数理解析研究所講究録
第 507 巻 1983 年 135-139

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)

粒子間にポテンシャル力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・家屋等）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）とともに新な興味を呼んでいる。ここでは$\mathbf{R}^2$上の格子点$\mathbf{Z}^2$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$\mathbf{Z}^2$の有限集合，[G]をGの部分集合の全体とする。$\mathbf{Z}^2$から$\mathbf{R}$への偶関数Φをポテンシャル関数と呼ぶ。$\Phi(x-y)$が点x, yに在る粒子間に働く相互作用（$\Phi>0$ 反撥，$\Phi<0$ 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 $\Phi(\xi)=\sum_{x,y\in\xi}\phi(x-y)$ は配置 ξ の全ポテンシャル・エネルギーであり，$Z_{\phi,G}=\sum_{\xi\in[G]}\exp(-\Phi(\xi))$ は大分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モデルと呼ぶものは，ポテンシャル関数の族 $\phi_\theta,\theta\in\Theta$，に対応するGibbs分布の族 $P_{\theta,G}=P_{\phi_\theta,G}$ のことである。このモデルの魅力は ϕ_θ の選択に応じ多様な分布が記述できること，又統計力学的イメー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（$\phi(x)=0$ for $x\neq 0$ の場合を除き）でありその解析は容易ではない。その主な原因は $Z_{\phi,G}$ の組合せ論的複雑さ（$2^{\#G}$ 個の和，しかも各項は極端に大きく又小さくなりうる！）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 $G\uparrow\mathbb{Z}^2$ の時の $P_{\theta,G}$ の弱極限（極限Gibbs測度）を考える際，ϕ_θ によっては極限分布が一意に定まらぬことが起こりうる（相転移現象！），し

かも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 Φ_θ 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 ξ より θ を推定する問題を考える。結果は $G \uparrow \mathbb{Z}^d$ の時の漸近論であり，$P_{\theta,G}$ の極限分布 $P_{\theta,\infty}$ が一意に定る(相転移の不在，この時 $P_{\theta,\infty}$ は自動的に定常)ことが本質的仮定となる。更に Φ_θ は有界，つまり或る $R>0$ があり $|x|>R$ なら $\Phi_\theta(x)=0$ とする。我々は G 上のランダム点配置を $P_{\theta,G}$ でモデル化するわけだが，$P_{\theta,G}$ は指数型分布族であり標準的仮定の下で最尤推定量 $\hat{\theta}_G$ 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 $P_{\theta,\infty}$ の存在，3) $P_{\theta,\infty}$ に関する $\xi(x)$ の2次形式の漸近正規性，そして4) G の拡大の仕方，が内容である。これらの仮定が少くとも弱い相互作用(i.e. $\sup_\theta \sup_{x\neq0}|\Phi_\theta(x)| \leq \exists\delta$)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(少くとも統計的応用の見地から見て)に鑑み，できる限り一般的議論に持ちこむ為 LeCam による局所漸近正規族(Locally Asymptotically Normal Family，略して LAN 族)の枠組を拝借する。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。$G=G_n\uparrow\mathbb{Z}^2$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。$\Lambda_{G_n}[\theta';\theta]$を対数尤度$dP_{\theta',G_n}/dP_{\theta,G_n}$とせよ。$\Theta\subset R^d$とする。

(LAN1) 正数列$\delta_n\to 0$と各$\theta\in\Theta$に関しd次元ベクトル$\mu(\theta)$，正定符号行列$\Gamma(\theta)$，G_n上のランダムベクトル$\Delta_n(\theta)$があり$\{P_{\theta,G_n}\}$に関し$v_n\to v$ならば確率収束の意味で

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

(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) $\theta\in\Theta$，$\forall v$で$\Delta_n(\theta+\delta_n v)-\Delta_n(\theta)$は$-\Gamma(\theta)v$に$\{P_{\theta,G_n}\}$に関し確率収束，

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

(LAN6) $\Delta_n(\theta)$はθについても可測。

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

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

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

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

$\{P_{\theta,G_n}\}$がLAN族であることから或種の推定量（最尤推定量を含む）の漸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。先ず最尤推定量を具体的に数値計算することが実際上困難である。これは結局大分配関数$\Xi_{\theta,G}$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が問題となる。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気になる所である。第3に上の結果をより現実的なR^2上のGibbsモデルに拡張できるかどうかが重要な問題として残る。少くとも形式的にはこれは十分可能であると思われるが，必要な確率論的結果が現在の所得られていぬようである。