Tsallis統計の基礎数理

SummerSchool 数理物理 2009（8/27-30, 東大数理）
べき乗則の数理　予稿集原稿

須鎗弘樹 (Hiroki Suyari)

千葉大学 大学院融合科学研究科
〒263-8522　千葉市稲毛区弥生町 1-33
suyari@faculty.chiba-u.jp, suyari@ieee.org

はじめに　べき乗則が現れるような個々の物理現象に対して，その背後にある物理的なからくり・原則を明確にして，その物理現象を説明・記述するという研究は，個々の現象・分野ごとに精力的に進んでいる．その一方で，近年のカオス・フラクタル・ネットワーク科学などのように，全く異なる分野を横断して，べき乗則が観測されると，それら物理現象の個々の特徴にとらわれない普遍的な原理原則があるのではないかと考えるのは，自然であろう．しかし，どのようなアプローチで，その普遍的な原理原則を見いだせばよいのかということは，一般には難しい．なぜなら，その出発となる仮定や仮説の選択が難しいからである．それに対して，1988 年に，物理学者の Constantino Tsallis は，Boltzmann-Gibbs 統計力学を基礎にして，それをマルチフラクタルのような系に拡張する具体的な方法を提案した．彼が採用した出発点（仮定）は，Shannon エントロピーを 1 パラメータ拡張した一般化エントロピー（今日，Tsallis エントロピーと言われる）の採用であった．この一般化エントロピー（Tsallis エントロピー）を Jaynes のエントロピー最大化原理による統計力学の構成法に適用し，従来の Boltzmann-Gibbs 統計力学の拡張を提案した．この方法で得られる統計力学の枠組みは，ルジャンドル変換構造などの統計力学の重要な要諦を満たすものの，明らかに従来の Boltzmann-Gibbs 統計力学の構成方法とは異なる．つまり，微視的な状態の数を数えるという，従来の統計力学の導入にあたるミクロな視点が欠落している．マクロな物理量であるエントロピーを出発点にしたために，なぜ Tsallis エントロピーを出発点にする（できる）のかという根本的な問題を一向に解決できない[1]．しかし，近年になって，独立性の拡張の一つと思われる「q 積」と呼ば

[1]Jaynes によるエントロピー最大化原理は，1957 年の論文による．つまり，1948 年の Shannon の有名な論文（この論文によって，情報理論が始まったと今日考えられている）の結果を受けて，情報理論で重要な役割を果たす Shannon エントロピーを出発点（仮定）として採用し，統計力学を再構成できることを示した．それに対して，Tsallis エントロピーの導入には，Jaynes の導入のときのような情報理論的なバックグラウンドがない点に注意しておく必要がある．これは必ずしも否定的な意味ではなく，そこに研究の余地が残されているとも考えられる．

れる拡張された積を用いれば，ミクロなアプローチから Tsallis エントロピーを初めとする重要なマクロな物理量が導かれることがわかってきた．また，最近になって，この q 積の数理を用いれば，Tsallis が始めた Boltzmann-Gibbs 統計力学の拡張（今日，Tsallis 統計力学，Tsallis 統計，q 統計などと言われる）の背景には，非常に自然な数理が存在することがわかってきた．それを端的に書けば，従来の Boltzmann-Gibbs 統計力学の数理は，指数関数族 $\frac{dy}{dx} = y$ の数理であり，その拡張である Tsallis 統計力学の数理は，その 1 パラメータ拡張である $\frac{dy}{dx} = y^q$ の数理である．この予稿では，その基礎数理について，次の順番で，できるだけ初等的に述べる．

1. 理論展開の出発点 (仮説) の選択について
2. 非線形微分方程式 $\frac{dy}{dx} = y^q$ から導かれる誤差法則の拡張
3. q-積から導かれる Tsallis エントロピー
4. Shannon-Khinchin の公理系の一般化
5. Csiszár タイプの Tsallis 相対エントロピーと α-ダイバージェンス
6. Tsallis 分布と物理的温度
7. Tsallis 統計の 4 つの数理構造
8. Tsallis エントロピーからマルチフラクタルの理論へ
9. おわりに

1　理論展開の出発点 (仮説) の選択について

一般に，平衡統計力学（Boltzmann-Gibbs 統計力学）において，カノニカル分布は非常に基本的であり，その応用範囲は極めて広いことはよく知られている．N 個の状態を取り得る物理系を絶対温度 T の熱浴に長時間放置したとき，その物理系が i 番目の状態（そのときのエネルギーを E_i で表す）をとる確率 p_i は，

$$p_i = \frac{\exp(-\beta E_i)}{Z} \tag{1}$$

で与えられる．ここで，Z は分配関数，β は Boltzmann 定数 k_B と絶対温度 T を用いて，それぞれ次のように定義される．

$$Z := \sum_{j=1}^{N} \exp(-\beta E_j), \qquad \beta := \frac{1}{k_B T} \tag{2}$$

ここでは，1 つの物理系に着目したが，絶対温度 T の同じ熱浴に長時間放置された 2 つの物理系 A, B に着目する．このとき，それぞれ i 番目の状態と j 番目の状態をとる確率

$p_i^{(A)}, p_j^{(B)}$ は，上と同じくカノニカル分布：

$$p_i^{(A)} = \frac{\exp\left(-\beta E_i^{(A)}\right)}{Z_A}, \quad p_j^{(B)} = \frac{\exp\left(-\beta E_j^{(B)}\right)}{Z_B} \tag{3}$$

で与えられる．その一方で，これら 2 つの物理系をあわせて一つの物理系としてみなしたとき，その物理系において，上の状態は，組 (i, j) で指定され，その状態 (i, j) を実現する確率 $p_{i,j}^{(A,B)}$ は，やはりカノニカル分布：

$$p_{i,j}^{(A,B)} = \frac{\exp\left(-\beta\left(E_i^{(A)} + E_j^{(B)}\right)\right)}{Z_{AB}} \tag{4}$$

で与えられる．これは，2 つの物理系 A, B の同時確率であるから，これより，カノニカル分布において，物理系 A と B は独立であることがわかる．つまり，

$$p_{i,j}^{(A,B)} = p_i^{(A)} \cdot p_j^{(B)} \quad (\forall i, j)\,. \tag{5}$$

この独立性は，数学的には**指数法則**によることがわかる．

Boltzmann-Gibbs 統計力学の基礎であるカノニカル分布は指数関数で表されるという点は，べき乗則の理論を展開していくうえで非常に重要である．実際，べき関数は，指数関数と対比して現れるからである．

後の議論のために，文献 [1] の 12 章の例にならって，カノニカル分布について少し別の角度から見ておく．n 個のサイコロを同時に投げたとき，出た目の総和が $n\alpha$（$1 \le \alpha \le 6$）であったとする．目 i（$i = 1, \cdots, 6$）が出たサイコロの数を n_i とすると，サイコロの出た目の比率 $\left(\frac{n_1}{n}, \cdots, \frac{n_6}{n}\right)$ として最も可能性が高い場合の確率 $p_i^* := \frac{n_i^*}{n}$ は

$$p_i^* = \frac{\exp(-\lambda \cdot i)}{Z}, \qquad Z := \sum_{j=1}^{6} \exp(-\lambda \cdot j) \tag{6}$$

で与えられる．ここで，λ は，$\sum_{i=1}^6 i p_i^* = \alpha$ を満たす定数である．この分布 p_i^* とカノニカル分布（1）を比較すると，λ は β に，サイコロの目 i はエネルギー E_i に対応することがわかる．つまり，分布 p_i^* はカノニカル分布である．この問題設定において，(6）の導出について見ておく．まず，サイコロの目の出方は $(n_1, \cdots, n_6)$ で指定され，$(n_1, \cdots, n_6)$ の目の出方の組み合わせは，多項係数：

$$\begin{bmatrix} & n & \\ n_1 & \cdots & n_6 \end{bmatrix} := \frac{n!}{n_1! \cdots n_6!} \tag{7}$$

で表される．この組み合わせによって定まるエネルギーとして，サイコロの出た目の総和 $\sum_{i=1}^6 i n_i$ を採用すると，$(n_1, \cdots, n_6)$ で指定される物理的な状態（エネルギー $\sum_{i=1}^6 i n_i$ の状態）は，等確率で実現されると考えられる（等重率の原理に対応）．出た目の総和が $n\alpha$ という条件のもとで，サイコロの出た目の比率 $\left(\frac{n_1}{n}, \cdots, \frac{n_6}{n}\right)$ として最も可能性が高い

場合の確率 $p_i^* = \left(\frac{n_1^*}{n}, \cdots, \frac{n_6^*}{n}\right)$ を求めるには，$(n_1, \cdots, n_6)$ に関して，次の最大化問題を考えればよい．

$$\text{条件} \quad \sum_{i=1}^{6} i n_i = n\alpha \tag{8}$$

$$\text{最大化} \quad \begin{bmatrix} & n & \\ n_1 & \cdots & n_6 \end{bmatrix} \tag{9}$$

そこで,（9）の多項係数を最大化する代わりに，その対数 ln（増加関数）を用いることにする．n が十分大きいとき，Stirling の公式を用いると，多項係数（7）と Shannon エントロピー S_1 との間に，次の関係が得られる．

$$\ln \begin{bmatrix} & n & \\ n_1 & \cdots & n_6 \end{bmatrix} \simeq n S_1 \left(\frac{n_1}{n}, \cdots, \frac{n_6}{n}\right) \tag{10}$$

つまり，上の最大化問題は，期待値一定の条件下における Shannon エントロピー最大化問題に帰着する．通常，このような条件付き最大化問題は，Lagrange の未定乗数法によって，その最適分布の形がわかる．実際，p_i, λ, γ の関数 J として，

$$J(p_i, \lambda, \gamma) := S_1(p_1, \cdots, p_6) - \lambda \left(\sum_{i=1}^{6} i p_i - \alpha\right) - \gamma \left(\sum_{i=1}^{6} p_i - 1\right) \tag{11}$$

とおき，その極値の条件 $\frac{\partial J}{\partial p_i} = \frac{\partial J}{\partial \lambda} = \frac{\partial J}{\partial \gamma} = 0$ より，カノニカル分布（6）が得られる．また，上で述べたカノニカル分布における独立性についても，ここで述べた多項係数による議論を用いれば，Shannon エントロピー S_1 の加法性とともに導かれる．

以上の準備のもと，べき乗則の理論を展開するにあたって，どのような出発点を選択すればよいかということを考えておく.「はじめに」で述べたように，物理学者の Tsallis は，Jaynes の議論 [2]（上の後半の議論）にならって，最大化すべきエントロピーとして，Shannon エントロピー S_1 を 1 パラメータ拡張した Tsallis エントロピー S_q^{Tsallis} の導入を出発点にした [3]（ただし，多項係数の一般化ではなく，従来のマルチフラクタルの定式化にヒントを得た直観的な一般化[2]であり，当時知られていた Rényi エントロピー $S_q^{\mathrm{Rényi}}$ とも異なる）．

$$S_q^{\mathrm{Tsallis}}(p_1, \cdots, p_k) := \frac{1 - \sum_{i=1}^{k} p_i^q}{q - 1}, \tag{12}$$

$$S_q^{\mathrm{Rényi}}(p_1, \cdots, p_k) := \frac{\ln \sum_{i=1}^{k} p_i^q}{1 - q} \tag{13}$$

$$\lim_{q \to 1} S_q^{\mathrm{Tsallis}} = \lim_{q \to 1} S_q^{\mathrm{Rényi}} = S_1 := -\sum_{i=1}^{k} p_i \ln p_i \tag{14}$$

[2] [4] の p.9 に，1988 年当時に Tsallis が用いた直観的な導入方法が記されている．

しかし，そのような一般化エントロピーを出発点（仮定）に選んでいる以上，その選択の理由を説明できない．ましてや，Jaynes のときとは異なり，Tsallis エントロピー S_q^{Tsallis} には，Shannon エントロピー S_1 のような情報理論的な裏付けはない．そこで，エントロピーを一般化するのではなく,「べき関数」が「指数関数」と対比的に扱われることを鑑み，指数関数の特徴付けを一般化することを出発点に選ぶ[3]．指数関数の特徴付けは，いくつか存在するが，そのなかでも最も有名な特徴付けは，最も基本的な線形微分方程式：

$$\frac{dy}{dx} = y \tag{15}$$

であろう．これを次のように一般化した非線形微分方程式：

$$\frac{dy}{dx} = y^q \quad (q > 0) \tag{16}$$

を理論の出発点に選ぶ．実際，次の章から展開していくように，Tsallis 統計の数理を一言で言えば，非線形微分方程式 $\frac{dy}{dx} = y^q$ の数理と断言できる．

なお，$\frac{dy}{dx} = y^q$ の数理が指数関数族 $\frac{dy}{dx} = y$ の数理の一般化である以上，Boltzmann-Gibbs 統計力学の数理が理論展開の重要な拠り所であることは言うまでもない．しかし，Cauchy 分布のように，一般に，べき分布は，通常の意味の期待値や分散が存在しない場合が多いことに注意する必要がある．実際，統計力学が確率論を基礎にしているため，従来の確率論の主要な定理は，期待値や分散の存在（有限性）を仮定している場合が少なくない．そのため，べき乗則の理論を展開する際には，それら定理の利用や一般化の際には，その適用範囲について，十分注意する必要がある．また，べき乗則に関する論文では，データとのカーブフィッティングを多数見ることができ，現象の背後にある法則の発見の予見に欠かせないかもしれないが，本稿のような理論展開では，必要がないので，一切用いない．

以下，S_1 は Shannon エントロピーを表すが，特に断らない限り，S_q は Tsallis エントロピー（12）あるいは，その連続系の場合の表記（36）を表す．他の一般化エントロピーと区別する必要がある場合は，この章で用いたように，$S_q^{\mathrm{Rényi}}$，S_q^{Tsallis} などの表記を使うことにする．

2 非線形微分方程式 $\frac{dy}{dx} = y^q$ から導かれる誤差法則の拡張

指数関数の特徴付けの一般化として，次の非線形微分方程式 [5]：

$$\frac{dy}{dx} = y^q \quad (q > 0) \tag{17}$$

を一般化指数関数を特徴付ける式として解くと，

$$\frac{y}{\exp_q(C)} = \exp_q\left(\frac{x}{\left(\exp_q(C)\right)^{1-q}}\right) \tag{18}$$

を得る [6][4]．ここで，C は，$1 + (1-q)\,C > 0$ を満たす任意定数で，$\exp_q$ は q-指数関数と言われる一般化指数関数である [7][4][8].

[3]おそらく，この出発点が最も一般的で自然であろう．

[4]初期値 $(x_0, y_0) \in \mathbb{R}^2$ において，$y_0 > 0$ であれば，解は一意に存在する．

定義 1 （q-**指数関数**，q-**対数関数**）$q>0$ を任意に固定する．$1+(1-q)\,x>0$ を満たす $x\in\mathbb{R}$ の集合上の関数

$$\exp_q x := [1+(1-q)\,x]^{\frac{1}{1-q}} \tag{19}$$

を q-指数関数といい，$\mathbb{R}^+$ 上の関数

$$\ln_q x := \frac{x^{1-q}-1}{1-q} \tag{20}$$

を q-対数関数という．

q-指数関数に対して

$$\exp_q(x)\otimes_q \exp_q(y) = \exp_q(x+y), \tag{21}$$

あるいは q-対数関数に対して

$$\ln_q(x\otimes_q y) = \ln_q(x)+\ln_q(y) \tag{22}$$

を満たすように，新しい積 $\otimes_q$ を定める．この $\otimes_q$ を q-積という [9][10].

定義 2 （q-**積**）$x^{1-q}+y^{1-q}-1>0$ を満たす $x,y>0$ に対して，

$$x\otimes_q y := \left[x^{1-q}+y^{1-q}-1\right]^{\frac{1}{1-q}} \tag{23}$$

を x と y の q-積という．

注意 3 $x^{1-q}+y^{1-q}-1>0$ の条件は，q-指数関数の定義域の条件 $1+(1-q)\,x>0$ と（*21*）から導かれる．

さて，このように $\frac{dy}{dx}=y^q$ から定まる q-積 $\otimes_q$ が，独立性の拡張と考えられるかを検証するため，その最初の応用として，**Gauss の誤差法則の拡張**を考える [11].

一般に，長さ・重さの測定など，ある測定を n 回独立に行い，その測定結果が

$$x_1, x_2, \cdots, x_n \in \mathbb{R} \tag{24}$$

で与えられたとしよう．このとき，各値 x_i $(i=1,\cdots,n)$ は，互いに独立で同一の確率変数 X_i $(i=1,\cdots,n)$ の値と考えられる．このとき，真の値 $x\in\mathbb{R}$ が存在して，次のような加法的な関係：

$$x_i = x+e_i \quad (i=1,\cdots,n), \tag{25}$$

を満たすとする．ここで，e_i は，真の値と観測値との差，つまり，誤差（ゆらぎ）である．したがって，各確率変数 X_i に対して，誤差 e_i を値にとる確率変数 E_i が存在して，

$$X_i = x+E_i \ (i=1,\cdots,n) \tag{26}$$

と表される．確率変数 X_i $(i=1,\cdots,n)$ が独立同一分布にしたがうことから，各 E_i は，同じ確率密度関数 f をもつ．ただし，f は微分可能とする．このとき，θ の関数 $L(\theta)$ として，

$$L(\theta) := f(x_1-\theta)\,f(x_2-\theta)\cdots f(x_n-\theta) \tag{27}$$

を定義する．この $L(\theta)$ を**尤度関数**という．このとき，次の定理が成り立つ．

命題 4 （***Gauss* の誤差法則**）任意に固定された $x_1, x_2, \cdots, x_n$ に対して，$L(\theta)$ が

$$\theta = \theta^* := \frac{x_1 + x_2 + \cdots + x_n}{n}, \tag{28}$$

において最大値をとるとする．このとき，$x_i - \theta \, (i = 1, \cdots, n)$ を値にとる確率変数の確率密度関数 f は *Gauss* 分布で与えられる．

$$f(e) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{e^2}{2\sigma^2}\right\}. \tag{29}$$

上の定理は，**Gauss の誤差法則**として知られており, さまざまな分野において測定に伴う偶然誤差に関する仮定として使われている．Gauss 分布の特徴付けとして，中心極限定理などがよく知られているが，エントロピーとの関係では，連続系の Shannon エントロピーを，分散に関する制約の下で最大化すると Gauss 分布が得られる．

そこで，このガウスの誤差法則を先に述べた q-積によって拡張する．上で述べた Gauss の誤差法則と同様の状況を考える．つまり，観測の結果，n 個の値を得たと仮定する．

$$x_1, x_2, \cdots, x_n \in \mathbb{R} \tag{30}$$

ただし，ここでは先とは異なり独立性を仮定しない．しかし，n 個の確率変数の組 $(X_1, \cdots, X_n)$ が $(x_1, \cdots, x_n)$ を含む無限小の区間に値をとる確率が，次の関数に比例すると仮定する．

$$L_q(\theta) := f(x_1 - \theta) \otimes_q f(x_2 - \theta) \otimes_q \cdots \otimes_q f(x_n - \theta) \tag{31}$$

つまり，尤度関数 $L(\theta)$ における独立性による積 $\times$ を q-積 $\otimes_q$ に置き換えたのが $L_q(\theta)$ である．このとき，次の定理が成り立つ [11].

命題 5 （***Gauss* の誤差法則の拡張**）任意に固定した $x_1, x_2, \cdots, x_n \in \mathbb{R}$ に対して，θ の関数 $L_q(\theta)$ が

$$\theta = \theta^* := \frac{x_1 + x_2 + \cdots + x_n}{n}, \tag{32}$$

において最大値をとるとき，確率密度関数 f は，q-*Gauss* 分布で与えられる．

$$f(e) = \frac{\exp_q(-\beta_q e^2)}{\int \exp_q(-\beta_q x^2)\, dx} \tag{33}$$

ここで，β_q は q に依存した正の定数である．

この証明は，Gauss の誤差法則とほぼ同様にできる [11]．この q-Gauss 分布は，Tsallis エントロピーを分散に関する制約の下で最大化した分布と数式上で一致する [12][13][14].

命題 6 ***(Tsallis* エントロピー最大化による q-*Gauss* 分布の導出*)*** 条件：

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x)\, dx = 1, \tag{34}$$

$$\frac{\int_{-\infty}^{\infty} x^2 (p(x))^q \, dx}{\int_{-\infty}^{\infty} (p(x))^q \, dx} = \sigma^2 \tag{35}$$

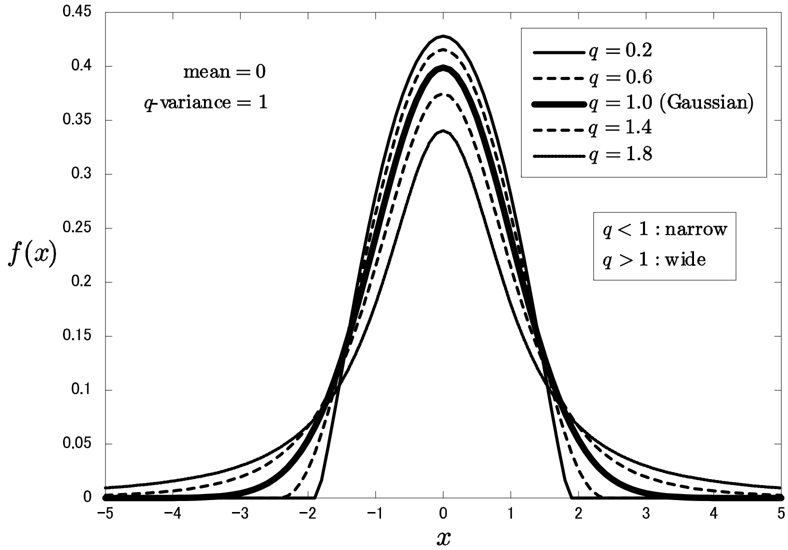

図 1: q-Gauss 分布（平均は 0，エスコート分布による分散 (q-分散) は 1）

のもとで[5]，*Tsallis* エントロピー:

$$S_q = \frac{1 - \int_{-\infty}^{\infty} (p(x))^q \, dx}{q-1} \tag{36}$$

を最大化する確率分布 $p_q(x)$ は

$$p_q(x) = \frac{1}{Z_q}\left(1 - \frac{1-q}{3-q}\frac{x^2}{\sigma^2}\right)^{\frac{1}{1-q}} \tag{37}$$

$$= \frac{1}{Z_q}\exp_q\left(-\frac{x^2}{(3-q)\,\sigma^2}\right) \tag{38}$$

で与えられる．正規化定数 Z_q は，ベータ関数 $B(u,v)$ を用いて次のように計算できる．

$$Z_q := \int_{-\infty}^{\infty}\left(1 - \frac{1-q}{3-q}\frac{x^2}{\sigma^2}\right)^{\frac{1}{1-q}} dx = \begin{cases} \left(\frac{3-q}{q-1}\sigma^2\right)^{\frac{1}{2}} B\left(\frac{3-q}{2(q-1)}, \frac{1}{2}\right) & 1 \le q < 3 \\ \left(\frac{3-q}{1-q}\sigma^2\right)^{\frac{1}{2}} B\left(\frac{2-q}{1-q}, \frac{1}{2}\right) & q < 1 \end{cases} \tag{39}$$

[5]確率分布 $p(x)$ から作られる確率分布：

$$\frac{(p(x))^q}{\int_{-\infty}^{\infty} (p(x))^q \, dx}$$

を，$p(x)$ に対する**エスコート分布**という [15]．通常の期待値の定義の代わりに，エスコート分布による期待値を用いることによって，べき分布の分散の有限性の問題を回避している．このエスコート分布は，マルチフラクタルの分野で頻出する分布 [16] で，8 章で，その関係について述べる．

Gauss の誤差法則の拡張で得られた（33）に対して，上の Tsallis エントロピー最大化で用いた制約（35）を用いれば，

$$\beta_q = \frac{1}{(3-q)\,\sigma^2} \tag{40}$$

と求まり，(38) に一致する．

この q-Gauss 分布は，べき分布の典型的な例を特別な場合として含む．

1. $q=1$ のとき，q-Gauss 分布は，通常の **Gauss 分布**に一致する．
2. $q=1+\frac{2}{n+1}$ のとき，q-Gauss 分布は，自由度 n の t-**分布**に一致する．

$$p_{1+\frac{2}{n+1}}(x) = \frac{1}{\sqrt{n}B\left(\frac{n}{2},\frac{1}{2}\right)\sigma}\left(1+\frac{1}{n}\frac{x^2}{\sigma^2}\right)^{-\frac{n+1}{2}} \tag{41}$$

3. $q=2$ のとき，q-Gauss 分布は，**Cauchy 分布**に一致する．

$$p_2(x) = \frac{1}{\pi\sigma}\left(1+\frac{x^2}{\sigma^2}\right)^{-1} \tag{42}$$

4. $q=-1$ のとき，q-Gauss 分布は，**半円分布**に一致する[6]．

$$p_{-1}(x) = \frac{\sqrt{2}}{\pi\sigma}\sqrt{1-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \tag{43}$$

Tsallis エントロピー最大化による q-Gauss 分布の導出 [12][13][14] は，上の Gauss の誤差法則の拡張以前に求められており，ここではそれとは異なるアプローチ（最尤原理）による一致を見ることができた．つまり，ここで述べた Gauss の誤差法則の拡張により，通常の積（独立性）と Shannon エントロピーの関係は，q-積 $\otimes_q$ と Tsallis エントロピーの関係にも拡張できることがわかった．ただし，Renyi エントロピーも分散に関して同じ条件で最大化することによって，q-Gauss 分布が得られるので，上の結果をもって，Tsallis エントロピーが一般化エントロピーとして妥当であるとは言い難い．実際，ここで述べた Gauss の誤差法則の拡張では，一般化エントロピーを用いていない．また，エントロピー最大化を用いる限り，Tsallis エントロピーも Renyi エントロピーも $\left(\sum_{i=1}^{k} p_i^q\right)^{\frac{1}{1-q}}$ あるいは $\left(\int_{-\infty}^{\infty}(p(x))^q\,dx\right)^{\frac{1}{1-q}}$ の増加関数なので，最大化で得られる分布に違いはない．なお，この Gauss の誤差法則の拡張の結果を受けて，最近，独立な確率変数に対する q-最尤推定量の詳細な性質が報告されている．詳しくは，論文 [20] を参照されたい．

[6] $q=-1$ のときは，$q>0$ の範囲外であるが，ランダム行列理論 [17] の発端であった Wigner の半円分布 [18][19] もまた，q-Gauss 分布によって recover される．

3　q-積から導かれる Tsallis エントロピー

q-指数関数は，Rényi エントロピーあるいは Tsallis エントロピーのような一般化エントロピーの最大化により得られるが，その逆に，q-指数関数あるいはその特徴付けである非線形微分方程式（17）から，q-指数関数に一意に対応する一般化エントロピーが得られる．実は，その一般化エントロピーが Tsallis エントロピーである．本章では，その導出を示すが，そのための指針は，1 章で述べた関係式（10）である．

q-積 $\otimes_q$ を用いて，q-積の階乗である q-階乗 $n!_q$ を定義する [21].

定義 7　（**q-階乗**）自然数 $n \in \mathbb{N}$ と $q > 0$ に対して，

$$n!_q := 1 \otimes_q \cdots \otimes_q n. \tag{44}$$

を q-階乗という．

q-階乗 $n!_q$ に対して，次の q-Stirling の公式が成り立つ [21].

命題 8　（**q-*Stirling* の公式**）十分大きな自然数 $n \in \mathbb{N}$ に対して，次の近似が成り立つ．

$$\ln_q (n!_q) \simeq \begin{cases} \dfrac{n}{2-q} \ln_q n - \dfrac{n}{2-q} + O(\ln_q n) & if \quad q \neq 2, \\ n - \ln n + O(1) & if \quad q = 2. \end{cases} \tag{45}$$

q-積 $\otimes_q$ と同様にして，q-比 $\oslash_q$ は次の等式から定義される [9][10].

$$\exp_q(x) \oslash_q \exp_q(y) = \exp_q(x-y), \tag{46}$$

$$\ln_q(x \oslash_q y) = \ln_q(x) + \ln_q(y). \tag{47}$$

定義 9　（**q-比**）$x^{1-q} - y^{1-q} + 1 > 0$ を満たす $x, y > 0$ に対して，

$$x \oslash_q y := \left[x^{1-q} - y^{1-q} + 1\right]^{\frac{1}{1-q}} \tag{48}$$

を x と y の q-比という．

q-積 $\otimes_q$ と q-比 $\oslash_q$ を用いて，q-多項係数が次のように定義される [21].

定義 10　（**q-多項係数**）$n = \sum_{i=1}^{k} n_i$ と $n_i \in \mathbb{N}$ $(i = 1, \cdots, k)$ に対して，

$$\left[\begin{array}{ccc} & n & \\ n_1 & \cdots & n_k \end{array}\right]_q := (n!_q) \oslash_q \left[(n_1!_q) \otimes_q \cdots \otimes_q (n_k!_q)\right] \tag{49}$$

を q-多項係数という．

先にも述べたように，以上の定式化の目的は，1 章で述べた有名な次の関係式を拡張するためである．

$$\ln \begin{bmatrix} & n & \\ n_1 & \cdots & n_k \end{bmatrix} \simeq nS_1\left(\frac{n_1}{n}, \cdots, \frac{n_k}{n}\right) \tag{50}$$

つまり，（50）の左辺の対数と多項係数は，それぞれ（20）と（49）に拡張されており，Stirling の公式による近似を表す $\simeq$ は,（45）によって q-Stirling の公式として拡張・定式化されている．以上の準備のもと,（50）の左辺の拡張に上記の定式化と近似を使うと，右辺には Tsallis エントロピーが現れる．つまり，出発点の非線形微分方程式（17）$\frac{dy}{dx} = y^q$ に対応するエントロピーは，Tsallis エントロピーであることがわかる [21].

定理 11 （**q-多項係数による *Tsallis* エントロピーの導出**）n が十分に大きいとき，q-多項係数 *(49)* の q-対数から，*Tsallis* エントロピー S_q が導かれる．

$$\ln_q \begin{bmatrix} & n & \\ n_1 & \cdots & n_k \end{bmatrix}_q \simeq \begin{cases} \dfrac{n^{2-q}}{2-q} \cdot S_{2-q}\left(\dfrac{n_1}{n}, \cdots, \dfrac{n_k}{n}\right), & q \neq 2 \text{ のとき}, \\ -S_1(n) + \sum\limits_{i=1}^{k} S_1(n_i), & q = 2 \text{ のとき}. \end{cases} \tag{51}$$

ここで，S_q は ***Tsallis* エントロピー**：

$$S_q(p_1, \cdots, p_k) := \frac{1 - \sum\limits_{i=1}^{k} p_i^q}{q-1}, \tag{52}$$

$S_1(n)$ は,

$$S_1(n) := \ln n. \tag{53}$$

(51) において，Tsallis 統計に頻出する**加法的双対性** $q \leftrightarrow 2-q$ が自然に導かれていることがわかる．実は，上の定式化は，Tsallis 統計の代表的な 4 つの数理を特別な場合として含むように，もう少し一般化できる．それについては 7 章で述べる．

なお，同様の定式化から，(51) の左辺の q-対数 $\ln_q$ の代わりに通常の対数 ln を用いれば，Rényi エントロピーを導けなくもないが，かなり無理があり，(51) のような綺麗な対称性は全く見られない．これにより，q-指数関数の数理から見れば，対応する自然なエントロピーは，Rényi エントロピーではなく Tsallis エントロピーであることが，上の結果からわかる．

4 Shannon-Khinchin の公理系の一般化

前の章で，非線形微分方程式（17）から Tsallis エントロピーが一意に導かれることがわかった．Shannon エントロピーの特徴付けとして，情報理論の分野では，Shannon-Khinchin の公理系がよく知られている [22][23]．これは，1948 年の Shannon の論文の重要な業績の一つである．そこでは，Shannon エントロピーとして満たすべき性質を公理として挙

げ，Shannon エントロピーを一意に定める公理の集まりのことを発見者の名前にちなんで Shannon-Khinchin の公理系と呼んでいる．そこで，Tsallis エントロピーが Shannon エントロピーの 1 パラメータ拡張であることから，Shannon-Khinchin の公理系を 1 パラメータ拡張することによって，Tsallis エントロピーに対する公理系が存在すると期待できる．実際，Tsallis エントロピーは，Shannon-Khinchin の公理系の拡張により定まる一般化エントロピーの最も簡単な場合として導かれる．また，その公理系を構成する公理の中で最も重要な一般化 Shannon 加法性は，前章で定義した q-多項係数からも導かれる．この章では，これらのことを示す．

まず，Shannon-Khinchin の公理系について，簡単に復習しておこう．

Δ_n を n 次元単体とする．

$$\Delta_n := \left\{ (p_1, \ldots, p_n) \in \mathbb{R}^n \,\middle|\, p_i \geq 0,\ \sum_{i=1}^{n} p_i = 1 \right\}. \tag{54}$$

Shannon-Khinchin の公理系は，次の 4 つの公理 [SK1]~[SK4] で構成される．

[SK1] **連続性**: 任意の $n \in \mathbb{N}$ に対して，関数 $S_1(p_1, \cdots, p_n)$ は，$(p_1, \cdots, p_n) \in \Delta_n$ について連続である．

[SK2] **最大性**: 任意の $n \in \mathbb{N}$ に対して，関数 $S_1(p_1, \cdots, p_n)$ は $p_i = \frac{1}{n}\,(i = 1,\ \ldots,\ n)$ のとき，最大値をとる，つまり，任意の $(p_1,\ \ldots,\ p_n) \in \Delta_n$ に対して，

$$S_1(p_1, \cdots, p_n) \leq S_1\left(\frac{1}{n}, \ldots, \frac{1}{n}\right) \tag{55}$$

を満たす．

[SK3] **強加法性 (Shannon 加法性)**:

$$p_{ij} \geq 0,\ \ p_i = \sum_{j=1}^{m_i} p_{ij} \ \ \forall i = 1, \cdots, n, \forall j = 1, \cdots, m_i, \tag{56}$$

のとき，次の等式を満たす．

$$S_1(p_{11}, \cdots, p_{nm_n}) = S_1(p_1, \cdots, p_n) + \sum_{i=1}^{n} p_i S_1\left(\frac{p_{i1}}{p_i}, \cdots, \frac{p_{im_i}}{p_i}\right), \tag{57}$$

[SK4] **展開性**:任意の $(p_1,\ \ldots,\ p_n) \in \Delta_n$ に対して，

$$S_1(p_1, \ldots, p_n, 0) = S_1(p_1, \ldots, p_n). \tag{58}$$

を満たす．

このとき，次の一意性定理が成り立つ．

定理 12 $S_1(p_1, \cdots, p_n)$ を任意の自然数 $n \in \mathbb{N}$ と任意の $(p_1,\ \ldots,\ p_n) \in \Delta_n$ に対して定義される関数とする．$S_1(p_1, \cdots, p_n)$ が *[SK1]~[SK4]* を満たすとき，$S_1(p_1, \cdots, p_n)$ は，一意に次の関数に定まる．

$$S_1(p_1, \cdots, p_n) = -k \sum_{i=1}^{n} p_i \ln p_i, \tag{59}$$

ここで，k は正の定数である．

このShannonエントロピーの一意性定理の証明は，やや詳しい情報理論の書籍などに記載されているので，省略する．

情報理論では，いくつかの加法性が現れる．特に，強加法性（57）は，以後，特に重要になるので，ここでは，改めて**Shannon加法性**と呼ぶことにする．

以上の準備のもと，Tsallisエントピーを特別な場合として含む一般化エントロピーに対する公理系を示す．Shannon-Khinchinの公理系との違いは，(57)の右辺の第2項の各S_qの重みp_iがp_i^qに一般化された部分だけである[7]．

一般化Shannon-Khinchinの公理系は，次の4つの公理[GSK1]∼[GSK4]で構成される．

[GSK1] **連続性**: 任意の$n \in \mathbb{N}$に対して，関数$S_q(p_1, \cdots, p_n)$は，$q > 0$と$(p_1, \cdots, p_n) \in \Delta_n$について連続である．

[GSK2] **最大性**: 任意の$n \in \mathbb{N}$と任意の$q \in \mathbb{R}^+$に対して，関数$S_q(p_1, \cdots, p_n)$は$p_i = \frac{1}{n}\,(i = 1, \ldots, n)$のとき，最大値をとる，つまり，任意の$(p_1, \ldots, p_n) \in \Delta_n$に対して，

$$S_q(p_1, \cdots, p_n) \le S_q\left(\frac{1}{n}, \ldots, \frac{1}{n}\right) \tag{60}$$

を満たす．

[GSK3] **一般化Shannon加法性**:条件（56）のもと，次の等式を満たす．

$$S_q(p_{11}, \cdots, p_{nm_n}) = S_q(p_1, \cdots, p_n) + \sum_{i=1}^{n} p_i^q S_q\left(\frac{p_{i1}}{p_i}, \cdots, \frac{p_{im_i}}{p_i}\right), \tag{61}$$

[GSK4] **展開性**:任意の$(p_1, \ldots, p_n) \in \Delta_n$に対して，

$$S_q(p_1, \ldots, p_n, 0) = S_q(p_1, \ldots, p_n). \tag{62}$$

を満たす．

このとき，次の一意性定理が成り立つ[24]．

定理 13 Δ_nを*(54)*で定義されるn次元単体とする．このとき，公理系*[GSK1]∼[GSK4]*を満たす$S_q : \Delta_n \to \mathbb{R}^+$として，一意に次の関数に定まる．

$$S_q(p_1, \ldots, p_n) = \frac{1 - \sum_{i=1}^{n} p_i^q}{\phi(q)}, \tag{63}$$

[7]独立な2つの確率変数X, Yに対して，あるエントロピー$S(X)$が加法性を満たさないとき，つまり，$S(X, Y) \ne S(X) + S(Y)$のとき，そのエントロピーSを**非加法的エントロピー**という．Tsallisエントロピーの定義（52）より，TsallisエントロピーS_qは，独立な2つの確率変数X, Yに対して，

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

が成り立つことを容易に確認できる．つまり，Tsallisエントロピーは，非加法的エントロピーの代表例である．なお，Tsallisエントロピーの上の性質を**擬加法性**と呼ぶこともある．

ここで，$\phi(q)$ は，次の性質 *(i)*〜*(iv)* を満たす．

$$\textit{(i)}\ \phi(q)\text{ は連続で,}q-1\text{ と同じ符号をもつ，つまり}\phi(q)(q-1)>0\quad(q\neq 1), \tag{64}$$

$$\textit{(ii)}\ \lim_{q\to 1}\phi(q)=\phi(1)=0,\quad \phi(q)\neq 0\quad(q\neq 1), \tag{65}$$

(iii) $a<1<b$ を満たす開区間 $(a,b)\subset\mathbb{R}^+$が存在して，

$$\phi(q)\text{ が }(a,1)\cup(1,b)\text{ において微分可能}, \tag{66}$$

$$\textit{(iv)}\ \lim_{q\to 1}\frac{d\phi(q)}{dq}=\frac{1}{k}>0\text{ を満たす }k>0\text{ が存在する}. \tag{67}$$

この非加法的エントロピーの一意性定理の証明は，上の Shannon エントロピーの一意性定理の証明とは大きく異なるが，証明の詳細は，論文 [24] を参照していただきたい．

ここで，$\phi(q)$ は，(64)〜(67) を満たす関数という意味で，一般性をもつ．実際，非加法的エントロピーとして，Tsallis エントロピー (52) 以外にも，Tsallis エントロピーとほぼ等価な一般化エントロピーがいくつか知られており，それらは，いずれも (64)〜(67) を満たす．たとえば，Havrda-Charvat-Daróczi エントロピー [25][26] は，

$$\phi(q)=1-2^{1-q},\quad k=1 \tag{68}$$

の場合である[8]．そのなかでも，Tsallis エントロピーは，(67) の極限操作 $\lim_{q\to 1}$ を取り除くと得られる．つまり，

$$\frac{d\phi(q)}{dq}=\frac{1}{k} \tag{69}$$

のとき，Tsallis エントロピーに定まる．その意味において，Tsallis エントロピーは，上の公理系を満たす一般化エントロピーの最も簡潔な形であると言える．

2 つの離散確率変数 X,Y が独立であるとき，上の一意性定理で得られた (63) は，次の加法性を満たすことが容易にわかる．

$$S_q(X,Y)=S_q(X)+S_q(Y)-\phi(q)\,S_q(X)\,S_q(Y). \tag{70}$$

つまり，この一般化公理系を満たすエントロピーは，先に述べた非加法的エントロピーである．なお，Tsallis エントロピーの性質として，独立な 2 つの確率変数 X,Y に対して成り立つ

$$S_q(X,Y)=S_q(X)+S_q(Y)+(1-q)\,S_q(X)\,S_q(Y) \tag{71}$$

が擬加法性として知られているが,（70）において，Tsallis エントロピーの場合の $\phi(q)=q-1$ とおけば得られるように，擬加法性は，一般化 Shannon 加法性 (61) の直接的な帰結である．また，この擬加法性 (71) は物理的には加法的でないという意味で重要な性質であるものの，数学的には一般化 Shannon 加法性 (61) の方が次の意味ではるかに重要である．

[8] Havrda-Charvat-Daróczi エントロピーは，Tsallis エントロピーと酷似しているが，これらは情報数学の分野において，Shannon エントロピーの一般化として導入され，統計力学の一般化に使われることはなかった．その点が，Tsallis エントロピーと異なる点である．実際，$\phi(q)=1-2^{1-q}$ における 2 は，情報のビット（bit）に由来している．

1. q-多項係数（49）から，一般化 Shannon 加法性が導かれる [6].
2. Jackson の q-微分による Leibniz の規則から，一般化 Shannon 加法性が導かれる [27][29].

上で挙げたいずれの場合でも，一般化 Shannon 加法性は中心的な役割を演じている．その意味において，本節で述べた公理系が重要であることが最近になってわかってきた[9].

ここで，q-多項係数（49）から，一般化 Shannon 加法性が導かれることを示しておく [6].

十分大きな自然数 $n \in \mathbb{N}$ を k 個のグループに分割することを考える．つまり，

$$n = \sum_{i=1}^{k} n_i. \tag{72}$$

さらに，各 $n_i \in \mathbb{N}$ $(i = 1, \cdots, k)$ を m_i 個のグループに分ける．つまり，

$$n_i = \sum_{j=1}^{m_i} n_{ij}. \tag{73}$$

このような 2 段階の分割の様子は，次の図 2 で表される．

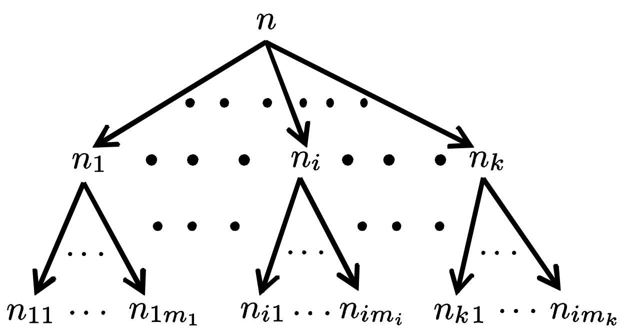

図 2: 自然数 n の分割

このとき，多項係数 $\begin{bmatrix} & n & \\ n_{11} & \cdots & n_{km_k} \end{bmatrix}$ について，次の等式が成り立つことは，実際に計算してみれば容易にわかる．

$$\begin{bmatrix} & n & \\ n_{11} & \cdots & n_{km_k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & n & \\ n_1 & \cdots & n_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} & n_1 & \\ n_{11} & \cdots & n_{1m_1} \end{bmatrix} \cdots \begin{bmatrix} & n_k & \\ n_{k1} & \cdots & n_{km_k} \end{bmatrix} \tag{74}$$

この等式（74）は，左辺が，n を $n_{11}, \cdots, n_{km_k}$ に分割する組み合わせの数を表しており，右辺の最初の項 $\begin{bmatrix} & n & \\ n_1 & \cdots & n_k \end{bmatrix}$ が第 1 段階の分割（72）の組み合わせの数，それ以外の

[9]本節の公理系の論文を著者が IEEE.Trans.Inf.Theo. に投稿した 2002 年 8 月の時点では，まだ，q-積の定義は，発表されていなかった（q-積の定義が発表されたのは，2003 年 4 月）．もちろん，2002 年当時，q-積を使って定義された q-多項係数もまだ定式化されていなかった．一般化 Shannon 加法性の重要性がわかったのは最近（2006 年以降）のことであり，今後も増えることが予想される．

各項 $\begin{bmatrix} & n_1 & \\ n_{i1} & \cdots & n_{im_i} \end{bmatrix}$ $(i=1,\cdots,k)$ が第 2 段階の各分割（73）の組み合わせの数を表している．これより, (74) の両辺の対数をとると,

$$\ln \begin{bmatrix} & n & \\ n_{11} & \cdots & n_{km_k} \end{bmatrix} = \ln \begin{bmatrix} & n & \\ n_1 & \cdots & n_k \end{bmatrix} + \sum_{i=1}^{k} \ln \begin{bmatrix} & n_i & \\ n_{i1} & \cdots & n_{im_i} \end{bmatrix} \tag{75}$$

を得る．これと同様に，q-多項係数に関しても,

$$\ln_q \begin{bmatrix} & n & \\ n_{11} & \cdots & n_{km_k} \end{bmatrix}_q = \ln_q \begin{bmatrix} & n & \\ n_1 & \cdots & n_k \end{bmatrix}_q + \sum_{i=1}^{k} \ln_q \begin{bmatrix} & n_i & \\ n_{i1} & \cdots & n_{im_i} \end{bmatrix}_q \tag{76}$$

が成り立つ．実際, (49) を代入すれば, (76) を容易に確かめることができる．ここで，q-多項係数と Tsallis エントロピーの 1 対 1 関係（51）を適用することを考える. (51) より, $q \neq 2$ のとき,

$$\ln_q \begin{bmatrix} & n & \\ n_1 & \cdots & n_k \end{bmatrix}_q \simeq \frac{n^{2-q}}{2-q} \cdot S_{2-q}\left(\frac{n_1}{n},\cdots,\frac{n_k}{n}\right) \tag{77}$$

であったので，これを（76）に代入すると,

$$S_{2-q}\left(\frac{n_{11}}{n},\cdots,\frac{n_{km_k}}{n}\right) = S_{2-q}\left(\frac{n_1}{n},\cdots,\frac{n_k}{n}\right) + \sum_{i=1}^{k}\left(\frac{n_i}{n}\right)^{2-q} S_{2-q}\left(\frac{n_{i1}}{n_i},\cdots,\frac{n_{im_i}}{n_i}\right) \tag{78}$$

が得られる．ここで，図 2 より，確率：

$$p_{ij} := \frac{n_{ij}}{n} \quad (i=1,\cdots,k, \quad j=1,\cdots,m_k), \tag{79}$$

$$p_i := \sum_{j=1}^{m_i} p_{ij} = \sum_{j=1}^{m_i} \frac{n_{ij}}{n} = \frac{n_i}{n} \quad \left(\because n_i = \sum_{j=1}^{m_i} n_{ij}\right), \tag{80}$$

を定義すると，(78) は,

$$S_q\left(p_{11},\cdots,p_{km_k}\right) = S_q\left(p_1,\cdots,p_k\right) + \sum_{i=1}^{k} p_i^q S_q\left(\frac{p_{i1}}{p_i},\cdots,\frac{p_{im_i}}{p_i}\right). \tag{81}$$

となる．これは，先の一般化公理系で用いた [GSK3] 一般化 Shannon 加法性 (61) に他ならない．つまり，q-多項係数から一般化 Shannon 加法性が導かれる．

5 Csiszár タイプの Tsallis 相対エントロピーと α-ダイバージェンス

ここまでは，出発点の非線形微分方程式（17）$\frac{dy}{dx} = y^q$ から Tsallis エントロピーが自然に導かれることを示してきたが，Tsallis 相対エントロピーも同様に導くことができる．そ

の中でも，Csiszár タイプの Tsallis 相対エントロピーは，情報幾何で頻出する α-ダイバージェンスと綺麗な一致を見ることができる．この章では，そのことを見ておく．

Csiszár タイプの相対エントロピー（ダイバージェンス）とは，次で定義される f-ダイバージェンスのことである [30][31].

定義 14 (f-ダイバージェンス) 関数 $f:\mathbb{R}^+\to\mathbb{R}$ が凸関数で $f(1)=0$ を満たすとする．このとき，*2* つの確率分布 $\{p_i\},\{\bar{p}_i\}\ (i=1,\cdots,k)$ に対して，

$$D_f(p\,\|\bar{p}) := \sum_{i=1}^{k} p_i f\left(\frac{\bar{p}_i}{p_i}\right) \tag{82}$$

を f-**ダイバージェンス（*f-divergence*）**という．なお，

$$0f\left(\frac{0}{0}\right) := 0,\quad f(0) := \lim_{t\to 0} f(t),\quad 0f\left(\frac{a}{0}\right) := \lim_{t\to 0} t f\left(\frac{a}{t}\right) \tag{83}$$

と定める．

f-ダイバージェンスもまた次の重要な性質を満たす．

命題 15 (f-ダイバージェンスの性質) 関数 $f:\mathbb{R}^+\to\mathbb{R}$ が凸関数で $f(1)=0$ を満たすとする．f-ダイバージェンスについて，次の性質が成り立つ．

1. 任意の確率分布 $\{p_i\},\{\bar{p}_i\}\ (i=1,\cdots,k)$ に対して，

$$D_f(p\,\|\bar{p}) \geq 0, \tag{84}$$

2.

$$D_f(p\,\|\bar{p}) = 0 \text{ ならば}, p_i = \bar{p}_i\ (i=1,\cdots,k). \tag{85}$$

f-ダイバージェンスは, KL ダイバージェンスはもちろんのこと，Pearson 距離，Hellinnger 距離，変動距離など様々なダイバージェンスを特別な場合として含むことが知られている．そして，Tsallis の相対エントロピーもまた，その一例である[10].

まず，Tsallis エントロピー S_q は,

$$S_q(p_1,\cdots,p_k) := \frac{1-\sum_{i=1}^{k} p_i^q}{q-1} = -\sum_{i=1}^{k}\left(\frac{p_i^q - p_i}{q-1}\right) \tag{86}$$

と表されるので，f-ダイバージェンスにおける関数 f として,

$$f(x) := \frac{x^q - x}{q-1} \tag{87}$$

をとる[11]．これより，Csiszár タイプの Tsallis 相対エントロピーは，次のように与えられる．

---

[10] Tsallis 相対エントロピーは，1998 年に Tsallis 自身によって初めて導入された [32][33]．それらの論文では，Tsallis エントロピーのアナロジーから導入されており，f-ダイバージェンスとしての観点はなかったが，実際には，f-ダイバージェンスのひとつである．

[11] これは，q-対数関数 $\ln_q$ を用いて，$f(x) = x\ln_{2-q}x = x^q\ln_q x$ とも表される．

定義 16 (Csiszár タイプの Tsallis 相対エントロピー) 関数 $f:\mathbb{R}^+\to\mathbb{R}$ として，

$$f(x) := \frac{x^q - x}{q-1} \tag{88}$$

とおくと，f は $f(1)=0$ を満たす凸関数である．このときの f-ダイバージェンス：

$$D_q^{Csisz\acute{a}r}(p\,\|r) := D_f(r\,\|p) = \sum_{i=1}^{k} r_i f\left(\frac{p_i}{r_i}\right) = \frac{1-\sum\limits_{i=1}^{k} p_i^q r_i^{1-q}}{1-q} \tag{89}$$

を ***Csiszár* タイプの *Tsallis* 相対エントロピー**という．

この Csiszár タイプの Tsallis 相対エントロピーの性質については，基本的に，f-ダイバージェンスのそれに準じるが，詳しくは，論文 [34][35] を参照されたい．

ここで，参照確率分布 r として，等確率の分布 $r_i=\frac{1}{k}$ をとると，

$$D_q^{\mathrm{Csisz\acute{a}r}}(p\,\|r) = k^{q-1}\left(\ln_q k - S_q(p)\right) \tag{90}$$

となるので，このとき，Tsallis エントロピー最大化は，Tsallis 相対エントロピー最小化を表すことがわかる．

この Csiszár タイプの Tsallis 相対エントロピーの最も直接的な応用は，**情報幾何**[36] であろう．その理論展開において，α-接続と呼ばれる双対接続に関連して，確率分布間の近さを表す α-ダイバージェンスという，f-ダイバージェンスが導入される．α-ダイバージェンスにおける凸関数 f の定義は，次で与えられる．

$$f_\alpha(x) := \begin{cases} \frac{4}{1-\alpha^2}\left(1-x^{\frac{1+\alpha}{2}}\right), & \alpha \neq \pm 1, \\ x\log x, & \alpha = 1, \\ -\log x, & \alpha = -1. \end{cases} \tag{91}$$

このとき，f-ダイバージェンスの定義に従い，α-ダイバージェンス $D^{(\alpha)}(p\,\|r)$ は次のように定義される．

$$D^{(\alpha)}(p\,\|r) := \begin{cases} \frac{4}{1-\alpha^2}\left(1-\sum\limits_{i=1}^{k} p_i^{\frac{1-\alpha}{2}} r_i^{\frac{1+\alpha}{2}}\right), & \alpha \neq \pm 1, \\ \sum_{i=1}^{k} r_i \ln\frac{r_i}{p_i} & \alpha = 1, \\ \sum_{i=1}^{k} p_i \ln\frac{p_i}{r_i} & \alpha = -1. \end{cases} \tag{92}$$

なお，α-ダイバージェンス $D^{(\alpha)}(p\,\|r)$ について一般的に次のような双対性が成り立つ．

$$D^{(\alpha)}(p\,\|r) = D^{(-\alpha)}(r\,\|p) \tag{93}$$

（89）と $\alpha\neq\pm1$ のときの α-ダイバージェンス（92）を比べてればわかるように，非常に似ている．実際,（92）において，

$$q = \frac{1-\alpha}{2} \quad (\alpha \neq \pm 1) \tag{94}$$

とおくと，α-ダイバージェンスと Csiszár タイプの Tsallis 相対エントロピーの間には，次の綺麗な関係があることが容易にわかる．

$$D^{(\alpha)}(p\,\|r) = \frac{1}{q} D_q^{\mathrm{Csisz\acute{a}r}}(p\,\|r) \quad (q \neq 0,1) \tag{95}$$

情報幾何に関連して，Csiszár タイプの Tsallis 相対エントロピーの応用については，[37] を参照されたい．また，Tsallis 相対エントロピーとして，Bregman タイプの Tsallis 相対エントロピーも導入されており [38]，その情報幾何における応用も最近発表されている [39].

6　Tsallis 分布と物理的温度

Tsallis エントロピーを最大化することによって得られる分布を一般に **Tsallis 分布**というが，ここでは，その典型例である期待値一定の条件下における Tsallis 分布を求めておく [40][41]．これはちょうど，1 章で述べたカノニカル分布の拡張になっており，これより温度が定義できる．

問題 17 条件：

$$\sum_{i=1}^{n} p_i = 1, \tag{96}$$

$$\frac{\sum_{i=1}^{n} p_i^q \varepsilon_i}{\sum_{j=1}^{n} p_j^q} = U_q \tag{97}$$

のもとで，*Tsallis* エントロピー*:*

$$S_q(p_1, \cdots, p_n) = -\sum_{i=1}^{n} p_i^q \ln_q p_i \tag{98}$$

を最大化する確率分布 $p_i^{(e)}$ を求めよ．

この最適化問題は重要かつ多くの誤謬があるので，展開の過程を省かずに，やや詳細に述べる[12]．以下の展開で注意すべき点は，p_i について展開するのではなく，$\ln_q p_i$ について展開する点である．そのために，Tsallis エントロピーとして，もともとの形の（52）ではなく,（52）と等価な (98) の形を使う．Shannon エントロピーの最大化の場合と違って，今まで述べてきた数理を意識した，やや技巧的な変形が必要になる．具体的には，先に述べた q-積の代数により，q-対数をとった $\ln_q p_i$ を中心に展開した方が見通しがよくなる．

解法　ラグランジェの未定乗数法を使う．Φ_q を p_i, α, β の関数として，次のように定義する．

$$\Phi_q(p_i, \alpha, \beta) := -\sum_{i=1}^{n} p_i^q \ln_q p_i - \alpha\left(\sum_{i=1}^{n} p_i - 1\right) - \beta\frac{\sum_{i=1}^{n} p_i^q(\varepsilon_i - U_q)}{\sum_{j=1}^{n} p_j^q} \tag{99}$$

[12] 本来ならば，拘束条件によって定まる領域の端点の処理など，もっと詳細な導出が必要であるが，膨大な分量になるので，ここでは省略した．

ラグランジェの未定乗数法にしたがって，Φ_q を p_i, α, β について微分する．

$$\frac{\partial \Phi_q\left(p_i, \alpha, \beta\right)}{\partial p_i} = -q p_i^{q-1} \ln_q p_i - 1 - \alpha - \beta \frac{q p_i^{q-1}\left(\varepsilon_i - U_q\right)}{\sum_{j=1}^{n} p_j^q} = 0, \tag{100}$$

$$\frac{\partial \Phi_q\left(p_i, \alpha, \beta\right)}{\partial \alpha} = 1 - \sum_{i=1}^{n} p_i = 0, \tag{101}$$

$$\frac{\partial \Phi_q\left(p_i, \alpha, \beta\right)}{\partial \beta} = -\frac{\sum_{i=1}^{n} p_i^q\left(\varepsilon_i - U_q\right)}{\sum_{j=1}^{n} p_j^q} = 0. \tag{102}$$

(100) の計算結果に (102) を用いた．(100) を $\ln_q p_i$ についてまとめると，次のように整理できる．

$$\ln_q p_i = \left(\frac{-1-\alpha}{q}\right) p_i^{1-q} - \beta \frac{\left(\varepsilon_i - U_q\right)}{\sum_{j=1}^{n} p_j^q} \tag{103}$$

次に，この右辺第 2 項以外を $\ln_q p_i$ でまとめるように整理する．

$$\frac{q + (1+\alpha)(1-q)}{q} \frac{p_i^{1-q}}{1-q} = \frac{1}{1-q} - \beta \frac{\left(\varepsilon_i - U_q\right)}{\sum_{j=1}^{n} p_j^q} \tag{104}$$

$$\frac{q + (1+\alpha)(1-q)}{q} \ln_q p_i = \frac{-(1+\alpha)}{q} - \beta \frac{\left(\varepsilon_i - U_q\right)}{\sum_{j=1}^{n} p_j^q} \tag{105}$$

これより，$\ln_q p_i$ は，次のように求まる．

$$\ln_q p_i = \frac{q}{q + (1+\alpha)(1-q)} \left(\frac{-(1+\alpha)}{q} - \beta \frac{\left(\varepsilon_i - U_q\right)}{\sum_{j=1}^{n} p_j^q}\right) \tag{106}$$

$$= C_q - \beta_q \frac{\left(\varepsilon_i - U_q\right)}{\sum_{j=1}^{n} p_j^q} \tag{107}$$

ここで，C_q と β_q は，次のように定義した．

$$C_q := \frac{-(1+\alpha)}{q + (1+\alpha)(1-q)}, \tag{108}$$

$$\beta_q := \frac{q}{q + (1+\alpha)(1-q)} \beta. \tag{109}$$

(107) より，p_i は C_q, β_q を用いて次のように表される．

$$p_i = \exp_q\left[C_q - \beta_q \frac{\left(\varepsilon_i - U_q\right)}{\sum_{j=1}^{n} p_j^q}\right] = \left(1 + (1-q)\left(C_q - \beta_q \frac{\left(\varepsilon_i - U_q\right)}{\sum_{j=1}^{n} p_j^q}\right)\right)^{\frac{1}{1-q}} \tag{110}$$

$$= \left(1 + (1-q) C_q\right)^{\frac{1}{1-q}} \left(1 + (1-q)\left(-\beta_q \frac{\left(\varepsilon_i - U_q\right)}{\left(1 + (1-q) C_q\right) \sum_{j=1}^{n} p_j^q}\right)\right)^{\frac{1}{1-q}} \tag{111}$$

$$= \exp_q\left(C_q\right) \exp_q\left(-\beta_q \frac{\left(\varepsilon_i - U_q\right)}{\left(\exp_q\left(C_q\right)\right)^{1-q} \sum_{j=1}^{n} p_j^q}\right) \tag{112}$$

(112) を条件 (101) に代入する.

$$
\begin{aligned}
1 = \sum_{i=1}^{n} p_i &= \exp_q\left(C_q\right) \sum_{i=1}^{n} \exp_q\left(-\beta_q \frac{\left(\varepsilon_i - U_q\right)}{\left(1+(1-q)\,C_q\right)\sum_{j=1}^{n} p_j^q}\right) && (113)\\
&= \left(\exp_q\left(C_q\right)\right)^{1-q} \sum_{i=1}^{n} \left(\exp_q\left(C_q\right)\right)^{q} \left(1+(1-q)\left(-\beta_q \frac{\left(\varepsilon_i - U_q\right)}{\left(1+(1-q)\,C_q\right)\sum_{j=1}^{n} p_j^q}\right)\right)^{\frac{q}{1-q}} && (114)\\
&\times \left(1+(1-q)\left(-\beta_q \frac{\left(\varepsilon_i - U_q\right)}{\left(1+(1-q)\,C_q\right)\sum_{j=1}^{n} p_j^q}\right)\right) \qquad \left(\because \frac{1}{1-q} = \frac{q}{1-q}+1\right) && (115)\\
&= \left(\exp_q\left(C_q\right)\right)^{1-q} \sum_{i=1}^{n} p_i^q \left(1+(1-q)\left(-\beta_q \frac{\left(\varepsilon_i - U_q\right)}{\left(1+(1-q)\,C_q\right)\sum_{j=1}^{n} p_j^q}\right)\right) \qquad (\because (112)) && (116)\\
&= \left(\exp_q\left(C_q\right)\right)^{1-q} \sum_{i=1}^{n} p_i^q \qquad \left(\because \frac{\sum_{i=1}^{n} p_i^q\left(\varepsilon_i - U_q\right)}{\sum_{j=1}^{n} p_j^q} = 0 \quad \text{あるいは} \quad (102)\right). && (117)
\end{aligned}
$$

この最後の式 (117) を (112) に代入すると,

$$
p_i = \exp_q\left(C_q\right) \exp_q\left(-\beta_q\left(\varepsilon_i - U_q\right)\right). \tag{118}
$$

と求まる．ここで，$\exp_q\left(C_q\right)$ を次のように書き換えると,

$$
Z_q^{(e)}\left(\beta_q\right) := \frac{1}{\exp_q\left(C_q\right)}. \tag{119}
$$

(117) より，次を得る.

$$
\sum_{i=1}^{n} \left(p_i^{(e)}\right)^q = \left(Z_q^{(e)}\left(\beta_q\right)\right)^{1-q} \tag{120}
$$

さらに，(118) と (119) より，求めたかった最適分布は，次のように与えられる.

$$
p_i^{(e)} = \frac{1}{Z_q^{(e)}\left(\beta_q\right)} \exp_q\left(-\beta_q\left(\varepsilon_i - U_q\right)\right) \tag{121}
$$

ここで， (118) における p_i を記号を，$p_i^{(e)}$ に置き換えた.

以上をまとめると，条件 (96) と（97）のもとで，Tsallis エントロピーを最大化する確率分布は,

$$
p_i^{(e)} = \frac{1}{Z_q^{(e)}} \exp_q\left(-\beta_q\left(\varepsilon_i - U_q\right)\right) \tag{122}
$$

で与えられる．ここで，$Z_q^{(e)}$ は一般化分配関数を表す.

$$
Z_q^{(e)} := \sum_{i=1}^{n} \exp_q\left(-\beta_q\left(\varepsilon_i - U_q\right)\right), \tag{123}
$$

また，β_q は，先の計算中で定めたように，

$$\beta_q := \frac{q}{q+(1+\alpha)(1-q)}\beta \tag{124}$$

で定義され，α は確率の正規化の条件 (96) に対するラグランジェ未定係数である．

ここで，この結果は，Tsallis 統計力学でよく知られている結果と異なるので，コメントしておく必要があろう．Tsallis 統計力学は，当初，Tsallis エントロピーの最大化原理を基礎にしていた．そのため，Tsallis エントロピー最大化は，多くの論文で取り上げられている．そのなかでも代表的な論文が，1998 年の Tsallis らの論文である [42]．しかし，それら論文のほとんどが，自己参照型の結果になってしまっている．具体的には，(104) より，

$$\left(\frac{q+(1+\alpha)(1-q)}{q}\right)^{\frac{1}{1-q}} p_i = \left(1-(1-q)\frac{\beta}{\sum_{j=1}^{n} p_j^q}(\varepsilon_i - U_q)\right)^{\frac{1}{1-q}} \tag{125}$$

と求まるので，これより，

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{1}{\bar{Z}_q}\left(1-(1-q)\frac{\beta}{\sum_{j=1}^{n} p_j^q}(\varepsilon_i - U_q)\right)^{\frac{1}{1-q}} && (126) \\ &= \frac{1}{\bar{Z}_q}\exp_q\left(-\frac{\beta}{\sum_{j=1}^{n} p_j^q}(\varepsilon_i - U_q)\right) && (127) \end{aligned}$$

と表している点である．$\bar{Z}_q$ は正規化定数，つまり，$\bar{Z}_q$ は先の（123）とは異なる一般化分配関数：

$$\bar{Z}_q := \sum_{i=1}^{n}\left(1-(1-q)\frac{\beta}{\sum_{j=1}^{n} p_j^q}(\varepsilon_i - U_q)\right)^{\frac{1}{1-q}} \tag{128}$$

である．この (127) は，1998 年の Tsallis らの論文 [42] の式 (23) そのものである．一見，(127) は解のように見えるが，右辺にも p_i が入っているため，一般に一意な表現ではない．このような自己参照型の式は，単なる式変形の結果であり，表現が幾通りもある．この場合，たまたま一意な解（122）と (127) が，両方とも q-指数関数の形になっているために，形の上で整合性をもつ．実際，その整合性は，次のように示すことができる．

(100) に p_i をかけて i について和を取り，整理すると，

$$\sum_{i=1}^{n} p_i^q = \frac{q+(1-q)(1+\alpha)}{q}.$$

したがって，(127) における自己参照の部分は，

$$\frac{\beta}{\sum_{j=1}^{n} p_j^q} = \frac{q}{q+(1-q)(1+\alpha)}\beta = \beta_q \tag{129}$$

となり，(124) の β_q に等しくなる．その意味において，(122）と (127) は等しい．これは，（122）が一意な解であるから，当然の整合性である．さらに，自己参照型の表現では，そ

もそも微分できない．実際，次に述べるような U_q で微分する場合，p_j が U_q に依存するために微分できない[13].

さて，(124) の β_q は，$q \to 1$ のとき，$\beta_q \to \beta$ となる．$q=1$ のとき，1 章の初めで述べたように，β は絶対温度 T の逆数に比例する重要な量である（逆温度とも呼ばれる）．

$$\beta = \frac{1}{T} \tag{130}$$

ただし，この章の最後の擬加法性に関する議論との混乱を避けるため，Boltzmann 定数 $k_B = 1$ とおいた．この β に対して，β_q は何を表しているのかということを述べておく．

（120）より,（122）に対する Tsallis エントロピーは,

$$S_q\left(p_i^{(e)}\right) = \ln_q Z_q^{(e)}. \tag{131}$$

である．$q=1$ のときの Boltzmann-Gibbs 統計力学において，重要な熱力学的関係式（温度の定義）として,

$$\frac{\partial S_1\left(p_i^{(e)}\right)}{\partial U_1} = \frac{1}{T} \tag{132}$$

がよく知られている．そこで，この拡張として,（131）を用いて，$\frac{\partial S_q(p_i^{(e)})}{\partial U_q}$ を計算すると，次を得る．

$$\frac{\partial S_q\left(p_i^{(e)}\right)}{\partial U_q} = \frac{\partial}{\partial U_q}\ln_q Z_q^{(e)}\left(\beta_q\right) = \beta_q \sum_{i=1}^{n}\left(p_i^{(e)}\right)^q \tag{133}$$

$$= \beta_q\left(1 + (1-q)\,S_q\left(p_i^{(e)}\right)\right) \tag{134}$$

したがって，T_q を β_q で次のように定義すると,

$$T_q := \frac{1}{\beta_q}, \tag{135}$$

T_q は次のように表される [41].

$$T_q = \left(1 + (1-q)\,S_q\left(p_i^{(e)}\right)\right)\left(\frac{\partial S_q\left(p_i^{(e)}\right)}{\partial U_q}\right)^{-1}. \tag{136}$$

さて，上で導いた T_q は，全く別の方法で導かれている物理的温度 [43] と言われる温度と式の上で一致する．

その別の方法とは，Tsallis エントロピーの擬加法性 (71) の仮定から始まる．以下，統計力学で慣れ親しんだ表記を使うため，擬加法性 (71) で使われている文字 X, Y を系 A, B に書き換えて，話を進める．

[13] (127) が記載されている文献では，$\sum_{j=1}^{n} p_j^q$ を U_q に依存しない定数と仮定して微分をおこなっている．

Tsallis エントロピーの擬加法性:

$$S_q(A,B) = S_q(A) + S_q(B) + (1-q)\,S_q(A)\,S_q(B) \tag{137}$$

は，2 つの系 A, B が独立な場合に成り立つ．本章で述べた Tsallis エントロピー最大化問題において，(97) の U_q は内部エネルギーと言われる定数である．そこで，2 つの系 A, B からなる全体系において，Tsallis エントロピー $S_q(A,B)$ が U_q 一定のもとで最大であるときに，上の擬加法性が成り立つと仮定する．U_q 一定であるから，系 A の内部エネルギー $U_q(A)$ の変分 $\delta U_q(A)$ と系 B の内部エネルギー $U_q(B)$ の変分 $\delta U_q(B)$ の総和は 0 である．

$$0 = \delta U_q(A,B) = \delta U_q(A) + \delta U_q(B) \tag{138}$$

さらに，Tsallis エントロピー $S_q(A,B)$ も最大であるから，これらの変分 $\delta U_q(A), \delta U_q(B)$ に対して，次が成り立つ．

$$\begin{aligned} 0 &= \delta S_q(A,B) \\ &= (1+(1-q)\,S_q(B))\,\frac{\partial S_q(A)}{\partial U_q(A)}\delta U_q(A) + (1+(1-q)\,S_q(A))\,\frac{\partial S_q(B)}{\partial U_q(B)}\delta U_q(B) \end{aligned} \tag{139}$$

したがって，(138) と (139) より，次が成り立つ．

$$(1+(1-q)\,S_q(A))\left(\frac{\partial S_q(A)}{\partial U_q(A)}\right)^{-1} = (1+(1-q)\,S_q(B))\left(\frac{\partial S_q(B)}{\partial U_q(B)}\right)^{-1}. \tag{140}$$

これは，系 A, B に関わらず不変な量である．そこで，これを**物理的温度**と呼んでいる．これは,（136）と数式上で一致していることがわかる．改めて定義し直すと，物理的温度 T_{phys} とは,

$$T_{\mathrm{phys}} := (1+(1-q)\,S_q)\left(\frac{\partial S_q}{\partial U_q}\right)^{-1} \tag{141}$$

で定義される．ここまででわかるように，両者の導出の方法は，全く異なるにもかかわらず，数式上で完全に一致する．

7 Tsallis 統計の 4 つの数理構造

(51) において，$q \neq 2$ のときは，加法的双対性 $q \leftrightarrow 2-q$ を表している．この加法的双対性以外に，Tsallis 統計では，乗法的双対性 $q \leftrightarrow \frac{1}{q}$ や q-トリプレットなどの関係が知られている.（ただし，著者らが理論的に見つけるまでは，q-トリプレットは数値計算による conjecture であった [45].）そこで，加法的双対性 $q \leftrightarrow 2-q$ が現れている関係 (51) を，乗法的双対性 $q \leftrightarrow \frac{1}{q}$ も表現できるように拡張したところ，q-トリプレットなど，Tsallis 統計力学の代表的な 4 つの数理構造が自然に導かれる [46]．ここでは，その結果だけを簡潔に書いておく．証明については，[46] を参照していただきたい．

定義 18 *((μ,ν)-**階乗**)* $n \in \mathbb{N}$ と $\mu, \nu \in \mathbb{R}$ に対して，(μ,ν)-階乗 $n!_{(\mu,\nu)}$ を次のように定義する．

$$n!_{(\mu,\nu)} := 1^{\nu} \otimes_{\mu} 2^{\nu} \otimes_{\mu} \cdots \otimes_{\mu} n^{\nu}. \tag{142}$$

ただし，$\nu \neq 0$ とする．

定理 19 ((μ,ν)-**Stirling の公式**)

$$\ln_{\mu}\left(n!_{(\mu,\nu)}\right) = \begin{cases} \dfrac{n \ln_{\mu} n^{\nu} - \nu n}{\nu(1-\mu)+1} + O(\ln_{\mu} n) & \textit{if} \quad \nu(1-\mu)+1 \neq 0, \\ \nu(n - \ln n) + O(1) & \textit{if} \quad \nu(1-\mu)+1 = 0. \end{cases} \tag{143}$$

定義 20 *((μ,ν)-**多項係数**)* 自然数 $n_i \in \mathbb{N}$ $(i = 1, \cdots, k)$ と $n = \sum_{i=1}^{k} n_i$ に対して，(μ,ν)-多項係数を (μ,ν)-階乗 *(142)* を用いて次のように定義する．

$$\begin{bmatrix} & n & \\ n_1 & \cdots & n_k \end{bmatrix}_{(\mu,\nu)} := \left(n!_{(\mu,\nu)}\right) \oslash_{\mu} \left[\left(n_1!_{(\mu,\nu)}\right) \otimes_{\mu} \cdots \otimes_{\mu} \left(n_k!_{(\mu,\nu)}\right)\right]. \tag{144}$$

定理 21 ((μ,ν)-**多項係数と Tsallis エントロピー** S_q **の関係**) n が十分大きいとき，(μ,ν)-多項係数の μ-対数は *Tsallis* エントロピー *(52)* に一致する．

$$\frac{1}{\nu} \ln_{\mu} \begin{bmatrix} & n & \\ n_1 & \cdots & n_k \end{bmatrix}_{(\mu,\nu)} \simeq \begin{cases} \dfrac{n^q}{q} \cdot S_q\left(\dfrac{n_1}{n}, \cdots, \dfrac{n_k}{n}\right) & \textit{if} \quad q \neq 0 \\ -S_1(n) + \displaystyle\sum_{i=1}^{k} S_1(n_i) & \textit{if} \quad q = 0 \end{cases} \tag{145}$$

ただし，$\nu \neq 0$,

$$\nu(1-\mu)+1 = q, \tag{146}$$

S_q は *Tsallis* エントロピー *(52)* で，$S_1(n) := \ln n$.

ここで重要なのは，(146) である（これを著者は，(μ,ν,q) **トリプレット**と呼んでいる）．ν の値によって，(145) は，次のような典型的な 4 つの数理構造を特別な場合として含んでいることがわかる．

1. **加法的双対性**：$\nu = 1$ のとき，(μ,ν,q) トリプレット (146) より，μ は次のように与えられる．

   $$\mu = 2 - q. \tag{147}$$

   したがって，このとき，(145) は，

   $$\ln_{2-q} \begin{bmatrix} & n & \\ n_1 & \cdots & n_k \end{bmatrix}_{2-q} \simeq \frac{n^q}{q} \cdot S_q\left(\frac{n_1}{n}, \cdots, \frac{n_k}{n}\right) \tag{148}$$

   となる．これは，(51) において q と $2-q$ を入れ替えたときの式に一致する．つまり，加法的双対性 $q \leftrightarrow 2-q$ を表す．

2. **乗法的双対性**：$\nu = q$ のとき，(μ, ν, q) トリプレット (146) より，μ は次のように与えられる．

$$\mu = \frac{1}{q}. \tag{149}$$

したがって，このとき，(145) は，

$$\ln_{\frac{1}{q}} \begin{bmatrix} & n & \\ n_1 & \cdots & n_k \end{bmatrix}_{\left(\frac{1}{q}, q\right)} \simeq n^q \cdot S_q \left(\frac{n_1}{n}, \cdots, \frac{n_k}{n}\right) \tag{150}$$

となり，乗法的双対性 $q \leftrightarrow \frac{1}{q}$ を表す．つまり，q と $\frac{1}{q}$ を入れ替えても式は成り立つ．

3. q-**トリプレット**：$\nu = 2 - q$ のとき，(μ, ν, q) トリプレット (146) より，μ は次のように与えられる．

$$\mu = \frac{3 - 2q}{2 - q}. \tag{151}$$

したがって，(145) は，

$$\frac{1}{2-q} \ln_{\frac{3-2q}{2-q}} \begin{bmatrix} & n & \\ n_1 & \cdots & n_k \end{bmatrix}_{\left(\frac{3-2q}{2-q}, 2-q\right)} \simeq \frac{n^q}{q} \cdot S_q \left(\frac{n_1}{n}, \cdots, \frac{n_k}{n}\right) \tag{152}$$

となる．このとき，(μ, ν, q) トリプレット (146) は，Tsallis によって数値計算により予想されていた q-**トリプレット**$(q_{\mathrm{sen}}, q_{\mathrm{rel}}, q_{\mathrm{stat}})$ と次の意味で一致する [44][45][46].

$$\mu = \frac{1}{q_{\mathrm{sen}}}, \quad \nu = \frac{1}{q_{\mathrm{rel}}}, \quad q = q_{\mathrm{stat}}. \tag{153}$$

ここで，q-**トリプレット**$(q_{\mathrm{sen}}, q_{\mathrm{rel}}, q_{\mathrm{stat}})$ とは何かを簡単に説明しておこう．Tsallis は，数値計算から Tsallis エントロピー S_q のパラメーター q には 3 種類 $q_{\mathrm{sen}}, q_{\mathrm{rel}}, q_{\mathrm{stat}}$ あると予想し，それらの組を q-トリプレットと名付けた．

q_{sen} の添え字の“sen”は sensitivity を表し，カオスに特徴的に現れる初期値鋭敏性を意味している．1 次元の非線形ダイナミックス $\{x(t) \in \mathbb{R} \,|t \in \mathbb{R}^+\}$ を考える．このとき，時刻 $t = 0$ における値（初期値）のずれを $\Delta x(0)$，時刻 t における値のずれ（差異）を $\Delta x(t)$ とすると，一般に，初期値のずれ $\Delta x(0)$ に対する時刻 t における初期値鋭敏性は，

$$\xi(t) := \lim_{\Delta x(0) \to 0} \frac{\Delta x(t)}{\Delta x(0)} \tag{154}$$

で定義される．この初期値鋭敏性 ξ が

$$\frac{d\xi}{dt} = \lambda_1 \xi \tag{155}$$

を満たすと仮定する．このとき，λ_1 を**リアプノフ指数**という．この微分方程式の解は，上の定義より，$\xi(0) = 1$ に注意すると，

$$\xi(t) = \exp(\lambda_1 t) \tag{156}$$

で表される．つまり，

$$\lim_{\Delta x(0)\to 0}\frac{\Delta x(t)}{\Delta x(0)} = \exp(\lambda_1 t) \tag{157}$$

より，時刻 t における値のずれ（差異）$\Delta x(t)$ が t に対して指数関数的に大きくなるとき，その時定数 λ_1 がリアプノフ指数である．リアプノフ指数は，カオスの指標の１つとして用いられ，$\lambda_1 > 0$ のとき，**カオス**であるという．一般に，n 次元の非線形ダイナミックス $\{x(t) \in \mathbb{R}^n \,|t \in \mathbb{R}^+\}$ では，各次元に対してリアプノフ指数が存在するので，n 個のリアプノフ指数が存在することになる．このような場合，n 個のリアプノフ指数のうち，最大リアプノフ指数が正のとき，カオスであるという．さて，上では，初期値鋭敏性 ξ が線形微分方程式 (155) を満たすという仮定であったが，カオスの縁と呼ばれるカオスの臨界点（$\lambda_1 = 0$）では，$\Delta x(t)$ が t に対してべき関数に従う振る舞いをみせ，指数関数に従わない．そこで，Tsallis らは，(155) の一般化として，本稿の出発点である非線形微分方程式 (17) を用いた．

$$\frac{d\xi}{dt} = \lambda_q \xi^q \tag{158}$$

この非線形微分方程式の解は，$\xi(0) = 1$ に注意すると，

$$\xi(t) = \exp_q(\lambda_q t) \tag{159}$$

と表される．このときの q を Tsallis は，q_{sen} と記した．

次に，q_{rel} の添え字の“rel”は relaxation を表し，物理量の平衡状態への推移を表す．時刻 t における，ある物理量 $O(t)$ に対して，

$$O(\infty) := \lim_{t\to\infty} O(t) \tag{160}$$

と定義し，$O(\infty)$ は有限確定値とする．このとき，$O(t)$ を用いて

$$\Omega(t) := \frac{O(t) - O(\infty)}{O(0) - O(\infty)} \tag{161}$$

と定義する．$\Omega(t)$ が次の微分方程式

$$\frac{d\Omega}{dt} = -\frac{1}{\tau_1}\Omega \tag{162}$$

を満たすと仮定する．このとき，τ_1 を**緩和時間**という．この微分方程式の解は，上の定義より，$\Omega(0) = 1$ に注意すると，

$$\Omega(t) = \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right) \tag{163}$$

で表される．つまり，

$$\frac{O(t) - O(\infty)}{O(0) - O(\infty)} = \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right) \tag{164}$$

より，時刻 t における物理量と平衡状態 $t=\infty$ における物理量との差 $O(t)-O(\infty)$ が t に対して指数関数的に小さくなるとき，その時定数の逆数 τ_1 が緩和時間である．しかし，ここでもまた指数関数的な減少になるとは限らない．そこで，先と同様に，（162）の一般化として，次の非線形微分方程式：

$$\frac{d\Omega}{dt}=-\frac{1}{\tau_q}\Omega^q \tag{165}$$

を考える．この解は，$\Omega(0)=1$ に注意すると，

$$\Omega(t)=\exp_q\left(-\frac{1}{\tau_q}t\right) \tag{166}$$

と表される．このときの q を Tsallis は，q_{rel} と記した．

最後に，q_{stat} の添え字の“stat”は stationary を表し，平均による拘束条件における Tsallis エントロピー S_q の最大化によって求められる **Tsallis 分布**（121）の q を表す．

Tsallis は，ある数値計算から，これら 3 つの $q_{\mathrm{sen}}, q_{\mathrm{rel}}, q_{\mathrm{stat}}$ の間に，次の関係があることを予想した [45].

$$q_{\mathrm{rel}}+\frac{1}{q_{\mathrm{sen}}}=2, \quad q_{\mathrm{stat}}+\frac{1}{q_{\mathrm{rel}}}=2. \tag{167}$$

この関係からわかるように，3 つの q のうち，どれか 1 つでも $q\to 1$ のとき，他の 2 つも $q\to 1$ になることがわかる．この関係（167）から，

$$\frac{1}{q_{\mathrm{sen}}}=\frac{3-2q_{\mathrm{stat}}}{2-q_{\mathrm{stat}}} \tag{168}$$

と求まる．これは，(151) と数式上で完全に一致している．これより，$\nu=2-q$ のとき，(μ,ν,q) 対 (146) は，q-トリプレット $(q_{\mathrm{sen}}, q_{\mathrm{rel}}, q_{\mathrm{stat}})$ と（153）の意味で一致することがわかる．ここで，強調しておきたいことは,（153）は，(μ,ν,q) 対 (146) における特別な場合（$\nu=2-q$ のとき）であり,（153）の導出において，q-トリプレット $(q_{\mathrm{sen}}, q_{\mathrm{rel}}, q_{\mathrm{stat}})$ の定義を用いていないという点である．

4. **マルチフラクタル-トリプレット**：$\nu=\dfrac{1}{q}$ のとき，(μ,ν,q) トリプレット (146) より，μ は次のように与えられる．

$$\frac{1}{1-\mu}=\frac{1}{q-1}-\frac{1}{q}. \tag{169}$$

この関係は，近年，Tsallis らによって理論的に求められていた

$$\frac{1}{1-q_{\mathrm{sen}}}=\frac{1}{\alpha_{\min}}-\frac{1}{\alpha_{\max}} \tag{170}$$

に酷似している [47]．ここで，$\alpha_{\min}, \alpha_{\max} (\alpha_{\min}<\alpha_{\max})$ は，マルチフラクタルの理論に現れる $f(\alpha)$ スペクトラムにおいて，$f(\alpha)=0$ を満たす 2 つの α である.（169）

と（170）を比べればわかるように,（170）を $\alpha_{\max}-\alpha_{\min}=1$ を満たすように α をリスケールすると,（169）と一致する．そのとき，(μ,ν,q) トリプレット (146) は，$q_{\mathrm{sen}},\alpha_{\max}$ と次の意味で一致する．

$$\mu=q_{\mathrm{sen}},\quad \nu=\frac{1}{\alpha_{\max}},\quad q=\alpha_{\max} \tag{171}$$

この（171）を q-トリプレット $(q_{\mathrm{sen}},q_{\mathrm{rel}},q_{\mathrm{stat}})$ と区別するために，著者らはマルチフラクタル-トリプレットと呼んでいる [46].

ここまで，非線形微分方程式 $\frac{dy}{dx}=y^q$ を出発点にして，Tsallis エントロピーを導き，Tsallis 統計における代表的な 4 つの数理構造もまた自然に導かれることがわかった．このなかでも，特に後者の 2 つは物理的に重要な応用をもつが，これらは (μ,ν,q) トリプレット (146) の特別な場合であり，一般的な (μ,ν,q) トリプレット (146) の物理的な意味あるいは幾何学的な意味などは，これからの課題であろう．

8 Tsallis エントロピーからマルチフラクタルへ

1988 年の Tsallis エントロピーの導入 [3][4] では，マルチフラクタルの定式化に頻出する確率の q 乗（p_i^q）を一般化エントロピーの定式化に使うことが発端であったことが読み取れる．フラクタルやマルチフラクタルで，最も重要な特徴は，対象となる系の次元が非整数次元であることである．実際，マルチフラクタルについて様々な文献を調べると，必ず現れるのが次の一般化次元 D_q である．

定義 22 (一般化次元) 空でない有界な任意の集合 $A\subset\mathbb{R}^n$ に対して，A の ε 被覆を $\{U_i : i=1,\cdots,n(\varepsilon)\}\subset\mathbb{R}^n$ とする．また，集合 A から N 個の点 $\{x_k : k=1,\cdots,N\}$ を任意に取り出し，U_i に入る x_k の数を N_i とする．このとき，確率

$$p_i:=\lim_{N\to\infty}\frac{N_i}{N}\quad (i=1,\cdots,n(\varepsilon)) \tag{172}$$

に対して，

$$D_q:=-\frac{1}{1-q}\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\ln\sum_{i=1}^{n(\varepsilon)}p_i^q}{\ln\varepsilon} \tag{173}$$

を集合 A の一般化次元という．

この定義において，$\varepsilon\to 0$ のとき，$n(\varepsilon)\to\infty$ であることに注意する必要がある．この一般化次元において，特に，$q=0,1,2$ のときは，それぞれ**容量次元**，**情報次元**，**相関次元**を表し，いわゆるカントール集合やコッホ曲線のような図形のフラクタル次元は，容量次元のことを指す．この一般化次元 D_q は，Tsallis エントロピーが導入された 1988 年当時まで，Rényi エントロピー（13）との関係がよく知られていた [48]．Rényi エントロピー $S_q^{\text{Rényi}}$ と Tsallis エントロピー S_q^{Tsallis} の両者の定式化には $\sum_{i=1}^n p_i^q$ が含まれ，非常に似ている．実は，$\varepsilon\,(>0)$ が十分小さいとき，これらの間には，次のような関係がある．

定理 23 (一般化次元と Rényi エントロピーと Tsallis エントロピーの関係) $\varepsilon > 0$ が十分小さいとき，次が成り立つ．

$$\exp\left(S_q^{R\acute{e}nyi}(p_i)\right) = \exp_q\left(S_q^{Tsallis}(p_i)\right) = \exp_{\frac{1}{q}}\left(S_{\frac{1}{q}}^{Tsallis}(P_i)\right) \simeq \varepsilon^{-D_q} \tag{174}$$

ここで，P_j は p_i のエスコート分布で，

$$P_j := \frac{p_j^q}{\sum_{i=1}^n p_i^q} \tag{175}$$

で定義される．

エスコート分布が現れるときは，乗法的双対性 $q \leftrightarrow \frac{1}{q}$ が存在することが多い．実際，(174) の 2 番目の等号もまた乗法的双対性の表現の 1 つである．また，エスコート分布は，ここで見たようにマルチフラクタルに特徴的に現れ [16]，Tsallis 統計の定式化では，期待値の定義に使われることが多い [42].

この関係式 (174) からわかるように，今まで述べてきた Tsallis エントロピー S_q^{Tsallis} の q は，一般化次元 D_q の q に他ならない．また，(174) の関係式は，1910 年の Einstein の論文 [49] で，Boltzmann の式 $S = k_B \ln W$ を逆さまにした $\exp(S/k_B) = W$ の一般化に対応していることがわかる．

9 おわりに

本稿で述べてきたことを簡潔に書くと，次のように表すことができる．記号 $\Rightarrow$ の意味は，$A \Rightarrow B$ は，A から B を導くことができるという意味である．

$$\frac{dy}{dx} = y^q \quad \Rightarrow \quad q\text{-対数関数}, q\text{-指数関数} \tag{176}$$
$$\Rightarrow \quad q\text{-積}, q\text{-スターリングの公式}, q\text{-多項係数} \tag{177}$$
$$\Rightarrow \quad \text{Tsallis エントロピー } S_q \tag{178}$$
$$\Rightarrow \quad q\text{-トリプレット，マルチフラクタル-トリプレット} \tag{179}$$
$$\Rightarrow \quad \text{一般化次元 } D_q \tag{180}$$

これよりわかるように，非線形微分方程式 $\frac{dy}{dx} = y^q$ だけを出発点にして，豊かな数理が展開できることがわかる．さらに，Boltzmann-Gibbs 統計と Tsallis 統計には，次のような

対応関係があることが最近明らかになっている．

	Boltzmann-Gibbs 統計	Tsallis 統計
基本方程式	$\frac{dy}{dx} = y$	$\frac{dy}{dx} = y^q$
基本情報量	Shannon エントロピー	Tsallis エントロピー
乗法	$\times$ (積)(統計的独立性)	$\otimes_q$ (q-積)
q	$q = 1$	$q \neq 1$ (一般化次元D_qにおける q)
基本 演算子	微分演算子 $\frac{df}{dx} = \lim_{h\to 0} \frac{f(x+h)-f(x)}{h}$	Jackson の q-微分演算子 $\frac{d_q f}{d_q x} = \frac{f(qx)-f(x)}{(q-1)x}$
ダイバージェンス	Kullback-Leibler ダイバージェンス	α-ダイバージェンス $q = \frac{1-\alpha}{2} \quad (\alpha \neq \pm 1)$

Jackson の q-微分演算子との関係については [27][28][29] を参照されたい．

参考文献

[1] T.M. Cover and J.A. Thomas, Elements of information theory, Wiley (1991).

[2] E.T. Jaynes, Information theory and statistical mechanics, Phys. Rev. vol.106, pp.620-630, 1957;.E.T. Jaynes, Information theory and statistical mechanics. II, Phys. Rev. vol.108, pp.171-190, 1957.

[3] C. Tsallis, Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics, J.Stat.Phys. vol.52, pp.479-487, 1988.

[4] M. Gell-Mann and C. Tsallis, eds., Nonextensive Entropy: Interdisciplinary Applications (Oxford Univ. Press, New York, 2004).

[5] C. Tsallis, What should a statistical mechanics satisfy to reflect nature ?, Physica D, vol.193, pp.3-34, 2004.

[6] H. Suyari and T. Wada, Scaling property and Tsallis entropy derived from a fundamental nonlinear differential equation, Proc. of the 2006 Inter. Sym. on Inform. Theory and its Appli. (ISITA2006), pp.75-80, 2006. [LANL e-print cond-mat/0608007]

[7] C. Tsallis et al., Nonextensive Statistical Mechanics and Its Applications, edited by S. Abe and Y. Okamoto (Springer-Verlag, Heidelberg, 2001).

[8] C. Tsallis, Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics: Approaching a Complex World, Springer, 2009.

[9] L. Nivanen, A. Le Mehaute, Q.A. Wang, Generalized algebra within a nonextensive statistics, Rep. Math. Phys., vol.52, 437-434, 2003.

[10] E.P. Borges, A possible deformed algebra and calculus inspired in nonextensive thermostatistics, Physica A, vol.340, pp.95–101, 2004.

[11] H. Suyari and M. Tsukada, Law of error in Tsallis statistics, IEEE Trans. Inform. Theory, vol.51, pp.753-757, 2005.

[12] 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. vol.75, pp.3589-3593, 1995 [Erratum: 77, 5442 (1996)].

[13] D. Prato and C. Tsallis, Nonextensive foundation of Lévy distributions, Phys. Rev. E, vol.60, 2398-2401, 2000.

[14] 田中勝, q-正規分布族に関する考察，電子情報通信学会論文誌 D, vol.J85-D2, pp.161-173, 2002.

[15] C. Beck and F. Schlogl, Thermodynamics of Chaotic Systems: An introduction (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1993).

[16] 長島弘幸, 馬場良和，カオス入門, 培風館, 1992.

[17] M. L. Mehta, Random Matrices, (Academic Pr., 1991).

[18] E. Wigner, Characteristic vectors of bordered matrices with infinite dimensions, Ann. of Math. vol.62, pp.548-564, 1955.

[19] E. Wigner, On the distribution of the roots of certain symmetric matrices, Ann. of Math. vol.67, pp.325-327, 1958.

[20] Y. Hasegawa and M. Arita, Properties of the maximum q-likelihood estimator for independent random variables, Physica A, vol.388, pp.3399-3412, 2009.

[21] H. Suyari, M. Tsukada and Y. Uesaka, Mathematical structures derived from the q-product uniquely determined by Tsallis entropy, Proc. of the 2005 IEEE Inter. Sym. on Inform. Theory (2005IEEE-ISIT), pp.2364-2368, 2005.; H. Suyari, Mathematical structure derived from the q-multinomial coefficient in Tsallis statistics, Physica A, vol.368, pp.63-82, 2006.

[22] C. E. Shannon, A mathematical theory of communication, The Bell System Technical Journal, vol.27, pp.379-423, 623-656, 1948.

[23] A. I. Khinchin, Mathematical Foundations of Information Theory. New York: Dover, 1957.

[24] H. Suyari, Generalization of Shannon-Khinchin axioms to nonextensive systems and the uniqueness theorem for the nonextensive entropy, IEEE Trans. Inform. Theory, vol.50, pp.1783-1787, 2004.

[25] J.H. Havrda and F. Charvát, Quantication method of classication processes: Concept of structural μ-entropy, Kybernetika, vol.3, pp.30-35, 1967.

[26] Z. Daróczy, Generalized information functions, Inf. Control, vol.16, pp.36-51, 1970.

[27] S. Abe, A note on the q-deformation-theoretic aspect of the generalized entropies in nonextensive physics, Phys.Lett.A, vol.224, 326-330, 1997.

[28] R.S. Johal, q calculus and entropy in nonextensive statistical physics, Phys.Rev.E. vol.58, 4147-4151, 1998.

[29] T. Wada and H. Suyari, A two-parameter generalization of Shannon–Khinchin axioms and the uniqueness theorem, Phys.Lett.A, vol.368, pp.199-205, 2007.

[30] I. Csiszár, Information-type measures of difference of probability distributions and indirect observation, Studia Sci. Math. Hungar., vol 2, pp. 229-318, 1967.

[31] I. Csiszár and P.C. Shields, Information Theory and Statistics: A Tutorial. Foundations and Trends in Communications and Information Theory, vol.1(4), 2004.

[32] C. Tsallis, Generalized entropy-based criterion for consistent testing, Phys.Rev.E, vol.58, pp.1442-1445, 1998.

[33] L. Borland, A.R. Plastino and C. Tsallis, Information gain within nonextensive thermostatistics, J. Math. Phys. vol.39, pp.6490–6501, 1998; vol.40, pp.2196(E), 1999.

[34] S. Furuichi, Fundamental properties of Tsallis relative entropy, J.Math.Phys., vol.45, pp.4868-4877, 2004.

[35] S. Furuichi, On uniqueness theorems for Tsallis entropy and Tsallis relative entropy, IEEE Trans. Inform. Theory, vol.51, pp.3638-3645, 2005.

[36] S. Amari and H. Nagaoka, Methods of Information Geometry, Translations of mathematical monographs; v. 191, American Mathematical Society & Oxford University Press, 2000.

[37] A. Ohara, Geometry of distributions associated with Tsallis statistics and properties of relative entropy minimization, Phys.Lett.A, vol.370, pp.184-193, 2007.

[38] J. Naudts, Continuity of a class of entropies and relative entropies, Rev. Math. Phys. vol.16, pp.809-822, 2004.

[39] A. Ohara and T. Wada, Information geometry of q-Gaussian densities and behaviors of solutions to related diffusion equations, LANL e-print arXiv:0810.0624

[40] T. Wada and A.M. Scarfone, A non self-referential expression of Tsallis' probability distribution function, Eur.Phys.J.B, vol.47, pp. 557-562, 2005.

[41] H. Suyari, The unique non self-referential q-canonical distribution and the physical temperature derived from the maximum entropy principle in Tsallis statistics, Prog. Theor. Phys. Suppl., vol.162, pp.79-86, 2006.

[42] C. Tsallis, R.S. Mendes, A.R. Plastino, The role of constraints within generalized nonextensive statistics, Physica A, vol.261, pp.534-554, 1998.

[43] S. Abe, S. Martínez, F. Pennini and A. Plastino, Nonextensive thermodynamic relations, Phys. Lett. A, vol.281, pp.126-130, 2001.

[44] C. Tsallis, Dynamical scenario for nonextensive statistical mechanics, Physica A, vol.340, pp.1-10, 2004.

[45] C. Tsallis, M. Gell-Mann and Y. Sato, Asymptotically scale-invariant occupancy of phase space makes the entropy S_q extensive, Proc.Natl.Acad.Sciences, vol.102, pp.15377-15382, 2005.

[46] H. Suyari and T. Wada, Multiplicative duality, q-triplet and (μ, ν, q)-relation derived from the one-to-one correspondence between the (μ, ν)-multinomial coefficient and Tsallis entropy S_q, Physica A, vol. 387, pp.71-83, 2008.

[47] M. L. Lyra and C. Tsallis, Nonextensivity and multifractality in low-dimensional dissipative systems, Phys.Rev.Lett. vol.80, pp.53-56, 1998.

[48] P. Grassberger, Generalized dimension of strange attractors, Phys.Lett.A, vol.97, pp.227-229, 1983.

[49] A. Einstein, Theorie der Opaleszenz von homogenen Flüssigkeiten und Flüssigkeitsgemischen in der Nähe des kritischen Zustandes, Annalen der Physik, vol.33, pp.1275-1298, 1910.

Tsallis 統計に関する包括的な書籍・日本語の解説など

1. C. Tsallis, Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics: Approaching a Complex World, Springer, 2009.

2. 阿部純義: 日本物理学会誌, 54 (1999) 287; 数理科学, no.439 (2000) 71, no.440 (2000) 78, no.441 (2000) 68, no.442 (2000) 56

3. 須鎗弘樹，Tsallis 統計力学の背景と新展開，日本物理学会誌, vol.63, no.6, pp.450-454, 2008.

4. 須鎗弘樹，複雑系のための基礎数理　ー Tsallis エントロピーの数理とその応用ー，牧野書店，近刊.