

一般化された Laplace の方法

黒木玄

2016年10月14日(金)作成*

<http://www.math.tohoku.ac.jp/~kuroki/LaTeX/20161014GeneralizedLaplace.pdf>

目次

0	はじめに	1
1	一般化された Laplace の方法を導くための公式	2
1.1	ウォーミングアップ (2次元の場合)	2
1.2	3次元の場合	3
1.3	一般次元の場合	5

0 はじめに

このノートの内容は次のリンク先から始まる連続ツイートの内容をまとめたものである:

<https://twitter.com/genkuroki/status/786179021138571266>

<https://twitter.com/genkuroki/status/789286733246451712>

\mathbb{R}^d を列ベクトル (縦ベクトル) の空間であるとみなし, Euclid 内積を $\langle \cdot, \cdot \rangle$ と書く.
 \mathbb{R}^d の Lebesgue 測度を dx と書く. A が d 次正值実対称行列ならば

$$\int_{\mathbb{R}^d} e^{-n\langle x, Ax \rangle} dx = \sqrt{\det(2\pi n^{-1}A^{-1})} = \frac{(2\pi)^{d/2}}{n^{d/2}\sqrt{\det(A)}}$$

なので

$$-\log \int_{\mathbb{R}^d} e^{-n\langle x, Ax \rangle} dx = \frac{d}{2} \log n + \frac{1}{2} \log \det(A) - \frac{d}{2} \log(2\pi).$$

ゆえにもしも $f(x)$ が唯一の最小値 $f(x_0)$ を持ち, $x = x_0$ の近傍で

$$f(x) = f(x_0) + \frac{1}{2}\langle x - x_0, A(x - x_0) \rangle + \dots$$

*2016年10月14日 Ver.0.1(4頁): 作成. 2016年10月19日 Ver.0.2(4頁): 微修正. 2016年10月21日 Ver.0.3(6頁): 第1.2節を追加.

と Taylor 展開可能でかつ A が正定値ならば, 適当な条件を満たす $\varphi(x)$ について

$$Z_n := \int_{\mathbb{R}^n} e^{-nf(x)} \varphi(x) dx = \frac{(2\pi)^{d/2} e^{-nf(x_0)} \varphi(x_0)}{n^{d/2} \sqrt{\det(A)}} (1 + o(1)) \quad (n \rightarrow \infty)$$

が成立する. すなわち,

$$-\log Z_n = nf(x_0) + \frac{d}{2} \log n + \frac{1}{2} \log \det(A) - \frac{d}{2} \log(2\pi) - \log \varphi(x_0) + o(1).$$

このようにして積分の漸近挙動を導く方法を **Laplace** の方法と呼ぶ. この方法を一般化するための公式を次の節で示そう.

1 一般化された Laplace の方法を導くための公式

以下の計算のモチベーションは [1] の第 4 章の初等的な解説である.

1.1 ウォーミングアップ (2次元の場合)

$L, M > 0$ であるとする. 次の形の積分について考えよう:

$$\int_0^L dx \int_0^M dy \exp(-nx^a y^b) x^c y^d.$$

この形の積分の計算は積分変数の置換 $x^a = X, y^b = Y$ によって次の形の積分に帰着できる:

$$Z_n := \int_0^L dx \int_0^M dy e^{-nxy} x^{\lambda-1} y^{\mu-1}.$$

ここで $\lambda = (c+1)/a, \mu = (d+1)/b$ である. 以下では $0 < \lambda \leq \mu$ と仮定して, この積分の $n \rightarrow \infty$ での漸近挙動を調べよう.

$0 < \lambda < \mu$ の場合. x による積分を最初に行うことにし, 積分変数を $x = t/(ny)$ によって t に変換すると,

$$\begin{aligned} Z_n &= \int_0^M \left(\int_0^L e^{-nxy} x^{\lambda-1} y^{\mu-1} dy \right) dy = \int_0^M \left(\int_0^{nLy} e^{-t} \left(\frac{t}{ny} \right)^\lambda y^{\mu-1} \frac{dt}{t} \right) dy \\ &= \frac{1}{n^\lambda} \int_0^M \left(\int_0^{nLy} e^{-t} t^{\lambda-1} dt \right) y^{\mu-\lambda-1} dy = \frac{\Gamma(\lambda)}{n^\lambda} \int_0^M y^{\mu-\lambda-1} dy \cdot (1 + o(1)) \\ &= \frac{\Gamma(\lambda) M^{\mu-\lambda}}{n^\lambda (\mu - \lambda)} (1 + o(1)). \end{aligned}$$

すなわち

$$-\log Z_n = \lambda \log n - \log \Gamma(\lambda) + \log(\mu - \lambda) - (\mu - \lambda) \log M + o(1).$$

$0 < \lambda = \mu$ の場合. 上と同様にして,

$$\begin{aligned}
Z_n &= \int_0^M \left(\int_0^L e^{-nxy} (xy)^{\lambda-1} dy \right) dx = \int_0^M \left(\int_0^{nLy} e^{-t} \left(\frac{t}{ny} \right)^\lambda y^{\lambda-1} \frac{dt}{t} \right) dx \\
&= \frac{1}{n^\lambda} \int_0^M \left(\int_0^{nLy} e^{-t} t^{\lambda-1} dt \right) \frac{dx}{y} = \frac{1}{n^\lambda} \int_0^{nLM} e^{-t} t^{\lambda-1} \left(\int_{t/(nL)}^M \frac{dx}{y} \right) dt \\
&= \frac{1}{n^\lambda} \int_0^{nLM} e^{-t} t^{\lambda-1} (\log n + \log(LM) - \log t) dt \\
&= \left(\frac{\Gamma(\lambda) \log n}{n^\lambda} + \frac{1}{n^\lambda} (\Gamma(\lambda) \log(LM) - \Gamma'(\lambda)) \right) (1 + o(1)) \\
&= \frac{\Gamma(\lambda) \log n}{n^\lambda} (1 + o(1)).
\end{aligned}$$

ゆえに

$$-\log Z_n = \lambda \log n - \log \log n - \log \Gamma(\lambda) + o(1).$$

べきに重複が存在すると $\log \log n$ の項が現われる.

以上のウォーミングアップをすませた後であれば次の部分節の結果も同様に示せることがわかるだろう.

1.2 3次元の場合

$L, M, N > 0$ であるとし, 次の積分について考えよう:

$$\int_0^L dx \int_0^M dy \int_0^N dz \exp(-n x^k y^l z^m) x^a y^b z^c.$$

この積分の計算は $x = X^{1/k}$, $y = Y^{1/l}$, $z = Z^{1/m}$ という積分変数変換によって次の形の積分に帰着できる:

$$Z_n = \int_0^L dx \int_0^M dy \int_0^N dz e^{-nxyz} x^{a-1} y^{b-1} z^{c-1}.$$

この Z_n における L, M, N をそれぞれ L^k, M^l, N^m で置き換え, さらに a, b, c をそれぞれ $(a+1)/k, (b+1)/l, (c+1)/m$ で置き換えて, さらに klm で割ると上の積分に一致する.

以下では $a, b, c > 0$ と仮定する. $-\log Z_n$ の $n \rightarrow \infty$ での漸近挙動を知りたい.

$x = t/(nyz)$ において積分変数を (x, y, z) から (t, y, z) に変換しよう. そのとき (t, y, z) に関する積分領域は次の条件で与えられる:

$$0 < \frac{t}{nyz} < L, \quad 0 < y < M, \quad 0 < z < N.$$

これは以下の各行と同値である:

$$\begin{aligned}
0 < y < M, \quad 0 < z < N, \quad 0 < t < nLy z; \\
0 < z < N, \quad 0 < t < nLMz, \quad \frac{t}{nLz} < y < M; \\
0 < t < nLMN, \quad \frac{t}{nLN} < y < M, \quad \frac{t}{nLy} < z < N.
\end{aligned}$$

さらに, $x = t/(nyz)$ より,

$$\begin{aligned} e^{-nxyz} x^{a-1} y^{b-1} z^{c-1} dx dy dz &= e^{-t} \left(\frac{t}{nyz} \right)^{a-1} y^{b-1} z^{c-1} \frac{dt}{nyz} dy dz \\ &= \frac{1}{n^a} e^{-t} t^{a-1} y^{b-a-1} z^{c-a-1} dt dy dz. \end{aligned}$$

ゆえに

$$Z_n = \frac{1}{n^a} \int_0^M y^{b-a-1} \left(\int_0^N z^{c-a-1} \left(\int_0^{nLy} e^{-t} t^{a-1} dt \right) dz \right) dy \quad (1)$$

$$= \frac{1}{n^a} \int_0^N z^{c-a-1} \left(\int_0^{nLMz} e^{-t} t^{a-1} \left(\int_{t/(nLz)}^M y^{b-a-1} dy \right) dt \right) dz \quad (2)$$

$$= \frac{1}{n^a} \int_0^{nLMN} e^{-t} t^{a-1} \left(\int_{t/(nLN)}^M y^{b-a-1} \left(\int_{t/(nLy)}^N z^{c-a-1} dz \right) dy \right) dt. \quad (3)$$

$0 < a < b \leq c$ の場合. $b-a > 0, c-a > 0$ なので, (1) より, $n \rightarrow \infty$ のとき

$$Z_n = \frac{1}{n^a} \Gamma(a) \frac{M^{b-a} N^{c-a}}{b-a} (1 + o(1)).$$

ゆえに

$$-\log Z_n = a \log n + O(1).$$

$0 < a = b < c$ の場合. $b-a = 0, c-a > 0$ なので, (2) より,

$$\begin{aligned} Z_n &= \frac{1}{n^a} \int_0^N z^{c-a-1} \left(\int_0^{nLMz} e^{-t} t^{a-1} \log \frac{nLMz}{t} dt \right) dz \\ &= \frac{\log n}{n^a} \Gamma(a) \frac{N^{c-a}}{c-a} (1 + o(1)). \end{aligned}$$

ゆえに

$$-\log Z_n = a \log n - \log \log n + O(1).$$

$0 < a = b = c$ の場合. $b-a = c-a = 0$ なので, (3) より,

$$\begin{aligned} Z_n &= \frac{1}{n^a} \int_0^{nLMN} e^{-t} t^{a-1} \left(\int_{t/(nLN)}^M y^{-1} \log \frac{nLyN}{t} dy \right) dt \\ &= \frac{\log n}{n^a} \int_0^{nLMN} e^{-t} t^{a-1} \left(\int_{t/(nLN)}^M y^{-1} dy \right) dt \cdot (1 + o(1)) \\ &= \frac{\log n}{n^a} \int_0^{nLMN} e^{-t} t^{a-1} \log \frac{nLMN}{t} dt \cdot (1 + o(1)) \\ &= \frac{(\log n)^2}{n^a} \int_0^{nLMN} e^{-t} t^{a-1} dt \cdot (1 + o(1)) \\ &= \frac{(\log n)^2}{n^a} \Gamma(a) (1 + o(1)). \end{aligned}$$

ゆえに

$$-\log Z_n = a \log n - 2 \log \log n + O(1).$$

1.3 一般次元の場合

$L_i > 0$ であるとし, 前節の積分を一般化した次の積分について考えよう:

$$\int_0^{L_1} dx_1 \cdots \int_0^{L_d} dx_d \exp(-nx_1^{a_1} \cdots x_d^{a_d}) x_1^{b_1} \cdots x_d^{b_d}.$$

この積分の計算は $x_i^{a_i} = X_i$ による積分変数の変換によって次の形の積分に帰着する:

$$Z_n = \int_0^{L_1} dx_1 \cdots \int_0^{L_d} dx_d e^{-nx_1 \cdots x_d} x_1^{\lambda_1-1} \cdots x_d^{\lambda_d-1}.$$

ここで

$$\lambda_i = \frac{b_i + 1}{a_i}$$

$\lambda_i > 0$ となると仮定する. $\lambda_1, \dots, \lambda_d$ の最小値を λ と書き, $\lambda = \lambda_i$ となる i の個数 (λ の重複度) を m と書くことにする. このとき前節の計算を一般化することによって次が成立することを示せる:

$$-\log Z_n = \lambda \log n - (m - 1) \log \log n + O(1).$$

この公式における λ と m は本質的に [1] の第4章に登場する λ と m と同じものである.

例 1.1 (Gauss 積分). w_i たちを

$$w_1 = x_1, w_2 = w_1 x_2, \dots, w_d = w_1 x_d$$

と定めると

$$w_1^2 + \cdots + w_d^2 = x_1^2(1 + x_2^2 + \cdots + x_d^2)$$

であることから, Gauss 積分の対数の -1 倍

$$-\log Z_n = -\log \int dw_1 \cdots \int dw_d \exp(-n(w_1^2 + \cdots + w_d^2))$$

の漸近挙動は本質的に次と同じになる:

$$-\log \int dx_1 \cdots \int dx_d e^{-nx_1^2 x_1^{d-1}}.$$

この場合は $\lambda = (d - 1 + 1)/2 = d/2$, $m = 1$ となるので

$$-\log \int dx_1 \cdots \int dx_d e^{-nx_1^2 x_1^{d-1}} = \frac{d}{2} \log n + O(1)$$

となる. これはガウス積分を直接計算した場合の結果と一致する. □

例 1.2 (退化した Gauss 積分). $0 \leq k < d$ であるとし, w_i たちを

$$w_1 = x_1, w_2 = w_1 x_2, \dots, w_k = w_1 x_k, w_{k+1} = x_{k+1}, \dots, w_d = x_d$$

と定めると

$$w_1^2 + \cdots + w_k^2 = x_1^2(1 + x_2^2 + \cdots + x_k^2)$$

であることから, w_{k+1}, \dots, w_d に関する積分は有限の範囲内で行なうことにすると, 退化した Gauss 積分の対数の -1 倍

$$-\log Z_n = -\log \int dw_1 \cdots \int dw_d \exp(-n(w_1^2 + \cdots + w_k^2))$$

の漸近挙動は本質的に次と同じになる:

$$-\log \int dx_1 \cdots \int dx_d e^{-nx_1^2 x_1^{k-1}}.$$

この場合は $\lambda = (k - 1 + 1)/2 = k/2$, $m = 1$ となるので

$$-\log \int dx_1 \cdots \int dx_d e^{-nx_1^2 x_1^{k-1}} = \frac{k}{2} \log n + O(1)$$

となる. このとき $k < d$ より, $\lambda = k/2 < d/2$ となる. □

参考文献

[1] 渡辺澄夫. ベイズ統計の理論と方法. コロナ社 (2012/03), 226 頁.

<http://watanabe-www.math.dis.titech.ac.jp/users/swatanab/bayes-theory-method.html>