

計量的指標の選定では、個体が計量化しにくい形状などの場合には、その形態学的特徴をいかに計量的に表現するか、換言すれば採用した指標が現実の形態識別を良く表現しているか否かが問題となる。

サンプリング法では、今回は甲状腺腫の典型的な特徴を表す濾胞をサンプリングし、検討を行ったが、甲状腺腫、腺腫様甲状腺腫では同一腺腫内でも、部位によって分化が異なるため多様な濾胞が存在する。どのような部位を何か所サンプリングすればよいか——サンプリング法は重要な課題である。

参 考 文 献

- 1) Fawcett, D.W. (1986). *A Textbook of Histology*, 11th ed. (eds. D.W. Fawcett and W. Bloom), Philadelphia, W.B. Saunders Company, 500-511.
- 2) 中村清美, 他(1986). 甲状腺腺腫と腺腫様甲状腺腫の濾胞腔の計量学的解析, 臨床病理, **34**, 206-210.
- 3) William, A.M. and Shields, W. (1969). *Tumors of the Thyroid Gland*, 2nd ed., Washington D.C., Armed Forces Institute of Pathology, 43-50.

二次元原子分子の駐車問題

化学技術研究所天然有機化学部 深谷俊夫・小高正人

1. 緒 言

原子・分子レベルに立ち戻って化学反応を見てみると、個々の反応はランダムな事象であり、一般的な化学での取り扱いはそのランダム性には立ち入らないで、単にそれらの統計量を用いて解析する場合が殆どである。

しかし、例えば結晶格子点への分子吸着、蒸着やCVDのようにある種のランダム性が二次元表面に固定化されたもの、あるいはこれらのランダム性の統計的性質を積極的に触媒設計や膜透過制御等に応用しようとするアイデアを具体的に考察するには、原子・分子レベルに立ち戻ったランダム性の追究が必要であろう。

この種の問題解決の一つの糸口として“駐車問題”がある¹⁾。すなわち、一次元の“駐車問題”とは、「同じ長さの棒を一直線上に互いに重なることなくランダムに並べる場合、ぎっしり詰まった場合の何割の密度まで詰め込めるか？」という乱れた一次元系に対する統計的性質を求める問題の一つであり、車の駐車に例えられている。この問題の答えは、まず計算機によって、約0.7476倍の密度までであると調べられ、その後解析的に厳密解が得られている。

この問題を二次元、そしてさらには三次元へ拡張することにより、より現実に近い統計的性質を持つ乱れた系のモデル化が期待される。

近年、高性能の計算機能とディスプレイ機能を持つ計算機を長時間占有できるようになり、種々のシミュレーション実験が気軽に行なえるようになった。しかしながら、“駐車問題”は一次元の場合ですら4桁までの信頼度を得るためには、膨大なシミュレーション計算を行ない、その平均値と標準偏差値から求めるので、例えばNEC社製16bitパーソナルコンピュータPC-9801FのBASIC言語を用いる場合でいえば、二昼夜は優にかかる計算量となる。またこの種の問題は、解析的に解こうとする場合、一見正しい推論から異なる結果を導く危険性が多く、パラドックス問題の宝庫である。その点、シミュレーションによる方法は、予測や推論の入り込む余地は少なく、安全・確実な実証法といえる。

二次元に拡張する場合，本来なら自由平面上に設定した“駐車場”に，種々形状の“車”をランダムに配置する問題としてシミュレートすべきであろうが，最初の試行計算実験としては障壁が大き過ぎる。ただし，“車”の形状が円や球の場合は，比較的容易にシミュレートでき，文献¹⁾の2.11章には，それらの計算結果による考察がまとめられている。

今回，二次元格子点よりなる“駐車場”を想定し，種々の“車”の形状を格子点を占める手順により定義する簡易化法により，二次元における“駐車問題”をシミュレートする方法を提案する。実際，上記例示の問題の大半はこのような簡易化法によっても十分にシミュレートできると思われる。“車”の形状の違いによる密度変化やクラスターの形成に関して，二三の興味ある結果を得た²⁾⁻⁴⁾。

2. 実 験

シミュレーション計算には，主に富士通 KK 社製 FM-110S-9 の BASIC 09 を用いた，マルチウインドウ，マルチタスク，コンパイラゆえの高速性などがその採用理由で，この計算に計算機が占領されないためでもある。

グラフィック画面上に 100×100 個の正方格子点を設定し，隣り合った2点以上の格子点を一

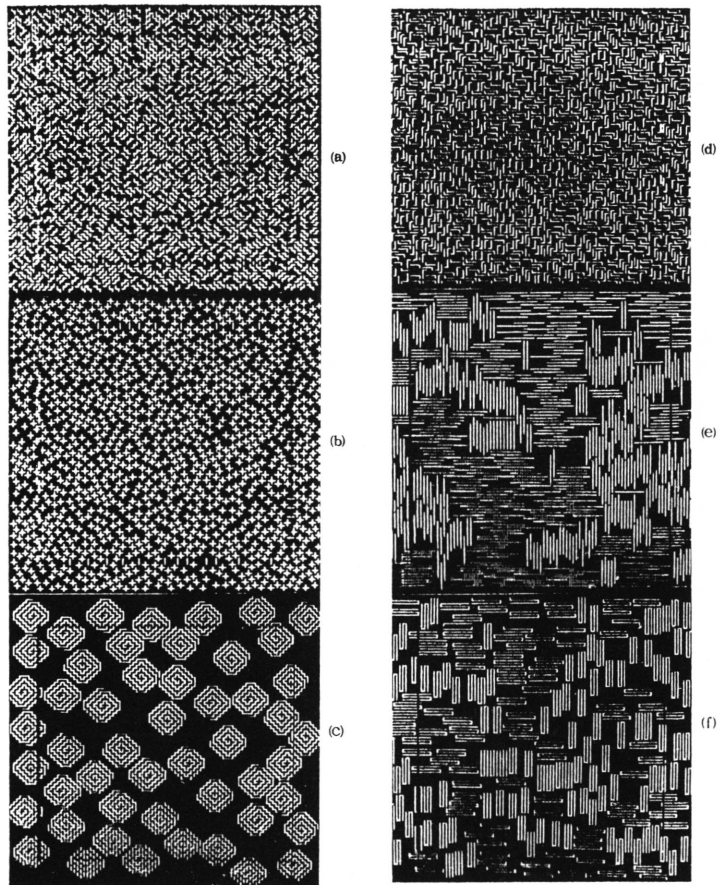


図1. Typical examples of photographs of close-packed patterns.

表1. Means and their deviations which are derived from averaging 100 simulations.

shape	average	$\sigma^2 \times 10^{-5}$	shape	average	$\sigma^2 \times 10^{-5}$
	0.91728	1.097		0.72413	2.413
	0.85315	1.981		0.71942	2.310
	0.83825	1.372		0.75011	4.141
	0.81386	3.025		0.70964	3.118
	0.77926	2.651		0.73119	12.28
	0.77309	2.223		0.67124	16.01
	0.76640	4.132		0.65957	23.29
	0.76364	3.096		0.65305	33.17
	0.78713	4.623		0.64555	33.62
	0.73865	3.638		0.58246	79.82
	0.73114	2.484		0.57356	52.96

定の手順で占めてゆく方法によって, "車" の形状と "駐車" を定義した. 駐車場所と車の方向を乱数により選択し駐車していき, 満車に近くなって, 空きスペースの検索に 500 回 (場合によって 1000 回) 失敗した時点で, 個々の格子点について残ったスペースの有無を検討して埋めていく方式とした. 計算途中の状態を常時ディスプレイに表示させ, 確認できるようにした.

3. 結果と考察

最終的に "車" が密に詰まった時の様子を図 1 に例示する. "車" の形状によってかなり異なるパターンとなる.

まず "車" の形状と密度の関係を求めた. 壁の影響を避けるため, 中央の 80×80 個の格子点について密度の統計を求めた. 各形状に対して, 100 回の試行についての平均結果を表 1 に示す. 表には平均値と標準偏差値を記した. ただし, 平均値の信頼度は標準偏差値によって異なり, その下位の数値にはあまり意味がない. 例えば信頼度 α で真の平均値 m が存在する信頼区間を求めるには, 各試行値が平均値 X と標準偏差値 σ で規定される正規分布を示すと考え, 正規分布の数値表あるいは (3.1) 式から信頼度 α に対する係数 t を求め, (3.2) 式により信頼区間が求められる⁵⁾. なお信頼度 95% では, $t_{95} = 1.96$ である.

$$(3.1) \quad \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-t\alpha}^{t\alpha} e^{-(1/2)y^2} dy = \alpha$$

$$(3.2) \quad \bar{X} - t\alpha \frac{\sigma}{\sqrt{n}} < m < \bar{X} + t\alpha \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$$

ここに, $X = (X_1 + X_2 + X_3 + \dots + X_n) / n$ である. 隣り合った 2 格子点による "車" の場合, 例えばエチレンは白金の 2.5 サイトを占めるという結果⁶⁾ から類推される密度 0.8 に比較して, 予想以上に高い密度となった. その他, 少ない格子点から構成される "車" において, 概ね予想を上回る高い密度となった.

また“車”の形状に方向性がある場合、同一方向に集落を作る傾向が見られた。集落の大きさを見積もるため、長方形の“車”を代表例としてその自己相関を求めてみた。自己相関は、“車”が縦に置かれた格子点を1、空き格子点と“車”が横に置かれた格子点を0とした2枚の同一パターンを用意し、その内の1枚は中央の 50×50 個の格子点部のみを用いて、2枚のパターンが一致する原点を中心に、上下または左右に位置をずらせながら両パターンの重なり積分を求めていく方法により求めた。また各試行による統計誤差を少なくするために、100回平均とした。

“車”の長さが 50×50 のウィンドウの大きさに比して長い場合は、自己相関関数の端まで求めらず、逆に短い場合は、中央に凝縮した関数となる。格子点数にして10前後の場合、比較的自己相関の収まりが良く、長さが10、幅が1, 2, 3, 4, 5, 10の6種類の形状について自己相関を求めた。図2にその結果の一部を示す。

いずれの場合も、ほぼ長さ方向と同じ位の大きさの集落を作る。すなわち、長方形の“車”は、幅方向にも長さと同じ位の影響力を持つことが分かった。なお、“車”の幅が2以上で、自己相関の肩部に中間ピークがみられるのは、“車”の間に隙間が生ずるためである。また、自己相関が左右対称でないのは、統計誤差である。

次に、図3に示すような二次元平面内において互いに異性体となる形状に注目し、異性体同士の混合駐車に関する計算機実験を行なった。

図4で例示するように、比較的少ない格子点より構成される“車”の場合には、一方の異性体のみでランダムに駐車し満車にした後でも、他方の異性体に対してはまだ駐車スペースが残っている。また、一方の異性体のみによる駐車密度は、双方の異性体を同確率でランダムに駐車した場合の密度に較べて、一般には低いものとなる。表2に100回平均の結果をまとめて示す。Iは、一方の異性体のみの場合の密度、IIは、その後で他方の異性体が入り込む密度、IIIは、双方の異性体が同確率の場合の密度である。即ち、一般的には、異性体同士の方が、同性体同士よりも密に詰まり易いと言える。しかしながら、表2の上から6番目あるいは10目番のような異性部分が2箇所あるとみられる形状に関しては、むしろ同性体の方が密に詰まり易い傾向がみられた。

4. 総括

“駐車問題”は、その出典である非晶質物質の乱れた系のモデル化を抜きにして語れないであろう。今のところ、一つの基礎的理論モデルに過ぎない。今後、例えば二種類の“車”の“駐車問題”を考えることによって、相形成などの、モデル化による解析が可能と思われる。

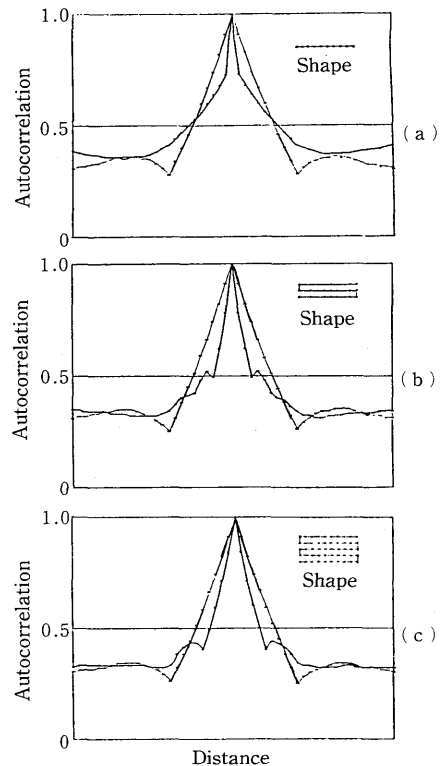


図2. Auto-correlation functions of clusters of rectangularly shaped cars. Thin and thick lines indicate longitudinal and lateral directions, respectively.
(a) 1×10 (b) 3×10 (c) 5×10

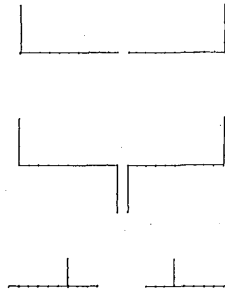


図 3.

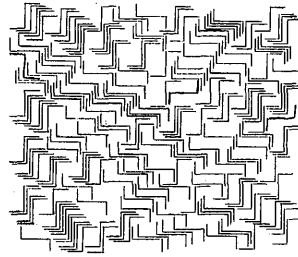


図 4.

表 2.

	I	II	III
1	0.7824	0.0232	0.7973
2	0.7624	0.0194	0.7813
3	0.7382	0.0219	0.7530
4	0.7171	0.0139	0.7251
5	0.7242	0.0246	0.7421
6	0.7245	0.0125	0.7261
7	0.7323	0.0186	0.7490
8	0.7268	0.0217	0.7450
9	0.5195	0.0159	0.5308
10	0.4631	0.0053	0.4477
11	0.4644	0.0120	0.4747

従来よりランダムな性質を持つパターンの解析には、フーリエ変換による解析が多用される。例えば、宮崎らは⁷⁾、合金の相形成の計算機シミュレーション実験において、フーリエ解析によって簡略化に成功している。また筆者らも⁸⁾、フーリエ変換領域で周波数フィルターを掛けることによって、種々の統計的性質をもつランダムパターンが得られることを見出した。

しかし、本報のようにパターン面で直接ランダム性を導入するランダムパターンの発生方法の場合、単なる統計量では評価しきれない細部にわたる考察が可能となる。また、例えば銀塩写真の銀粒子による粒状性のシミュレーションのように⁹⁾、粒子の重なりを認める方法に較べ

て、“車”同士に相互作用などの“意志”を持たせる第一歩として本報の意義は大きいと考える。さらに、“車”同士に斥力・引力などの相互作用の導入、動きの導入、異なる形の“車”の混合駐車、更には格子点での駐車という制限を外して、自由平面での解析、そして三次元での解析等を通じて、より現実に近いシミュレーションが可能であろうし、より広い分野における各種の問題に応用できると考えられ、今後に残された課題は多い。

参 考 文 献

- 1) 米澤・渡部 訳(1982). ザイマン, 乱れの物理学, 丸善, 41.
- 2) 深谷(1985). 第46回応用物理学会秋季大会, 3a-ZA-13.
- 3) 深谷, 小高, 吉川(1986). 化技研報, 81, 265.
- 4) 深谷, 小高(1986). 第33回応用物理学会春季大会, 2a-D-1.
- 5) 数学ハンドブック編集委員会編(1960). 数学ハンドブック, 丸善, 297.
- 6) 本尾 哲(1983). 電気化学協会主催第8回電気化学セミナー予稿集, 30.
- 7) 宮崎 亨, 小坂井孝生(1984). 日本金属学会会報, 23, 757.
- 8) Fukaya, T. and Tsujiuchi, J. (1975). *Nouv. Rev. Optique*, 6, 317.
- 9) Tanaka, K. and Uchida, S. (1983). *J. Opt. Soc. Am.*, 73, 1312.

一般化ポロノイ領域とその応用

統計数理研究所 種 村 正 美

1. 序

空間の有限領域 V に散布する N 個の粒子の位置座標を $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_N)$ とする。空間の次元は任意で良いが、便宜上以下の議論を二次元平面において進める。

平面上の任意の点 \mathbf{x} に対して、それに最近接の粒子 \mathbf{a}_i が定義できる。それを $n(\mathbf{x}) = \mathbf{a}_i$ と表すことにする。これとは逆に粒子 \mathbf{a}_i を与えたとき、 $\Pi(\mathbf{a}_i) = \{\mathbf{x}; n(\mathbf{x}) = \mathbf{a}_i\}$ とする。半平面 K_{ij} を

$$K_{ij} = \{\mathbf{x}; |\mathbf{x} - \mathbf{a}_i| < |\mathbf{x} - \mathbf{a}_j|\}$$

で定義すれば

$$\Pi(\mathbf{a}_i) = \bigcap_{i \neq j} K_{ij}$$

となり、 $\Pi(\mathbf{a}_i)$ は一般に半平面で囲まれた凸領域で、しかも $\{\Pi(\mathbf{a}_i), i=1, \dots, N\}$ は空間を隙間なく、また重なりなく分割する。 $\Pi(\mathbf{a}_i)$ は \mathbf{a}_i のポロノイ領域と呼ばれる。またポロノイ領域による空間の分割をポロノイ分割と呼ぶ。

2. 一般化ポロノイ領域

上のポロノイ領域の概念は以下のような一般化が可能である。上と同様に $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_N)$ を平面上の粒子座標とする。前記のポロノイ領域は平面上の各点を最近接の粒子に割り振ることによって得られたが、これを拡張して平面上の各点を第 k ($=2, 3, \dots$) 近接までの粒子集合に割り振ることを考えてみよう。これと逆に任意の k 個の粒子集合に対して $\Pi(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_k) = \{\mathbf{x}; n_k(\mathbf{x}) = \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_k\}$ が定義できる。これを k 次のポロノイ領域という。