時系列の統計における大偏差関数

根本　孝裕
京都大学大学院理学研究科　物理学・宇宙物理学専攻

N 枚のコインがある。そのコインを全て投げ、投げたうちの x 割が表になる確率を考えてみよう。答えは二項分布であり、簡単に計算することが出来る。それを様々な N に対してプロットしてみよう。すると下の図 1 左のようになる。図を見ると、N が大きくなるにつれて確率密度がデルタ関数のようになっていくことに気付く。これが大数の法則である。一方で図 1 右は、その確率の対数を取り、N で割ったものである。N を大きくしていくと、それらがある関数に収束していくことが分かる。これと同様の収束はコイン投げの例題のみならず、様々な問題において現れる。この性質のことを大偏差性質と呼び、収束先の関数のことを**大偏差関数**と呼ぶ。大偏差性質は、分布関数がデルタ関数に近づいていくときの漸近の仕方を記述する性質であり、従って必然的に大数の法則を含む。直感的に言えば大偏差関数は、大数の法則では考えることの出来ない**まれに起こるゆらぎを記述する関数**と言うことが出来る。

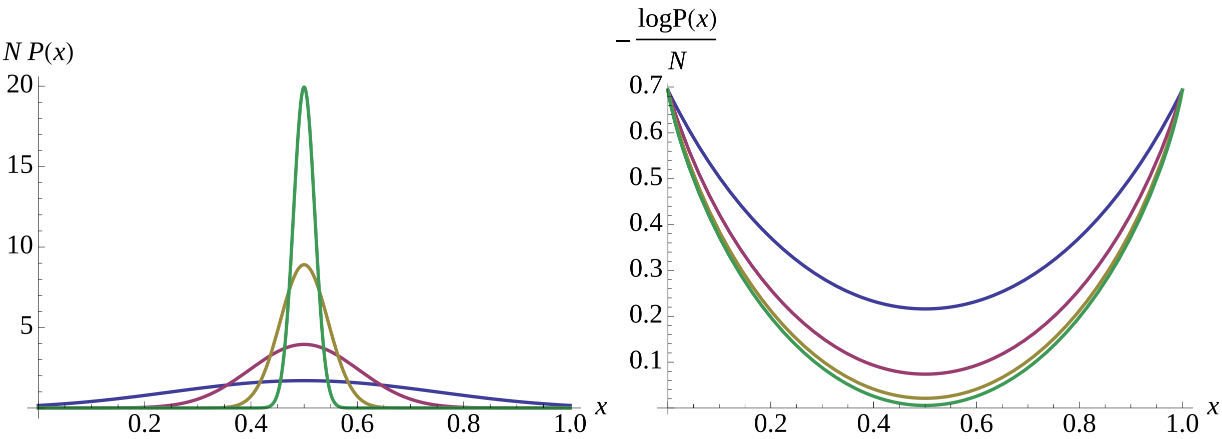

図 1: N 枚のコインのうち x 割が表になる確率 $P(x)$。左：$NP(x)$（確率密度）。右：$(-1/N)\log P(x)$。左右とも、$N = 5$ (青), $N = 25$ (赤), $N = 125$ (黄色), $N = 625$ (緑) である。

平衡統計力学においては、大偏差関数は熱力学関数に対応する。平衡系における気体の比体積やスピン系の単位格子当たりの磁化は、熱力学的極限を取ることでゆらぎが小さくなる。それが、確率密度のデルタ関数化（図 1 左）に対応する。また図 1 右に見るように、大偏差関数が 0 となる x の値は、そのデルタ関数のピーク位置に他ならない。従って大偏差関数を最小にする変分原理を考えると、その変分原理は系の状態を決定する変分原理になることが分かる。これが、熱力学における変分原理の正体である。大偏差関数を用いた視点から熱力学を考えることは、測定可能だが抽象的な熱力学関数に対し、新鮮な理解を与える。また逆に、物理的な意味がはっきりしているが測定困難な大偏差関数が、測定可能な熱力学関数に対応していることは驚きである。

平衡統計力学においてのみならず、様々な物理に対して大偏差関数は応用される。その中でも特に、時系列の統計に対する大偏差関数が近年注目を集めている。1993 年、Evans, Cohen, Morriss は熱力学第 2 法則の不等式の裏に、ある等式が存在することを指摘した [1]。後に Lebowitz と Spohn は、エントロピー生成の大偏差関数の性質としてその等式を書き直した [2]。この等式はゆらぎ定理と呼ばれる。2004 年、Bodineau と Derrida は SSEP と呼ばれる非平衡格子模型に対し、そのカレントの大偏差関数を問題にした。彼らはその結果、熱力学を思わせるある変分原理を用いることで、大偏差関数が現象論的に計算出来ることを見出した。この現象論は相加性原理と呼ばれる [3]。また 2007 年、Garrahan 等は、ガラスの性質を記述する KCM と呼ばれる格子模型に対し、activity（系が局所的に動いたときに値を持つ量。この量が大きいほど系が活性的な状態にある）の大偏差関数を問題にした。そしてその大偏差関数が、あたかも熱力学の相転移を記述する熱力学関数のように、特異的な振る舞いを示すことを指摘した [4]。

数理的には、時系列の統計における大偏差関数は、熱力学関数の時系列に対する拡張そのものである。そして上で説明した研究に見るように、それは形式的な数理を超えて、物理そのものと深く関わっているように思われる。我々のグループでは、この**時系列における熱力学関数の物理**という点に着目してきた。問いを明確にするため、次のような具体的な例を考えてみよう。周期ポテンシャル上にブラウン粒子がある。このブラウン粒子に対して外場を加え、非平衡状態を作る。粒子の感じる実質的なポテンシャルは、図 2 左のように階段型になる。ポテンシャルが階段状になっているため、粒子はほとんどの時間で、ポテンシャルの階段を下ることになるだろう。しかしごくまれに、熱的なゆらぎによって、粒子はポテンシャルの階段を登ることもあるだろう。この登る頻度は、粒子の時間平均速度の大偏差関数を用いて定式化することが出来る。ここで平衡統計力学では、熱力学量の大偏差関数が熱力学関数に対応していることを思い出そう。このことは間接的に、熱力学量の大偏差関数が測定可能であることを意味している。もしも時系列の大偏差関数に対しても、熱力学のような現象論が存在するのであれば、この登る頻度を、**実際に粒子がポテンシャルを登るのを待たずして得る**ことが出来るはずである。

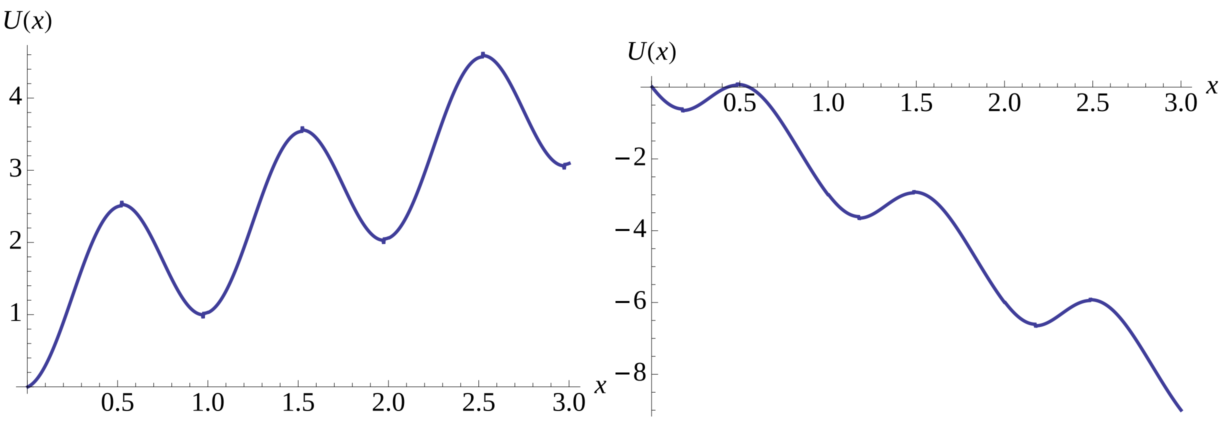

図 2: 外場によって傾けられた周期ポテンシャル。左はもともとのポテンシャルで、右は余分な外場を加えて変形させたポテンシャル。

平衡統計力学においては、圧力や磁場などの外場をコントロールしていくつもの平衡状態を作ることが熱力学関数測定の鍵になる。驚くべきことに、それと同様の構造が時系列

の統計にも存在する [5]。実際に、図 2 左のポテンシャルが与えられたとき、そのポテンシャルを図 2 右のように変形すると、その変形した先での粒子の振る舞いが、もとの系でのまれに起こる事象（粒子がポテンシャルを登る事象）と関連しているのである。このポテンシャルの傾け方は、ある変分原理によって規定される。そしてその変分原理は、ブラウン粒子の問題を超えて、一般のマルコフ過程に対して成立するのである [5]。

我々は、時系列の統計における大偏差関数が、非平衡物理学を理解する上で重要になると期待している。本講演では、以上の内容を大偏差関数の基礎的なところから解説、議論したい。

参考文献

[1] D. J. Evans, E. G. D. Cohen, and G. P. Morriss, Phys. Rev. Lett. **71**, 2401 (1993).

[2] J. L. Lebowitz and H. Spohn, J. Stat. Phys. **95**, 333 (1999).

[3] T. Bodineau and B. Derrida, Phys. Rev. Lett. **92**, 180601 (2004); J. Stat. Phys. **123**, 277 (2006).

[4] J. P. Garrahan, R. L. Jack, V. Lecomte, E. Pitard, K. van Duijvendijk, and F. van Wijland, Phys. Rev. Lett. **98**, 195702 (2007); J. Phys. A **42**, 075007 (2009).

[5] T. Nemoto and S.-i. Sasa, Phys. Rev. E **83**, 030105(R) (2011); Phys. Rev. E **84**, 061113 (2011); 根本孝裕, 修士論文, 物性研究・電子版, Vol. 1, No. 1 011601 (2012).