(続紙 1)

京都大学	博 士 (理 学)	氏名	根本孝裕
論文題目	Phenomenological structure for large deviation principle in time-series statistics (時系列統計における大偏差原理の現象論的構造)		

(論文内容の要旨)

稀にしか生じないが、ひとたび生じれば大きな影響を与える事象がある。地震や株価暴落などはその典型例だし、生物進化はそのような事象の積み重ねの結果である。ところが、稀にしか生じない事象の性質を調べるのは容易ではない。例えば、その頻度を知ろうとしても測定精度を高くするのは困難である。そのため、稀にしか生じないゆらぎの性質を、そのゆらぎを直接観測することなく求めることができれば、多くの可能性が生まれてくる。勿論、このような一般論の存在を期待するのは楽観的すぎるだろう。興味ある現象を絞って、そこでの可能性を徹底的に研究する段階かもしれない。それに対して、根本氏が選んだ研究方法の特徴は、稀にしか生じないゆらぎの性質を探る手がかりを熱力学に求めたことにある。

熱力学は熱的性質と力学的性質を統一的に記述する体系である。そこでは統計力学を介して、熱力学変数のゆらぎの頻度が熱力学関数で表されることが知られている。熱力学関数は状態方程式と熱容量というゆらぎと関係ない測定によって決定できるので、稀にしか生じない熱力学変数のゆらぎの統計的性質が、ゆらぎを測定することなく決まる。数学的には、熱力学変数について大偏差原理が成り立つことが前提になっており、それを特徴づける大偏差関数が熱力学関数に対応する、すなわち、大偏差関数が熱力学という実験によって完結した体系と結ばれていることにその神髄がある。根本氏の学位論文では、より一般に、大偏差関数が何らかの実験で決められる構造のことを大偏差原理の現象論的構造とよび、時系列解析においてその可能性を追求する。第1章では、以上の背景が述べられる。

具体的には、マルコフ確率過程において時間平均された物理量を対象とする。平均時間を十分に大きくとれば、大数の法則により確定した値をとるが、平均時間が有限である限り典型値から大きくずれることが稀にある。その確率を特徴づける大偏差関数を考える。まず、数理的な一般論として、大偏差関数を変分原理で決める定式化を行う。その際、変分パラメータが力学のポテンシャルに相当することが本質的である。この公式が学位論文の骨格をなしている。

この公式は理論的には正しいが、現実の実験でも数値実験でも使えるものではない。そこには二つの困難がある。第1の困難は、ランダム変数の指数関数の期待値の精度を高める難しさに由来し、第2の困難は変分パラメータが大自由度になることからくる。第1の困難は、測定とフィードバックの繰り返しを巧妙に使うことで厳密に克服される。第2の困難は、有効記述について作業仮説を導入することで回避する。具体的に、単純な格子模型におけるカレントの時間平均の大偏差関数をこの方法で決定し、厳密解析と一致していることが示される。また、1次元運動論的拘束模型におけるアクティビティーの時間平均の大偏差関数にこの方法を適用することで、有効相互作用が有限にとどまっていることが示唆された。以上が第2章である。

第3章と第4章では、大偏差原理の現象論的構造の応用が議論される。第3章では、運動論的拘束模型の平均場模型におけるアクティビティーの時間平均の大偏差関数を問題にする。その有限サイズスケーリングに関する理論的構造が平均場イジング模型の量子相転移と共通することが示される。第4章では、van Zon-Cohen の拡張されたゆらぎの定理の性質を理解するために、現象論的構造を介した解析がされる。

（続紙　２　）

その結果、既に知られていた特異性が、現象論的構造の言葉では、負の温度が生じることに対応することが示された。

　第５章では、論文全体がまとめられ、これからの問題が議論される。

（論文審査の結果の要旨）

大偏差原理は確率論の分野で発展してきた概念であり、最近は、非平衡統計力学においても活発に研究されている。ただし、そこでは、ゆらぎの定理とよばれる大偏差関数の対称性が見出されたことがきっかけとなっているため、対称性そのものに焦点があてられることが多い。それに対し、根本氏の研究課題は、大偏差関数を対象としている点で流行の延長上にあるものの、操作的に実験で測定することを目標として掲げる点で独特なものとなっている。また、実験における測定とすぐに結びつけようとするのでなく、熱力学変数のゆらぎについての大偏差原理と熱力学の関係を雛形とし、より広く大偏差原理に対応する現象論的構造を見出そうとしている。すなわち、大きな視野を見据えた上で独創的かつ健全な課題を設定している。

　本学位論文の主要部である第２章では、大偏差原理に対応する現象論的構造について現在までの到達点が明晰に記述されている。特に、測定とフィードバックの繰り返しによって大偏差関数を決める厳密な公式は、数理としても興味深いものである。また実験への応用に向けても、例えば、ポテンシャル中を運動する一つの微粒子の時間平均速度の大偏差関数に対しては、この公式の実験における適用が可能だと期待される。一方で、大自由度系に対応するために提案された有効記述については、複数の数値実験によりその正当性と有効性が示されているものの、作業仮説を含むため、その有効性が確定した状況ではない。適用範囲や保証される精度について明らかにするためには、今後さらに研究を積み重ねる必要があろう。

　第３章と第４章の結果は、具体的な問題についての堅実な結果を提示したものと位置づけられる。詳細において駆使された計算技術のレベルは高く、細部に渡って貫徹して行われた計算により、非自明な結果が導かれている。それだけでなく、現象論的構造の量子相転移との関係（第３章）、負の温度との関係（第４章）は、非平衡物理系へ大偏差原理を応用する研究の今後の展開を考える上でもひとつの手掛かりを与えている。

　本学位論文の結果は、稀に生じる事象の統計的性質について様々な展開を可能にする。例えば、乱流におけるバーストの間欠的発生やタンパク質の構造変化を実験で制御する試みについては、そう遠くない時期に定式化される可能性がある。現在、数値計算法としては、様々なレアイベントサンプリング法が提案されており、本学位論文で提案している方法もそのひとつとみなすこともできる。しかしながら、実験室の実験でレアイベントサンプリングする道を切り拓こうとするのが、他の方法と質的に異なる点であり、それが重要な鍵となっている。現時点では、そこに至る道筋が必ずしも明確になっているわけではないが、本学位論文を拠点としてさらなる展開が期待される。

　主論文は１２５ページにわたって丁寧に書かれており、背景、結果、今後の展望が明確に表現されている。これまでに述べたように、稀にしか生じないゆらぎを特徴づける大偏差原理に対して、現象論的構造という新しい概念を提案し、その可能性を明らかにしたものと判断する。よって、本論文は博士（理学）の学位論文として価値あるものと認める。また、平成２６年１２月２４日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行った結果、合格と認めた。