\cdots,n),\ x_1+\cdots+x_n\leq 1\}$ における積分

$$(2.1)\qquad I=\iint_A\cdots\int x_1{}^{p_1-1}x_2{}^{p_2-1}\cdots x_n{}^{p_n-1}dx_1dx_2\cdots dx_n=\frac{\Gamma(p_1)\Gamma(p_2)\cdots\Gamma(p_n)}{\Gamma(p_1+p_2+\cdots+p_n+1)}$$

はよく知られた多重積分である．これはディリクレ (Dirichlet, G. P. L.; *Liouville's Journal* Vol. 4, (1839), p. 168) によって与えられた．$n=2$ のとき I は $B(p_1, p_2+1)/p_2$ である．たゞし $B(\cdot,\cdot)$ はベータ関数である．$n\geq 3$ のときは帰納法或は逐次積分を実行して上式を証明できる．ディリクレはまた *Berliner Abh. Werke* **1**, p. 375 において積分

$$(2.2)\qquad J=\iint_A\cdots\int e^{-q(x_1+\cdots+x_n)}x_1{}^{p_1-1}x_2{}^{p_2-1}\cdots x_n{}^{p_n-1}dx_1dx_2\cdots dx_n$$
$$=\frac{\Gamma(p_1)\Gamma(p_2)\cdots\Gamma(p_n)}{\Gamma(p_1+p_2+\cdots+p_n)}\int_0^1 e^{-qu}u^{p_1+\cdots+p_n-1}du$$

も計算したようである (cf. 藤原 [31])．彼は(2.2)を証明する際にディリクレの不連続因子

$$(2.3)\qquad \int_0^\infty\frac{\sin t}{t}\cos\lambda t dt=\begin{cases}\dfrac{\pi}{2} & |\lambda|<1\\ \dfrac{\pi}{4} & |\lambda|=1\\ 0 & |\lambda|>1\end{cases}$$

および複素積分

$$(2.4)\qquad \int_0^\infty e^{-(q\pm it)x}x^{p-1}dx=\frac{\Gamma(p)}{(q\pm it)^p}\qquad\left(\begin{array}{l}p, q>0,\ -\infty<t<\infty\\ \text{複号同順}\end{array}\right)$$

を巧みに利用した．この方法は後述のアッベ (Abbe, E.) の論文における重要な道具立てとも

なっている．なお (2.2) は後で見る様に，複素積分に頼ることなしに実ガンマ関数の知識があれば誘導できる．さて積分 I および J は次の多重積分の特別な場合と見做せる：

$$p_i, \alpha_i, \beta_i > 0 \quad (i=1, 2, \cdots, n),$$

$$B_n = \left\{x_i \geq 0\,(i=1, \cdots, n),\ \ 0 < m \leq \left(\frac{x_1}{\beta_1}\right)^{\alpha_1} + \left(\frac{x_2}{\beta_2}\right)^{\alpha_2} + \cdots + \left(\frac{x_n}{\beta_n}\right)^{\alpha_n} \leq M\right\}$$

とする．このとき

$$K = \iint_{B_n}\cdots\int x_1^{p_1-1}x_2^{p_2-1}\cdots x_n^{p_n-1} \times f\left\{\left(\frac{x_1}{\beta_1}\right)^{\alpha_1} + \left(\frac{x_2}{\beta_2}\right)^{\alpha_2} + \cdots + \left(\frac{x_n}{\beta_n}\right)^{\alpha_n}\right\} dx_1 dx_2 \cdots dx_n = \frac{\beta^{p_1}\beta^{p_2}\cdots\beta^{p_n}}{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n} \frac{\Gamma\left(\frac{p_1}{\alpha_1}\right)\Gamma\left(\frac{p_2}{\alpha_2}\right)\cdots\Gamma\left(\frac{p_n}{\alpha_n}\right)}{\Gamma\left(\frac{p_1}{\alpha_1}+\frac{p_2}{\alpha_2}+\cdots+\frac{p_n}{\alpha_n}\right)} \int_m^M u^{k-1} f(u)\, du \tag{2.5}$$

が成立する．こゝに $k = \sum_{i=1}^{n} p_i/\alpha_i$ である．

この拡張はリューヴィル (Liouville, *J.*; *Liouville's Journal*, Vol. 4, (1839), p. 231) によっている (cf. Edwards [9], p. 161, 寺沢 [29], p. 218)．多重積分の問題としての (2.5) 式は通常間接的な証明で済まされている．しかし (2.5) の積分と統計学に於るディリクレ分布 (cf. Wilks [26]) との密接な関連に気がつけばこの式の直接的な証明は容易に行える．以下の節でこの積分を使う必要があるので，その誘導の概略を述べておこう：

次の合成変換を行う．

$$\left(\frac{x_i}{\beta_i}\right)^{\alpha_i} = c y_i \quad (c = M \text{ または } m), \qquad z_i = z_i - z_{i-1}, \tag{2.6}$$

$$z_i = \prod_{k=i}^{n} \theta_i \quad (i=1, 2, \cdots, n), \qquad (\text{但し } z_0 \equiv 0)$$

よって変換の Jacobian は

$$\frac{\partial(x_1, \cdots, x_n)}{\partial(\theta_1, \cdots, \theta_n)} = \frac{\partial(x_1, \cdots, x_n)}{\partial(y_1, \cdots, y_n)} \frac{\partial(y_1, \cdots, y_n)}{\partial(z_1, \cdots, z_n)} \frac{\partial(z_1, \cdots, z_n)}{\partial(\theta_1, \cdots, \theta_n)} = \prod_{i=1}^{n} \frac{x_i}{\alpha_i z_i} \cdot \prod_{i=2}^{n} \theta_i^{i-1}$$

となる．$y_1+y_2+\cdots+y_n = z_n = \theta_n$ に注意し，$c\theta_n = u\,(c=M$ または $m)$ と置けば (2.5) の結果を直ちに得る．

なお，(2.5) に於て $\alpha_i = \beta_i = 1\ (i=1, \cdots, n)$，$f(t) = 1-t$ のとき K は n 変数ディリクレ分布の領域 B_n での確率を表しており，この確率は単一積分で計算ができるわけである．

3. 理論カイ二乗分布の直接的な誘導

$Z_1, Z_2, \cdots, Z_n$ を互に独立に標準正規分布 $N(0, 1)$ に従って分布する n 個の確率変数とする．このとき

$$\chi_n^2 = Z_1^2 + Z_2^2 + \cdots + Z_n^2 \tag{3.1}$$

は周知のように密度関数が

$$(3.2)\qquad g_n(x)=\frac{1}{2^{n/2}\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}x^{n/2-1}e^{-x/2}\qquad(x>0)$$

で与えられる自由度 n のカイ二乗分布に従う．この分布は統計的誤差を定量的に評価しようという状況で頻繁に使われるものであり，t-分布や F-分布とも密接に関係する非常に重要な分布であることは今更言うまでもない．その有用さから，従って，統計学を学ぶ者にとってかなり早い時期に遭遇する分布である．

ところで筆者はかねがね不思議に思っていることは，種々の本や文献に出ている $g_n(x)$ の誘導方法にそれ程予備知識を必要としない証明方法が少ないことである．よく見受けるやり方は χ_n^2 が独立な n 個の標準正規確率変数の二乗和であることを考慮した上で，積率母関数或は特性関数を計算して，その結果が自由度 n のカイ二乗分布に従う度数の積率母関数或は特性関数と一致することを示す方法である．この方法は積率母関数などの知識が必要である事と方法が間接的であるために分布型を導き出したという実感を与えない欠点があるように思う．次のカイ二乗分布とガンマ分布の間の関係に基づく方法もよく用いられる．即ち標準正規確率変数の Z に対し $Z^2/2$ が平均 $1/2$ のガンマ分布に従っている事実と，ガンマ分布の再生成から $\chi_n^2/2$ が平均 $n/2$ のガンマ分布に従う．よって χ_n^2 自身の密度関数は (3.2) で与えられるとする証明である (cf. Lancaster [16])．この方法はエレガントではあるが，ガンマ分布に関する予備知識を必要とする点でもう一つなじみ難いのではないかと思われる．

上に述べた間接的方法に対して，幾何学的な発想によって $f_n(x)$ を求める方法もある．(cf. Cramér [8], Guttman, et al. [10])．この方法は途中で n 次元超球の体積の公式を使うことになる．この証明方法は直観的で分り易いかも知れないが，幾何学的な直観による証明を不鮮明なものと感じる人には不向であろう．

次の様な解析的な方法もある．それはまず $N(0,1)$ に従う変数 Z^2 の密度関数が

$$g(y)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-y/2}y^{-1/2}\left(=\frac{1}{\sqrt{2}\,\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}e^{-y/2}y^{-1/2}\right)$$

となることを示し，次に $T=Z_1^2+Z_2^2$ の密度関数を合成積を用いて

$$\begin{aligned}h(t)&=\int_0^t g(t-y_1)\,g(y_1)\,dy_1\qquad(t>0)\\&=\frac{1}{2}e^{-t/2}\left(=\frac{1}{2\Gamma(1)}e^{-t/2}\right)\end{aligned}$$

のように求める．以下逐次この操作を繰返して (3.2) の型を数学的帰納法によって導く方法である．このやり方はこれ迄に述べたものと違って特別な予備知識を必要としない点で優れている．たゞ $n=3,4,\cdots$ として一般型 $g_n(x)$ を求める迄の多少退屈な計算と帰納法を使うもどかしさを覚悟する必要がある．

その他の方法として，Helmert がやったように (3.1) に関連する二次形式に於てベクトル $(Z_1,\cdots,Z_n)'$ に Helmert の直交変換を施し計算を進めるやり方 (cf. Kendall-Stuart [12])，n 次元実ベクトル $(Z_1,\cdots,Z_n)'$ を極座標系に変換して所要の積分計算をする方法 (cf. Lancaster [16]) などが著名である．いずれも非常に美しい方法であるが，多少程度の高い数学的な予備知識を必要とする欠点がある．

そこで筆者はカイ二乗分布の密度関数 $g_n(x)$ を誘導する方法として前節のリューヴィル積分を利用するのが有効であることを注意したい．(3.1) 式に於る変数 χ^2 の分布関数は定義により

$$(3.3)\qquad \Pr(\chi_n{}^2 \le x) = \iint_{S_n} \cdots \int \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)^n \exp\left\{-\sum_{i=1}^n x_i{}^2\right\} dx_1 dx_2 \cdots dx_n$$

で与えられる．こゝに積分領域 S_n は

$$S_n = \left\{(x_1, \cdots, x_n) \,\middle|\, \sum_{i=1}^n x_i{}^2 \le x\right\}$$

で定義される半径 $\sqrt{x}$ の n 次元超球の内部及び表面である．S_n 内の点でありさえすれば各 $x_i(i=1, \cdots, n)$ は負の値を取ってもよい訳であるが，超球の持つ対称性から (3.3) は

$$(3.4)\qquad \Pr(\chi_n{}^2 \le x) = 2^n \cdot \iint_{V_n} \cdots \int \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)^n \exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^n x_i{}^2\right\} dx_1 dx_2 \cdots dx_n$$

と表現できる．たゞし

$$V_n = \left\{(x_1, \cdots, x_n) \,\middle|\, x_i \ge 0\ (i=1, \cdots, n)\ ;\ \sum_{i=1}^n x_i{}^2 \le x\right\}.$$

(3.4) 式の積分を求めるには，(2.5) 式で

$$f(u) = e^{-1/2u}, \qquad m = 0, \qquad M = x$$
$$\alpha_i = 2, \qquad \beta_i = 1, \qquad p_i = 1\ \ (i = 1, 2, \cdots, n)$$

と置けばよい．$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$ に注意すれば直ちに

$$(3.5)\qquad \Pr(\chi_n{}^2 \le x) = \frac{1}{2^{n/2}\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \int_0^x u^{n/2-1} e^{-u/2} du$$

を得る．これより $\chi_n{}^2$ の密度関数は (3.2) 式で与えられることが分る．

上で述べた証明法は直接的で計算の手段として用いたリューヴィル積分は大学の教養課程の微積分の知識があれば導ける．又この積分は先に述べた幾何学的取扱いで気になる n 次元超球の体積も簡単に与えてくれる．その上この積分はノンパラメトリックな統計学でしばしば出てくるディリクレ分布に関連する計算を簡単に実行させてくれる利点などもあると思う．

4.　E. アッベの論文 (1863) の検討と考察

アッベ (Ernst Abbe) [1] は 1863 年に「観測値列における誤差の分布の法則性について」(Über die Gesetzmässigkeit der Verteilung der Fehler bei Beobachtungsreihen, *Ges. Abh.* Vol. 2, pp. 55–81) という論文を発表した．この論文は永い間全く忘れられていたが O. B. シャイニン [24] によって見出され，アッベが理論カイ二乗分布の最初の発見者であるとした．それ迄は，通常 Helmert (1875) がカイ二乗分布の発見者と見做されていたが，アッベはそれよりも更に昔にやっていたことになる．なおビアネイメ (1852) が最小二乗法の理論に於てガンマ確率変数の二乗和の分布を誘導しており，Lancaster [15] は彼が本質的にはカイ二乗分布の発見者であるとしている．

この Abbe の論文の紹介が M. G. ケンドール [12] によってなされている．そしてこの紹介からだけでもアッベの仕事の重要さが十分汲みとれる．アッベが 23 才の時に発表したこの論文の内容は驚くべきものである．彼は 19 世紀の半ばに既にカイ二乗分布，平均平方逐次階差そ

して循環系列相関係数などの理論分布を導出していたのである．ケンドールの紹介にも拘らず筆者が敢てこゝでアッベの論文を取り上げたのは，その内容の歴史的重要さだけではなく，彼の問題意識の高さと，分布誘導で用いた数学上のテクニックの見事さは今日でも非常に参考になるものであり，ケンドールの摘要だけではアッベの業績が見過されてしまうと考えたからである（尚ケンドールの紹介にはミスプリントと不完全さが多い）．他の理由は筆者が検討した結果，アッベは次の二つの事も問題の論文の中で解決していることに気がついたからである．即ち (i) リューヴィル積分は周辺積分に置き替えて計算できることを発見したこと，(ii) 互に独立にカイ二乗分布する確率変数の線形結合の分布を誘導したことである．これ等と本質的に変らないことが彼の仕事から 100 年近くも経って新発見として発表されてきたことを考えるとアッベがいかに進んでいたかが分る．そこで，アッベの仕事を，ケンドールの摘要も参考にしながら，筆者なりに解釈して紹介し知見を述べる．

4.1 アッベの問題意識と定式化

アッベはガウスの観測値の誤差論から次の点に強い関心を示している：「人は独立に得られた観測値の精度を比較する場合に，誤差の平方和又は平均二乗誤差にある程度は頼る；また誤差の分布の仕方をある程度は考慮する.」この引用はガウスが観測値の算術平均が最確値になることなどを仮定して誤差分布を誘導し，逆に誤差分布を仮定して最小二乗法の原理を明確にしたことの基本的な考えをアッベが十分に認識していたことを意味する．特に重要なのは，独立に誤差分布する確率変数の二乗和の分布すなわち今日のカイ二乗分布が上に述べた観測値の精度を比較する場合に重要な意味を持つことを認識したことにある．ガウスは観測値そのものゝ二乗和の重要性を指摘したが，それに対応する確率分布の誘導などはしていないのである．アッベの認識が的を射たものであることは，今日我々が使っている統計的誤差評価のための数々の統計量や情報量の分布の中に近似的にカイ二乗分布するものが極めて重要な位置を占めていることからも明らかであろう．

さて，アッベは正規分布をガウスの誤差分布

$$(4.1)\qquad \omega(x)=\frac{h}{\sqrt{\pi}}\exp(-h^2x^2)\qquad(-\infty<x<\infty)$$

の形で用いる．こゝに h は精度定数である．なお誤差の平方 x^2 の平均値を σ^2 とすると，平均二乗誤差の平方根は $\sigma=(\sqrt{2}\,h)^{-1}$ となり今日の正規分布の表現となる．彼は観測値の系列に対し，平方和を

$$(4.2)\qquad \Delta=\sum_{j=1}^{n}x_j^2,$$

循環的第一階差を

$$(4.3)\qquad \theta=\sum_{j=1}^{n}(x_j-x_{j+1})^2,\qquad (x_{n+1}=x_1),$$

そしてこれら二つの量の比を

$$(4.4)\qquad \mu=\theta/\Delta$$

で定義した．ケンドールの摘要を通じての彼の問題の設定の記述は分りにくいが，原著に於て彼は Δ,θ,μ に対応する確率変数（誤差）の精密標本分布を求めることを問題としそれに成功している．ただし μ に関連しては n が奇数の場合のやや範囲を限定した結果で研究を留めた．しかしアッベは R. L. Anderson [2] の主要結果をその約 80 年前に既に明確に理解していたことは殆ど間違いないように見える．

4.2 アッベによる平方和の分布（カイ二乗分布）の誘導

アッベは複素積分を用いてカイ二乗分布の分布関数を誘導している．彼の方法はディリクレ及びコーシーの用いた不連続因子を巧みに利用した非常にエレガントなものである．筆者の知る限りでは，彼の誘導方法は今日の確率・統計の教科書で全く触れられていない．

そこで，解説のために必要と思われる事柄を織り込みながら，アッベの誘導法を述べよう：

問題は 0 と $\varDelta$ の間の平方和を持つ誤差の系列の確率

$$\Phi(\varDelta)=\frac{h^n}{\pi^{n/2}}\int\cdots\int_{0<\sum_{j=1}^{n}x_j^2<\varDelta}\exp\left(-h^2\sum_{j=1}^{n}x_j^2\right)dx_1\cdots dx_n \tag{4.5}$$

を求めることである．アッベは上の多重積分を計算するに当って (2.4) 式および次の複素積分の公式を援用した．

補題 4.1

$$\lim_{\rho\to\infty}\frac{1}{2\pi}\int_{-\rho}^{\rho}\frac{\exp\{\sigma(a+i\phi)\}}{a+i\phi}d\phi=\begin{cases}1 & (\sigma>0)\\ \dfrac{1}{2} & (\sigma=0)\\ 0 & (\sigma<0).\end{cases} \tag{4.6}$$

この積分はコーシーの不連続因子と呼ばれている (cf. Whitacker & Watson [25], p. 123)．これは $a>0$ として $\pm i\rho$, $a\pm i\rho$ を頂点とする長方形から原点を避けた閉曲線 C を積分路とする周辺積分 $\int_C e^{\sigma z}/z\,dz$ をディリクレの不連続因子 (cf. (2.3)) の結果を応用して計算を実行することにより求まる．

アッベは (4.6) に於て

$$\sigma=\varDelta-\sum_{j=1}^{n}x_j^2 \tag{4.7}$$

と置き，(4.5) 式にこの不連続因子を代入した：

$$\begin{aligned}\Phi(\varDelta)&=\frac{1}{2\pi}\cdot\frac{h^n}{\pi^{n/2}}\int_{-\infty}^{\infty}d\phi\,\frac{\exp\{\varDelta(a+i\phi)\}}{a+i\phi}\\&\quad\times\int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\exp\{-\textstyle\sum(h^2+a+i\phi)x_j^2\}dx_1\cdots dx_n\\&=\frac{h^n}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\exp\{\varDelta(a+i\phi)\}}{(a+i\phi)\sqrt{(h^2+a+i\phi)^n}}d\phi,\end{aligned}$$

(2.4) 式を使って $1/\sqrt{(h^2+a+i\phi)^n}$ を積分表示すれば

$$=\frac{h^n}{2\pi\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}\int_{-\infty}^{\infty}d\phi\,\frac{\exp\{(\varDelta-y)(a+i\phi)\}}{a+i\phi}\int_{-\infty}^{\infty}dy\,e^{-h^2y}y^{n/2-1}$$

となる．再び (4.6) に注意して，アッベは誤差の平方和の分布関数

$$\Phi(\varDelta)=\frac{h^n}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}\int_0^{\varDelta}e^{-h^2y}y^{n/2-1}dy \tag{4.8}$$

を得た．

さて，(4.8)を $\varDelta$ で微分すれば

$$g_n(\varDelta)\equiv\frac{h^n}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}e^{-h^2\varDelta}\varDelta^{n/2-1} \tag{4.9}$$

となる．なおケンドールはアッベの述べた別の表現を採用しているが，アッベ自身は(4.9)式自体を正確に記述している，こゝで特に $h=1/\sqrt{2}$ と置くと(4.9)式は今日で言う自由度 n のカイ二乗分布の密度関数(4.2)式と同等になる．なお $h=1/\sqrt{2}$ とすることは誤差の平均二乗誤差が1となるような標準化をしたことになっており，このときガウスの誤差分布が今日の標準正規分布である．結論として，アッベは自由度 n のカイ二乗分布の密度関数を明確に導いたことが確認できる．

4.3 アッベによる平均平方逐次階差の分布の誘導

こゝで述べるアッベの方法はまた巧みである．次の積分を計算することが課題である：

$$\Psi(\theta)=\frac{h^n}{\pi^{n/2}}\underset{\substack{0<\sum_{j=1}^{n}(x_j-x_{j+1})^2<\theta\\ x_{n+1}=x_1}}{\int\cdots\int}\exp\left\{-h^2\sum_{j=1}^{n}x_j^2\right\}dx_1\cdots dx_n \tag{4.10}$$

前と同様にアッベはコーシーの不連続因子を用いて

$$\begin{aligned}\Psi(\theta)=&\frac{h^n}{2\pi\pi^{n/2}}\int_{-\infty}^{\infty}d\phi\,\frac{\exp\{\theta(a+i\phi)\}}{a+i\phi}\\ &\times\int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left\{-h^2\sum_{j=1}^{n}x_j^2-(a+i\phi)\sum_{j=1}^{n}(x_j-x_{j+1})^2\right\}dx_1\cdots dx_n\end{aligned} \tag{4.11}$$

を求める．上式の最後の部分は前と違って変数分離をして積分を実行することはできない．そこでアッベは $\sum x_j^2$ を $\sum\xi_j^2$ に変換する間に $\sum(x_j-x_{j+1})^2$ が $\sum\lambda_j\xi_j^2$ の形になるような直交変換を考えた．こゝでは筆者流の説明をしておく．

$x_1=x_{n+1}$ の条件下で平均平方逐次階差は次の様に表現される．

$$\theta=\sum_{j=1}^{n}(x_j-x_{j+1})^2=2\sum_{j=1}^{n}x_j^2-2\sum_{j=1}^{n}x_jx_{j+1}\equiv\boldsymbol{x}'A\boldsymbol{x} \tag{4.12}$$

但し $\boldsymbol{x}=(x_1,\cdots,x_n)'$ であり A は次の $n\times n$ 行列を表す：

$$A=\begin{pmatrix}2&-1&0&0&\cdots&-1\\-1&2&-1&0&\cdots&0\\0&-1&2&-1&\cdots&0\\\vdots&&&&&\vdots\\-1&0&0&0&\cdots&2\end{pmatrix}. \tag{4.13}$$

θ を直交変換で標準形にするために行列 A の固有根を求める必要がある．こゝでは次のような方法を取る： 循環行列 C と単位循環子行列とでも呼ぶべき J を

$$C=\begin{pmatrix}c_1&c_2&c_3&\cdots&c_n\\c_n&c_1&c_2&\cdots&c_{n-1}\\\cdots&\cdots&\cdots&\cdots&\cdots\\c_3&c_4&c_5&\cdots&c_2\\c_2&c_3&c_4&\cdots&c_1\end{pmatrix},\qquad J=\begin{pmatrix}0&1&0&\cdots&0&0\\0&0&1&\cdots&0&0\\\cdots&\cdots&\cdots&\cdots&\cdots&\cdots\\0&0&0&\cdots&0&1\\1&0&0&\cdots&0&0\end{pmatrix}$$

と記す. $J^2, J^3, \cdots$ を計算するとすぐ分るように, $J^r (r=1,2,\cdots,n-1)$ の第 k 列 $(k=2, 3,\cdots,n)$ は J^{r-1} の第 $k-1$ 列 $(k=2,3,\cdots,n)$ と一致し, J^r の第1列は元の J^{r-1} の第 n 列となっている. 但し $J^0=I$ (n 次元単位行列) と考える. これより

$$C = \sum_{r=1}^{n} C_r J^{r-1} \tag{4.14}$$

が容易に従う. J の固有値は $|J-\omega I|=(-1)^n(\omega^n-1)\equiv 0$ の解, 即ち $\omega^n=1$ を満たす n 個の複素根である:

$$\omega_k = \exp(i\varphi_k), \qquad \varphi_k = \frac{2k\pi}{n} \quad (k=1,2,\cdots,n) \tag{4.15}$$

である. 従って C の固有値はフロベニウスの定理により (cf. Pipes & Hovanessian [22]),

$$\mu_k = \sum_{r=1}^{n} c_r \omega_k{}^{r-1} = \sum_{r=1}^{n} c_r \exp(i(r-1)\varphi_k), \quad (k=1,2,\cdots,n). \tag{4.16}$$

よって A の固有値は上で $c_1=2$, $c_2=c_n=-1$, $c_r=0\,(r=2,3,\cdots,n-1)$ と置いて次の様に求まる.

$$\lambda_k = 2-\exp(i\varphi_k)-\exp(i(n-1)\varphi_k)=2\left(1-\cos\frac{2k\pi}{n}\right)=4\sin^2\left(\frac{2k\pi}{n}\right), \tag{4.17}$$
$$(k=1,2,\cdots,n).$$

なお, アッベ自身は $|A-\lambda I|=0$ より (4.17) を直接導いた.

さて, $\lambda_k (k=1,\cdots,n)$ に対する正規固有列ベクトルを $\boldsymbol{P}_k (k=1,\cdots,n)$ とし直交行列 $P=(\boldsymbol{P}_1, \boldsymbol{P}_2, \cdots, \boldsymbol{P}_k)$ を作り $P\boldsymbol{x}=(\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_n)'=\boldsymbol{\xi}$ なる変換を行えば,

$$\sum_{j=1}^{n} x_j{}^2 = \sum_{j=1}^{n} \xi_j{}^2, \qquad \sum_{j=1}^{n} (x_j-x_{j+1})^2 = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j \xi_j{}^2 \quad (\text{但し } x_{n+1}=x_1),$$

が成立し, 変換のヤコビアンも1であるから, アッベは (4.11) を

$$\Psi(\theta) = \frac{1}{2\pi}\cdot\frac{h^n}{\pi^{n/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\phi}{a+i\phi}\exp\{\theta(a+i\phi)\}\prod_{j=1}^{n}\int_{-\infty}^{\infty}d\xi_j$$
$$\times\exp[-\{h^2+\lambda_j(a+i\phi)\}\xi_j{}^2]$$
$$= \frac{h^n}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}d\phi\,\frac{\exp\{\theta(a+i\phi)\}}{(a+i\phi)\{h^2+\lambda_1(a+i\phi)\}^{1/2}\cdots\{h^2+\lambda_n(a+i\phi)\}^{1/2}} \tag{4.18}$$

と書替えた. この積分を計算するに当り, アッベは行列 A の固有値 $\lambda_k (k=1,\cdots,n)$ のうち一つは0であり, 他の根は恐らく一つを除いて対になって出てくることを指摘した. より厳密に言えば n が奇数の時, $\lambda_n=0$ と $\lambda_k=\lambda_{n-k} (k=1,\cdots,n-1)$; n が偶数の時, $\lambda_n=0$, $\lambda_{n/2}=4$ と $\lambda_k=\lambda_{n-k} (k=1,\cdots,n/2-1, n/2+1,\cdots,n-1)$ の二通りの場合があり, アッベは明確に場合分けをして誘導を行っている:

(i) n が奇数のとき $\nu=\frac{1}{2}(n-1)$ と置けば

$$\Psi(\theta) = \frac{h^{n-1}}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}d\phi\,\frac{\exp\{\theta(a+i\phi)\}}{(a+i\phi)\{h^2+\lambda_1(a+i\phi)\}\cdots\{h^2+\lambda_\nu(a+i\phi)\}}. \tag{4.19}$$

この式は周辺積分で評価できる. 被積分関数を $q(\phi)$ とすると

$$\phi=ai, \quad \left(a+\frac{h^2}{\lambda_1}\right)i, \;\cdots,\; \left(a+\frac{h^2}{\lambda_\nu}\right)i$$

で1位の極を持つ．正の虚数部分を持つ複素数 ϕ に対しては被積分関数は ϕ が無限大で0になることに注意すれば，積分は留数定理を応用して求め得る．極 $(a+h^2/\lambda_j)i$ に於る留数の貢献は

$$(4.20)\qquad 2\pi i[\mathrm{Res}\, q(\phi)]_{\phi=(a+h^2/\lambda_j)i}=2\pi i\left[q(\phi)\left\{\phi-\left(a+\frac{h^2}{\lambda_j}\right)i\right\}\right]_{\phi=(a+h^2/\lambda_j)i}$$

$$=-\frac{2\pi\lambda_j{}^{\nu}\exp\{-\theta h^2/\lambda_j\}}{h^{n-1}\prod\limits_{\substack{k=1\\(k\neq j)}}^{\nu}(\lambda_j-\lambda_k)}.$$

また $\phi=ai$ では

$$(4.21)\qquad 2\pi i[\mathrm{Res}\, q(\phi)]_{\phi=ai}=2\pi i[q(\phi)(\phi-ai)]_{\phi=ai}=\frac{2\pi}{h^{n-1}}.$$

よって(4.19)，(4.20)，(4.21)から n が奇数のとき

$$(4.22)\qquad \Psi(\theta)=1-\sum_{j=1}^{\nu}\frac{\lambda_j{}^{\nu}\exp\{-\theta h^2/\lambda_j\}}{\prod\limits_{\substack{k=1\\(k\neq j)}}^{\nu}(\lambda_j-\lambda_k)},\qquad \left(\nu=\frac{1}{2}(n-1)\right).$$

を示した．

(ii) n が偶数のとき $\nu=\frac{1}{2}(n-2)$ とおく．このとき先に述べたように A の固有値の中に $\lambda_{n/2}=4$ と対になるものはない．従って留数定理を応用するために(4.18)式においてこの $\lambda_{n/2}$ を含む項を別扱いしなければならない．アッベは(4.8)式を誘導する際にもその一般形を用いた次の関係式

$$(4.23)\qquad \frac{1}{\{h^2+\lambda_{n/2}(a+i\phi)\}^{1/2}}=\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\int_0^{\infty}\frac{du}{\sqrt{u}}\exp\left[-\left(\frac{1}{4}h^2+a+i\phi\right)u\right],$$

を利用した．(4.18)，(4.23)および $\lambda_n=0$ に注意して再び留数定理を用いて n が偶数の場合，アッベは

$$(4.24)\qquad \Psi(\theta)=\frac{h}{2\sqrt{\pi}}\int_0^{\infty}\frac{du}{\sqrt{u}}e^{-(1/4)h^2u}\left[1-\sum_{j=1}^{\nu}\frac{\lambda_j{}^{\nu}\exp\{-(\theta-u)h^2/\lambda_j\}}{\prod\limits_{\substack{k=1\\(k\neq j)}}^{\nu}(\lambda_j-\lambda_k)}\right]$$

$$\left(\nu=\frac{1}{2}(n-2)\right),$$

となることを示した．

平均平方逐次階差の密度関数はアッベが述べているように，(4.22)及び(4.24)を θ で微分すれば求まる．

さて，上で見てきたアッベの平均平方逐次階差の分布を誘導した過程の中に彼は本質的に次の事柄を与えていたことに気がつく：『互に独立に自由度1のカイ二乗分布する確率変数の線形結合の分布について，それらの係数の殆どが対になっている場合の厳密な分布形は例えば(4.22)又は(4.24)の形で与えられる．』このアッベの与えた結果を，係数が対になっていないような線形結合の場合へ拡張することはそれ程難しくない．ケンドールはアッベのこの点の貢績を明確にしていない．私見では1940年代以後に数多く現われた，カイ二乗確率変数，指数確率変数，ガンマ確率変数などの線形結合の分布を求めた論文はアッベの論文の中で基本的には解決されていたと見做せる．その意味でアッベの仕事が全く忘れられていたということは非常

に惜しまれる．

なお，本節に対応するケンドールの摘要の 2·3 節には誤りとミスプリントが散見される．上では断りなしに訂正して述べた．

4.4 比の分布（循環系列相関係数の分布）

アッベは更に (4.4) 式の μ に対応する比の確率変数の分布を誘導している．これは現代の用語で言うと 1 次遅れの循環系列相関係数の分布である．分布関数は次の積分

$$(4.25)\qquad X(\mu)=\frac{h^n}{\pi^{n/2}}\underset{\substack{0<\sum_{j=1}^{n}(x_j-x_{j+1})^2/\sum_{j=1}^{n}x_j^2<\mu \\ x_{n+1}=x_1}}{\int\cdots\int}\exp\left(-h^2\sum_{j=1}^{n}x_j^2\right)dx_1\cdots dx_n$$

で与えられる．アッベはこの積分を 3.3 節と同じテクニックを用いて求め，n が奇数のとき

$$(4.26)\qquad X(\mu)=1-\sum_{\substack{j=1\\(\lambda_j>\mu)}}^{\nu}\frac{(\lambda_j-\mu)^{(n-3)/2}(1-\mu/\lambda_j)}{\prod_{\substack{k=1\\(k\neq j)}}^{\nu}(\lambda_j-\lambda_k)},\quad \left(\nu=\frac{1}{2}(n-1)\right).$$

を与えた．n が偶数のときに対する具体的な表現はしていないが，奇数の場合と同様な方法で与え得ることを指摘している．

アッベは $X(\mu)$ の性質について，証明なしで数値実験からかなり正確なことをつかんでおり，$X(\mu)$ の漸近的な表現も得ていたようである．なお本節のアッベの結果とその主要部分が基本的には同じと見做し得る仕事がずっと後になって R. L. Anderson [2], Koopmans [14] 等によってなされているが，アッベの論文はそれらに比べても遜色はない．

4.5 アッベの小伝と他の分野での業績

統計の方面ではアッベの名はなじみが薄いが，彼は多彩な活躍をした人物でその人生は興味深い．彼の人となりを知るためにこゝで彼の小伝と各方面でのいくつかの貢献を記しておく．なお本節ではケンドール [13] の他に青木 [27]，佐藤 [28]，広重 [30] を参照させて頂いた．

前述のアッベの分布論に於る論文は 1863 年に哲学学部の教授免許獲得の目的で提出されたもので，彼は 23 才の頃教員に指名された．しかしその後彼が確率・統計の分野で仕事を公表したということはなかったようである．このため彼と同時代の人々も含め彼の分布論に於る貢献を全く見過してしまったのであろう．1866 年彼が 26 才の時に有名な光学器械会社を築いたカール・ツアイス (Carl Zeiss 1816–1888) からいくつかの光学上の問題で相談をうけた．1830 年代末は生物学の分野において，細胞説が確立され，優秀な顕微鏡への需要が高まっていた頃である．ツアイスは顕微鏡の根本的改良を策していたがそれには物理学者の協力が是非必要と判断したようである．そしてこれ以後アッベは光学と天文学の理論及び応用研究に従事した．1878 年にイエナ大学の天文学教授となり，天文台長と気象台長を兼任している．また 1881 年には光学用ガラスの製造を行い，1886 年カール・ツアイス光学器械会社に入社し工場の総支配人となり，1896 年には社長になったが 1905 年没した (cf. 佐藤 [28])．彼の業績は多方面に渡っているが，特に著名なのは光学分野における理論及び発明である．彼によって光の回折を考慮したレンズの分解能の理論 (1873) がつくられ，はじめて絞りの効果を正しく取入れた結像理論ができ上った．とくに光軸の近くの小物体の像が収差なしに生ずるための条件はアッベの正弦条件 (cf. 広重 [30]) としてよく知られている．また精密測定理論における“測定すべき長さを，物差しとして用いられる目盛の延長線上に置く”というアッベの原理 (cf. 青木 [27]) はその方面の基本的事項となっている．応用面ではツアイスに見込まれて実業界に引抜れたア

ッベは期待に応えて会社を世界の一流メーカーにした．彼が発明したり改良して彼の名前がついた光学測定器械として球面計，屈折計，プリズム，偏光プリズム，測長機など多数ある．実業家としての彼もまた時代に先駆けた人物であったようで，その後の半世紀間一般的とならなかった1日8時間労働，有給休暇，疾病手当，年金，退職金，毎年のボーナスなどを導入したと言われている．

彼の人生を見ると理想とするものと現実にあるものとの差をなるべく小さくするための工夫と創意を様々な分野で行ったと言ってよかろう．

5. K. ピアソンのカイ二乗について

1900年にカール・ピアソン[21]が，今日カイ二乗適合度検定の名で知られる理論の基礎となる考えを発表したことはよく知られている．この20世紀の最初の年は，物理学においてマックス・プランクにより量子力学の幕あけとなった歴史的な大発見がなされた記念すべき年でもある．実は分野の違う所で行われた二つの仕事の間には深い係りがあるように見える．それは確率論的に見ると前者は多項確率が後者は負の二項確率に関連する熱力学的確率が根底にある問題を扱っていることになるが，共にエントロピーという概念がそれぞれの分野に於て重要であるという事を示唆している点である．

さて，ピアソンの論文について話しを戻そう．この論文にはいくつかの重大な事柄が含まれている．それらは後に続く人々によって内容を強化，発展され，時に誤解されてきた．しかし疑いもなくこの論文は統計の歴史の中の最重要論文の一つであろう．本論文ではカイ二乗分布の歴史を主に考えているので，その点からピアソンの仕事を振返ることにする．この点に関してピアソンは

(i) 自由度 n の理論カイ二乗分布を誘導，

(ii) カイ二乗統計量の極限分布（理論カイ二乗分布）の誘導

を行った．(i)については彼はアッベと違って，相関のある n 変数に対して χ^2 変数を定義し，その分布の右側の裾部分の確率を幾何学的考察によって求める事を通じてなされた．この部分の彼の問題の設定はあいまいで，各変数が正規分布するという前提も明確に述べられていない．しかし文脈から見て，結果的にピアソンは互に独立に同一な標準正規分布する変数の二乗和が自由度 n のカイ二乗分布するということを示した．なお，彼自身はこの分布の密度関数を(3.2)式の形では使っておらず，今日で言うカイ分布の密度関数の形で表現している．カイ分布については次章で述べるようにピアソン以前に，レイリーが自由度3のものまで与えており，レイリー分布とも言われるものである．とに角，項目(i)に関してはアッベの仕事に比べ見劣りする．ピアソンの業績は項目(ii)にある．そこに於ける問題の設定，数学的誘導は(i)と同様不備な点が目立つが，今日言うピアソンのカイ二乗統計量の導入と適合度検定の考えはその後の統計理論に於て大きな貢献をしてきたことは言うまでもない．

ところで(ii)の結果を利用する適合度検定は，データを見る限りでは採択してもよいと思われる仮説をサンプルサイズを大きくすると殆どの場合棄却するという，我々の感覚にそぐわない結果になるということはよく知られている．ピアソンの論文の中に，ウェルダンのサイコロ投げの実験のデータを使っての有名な適合度検定の例が出ているが，これなどは上に述べた事の顕著な表れと考えられる．カイ二乗統計量のもつこのような欠点は何故起るかが問題になるが，これについてはいろいろな見解があろう．こゝでは筆者なりの考えを簡単に述べる．問題を，最初から多項分布に設定して話しをする．

$E_1, E_2, \cdots, E_k$ を互に排反な事象とし，ある試行の結果，これらの事象のいずれかが生起す

るものとする．E_i の起る確率を $p_i(>0, i=1, \cdots, k)$ とする．この試行を n 回独立に行なうものとし，E_i の生起回数を $n_i(i=1, \cdots, k)$ とする．明らかに $\sum_{i=1}^{k} p_i=1$, $\sum_{i=1}^{k} n_i=n$ で，$n_1, \cdots, n_k$ は次の多項分布に従う：

$$P(n_1, \cdots, n_k)=\binom{n}{n_1, \cdots, n_k} p_1^{n_1} p_2^{n_2} \cdots p_k^{n_k} \quad \left(0 \leq n_i, \sum_{i=1}^{n} n_i=n\right).$$

このとき統計量

$$\chi^2=\sum_{i=1}^{k} \frac{(n_i-np_i)^2}{np_i}=n \sum_{i=1}^{k} \frac{1}{p_i}\left(\frac{n_i}{n}-p_i\right)^2$$

の従う分布が問題になる．もちろんこの統計量の厳密分布は離散型分布である．しかし任意の (p_i, n_i, k, n) に対して使用できる，閉じた形での分布の表現は知られていない．仮にそれが可能になったとしても，k 次元超球の中である条件を満たす格子点の数を厳密に数え上げるという途方もなく骨の折れる計算がつきまとうことになり，実際の確率の計算には役立たないであろう．そこでこの統計量の近似分布が必要になった．ピアソンはこれに対して自由度 $k-1$ のカイ二乗分布を導入した．前述の様に実際には，彼は式の上では χ^2 でなく χ の分布で表現したと見なせる．なお，彼の論文における χ のことを当初 (1900) は ray（半径）と呼び，後 (1908, *Biometrika* 59–68, with A. Lee) に generalized probable error と呼んでいる．

さて，この様に連続型分布で近似されることになった χ^2 統計量は当然，このことに起因する誤差が入ってくる．この欠点を除く方法として連続補正および離散項を加えた第2近似が考えられる．ピアソンの近似で気になるもう一つの点は，極限分布を得るための条件を明確にしていないことである．これは後世の人々もあまり考慮しなかったように見える．これらのことに関して筆者 [17] は若干の結果を得たが，その結果，理論カイ二乗分布がカイ二乗統計量の近似として使えるための十分条件の内の一つとして

$$\max_{1 \leq i \leq k-1}\left\{\frac{1}{p_i}+\frac{1}{\sum_{j=i+1}^{k} p_j}\right\} \Big/ \left(n+\frac{k}{2}\right) \leq 3$$

の成立が要請された．もちろん，これが必要条件というわけではないのでピアソンの取り扱いが全くナンセンスとは断定出来ないが，彼が検定したウェルダンのサイコロ投げのデータは理論度数の著しく小さな階級が存在するため，上の条件から著しく外れている．このような場合通常は度数の小さな階級はいくつかをプールして1つの階級と見做す訳であるが，ピアソンはこの点の考慮をしておらず，極限分布に基づく形式的な検定を行った．ウェルダン自身はピアソンの検定結果を知って，サイコロ投げで問題にしている事象の生起確率を推定した後でカイ二乗検定を行うことをピアソンに助言している．これに基づいてピアソンが計算しているが，この場合と先に述べた母集団分布が完全に指定されている場合との統計的な意味の違いをピアソンは明確には認識しておらず，周知のように Fisher や Cramér の貢献を待たねばならなかった．

ピアソンの χ^2 統計量は次のように，k 項の二つの分布 $\{n_i/n\}$ $(i=1, \cdots, k)$ と $\{p_i\}$ $(i=1, \cdots, k)$ の間のエントロピーを近似的に測っているとも解釈できる：

χ^2 統計量は

$$\chi^2 \equiv \sum_{i=1}^{k} \frac{(n_i-np_i)^2}{np_i}=n \cdot \sum_{i=1}^{k}\left(\frac{n_i/n}{p_i}-1\right)^2 p_i$$

と表せる．そこで各 n に対し ε_n を任意に与えられた正数とし，

$$B_{\varepsilon_n} \equiv \left\{ (n_1, \cdots, n_k) \,;\, \max\left[\left| \frac{n_i/n}{p_i} - 1 \right|, \left| \frac{p_i}{n_i/n} - 1 \right| \right] < \varepsilon_n \right\}$$

に対し

$$P_{\{n_i/n(i=1,\cdots,k)\}}(B)_{\varepsilon_n} \geq 1-\varepsilon_n$$

と仮定する.(先に述べたプーリングは上の条件を満す一つの操作とも考え得る.)領域 B_{ε_n} に制限された χ^2 統計量を $\chi^2\left(\left\{\frac{n_i}{n}\right\}, \{p_i\}\,;\, B_{\varepsilon_n}\right)$ としよう.このとき

$$\frac{2n\left\{\sum_{i=1}^{k} \frac{n_i}{n} \ln \frac{n_i/n}{p_i} - \varepsilon_n\right\}}{1+\varepsilon_n/3} \leq \chi^2\left(\left\{\frac{n_i}{n}\right\}, \{p_i\}\,;\, B_{\varepsilon_n}\right) \leq \frac{2n\left\{\sum_{i=1}^{n} \frac{n_i}{n} \ln \frac{n_i/n}{p_i} + \varepsilon_n\right\}}{1-\varepsilon_n/3}$$

が成立する (cf. Matsunawa [18]).よって n が十分大きいとき

$$\chi^2\left(\left\{\frac{n_i}{n}\right\}, \{p_i\}\,;\, B_{\varepsilon_n}\right) \sim 2n \sum_{i=1}^{k} \frac{n_i}{n} \ln \frac{n_i/n}{p_i} = 2n \sum_{i=1}^{k} p_i \left(\frac{n_i/n}{p_i}\right) \ln\left(\frac{n_i/n}{p_i}\right)$$

となる.右辺は分布 $\left\{\frac{n_i}{n}\right\}(i=1, \cdots, k)$ と $\{p_i\}(i=1, \cdots, k)$ の間の Kullback-Leibler 情報量であり,これは分布 $\{n_i/n\}$ の分布 $\{p_i\}$ に関する負のエントロピー (neg-entropy) と解釈される.

ところで,上に見た様に,χ^2 統計量も K–L 情報量も共に分母に p_i を含むため p_i の小さな値に大きく影響される.しかし後者の方がその影響は多少は小さいことが次の一般的大小関係から分る:

$$\sum_{i=1}^{k} \frac{n_i}{n} \ln \frac{n_i/n}{p_i} \leq \ln\left\{1+\frac{1}{n}\chi^2\right\}$$

(cf. Matsunawa [18]).このように,理論および実用上のいくつかの欠点のために χ^2 統計量を使った統計的議論は今後情報量などを使ってなされてゆくであろう.

6. 物理学で現れるカイ二乗分布とその発見者達

本節ではカイ二乗分布の発見の歴史の中で,物理学者達が独自の立場からこの分布とそれに関連する分布を見出していたことを振り返った上で,この分布の物理的意味を考察する.

マクスウェル (Maxwell, J. C. 1831–1879) は外力場の影響が全くない完全気体の熱平衡にある気体粒子速度分布則が誤差法則に従うことを 1859 年に発表し,その結果は翌年出版された [19].彼の結果は次の設問に答える形でなされている.『多数の同等の粒子間の多数の衝突後にその速度が与えられた範囲内にある平均の粒子数を見出すこと』.そしてこれに対する彼の答は次の通りである.N を全粒子数,x, y, z を各粒子の速度の三つの直交成分として,v_x が $[x, x+dx]$ に入る粒子数を $Nf(v_x)$ とする.こゝで $f(v_x)$ は求めるべき v_x の関数である.すると若干の仮定の下で

$$f(v_x) = \frac{1}{\alpha\sqrt{\pi}} \exp(-v_x^2/\alpha^2) \quad (-\infty < v_x < \infty) \tag{6.1}$$

となることを導いた.α は分布の正規化定数であって熱力学の法則と照しあわせて現在では $\alpha = \sqrt{2k^*T/m}$ と与えられる.こゝに m は1個の原子の質量,T は絶対温度,k^* は一般にボルツマン定数と言われ,1900 年にプランクによって導入された.マクスウェルは空間速度 v

が $[v, v+dy]$ に属する粒子数は

$$(6.2) \qquad N \frac{4}{\alpha^3 \sqrt{\pi}} v^2 \exp(-v^2/\alpha^2)\, dv$$

であることなども証明なしに述べた．これから N を除いたものは本質的に自由度3のカイ分布［カイ二乗ではない］の密度関数である．マクスウェルのこれらの表現式は正しい．しかし，(6.1) 式を求める際に置いた仮定「速度成分 x が $[x, x+dx]$ 内にある確率は，速度成分 y, z には影響されない」の根拠が不確かであった．そこで，1866年に彼自身[20]によってこの仮定を除き，分子間の衝突モデルを立て力学的考察をすることによって (6.1) を証明した．更に，空間速度 v の最終分布則として

$$(6.3) \qquad \frac{N}{\alpha^3 \pi^{3/2}} \exp(-(v_x^2+v_y^2+v_z^2)/\alpha^2)\, dv_y dv_z$$

が一つの可能な形であることを指摘した．そして彼は (6.3) が v の唯一の最終分布であることを証明しようとした．しかし，彼の証明は完全ではなかった．これは後にボルツマン (Boltzman, L. 1844–1906) が，彼の H 定理を発表した1872年の論文 [5] で，その定理を用いて完全なものにした．なおそこではボルツマンはまだ H 関数という表現を使わず E（エントロピー）と呼んでいる．しかし1877年の論文以後，符号を変えたものをエントロピーと呼ぶようになった．更に，ボルツマンはマクスウェル分布を拡張して，各原子または分子が外力場の影響を受ける場合（たゞし外力はポテンシャルエネルギーから導かれ得る保存系に制限される場合）にも適用できる粒子の速度分布法則，いわゆるマクスウェル＝ボルツマン分布を導いた．（ボルツマンは1868年の論文 [3] では分布関数を拡張してポテンシャル・エネルギーを含むようにし，1871年の論文 [4] では更に拡張して分子の内部自由度を考慮に入れて多原子分子の場合も扱えるようにした．）

さて，こゝで (6.2) 式をもとにして粒子の二乗速度 v^2 の分布について考えてみよう．$v^2=x$ とおくと，x が区間 $[x, x+dx]$ に入るような粒子の分布密度は

$$(6.4) \qquad g_3(x)\, dx \equiv \frac{2}{\alpha^3 \sqrt{\pi}} \sqrt{x} \exp(-x/\alpha^2)\, dx$$

となる．もし更に $x/\alpha^2=y$ と変換するならば自由度3のカイ二乗分布の密度関数そのものが得られる．(6.4) 式は粒子の運動エネルギーを扱う場合には極く自然な分布であろう．しかしマクスウェルは v^2 の平均値が $3\alpha^2/2$ に等しいことには触れたが (6.4) の表現そのものは用いなかったようである．

ボルツマンはこれに対して，前述の1872年の論文で (6.4) 式と同等な表現に達している．即ち彼は物理学の見地から最初にカイ二乗分布を発見した人であろう．彼がこの論文でやったことの意味は非常に大きいが，こゝでそれを詳しく述べる余裕はない．たゞボルツマンとマクスウェルの仕事の間には次のような違いがある．マクスウェルは熱平衡になり切った状態を考えてその状態を記述する関数方程式を解くことによって速度分布を求めたのであるが，これに対してボルツマンはより厳密に気体分子の衝突過程を考察し気体の運動エネルギーの初期分布がいかなるものであっても，気体分子の速度分布は，非常に長時間を経た後に，マクスウェル分布に確率収束し，それ以外の分布は考えられないことを一応示した．なおボルツマンはこの結果を導くに当って次の二つの仮定をしていることを忘れてはならない．第一は気体分子の速度は最初からすでにあらゆる方向に等確率であること，第二は速度分布が最初からすでに一様であることである，これらは確率論的な仮定であって力学的な仮定ではない．従ってそこで扱われている極限過程は個別の力学系の収束過程とその極限力学系について論じたものではない．

上に述べた1872年のボルツマンのマクスウェル速度分布の誘導は実は速度の代りに分子の運動エネルギー $x=mv^2/2$ を用いて行われた：R を考察の対象とする気体が閉じ込められている全空間とし，その中で単位体積を持つ任意の小空間を r とする．この r の中にある分子で，時刻 t に於て x が $[x, x+dx]$ に入るものの数を $f(x, t)dx$ とする．ボルツマンは上述の仮定の下でこの $f(x, t)$ の時間変化に関する基礎の偏微分方程式（いわゆるボルツマン方程式）を立て，その解として自由度3のカイ二乗分布に他ならない

$$f(x, t)=c\sqrt{x}\,e^{-hx} \qquad (c, h \text{ は定数}) \tag{6.5}$$

なる表現を得た．そしてこのことが実はマクスウェルが熱平衡状態で証明したことゝ同等であることを示した．ボルツマンは更に，$t=0$ の運動エネルギーの分布が全く任意であったとしたら，$f(x, t)$ の時間変化はどうなるかという問題を扱った．この研究のために彼は後に H-定理と呼ぶようになった重要な定理を証明し用いた．その結果，前述のように，このように任意運動エネルギーの状態から始めても気体分子の速度分布は長時間後には必ずマクスウェル分布に近づくことをエネルギー分布の表現を用いて証明した．

ボルツマンは1878年の論文 [6] に於て再び運動エネルギーの分布を研究し自由度2および自由度3のカイ二乗分布を見出した．シャイニン [24] はこの論文をもってボルツマンによるカイ二乗分布到達の年としているように見受けるが，筆者が既に上で指摘したように1872年の彼の著名な論文の中で自由度3のカイ二乗分布は使われており，シャイニンの説は訂正する必要がある．

ところでボルツマンは更に1878年の結果を拡張して，1882年の論文 [7] に於て，一般の次元 a に於る気体分子の速度分布に関し，各速度成分が $[u_1, u_1+du_1]$, $[u_2, u_2+du_2]$, $\cdots$, $[u_a, u_a+du_a]$ に入る確率は

$$\sqrt{\frac{k^a}{\pi}}\ \exp\left(-k(u_1{}^2+u_2{}^2+\cdots+u_a{}^2)\right)du_1du_2\cdots du \tag{6.6}$$

であること，そしてこの場合の分子の運動エネルギーが $[\chi, \chi+d\chi)$ に入る確率は

$$\frac{h^{a/2}}{\Gamma\left(\frac{a}{2}\right)}\,e^{-hx}\,\chi^{a/2-1}\,d\chi \tag{6.7}$$

であることを，証明なしではあるが，はっきりと記している．

(6.6) は a 次元正規分布，(6.7) は自由度 a のカイ二乗分布の確率要素に相当している．なお，(6.5)-(6.7) の中にある定数 k, h はボルツマンはいずれの論文でも与えていないが

$$k=\frac{m}{2k^*T}, \qquad h=\frac{1}{k^*T} \tag{6.8}$$

である．たゞし m は気体分子の質量，T は平衡状態の絶対温度，k^* はボルツマン定数である．

ところでマクスウェルが気体分子運動論から自由度3のカイ分布を導出したのに対して，レイリー卿 (Lord Rayleigh, J. W. S. 1842–1919) は音響の振動論の立場から正規分布，二次元正規分布を導いた上で本質的に自由度2のカイ分布を1880年の *Philosophical Magazine* に於て発表した．これが今日レイリー分布としてランダム変動を扱う分野でよく使われるものである．レイリーは著書 "The Theory of Sound" の改訂版 (1894) において自由度3のカイ分布も前と同様な立場から与えている．彼はしなかったが彼の方法を一般化して自由度 n のカイ分布

$$h_n(x)=\frac{1}{2^{n/2-1}\,\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}\,x^{n-1}\,e^{-x^2/2} \qquad (x\geq 0) \tag{6.9}$$

を得ることが可能である．彼の問題の定式化をこゝで述べることはしないが，彼は漸近的立場から (i) 問題をある初期条件の下に n 次元 ($n=1, 2, 3$) の無限固体に関する熱伝導方程式を解くことに帰着させ，その結果から (ii) 振動の振巾が $[r, r+dr]$ の範囲にある確率を誘導した．(i) に対する解答として彼は 1-3 次元の正規分布を導いている．正規分布のこの様な物理的観点からの誘導が行われていたという指摘を筆者はこれ迄に見聞したことはない．(ii) は (i) の結果からの積分計算で求められている．

なお，レイリーの誘導によれば n は正の整数に限られるが，(6.9) 式から分るように自由度 n は正の実数であればよい．このことは仲上 [32] によっても指摘されている．彼はレイリー分布の拡張として本質的に一般の自由度 n の場合のカイ分布を雑音解析に於るフェージング現象に関連する実験から誘導し，これを，m–分布と名づけて分布の特性などについて明らかにし，その方面の問題に活用している．確率統計の理論の分野に於ては，ともすると分布の背後にある現象を何ら考慮しないで議論を展開することが応々にしてあるが，本節で触れた物理方向でのカイ二乗或はカイ分布の発見はその点で数学的モデルとしての確率分布というものを我々に認識させてくれる好例のように思う．

最後にレイリーの誘導法を拡張して，一般の自由度 n のカイ分布およびカイ二乗分布を熱伝導方程式の初期値問題を通じて求め得ることを示そう．問題はまず熱伝導（拡散）方程式

(6.10)
$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = \frac{1}{2n}\left(\frac{\partial^2\theta}{\partial x_1{}^2} + \frac{\partial^2\theta}{\partial x_2{}^2} + \cdots + \frac{\partial^2\theta}{\partial x_n{}^2}\right), \quad t>0, \quad -\infty < x_i < \infty \quad (i=1, \cdots, n)$$

を初期条件:

(6.11)
$$\theta(t, x_1, \cdots, x_n) = 1 \qquad t\to 0 \text{ のとき}$$

の下で解くことである．これは例えば変数分離法を用いて解くことが出来て，解は

(6.12)
$$\theta = \frac{1}{(\sqrt{2\pi t/n}\,)^n}\exp\left\{-\frac{x_1{}^2+x_2{}^2+\cdots+x_n{}^2}{2t/n}\right\}$$

で与えられる．即ち温度分布 θ は任意の時刻 t で n 次元正規分布 $N(\mathbf{0}, 2tn^{-1}I_n)$ の密度関数をもつことが分る．但し $\mathbf{0}$ は n 次元ゼロベクトル，I_n は n 次元単位行列，次に

(6.13)
$$\chi = \left\{\frac{n}{t}(x_1{}^2+x_2{}^2+\cdots+x_n{}^2)\right\}^{1/2}$$

と置いて，この量が $[x, x+dx]$ に入る確率を求めよう．このためにレイリーにならって直交座標系 $(x_1, \cdots, x_n)$ から球面座標系 $(\chi_1, \alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_{n-2}, \beta)$ への変換を考える．たとえば

(6.14)
$$\begin{cases} x_1 = \sqrt{t/n}\;\chi\cos\alpha_1, \\ x_2 = \sqrt{t/n}\;\chi\sin\alpha_1\cos\alpha_2, \\ x_3 = \sqrt{t/n}\;\chi\sin\alpha_1\sin\alpha_2\cos\alpha_3, \\ \quad\vdots \\ x_{n-1} = \sqrt{t/n}\;\chi\sin\alpha_1\sin\alpha_2\cdots\sin\alpha_{n-2}\cos\beta, \\ x_n = \sqrt{t/n}\;\chi\sin\alpha_1\sin\alpha_2\cdots\sin\alpha_{n-2}\sin\beta, \end{cases}$$

こゝに $0\leq\alpha_i\leq\pi$, $0\leq\beta<2\pi$ である．このとき変換のヤコビアンは

$$\frac{\partial(x_1, x_2, \cdots, x_{n-1}, x_n)}{\partial(\chi, \alpha_1, \cdots, \alpha_{n-1}, \beta)} = \left(\sqrt{\frac{t}{n}}\right)^n \chi^{n-1}\sin^{n-2}\alpha_1\sin^{n-3}\alpha_2\cdots\sin\alpha_{n-2}.$$

となるから $\int_0^\pi \sin^k\alpha\, d\alpha = \sqrt{\pi}\ \Gamma\left(\frac{k+1}{2}\right)\Big/\Gamma\left(\frac{k}{2}+1\right)$ に注意して，求める確率は

$$h_n(\chi)d\chi = \frac{1}{(\sqrt{2\pi t/n})^n}\left(\sqrt{\frac{t}{n}}\right)^n \chi^{n-1}e^{-\chi^2/2}d\chi \tag{6.15}$$

$$\times\int_0^\pi \sin^{n-2}\alpha_1 d\alpha_1 \int_0^\pi \sin^{n-3}\alpha_2 d\alpha_2\cdots\int_0^{2\pi} d\beta$$

$$= \frac{1}{2^{n/2-1}\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}\chi^{n-1}e^{-\chi^2/2}d\chi$$

となる．これは χ が自由度 n のカイ分布に従うことを意味する．もし χ を平方した χ^2 を考え，これが $[\chi^2, \chi^2+d\chi^2]$ に入る確率を考えれば，それが自由度 n のカイ二乗分布の確率要素となることは直ちに分る．

なお (6.13)，(6.14) からカイ分布の一つの物理的解釈は次の様に言えよう．即ち n 次元実空間の原点から，この空間内をランダムに動き廻る点 $\left(\sqrt{\frac{n}{t}}\ x_1, \cdots, \sqrt{\frac{n}{t}}\ x_n\right)$ へ引いたランダム変動する動径の長さ χ の従う分布が自由度 n のカイ分布である．また，この動径の長さの二乗 χ^2 の従う分布が自由度 n のカイ二乗分布である．この解釈から，熱伝導，気体の分子運動，雑音解析学で現れるランダム振動などのように原子或は分子のランダムな運動が問題の背後にある場合，カイ或はカイ二乗分布が共通して現れることは極く自然と言うことになる．

参考文献

[1] Abbe, E. (1906). Über die Gesetzmässigkeit in der Verteilung der Fehler bei Beobachtungsreihen, *Gesammelte Abhandlungen von Ernst Abbe* Bd. II, Jena. Originally published as Dissertation zur Erlangung der Venia Docendi bei der philosophischen Fakultät in Jena 1863.

[2] Anderson, R.L. (1942). Distribution of the serial correlation coefficient, *Ann. Math. Statist.*, **13**, 1–13.

[3] Boltzmann, L. (1868). Über die Integrale linearer Differentialgleichungen mit periodischen Koeffizienten, *Wiener Berichte*, **58**, s. 54–59.

[4] Boltzmann, L. (1871). Über das Wärmegleichgewicht zwischen mehratomigen Gasmolekülen, *Wiener Berichte*, **63**, s. 397–418.

[5] Boltzmann, L. (1872). Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen, *Wiener Berichte*, **66**, 275–370.

[6] Boltzmann, L. (1878). Weitere Bemerkungen über einige Probleme der mechanischen Wärmetheorie, *Wiener Berichte*, **78**, s. 7–46.

[7] Boltzmann, L. (1882). Über einige das Wärmegleichgewicht betreffende Sätze, *Wiener Berichte*, **84**, s. 136–145.

[8] Cramér, H. (1955). *The Elements of Probability Theory and Some of its Applications*, Almqvist & Wiksell.

[9] Edwards, J. (1922). *A treaties on the Integral Calculus*, Vol. 2, London.

[10] Guttman, I., Wilks, S.S. and Hunter, J.S. (1971). Introductory Engineering Statistics, 2nd ed., John Wiley & Sons, Inc.

[11] Johnson, N.L. and Kotz, S. (1970). *Distributions in Statistics, Continuous Univariate Distributions*–1, Houghton Mifflin Company, Boston.

[12] Kendall, M.G. and Stuart, A. (1969). *The Advanced Theory of Statistics*, Vol. 1. *Distribution Theory*. 3rd ed., Charles Griffin.

[13] Kendall, M.G. (1971). Studies in the history of probability and statistics, XXVI, The work of Ernst Abbe, *Biometrika*, **58**, 369–373.

[14] Koopmans, T. (1942). Serial correlations and quadratic forms in normal variables, *Ann. Math. Statist.*, **13**, 14–33.
[15] Lancaster, H.O. (1966). Forerunners of the Pearson χ^2, *Aust. J. Statist.*, **8**, 117–126.
[16] Lancaster, H.O. (1969). *The Chi-squared Distribution*, Wiley & Sons, Inc.
[17] Matsunawa, T. (1977). Approximations to the probabilities and multinomial random variables and chi-square type statistics, *Ann. Inst. Statist. Math.*, **29**, A, 333–358.
[18] Matsunawa, T. (1982). Uniform ϕ-equivalence of probability distributions based on information and related measures of discrepancy, *Ann. Inst. Statist. Math.*, **34**, A, 1-17.
[19] Maxwell, J.C. (1860). Illustrations of the dynamical theory of gases, *Philosophical Magazine. Scient. Papers*, Vol. 1, 377-410, Paris, 1927: Libr. scient. Hermann.
[20] Maxwell, J.C. (1866). On the dynamical theory of gases, *Philosophical Transactions*, CLVII.
[21] Pearson, K. (1900). On a criterion that a given system of deviations from the probable in the case of correlated system of variables is such that it can be reasonably supposed to have arisen from random sampling, *Philosophical Magazine* 5th ser., **50**, 157–175.
[22] Pipes, L.A. and Hovanessian, S.A. (1969). *Matrix Computer Methods in Engineering*, John Wiley & Sons. Inc.
[23] Rayleigh, J.W.S. Baron (1894). *The Theory of Sound*, Vol. 1, 2nd ed., revised and enlarged, Dover Publications.
[24] Sheynin, O.B. (1971). Studies in the history of probability and Statistics. XXV, On the history of some statistical laws of distribution, *Biometrika*, **58**, 234–236.
[25] Whittaker, E.T. and Watson, G.N. (1927). *A Course of Modern Analysis*, Fourth Edition, Cambridge Univ. Press.
[26] Wilks, S.S. (1962). *Mathematical Statistics*, John Wiley & Sons, Inc.
[27] 青木保雄 (1965). 精密測定 (1), コロナ社, p. 22.
[28] 佐藤正明 (1937). 最新工業大辞典, 第1巻, 松元竹二編, 非凡閣, p. 223.
[29] 寺沢寛一 (1951). 自然科学者のための数学概論, 増訂版, 岩波書店.
[30] 広重 徹 (1968). 物理学史 I, 培風館, pp. 174-175.
[31] 藤原松三郎 (1938). 微分積分学 (第二巻), 内田老鶴圃, pp. 272-274.
[32] 仲上 稔 (1947). 短波の特性及び合成受信の研究, 修教社.

Some Reflexions and Historical Reviews on the Chi-square Distribution

Tadashi Matsunawa

(The Institute of Statistical Mathematics)

This paper deals with some topics concerning the birth and the derivation of the chi-square distribution. A direct derivation of its probability density function is devised by the author with the help of the Dirichlet-Liouville integral in real variable cases. This way of derivation, which has never been appeared yet in literature, so far as the author knows, has advantage of making a good many statistical calculations easy.

A historical sketch is given with the author's review on forerunners' works about the distribution. Especially, the importance of the work by Ernst Abbe in 1863 is stated and is proved more fully than M. G. Kendall did. Surprisingly, Abbe had already given a nice derivation of the pdf of the chi-square distribution with n-degrees of freedom, is almost forgotten at present. Besides the fact, he had derived the exact distributions of mean square successive differences and the circular serial correlation coefficient of the normal random variables. As regard to Karl Pearson's famous paper in 1900 some comments are also given. It is remarked that he expressed the pdf of his chi-square variable by the corresponding pdf of the chi distribution rather than that of the chi-square distribution. Further, the close relation between the chi-square goodness-of-fit statistic and the negative entropy is noted in respect to the underlying problems.

In addition to the above mathematical aspect, the physical backgrounds of the distribution are considered through the related works by Maxwell, Boltzmann, Rayleigh and Nakagami.