

格子点上の Gibbs モデルの局所漸近正規性

広島大学総合科学部 間瀬 茂 (Shigeru Mase)

粒子間にはインシラルカが働く下での大量粒子の位置の熱力学的平衡状態を記述するものとして Gibbs 分布が統計力学の重要な研究テーマであることは良く知られている。この Gibbs 分布を非物理的粒子（例えば植物・星・虫屋等）の集合的挙動の統計的モデルとして使おうという試みも古くからあるが、近年 Gibbs 分布の厳密な確率論的定式化 (Dobrushin, Ruelle 等による) とともに新に興味を呼んでいる。ここでは \mathbb{R}^2 上の格子点 \mathbb{Z}^2 に粒子が存在する場合に限り漸近的統計解析を試みる。

G を \mathbb{Z}^2 の有限集合, $[G]$ を G の部分集合の全体とする。 \mathbb{Z}^2 から \mathbb{R}^n への偶関数 ϕ をインシラル関数と呼ぶ。 $\phi(x-y)$ が点 x, y に在る粒子間働く相互作用 ($\phi > 0$ 反発, $\phi < 0$ 誘引) の力を表わす。 ϕ に伴う G 上の Gibbs 測度 $P_{\phi, G}$ とは $[G]$ 上の確率測度

$$P_{\phi, G}(Z=\xi) = \exp(-\phi(\xi)) / Z_{\phi, G} \quad \text{for } \forall \xi \in [G]$$

のことである。ここで $\phi(\xi) = \sum_{x, y \in G} \phi(x, y)$ は配置 ξ の全ポテンシャル・エネルギーであり、 $Z_{\phi, G} = \sum_{\xi \in [G]} \exp(-\phi(\xi))$ は木命配関数と呼ばれる正規化定数である。

$P_{\phi, G}$ の解釈は以下の通りである。G上の各点上に粒子が $\exp(-\phi(0))$ に比例する確率で発生、発生した配置 ξ の2点間に相互作用力 $\phi(x, y)$ が働き（3点以上に働くポテンシャルは無いと仮定）、その総和 $\phi(\xi)$ の大小が配置 ξ の安定性の大小を示す。この状況の下での熱力学的（同？）平衡状態に相当するG上の粒子分布が $P_{\phi, G}$ である。

以下 Gibbs モデルと呼ばれるものは、ポテンシャル関数の族 $\phi_0, \phi \in \Phi$ に対応する Gibbs 分布の族 $P_{\phi, G} = P_{\phi_0, G}$ のことである。このモデルの魅力は ϕ_0 の選択に応じ多様な分布が記述できること、又統計力学的イマジに基く直観的解釈が与えられることである。反面このモデルは極めて複雑な分布（ $\phi \in \Phi$ for $\phi \neq 0$ の場合を除き）でありその解釈は容易ではない。その主存原因は $Z_{\phi, G}$ の組合せ論的複雑さ（ $2^{|G|}$ 個の和、しかも各頂は極端に大きく又小さく存りうる！）であり、理論的・数値的解析は困難を極める。又漸近論にもちこむ為には $G \uparrow \infty$ の時の $P_{\phi, G}$ の凍極限（極限 Gibbs 制度）を考える際、 ϕ_0 によつては極限分布が一意に定まらぬことが起り得る（相転移現象！）、し

が相転移状態では通常の正則条件が成立せぬことも知られており中の選択が問題となる。

以下では幾つかの前提の下で G 上の実現配置より θ を推定する問題を考える。結果は $G \cap \mathbb{Z}^d$ の時の漸近論であり、 $P_{0,n}$ の極限分布 $P_{0,\infty}$ が一意に定る (相転移の不在, この時 $P_{0,\infty}$ は自動的に定常) ことが本質的仮定となる。更に θ は有界、つまり或る $R > 0$ があって R 内なら $\theta(\theta) = 0$ とする。我々は G 上のランダム点配置を $P_{0,G}$ でモデル化するわけだが、 $P_{0,n}$ は指数型分布族であり標準的仮定の下で最大推定量 $\hat{\theta}_n$ の存在と一意性が言えることに注意せよ。基本的仮定を厳密に述べることは省くが、簡単に言うと、1) 互いに離れた領域に対する漸近的独立性, 2) 上述の極限分布 $P_{0,\infty}$ の存在, 3) $P_{0,\infty}$ に関する \mathbb{Z}^d の 2 相形式の漸近正則性, として 4) G の根木の仕方, が内容である。これらの仮定が少しも弱い相互作用 (i.e. $\sup_{\theta} \sup_{\theta'} |\theta(\theta')| \leq \delta$) の時満足されることは Sylvester (Z. Wahr. 1979, Vol. 50) よりわかる。

Gibbs 分布についての既知の結果の僅少さ (少しも統計的応用の見地から見ると) に鑑み、できる限り一般的議論を持ちこむ為 LeCam による局所漸近正規族 (Locally Asymptotically Normal Family, 略して LAN 族) の概組を拝借する。LAN 族については LeCam の原論文 (Univ. Calif. Pub. Statist. Vol. 3)

又は Roussas による好著「Contiguity of Probability Measures」を参照の事。 $G = G_n \uparrow$ の時 $\{P_{\theta, G_n}\}$ が LAN 族であるとは以下の条件が満足されることである。 $\Delta_{G_n}[\theta; \theta]$ を対数尤度 $dP_{\theta, G_n} / dP_{\theta_0, G_n}$ とせよ。 $\Theta \subset \mathbb{R}^d$ とする。

(LAN1) 正数列 $\delta_n \rightarrow 0$ と各 $\theta \in \Theta$ に対し d 次元ベクトル $\mu(\theta)$, 正定符号行列 $\Gamma(\theta)$, G_n 上のランク d のベクトル $\Delta_n(\theta)$ があり $\{P_{\theta, G_n}\}$ に対し $v_n \rightarrow v$ ならば「確率収束の意味で」

$$\Delta_{G_n}[\theta + \delta_n v; \theta] - v' \Delta_n(\theta) \rightarrow -v' \mu(\theta) - \frac{1}{2} v' \Gamma(\theta) v,$$

(LAN2) μ と Γ は θ の連続関数,

(LAN3) P_{θ, G_n} に関する $\Delta_n(\theta)$ の分布は $N(\mu(\theta), \Gamma(\theta))$ に漸近収束,

(LAN4) $\theta \in \Theta$, $\forall v$ について $\Delta_n(\theta + \delta_n v) - \Delta_n(\theta)$ は $-\Gamma(\theta)v$ に $\{P_{\theta, G_n}\}$ に対し確率収束,

(LAN5) $\{P_{\theta, G_n}\}$ と differentially equivalent なる $\{Q_{\theta, n}\}$ があり, 各 n と各 $A \subset G_n$ で $\theta \mapsto Q_{\theta, n}(A)$ は可測,

(LAN6) $\Delta_n(\theta)$ は θ に Γ して可測。

この研究の主要結果は次の通りである。

定理. 前述の仮定の下で $\{P_{\theta, G_n}\}$ は LAN 族となる。但し

$$\delta_n = (\#G_n)^{1/2}, \quad \mu(\theta) = 0,$$

$$\Gamma(\theta) = \sum_{x \in \mathbb{Z}^2} \sum_{|a|, |b| \leq R} [\nabla \phi_{\theta}(a)] \text{Cov}_{\theta, \infty} \{Z_1(0)Z_1(a), Z_1(x)Z_1(x+b)\} \\ \times [\nabla \phi_{\theta}(b)]',$$

$$\Delta_n(\theta) = \delta_n [\nabla \phi_{\theta}(Z_1) - E_{\theta, G_n} \nabla \phi_{\theta}(Z_1)]$$

(Potts) が LAN 族であることから感雑の推定量 (最尤推定量を含む) の新近一次有効性が自動的に導かれる。例えば広範囲の損失関数に対するリスクの極限の意味での有効性については Strasser (Z. Wahr. Vol. 45), Wolfowitz 流の確率集中度の意味での有効性については前掲の Roussas の本を見よ。

最後に以上の結果の実際的適用に際しての困難を述べる。まず最尤推定量を具体的に数値計算することが實際上困難である。これは結局大分散関数 $Zp(\beta)$ の計算困難さと同等であり、良い近似式もしくはモンテ・カルロ式計算法の開発が望まれる。第2に相転移状態を含む範囲への拡張が可能かどうかの問題となる。このことは相転移状態を引き起すポテンシャルの形の決定が極めて困難であるだけに因りたる所である。第3に上の結果をより現実的に \mathbb{R}^2 上の Gibbs モデルに拡張できるかどうか重要な問題として残る。少なくとも形式的にはこれは十分可能であると思われるが、必要で確率論的結果が現在の所得られていぬようである。