多項分布 (multinomial distribution)

$$p(x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_n) = \frac{N!}{x_1!x_2!\cdots x_n!}p_1^{x_1}p_2^{x_2}\cdots p_n^{x_n} \tag{1}$$

ただし、

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 + \cdots + x_n &= N, & (2) \\ p_1 + p_2 + \cdots + p_n &= 1 & (3) \end{aligned}$$

ここで、条件式 (2) は、独立変数が $n-1$ コであることを表している。これを、計算に取り込むために、変数が $n-1$ コである関数を $P(x_1,\ x_2,\ \cdots, x_{n-1})$ で表し、

$$P(x_1,\ x_2,\ \cdots, x_{n-1}) = \sum_{x_n=0}^{N} p(x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_n)\,\delta_{x_1+x_2+\cdots+x_n,\ n} \tag{4}$$

と書こう。ここで、$\delta_{x_1+x_2+\cdots+x_n,\ n}$ は、クロネッカーのデルタである。

N は十分に大きいとして、(1) 式をスターリングの公式を用いて書き直すと、

$$\begin{aligned} p(x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_n) &\sim \frac{\sqrt{2\pi}N^{N+\frac{1}{2}}}{\sqrt{2\pi}x_1^{x_1+\frac{1}{2}}\sqrt{2\pi}x_2^{x_2+\frac{1}{2}}\cdots\sqrt{2\pi}x_n^{x_n+\frac{1}{2}}}p_1^{x_1}p_2^{x_2}\cdots p_n^{x_n} \\ &= \frac{N^{-(n-1)/2}}{(2\pi)^{(n-1)/2}\sqrt{p_1p_2\cdots p_n}}\left(\frac{x_1}{Np_1}\right)^{-x_1-\frac{1}{2}}\left(\frac{x_2}{Np_2}\right)^{-x_2-\frac{1}{2}}\cdots\left(\frac{x_n}{Np_n}\right)^{-x_n-\frac{1}{2}} \qquad (5) \end{aligned}$$

ここで、

$$t_i = \frac{x_i - Np_i}{\sqrt{Np_i}} \quad (i = 1,\ 2,\ \cdots,\ n)$$

と置くと、

$$x_i = Np_i + \sqrt{Np_i}\,t_i, \qquad \frac{x_i}{Np_i} = 1 + \frac{t_i}{\sqrt{Np_i}}$$

だから、

$$\begin{aligned} \left(\frac{x_i}{Np_i}\right)^{-x_i-\frac{1}{2}} &= \exp\left\{-\left(x_i+\frac{1}{2}\right)\ln\left(\frac{x_i}{Np_i}\right)\right\} \\ &= \exp\left\{-\left(Np_i+\sqrt{Np_i}t_i+\frac{1}{2}\right)\ln\left(1+\frac{t_i}{\sqrt{Np_i}}\right)\right\} \\ &= \exp\left\{-\left(Np_i+\sqrt{Np_i}t_i+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{t_i}{\sqrt{Np_i}}-\frac{t_i^2}{2Np_i}+\dots\right)\right\} \\ &= \exp\left\{-\sqrt{Np_i}t_i-\frac{t_i^2}{2}+\cdots\right\} \end{aligned}$$

となる。これらを用いて (5) 式を書き直すと、

$$p(x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_n) \sim \frac{N^{-(n-1)/2}}{(2\pi)^{(n-1)/2}\sqrt{p_1p_2\cdots p_n}}\exp\left\{-\sqrt{N}(\sqrt{p_1}t_1+\sqrt{p_2}t_2+\cdots+\sqrt{p_n}t_n)-\frac{1}{2}\left(t_1^2+t_2^2+\cdots+t_n^2\right)\right\}$$

となる。この式を (4) 式に代入し、さらに、和を積分で置き換える、すなわち、

$$\sum_{x_n=0}^{N}\delta_{x_1+x_2+\cdots+x_n,\ n} \ \rightarrow\ \sqrt{p_n}\int_{-\infty}^{+\infty}dt_n\delta(\sqrt{p_1}t_1+\sqrt{p_2}t_2+\cdots+\sqrt{p_n}t_n)$$

とおく。このデルタ関数のお蔭で、$\sqrt{p_1}t_1+\sqrt{p_2}t_2+\cdots+\sqrt{p_n}t_n=0$ となる。

一方、連続変数 $t_1,\ t_2,\ \cdots,\ t_{n-1}$ の分布を $F(t_1,\ t_2,\ \cdots,\ t_{n-1})$ と書くと、$\Delta x_i=\sqrt{Np_i}\Delta t_i$、かつ $\Delta x_i=1$ だから、$\Delta t_i=1/\sqrt{Np_i}$、すなわち、

$$P(x_1,\ x_2,\ \cdots,x_{n-1})=\frac{1}{\sqrt{N^{(n-1)}p_1p_2\cdots p_{n-1}}}F(t_1,\ t_2,\ \cdots,\ t_{n-1})$$

となるので、結局、

$$\begin{aligned}&F(t_1,\ t_2,\ \cdots,\ t_{n-1})\\&=\frac{1}{(2\pi)^{(n-1)/2}}\int_{-\infty}^{+\infty}dt_n\delta(\sqrt{p_1}t_1+\sqrt{p_2}t_2+\cdots+\sqrt{p_n}t_n)\exp\left\{-\frac{1}{2}\left(t_1^2+t_2^2+\cdots+t_n^2\right)\right\}\\&=\frac{1}{(2\pi)^{(n-1)/2}\sqrt{p_n}}\exp\left\{-\frac{1}{2}\left(t_1^2+t_2^2+\cdots+t_{n-1}^2+\frac{(\sqrt{p_1}t_1+\sqrt{p_2}t_2+\cdots+\sqrt{p_{n-1}}t_{n-1})^2}{p_n}\right)\right\}\end{aligned}$$

となる。この指数部分を行列表示を用いて、

$$t_1^2+t_2^2+\cdots+t_{n-1}^2+\left(\sqrt{\frac{p_1}{p_n}}t_1+\sqrt{\frac{p_2}{p_n}}t_2+\cdots+\sqrt{\frac{p_{n-1}}{p_n}}t_{n-1}\right)^2=\mathbf{t}^TA\mathbf{t}$$

と書こう。ここで、$r_i=\sqrt{p_i/p_n}$ と書くことにすると、

$$A=\begin{pmatrix}1+r_1^2 & r_1r_2 & \ldots & r_1r_{n-1}\\ r_1r_2 & 1+r_2^2 & \ldots & r_2r_{n-1}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ r_1r_{n-1} & r_2r_{n-1} & \ldots & 1+r_{n-1}^2\end{pmatrix},\qquad \mathbf{t}=\begin{pmatrix}t_1\\ t_2\\ \vdots\\ t_{n-1}\end{pmatrix}$$

である。行列 A を対角化する直行行列を S と書き、S で $\mathbf{t}$ を変換したベクトルを $\mathbf{u}$ と書く。

$$SAS^{-1}=D=\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0 & \ldots & 0\\ 0 & \lambda_2 & \ldots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \ldots & \lambda_{n-1}\end{pmatrix},\qquad \mathbf{u}=\begin{pmatrix}u_1\\ u_2\\ \vdots\\ u_{n-1}\end{pmatrix}=S\mathbf{t}$$

ここで、$\lambda_i>0\ (i=1,\ 2,\ \cdots,\ n-1)$ である。

次に、行列式 $|A|$ を行列式の性質を使って計算する。

$$\begin{aligned}|A|\quad&=\quad\begin{vmatrix}1+r_1^2 & r_1r_2 & \ldots & r_1r_{n-1}\\ r_1r_2 & 1+r_2^2 & \ldots & r_2r_{n-1}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ r_1r_{n-1} & r_2r_{n-1} & \ldots & r_{n-1}^2\end{vmatrix}+\begin{vmatrix}1+r_1^2 & r_1r_2 & \ldots & 0\\ r_1r_2 & 1+r_2^2 & \ldots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ r_1r_{n-1} & r_2r_{n-1} & \ldots & 1\end{vmatrix}\\&=\quad|A_1|+|A_2|\end{aligned}$$

$\bullet|A_1|$ の計算　第 $n-1$ 列の要素には、すべて r_{n-1} が掛かっているので、行列式の外に出すことができる。

$$|A_1|=r_{n-1}\begin{vmatrix}1+r_1^2 & r_1r_2 & \ldots & r_1\\ r_1r_2 & 1+r_2^2 & \ldots & r_2\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ r_1r_{n-1} & r_2r_{n-1} & \ldots & r_{n-1}\end{vmatrix}$$

第 i 列に第 $(n-1)$ の要素に r_i を掛けたものを引いても行列の値は変わらないので、

$$|A_1| = r_{n-1}\begin{vmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & r_1 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & r_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & r_{n-2} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & r_{n-1} \end{vmatrix} = r_{n-1}^2$$

●$|A_2|$ の計算

$$|A_2| = \begin{vmatrix} 1+r_1^2 & r_1r_2 & \dots & r_1r_{n-2} \\ r_1r_2 & 1+r_2^2 & \dots & r_2r_{n-2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r_1r_{n-2} & r_2r_{n-2} & \dots & 1+r_{n-2}^2 \end{vmatrix}$$

後は、$|A_1|$ の計算と同様な操作を順次繰り返せば良い。

$$|A_2| = r_{n-2}^2 + r_{n-3}^2 + \cdots + r_2^2 + r_1^2 + 1$$

以上の結果から、

$$|A| = r_{n-1}^2 + r_{n-2}^2 + \cdots + r_1^2 + 1 = \frac{1}{p_n}$$

一方、

$$|A| = \lambda_1\lambda_2\lambda_3\cdots\lambda_{n-1}$$

でもあるので、

$$\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_{n-1} = \frac{1}{p_n}$$

を得る。

そこで、$F(t_1,\ t_2,\ \cdots,\ t_{n-1})$ を $u_1,\ u_2,\ \cdots,\ u_{n-1}$ を用いて書き直すと、

$$\begin{aligned} f(u_1,\ u_2,\ \cdots,\ u_{n-1}) &= F(t_1,\ t_2,\ \cdots,\ t_{n-1}) \\ &= \frac{\sqrt{\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_{n-1}}}{(2\pi)^{(n-1)/2}}\exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\lambda_1u_1^2 + \lambda_2u_2^2 + \cdots + \lambda_{n-1}u_{n-1}^2\right)\right\} \end{aligned}$$

となる。

さらに、$v_i = \sqrt{\lambda_i}u_i\ (i = 1,\ 2,\ \cdots,\ n-1)$ と変数変換をすると、

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(v_i - \sqrt{\lambda_i}u_i)\exp\left(-\frac{\lambda_i}{2}u_i^2\right)du_i = \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}}\exp\left(-\frac{1}{2}v_i^2\right)$$

だから、

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(v_1,\ \cdots,\ v_{n-1}) &= \int\cdots\int f(u_1,\ \cdots,\ u_{n-1})\delta(v_1 - \sqrt{\lambda_1}u_1)\cdots\delta(v_{n-1} - \sqrt{\lambda_{n-1}}u_{n-1})\,du_1\cdots du_{n-1} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{(n-1)/2}}\exp\left\{-\frac{1}{2}\left(v_1^2 + v_2^2 + \cdots + v_{n-1}^2\right)\right\} \end{aligned}$$

となる。これは、独立な $n-1$ コの標準正規分布を表している。したがって、

$$\chi^2 = v_1^2 + v_2^2 + \cdots + v_{n-1}^2 = t_1^2 + t_2^2 + \cdots + t_n^2$$

は、自由度 $n-1$ の χ^2 分布に従う。