

堆積モデルと Tsallis 統計

南野達彦⁺¹, 須鎗弘樹⁺²

⁺¹Tatsuhiko Nouno, ⁺²Hiroki Suyari

⁺¹ 千葉大学大学院自然科学研究科知能情報工学専攻

Graduate School of Science and Technology, Chiba University

⁺² 千葉大学工学部情報画像工学科

Department of Information and Image Sciences, Chiba University

email: ⁺¹nouno@graduate.chiba-u.jp, ⁺²suyari@faculty.chiba-u.jp

概要

ガウス分布を生成する確率モデルとして「球の落下モデル」がある。これは、ちょうど分散に関する制約下で Shannon エントロピーの最大化に対応していると考えられている。これに対応して、Tsallis 分布を生成するモデルとして「堆積モデル」を考える。Tsallis 分布は、近年、統計力学の分野でさかんに応用されている Tsallis エントロピーの最大化により得られる。本研究では、簡単な確率モデルである堆積モデルから Tsallis 統計で重要なパラメータ q の普遍的な意味を探ることを目的として、Tsallis 分布のパラメータ q の推定と、 q 解析学との関連について述べる。

1 はじめに

1988 年に Tsallis によって導入され、今日、Tsallis エントロピーと言われるエントロピーは、数学的には、Shannon エントロピーの 1 パラメータ拡張で与えられる [1][2].

$$S_q := \frac{1 - \int f(x)^q dx}{q - 1} \quad (1.1)$$

$$\lim_{q \rightarrow 1} S_q = S_1 := - \int f(x) \ln f(x) dx \quad (1.2)$$

このような数学的拡張であれば、すでにかかなりの数のエントロピーが知られているが、Tsallis エントロピーが広く統計物理の分野で使われるようになったのは、そのエントロピー最大化原理により、ベキ分布に従う一般化カノニカル分布が得られるとともに、ルジャンドル変換構造など従来の物理的な枠組みを自然な形で拡張されるからである。我々の身の回りに見られる様々な平衡状態は、Shannon エントロピーの最大化で得られるカノニカル分布ですべて記述されるわけではなく、むしろベキ分布にしたがう平衡分布の方が圧倒的に多い。この事実が、Tsallis エントロピーが統計物理の専門家の間で広く使われるようになった理由である。それらの研究では、平衡状態がベキ分布にしたがう個々の物理現象に対して、それぞれの専門家が、Tsallis エントロピーを適用し、現象をうまく説明しているということが多い [3][4]。それら個々の研究では、Tsallis エントロピーに用いられている新しいパラメータ $q \in \mathbb{R}^+$ の意味が個々に与えられている。

そこで、できるだけ簡単な確率モデルを採用して、パラメータ q の共通の意味（普遍的な意味）を探ることを考える。確率分布の2次モーメント（分散）が一定の条件のもとで、Shannon エントロピーを最大化すると、ガウス分布が得られる。このガウス分布を生成する確率モデルとして球の落下モデルを考える。これは、ゴルトン盤と言われるモデルであるが、本質的にはランダムウォークである。この球の落下モデルに対して、球の堆積モデルを考える。球の落下モデルでは、球が一定の距離までランダムウォークを繰り返すと、その位置のみ記憶して、その位置に残らないが、球の堆積モデルでは、その位置に残り、後から落下してくる球の進路を塞いでしまうモデルである。つまり、堆積効果のある落下モデルを堆積モデルと呼んでいる。この堆積モデルでは、先と同じ制約条件のもとで Tsallis エントロピーを最大化して得られる Tsallis 分布に q のある範囲でほぼ一致することが知られている [5]。

本報告では、Tsallis エントロピー・堆積モデル・ q 解析学上の q 二項分布の3者の関係について述べる。

2 Tsallis 分布

式 (1.1) で与えられる Tsallis エントロピーを条件：

$$\int f(x) dx = 1, \quad \frac{\int x^2 f(x)^q dx}{\int f(x)^q dx} = \sigma^2 \quad (2.3)$$

のもとで最大化すると、Tsallis 分布と言われる次の分布が得られる [6][7][8]。

$$f(x) = \frac{e_q(-\beta x^2)}{\int e_q(-\beta y^2) dy} \propto [1 + (1-q)(-\beta x^2)]^{\frac{1}{1-q}} \quad (q < 3). \quad (2.4)$$

ここで、 $e_q(x)$ は、 q 指数関数 (q -exponential function) といわれ次式で定義され、

$$e_q(x) := \begin{cases} [1 + (1-q)x]^{\frac{1}{1-q}}, & \text{if } 1 + (1-q)x > 0, \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (x, q \in \mathbb{R}), \quad (2.5)$$

β は σ に依存した定数である。式 (2.4) で与えられる Tsallis 分布を改めて $f_q(x)$ で表すと、

$$f_q(x) = \frac{e_q(-\beta x^2)}{\int e_q(-\beta y^2) dy} \xrightarrow{q \rightarrow 1} f_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left\{-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right\} \quad (2.6)$$

となり、 $q \rightarrow 1$ のとき、Tsallis 分布はガウス分布に近づくことがわかる。

ここで、 q 指数関数に関連して、 q 対数関数 (q -logarithm function) を導入しておく。

$$\ln_q x := \frac{x^{1-q} - 1}{1-q} \quad (2.7)$$

この q 対数関数を用いると、Tsallis エントロピー (1.1) は、次のように表される。

$$S_q = - \int f(x)^q \ln_q f(x) dx \quad (2.8)$$

これより明らかなように、 $q \rightarrow 1$ のとき、Shannon エントロピーに一致する。この q 対数関数の逆関数が q 指数関数 (式 (2.5)) である。

3 球の落下モデル

図 3.1 のような格子状の頂点から左右に等確率で球を落下させると、格子内を通った球が底に到達した地点を横軸にした頻度の分布は、二項分布に従う。実際、個々の試行は、底まで n 回の辺を経て達したときに、球が右に k 回、左に $(n - k)$ 回と表せる。このような試行を数多く繰り返すと、中心極限定理より、ガウス分布に近づくことが証明される。

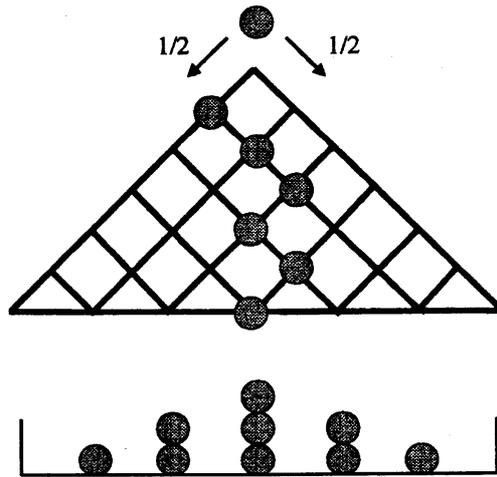


図 3.1 球の落下モデル (ゴールトン盤)

この球の落下モデルをベースに Tsallis 分布に従うモデルとして堆積モデルを考える。堆積モデルを考えるとときに重要なことは、落下モデルが堆積モデルの特別な場合になっていることである。これは、ちょうど、Tsallis 分布において、パラメータ q が $q \rightarrow 1$ のとき、ガウス分布に一致していることに対応している。したがって、これらの関係は、図 3.2 のように図式化できる。

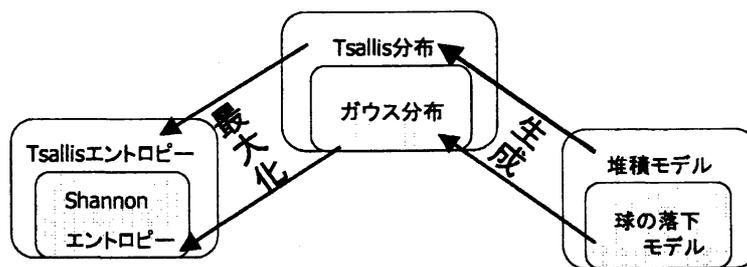


図 3.2 エントロピー・カノニカル分布・モデルの期待される関係

4 堆積モデル

位置 $x = 0$, 高さ $y = H$ の座標から球を発生させ、その球を堆積させていくモデルを考える。 xy 平面で表すと、座標 $(0, H)$ から直径 1 の球をある規則でランダムウォークさせる (図 4.1)。移動規則は、まず垂直方向に 1 マス下に移動した後、水平方向に 1 マス、ランダムウォークする。これを 1 ステップとみなす

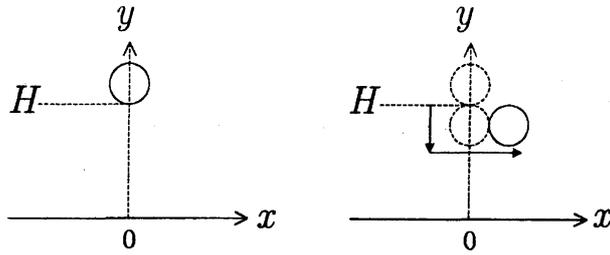


図 4.1 初期位置

図 4.2 1ステップの動作

球が底に着くか、以前に堆積した球の上には到達したら球を堆積させ、次の球を落とし始める。水平方向 (x 軸方向) にランダムウォークするとき、移動しようとした方向に堆積した球があり、進路がふさがれている場合 (図 4.3) は、もう 1 マス垂直に下に移動するという規則を設ける (図 4.4)。この水平方向の移動を妨げる働きを“堆積効果”と呼ぶ。

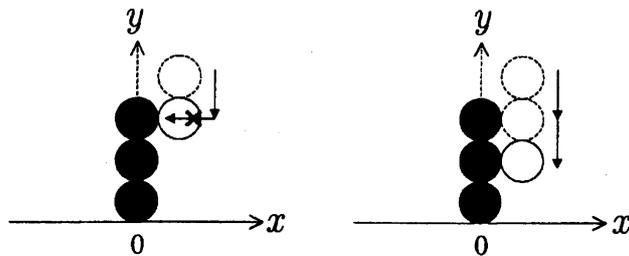


図 4.3 進路がふさがれている場合 図 4.4 1マス垂直に下に移動

(注：黒球は以前に堆積した球，破線の球は移動した軌跡)

堆積した山の頂点が初めの高さ H (図 4.1) に達したら、それ以上球を動かすことができないので終了する。その状態を“飽和状態”と呼ぶ。初期位置 $(0, 700)$ で 1000 回行った平均の堆積分布を図 4.5 に示す。球の落下モデルと堆積モデルの式は各 x 座標の球数を $n(x)$ 、総球数 N をとおくと、以下の式で表せる。

$$\text{球の落下モデル} : n(x) = \frac{N}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right\} \quad (4.9)$$

$$\text{堆積モデル} : n_q(x) = A[1 + b(q-1)]^{1-\frac{x}{q}} \quad (4.10)$$

ここで、 A は正規化の際に現れるパラメータ、 b は σ に依存したパラメータで、指数部分の $\frac{x}{q}$ は、この非加法的統計力学における期待値：

$$E_q[X] := \frac{\int x f_q(x)^q dx}{\int f_q(x)^q dx} \quad (4.11)$$

で正規化するため、Tsallis 分布 (2.4) の指数部分 $\frac{1}{1-q}$ の q 乗になる [5]。

堆積モデルのシミュレーションにおいて、堆積数 N を 8000, 16000, 32000 で図 4.5 にプロットした。比較のため、球の数を同じにした落下モデル (ガウス分布) も図 4.6 に示す。

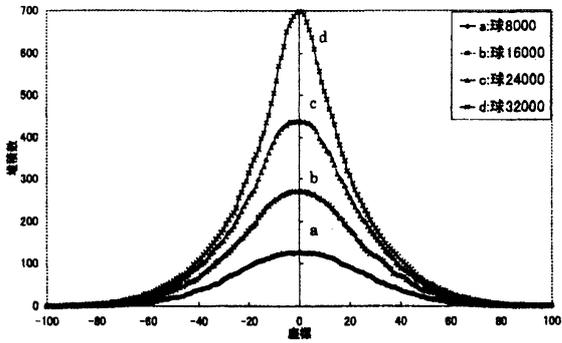


図 4.5 堆積モデルによる分布

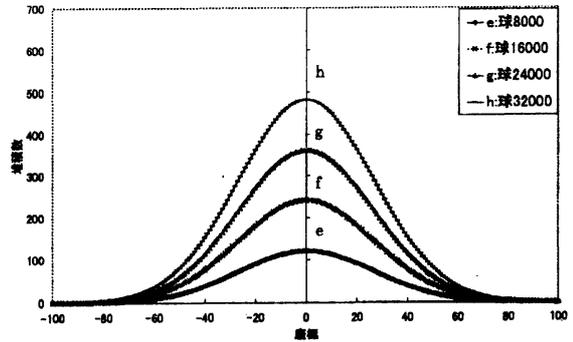


図 4.6 落下モデルによる分布

原点の堆積数が初めの高さ 700 に達している分布が飽和状態で、球の堆積数は約 32000 だった。図 4.6 と比較してみると、堆積数 8000 の分布は酷似しているが、堆積が進むにつれてガウス分布から外れていることがわかる。

堆積モデルによる結果を正規化して確率分布に変換し、文献 [5] にならい、式 (4.10) との比較を行った。式 (4.10) のパラメータ A, b をそれぞれ設定して、図 4.5 中の分布 a~d のパラメータ q を推定した。その際に設定したパラメータ A, b は表 4.11 である。

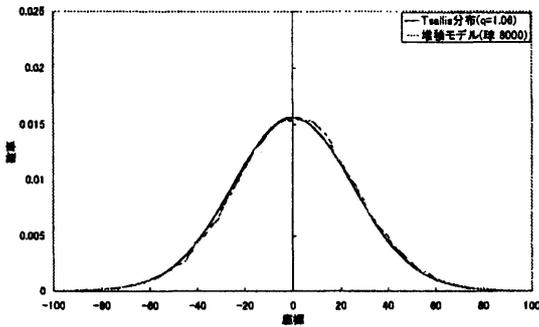


図 4.7 (分布 a : $q = 1.06$)

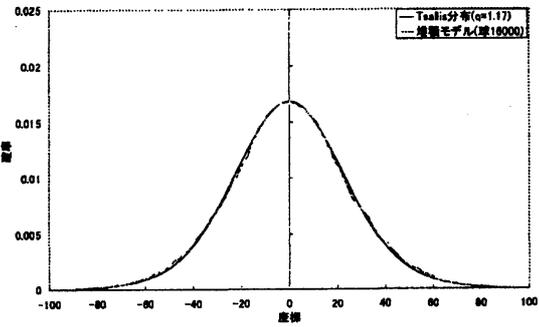


図 4.8 (分布 b : $q = 1.17$)

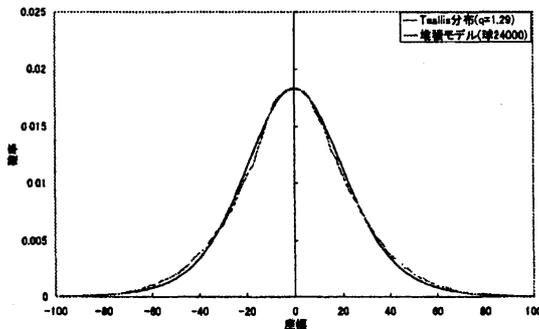


図 4.9 (分布 c : $q = 1.29$)

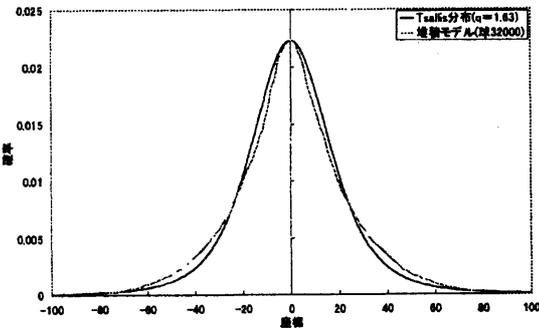


図 4.10 (分布 d : $q = 1.63$)

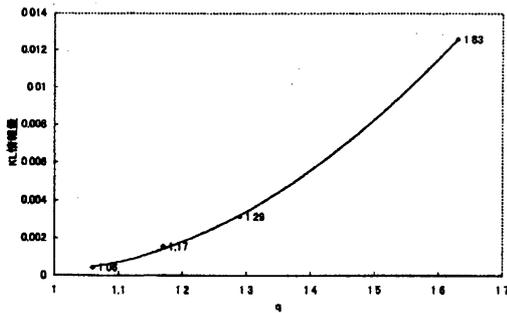
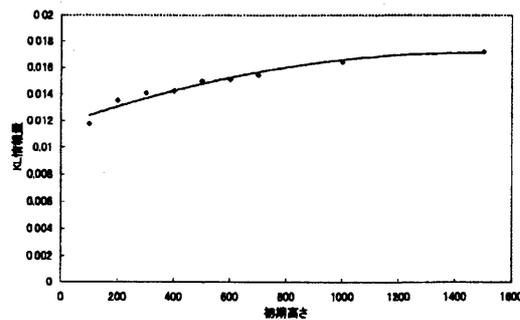
堆積数	q	A	b
8000	1.06	0.015625	0.000756
16000	1.17	0.016856	0.000856
24000	1.29	0.018334	0.000982
32000	1.63	0.022341	0.001343

表 4.11 シミュレーションで使った堆積数とパラメータ q, A, b

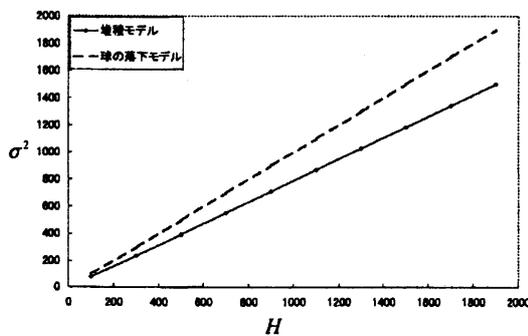
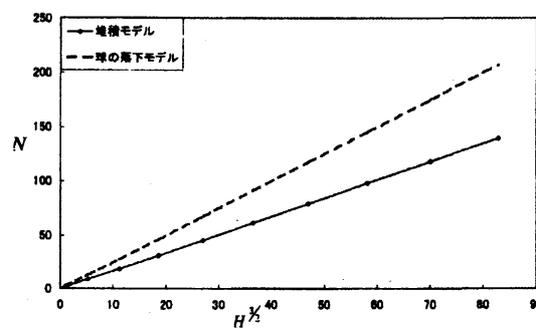
図 4.7~図 4.9 は、ほぼ一致しているといえるが、図 4.10 はズレが生じている。そこで、図 4.7~図 4.10 の分布間の距離を表す KL 情報量:

$$D(p^{(1)}, p^{(2)}) := \sum_i p_i^{(1)} (\ln p_i^{(1)} - \ln p_i^{(2)}) \quad (4.12)$$

を計算して、 q と KL 情報量の推移を図 4.12 に示す。ここで、 $p^{(1)}$ は Tsallis 分布、 $p_i^{(2)}$ は堆積モデルから得られる分布を用いた。また、初めの高さ H を変えた場合の KL 情報量の変化を図 4.13 に示す。

図 4.12 q と KL 情報量図 4.13 初めの高さ H と KL 情報量

q の値が大きくなるにつれて、僅かではあるが KL 情報量は増加している。また、初めの高さ H を高くしていったときも増加している。図 4.13 はすべて堆積が飽和状態になったときの場合である。堆積数が増えるにつれて KL 情報量が減れば、Tsallis 分布に従う最適な確率モデルといえるが、これらの結果はモデルが不完全であることを示唆していると考えられる。

図 4.14 高さ H と分散 σ^2 の関係図 4.15 高さ H と堆積数 N の関係

また、初めの高さ H を変化させたときの、飽和したときの高さ H と分散 σ^2 の関係と、飽和したときの高さ H とそのときの堆積数 N の関係を示す。それぞれ

$$\sigma^2 \propto H, \quad N \propto H^{\frac{3}{2}} \quad (4.13)$$

という結果が得られた (図 4.14 と図 4.15)。

堆積モデルでは堆積が進むにつれ q が増大し、ガウス分布 ($q = 1$) から外れてくることが上のシミュレーションからわかる。このことを中心極限定理の観点から考える。球の落下モデルは過去の球の影響を受けないので、互いに独立であり、中心極限定理でいうところの同一な分布は二項分布であるので、十分多くの試行回数に対して、ガウス分布に近づくことがわかる。一方、堆積モデルは過去の球の影響を受けており (堆積効果)、「互いに独立」という点で中心極限定理の仮定を満たしておらず、ガウス分布から外れていくことが分かる。

5 q 解析学における q 二項分布

Tsallis エントロピーと q 解析学の関係について、著しい類似性が指摘されている [9][10][11]。具体的には、カオスの分野で動力的分配関数と呼ばれる次の関数：

$$g(x) = \sum_i (p_i)^x \quad (5.14)$$

に対して、Shannon エントロピー S_1 は、

$$S_1 = -\left. \frac{d}{dx} g(x) \right|_{x=1} \quad (5.15)$$

で与えられるのに対して、Tsallis エントロピーは、Jackson 微分：

$$D_q g(x) := \frac{g(qx) - g(x)}{(q-1)x} \quad (5.16)$$

を用いて、

$$S_q = -D_q g(x)|_{x=1} \quad (5.17)$$

で表せる。ここで、

$$\lim_{q \rightarrow 1} D_q g(x) = \frac{d}{dx} g(x) \quad (5.18)$$

なる関係がある。さらに、互いに独立な確率変数 X, Y に対して、Tsallis エントロピーは擬加法性 (pseudoadditivity) と呼ばれる特徴的な関係：

$$S_q(X, Y) = S_q(X) + S_q(Y) + (1-q) S_q(X) S_q(Y) \quad (5.19)$$

が成り立つが、この関係式が合成関数の Jackson 微分：

$$D_q(f(x)g(x)) = (D_q f(x))g(x) + f(x)(D_q g(x)) \quad (5.20)$$

から直接得られる。ここで、 $f(x), g(x)$ は、先に述べた動力的分配関数である。

この Jackson 微分は q 解析学分野で現れる。 q 解析学と Tsallis 統計とは別々の分野で生まれたもので、パラメータの記号 q の一致は偶然ではあるが、上記のように、 q 解析学と Tsallis 統計とは強いアナロジーが存在している。 q 解析学の一般的な解説 [12] などを見ると、初めに扱われるのは、 q 二項分布である。

$$q \text{ 二項分布} : P_q(X = k) = \binom{n}{k}_q p^k (1-p)^{n-k} \tag{5.21}$$

ここで、

$$\binom{n}{k}_q := \frac{[n]_q!}{[k]_q! [n-k]_q!} = \prod_{j=1}^k \frac{1-q^{n-j+1}}{1-q^j}, \quad [n]_q := \frac{1-q^{n+1}}{1-q} \tag{5.22}$$

である。

中心極限定理からの類推で、通常の二項分布とガウス分布の関係が、 q 二項分布と Tsallis 分布との関係にも現れるのではないかと期待することは、自然であろう (図 5.1)。

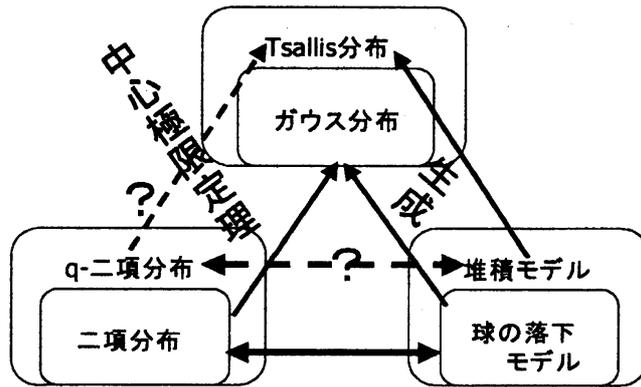


図 5.1 二項分布・カノニカル分布・モデルの期待される関係

ここで、堆積モデルの飽和状態での q の値で、Tsallis 分布と q 二項分布を比較した。

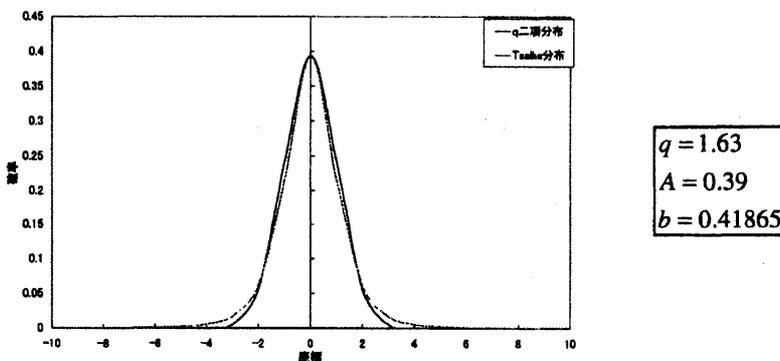


図 5.2 Tsallis 分布と q 二項分布

Tsallis 分布 (4.10) のパラメータ A, b を上記のように設定すると、ほぼ一致する。しかしながら、表 4.11 から分かるように、堆積モデルとは一致していない。三者の関係には、非加法的統計における中心極限定理の定式化が不可欠であると考えられ、更なる検証が必要である。

6 おわりに

堆積モデルが q のある範囲で Tsallis 分布に従うことが確認された。また、堆積の初期状態ではガウス分布と酷似しており、また、 q の値が 1 付近であることから、堆積モデルがガウス分布も含んでいることを示している。球の落下モデルは過去の球の影響を受けないが、堆積モデルは“堆積効果”により以前に堆積した球の影響を受ける。このことを踏まえると、堆積が進むにつれてガウス分布から外れ、 q の値が増大するということは、堆積モデルにおける q の値は、過去の球に影響を受ける度合いではないかと考えられる。それは、堆積モデルの分布 (図 4.5) を見ても分かるように、球数が増えるにつれ、中心に尖った形になっている。つまり、堆積の増加に伴い、中心付近で堆積効果が頻繁に起こっていることがわかる。このように、 q の意味の漠然とした見解は与えられるが、まだ解明の余地があるように思える。堆積モデルと q 解析学との関係について言及したが、実際には Tsallis 分布と堆積モデルと q 二項分布の三者を結びつけるのは困難が伴う。筆者らの最近の研究で、堆積モデルは、 q 解析学とは異なり、Tsallis エントピーから定まる新しい数理構造とよく一致することがわかってきた。それについては、機会を改めて発表する予定である¹。

参考文献

- [1] C. Tsallis, “Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics”, J. Stat. Phys. **52**, 479-487 (1988).
- [2] E.M.F. Curado and C. Tsallis, “Generalized statistical mechanics: connection with thermodynamics”, J. Phys. A **24**, L69-L72 (1991); Corrigenda **24**, 3187 (1991); **25**, 1019 (1992).
- [3] 阿部純義, “Tsallis の非加法的統計力学 (その 1) ~ (その 4)”, 数理科学, No. 439-No.442, サイエンス社 (2000).
- [4] C. Tsallis et al., *Nonextensive Statistical Mechanics and Its Applications*, edited by S. Abe and Y. Okamoto (Springer-Verlag, Heidelberg, 2001); この分野の包括的論文リストは次のサイトを参照 <http://tsallis.cat.cbpf.br/biblio.htm>
- [5] J.A. Cordeiro, M.V.B.T. Lima, R.M. Dias and F.A. Oliveira, “Morphology of growth by random walk deposition”, Physica A **295**, 209-214 (2001).
- [6] C. Tsallis, S.V.F. Levy, A.M.C. Souza and R. Maynard, “Statistical-mechanical foundation of the ubiquity of Lévy distributions in nature”, Phys. Rev. Lett. **75**, 3589-3593 (1995) [Erratum: **77**, 5442 (1996)].
- [7] C. Tsallis, R.S. Mendes and A.R. Plastino, “The role of constraints within generalized nonextensive statistics”, Physica A **261**, 534-554 (1998).

¹Tsallis エントロピーに関する筆者らの最近の研究は、参考文献 [13][14][15]などを参照。

- [8] D. Prato and C. Tsallis, "Nonextensive foundation of Lévy distributions", *Phys. Rev. E* **60**, 2398-2401 (2000).
- [9] S. Abe, "A note on the q -deformation-theoretic aspect of the generalized entropies in nonextensive physics", *Phys. Lett. A* **224**, 326-330 (1997).
- [10] S. Abe, "Nonextensive statistical mechanics of q -bosons based on the q -deformed entropy", *Phys. Lett. A* **244**, 229-236 (1998).
- [11] R.S. Johal, " q calculus and entropy in nonextensive statistical physics", *Phys. Rev. E* **58**, 4147-4151 (1998).
- [12] 上野喜三雄, " q 解析学と量子群", 数学のたのしみ No.2, 日本評論社 (1997).
- [13] H. Suyari, "Nonextensive entropies derived from form invariance of pseudoadditivity", *Phys. Rev. E* **65**, 066118 (7pages) (2002).
- [14] H. Suyari, "On the most concise set of axioms and the uniqueness theorem for Tsallis entropy", *J. Phys. A.*, **35**, 10731-10738 (2002).
- [15] H. Suyari, "The uniqueness theorem for the nonextensive entropy", *Proc. 2003 IEEE Int.Symp.Inform.Theory*, 260 (2003).