非加法的統計力学

[阿部純義 ： 数理科学, No.439, (2000), 1 月号から連載**]**の一部に
式のフォローを加えたもの

by T.Koyama

１．はじめに

ほぼ１世紀にわたって大きな成功をおさめてきた Boltzmann-Gibbs 統計力学が、現在いくつかの物理的要請にしたがって拡張されようとしている。このことに関連して最近注目を集めている「Tsallis の非加法的統計力学」について解説する。この研究は現在発展過程にあり、現時点において知られている理論的枠組みが最終的に正しいものか否かはわからない。しかしおそらくこの方向に何らかの真理が存在することは疑いの無いことであるように思われる。したがって、本稿はすでに確立された分野の解説ではなく、新しい発見への道の途中にある統計力学研究の報告であると考えていただきたい。

２．Boltzmann-Gibbs 統計力学

Boltzmann-Gibbs の統計力学の理論形式を、Jaynes の最大エントロピー原理から構成する。「最大エントロピー原理」の基本概念は、

「着目しているある物理量をQとし、測定によって得られたその物理量の期待値を$Q_{\exp}$とする。このような拘束条件の下で、系の状態に関する不確定性を最大化するという要請から、統計系の平衡確率分布が決定される。」

とする点にある。情報理論における不確定性の測度はエントロピーであり、Boltzmann-Shannon 型のエントロピーは、

$$S[p] = -k_B \sum_{i=1}^{W} p_i \ln p_i \tag{1}$$

にて与えられる。ここでk_Bは Boltzmann 定数、Wはあるスケールにおける系の微視的な状態総数、p_iは系がそのi番目の状態にある確率を表す。

まずミクロカノニカル集団について考えよう。最大エントロピー状態は確率分布関数$p = \{p_i\}_{i=1,2,\cdots,W}$の規格化に関する拘束条件

$$\sum_{i=1}^{W} p_i = 1 \tag{2}$$

のみを課して決定される。状態の数Wは系の物理量(粒子数, 体積, エネルギーなど)の値に依存して与えられる。これは、汎関数

$$\Phi[p;\alpha] = S[p] - k_B\alpha\left(\sum_{i=1}^{W} p_i - 1\right) = -k_B \sum_{i=1}^{W} p_i \ln p_i - k_B\alpha\left(\sum_{i=1}^{W} p_i - 1\right) \tag{3}$$

の停留値問題を解くことに等しい。ただし、αは Lagrange の未定乗数である。この汎関数のp_iに関する１次変分がゼロであるという条件から、オイラー方程式は、

$$\begin{aligned}
&-k_B(\ln p_i + 1) - k_B\alpha = 0 \\
&\ln p_i + 1 + \alpha = 0 \\
&\therefore\ \ln p_i = -(\alpha + 1)
\end{aligned}$$

となり、p_iはiに依存しない定数となる。したがって、式(2)の要請よりp_iは等確率分布

$$p_i = \frac{1}{W}, \quad (i = 1, 2, 3, \cdots, W) \tag{4}$$

と導かれる。この分布を用いてエントロピー式(1)の最大値を計算することにより、

$$S[p] = -k_B \sum_{i=1}^{W} p_i \ln p_i = -k_B \sum_{i=1}^{W} \frac{1}{W} \ln \frac{1}{W} = -k_B \frac{W}{W} \ln \frac{1}{W} = k_B \ln W$$
$$\therefore \ S = k_B \ln W \tag{5}$$

が導かれる、次に、確率分布関数の規格化条件の他に、物理量 Q (その i 番目の値を Q_i とする)の測定を考慮し、その期待値に対する拘束条件

$$\langle Q \rangle = \sum_{i=1}^{W} p_i Q_i \equiv Q_{\mathrm{exp}} \tag{6}$$

も課されている場合の最大エントロピー状態を求める。考えるべき汎関数は、β を拘束条件(6)に対するLagrange の未定乗数として、

$$\Phi[p;\alpha,\beta] = S[p] - k_B\alpha\left(\sum_{i=1}^{W} p_i - 1\right) - k_B\beta\left(\sum_{i=1}^{W} p_i Q_i - Q_{\mathrm{exp}}\right) \tag{7}$$

にて与えられる。この変分により、オイラー方程式から、

$$-k_B(\ln p_i + 1) - k_B\alpha - k_B\beta Q_i = 0$$
$$\ln p_i + 1 + \alpha + \beta Q_i = 0$$
$$\ln p_i = -(\alpha + 1 + \beta Q_i)$$
$$\therefore \ p_i = \exp\{-(\alpha + 1 + \beta Q_i)\} = \exp\{-(\alpha + 1)\}\exp(-\beta Q_i)$$

となり、この係数の $\exp\{-(\alpha+1)\}$ は、

$$\sum_{i=1}^{W} p_i = \sum_{i=1}^{W} \exp\{-(\alpha+1)\}\exp(-\beta Q_i) = \exp\{-(\alpha+1)\}\sum_{i=1}^{W}\exp(-\beta Q_i) = 1$$
$$\therefore \ \exp\{-(\alpha+1)\} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{W}\exp(-\beta Q_i)}$$

となるので、平衡確率分布関数 $p_i^{(e)}$ は、

$$p_i^{(e)} = \frac{1}{Z(\beta)}\exp(-\beta Q_i), \quad (i = 1, 2, \cdots, W) \tag{8}$$

であることがわかる。ここで、

$$Z(\beta) = \sum_{i=1}^{W}\exp(-\beta Q_i) \tag{9}$$

である。 $p_i^{(e)}$ のエントロピーの値は、

$$
\begin{aligned}
S[p^{(e)}] &= -k_B \sum_{i=1}^{W} p_i \ln p_i \\
&= -k_B \sum_{i=1}^{W} \frac{1}{Z(\beta)} \exp(-\beta Q_i) \ln \left\{ \frac{1}{Z(\beta)} \exp(-\beta Q_i) \right\} \\
&= -k_B \sum_{i=1}^{W} \frac{1}{Z(\beta)} \exp(-\beta Q_i) \left\{ -\ln Z(\beta) - \beta Q_i \right\} \\
&= k_B \frac{1}{Z(\beta)} \sum_{i=1}^{W} (\beta Q_i) \exp(-\beta Q_i) + k_B \frac{\ln Z(\beta)}{Z(\beta)} \sum_{i=1}^{W} \exp(-\beta Q_i) \\
&= k_B \beta Q_{\mathrm{exp}} + k_B \ln Z(\beta)
\end{aligned} \tag{10}
$$

と計算される。一方、

$$
\langle Q \rangle = \sum_{i=1}^{W} p_i Q_i = \sum_{i=1}^{W} \frac{Q_i \exp(-\beta Q_i)}{Z(\beta)} \equiv Q_{\mathrm{exp}}
$$

より、

$$
-\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z(\beta) = -\frac{1}{Z(\beta)} \frac{\partial Z(\beta)}{\partial \beta} = -\frac{1}{Z(\beta)} \sum_{i=1}^{W} (-Q_i) \exp(-\beta Q_i) = \sum_{i=1}^{W} \frac{Q_i \exp(-\beta Q_i)}{Z(\beta)} = Q_{\mathrm{exp}} \tag{11}
$$

が成立する。したがって、式(10)の S は($p_i^{(e)}$ による期待値) Q_{exp} の関数で、あらわに β には依存しない。

熱統計力学のカノニカル集団の理論を展開するためには、Q として系のハミルトニアン H を取ればよい。H の i 番目の値を ε_i とすると、式(9)は通常の分配関数 $Z(\beta) = \sum_{i=1}^{W} \exp(-\beta \varepsilon_i)$ になる。なお、以上の議論では一つの物理量に対する拘束条件しか課さなかったが、例えばグランドカノニカル集団の場合には、系のもつ粒子数の期待値に対する拘束条件も考慮しなければならない。以下では、カノニカル集団について議論を進めることにする。

Q がハミルトニアン H の場合、平衡状態のエントロピーの内部エネルギー $U = \langle H \rangle^{(e)}$ に対する依存性を調べることにより、式(8)～(11)中の β の物理的意味を知ることができる。（添字 e は、$p_i^{(e)}$ による期待値を意味する。） 式(10)の Q_{exp} をあらためて U と書くと、式(10)より、

$$
\frac{\partial S[p^{(e)}]}{\partial U} = k_B \beta \tag{12}
$$

が成り立つ。これは $k_B \beta$ が温度の逆数 $1/T$ と同一視されることを示す重要な関係式である。Helmholtz の自由エネルギー F は、S の熱力学的 Legendre 変換によって、

$$
F = U - TS \tag{13}
$$

と与えられる。$Q_{\mathrm{exp}} = U$ としたときの式(10)を用いると、F は

$$
F = -k_B T \ln Z(\beta) \tag{14}
$$

とも表される。物理的に、圧力 P や比熱 C_V は、自由エネルギーを系の体積 V と温度 T に関して

$$P = -\frac{\partial F}{\partial V} \tag{15}$$

$$C_V = \frac{\partial F}{\partial T} = -T\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \tag{16}$$

と計算される。

以上の議論では、系の取り得る状態が有限かつ離散的であるとしたが、連続無限の状態を取る系もほぼ同様に取り扱われる。また、量子力学的な場合には、 p_i の代わりに密度演算子 $\hat{\rho}$ 、エントロピーとして von Neumann エントロピー $S[\hat{\rho}] = -k_B \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\ln\hat{\rho})$、内部エネルギーは $U = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{H})$ ($\hat{H}$ は系のハミルトニアン演算子)とすればよい。その平衡状態は $\hat{\rho}^{(e)} = \frac{\exp(-\beta\hat{H})}{Z(\beta)}$ 、分配関数は $Z(\beta) = \mathrm{Tr}\{\exp(-\beta\hat{H})\}$ で与えられる。

なお、今後 簡単のために $k_B = 1$ という単位で話を進めることにする。

3．エントロピーの加法性

前節では、エントロピーがあらかじめ式(1)で与えられているものと仮定した。しかし、エントロピーがなぜそうであるべきなのか、と改めて考えてみるとよくわからなくなる。そこで、目的が、あくまでも意味のある熱力学的体系を統計力学の立場から構築することにあるということを念頭において、ある量がエントロピーと呼ばれ得るには、その量はどのような性質を有するべきか、というように問題を設定し直してみたい。とはいうものの、実はこれは大変難しいことである。なぜならば、そのような性質に関するこれまでの研究は、主として Boltzmann-Shannon エントロピーのもつ性質の研究に他ならなかったからである。この事情を反映して、最大エントロピー原理で採用されるべきエントロピーは式(1)の $S[p]$ のみであり、それ以外の何ものでもあり得ない、と主張するむきもある。はたしてそうだろうか。

Boltzmann-Shannon エントロピー $S[p]$ 以外の測度の可能性を吟味するにあたって、逆に $S[p]$ を規定する性質について振り返るのは有意義であろう。そこで、いわゆる"Shannon-Khinchin の一意性定理"というものについて考察したい。この定理に関連して、まず条件つきエントロピーの定義からはじめよう。

二つの系 A, B を考え、その状態を記述する同時確率分布を $p_{ij}(A,B)$ とする。p の前後の添字は、それぞれ A と B の状態の番号を表す。ここでは、状態の数は特に指定しないことにする。今、A が i 番目の状態にあることがあらかじめわかっているときに、B が j 番目の状態に見い出される確率 $p_{ij}(B|A)$ は、いわゆる条件つき確率

$$p_{ij}(B|A) = \frac{p_{ij}(A,B)}{p_i(A)} \tag{17}$$

にて与えられる。 $p_i(A) = \sum_j p_{ij}(A,B)$ は周辺分布である。 $p_{ij}(B|A)$ に関する Boltzmann-Shannon エントロピーを $S(B|A_i) = -\sum_j p_{ij}(B|A)\log p_{ij}(B|A)$ とすると $(k_B = 1)$、A の状態が与えられたときの B の条件つきエントロピーは、

$$
\begin{aligned}
S(B|A) &= \sum_i p_i(A) S(B|A_i) \\
&= \sum_i p_i(A) \left\{ -\sum_j p_{ij}(B|A) \log p_{ij}(B|A) \right\} \\
&= -\sum_{i,j} p_i(A) p_{ij}(B|A) \log p_{ij}(B|A) \\
&= -\sum_{i,j} p_{ij}(A,B) \log p_{ij}(B|A)
\end{aligned}
\tag{18}
$$

のように定義される。これに式(17)を代入すれば、

$$
\begin{aligned}
S(B|A) &= -\sum_{i,j} p_{ij}(A,B) \log p_{ij}(B|A) \\
&= -\sum_{i,j} p_{ij}(A,B) \log \frac{p_{ij}(A,B)}{p_i(A)} \\
&= -\sum_{i,j} p_{ij}(A,B) \left\{ \log p_{ij}(A,B) - \log p_i(A) \right\} \\
&= -\sum_{i,j} p_{ij}(A,B) \log p_{ij}(A,B) + \sum_{i,j} p_{ij}(A,B) \log p_i(A) \\
&= -\sum_{i,j} p_{ij}(A,B) \log p_{ij}(A,B) + \sum_i \log p_i(A) \sum_j p_{ij}(A,B) \\
&= -\sum_{i,j} p_{ij}(A,B) \log p_{ij}(A,B) - \{ -\sum_i p_i(A) \log p_i(A) \} \\
&= S(A,B) - S(A)
\end{aligned}
$$

より、同時確率分布のエントロピー $S(A,B)$ が周辺分布 $p_i(A)$ のエントロピー $S(A)$ と条件つきエントロピーの和

$$
S(A,B) = S(A) + S(B|A) \tag{19}
$$

になることが見い出される。A と B が統計的に独立な場合には、同時確率分布は $p_{ij}(A,B) = p_i(A) p_j(B)$ のように因子化され、式(18)から $S(B|A) = S(B)$ が成立することがわかる。したがって

$$
S(A,B) = S(A) + S(B) \tag{20}
$$

となる。さて Shannon-Khinchin の定理は、「ある量 $S[p] = S(p_1, p_2, \cdots, p_W)$ が

[Ⅰ] 確率分布関数 $p = \{p_i\}_{i=1,2,\cdots,W}$ について連続であり、
[Ⅱ] 等確率分布 $p_i = 1/W$, $(i = 1, 2, \cdots, W)$ の場合に最大値をとり、
[Ⅲ] $S(p_1, p_2, \cdots, p_W, 0) = S(p_1, p_2, \cdots, p_W)$ が成立し、
[Ⅳ] 式(19)のような加法性を満たす

ならば、その量は Boltzmann-Shannon エントロピー(1)に等しい。」ということを主張する。したがって、条件[Ⅰ]-[Ⅳ]は Boltzmann-Shannon エントロピーを数学的に規定するには十分である。

しかし、我々の目的は熱力学的体系を統計力学的に構築することにあるのだから、エントロピーが熱力学的安定性に関連する凹性を有すること、および熱力学第二法則の一つの表現であるH定理（確率分

布関数の物理的に意味のある動力学的時間発展の下でその時間微分が非負）ということも要請しなければならない。Boltzmann-Shannon エントロピーは、もちろんこれらの条件を満たしている。

[Ⅰ]-[Ⅳ]の中で特に注目したい点は、[Ⅳ]の加法性である。その特別な場合としての式(20)は、系を二つの部分系 A, B に分割したとき、それらは統計的に独立になり、全エントロピーは各部分系のエントロピーの単純な和となることを主張する。ここで、「分割する」とは、例えば A と B を空間的に十分分離することを意味する。[Ⅳ]は系のもつべき物理的性質にかなり制約を加えるように思われる。

熱統計力学における加法性とは、全系をあるスケールでの素の部分系に分割したとき、巨視的な量がその微視的自由度に比例することである。もし系の構成粒子間の相互作用が短距離力によるならば、加法性は容易に実現されるであろう。しかし、長距離相互作用の場合では、それは明らかではなくなる。部分系 A, B を空間的に十分分離したとしても、それらはまだ相互作用の影響下にある。そのような系では、統計的独立性は達成されないであろうし、また、内部エネルギーなどの巨視的量も単純に微視的自由度に比例しなくなるであろう。これらの結果として、式(19)や(20)のような加法性をもつエントロピーにもとづいて構成された Boltzmann-Gibbs 理論を長距離相互作用をもつ系に直接適用すると、異常な事態が生じる。例えば、３次元空間中で遮蔽されない coulomb 力のような $1/r$ 型ポテンシャル(r は粒子間の距離)で相互作用している系を Boltzmann-Gibbs 統計力学で取り扱おうとすると、種々の熱力学的量に対する通常の意味での熱力学的極限(すなわち、密度 $\rho = N/V$ を一定に保ちつつ、粒子数 N と体積 V を限りなく大きくする極限)は収束しない。

４．Boltzmann-Gibbs 統計力学の適用限界

上述の「異常な事態」について少し見てみることにしよう。Boltzmann-Gibbs 理論に困難が生じる場合の相互作用の距離特性を見積もるために、１体の内部エネルギー U/N をおおまかに評価する。系が D 次元空間中にあり、相互作用のポテンシャルエネルギーが $1/r^a$ 型 $(a>0)$ であるとすると、問題となる配位空間積分は

$$\frac{U}{N} \sim \int_{\varepsilon}^{(N/\rho)^{1/D}} \frac{1}{r^a} e^{-\beta/r^a} r^{D-1} dr \tag{21}$$

の形をしている。ただし、積分の下端の ε は構成粒子の有限の拡がりによる紫外切断であり、上端の $(N/\rho)^{1/D}$ は、密度 $\rho = N/V$ を一定に保つという条件と箱の大きさが $V^{1/D}$ 程度であることによる。被積分関数中の $e^{-\beta/r^a}$ は Boltzmann 因子 $e^{-\beta H}$ のポテンシャル部分である。また、r^{D-1} は積分の D 次元極座標への変換（ヤコビアン）に由来する。積分変数を $x = 1/r^a$ に置換すれば、式(21)は、

$$\frac{U}{N} \sim \frac{1}{a} \int_{(\rho/N)^{a/D}}^{1/\varepsilon} x^{-D/a} e^{-\beta x} dx \tag{22}$$

と書き換えられる。この値が熱力学的極限 $N \to \infty$ で収束するためには、

$$\frac{D}{a} < 1 \tag{23}$$

でなければならない。つまり３次元空間の空間的無限遠で $1/r^3$ よりも速く減少するポテンシャルでなければ、Boltzmann-Gibbs 的アプローチに困難が生じてしまう。普通の分子間力では式(23)は成立しているが、遮蔽されない Coulomb 力などでは確かに成立しない。条件(23)を満たさない長距離相互作用をもつ系は非加法的(non-extensive)である。Boltzmann-Gibbs の加法的(extensive)な理論に基づき計算されたそのような系の熱力学的諸量は、一般に微視的自由度に比例せず、熱力学的極限は収束しない。すなわち、このように熱力学的極限がうまく定義できなければ、系の巨視的状態については何も言えないことになる。

長距離相互作用の特異性は空間的非加法性の問題である。その他の非加法性も存在する。例えば、系が長時間の記憶効果を伴う場合である。そのような系は非 Markov 的であると呼ばれる。ここで問題となるのは時間的非加法性である。また系の配位などがフラクタル幾何学的な構造をもつ場合も、一般に

非加法的である。そのような系で現れる分布関数はベキ則的であり、Boltzmann-Gibbs の指数関数的分布と相容れない。さらに、非加法性の概念は最近さかんに議論されている複雑性(complexity)の問題においても重要であろう。複雑性は力学系の挙動がレギュラーな領域とカオス的な領域との境界(カオスの縁)において出現する。したがって、エルゴード性やランダムが期待される領域から少し外れている。自己組織化臨界性や$1/f$ ゆらぎなどが、通常の統計力学的枠組みの中で理解しにくい一つの理由は、非加法性にあると思われる。

加法性をもたないこれらの系を統計力学的に記述するに際して、出発点であるエントロピーに加法性の条件を課すことは合理的でないように見える。そこで、この条件を外して、エントロピーの定義を拡張する可能性が考えられる。問題は、そのような拡張を行った場合、それでもなお首尾一貫した熱力学的体系が構築できるか否か、そして仮にそれが可能であるとしても、そのような理論体系が、Boltzmann-Gibbs 統計力学でうまく取り扱えない現実の物理現象に対して説明能力を持ち得るか否か、ということである。実はこれらの問題に対する答えは肯定的のようなのである。

５．**Tsallis** の非加法的エントロピー

1988 年に発表された論文[C. Tsallis: J. Stat. Phys.,**52**(1988),479.]において、Tsallis は、「マルチフラクタル系のように確率分布関数がベキ則的振る舞いをする場合に対応する統計力学はどのようなものであろうか」という根本的な問題を考察した。マルチフラクタル系で基本となるスケールされる量は、確率分布関数のベキ乗すなわち$(p_i)^q$という量である。Boltzmann-Shannon エントロピーは、そのような量では表現されておらず、対数関数に関して与えられている。このため、Boltzmann-Gibbs 統計力学の確率分布関数は式(8)のように、ベキ関数的でなく指数関数的である。そこで、Tsallis はエントロピーの定義を

$$S_q[p] = \frac{1}{1-q}\left[\sum_{i=1}^{W}(p_i)^q - 1\right] \tag{24}$$

のように変更した。（量子力学的な場合には、密度演算子 $\hat{\rho}$ を用いて $S_q[\hat{\rho}] = (1-q)^{-1}(\mathrm{Tr}\hat{\rho}-1)$ となる。） ここで、q は正の定数である。この量が非負であることは明らかであろう。歴史的には、この型の量は 1970 年に Daróczy によってすでに考察されていた。しかし、Daróczy の議論は情報数学の枠内に終始しており、最大エントロピー原理や統計力学との関連については触れていない。Tsallis はまったく別の観点から独立にこの量を考案した。以後、この $S_q[p]$ を Tsallis エントロピーと呼ぶことにする。Tsallis エントロピーは、q というパラメータを含んでいる。定義式からわかるように、

$$
\begin{aligned}
&\lim_{q\to1} S_q[p] \\
&= \lim_{q\to1}\frac{1}{1-q}\left[\sum_{i=1}^{W}(p_i)^q - 1\right] \\
&= \lim_{q\to1}\frac{1}{1-q}\left[\sum_{i=1}^{W}p_i(p_i)^{q-1} - 1\right] \\
&= \lim_{q\to1}\frac{1}{1-q}\left[\sum_{i=1}^{W}p_i e^{(q-1)\ln p_i} - 1\right] \\
&= \lim_{q\to1}\frac{1}{1-q}\left[\sum_{i=1}^{W}p_i\left\{1+(q-1)\ln p_i+\frac{1}{2!}\{(q-1)\ln p_i\}^2+\frac{1}{3!}\{(q-1)\ln p_i\}^3+\cdots\right\}-1\right] \\
&= \lim_{q\to1}\frac{1}{1-q}\left[\sum_{i=1}^{W}\left\{p_i+(q-1)p_i\ln p_i+\frac{p_i}{2!}\{(q-1)\ln p_i\}^2+\frac{p_i}{3!}\{(q-1)\ln p_i\}^3+\cdots\right\}-1\right] \\
&= \lim_{q\to1}\frac{1}{1-q}\left[\sum_{i=1}^{W}p_i+\sum_{i=1}^{W}(q-1)p_i\ln p_i+\sum_{i=1}^{W}\frac{p_i}{2!}\{(q-1)\ln p_i\}^2+\sum_{i=1}^{W}\frac{p_i}{3!}\{(q-1)\ln p_i\}^3+\cdots-1\right] \\
&= \lim_{q\to1}\frac{1}{1-q}\left[\sum_{i=1}^{W}(q-1)p_i\ln p_i+\sum_{i=1}^{W}\frac{p_i}{2!}\{(q-1)\ln p_i\}^2+\sum_{i=1}^{W}\frac{p_i}{3!}\{(q-1)\ln p_i\}^3+\cdots\right] \\
&= \lim_{q\to1}\left[-\sum_{i=1}^{W}p_i\ln p_i-\sum_{i=1}^{W}\frac{p_i}{2!}(q-1)\{\ln p_i\}^2-\sum_{i=1}^{W}\frac{p_i}{3!}(q-1)^2\{\ln p_i\}^3+\cdots\right] \qquad (25) \\
&= -\sum_{i=1}^{W}p_i\ln p_i = S[p]
\end{aligned}
$$

となり、特別な場合として Boltzmann-Shannon エントロピーを含んでいる。この意味で、Tsallis エントロピーは Boltzmann-Shannon エントロピーの１-パラメータ拡張になっている。

さて、量(24)はなぜ“ エントロピー ”と呼ばれ得るのであろうか。まず大切なことは、この量がすべての正の q の値に対して凹性を満たすという点である。（このことは、いわゆる Rényi エントロピー $I_q[p]=(1-q)^{-1}\log\sum_i(p_i)^q$ と対照的である。 $S_q[p]$ と少し似ているこの量は、 $I_q[p]=(1-q)^{-1}\log\{1+(1-q)S_q[p]\}$ と表すこともできる。 Rényi エントロピーも、$q\to1$ の極限で Boltzmann-Shannon エントロピーに収束する。しかし、$q>1$ のとき凹性を持たない。Rényi エントロピーはマルチフラクタルの一般化次元の定義に関連して応用され、広く知ら机るようになったが、凹性の欠如のため、熱力学的体系の構築には適さないのである。）

次に、Shannon-Khinchin の一意性定理の仮定条件を調べてみよう。まず、[Ⅰ]と[III]が成り立つことは、ただちにわかる。[Ⅱ]がどうかを見るために、ミクロカノニカル集団理論的な考察をしてみよう。すなわち $S_q[p]$ の凹性を利用して、拘束条件(2)の下でその最大値を求めることにする。考えるべき汎関数は、$\Phi[p;\alpha]=S_q[p]-\alpha\left(\sum_{i=1}^{W}p_i-1\right)$ である。確率分布関数に関する変分を計算することにより、$S_q[p]$ が等確率分布 $p_i=1/W\ \ (i=1,2,\cdots,W)$ のときに実際最大値を取ることが示される。つまり、[Ⅱ]も成立する。ちなみに、その値は、

$$
S_q=\ln_q W \qquad (26)
$$

である。ここで、$\ln_q(x)$ は、

$$\ln_q(x) = \frac{x^{1-q}-1}{1-q} \tag{27}$$

で定義される q -対数と呼ばれる関数である。$q \to 1$ の極限で q -対数関数は、

$$\begin{aligned}
\lim_{q\to 1}\ln_q(x) &= \lim_{q\to 1}\frac{x^{1-q}-1}{1-q} \\
&= \lim_{q\to 1}\frac{e^{(1-q)\ln x}-1}{1-q} \\
&= \lim_{q\to 1}\frac{1+(1-q)\ln x + \frac{1}{2!}\{(1-q)\ln x\}^2 + \frac{1}{3!}\{(1-q)\ln x\}^3 + \cdots - 1}{1-q} \\
&= \lim_{q\to 1}\left\{\ln x + \frac{1}{2!}(1-q)(\ln x)^2 + \frac{1}{3!}(1-q)^2(\ln x)^3 + \cdots\right\} = \ln x
\end{aligned}$$

のように、通常の対数関数に一致し、式(26)は Boltzmann の関係式(5)に帰着される(ただし、$k_B = 1$)。式(26)の S_q も式(5)の S と同様に、W の単調増加関数である。

しかし、[IV]は破れている。このことを式(20)との対比で見るために、二つの系 A, B の同時確率分布が $p_{ij}(A,B) = p_i(A)p_j(B)$ のように因子化されている場合を考えよう。定義式(24)に代入して直接計算することにより、

$$\begin{aligned}
S_q(A)S_q(B) &= \left\{\frac{1}{1-q}\left[\sum_{i=1}^{W}\{p_i(A)\}^q - 1\right]\right\}\left\{\frac{1}{1-q}\left[\sum_{j=1}^{W}\{p_j(B)\}^q - 1\right]\right\} \\
&= \frac{1}{(1-q)^2}\left[\sum_{i=1}^{W}\sum_{j=1}^{W}\{p_i(A)\}^q\{p_j(B)\}^q - \sum_{i=1}^{W}\{p_i(A)\}^q - \sum_{j=1}^{W}\{p_j(B)\}^q + 1\right] \\
&= \frac{1}{(1-q)^2}\left[\left\{\sum_{i=1}^{W}\sum_{j=1}^{W}\{p_i(A)\}^q\{p_j(B)\}^q - 1\right\} - \left\{\sum_{i=1}^{W}\{p_i(A)\}^q - 1\right\} - \left\{\sum_{j=1}^{W}\{p_j(B)\}^q - 1\right\}\right] \\
&= \frac{1}{(1-q)}\left[S_q(A,B) - S_q(A) - S_q(B)\right]
\end{aligned}$$

となり、擬加法性(pseudo-additivity)と呼ばれる関係式

$$S_q(A,B) = S_q(A) + S_q(B) + (1-q)S_q(A)S_q(B) \tag{28}$$

が得られる。加法性が成立するのは、$q \to 1$ の極限においてのみであることがわかる。(このこととは対照的に、上述の Rényi エントロピーは、ゼロでないすべての q の値に対して加法性を有する。)

このように、Shannon-Khinchin の定理の仮定のうち、加法性のみが外されたわけである。$q > 1$ の場合、式(28)の右辺は $S_q(A) + S_q(B)$ より小さくなるので subextensive、逆に $0 < q < 1$ の場合を superextensive、また $q \to 1$ を加法的極限(extensive limit)という。

$S_q[p]$ が凹性をもつことはすでに述べた。実は、H定理も満たされることが知られている。確率分布関数が時間依存性をもつとして、$S_q[p]$ の時間微分を計算してみよう。$f = \sum_{i=1}^{W}(p_i)^q$ とおくと、

$$\frac{dS_q[p]}{dt} = \frac{1}{1-q}\frac{df}{dt} \tag{29}$$

である。ここで、確率分布関数がマスター方程式

$$\frac{dp_i}{dt} = \sum_{i=1}^{W}(A_{ji}p_i - A_{ij}p_i) \tag{30}$$

の解であると仮定する。ただし、A_{ij} は i 番目の状態から j 番目の状態への単位時間当たりの遷移確率である。f は $0<q<1$ で凹関数、$q>1$ で凸関数である。f のこの性質と方程式(30)から、$0<q<1$ のとき $df/dt \geq 0$，$q>1$ のとき $df/dt \leq 0$ となる。したがって、

$$\frac{dS_q[p]}{dt} \geq 0, \quad (q>0) \tag{31}$$

すなわち、$S_q[p]$ は時間的に減少しない。以上は古典論の場合のH定理であるが、量子論においても、密度演算子が Lindblad 方程式という量子散逸系を記述する方程式の解のときに、同様の結果が導かれることが示されている。

このように、加法性を除いて、$S_q[p]$ が Boltzmann-Shannon エントロピーと種々の性質を共有することがわかった。このことは、$S_q[p]$ を非加法的なエントロピーとみなすことを正当化するであろう。また上述の凹性とH定理により、系が平衡状態としての最大エントロピー状態に向かって時間発展することが保証される。すなわち、熱力学第二法則が非加法的な場合に拡張されるのである。

６．Tsallis エントロピーの一意性に関するコメント

Tsallis エントロピーの一意性について言及しておきたい。ある量 $S_q[p]$ が、３節で述べた Shannon-Khinchin の定理の条件[I], [II], 擬加法性(28)、および

$$S_q[\{p_i\}] = S_q[p_L, p_M] + (p_L)^q S_q[\{p_i / p_L\}] + (p_M)^q S_q[\{p_i / p_M\}]$$

（ただし、$p_L = \sum_{i=1}^{W_L} p_i$，$p_M = \sum_{i=W_L+1}^{W} p_i$，$p_L + p_M = 1$）という 4 つの条件を満たすとき、その量が Tsallis エントロピーであることを証明することができる。（最後の条件は $q \to 1$ の場合 Shannon property と呼ばれる。）

また"composability"という概念からの特徴づけの試みもある。これは「因子化された同時確率分布に対して、合成系のエントロピーが各部分系のエントロピーの何らかの関数で表される」という性質である。例えば、加法性(20)や擬加法性(28)は、その具体的な表現になっている。ごく最近、(定数)+$\sum_i \phi(p_i)$ の形をもつ量の内、composability を満たすものは、おそらく Tsallis エントロピーのみであろうという議論が展開された。

７．*q*-変形理論との関係

数理物理学に、量子群・*q*-変形理論という分野がある。それに関連する *q*-解析学は、20 世紀初頭に現れた数学であるが、場の量子論や統計力学におけるある種の可解模型がもつ対称性の研究を通じて近年物理学に導入された。この節では、Tsallis エントロピーと *q*-変形理論との興味深い関係について紹介する。

ある変形されていない系、すなわち通常の系の物理量 Q を考える、それがエネルギーなどのように加法的な量であるとすると、和 $Q^{(A)} + Q^{(b)}$ が意味をもつ。一方、その系を *q*-変形すると、*q*-類似(*q*-analogue)というものを考えなければならない。Q の *q*-類似は

$$[Q]_q = \frac{q^Q - 1}{q - 1} \tag{32}$$

で定義される Jackson 数と呼ばれる量である。

注意しなければならないのは、もとの量が加法的であっても、その q-類似は一般に加法的ではないという点である。実際、定義式(32)を用いると、$Q^{(A)} + Q^{(B)}$ の q-類似は $Q^{(A)}$ と $Q^{(B)}$ とのそれぞれの q-類似の単純な和にはならず、

$$\begin{aligned}
&[Q^{(A)}]_q + [Q^{(B)}]_q + (q-1)[Q^{(A)}]_q[Q^{(B)}]_q \\
&= \frac{q^{Q^{(A)}} - 1}{q-1} + \frac{q^{Q^{(B)}} - 1}{q-1} + (q-1)\left(\frac{q^{Q^{(A)}} - 1}{q-1}\right)\left(\frac{q^{Q^{(B)}} - 1}{q-1}\right) \\
&= \frac{q^{Q^{(A)}} + q^{Q^{(B)}} - 2 + (q^{Q^{(A)}} - 1)(q^{Q^{(B)}} - 1)}{q-1} \\
&= \frac{q^{Q^{(A)}} q^{Q^{(B)}} - 1}{q-1} = \frac{q^{Q^{(A)}+Q^{(B)}} - 1}{q-1} = [Q^{(A)} + Q^{(B)}]_q
\end{aligned}$$

より、

$$[Q^{(A)} + Q^{(B)}]_q = [Q^{(A)}]_q + [Q^{(B)}]_q + (q-1)[Q^{(A)}]_q[Q^{(B)}]_q \tag{33}$$

という関係を満たすことがわかる。

式(33)と Tsallis エントロピーの擬加法性を表す式(28)との間には著しい " 類似性 " が認められる。このことを少し別の観点から見てみよう、

まず、カオスの熱力学で動力学的分配関数と呼ばれる量

$$\chi(\alpha) = \sum_{i=1}^{W} (p_i)^\alpha \tag{34}$$

を考える。規格化条件から、明らかに $\chi(1) = 1$ である。今、この量の $\alpha = 1$ における値 1 からの無限小変化率、すなわち微分係数を計算すると、

$$y = (p_i)^\alpha \to \ln y = \alpha \ln(p_i) \to \frac{1}{y} dy = d\alpha \ln(p_i) \to \frac{dy}{d\alpha} = y \ln(p_i) = (p_i)^\alpha \ln(p_i)$$

$$\therefore \ \frac{d\chi(\alpha)}{d\alpha} = \sum_{i=1}^{W} (p_i)^\alpha \ln(p_i)$$

より、

$$S[p] = -\left.\frac{d\chi}{d\alpha}\right|_{\alpha=1} = -\sum_{i=1}^{W} p_i \ln(p_i) \tag{35}$$

となり、Boltzmann-Shannon エントロピー $(k_B = 1)$ が得られる。

一方、q-解析学における微分は

$$D_q f(\alpha) = \frac{f(q\alpha) - f(\alpha)}{q\alpha - \alpha} \tag{36}$$

で定義される Jackson の q-微分と呼ばれる演算である。変形無しの極限 $q \to 1$ で、$D_q f(\alpha)$ は通常の導関数 $df(\alpha)/d\alpha$ に一致する。

ところで、もし式(35)中の微分を q-微分で置き換えるならば

$$S_q[p] = -D_q\ \chi(\alpha)\Big|_{\alpha=1} = -\left.\frac{\chi(q\alpha)-\chi(\alpha)}{q\alpha-\alpha}\right|_{\alpha=1} = -\frac{\chi(q)-\chi(1)}{q-1} = \frac{\sum_{i=1}^{W}(p_i)^q - 1}{1-q} \tag{37}$$

すなわち Tsallis エントロピーが得られる（Tsallis エントロピーと変形理論とにおいて、パラメータ q が記号的に同じなのは面白い偶然である）。この表現を使うと、擬加法性(28)が、Jackson q-微分の満たす変形された Leibniz 則

$$D_q\{f(\alpha)g(\alpha)\} = \{D_q f(\alpha)\}g(q\alpha) + f(\alpha)\{D_q g(\alpha)\} \tag{38}$$

の直接的結果であることが確かめられる。

このように、Boltzmann-Shannon エントロピーは $\chi(\alpha)$ の指数の並進に関係して与えられるが、Tsallis エントロピーは指数のスケール変換に関係する量である。二つのエントロピーには、このような幾何学的性質が含まれていたわけである。Tsallis エントロピーは Boltzmann-Shannon エントロピーの q-変形である、これは単に数学的事実で終わる事柄ではない。q-変形理論では、$|1-q|$ は離散的構造の尺度を与える。このことは、次節で議論する Tsallis エントロピーに基づく非加法的統計力学の理論の背後に何らかの階層椎造が存在することを示唆しているように思われる、

５節で述べたように、Tsallis エントロピーはもともとマルチフラクタル系の統計力学的記述を目的として導入されたものである。一方、最近まったく独立な研究から、マルチフラクタル集合のもつ離散的スケール変換対称性が Jackson q-微分で生成されることが見い出された。したがって、非加法的統計力学、q-変形理論、マルチフラクタル性の間の関係がより強固になったことになる。

我々は、現代物理学の発展の歴史をとおして、新しい基礎理論の誕生においては、対応する既存の古典理論が極限として含まれると同時に、いつも何らかの特徴的な数学的構造が出現してきたことを知っている。特殊相対論、一般相対論、量子論のすべてでそうなっている。非加法的統計力学にも似たような状況が現れているように思われる。

q-変形理論の立場から考えると、Tsallis エントロピー以外の非加法的エントロピーも考えられることを指摘したい。例えば物理学で論じられる量子群の模型の多くは、q と q^{-1} を入れ換える変換の下で不変になっている。そこで q-類似として現れるのは、式(32)ではなく

$$[Q]_q^{(S)} = \frac{q^Q - q^{-Q}}{q - q^{-1}} \tag{39}$$

という形のものである。これに付随する q-微分は

$$D_q^{(S)} f(\alpha) = \frac{f(q\alpha) - f(q^{-1}\alpha)}{q\alpha - q^{-1}\alpha} \tag{40}$$

である。これも $q \to 1$ の極限で通常の微分に一致する。この演算に対応して与えられるエントロピーは

$$S_q^{(S)}[p] = -\frac{1}{q-q^{-1}}\sum_{i=1}^{W}\left[(p_i)^q - (p_i)^{q^{-1}}\right] \tag{41}$$

である。$q \leftrightarrow q^{-1}$ 対称性のために、この場合の q の範囲は区間 $(0,1)$ に縮小できる。これらの議論は、

さらに一般的な 2-パラメータ変形の場合に拡張されている。$S_q^{(S)}[p]$も 2-パラメータ変形エントロピーも、凹性や H 定理を満たすが、前節で述べた composability はもたない。

先に述べたように、量子群や q-変形された系は本質的に非加法的である。しかしながら、これまでのところ、それらの統計力学的研究は Bpltzmann-Gibbs 理論に基づくものが主であり、非加法的アプローチはまだほとんど見当たらない。

８．*q*-期待値と非加法的統計力学

Tsallis エントロピー$S_q[p]$が最大エントロピー原理を適用するのに好都合な性質をもっていることは５節で述べた。この節では、$S_q[p]$に基づくカノニカル集団の平衡確率分布の導出の問題に進むことにしよう。２節で行なった議論を$q \neq 1$の場合に拡張するのであるが、その際に物理量の期待値を定義しておかなければならない。このことは一見自明のように思えるが、実はそうではない。期待値の定義に関しては、ごく最近まで試行錯誤があった。

はじめに通常の期待値の定義(6)が考えられたが、その後そのような期待値を用いる限り、熱力学的 Legendre 変換構造を実現することはできないことが判明した。次に Tsallis エントロピーの構成の際に基本となったのが$(p_i)^q$という量であるという事実を反映させて、発見法的に

$$\langle Q \rangle_q' = \sum_{i=1}^{W} (p_i)^q Q_i \equiv Q_q' \tag{42}$$

という拡張された期待値が導人された。この定義を用いるならば、無矛盾な熱力学的 Legendre 変換構造が実理できることがわかった。

式(42)の定義を用いた理論は非常に注目され、驚くほど多岐にわたる問題に応用された。指数関数的でない確率分布が問題になる系に対して、ことごとく適用された感がある。ここで重要なのは、これらの研究をとおして、Tsallis エントロピーの適用範囲がその定式化の動機であったマルチフラクタル構造をもつ系に限定されるものではなく、どうやら非加法性をもつ一般的な系の統計力学的性質の解明に有用のようである、ということが次第に明らかになってきたことである。

このように式(42)を拘束条件として用いた理論形式は、まずまずの成功をおさめたといえる。1998 年までの非加法的統計力学に関するほとんどすべての議論は、この形式に基づくものであった。しかしながら、式(42)には明らかに不満足な点があった。まず第一に、$\langle 1 \rangle_q' \neq 1$，すなわち期待値が規格化条件を満たさない。第二に式(42)を拘束条件として採用した場合に得られる平衡確率分布関数を調べてみると、Qに定数を加える変換の下でその分布関数が不変にならない。これは確かに受け入れ難い点である。例えばQがハミルトニアンのとき、理論がエネルギーの原点の取り方に依存してしまうことになるからである。実はこれら二つの間題点は互いに関連していた。

上述の困難を解決するために、Tsallis，Mendes および Plastino は規格化された q-期待値

$$\langle Q \rangle_q = \sum_{i=1}^{W} P_i^{(q)} Q_i \equiv Q_q \tag{43}$$

を導入した。ここで、$P_i^{(q)}$はカオスの熱力学でエスコート分布と呼ばれている量で、p_iに附随して

$$P_i^{(q)} = \frac{(p_i)^q}{\sum_{j=1}^{W} (p_j)^q} \tag{44}$$

と定義される確率分布関数である。今度は明らかに$\langle 1 \rangle_q' = 1$が成り立つ。

したがって、今や考えるべき汎関数は

$$\Phi_q[p;\alpha,\beta]=S_q[p]-\alpha\left(\sum_{i=1}^{W}p_i-1\right)-\beta\left(\frac{\sum_{j=1}^{W}(p_j)^qQ_i}{\sum_{j=1}^{W}(p_j)^q}-Q_q\right) \tag{45}$$

となる。この変分により、平衡確率分布関数

$$p_i^{(e)}=\frac{1}{Z_q(\beta)}\left[1-(1-q)\frac{\beta}{c_q}(Q_i-Q_q)\right]^{1/(1-q)} \tag{46}$$

が得られる。ただし、

$$Z_q(\beta)=\sum_{i=1}^{W}\left[1-(1-q)\frac{\beta}{c_q}(Q_i-Q_q)\right]^{1/(1-q)} \tag{47}$$

である。この形式では、Q の定数シフトの下での不変性が成り立っている。

式(46)と(47)の中に現れている c_q と Q_q は、$p_i^{(e)}$ 自身を用いて計算されるべきものである。したがって、厳密な解を得るためには、これらの量を自己無矛盾的に決定しなければならない。ここで恒等式が一つ存在する。$p_i^{(e)}$ の規格化条件から

$$\begin{aligned}1&=\frac{1}{Z_q(\beta)}\sum_{i=1}^{W}\left[1-(1-q)\frac{\beta}{c_q}(Q_i-Q_q)\right]^{1/(1-q)}\\&=[Z_q(\beta)]^{q-1}\sum_{i=1}^{W}(p_i^{(e)})^q\left[1-(1-q)\frac{\beta}{c_q}(Q_i-Q_q)\right]\\&=[Z_q(\beta)]^{q-1}c_q\end{aligned} \tag{48}$$

すなわち、

$$c_q=[Z_q(\beta)]^{1-q} \tag{49}$$

が常に成り立つ。ただし式(48)の最後の等式において q-期待値 Q_q の定義を使った。

Tsallis 分布関数(46)はパラメータ q の範囲によって異なる性質をもつ。まず、subextensive $(q>1)$ の場合、大きい Q_i に対して漸近的に

$$p_i^{(e)}\sim Q_i^{1/(1-q)} \tag{50}$$

というベキ則的振る舞いを呈する。一方 superextensive $(0<q<1)$ の場合には、Q_i の取り得る値に上限が現れ、分布関数は

$$Q^{\max}=Q_q+\frac{c_q}{(1-q)\beta} \tag{51}$$

で切断される。したがって、式(47)は $Q_i\le Q^{\max}$ を満たす項のみの和となる。また、加法的極限 $q\to 1$ では、式(46)は指数関数に収束し、Boltzmann-Gibbs 理論が正しく再現される。このことから、加法的極限

は Boltzmann-Gibbs 極限とも呼ばれる。

これまで何度か述べたように、Tsallis エントロピー導入のもともとの動機は、マルチフラクタル系でスケールされる確率分布関数を統計力学的な原理に基づいて記述することにあったのであるが、上で見たように、ベキ則的な振る舞いをする分布関数が実際に得られたわけである。

さて、この理論的枠組みから如何に無矛盾な熱力学的形式が導かれるかを見てみることにしよう。したがって、以下において物理量QとしてハミルトニアンH（その i 番目の状態における値はε_i）を取り、その q-期待値$U_q = \langle H \rangle_q$ を一般化された内部エネルギーと見なすことにする。平衡確率分布関数(46)に対する Tsallis エントロピーを、恒等式(49)を用いて

$$S_q[p^{(e)}] = \ln_q Z_q(\beta) \tag{52}$$

とあらわす。・ただし、$\ln_q(x)$ は式(27)で与えられている q-対数関数である。$S_q[p^{(e)}]$が実際に最大値になっていることを見るためには、U_q を固定しての Lagrange の未定乗数に関する微分がゼロであることを確かめればよい。具体的に計算すると

$$\left.\frac{\partial S_q[p^{(e)}]}{\partial \beta}\right|_{U_q} = \frac{1}{[Z_q(\beta)]^q} \left.\frac{\partial Z_q(\beta)}{\partial \beta}\right|_{U_q} = -\frac{\partial}{\partial \beta}\left(\frac{\beta}{c_q}\right)\sum_{i=1}^{W}(p_i^{(e)})^q(\varepsilon_i - U_q) \tag{53}$$

となり、結局U_qの定義から

$$\left.\frac{\partial S_q[p^{(e)}]}{\partial \beta}\right|_{U_q} = 0 \tag{54}$$

が正しく成り立っていることがわかる。一方、$S_q[p^{(e)}]$のU_q に関する微分を計算すると

$$\frac{\partial S_q[p^{(e)}]}{\partial U_q} = -\beta \frac{\partial c_q^{-1}}{\partial U_q}\sum_{i=1}^{W}(p_i^{(e)})^q(\varepsilon_i - U_q) + \frac{\beta}{c_q}\sum_{i=1}^{W}(p_i^{(e)})^q \tag{55}$$

すなわち

$$\frac{\partial S_q[p^{(e)}]}{\partial U_q} = \beta \tag{56}$$

という関係式が得られる。これは、Boltzmann-Gibbs 理論における温度の定義式(12)$(k_B = 1)$ が非加法的な場合にもそのままの形で拡張されることを意味する非常に重要な関係式である。このことから、例えば一般化された自由エネルギーは

$$F_q = U_q - TS_q \tag{57}$$

のように与えられる。今、系を統計的に独立な部分系、A, B に分割できる場合、すなわち同時確率分布関数が $p_{ij}(A,B) = p_i(A)p_j(B)$ と因子化される場合には、ハミルトニアン $H(A)+H(B)$ の q-期待値は、$U_q(A)+U_q(B)$ を与える。この意味で、一般化された内部エネルギーは加法的である。一方、Tsallis エントロピーは非加法的である。したがって、結果的に一般化された自由エネルギーは非加法的な量ということになる。式(52)の表現を用いて、F_q を式(14)に対応する形

$$F_q = -\frac{1}{\beta}\ln_q \tilde{Z}_q(\beta) \tag{58}$$

に書き換えよう。ただし

$$\ln_q \tilde{Z}_q(\beta) = \ln_q Z_q(\beta) - \beta U_q \tag{59}$$

である。式(53)や(55)と同様の計算を行うことにより

$$-\frac{\partial}{\partial\beta}\ln_q \tilde{Z}_q(\beta) = U_q \tag{60}$$

が成り立つことが確かめられる。これは、通常の最大エントロピー原理における式(11)に相当している。圧力や比熱も、式(15),(16)に対応してそれぞれ

$$P_q = \frac{\partial F_q}{\partial V} \tag{61}$$

$$C_{Vq} = \frac{\partial U_q}{\partial T} = -T\,\frac{\partial^2 F_q}{\partial T^2} \tag{62}$$

と計算される。

このように、Boltzmann-Gibbs 極限 $q \to 1$ における通常の熱力学的関係式のすべてが、 $q \neq 1$ の場合に自然に移行されるのである。熱力学的 Legendre 変換構造は、非加法的拡張に対して、実はかくもロバストなのであった。

以上、Tsallis エントロピーの定義(24)と合わせて式(43)以降の議論が、現時点でもっとも信頼できる理論的枠組みと考えられているものである。Tsallis の非加法的統計力学は、エントロピーと期待値の定義の拡張に関する二つの仮定からなる理論なのである。

この節を締めくくるにあたり、エスコート分布の指数に関連する群論的構造についてコメントしておきたい。もともとの確率分布関数 p_i に対して

$$p_i \to p_i' = \frac{(p_j)^r}{\sum_{j=1}^{W}(p_j)^r} \tag{63}$$

という変換をほどこしてみる。これは、明らかに規格化条件を保持する変換である。これによって、エスコート分布(44)は

$$P_i^{(q)} \to \frac{(p_j)^{qr}}{\sum_{j=1}^{W}(p_j)^{qr}} = P_i^{(qr)} \tag{64}$$

となり、指数が r 倍されたエスコート分布に変換される。すなわち、いろいろな指数をもつエスコート分布全体の集合を考えると、変換(63)はこの関数空間中の 1-パラメータ Abel 群を成すのである。このように、期待値の概念を q-期待値のように拡張すると、その指数 q に関する群論的構造が新たに出現するのであるが、その物理的意味についてはまだあまりわかっていない。

９．Boltzmann-Gibbs 理論と Tsallis 理論との形式的関係

9.1 分配関数の積分表示

Tsallis の分配関数

$$Z_q(\beta)=\sum_{i=1}^{W}\left[1-(1-q)\frac{\beta}{c_q}(Q_i-Q_q)\right]^{1/(1-q)} \tag{65}$$

は、Boltzmann-Gibbs 理論のように指数関数的な量の和でないため、解析が厄介のように見える。そこで、状況を改善するために、この表式をもう少し馴染み深い形に書き直すことを考えてみよう。

まず subextencive の場合、指数$1/(1-q)$ が負であることに注意して、等式

$$\frac{1}{x^s}=\frac{1}{\Gamma(s)}\int_0^\infty t^{s-1}e^{-xt}dt,\quad (s>0) \tag{66}$$

を式(65)に適用する。ここで、$\Gamma(s)$ はガンマ関数である。ただちに

$$Z_q(\beta)=\frac{1}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)}\int_0^\infty t^{\frac{2-1}{q-1}}\exp\left\{-\left[1-(q-1)\frac{\beta U_q}{c_q}\right]t\right\}Z\left(\frac{(q-1)\beta t}{c_q}\right)dt \tag{67}$$

を得る。ただし、$Z\left((q-1)\beta t/c_q\right)$ は Boltzmann-Gibbs の分配関数 $Z(\beta)=\sum_{i=1}^{W}\exp(-\beta\varepsilon_i)$ である。一方、superextencive の場合には、複素積分の等式

$$x^s=\frac{i}{2\pi}\Gamma(s+1)\int_C(-t)^{-s-1}e^{-xt}dt \tag{68}$$

を用いる。C は Hankel 積分路と呼ばれるものである。これにより

$$Z_q(\beta)=\frac{i}{2\pi}\Gamma\left(\frac{2-1}{q-1}\right)\int_C(-t)^{-\frac{2-1}{q-1}}\exp\left\{-\left[1-(q-1)\frac{\beta U_q}{c_q}\right]t\right\}Z\left(\frac{(1-q)\beta t}{c_q}\right)dt \tag{69}$$

となることがわかる。このように、Tsallis 分配関数は Boltzmann-Gibbs 分配関数の積分としてあらわすことができる。

これらの形式的な積分表示においては、被積分関数の振る舞いに常に留意しなければならない。特に、系の取り得る状態が連続無限の場合には、注意が必要である。$Z(\beta)$ が担う系の性質が、積分の収束条件に反映されるのである。

式(67)と(69)の積分表示法は、最近一般化された温度 Green 関数の研究に応用された。Boltzmann-Gibbs 統計力学に基づく通常の温度 Green 関数の理論では、密度演算子が $\exp(-\beta\hat{H})$ という時間発展演算子に似た形をしていることから、Green 関数中の時間の虚軸方向に周期性が現れるが（いわゆる Kubo-Martin-Schwinger 関係）、Tsallis 統計力学ではそのような周期性は存在しない。

9.2 Gibbs のミクロカノニカル集団と Tsallis のカノニカル集団

サイズが小さい系の熱力学というのはそれ自身興味深い研究分野である。そこではミクロとマクロの中間領域が取り扱われる。一般に熱力学的極限を取ることはできず、したがって表面効果なども問題になる。ここでは、有限系に対する通常の Gibbs のミクロカノニカル集団理論が、Tsallis のカノニカル集団の理論の特別な場合に関連づけられることを見てみる。これは、非加法的統計力学による小さい系へのアプローチの可能性を示唆するものであろう。

まず、後の便利のために、分布関数(46)を形式的に

$$p_i^{(e)} = \frac{1}{\bar{Z}_q(\beta)} \left[1-(1-q)\bar{\beta}\varepsilon_i\right]^{1/(1-q)} \tag{70}$$

というように書き換える。ただしQとしてハミルトニアンHを取り、また

$$\bar{Z}_q(\beta) = Z_q(\beta)\left[1+(1-q)\frac{\beta U_q}{c_q}\right]^{-1/(1-q)} \tag{71}$$

$$\bar{\beta} = \frac{\beta}{c_q + (1-q)\beta U_q} \tag{72}$$

とおいた。

さて、通常のミクロカノニカル集団の理論で記述される対象系Sと熱浴Rからなる閉じた系を考えよう。SとRは互いに弱く相互作用していて、その全エネルギーが$E_0 - \Delta/2$と$E_0 + \Delta/2$の間にあるとする。ただし、$\Delta \ll E_0$である。我々は小さな系を考えているので、Rの自由度はSのそれより大きいけれども有限である。Rが準連続的エネルギー状態をもつと仮定すると、対象系Sをエネルギーε_iの状態に見い出す確率p_iは、幅ΔおよびRのエネルギーの単位区間あたりに存在する状態数$\eta(E_0 - \varepsilon_i)$に比例するであろう。$\Delta$は規格化因子に吸収されるから、本質的には

$$p_i \propto \eta(E_0 - \varepsilon_i) \tag{73}$$

である。ところで、エネルギーEがある程度大きい場合、E以下にあるRの状態数$\mu(E)$はいろいろな系でEのベキ乗に比例することが知られている。そこで

$$\mu(E) \propto E^a \tag{74}$$

とおくことにする。状態密度$\eta(E)$は$\mu(E)$の微分で与えられるので

$$p_i \propto \left(1-\frac{\varepsilon_i}{E_0}\right)^{a-1} \tag{75}$$

となる。更にまた、いろいろな系でaとE_0がNに比例することも知られている。例えば、N個の独立な量子調和振動子の場合では、$a = N$であり、またE_0に関しては$\tilde{\beta}$をある定数として

$$E_0 = \frac{N-1}{\tilde{\beta}} \tag{76}$$

とおくことができる、ただし、便宜上E_0を$1/\tilde{\beta}$だけずらしてある。したがってこの例では、qを

$$q = \frac{N-2}{N-1} \tag{77}$$

のように同一視するならば

$$p_i \propto \left[1-(1-q)\tilde{\beta}\varepsilon_i\right]^{1/(1-q)} \tag{78}$$

が得られる。すなわち、式(70)の形の分布関数が得られた、ここでは、q は１よりわずかに小さいので、この p_i は superextensive な Tsallis 分布関数に村応している。

このように、有限系に対するミクロカノニカル分布が Tsallis のカノニカル分布の特別な場合として解釈できることがわかる。q の値の１からのずれが N の有限性に起因しているのである。

１０．応用

これまで、Tsallis の非加法的統計力学の基礎的枠組みについて説明してきた。この理論は、まだ発展途上にあるにもかかわらず、その応用についてすでに多くの興味深い議論がなされてきた。今回と次回にわたって、それらのうちの代衷的なものを取り上げて紹介する。

10-1)　Lévy 型ランダム・ウォーク

Gauss 分布（正規分布）というものは、いたるところに見られるものである。この分布の普遍性は、中心極限定理によって保証されている。

そこでまずはじめに、Boltzmann-Shannon エントロピーに基づく最大エントロピー原理から Gauss 型ランダム・ウォークが如何に導かれるかを復習しよう。簡単のために、１次元のウォークを考える。ウォーカーの位置の確率変数を X とし、すべての実数 x にその値をとるとする。対応する確率密度を $p(x)$ と書くと、Boltzmann-Shannon エントロピーは

$$S[p] = -\int_{-\infty}^{\infty} p(x)\log[\sigma p(x)]dx \qquad (79)$$

である。ただし、σ は問題に特徴的なある長さのスケールを与える定数である。この定数が X の２次モーメントに関して与えられるとしよう、すなわち

$$\left\langle X^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p(x)x^2 dx = \sigma^2 \qquad (80)$$

という拘束条件を課す。式(1),(6)を連続的確率変数の場合に拡張し、$Q = X^2$ とおくわけである。このことから、最大エントロピー状態は Gauss 分布

$$p(x) = \sqrt{\frac{\beta}{\pi}}\, e^{-\beta x^2} \qquad (81)$$

になる。（ここでは１次モーメントを考慮していないので、中心が原点にある分布になっている。）拘束条件(80)から、Lagrange の未定乗数 β は

$$\beta = \frac{1}{2\sigma^2} \qquad (82)$$

のように決められる。ウォーカーの１回のジャンプが確率分布(81)であらわされるとして、N 回の独立なジャンプを記述するマクロな分布を求めるためには、$p(x)$ とそれ自身との合成積を N 回行えばいい。よく知られているように、Gauss 型関数の合成積は再び Gauss 型関数になる。結果的に N 回のジャンプに対する分布関数は

$$p(x:N) = \frac{1}{\sqrt{2\pi N\sigma^2}}\, e^{-x^2/(2N\sigma^2)} \qquad (83)$$

となる。したがって、分散（２次モーメント）は

$$\left\langle X^2 \right\rangle^N = \int_{-\infty}^{\infty} p(x:N) x^2 dx = N\sigma^2 \tag{84}$$

である。ジャンプの回数 N を所要時間 t を用いて $N = \Delta \cdot t$ と書こう。Δ は系の特徴的時間スケール（の逆数）である。$1/\beta$ を温度 T と同一視すれば、通常の拡散をあらわす関係式 $\left\langle X^2 \right\rangle^N = \Delta T t / 2$ が導かれる。

中心極限定理によれば、仮に１回のジャンプが厳密に Gauss 分布でなくても、２次モーメントが存在する限り、大きな N で漸近的に分布(83)が実現される。

ところで、数学的には２次モーメントが存在しない（発散する）分布を考えることができる。そのような分布は、確率変数の大きな値に対して Gauss 型のように指数関数的に急減少する分布とは異なり、ベキ則的にゆっくりと減少する。歴史的に最初にベキ則的分布が発見されたのは約１世紀ほど前のことで、それは Pareto による富裕階級の年収に関する統計解析においてであった。数学者 Lévy は、そのような長く尾を引く分布についての一般的理論を展開した。今日 Lévy 分布と呼ばれるこの確率分布と、それに関連するランダム・ウォーク（Lévy フライト）と解釈されるものは、Pareto の統計の他にも、自然現象や社会現象の中に豊富に存在することが知られている。それらは例えば、ミセル型ポリマー媒質中の分子の運動、回転同心円環内の層流のカオス的輸送、準反跳レーザー冷却、周期的パルス光照射を受けるセシウム原子の運動量分布則、量子色力学によるハード・プロセスに対する多重度分布、健康人の心臓の鼓動のリズム、水道の蛇口からもれ落ちる水滴の間隔、経済指数の分布、DNA の塩基配列、アホウドリの餌の漁り方、というように実に多様である。

Lévy は

$$L_\alpha(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} e^{-\alpha |k|^\alpha} dk \tag{85}$$

という形の分布について特に考察した。ここで、αは正の定数である。αは

$$0 < \alpha \le 2 \tag{86}$$

を満たすパラメータで、特性指数と呼ばれる。（$\alpha > 2$ の場合、$L_\alpha(x)$ の非負性は保証されない。）$\alpha < 2$ ならば、この分布は大きな x に対して

$$L_\alpha(x) \sim |x|^{-1-\alpha} \tag{87}$$

という振る舞いをする。一方、$\alpha = 2$ のときは、$L_\alpha(x)$ は式(81)で $1/\beta = 2\sigma^2 = 4a$ とした場合の Gauss 分布になり、式(87)と異なり指数関数的に減衰する。この意味で、$\alpha = 2$ は特異である。また、$\alpha = 1$ では Cauchy-Lorentz 分布 $L_1(x) = (a/\pi) \times (x^2 + a^2)^{-1}$、$\alpha = 2/3$ の場合には Zolotarev 分布 $L_{2/3}(x) = (2\pi)^{-1/2} x^{-1} \exp(-2a^3 / 27x^2) \times W_{1/2,1/6}(4a^{2/3} / 27x^2)$（$W_{1/2,1/6}(z)$ は Whittaker 関数）に等しい。

時間を離散化して考えると、先述の Gauss 過程というのは単位時間ステップで近接点へジャンプする場合になっているが、Lévy 過程はもっと速くへジャンプする確率を含んでいる。

式(85)が示すように、Lévy 分布は“引き延ばされた指数関数”（stretched exponential function）の Fourier 変換である。このことから、N 回の独立なジャンプをあらわす分布は $N^{-1/\alpha} L_\alpha(x / N^{1/\alpha})$ で与えられることになる。このように独立な確率変数の和のしたがう分布が、一つの変数に対する分布の変数のスケールを変えたものに等しくなる場合、それは安定分布と呼ばれる。Lévy 分布や Gauss 分布は安定分布である。

通常の中心極限定理によれば、有限な２次モーメントが存在する場合、同一の分布にしたがう N 個の互いに独立な確率変数に対応する分布は、N が大きくなると Gauss 分布に近づく。一方、２次モーメントが発散するような分布に関しては、Lévy-Gnedenko の一般化された中心極限定理によって、大きな N で収束する分布の収束先は Lévy 分布の安定クラスのうちのどれかである。

ところで、1980 年代に、フラクタルの概念の物理学における意義がさかんに議論された。その関連で、フラクタル的分布である Lévy 型の分布を最大エントロピー原理から理解しようという試みがなされた。

そのような研究の結論は、Boltzmann-Shanonn エントロピーに基づく限り、Lévy 分布(85)を得るためには

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x)\log\left(\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx-\alpha|k|^{\alpha}}dk\right)dx = \text{一定} \tag{88}$$

という拘束条件を課さなければならない、ということであった。しかし残念ながら、この拘束条件の物理的意味を見い出すことはおよそ不可能である。このことは、Lévy の間題に対して Boltzmann-Shanonn エントロピーを適用することが如何に不自然であるかを示している。

そこで、Tsallis エントロピー

$$S[p] = \frac{1}{1-q}\left\{\int_{-\infty}^{\infty}[\sigma p(x)]^q \frac{dx}{\sigma} - 1\right\} \tag{89}$$

を考えてみよう。拘束条件としては、式(80)の自然な拡張である

$$\left\langle X^2 \right\rangle_q = \frac{1}{c_q}\int_{-\infty}^{\infty}[p(x)]^q x^2 dx = \sigma^2 \tag{90}$$

$$c_q = \int_{-\infty}^{\infty}[p(x)]^q dx \tag{91}$$

を課すことにする。重要なのは、Lévy 型分布において通常の２次モーメント$\left\langle X^2 \right\rangle_{q=1} = \int_{-\infty}^{\infty} p(x)x^2 dx$ は発散しても、q-期待値(90)は有限になりうるという点である。$p(x)$ の規格化条件も課すことにより導かれる最大エントロピー状態は

$$p^{(e)}(x) = \frac{1}{Z_q(\beta)}\left[1-(1-q)\frac{\beta^*}{c_q}(x^2 - \left\langle X^2 \right\rangle_q)\right]^{1/(1-q)} \tag{92}$$

である。ただし、

$$Z_q(\beta) = \int_{-\infty}^{\infty}\left[1-(1-q)\frac{\beta^*}{c_q}(x^2 - \left\langle X^2 \right\rangle_q)\right]^{1/(1-q)} dx \tag{93}$$

であり、また、拘束条件(90)に対する Lagrange の未定乗数βを$\beta = \beta^* \sigma^{q-1}$とおいた。ここでは長く尾を引く分布に興味があるので、あらかじめ subextensive$(q > 1)$であることを仮定しておく。分布(91)を用いて式(90),(93)を計算することにより、結果的に分布自身が自己無矛盾に

$$p^{(e)}(x) = \sqrt{\frac{q-1}{\pi(3-q)}}\,\frac{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)}{\Gamma\left(\frac{3-q}{2q-2}\right)}\,\frac{1/\sigma}{\left(1+\frac{q-1}{3-q}\frac{x^2}{\sigma^2}\right)^{1/(q-1)}} \tag{94}$$

と求められる。この分布が規格化可能かつ発散する２次モーメント$\left\langle X^2 \right\rangle_{q=1}$ をもつためには、q は

$$\frac{5}{3} < q < 3 \tag{95}$$

の範囲になければならない。大きな$|x|$に対する$p^{(e)}(x)$の漸近形を式(87)と比較することにより、指数が

$$\alpha = \frac{3-q}{q-1} \tag{96}$$

であることがわかる。したがって、$p^{(e)}(x)$を１回のジャンプに関する確率分布であるとすると、N 回のジャンプをあらわす確率分布$p^{(e)}(x:N)$は、一般化された中心極限定理によって、大きなNで Lévy 分布$N^{-1/\alpha}L_\alpha(x/N^{1/\alpha})$に近づくと考えられる。実際、例えば$q=2$の場合、式(94)は Cauchy-Lorectz 分布$L_1(x)$に厳密に等しい。

このように非加法的統計力学の枠組みでは、Lévy 分布をきわめて自然な形で理解できるのである。

10-2)　非線形 Fokker-Planck 方程式と異常拡散

Boltzmann-Gibbs 分布は、確率分布関数の時間発展をあらわす Fokker-Planck 方程式の定常解としても特徴づけられる。まずはじめに、このことを簡単に復習しよう。

粒子の１次元的 Brown 運動を記述する Langevin 方程式

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + m\gamma\frac{dx}{dt} = F(x) + m\eta(t) \tag{97}$$

を考える。ここで m と $x(t)$ はそれぞれ粒子（ウォーカー）の質量と位置をあらわす。γ は抵抗係数である、右辺の力のうち、$F(x)$ は正則な部分で、ここではポテンシャル力

$$F(x) = -\frac{dU(x)}{dx} \tag{98}$$

であるとする。一方、$m\eta(t)$ はランダムな力で、バイアスのない Gauss 型ホワイト・ノイズ

$$\overline{\eta(t)} = 0, \quad \overline{\eta(t)\eta(t')} = D\delta(t-t') \tag{99}$$

であると仮定する。バーは$\eta(t)$の Gauss 分布に関する期待値を意味する。D は拡散係数であり、Einstein の関係式により m,　γ および温度の逆数βと

$$D = \frac{2\gamma}{m\beta} \tag{100}$$

のように結びつけられている。Langevin 方程式(97)に対応して、位置 x と速度 v の分布$W(x,v,t)$を決定する Fokker-Planck 方程式は

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \left\{-\frac{\partial}{\partial x}v + \frac{\partial}{\partial v}\left[\gamma v + \frac{1}{m}\frac{dU(x)}{dx}\right] + \frac{D}{2}\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right\}W \tag{101}$$

となる。これは Kramers 方程式とも呼ばれる。この方程式の定常解は、Boltzmann-Gibbs 因子

$$W(x,v) = W_0 e^{-\beta E} \tag{102}$$

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + U(x) \tag{103}$$

で与えられる。ただし、W_0 は規格化条件によって決定される定数である。すなわち、Boltzmann-Shanonn エントロピーを最大にする状態が定常解になっている。

抵抗が大きい場合には、Langevin 方程式(97)は過減衰の式

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{m\gamma}F(x) + \frac{1}{\gamma}\eta(t) \tag{104}$$

で近似される。対応する位置分布 $p(x,t)$ に対する Fokker-Planck 方程式は

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{m\gamma}\left[-\frac{\partial}{\partial t}F(x) + \frac{mD}{2\gamma}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right]p \tag{105}$$

となる。これは Smoluchowski 方程式、または一般化された拡散方程式とも呼ばれる。

式(98)のドリフトの場合、Smoluchowski 方程式の定常解は、p_0 を定数として

$$p(x) = p_0 e^{-\beta U(x)} \tag{106}$$

となる。これは、Boltzmann-Gibbs 因子(102)において、減衰が優勢であることにより運動エネルギーの項を無視したものに等しい。

Smoluchowski 方程式に関して特に重要なのは、いわゆる Ornstein-Uhlenbeck 過程である。これは、ドリフトが

$$F(x) = -kx, \quad (k > 0) \tag{107}$$

で与えられる場合である。（一般には、Smoluchowski 方程式の段階では、拡散係数は x に依存してよい。Ornstein-Uhlenbeck 過程は、拡散係数が定数でドリフトが式(107)のように x の１次関数で与えられる場合として定義される。）このとき、Smoluchowski 方程式は

$$p(x,t) = \frac{1}{Z(t)}e^{-B(t)[x-\xi(t)]^2} \tag{108}$$

という形の時間に依存する解をもつ。ただし、$B(t), Z(t)$ および $\xi(t)$ は

$$\frac{B(t)}{B(0)} = \left[\frac{Z(t)}{Z(0)}\right]^2 = \frac{1}{\left[1-k^{-1}DB(0)\right]e^{-2kt} + k^{-1}DB(0)} \tag{109}$$

$$\xi(t) = \xi(0)e^{-kt} \tag{110}$$

で与えられる。自由粒子近似 $(k \to +0)$ では、分散 $\left\langle\left[X-\xi(t)\right]^2\right\rangle = 1/[2B(t)]$ の長時間での振る舞いは

$$\frac{1}{2B(t)} \sim Dt \tag{111}$$

となる。すなわち、分布の幅の２乗が時間に比例するという、通常の拡散法則(normal diffusion)が導かれる。

以上は線形 Fokker-Planck 方程式の議論である。しかし、自然界には非線形 Fokker-Planck 方程式によって記述される系がいろいろある。そこで、式(105)を拡張して

$$\frac{\partial (p)^{\lambda}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\left[F(x)(p)^{\mu} \right] + \frac{D}{2}\frac{\partial^2 (p)^{\nu}}{\partial x^2} \tag{112}$$

という非線形方程式を考察しよう。ただし、簡単のために $m=1,\ \gamma=1$ とおいた。λ,μ および ν は定数指数である、（分布関数は長さの逆数の次元をもつので、この方程式のドリフトと拡敵係数は式(105)中のものとは異なるが、ここでは便宜上同じ表記をしている。）この形の方程式は、応用の観点から特に興味深い。例えば、重力によって落下する薄い流体フィルムの厚さの拡散の様子は、$\lambda=1,\mu=3,\nu=4$ の場合と形式的に同じ方程式であらわされる。また、放射的エネルギー輸送現象における Marshak 波の温度拡散は、ドリフトをもたない、$\lambda=1,\mu=7$ の方程式で記述される。

簡単な積分の計算によって、ドリフトが式(98)で与えられる場合の方程式'(112)の定常解が

$$p(x) = f_0\left[1-(1-q)\beta' U(x)\right]^{1/(1-q)} \tag{113}$$

$$q = \mu - \nu + 1 \tag{114}$$

であることが示される。ここで、f_0 は定数であり、$\beta' = \beta\nu^{-1}(f_0)^{q-1}$ とおいた。解(113)は式(70)の形をしている。このように、最大 Tsallis エントロピー状態は非線形 Fokker-Planck 方程式に関連する定常現象をあらわすのである。また、$\mu \to \nu (q \to 1)$ の極限でこの解が式(106)に収束することは明らかであろう。

さて、式(112)において $\lambda=\mu$ とし、かつドリフトが Ornsten-Uhlenbeck 型(107)であるとしよう。すなわち

$$\frac{\partial (p)^{\mu}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left[kx(p)^{\mu} \right] + \frac{D}{2}\frac{\partial^2 (p)^{\nu}}{\partial x^2} \tag{115}$$

という方程式について考えよう。興味深いことに、実はこの方程式は式(108)の非加法的拡張である

$$p(x,t) = \frac{1}{Z_q(t)}\left\{1-(1-q)B(t)\left[x-\xi(t)\right]^2\right\}^{1/(1-q)} \tag{116}$$

という形の時間に依存する厳密解をもつ。q は式(114)で与えられているものに等しい。実際、式(116)を方程式(115)に代入することにより、恒等式

$$\frac{B(t)}{B(0)} = \left[\frac{Z_q(t)}{Z_q(0)}\right]^{2\mu} \tag{117}$$

および $Z_q(t)$ に対する方程式

$$\frac{\mu}{\mu+\nu}\frac{d\left[Z_q(t)\right]^{\mu+\nu}}{dt} = -k\left[Z_q(t)\right]^{\mu+\nu} + \nu DB(0)\left[Z_q(0)\right]^{2\mu} \tag{118}$$

を得る。ただし、$\xi(t)$ は式(110)中のものと同じである。方程式(118)はただちに

$$Z_q(t) = Z_q(0)\left[(1-K^{-1})e^{-t/\tau} + K^{-1}\right]^{1/(\mu+\nu)} \tag{119}$$

$$K = \frac{k}{\nu DB(0)\left[Z_q(0)\right]^{\mu-\nu}} \tag{120}$$

$$\tau = \frac{\mu}{k(\mu+\nu)} \tag{121}$$

と解くことができる。自由粒子近似$(k \to +0)$を考えると、$Z_q(t)$は長時間で

$$Z_q(t) \sim t^{1/(\mu+\nu)} \tag{122}$$

と振る舞うことから、分布の “ 幅 ” の２乗の尺度を与える量$1/B(t)$は漸近的に

$$\frac{1}{B(t)} \sim t^{2\mu/(\mu+\nu)} \tag{123}$$

となることがわかる。$\nu/\mu = 1$のとき以外は、通常の拡散法則(111)と異なり、幅の２乗が単純に時間に比例しない。このような拡散を異常拡散(anomalous diffusion)という。$\nu/\mu > 1$ $(\nu/\mu < 1)$の場合、通常の拡散よりも遅く（速く）拡散するので、subdiffusion(superdiffusion)と呼ばれる。異常拡散は、多孔性媒質やランダム媒質巾でよく見られる現象であり、10.1 で述べた Lévy 型ランダム・ウォークと密接に関係している。

１０．４ 非弾性散乱する粉粒の速度分布

外部からの強制振動の下での粉粒物質の振る舞いの研究が行なわれている。ここでは、そのような系に対するシミュレーションの結果とそれを説明する理論的アプローチについて紹介する。

まず、粉粒でできたベッドを作り、それに垂直に調和振動を与える。水平方向に周期的境界条件を課す。粉粒子は有限の拡がりをもち、一様重力中で粘性を含む衝突を繰り返すとする。すでに１０２４個の粉粒子を用いたシミュレーションが行なわれており。ベッドの中に二つの相が共存して現れることが見い出されている。一つはベッドの下層部の固体相で、もう一つはベッドの上層部の流体相である。固体相では、Gauss 分布に近い。一方、流体相では、長く尾を引く分布になっていることが見られる。この分布を更に詳しく調べることにより、それが、

$$p(v) = \frac{1}{2a}\left[1+\left(\frac{v}{a}\right)^2\right]^{-3/2} \tag{126}$$

という関数でよく近似できることがわかった。これは、$q = 5/3$の Tsallis 分布になっている。

この速度分布を説明するために、以下のような考察が行なわれた。まず、N個の粉粒子でできているクラスターに注目する。これらの粉粒子は、衝突によって何度も運動量を交換する。保存する全運動量から相対的に測られた各粉粒子の運動量は、そのような過程をとおして、ある平均値に近づくであろう。すなわち、クラスター中のi番目の粉粒子の相対速度v_iは、平均速度$v = (1/N)\sum_i v_i$に収束すると考えられる。ここで、衝突前の各相対速度v_iが独立に同一の分散σ^2をもつ Gauss 分布であらわされると仮定すると、平均速度の分布はその Gauss 分布のN回の合成積で与えられる。したがって

$$p_N(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2/N}}\exp\left(-\frac{v^2}{2\sigma^2/N}\right) \tag{127}$$

となる。次に、衝突に関与する粉粒子対のサイズがNのクラスターに属する確率分布を

$$w(N) = ce^{-cN} \tag{128}$$

であると仮定する。$w(N)$ はクラスターのサイズの分布と見なすこともできる。これら二つの仮定から、多数の衝突後に相対速度 v_i をもつ粉粒子を見い出す確率は、

$$p(v) = \sum_N w(N) p_N(v) \tag{129}$$

という分布であらわされることになる。和を N についての $[0,\infty)$ での積分で近似することにより、式(126)が得られることがわかる。ただし、$a = \sqrt{2c\sigma^2}$ である。

以上の議論において特に注目したいのは、系が、いろいろなサイズをもつクラスターを含むという階層構造を有する点である。Tsallis の非加法的統計力学が内包する q-変形理論的構遺が階層性の存存を示唆することを７節で述べた。階層性と非加法的統計力学との関係は、実はかなり一般的な事実である。Boltzmann-Gibbs 統計力学では、与えられた系に関して、その微視的初期配位だけが異なるようなレプリカをたくさん用意する。アンサンブル平均という概念は、このレプリカ全体にわたる平均である。この処方を拡張して、もし異なるスケールごとに系のレプリカを用意するならば、非加法的統計力学の確率分布が得られる。異なるスケールにわたるアンサンブル平均という操作が、理論をスケール不変にしているのである。

１０．６ 銀河クラスターの速度分布

銀河クラスターの運動は宇宙模型と宇宙の質量密度に関する情報を与えると考えられている。最近、渦の巻き方が比較的ゆるい Sc 型と呼ばれる銀河の Tully-Fisher 距離の測定をとおして、銀河クラスターの速度分布がかなり精密に調べられた。分布が 540km/s 付近で切断されているという顕著な特徴は、superextensive な Tsallis 分布では、あらかじめ組み込まれている。実際、積分された Tsallis 型速度エスコート分布関数

$$P(>v) = \frac{\int_v^{v_{\max}} \left[1-(1-q)(v/v_0)^2\right]^{q/(1-q)} dv}{\int_0^{v_{\max}} \left[1-(1-q)(v/v_0)^2\right]^{q/(1-q)} dv}$$

において、データが極めてよく再現されることが示された。

この場合の Tsallis 分布は、いかなる宇宙模型とも無関係である。自已重力系に対する統計法則を非加法的にしただけである、

代表的な宇宙模型で理解できなかった観測データがこのような統計法則の変更で簡単に説明できるという事実は、宇宙論における非加法的統計力学の役割に関する研究の重要性を示唆しているように思われる。

１０．７ その他の応用：コメント

Tsallis の非加法的統計力学の興味深い応用はまだまだあるが、紙数の限界が迫ってきた。ここではそれらのうちのいくつかの文献的紹介にとどめなければならない。

まず、最適化問題への応用がある。一般化されたシミュレーティッド・アニーリング法が提出された。これは通常のシミュレーティッド・アニーリングにおける受容確率（acceptable probability）と訪問分布（visiting distribution）中にあらわれる Boltzmann 因子を Tsallis 因子で置き換えたものである。このアルゴリズムが最適解の発見までに要する時間を著しく短縮することがわかった。これはただちに巡回セールスマン問題やタンパク質フォールディングの問題に応用された。

おわりに

以上、Tsallis エントロピーに基づく非加法的統計力学の理論的枠組みとその応用について概観してきた。

この解説の冒頭で述べたように、この理論はまだ完成されたものではなく、明らかに発展の途上にある。非常に基本的でありながら理解できていないことがいくつか残っている。例えば、熱力学第ゼロ法則である。これに関しては、ごく単純な系の場合に限って定式化されているのみであり、一般的な議論が待たれる。また、ごく最近見い出された Boltzmann-Gibbs 極限$(q \to 1)$と熱力学的極限の交換不可能性という事実も、その物理的意味はまだはっきりしていない。

さて、非加法的統計力学が Boltzmann-Gibbs の拡張として真の基礎的物理理論となるためには、実験データを説明するために q の値がアドホックに決められるのではなく、考えている系の動力学的性質に基づいて計算されることが望ましい。これは一般にきわめて難しい問題である。しかし最近 q が解析的に求められる例が一つ見つかった。カオス力学系のアトラクターのマルチフラクタル特異性スペクトルを特徴づける量と q との間の厳密な関係が発見されたのである。q の値の計算のアルゴリズムを確立することは、もっとも重要な課題の一つである。

最後に、やはりごく最近得られた統計力学の根本問題に関する一つの結果について触れたい。５節で述べたように、ミクロカノニカル集団理論と等確率の原理は、通常の統計力学と Tsallis の非加法的統計力学とにおいて同一である。ところで、ミクロカノニカル集団理論が対象とする閉じた全体系の中の部分系に対するカノニカル集団理論については、いわゆる Gibbs の定理というものがある。この定理は、対象としている部分系以外の自由度を消去して得られるカノニカル集団は Boltzmann-Gibbs 型の分布関数によって記述され、そしてこの分布は Boltzmann-Shannon エントロピーを最大にする、ということを主張する。これは１世紀の間受け入れられてきた主張であり、歴史的には、Gibbs のオリジナルな議論をはじめ、Darwin-Fowler の最速降下法、Khinchin の中心極限定理を応用する方法、Balian-Balazs の計数原理などによって、繰り返し証明されてきた事柄なのである。したがって、もしこの主張が正しいならば、論理的問題として、Tsallis エントロピーなどを考える余地はまったくない、ということになる。しかしながら、この " 定理 " が実は普遍的ではなく、「ミクロカノニカル集団理論から導かれるカノニカル集団理論は一意的でない」ことが見い出された。そして、Boltzmann-Gibbs のカノニカル集団理論以外の理論体系として、Tsallis の非加法的統計力学が確かに導かれることが証明されたのである。このことは、平衡統一計力学が Boltzmann-Gibbs 理論に限定されるものではなく、実はもっと豊かな体系でありうることを示している。したがって、非平衡理論も多様でありうる。一方、これまでの非平衡統計力学の研究は、主として Boltzmann-Gibbs 下衡理論からのずれのみを取り扱ってきた。しかし、そのようなアプローチでうまく理解できない問題が多々存存することがわかってきた。Boltzmann-Gibbs 理論の非加法的拡張は、統計力学の地平を大きくひろげる可能性を秘めている。