数理解析研究所講究録
第 1609 巻 2008 年 63-74



# 一般化熱統計学における Legendre 構造[1]
## – 非線型 Fokker-Planck 方程式及び Bregman divergence との関連 –

茨城大・電気電子工学科　和田 達明 (Tatsuaki Wada)
Department of Electrical and Electronic Engineering, Ibaraki University
トリノ工科大・物理学科 Antonio M. Scarfone
Dipartimento di Fisica, Politecnico di Torino, Italy
千葉大・情報科学専攻　須鎗 弘樹　(Hiroki Suyari)
Graduate School of Advanced Integration Science, Chiba University

## 1　はじめに

平衡状態を記述する従来の熱力学や統計力学を拡張する試みがなされてきているなかで、ここで紹介する一般化熱統計学 (generalized thermostatistics) は、通常の Boltzmann-Gibbs-Shannon(BGS) エントロピをパラメータ拡張した一般化エントロピに基づいて、Callen が創始した熱統計学 [1] を拡張したものであり、2004 年に Nautds[2] により提案された。一般化エントロピに基づく統計力学の拡張としては、Tsallis 統計力学 [3] が知られている。創始者の Tsallis 自身による総説や国際会議録 [4, 5, 6] や、阿部 [7] による日本語の解説記事から刺激を受け、この分野に興味を持った人達もいることだろう。筆者等は 2000 年辺りから Tsallis 統計力学に関する分野[2]の研究に参入し、欧州（主として伊太利亜）で開催された国際会議等で活動してきている。良く知られているように、BGS エントロピを適切な条件の下で最大化する確率分布は指数型であり、この枠組みではフラクタル、乱流、多孔質媒質中における異常拡散、自己重力系、経済物理、等において良く見られる漸近的にベキ分布に従う現象を自然に説明するのは難しい。そこで、エントロピ最大原理に基づいて、漸近的なベキ分布を理解する方法として、指数分布とベキ分布の両方の特徴を兼ね備えた解析関数で表せる確率分布を最適分布とするようにエントロピを一般化する試みがなされた。1988 年に提案された Tsallis エントロピや $q$-指数関数等はこのような一般化のひとつである。その後 2001 年に Kaniadakis[10] により、Tsallis の $q$-指数関数とは異なるタイプの $\kappa$-指数関数及び $\kappa$-エントロピに基づく統計力学の拡張が提案された。更にこれらの 1 パラメータ拡張されたエントロピがより広いクラスである 2 パラメータのエントロピ [8] の特殊な場合であることも示されている。これらの経緯を経て、Naudts[2] は、より一般的に、従来の指数関数・対数関数をパラメータ拡張した変形関数を利用して熱統計学を一般化することができることを示した。

[1]RIMS 研究集会「非可換解析とミクロ・マクロ双対性」10 月 15-17 日, 2007 報告
[2]通常の BGS エントロピとは異なり、一般に加法的ではないエントロピを対象とすることから、"非加法的統計力学" と呼ばれている。

ここでは、ここ数年の研究で明らかになった、この一般化熱統計学における熱力学的関係式の一般化及びその Legendre 構造について紹介する。次章で一般化熱統計学について簡単に紹介し、Tsallis 及び Kaniadakis のエントロピに基づいた一般化熱統計学を具体例として説明する。続く 3 章では、一般化統計力学の基礎原理である一般化エントロピ最大原理を支持する非線型 Fokker-Planck 方程式とそれに関する Lyapunov 関数の時間発展について説明し、一般化熱統計学で扱う熱力学的状態は一般化自由エネルギが最小となる非線型 FP 方程式の停留状態であることを示す。4 章では、このような仕組みが、凸解析や情報理論における divergence 関数のひとつである Bregman divergence(BD) を用いることで、自然に説明できることを示す。

## 2 Generalized thermostatistics

Callen の熱統計学 [1] は、力学や電磁気学のように特定の力に対する動的応答や力自体の詳細を扱う理論ではなく、当時の物理理論の範疇外であった情報理論における乱雑さを表す量（エントロピ）を最大化する状態を " 平衡状態 " [3]として特徴付ける、エントロピ最大原理に基づく熱力学的理論体系である。

一般化熱統計学 [2] は、この熱統計学 [1] を、パラメータ拡張したエントロピに基づいて一般化した熱統計学である。例えば、ある実数パラメータ $\phi$ による対数関数の拡張

$$\ln_\phi(x) \quad \underset{\phi\to 0}{\longrightarrow} \quad \ln(x). \tag{1}$$

を用いて、従来の BGS-エントロピの表式を模した

$$S_\phi = -\int dx\; p(x)\, \ln_\phi p(x) \quad \underset{\phi\to 0}{\longrightarrow} \quad S^{\rm BGS}, \tag{2}$$

という一般化エントロピに基づいた熱統計学が構成できるのである。一般化熱統計学の具体例として、以下に Tsallis と Kaniadakis がそれぞれ提案した互いに異なる一般化エントロピに基づいた枠組みを簡単に紹介する。

### 2.1 Tsallis' thermostatistics in $(2-q)$-formalism

Tsallis 統計力学の解説記事は既に幾つかあるので、ここでは通常の Tsallis エントロピ $S_q$ における実数パラメータ $q$ の代わりに $2-q$ を用いる形式 [9] で説明する。この枠組みでは、一般化エントロピ $S_{2-q}$ の最大化を原理とし、拘束条件として通常のエネルギ期待値を用いることにより、文献 [9] で示したように熱力学的関係式や Legendre 構造が通常の熱統計学や統計力学の場合の自然な拡張となっている。

[3]いわゆる通常の（熱）平衡状態と同じだと誤解されないように "" 付きで" 平衡状態 " と記した。特に一般化統計力学においては一般化エントロピを（適切な条件の下で）最大化する状態が" 平衡状態 " であり、必ずしも平衡ではなく、非平衡定常や準平衡状態である場合もあり得る。

指数関数の実数パラメータ $q$ による拡張を $q$-指数関数と呼び、$\exp_q(x)$ と表す。対応する逆関数を $q$-対数関数と呼び、$\ln_q(x)$ と表す。$q$-指数関数と $q$-対数関数は、$q \to 1$ の極限において、通常の指数関数、対数関数にそれぞれ帰着する。

$$\ln_q(x) \equiv \frac{x^{1-q}-1}{1-q}, \quad \xrightarrow[q\to 1]{} \ln(x), \tag{3}$$

$$\exp_q(x) \equiv [1+(1-q)x]^{\frac{1}{1-q}}, \quad \xrightarrow[q\to 1]{} \exp(x). \tag{4}$$

この $q$-対数関数を用いて、$S_{2-q}$ は

$$S_{2-q} \equiv -\int dx\, p(x) \ln_q p(x), \quad \xrightarrow[q\to 1]{} S^{\mathrm{BGS}}, \tag{5}$$

と表せ、$q \to 1$ の極限において BGS エントロピに帰着する。確率分布 $p(x)$ の規格化条件及び系の平均エネルギ $U$ が一定の拘束条件下における $S_{2-q}$ に関する最大エントロピ法

$$\frac{\delta}{\delta p}\left(S_{2-q}[p] - \beta U[p] - \gamma \int p(x)dx\right) = 0. \tag{6}$$

$$\text{with} \quad U[p] = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, V(x)p(x), \tag{7}$$

を適用して得られる最適分布は、

$$p_q^{\mathrm{ME}}(x) = \alpha_q \exp_q\left[-\left(\gamma + \beta V(x)\right)\right], \quad \xrightarrow[V(x)>>1]{} V(x)^{\frac{1}{1-q}}, \quad \text{漸近的ベキ則!} \tag{8}$$

と求まる。ここで、$\gamma$ と $\beta$ は拘束条件を満たす為に導入した Lagrange 未定定数で、$\alpha_q$ は $q$ に依存する定数である。

$$\alpha_q = \left(\frac{1}{2-q}\right)^{1-q} = \frac{1}{\exp_q(1)}. \tag{9}$$

対応する熱力学関数についての Legendre 構造 [9] も調べられており、例えば

$$\Phi_{2-q} = S_{2-q} - \beta U, \quad \frac{d}{d\beta}\left(\Phi_{2-q}\right) = -U, \tag{10}$$

という通常の熱力学的関係式をパラメータ $q$ で一般化した関係が成立する。ここで $\Phi_{2-q}$ は $q$-拡張された Massieu ポテンシャルで、

$$\Phi_{2-q} = \frac{\gamma+1}{2-q} - \left(\frac{1-q}{2-q}\right)\beta U. \tag{11}$$

と表され、$q \to 1$ において通常の表式 $\Phi = \gamma + 1 (= \ln Z(\beta))$ に帰着する。また、$q$-拡張された自由エネルギ $F_{2-q}$ とは、

$$\Phi_{2-q} = -\beta F_{2-q} \tag{12}$$

の関係で結ばれている。

## 2.2 Kaniadakis' thermostatistics

Kaniadakis[10] が提案した $\kappa$ エントロピ $S_\kappa$ は先の Tsallis エントロピとは異なる一般化エントロピであり、実数パラメータ $\kappa$ を用いて $(-1<\kappa<1)$

$$S_\kappa \equiv -\int dx\, p(x) \ln_{\{\kappa\}} p(x), \quad \underset{\kappa\to 0}{\longrightarrow} S^{\mathrm{BGS}}, \tag{13}$$

と表せる。ここで $\kappa$-対数関数とその逆関数である $\kappa$-指数関数は

$$\ln_{\{\kappa\}}(x) \equiv \frac{x^\kappa - x^{-\kappa}}{2\kappa}, \quad \underset{\kappa\to 0}{\longrightarrow} \ln(x), \tag{14}$$

$$\exp_{\{\kappa\}}(x) \equiv \left(\kappa x + \sqrt{1+\kappa^2 x^2}\right)^{\frac{1}{\kappa}}, \quad \underset{\kappa\to 0}{\longrightarrow} \exp(x). \tag{15}$$

と定義され、$\kappa \to 0$ の極限において、それぞれ通常の対数関数と指数関数に帰着する。$S_\kappa$ に関する最大エントロピ法

$$\frac{\delta}{\delta p}\Big(S_\kappa[p] - \beta U[p] - \gamma \int p(x)dx\Big) = 0, \tag{16}$$

の解である最適分布は、

$$p_\kappa^{\mathrm{ME}}(x) = \alpha_\kappa \exp_{\{\kappa\}}\left[-\frac{1}{\lambda}\big(\gamma + \beta V(x)\big)\right], \quad \underset{V(x)>>1}{\longrightarrow} V(x)^{\frac{1}{\kappa}}, \text{ ベキ則!} \tag{17}$$

と求まる。ここで $\alpha_\kappa$ と $\lambda$ は $\kappa$ に依存する定数で、それぞれ

$$\alpha_\kappa = \left(\frac{1-\kappa}{1+\kappa}\right)^{\frac{1}{2\kappa}}, \quad \lambda = \sqrt{1-\kappa^2}. \tag{18}$$

であり、両者の間には

$$\alpha_\kappa = \exp_{\{\kappa\}}\left(-\frac{1}{\lambda}\right). \tag{19}$$

の関係がある。

この枠組みにおける Legendre 構造は文献 [11] において調べられ、例えば、パラメータ $\kappa$ で拡張された自由エネルギ $F_\kappa$

$$F_\kappa \equiv -\left(\frac{I_\kappa + \gamma}{\beta}\right), \tag{20}$$

$$\text{with} \quad I_\kappa \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{1}{2}\Big[\big(p_\kappa^{\mathrm{ME}}(x)\big)^{1+\kappa} + \big(p_\kappa^{\mathrm{ME}}(x)\big)^{1-\kappa}\Big]. \tag{21}$$

に対して、

$$F_\kappa = U - \frac{1}{\beta} S_\kappa, \quad \frac{d}{d\beta}\Big(\beta F_\kappa\Big) = U, \tag{22}$$

という熱力学的関係式が成立する。

こうして、パラメータ拡張した指数・対数関数を導入してエントロピを一般化し、そのエントロピ最大原理に基づいて熱統計学を構成することができ、対応する Legendre 構造や熱力学的関係式が成立することが判ってきた。

さて、このような拡張に対する疑問や批判として、指数関数とベキ関数の両方の特性を持つパラメータ拡張は幾らでもできるとしたら、それらの違いは何なのか？どのような状況や条件の下でどのような拡張が適切なのか？…等が挙げられるだろう。しかしそのような疑問には、与えられたエントロピを最大とする状態のみを扱う熱統計学の範囲では答えられないであろう。そこで次の段階として、系の動的な振る舞いを記述する拡散方程式や Fokker-Planck 方程式の拡張が考えられていった。

# 3　非線型 Fokker-Planck 方程式

熱平衡状態を記述する従来の熱統計学や統計力学を支える根本原理に関して、系の動的な振る舞い記述する拡散方程式や Fokker-Planck(FP) 方程式の果たす重要性は言うまでもない。では、パラメータ拡張された一般化熱統計学に対して、同様に重要な役割を果たす拡散方程式や FP 方程式の拡張版があるのではないだろうか？このような疑問への解答を模索する間に、著者は以下に示す多孔質媒質中におけるガスの輸送方程式である Porous medium(PM) 方程式と、その自己相似解という概念を知った。通常の拡散方程式の 1 パラメータ拡張である PM 方程式は、適切な時間依存変数変換により、非線型の Fokker-Planck(FP) 方程式に変換できて、その時間発展に付随する Lyapunov 関数が存在することが知られている。

## 3.1　多孔質媒質中の流体の輸送方程式

Porous medium(PM) 方程式 [12] は、多孔質媒質中の流体の拡散を記述する非線型の拡散方程式であり、流体の密度を $\rho(\mathbf{x},t)$ とすると、

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{x},t) = D\,\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2}\,\rho^m(\mathbf{x},t), \quad m \in R^+, \tag{23}$$

と表される。ここで $m$ は媒質の多孔質度に依存する実数パラメータで、$m > 1$ である。$m \to 1$ の極限において PM 方程式は通常の拡散方程式に帰着する。また、式 (23) と部分積分を利用して、

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x}\; \rho(x,t) = M \quad (\text{質量保存}). \tag{24}$$

であることが判る。この PM 方程式は、流体の密度 $\rho$ に対する連続の式、流体の平均速度 $\mathbf{v}$ が圧力 $P$ の勾配（の逆方向）に比例するという Darcy の法則、そして polytropic 流

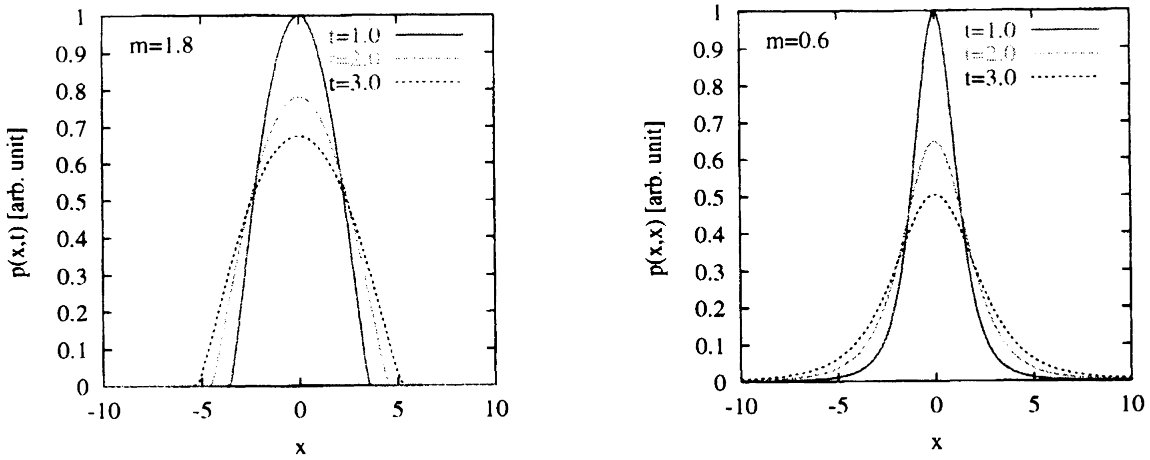


図 1: 非線型拡散方程式の自己相似解の時間発展の様子

体（すなわち圧力 $P$ が密度 $\rho$ のベキ関数である流体）という 3 つの物理的な関係式から導出できることが知られている。

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}\rho + \mathrm{div}(\rho\mathbf{v}) = 0 & (\text{連続の式}) \\ \mathbf{v} \propto -\mathrm{grad}P & (\text{Darcy の法則}) \\ P \propto \rho^{\nu} & (\text{polytropic 流体}) \end{cases} \tag{25}$$

以下、ここでは簡単の為に空間次元は 1 次元として、PM 方程式の自己相似解について説明する。Barenblatt[13] 等による先駆的な研究により、初期密度 $\rho(x,0) \in L^{(1)}$ に対する非線型拡散方程式 (23) の漸近解は、適切な規格化のための定数 $C$ を導入して、

$$\rho^{\mathrm{B}}(x,t) = (D\,t)^{-\frac{1}{m+1}}\left(C - \frac{m-1}{2m(m+1)}x^2(D\,t)^{-\frac{2}{m+1}}\right)^{\frac{1}{m-1}}, \tag{26}$$

と表せる。これは Barenblatt の自己相似解 [13] と呼ばれている。一般に自己相似解とは、ある時刻における解が判れば、それ以外の時刻における解も全て適切なスケール変換で表せる解のことを言う。$m \to 1$ における通常の拡散方程式の解である Gauss 分布も、（通常あまり強調されることはないが）自己相似解である。

図 1 に $m = 1.8$ と $m = 0.6$ のそれぞれの場合の自己相似解の時間発展の様子を示す。$m > 1$ の PM 方程式の自己相似解は、遅い拡散 (slow diffusion) とも呼ばれ、時刻と共に広がっていく有限のサポートを持つ関数である。一方 $m < 1$ の場合は速い拡散 (fast diffusion) と呼ばれ、裾の広がった分布である。

ところで、$m = 2 - q$ とおいて、前出の Tsallis の $q$-指数関数式 (4) を用いると、自己相似解 (26) は

$$\rho^{\mathrm{B}}(x,t) \propto \alpha_q \exp_q\left(-\gamma(t) - \beta(t)\frac{x^2}{2}\right), \tag{27}$$

と表せる。これは通常の Gauss 分布（の指数関数）を $q$-拡張した $q$-Gauss 関数に他ならないではないか！　とすると、前章で説明した $q$-拡張版の熱統計学に対応する拡散方程式の拡張版が PM 方程式であり、それに関連する FP 方程式の拡張版もあるのではないだろうか？この推測はまんざら的外れではなかったが、そうした方向への研究の数学的な本質部分は、Tsallis 統計力学とは独立に、既に数学者達 [12] によって成されていた。

PM 方程式において、時間依存変数変換

$$p(\xi,\tau) = a(t)\rho(x,t), \quad \text{with} \quad \xi = \frac{x}{a(t)},$$
$$a(t) = \Big(1 + (m+1)Dt\Big)^{\frac{1}{m+1}}, \quad \tau = \ln a(t), \tag{28}$$

を施すことで、次の非線型 FP 方程式を得る。

$$\frac{\partial}{\partial\tau} p(\xi,\tau) = \frac{\partial}{\partial\xi}\left[-h(\xi)\,p(\xi,\tau) + D\,\frac{\partial}{\partial\xi}\,p^{2-q}(\xi,\tau)\right]. \tag{29}$$

この FP 方程式の解の時間発展に伴って常に非増加となる Lyapunov 関数 [14, 15]

$$\mathcal{L}_q(\tau) \equiv U(\tau) - D\,S_{2-q}(\tau) \tag{30}$$

が存在する。ここで、

$$S_{2-q}(\tau) \equiv \int d\xi\; p(\xi,\tau)\ln_q p(\xi,\tau), \quad U(\tau) \equiv \int d\xi\; V(\xi)\,p(\xi,\tau). \tag{31}$$

である。$\mathcal{L}_q(\tau)$ の時間微分を計算してみると、

$$\frac{d\mathcal{L}_q}{d\tau} = \int dx\;\frac{\partial p}{\partial\tau}\frac{\delta}{\delta p}\Big(U[p] - D\,S_{2-q}[p]\Big) \le 0. \tag{32}$$

と負になることが示せるので、$\mathcal{L}(\tau)$ は時間が経つにつれて単調減少し、最終的に最小値 $\mathcal{L}_q^{\min}$ に達する。この最小値は、

$$\mathcal{L}_q^{\min} = U[p_q^{\mathrm{ME}}] - DS_{2-q}[p_q^{\mathrm{ME}}] \tag{33}$$

であり、これは $\beta = 1/D$ とおいた場合の $q$-拡張版の自由エネルギ $F_{2-q}$ に等しい。つまり、

$$\lim_{t\to\infty}\mathcal{L}_q(t) = \mathcal{L}_q^{\min} \quad \Leftrightarrow \quad \text{最小 } q\text{-自由エネルギ } F_{2-q} \tag{34}$$

という対応が成立している。

### 3.2 $\kappa$-拡張されたFP方程式とLyapunov関数

次にFP方程式の$\kappa$-拡張版 [16] について説明する。天下り的な感も受けるだろうが、幾らかの試行錯誤を経て以下のように非線形拡散項

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[p(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\lambda \ln_{\{\kappa\}}\left(\frac{p(x,t)}{\alpha}\right)\right] \quad \underset{\kappa\to 0}{\longrightarrow} \quad \frac{\partial}{\partial x}\left[p(x,t)\,\frac{\partial}{\partial x}\ln p(x,t)\right] = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\,p(x,t) \quad (35)$$

を導入すれば良いことが判り、対応する$\kappa$拡張されたFP方程式は、

$$\frac{\partial}{\partial t}\,p(x,\,t) = \frac{\partial}{\partial x}\left\{p(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\,\left[V(x) + D\,\lambda\,\ln_{\{\kappa\}}\left(\frac{p(x,t)}{\alpha}\right)\right]\right\}, \quad (36)$$

と表せる。ここで$D$は、拡散定数である。

先ず停留状態

$$\frac{\partial}{\partial t}\,p_\kappa^{\mathrm{st}}(x) = 0 \quad (37)$$

を求める。式 (36) を上式に代入し、両辺を積分して、積分定数を$C$とすると、

$$V(x) + D\lambda\ln_{\{\kappa\}}\left(\frac{p_\kappa^{\mathrm{st}}(x)}{\alpha}\right) = C, \quad (38)$$

を得る。これより

$$p_\kappa^{\mathrm{st}}(x) = \alpha\exp_{\{\kappa\}}\left[-\frac{1}{\lambda}\Big(-\frac{C}{D}+\frac{1}{D}V(x)\Big)\right] \quad (39)$$

であることが判る。ところで、先に求めた最大エントロピ法による解 (8) と比較すると、

$$C = -\frac{\gamma}{\beta} \quad \text{and} \quad \frac{1}{D} = \beta \quad (40)$$

という対応が成立する。つまり停留解$p^{\mathrm{st}}(x)$は、$\kappa$エントロピを最大化する最適解$p_\kappa^{\mathrm{ME}}(x)$において$\beta = 1/D$とおいたものに等しい。

先の$\kappa$-非線型FP方程式に従って$p(x,t)$が時間発展する時に、Lyapunov 関数

$$\mathcal{L}_\kappa(t) \equiv U[p] - D\,S_\kappa[p]\ , \quad (41)$$

の時間依存性を計算してみると、

$$\begin{aligned}\frac{d\mathcal{L}_\kappa(t)}{dt} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\;\frac{\partial p}{\partial t}\cdot\frac{\delta}{\delta p}\Big(U[p] - DS_\kappa[p]\Big)\\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\left\{\frac{\partial}{\partial x}\,p\,\frac{\partial}{\partial x}\,\left[V(x) + D\,\lambda\,\ln_{\{\kappa\}}\left(\frac{p}{\alpha}\right)\right]\right\}\times\left[V(x) + D\lambda\ln_{\{\kappa\}}\left(\frac{p}{\alpha}\right)\right]\\ &= -\int_{-\infty}^{\infty} dx\,p\left[\frac{\partial}{\partial x}\Big(V(x) + D\lambda\ln_{\{\kappa\}}\left(\frac{p}{\alpha}\right)\Big)\right]^2 \le 0,\end{aligned} \quad (42)$$

となるので、$\mathcal{L}_\kappa(t)$は非増加関数であることが判る。

ここまでのまとめとして、

- $q$-及び $\kappa$-拡張版の非線型 FP 方程式の解の時間発展に伴い、常に非増加となる Lyapunovu 関数がそれぞれ存在する。

- 時刻無限大の極限である停留状態は、一般化エントロピを最大とする最適分布 (17) に等しい。

$$p^{\mathrm{st}}(x) = \lim_{t\to\infty} p(x,t) = p_\kappa^{\mathrm{ME}}(x) \tag{43}$$

- 停留状態において Lyapunov 関数は最小となり、そしてそれは拡張版の自由エネルギの最小でもあり、対応する一般化エントロピの最大と一致する。

$$\min \mathcal{L}(t) = U[p_\kappa^{\mathrm{ME}}] - D\, S_\kappa[p_\kappa^{\mathrm{ME}}] = F_\kappa[p_\kappa^{\mathrm{ME}}] \quad \Leftrightarrow \quad \max S_\kappa \tag{44}$$

# 4 Bregman divergence との関連

## 4.1 Divergence とは？

確率論や情報理論における divergence とは、一般にある確率分布関数 $p$ と参照分布関数 $r$ との間の異なる度合いを表す非負の量として定義される。つまり、

$$\begin{cases} \text{非負性：} & D(p||r) \geq 0 \\ D(p||r) = 0 & \text{の時のみ}\ p = r \end{cases} \tag{45}$$

を満たす $D(p||r)$ を一般に divergence と呼ぶ。また、一般に $D(p||r)$ は、$p$ と $r$ の交換に対して非対称である。

良く知られている divergence は、Kullback-Leibler(KL) divergence

$$D^{\mathrm{KL}}(p||r) = \int dx\, p(x) \ln\left(\frac{p(x)}{r(x)}\right), \tag{46}$$

や、その凸関数 $f$ による一般化である Csiszár f-divergence

$$D^{\mathrm{C}}(p||r) = \int dx\, p(x)\, f\left(\frac{p(x)}{r(x)}\right) dx, \tag{47}$$

で、情報理論や統計力学を含め様々な分野で多くの応用がなされている。しかしながら、通常の対数関数の性質 $\ln(x/y) = \ln(x) - \ln(y)$ が $q$-対数関数や $\kappa$-対数関数等の拡張された対数関数では一般に成立しないこと等から、これらの拡張関数に基づく一般化熱統計学の枠組みとより良く整合するのは次に説明する Bregman divergence であることが最近の研究から判ってきた。

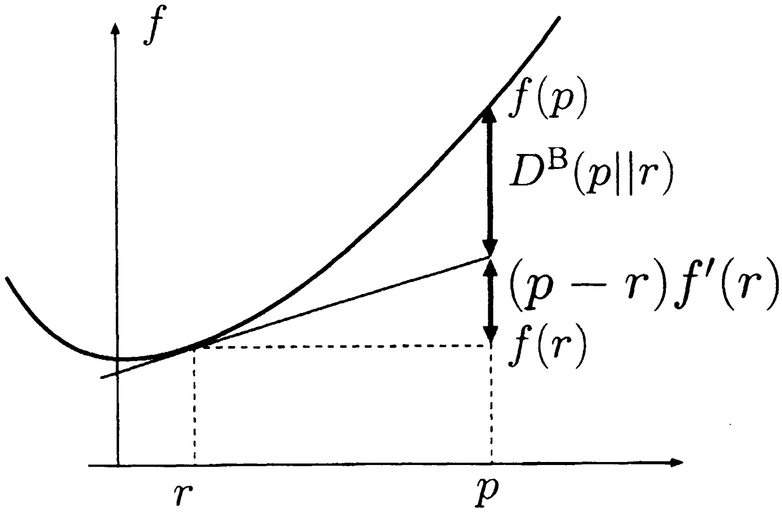


図 2: Bregman divergence の図的解釈

## 4.2 Bregman divergence

確率分布関数 $p(x)$ と $r(x)$ に対する Bregmann divergence(BD)[17] は、

$$D^{\mathrm{B}}(p||r) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx\Big[f\big(p(x)\big) - f\big(r(x)\big) - \Big(p(x) - r(x)\Big)f'\big(r(x)\big)\Big], \tag{48}$$

と定義される。ここで $f(x)$ は凸関数で、$f'(x)$ は $f$ の微分を表す。

図 2 は、任意の凸関数 $f$ による BD が常に非負であることを図的に示したものである。$f$ の $r$ における接線の傾きは $f'(r)$ なので、$(p-r)f'(r)$ は図に示した部分の長さに等しい。その部分と $f(r)$ を加えたものを $f(p)$ から引いた残りが $D^{\mathrm{B}}(p||r)$ であるので、これが非負となることが判る。また、$p$ と $r$ が等しい時のみ $D^{\mathrm{B}}(p||r)$ が零となることも、この図より明らかである。

次に、先の $\kappa$-拡張版の自由エネルギ最小原理を、この BD の枠組みで捉え直してみる。凸関数 $f$ と、参照分布 $r$ として、それぞれ

$$f(\rho) = \rho \ln_{\{\kappa\}}(\rho) \tag{49}$$

$$r = p_{\kappa}^{\mathrm{ME}} = \alpha \exp_{\{\kappa\}}[-\frac{1}{\lambda}\Big(\gamma + \beta V(x)\Big)] \tag{50}$$

を採用して、以下の時間依存性を持つ BD

$$D_{\kappa}^{\mathrm{B}}\Big(p(t)\,||\,p_{\kappa}^{\mathrm{ME}}\Big) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx\Big[p(x,t)\ln_{\{\kappa\}}\big(p(x,t)\big) - p_{\kappa}^{\mathrm{ME}}(x)\ln_{\{\kappa\}}(p_{\kappa}^{\mathrm{ME}}(x)) + \Big(p(x,t) - p_{\kappa}^{\mathrm{ME}}(x)\Big)\Big(\beta V(x) + \gamma\Big)\Big] \tag{51}$$

を導入する。

$$f'\left(p^{\mathrm{ME}}(x)\right) = \lambda \ln_{\{\kappa\}}\left(\frac{p^{\mathrm{ME}}(x)}{\alpha}\right) = -\gamma - \beta V(x), \tag{52}$$

であることに注意すると、

$$\begin{aligned} D^{\mathrm{B}}_{\kappa}\Big(p(t)\,||\,p^{\mathrm{ME}}_{\kappa}\Big) &= \beta U[p(t)] - S_{\kappa}[p(t)] - \beta U[p^{\mathrm{ME}}_{\kappa}] + S_{\kappa}[p^{\mathrm{ME}}_{\kappa}] \\ &= \beta\Big(F_{\kappa}[p(t)] - F_{\kappa}[p^{\mathrm{ME}}_{\kappa}]\Big) = \beta\Big(\mathcal{L}_{\kappa}(t) - \mathcal{L}^{\min}_{\kappa}\Big). \end{aligned}$$

となる。この表式から、divergence の非負性により、Lyapunov 関数の最小値は $\mathcal{L}^{\min}_{\kappa}$ であり、そこで自由エネルギ $F_{\kappa}(t)$ が最小となることが良く判る。

# 5 おわりに

エントロピ最大原理に基づく熱統計学の拡張の具体例として、Tsallis 及び Kaniadakis エントロピに基づいた一般化を簡単に紹介し、それぞれの拡張版における熱力学的関係式や Legendre 構造が成立することを示した。Tsallis エントロピが注目される以前までは、熱力学的なエントロピを一般化することはあまり真剣に考えられなかったようである。少なくとも熱統計学レベルにおいてさえも、エントロピを一般化することで熱力学的関係式や Legendre 変換構造が成立しなくなってしまったとしたら、そのような拡張が従来の熱力学のような普遍性がある理論となることは到底あり得ないであろう。よって、上記に示した一般化熱統計学における一般化された熱力学的関係式や Legendre 構造は、まだ第一段階のハードルをクリアしたばかりと言っても過言ではないだろう。

続いて、一般化熱統計学で対象となる系の動的振る舞いを記述する非線型拡散方程式および非線型 Fokker-Planck(FP) 方程式について紹介し、その停留状態が一般化エントロピ ($S_{2-q}$ や $S_{\kappa}$ 等) を最大化する最適分布に等しいこと示した。また、これらの非線型時間発展方程式に関する Lyapunov 関数の非増加性から、停留状態において一般化された自由エネルギが最小（or 一般化エントロピが最大）となることを示した。$q$-拡張版の非線型 FP 方程式の自己相似解は、Barenblatt や数学者達による先駆的な研究成果のお陰で、次元解析やスケール変換を利用して、ここに紹介した解析的表式が既に判っているが、$\kappa$-拡張版の非線型 FP 方程式の自己相似解はまだ求まっておらず、現在の研究課題のひとつである。

最後の 4 章で紹介した、非線型 FP 方程式の時間発展に伴い Lyapunov 関数（一般化自由エネルギ）が単調減少していく仕組みを Bregman divergencel(BD) を利用して捉え直せることは、ごく最近の研究において判ってきたことであり、情報理論や凸解析、情報幾何との接点も見えてきており、様々な分野との研究の関わりが広がっていくことを期待している。

# 参考文献


[1] H.B. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, 2nd ed. (Wiley New York 1985)

[2] J. Naudts, Physica A **340** (2004) 32.

[3] C. Tsallis, J. Stat. Phys. **52** (1988) 479.

[4] G. Kaniadakis, M. Lissia, A. Rapisarda (editors), *Proceedings of NEXT2001*, Physica A **305** Issues 1-2 (2001); G. Kaniadakis, M. Lissia (editors), *Proceedings of NEXT2003*, Physica A **340** Issues 1-3 (2004).

[5] M. Gell-Mann, C. Tsallis, *Nonextensive Entropy: Interdisciplinary Applications* (Oxford University Press, Oxford 2004).

[6] 以下の URL から Tsallis 統計力学に関する文献リストが入手可能。 http://tsallis.cat.cbpf.br/biblio.htm

[7] 阿部純義： 日本物理学会誌 **54** No.4 (1999) 287; 数理科学 No. 439 (2000) 71, No. 440 (2000) 78, No. 441 (2000) 68, No. 442 (2000) 56.

[8] G. Kaniadakis, M. Lissia, A.M. Scarfone, Physica A **340** (2004) 41.

[9] T. Wada, A.M. Scarfone, Phys. Lett. A **335** (2005) 351.

[10] G. Kaniadakis, Physica A **296** (2001) 405; G. Kaniadakis, A.M. Scarfone, Physica A **305** (2002) 69; G. Kaniadakis, Phys. Rev. E **66** (2002) 056125; G. Kaniadakis, PRE **72** (2005) 036108.

[11] A.M. Scarfone, T. Wada, Prog. Theor. Phys. Suppl. **162** (2006) 45.

[12] 儀我美一、儀我美保： 非線形偏微分方程式 – 解の漸近挙動と自己相似解 – (1999) 共立出版

[13] G.I. Barenblatt. Prikl. Mat. Mekh., **16** (1952) 679.

[14] T.D. Frank, *Nonlinear Fokker-Planck Equations*, Springer (2005).

[15] A.M. Scarfone, T. Wada, Physica A **384** (2007) 305.

[16] T. Wada, A.M. Scarfone, AIP Conference Proceedings **965** (2007) 177-180.

[17] L.M. Bregman, USSR Comp. Math. Phys., **7** (1967) 200.