

Gauß 原理と統計集団間の等価性を満たす一般化エントロピー¹

和田達明 茨城大学

1 緒言

熱力学や統計力学はエントロピーを基礎とする強力な枠組みである。力学や電磁気学と同様に、熱力学はマクロ系の熱的現象を現象論として取り扱う学問であるが、統計力学は、マクロ系を構成している非常に多数のミクロ系の状態に対して確率や統計の手法を適用することで、マクロ系の熱的現象を理解する。統計力学において用いられる統計的手法としては、数学的に初等的な平均操作から、高等的な中心極限定理や大偏差原理などがある。本研究で用いる統計的手法は、Gauß自身が開発した正規分布を導出する方法である Gauß原理 [1] である。統計力学におけるエントロピーには、例えばエネルギー E が一定の小正準集団における Boltzmann エントロピー $S^B(E)$ や温度一定の正準集団における Gibbs エントロピー $S(U)$ がある。同じ熱力学系を記述しているのであれば、それら統計集団間に等価性が成立するはずである。このような統計集団の等価性 [2] と Gauß原理とを満たすという要請から、エントロピーの関数形を決めることができる [3]。

2 統計力学における Gauß原理

温度 T の熱的な系の確率分布 $f(E; \beta)$ は、エネルギー E の関数として

$$f(E; \beta) = \Omega(E) p(E; \beta) \quad (1)$$

と表せる [4, 5]。ここで、 $\beta = 1/(k_B T)$ であり、 $p(E; \beta)$ は統計的因子と呼ばれる量で、熱平衡状態においてエネルギー E である単一状態が実現する確率である。 $\Omega(E)$ はそのような状態の多重度 (or エネルギー状態密度) であり、構造因子とも呼ばれ、系のエネルギー状態数² $W(E) = \Omega(E) dE$ を特徴付けている。エネルギー空間での積分から位相空間 (Γ -空間) での積分へ、 $d\Gamma = \Omega(E) dE$ の関係を利用して変換すると、 f と p の規格化条件はそれぞれ

$$\int dE f(E; \beta) = \int dE \Omega(E) p(E; \beta) = \int d\Gamma p(E; \beta) = 1, \quad (2)$$

で結ばれていることが分かる。

さて、温度一定の正準分布に対しては、統計因子は $p(E; \beta) = Z(\beta)^{-1} \exp(-\beta E)$ の Gibbs 因子で与えられるので、

$$f(E; \beta) = \Omega(E) \frac{e^{-\beta E}}{Z(\beta)}, \quad (3)$$

と表せる。ここで $Z(\beta)$ は、分配関数

$$Z(\beta) = \int_0^\infty dE \Omega(E) e^{-\beta E}. \quad (4)$$

である。この状況で最も実現可能な状態は、 $f(E; \beta) = \Omega(E) p(E; \beta)$ を最大化する状態 (熱平衡状態) であり、そのエネルギーを U^* 、最大値を $f(U^*; \beta)$ と記すことにする。

¹RIMS 研究集会「函数解析による一般化エントロピーの新展開」、京都大学数理解析研究所、2012 年 11 月 12 日-14 日の講演報告書

² $W(E)$ は、系のエネルギーが E から $E + dE$ の間にある状態の数

2.1 Gauß原理

Gauss 原理 (or Gauss の誤差法則 [1]) は、ある物理量の真値 θ の存在を仮定し、その物理量に対する測定データ x_i (データ数を n とする) に対する誤差 $x_i - \theta$ の分布関数 $f(x_i - \theta)$ を導出する原理である。

先ず、対数尤度関数

$$\ln \mathcal{L}(\theta) \equiv \sum_{i=1}^n \ln f(x_i - \theta), \quad (5)$$

を導入する。Gauss 原理における要請は次の2つである。

1) $\theta = \theta^*$ において、対数尤度関数は単一の最大を持つ：

$$\left. \frac{d}{d\theta} \ln \mathcal{L}(\theta) \right|_{\theta=\theta^*} = \sum_{i=1}^n \left. \frac{\partial}{\partial \theta} \ln f(x_i - \theta) \right|_{\theta=\theta^*} = 0, \quad (6)$$

2) θ^* は測定データの算術平均に等しい：

$$\sum_{i=1}^n (x_i - \theta^*) = 0. \quad (7)$$

付録の補題より、この2つの要請を同時に満足する為には、式 (6) と (7) の対応するそれぞれの項が互いに比例しなければならない。ここで、連続で2回微分可能な凹関数 $\varphi(\theta^*)$ を導入し、比例係数を $-d^2\varphi(\theta^*)/d(\theta^*)^2$ と置くことにすると

$$\frac{\partial}{\partial \theta^*} \ln f(x_i - \theta^*) = -\frac{d^2\varphi(\theta^*)}{d(\theta^*)^2} (x_i - \theta^*). \quad (8)$$

この式を θ^* について積分して、積分定数として θ^* に依存しない別の関数 $\psi(x_i)$ を導入すると、

$$\ln f(x_i - \theta^*) = \psi(x_i) - \varphi(\theta^*) - \frac{d\varphi(\theta^*)}{d\theta^*} (x_i - \theta^*), \quad (9)$$

を得る。この表式がいわゆる誤差法則の形である。

$\psi(x_i)$ を $x_i = \theta^*$ の周りに2次のオーダーまで展開すると

$$\psi(x_i) \approx \psi(\theta^*) + \frac{d\psi(\theta^*)}{d\theta^*} (x_i - \theta^*) + \frac{1}{2} \frac{d^2\psi(\theta^*)}{d(\theta^*)^2} (x_i - \theta^*)^2, \quad (10)$$

であるが、もし関数 ψ の x_i 依存性が、関数 φ の θ^* 依存性と等しいならば、

$$\psi(x_i) \approx \psi(\theta^*) + \frac{d\varphi(\theta^*)}{d\theta^*} (x_i - \theta^*) + \frac{1}{2} \frac{d^2\varphi(\theta^*)}{d(\theta^*)^2} (x_i - \theta^*)^2, \quad (11)$$

と表せる。よって、式 (9) は

$$\ln f(x_i - \theta^*) = \psi(\theta^*) - \varphi(\theta^*) + \frac{1}{2} \frac{d^2\varphi(\theta)}{d\theta^2} \Big|_{\theta=\theta^*} (x_i - \theta^*)^2, \quad (12)$$

となる。ここで $\bar{\theta}$ は x_i と θ^* の間のある値を取る。右辺の最後の項が負値であることは、 φ の凹性 ($\varphi'' < 0$) から保証されることに注意。よって、

$$f(x_i - \theta^*) = f(0) \exp \left[\frac{1}{2} \frac{d^2\varphi(\theta)}{d\theta^2} \Big|_{\theta=\bar{\theta}} (x_i - \theta^*)^2 \right], \quad (13)$$

の結果を得る。これは規格化定数を $f(0) = \exp[\psi(\theta^*) - \varphi(\theta^*)]$ とする Gauss 関数に他ならない。

2.2 Gauß原理の統計力学への適用

Lavenda [6] に従って、Gauß原理の（熱平衡）統計力学への適用を説明する。系のエネルギー状態密度を $\Omega(E)$ と記すと、Boltzmann の原理から

$$S^B(E) = \ln \Omega(E), \quad (14)$$

であり³、これを Boltzmann エントロピー（“ストカスティク・エントロピー”）と呼ぶ。式 (3) の両辺の対数をとると、

$$\ln f(E; \beta(U^*)) = \ln \Omega(E) - \beta(U^*)E - \ln Z(\beta(U^*)). \quad (15)$$

ここで、 β の U^* 依存性を明示的に書き下している点に注意。

$$\beta(U^*) \equiv \left. \frac{\partial \ln \Omega(E)}{\partial E} \right|_{E=U^*}. \quad (16)$$

次の Legendre 関係式

$$\ln Z(\beta(U^*)) = S(U^*) - \beta(U^*)U^*, \quad \beta(U^*) = \frac{\partial S(U^*)}{\partial U^*}, \quad (17)$$

と Boltzmann の原理 (14) を利用すると、式 (15) は

$$\ln f(E; \beta(U^*)) = S^B(E) - S(U^*) - \frac{\partial S(U^*)}{\partial U^*}(E - U^*), \quad (18)$$

と誤差法則の形 (9) として書き表せる。この段階で、もし $S^B(E)$ の E への関数依存性が $S(U^*)$ の U^* へのそれと同じならば [2]、先と同様にして、

$$\ln f(E; \beta(U^*)) = S^B(U^*) - S(U^*) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 S(U)}{\partial U^2} \right|_{U=\tilde{U}} (E - U^*)^2, \quad (19)$$

となる。ここで、 $\tilde{U}$ は U と U^* との間のある値を取る。 $S(U^*)$ は凹 (concave) 関数なので、次の正值パラメータ

$$\frac{1}{\sigma^2} \equiv - \left. \frac{\partial^2 S(U)}{\partial U^2} \right|_{U=\tilde{U}} > 0, \quad (20)$$

と

$$\ln f(U^*; \beta(U^*)) = S^B(U^*) - S(U^*) \quad (21)$$

であることを利用すれば、次の Gauss 分布を得る。

$$f(E; \beta(U^*)) = f(U^*; \beta(U^*)) \exp \left[-\frac{1}{2\sigma^2} (E - U^*)^2 \right]. \quad (22)$$

2.3 エントロピー汎関数

式 (15) を並べ直すと、対数尤度比は

$$\ln \frac{f(E; \beta(U^*))}{\Omega(E)} = -S(U^*) - \beta(U^*)(E - U^*). \quad (23)$$

³ $W(E) = \Omega(E)dE$ で、通常は dE は $\Omega(E)$ に比べて桁違いに小さいので、 $\ln W(E) = \ln \Omega(E)$ として良い。

この両辺に $f(E; \beta(U^*))$ を乗じて、エネルギー E について積分すると、

$$\int dE f(E; \beta(U^*)) \ln \frac{f(E; \beta(U^*))}{\Omega(E)} = -S(U^*) - \beta(U^*) \left(\int dE f(E; \beta(U^*)) E - U^* \right). \quad (24)$$

U^* はエネルギー期待値に等しいので、結局、対数尤度比の期待値は

$$\begin{aligned} S(U^*) &= - \int dE f(E; \beta(U^*)) \ln \frac{f(E; \beta(U^*))}{\Omega(E)} = - \int dE \Omega(E) p(E; \beta(U^*)) \ln p(E; \beta(U^*)) \\ &= - \int d\Gamma p(\Gamma; \beta(U^*)) \ln p(\Gamma; \beta(U^*)), \end{aligned} \quad (25)$$

となる。最後の行で、 $d\Gamma = \Omega(E)dE$ の関係を利用して、エネルギー空間での積分から Γ -(or 位相) 空間での積分へ変換した。こうして、Gauß原理と統計集団間の等価性より、対数尤度比の期待値である統計的エントロピー $S(U)$ の確率分布 $p(\Gamma; \beta(U^*))$ に関する関数形が決定できることが判る。

3 Gauß原理の q -拡張

次に、統計力学の実数パラメータ拡張のひとつである q -拡張 [7] に基づいて、Gauß原理の q -拡張 [3] を考える。

Gaußの誤差法則の q -拡張は、文献 [8] で初めて示された。そこで、 q -対数関数を利用して通常の対数尤度から q -対数尤度

$$\ln \mathcal{L}(U) = \sum_i \ln f(E_i; U) \Rightarrow \ln_q \mathcal{L}_q \equiv \sum_i \ln_q f(E_i; U), \quad (26)$$

へ拡張する。 q -拡張された統計因子としては、以下の q -指数分布 [9] を用いる。

$$p_q(E; \beta^N) = \exp_q \left[-\beta^N E - \Phi_q^N(\beta^N) \right]. \quad (27)$$

ここで、 Φ_q^N は q -拡張された Massieu 関数で、規格化された Tsallis エントロピー

$$S_q^N = \frac{S_q}{\int d\Gamma p_i^q}, \quad (28)$$

と Legendre 双対なポテンシャル関数である。

$$\Phi_q^N(\beta^N) = S_q^N - \beta^N U_q, \quad \beta^N(\hat{U}_q) = \frac{dS_q^N(U_q)}{dU_q} \Big|_{U_q=\hat{U}_q}. \quad (29)$$

よって、系の確率分布は

$$f_q(E; U_q) = \Omega(E) p_q(E; \beta^N) = \Omega(E) \exp_q \left[-\beta^N E - \Phi_q^N(\beta^N) \right], \quad (30)$$

と表される。両辺の q -対数を取ると、

$$\ln_q f_q(E; \hat{U}_q) = \ln_q \Omega(E) \left[1 - (1-q) \left(\beta^N E + \Phi_q^N(\beta^N) \right) \right] - \beta^N E - \Phi_q^N(\beta^N). \quad (31)$$

次の q -拡張された”ストカスティク・エントロピー”、

$$\Sigma_q(E) \equiv \ln_q \Omega(E) \left[1 - (1-q) \left(S_q^N + \beta^N (E - \hat{U}_q) \right) \right], \quad (32)$$

を導入して、Legendre 関係式 (29) を利用すると、

$$\ln_q f_q(E; \hat{U}_q) = \Sigma_q(E) - S_q^N(\hat{U}_q) - \frac{dS_q^N(U_q)}{dU_q} \Big|_{U_q=\hat{U}_q} (E - \hat{U}_q). \quad (33)$$

この表式は誤差法則の形 (9) になっている！

よって、統計集団間の等価性 [2] により、もし $\Sigma_q(E)$ の関数依存性が $S_q^N(U_q)$ と同じならば、以下の q -Gauß 誤差関数を得る。

$$f_q(E; \hat{U}_q) = f_q(\hat{U}_q; \hat{U}_q) \exp_q \left[-\frac{1}{2\sigma_q^2} (E - U_q)^2 \right], \quad (34)$$

ここで、正値量 σ_q^2

$$\frac{1}{\sigma_q^2} \equiv -\frac{d^2 S_q^N(U_q)}{dU_q^2} \Big|_{U_q=\hat{U}_q} > 0. \quad (35)$$

を導入した。

3.1 q -エントロピー関数

確率分布関数の規格化条件より、

$$0 = \frac{d}{d\beta^N} \int_0^\infty \Omega(E) p_q(E; \beta^N) dE = - \int_0^\infty \Omega(E) dE \left(E + \frac{d\Phi_q^N(\beta^N)}{d\beta^N} \right) [p_q(E; \beta^N)]^q. \quad (36)$$

よって、次の関係式を得る。

$$U_q(\beta^N) \equiv \int_0^\infty F_q(E; U_q) E dE = -\frac{d\Phi_q^N(\beta^N)}{d\beta^N}. \quad (37)$$

ここで、 $f_q(E; U_q)$ に対するエスコート分布 (の類似物) $F_q(E; U_q)$ を次式で導入。

$$F_q(E; U_q) = \frac{\Omega(E) [p_q(E; \beta^N)]^q}{\int d\Gamma [p_q(E; \beta^N)]^q} = \Omega(E) P_q(E; U_q), \quad (38)$$

P_q は p_q に対するエスコート分布。

書き直して、両辺の q -対数を取ると、

$$\ln_q \frac{f_q(E; \hat{U}_q)}{\Omega(E)} = -S_q^N - \beta^N (E - \hat{U}_q). \quad (39)$$

統計的エントロピーの q -拡張として、 q -対数尤度比の q -期待値、即ち

$$- \int dE F_q(E; \hat{U}_q) \ln_q \frac{f_q(E; \hat{U}_q)}{\Omega(E)} = S_q^N(\hat{U}_q) + \beta^N \left(\int dE F_q(E; \hat{U}_q) E - \hat{U}_q \right), \quad (40)$$

と定義する。

$\hat{U}_q$ はエネルギーのエスコート期待値に等しいので、 q -拡張された統計的エントロピーは規格化された Tsallis エントロピーである。

$$\begin{aligned} S_q^N(\hat{U}_q) &= - \int dE \Omega(E) P_q(E; \beta^N) \ln_q p_q(E; \beta^N) \\ &= - \int d\Gamma P_q(E; \beta^N) \ln_q p_q(E; \beta^N). \end{aligned} \quad (41)$$

4 結言

先ず、Gauß原理 [1] について説明し、その熱平衡統計力学への適用 [6] と、小正準集団における Boltzmann エントロピー $S^B(E)$ (“ストカスティック・エントロピー”) と正準集団における Gibbs エントロピー $S(U)$ (統計的エントロピー) との等価性の要請により、統計的エントロピー $S(U)$ の関数形を決定できることを説明した。次に、統計力学のパラメータ (q)-拡張において、Gauß原理と統計集団間の等価性の両者を満たす q -拡張された統計的エントロピーの関数形を決定し、それが規格化された Tsallis エントロピー $S_q^N(U_q)$ であることを示した。

付録

補題： 連続な実関数 ϕ が全ての $n \in \mathbb{N}$ に対して、 $\sum_{i=1}^n \phi(e_i) = 0$ かつ $\sum_{i=1}^n e_i = 0$. $e_1, \dots, e_n \in \mathbb{R}$ を満たすとする。このとき、 $\phi(e)$ は e に比例する。 ■

証明： $n = 2$ の場合、 $\phi(-e) = -\phi(e)$ が各 $e \in \mathbb{R}$ に対して成立するので、 $\phi(e)$ は e の奇関数である。これより、 $\phi(0) = 0$ となる。更に $n = 3$ とすれば、各 $e_1, e_2 \in \mathbb{R}$ に対して、 $\phi(e_1 + e_2) = \phi(-e_3) = -\phi(e_3) = \phi(e_1) + \phi(e_2)$ 線形性が成立することが分かる。これらの結果と $\phi(e)$ の連続性より、 $\phi(e)$ は e に比例する。 ■

参考文献

- [1] C.F. Gauß, *Theoria motus corporum coelestium in sectionibus conicis solem ambientium*, (Hamburg, F. Perthes and I.H. Besser, 1809)
- [2] R.F. Greene, H.B. Callen, Phys. Rev. **83** (1951) 1231-1235.
- [3] T. Wada, Phys. Lett. A **375** (2011) 2037-2040.
- [4] F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*, (McGraw-Hill 1965).
- [5] H.B. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics* 2nd ed. (Wiley New York 1985)
- [6] B. H. Lavenda, *Statistical Physics: A Probabilistic Approach*, Wiley-Interscience (1991)
- [7] C. Tsallis, *Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics: Approaching a Complex World* (Springer-Verlag New York 2009).
- [8] H. Suyari and M. Tsukada, IEEE Trans. Inform. Theory **51** (2005) 753.
- [9] T. Wada, A.M. Scarfone, Phys. Lett. A **335** (2005) 351-362.