

Gibbs 分布による尤度解析

統計数理研究所 尾形良彦・種村正美

(1987年11月 受付)

1. 問題の背景

歴史的にみて、空間とくに平面上に於ける点配置のデータに対する統計解析は、まず与えられた点配置が完全にランダムであるか否かということの検定問題から始まったと言ってよい。ポアソン場を帰無仮説とする、様々な検定統計量がその為に提案された。それらの統計量の中には、ポアソン配置に対応する値を境にしてその値の大小によって、たとえば集中型であるとか規則型であるなどというように、点配置の特徴をとらえるものとして積極的に使われているものもある。

次に点確率場上の確率集合 (random sets) の2次モーメントの概念に基づいて点配置の特徴を記述する方法がある。動径分布関数、 K 統計量、 L 統計量、そして最近接距離分布などと呼ばれるものがそうである。点配置が均質 (homogeneous: 定常かつ回転不変) であるとき、確率集合の2次モーメントに関係する統計量は全てこれらのように点間の距離のみに対する関数としてグラフによって表示され、点配置の特徴を量的に記述する。

さらに点の間の相互作用を記述し点配置を生成 (simulate) する統計モデルも様々提案されている。逐次充填モデル、ハードコアモデル、Strauss 型モデルとかポアソンクラスターモデルなどといったものが比較的早期に提案された。このようなモデルから何枚でも点配置が生成できるので、2次モーメント統計量グラフの確率的変動幅 (variability) が分かる。解析対象の点配置の2次モーメント統計量グラフが、点間の各距離について、この変動幅に収まるか否かによってモデルの適合度を議論するようになった。また、モデルを特徴づけるパラメタの推定のために、こうした比較によってパラメタを調節してまたシミュレーションをするといった試行錯誤の繰り返しをしたり、最小二乗法で合わせたりしている。以上の手法の詳細については、たとえば長谷川・種村 (1986) を参照されたい。

尤度を最大化する推定法 (最尤法) は最も一般的で有用な数理統計学に於ける基本原理とも言えるべきものである。この方法の真価は上記のようなシミュレーションや試行錯誤を行なわなくとも仮定されたモデル族の中で最も良く適合するパラメタを自動的に決定しうることである。もともと統計モデルによって生成 (simulate) される標本の再現性の良さと対数尤度とは深い関係があるからである。しかしながら点配置の推定に於いてはこの方法がほとんど発展することがなかった。これは次節に見るように計算可能な尤度関数を書くことが困難であったことに尽きる。本論ではこの困難を避ける為の尤度関数のいくつかの近似法を示し、それによって可能となる点配置の統計解析を示してみたい。

2. 平衡点配置の尤度

平面上の有界領域 V の中に N 個の点があり、その座標を $X = \{(x_i, y_i) \in V; i=1, 2, \dots, N\}$ とする。点 i と j の相互作用をポテンシャル関数 $\phi(r_{ij})$ で示すとする。但し r_{ij} は点 i と j

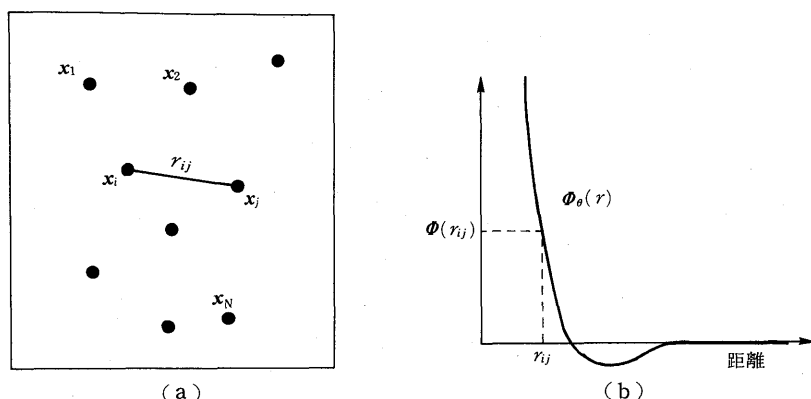


図1. 点配置とポテンシャル関数の模式図: (a) 点 i および j の間の距離 r_{ij} . (b) ポテンシャル関数 $\Phi_\theta(r)$ の一例.

Fig.1. A diagram of a point pattern and a pairwise potential function: (a) A distance r_{ij} between two points i and j . (b) An example of the potential function $\Phi_\theta(r)$.

の距離, たとえば $r_{ij}^2 = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2$, である. ポテンシャルの微分が正の値になる距離 r_{ij} では2点 i, j に互いに反撥する力が作用するし, 負ならば互いに引き合う (図1). いま N を固定した点配置 X に於いて点間の相互作用の結果得られる平衡分布 (Gibbs カノニカル分布) は全ポテンシャルエネルギー $U(X) = \sum_{i < j} \Phi(r_{ij})$ に依存した密度分布

$$(2.1) \quad f(X) = \exp \{-U(X)\} / Z(\Phi; N, V)$$

で与えられる. ここに分母の Z は確率密度の規格化因子 (統計力学では分配関数と呼ばれている) で, すべての点の座標に関する積分

$$(2.2) \quad Z(\Phi; N, V) = \int_{V^N} \exp \{-U(X)\} dx_1 dy_1 \cdots dx_N dy_N$$

で表現されるものである.

統計家としての立場から次のような発想が我々の第一歩であった (Ogata and Tanemura (以下 O & T と省略する), 1981a). それは平衡状態にあると思われる点配置座標 X が与えられたときに $\Phi(r)$ の形状を推定できないかということである. すなわち相互作用ポテンシャルを何らかの形で $\{\Phi_\theta(r), \theta \in \Theta\}$ のようにパラメタによって特徴づけたとき, 点配置データ X を (2.1) に代入したものはパラメタ θ の関数 (尤度関数と呼ぶ) となる. これを最大にするような $\hat{\theta}$ が最尤推定値であり $\Phi_{\hat{\theta}}(r)$ が推定されたポテンシャル関数である. しかしここに大きな困難があったのである. つまり規格化因子 (2.2) もやはり θ の関数であるので, θ が与えられたときに尤度の計算が可能であるためには $Z(\Phi_\theta; N, V)$ の値が計算できなければならないのである. (2.2) は $2N$ 重積分であるためにこれをそのまま計算するのは極めて困難である. 唯一の例外はポアソン場すなわち N 個の点が V 上で一様に互いに独立に分布している場合である. このとき点間の相互作用は無いので $\Phi(r) \equiv 0$ で (2.2) は V^N となる. 以後の議論の都合上, 尤度関数の代わりに, ポアソン場を基準とした対数尤度 (比) 関数

$$(2.3) \quad \log L(\theta; X) = -\sum_{i < j} \Phi_\theta(r_{ij}) - \log \bar{Z}(\Phi_\theta; N, V),$$

(但し $\bar{Z} = Z/V^N$) を考えることにする.

3. Gibbs 場のシミュレーション

相互作用ポテンシャルに対して標本としての平衡状態がどのように生成されるのかを見ることは以後の議論に必要なのでその点を簡単に解説してみたい。統計力学の計算機実験のために提案された方法の1つに特殊なランダムウォークを応用したモンテカルロ法がある。これは最初 Metropolis et al. (1953) が Hard-core ポテンシャルについて提案したものを Wood (1968) 等が一般のポテンシャルについて発展させたものである。

周期境界条件をもつ矩形の領域 V (トーラスと考えても良い) 上にある N 個の粒子についてたとえば以下のようなアルゴリズムで粒子運動を定義することができる(図2を参照)。離散時間 $t(=1, 2, \dots, T)$ について粒子系の座標が $X(t) = \{(x_i(t), y_i(t)) \in V; i=1, 2, \dots, N\}$ であるとする。 N 粒子($i=1, 2, \dots, N$)の中からランダムに1粒子 n を選びその座標 $(x_n(t), y_n(t))$ を中心とする1辺の長さが 2δ の正方形の中でこの粒子を一様にランダムシフトしたものを $(x'_n(t), y'_n(t))$ とする(ここで正方形の辺の長さに関する調節パラメータ δ の役割については後程述べる)。そして他のすべての粒子の位置はそのまま[すなわち, $(x'_i(t), y'_i(t)) = (x_i(t), y_i(t))$, $i \neq n$]にした配置を $X'(t) = \{(x'_i(t), y'_i(t))\}$ とする。このときの全ポテンシャル $U(X'(t))$ を計算し、元の配置の全ポテンシャル $U(X(t))$ と比較して以下の選択をおこなう。

- (i) $U(X'(t)) \leq U(X(t))$ ならば無条件で次の時間ステップ $t+1$ での配置は $X(t+1) = X'(t)$ とする。
- (ii) $U(X'(t)) > U(X(t))$ ならば確率 $\exp \{U(X(t)) - U(X'(t))\}$ の割合で $X(t+1) = X'(t)$ とし、残りの確率で $X(t+1) = X(t)$ (すなわち前の配置と同じ) とする。

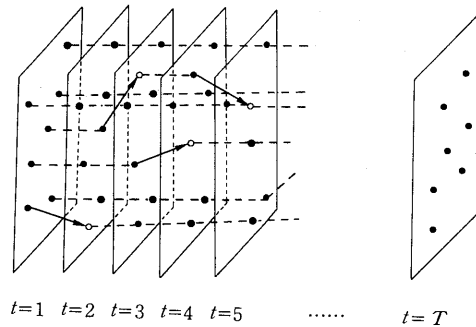


図2. Gibbs 場を生成するモンテカルロ法の時空間過程: アルゴリズム(i)および(ii)に従ったマルコフ連鎖になっている(●: 既存の点; ○: 生成された点). 十分大きな T に対して Gibbs 分布 (2.1) に従う平衡点配置列が実現される。

Fig. 2. A diagram of spatio-temporal process of the Monte-Carlo simulation procedure for a Gibbsian point field. This is a Markov chain constructed by certain transition probabilities realized by the algorithm (i) and (ii). (●) in the graph are existing points and (○) are generated points. Gibbsian point patterns are realized equilibrium states of the Markov chain.

このように1つの時間ステップを前進するのに3つまたは4つの一様乱数を使うことになり、これを繰り返すことによって(2.1)を満たす平衡状態が実現されることになる。ここで留意すべきことは Gibbs 分布 (2.1) を満たす標本を生成するのに規格化因子 Z を使わずに済んだということである。

他にも類似のモンテカルロシミュレーション法があるが、この種の粒子系ランダムウォーク型のアルゴリズムの本質は Gibbs 分布 (2.1) を平衡分布にするような時空間過程 $X(t)$ (マルコフ連鎖) の遷移確率を構成するものである点にある。上述のアルゴリズムの中にあるパラメタ δ の役割は、平衡状態への収束を早めるための調節をすることであり、Wood (1968) によれば上述の (i) および (ii) を合わせて試行状態 $X'(t)$ が $X(t+1)$ となる頻度がほぼ半分ぐらいが経験的には適当であると言う。この他にも初期状態をうまくとることによって収束を早めることもできる。O & T (1981b) はポテンシャル $\Phi(r)$ を使って逐次的に粒子を充填するようにして初期配置を作ることを提案した。

4. ポテンシャルによる統計モデルと尤度の希薄気体近似

統計力学でおなじみの Lennard-Jones 型ポテンシャルの拡張として

$$(4.1) \quad \Phi_\theta(r) = \left(\frac{\sigma}{r}\right)^m - \alpha \left(\frac{\sigma}{r}\right)^n, \quad \theta = (\sigma, \alpha, m, n), \quad \sigma > 0, \quad m > n > 2$$

を考えよう (図 3a)。これは反撥のコア (殻) をもっていて、 $\alpha > 0$ なら、コアの周辺部では吸引力が働いている。 $\alpha = 0$ のときにはいわゆる Soft-core ポテンシャル、さらに $\alpha = 0, m = \infty$ のときには Hard-core ポテンシャル

$$(4.2) \quad \Phi_\sigma(r) = 0, \quad r > \sigma; \quad \Phi_\sigma(r) = \infty, \quad r \leq \sigma$$

になっている (図 3b)。もっと柔らかい反撥のコアをもつポテンシャルとして次のようなものが考えられた (O & T (1981a, 1985))。

$$(4.3) \quad \Phi_\theta(r) = -\log \left[1 + \left\{ \alpha \left(\frac{r}{\sigma} \right) - 1 \right\} \exp \left\{ - \left(\frac{r}{\sigma} \right)^2 \right\} \right], \quad \theta = (\alpha, \sigma), \quad \alpha \geq 0, \sigma > 0$$

$$(4.4) \quad \Phi_\theta(r) = -\log \left[1 + (\alpha - 1) \exp \left\{ - \left(\frac{r}{\sigma} \right)^m \right\} \right], \quad \theta = (\alpha, \sigma, m), \quad \alpha \geq 0, \sigma, m > 0$$

この2つのポテンシャルの違いは (4.3) が反撥・吸引を合わせもつ (図 3c) のに対して (4.4) は α によって反撥力のみか吸引力のみになるし $r=0$ で有限値である (図 3d) ことにある。Hard-core の一般化として Strauss (1975) は

$$(4.5) \quad \Phi_\theta(r) = 0, \quad r > \sigma; \quad \Phi_\theta(r) = \alpha, \quad r \leq \sigma; \quad \theta = (\alpha, \sigma), \quad \sigma > 0$$

を議論している (図 3e)。これはまた (4.4) において $m = \infty$ としても得られる。

2 節でも述べたように規格化因子 (分配関数) Z を解析的に求めることは一般に不可能であるが、点配置がポアソン場 (理想気体) に近い、いわゆる希薄気体とみなせる場合には次のような近似

$$(4.6) \quad \bar{Z}(\Phi_\theta; N, V) \doteq \left(1 - \frac{a(\theta)}{V} \right)^{N(N-1)/2}$$

を利用できる。ここで

$$(4.7) \quad a(\theta) = \int_0^\infty 2\pi r [1 - \exp \{-\Phi_\theta(r)\}] dr$$

は第2クラスター積分と呼ばれる。この近似のもとで対数尤度は

$$(4.8) \quad \log L(\theta; X) = - \sum_{i < j} \Phi_\theta(r_{ij}) - \frac{1}{2} N(N-1) \log \left\{ 1 - \frac{a(\theta)}{V} \right\}$$

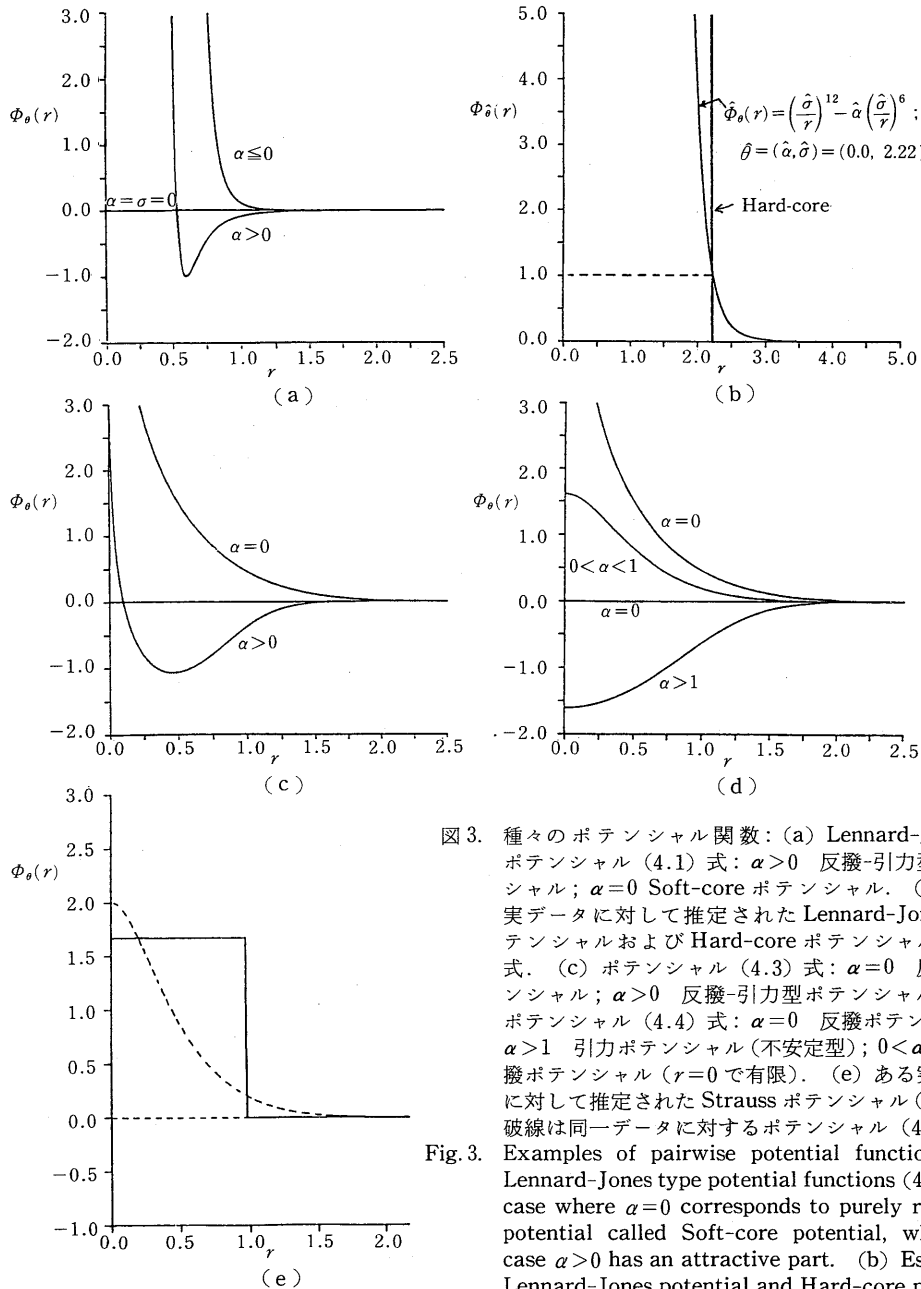


図 3. 種々のポテンシャル関数: (a) Lennard-Jones 型ポテンシャル (4.1) 式: $\alpha > 0$ 反撥-引力型ポテンシャル; $\alpha = 0$ Soft-core ポテンシャル. (b) ある実データに対して推定された Lennard-Jones 型ポテンシャルおよび Hard-core ポテンシャル (4.2) 式. (c) ポテンシャル (4.3) 式: $\alpha = 0$ 反撥ポテンシャル; $\alpha > 0$ 反撥-引力型ポテンシャル. (d) ポテンシャル (4.4) 式: $\alpha = 0$ 反撥ポテンシャル; $\alpha > 1$ 引力ポテンシャル (不安定型); $0 < \alpha < 1$ 反撥ポテンシャル ($r=0$ で有限). (e) ある実データに対して推定された Strauss ポテンシャル (4.5) 式. 破線は同一データに対するポテンシャル (4.4) 式.

Fig. 3. Examples of pairwise potential functions: (a) Lennard-Jones type potential functions (4.1): the case where $\alpha=0$ corresponds to purely repulsive potential called Soft-core potential, while the case $\alpha>0$ has an attractive part. (b) Estimated Lennard-Jones potential and Hard-core potential (4.2) fitted to a certain data set. (c) The potential (4.3): the case where $\alpha=0$ corresponds to purely repulsive potential, while the case $\alpha>0$ has an attractive part. (d) The potential (4.4): the case where $\alpha=0$ corresponds to purely repulsive potential called Very-soft-core potential, the case $\alpha>1$ corresponds to a purely attractive potential but known to be unstable in the sense of Ruelle condition (see Gates and Westcott (1986)), and the case where $0<\alpha<1$ corresponds to a purely repulsive but takes finite value at $r=0$. (e) Strauss potential (4.5) (solid line) and the potential (4.4) (dotted line) estimated from a certain data.

表1. 種々のポテンシャルモデルに対する第2クラスター積分 $a(\theta)$.

Table 1. The second cluster integrals for some models of potential functions.

Eq. of potential function	$a(\alpha, \sigma)$
(4.1)	$\frac{\pi\sigma^2}{n} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \Gamma\left(\frac{k}{2} - \frac{1}{n}\right) \alpha^k \quad (\text{case } m=2n)$
(4.3)	$\pi\sigma^2 \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2}\right) (\alpha-1)$
(4.4)	$\pi\sigma^2 (\alpha-1) \left(\frac{2}{m}\right) \Gamma\left(\frac{2}{m}\right)$
(4.5)	$-(1-e^{-\alpha})\pi\sigma^2$

となる. 上述のポテンシャルたちに対して第2クラスター積分は解析的に求められ(表1参照), これらを用いて(4.8)によって尤度計算をすることができる.

勿論, 点配置がボアソン場から程遠い場合にはこの近似は役に立たない. そのうえ, (4.3) から(4.5)までのポテンシャルには Ruelle の安定性条件を満たさない場合が含まれているが, そのときには希薄有限粒子系といえども極めて近似が悪くなることが示されている (Gates and Westcott (1986)). 他方 Soft-core, Hard-core そして(4.2) から(4.5) の特殊なものの中には virial 展開やその Padé 近似による外挿によって近似の範囲をある程度まで広げることができる (O & T (1984, 1985)).

不均質 (inhomogeneous) 点配置も外場の存在を仮定すれば Gibbs モデルを考えることができる. 外場は領域 V の任意の点 (x, y) に定義されたポテンシャル関数 $\Psi_{\xi}(x, y)$ として表現される. このうえに粒子間に相互作用ポテンシャル $\Phi_{\theta}(r_{ij})$ が働いているとき全エネルギーは

$$(4.9) \quad U(X; \theta, \xi) = \sum_{i < j} \Phi_{\theta}(r_{ij}) + \sum_i \Psi_{\xi}(x_i, y_i)$$

となる. この平衡分布も(2.1)で定義された Gibbs (カノニカル) 分布で表現できる. このような場合にも希薄気体近似によって次のような対数尤度を導くことができる (O & T (1986a)):

$$(4.10) \quad \log L(\theta, \xi; X) = -U(X; \theta, \xi) - N \log \mathcal{Q}(\xi) - \frac{N(N-1)a(\theta)}{2\mathcal{Q}(\xi)^2} \int_V \exp \{-2\Psi_{\xi}(x, y)\} dx dy.$$

ここで $\mathcal{Q}(\xi) = \int_V \exp \{-\Psi_{\xi}(x, y)\} dx dy$ であり $a(\theta)$ は(4.7)と同じものである.

ところで最尤法のメリットとして赤池の情報量基準 AIC を使ったモデル選択が可能になることを特記しておく. これはよく知られているように

$$(4.11) \quad \text{AIC} = (-2) \log L(\hat{\theta}) + 2(\text{パラメタ数})$$

と定義される. ただし, $\hat{\theta}$ は最尤推定量をはじめとする有効統計量である. AIC は相互作用のポテンシャル(4.1)-(4.5)の適合度の比較をするのに役立つばかりでなく, 外場 Ψ_{ξ} の存在とその形(たとえば2変数多項式の次数の決定)を見出すのに有用である. ただし Hard-core (4.2) と Strauss 型 (4.5) でのパラメタ σ は漸近理論的正則条件を満たしていないので, この場合特別に2個分のパラメタとして繰り込まなければならない (O & T (1983, 1984)). 不均質点配置の解析例として, 松の幼木・若木の配置について図4及び表2に結果を示す (O & T (1986a)).

以上は点配置がいわゆる希薄気体と見做せることが前提である. したがって配置パターンがボ

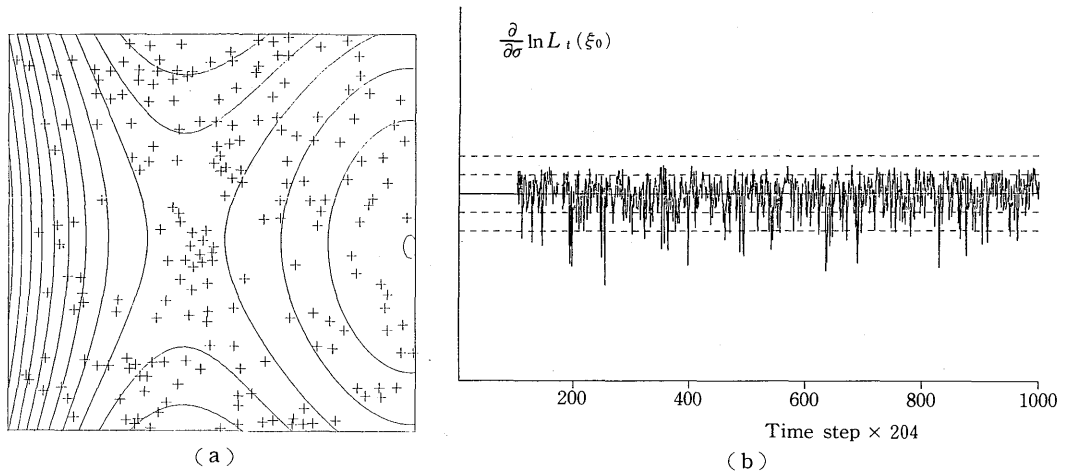


図 4. 不均質な点配置データとその解析例 (O & T (1986a)): (a) 松の幼木・若木の配置図: $N = 204$, $V = 10 \text{ m} \times 10 \text{ m}$, そしてこの配置図に対して推定された外場 Ψ の等高線: この関数形は $\Psi(x, y) = -1.06x - 0.29y + 3.99x^2 - 0.10xy - 1.70y^2 - 1.59x^3$. (b) 推定された相互作用ポテンシャル $\Phi(r) = (0.1373/r)^{12}$ および図 4a に示された外場を用いた場合の, σ に関する Fisher score 統計量の時系列. 中央の実線は 0 の水準を表し, 破線は標準偏差の 1 倍および 2 倍の位置を示す.

Fig. 4. An example of the analysis of an inhomogeneous point pattern (O & T (1986a)): (a) Map of the seedlings and saplings of Japanese black pines where $N = 204$ in a region $V = 10 \text{ m} \times 10 \text{ m}$ with contour map of the external potential field $\Psi(x, y) = -1.06x - 0.29y + 3.99x^2 - 0.10xy - 1.70y^2 - 1.59x^3$ estimated together with the pairwise interaction potential $\Phi(r) = (0.1373/r)^{12}$. (b) Time series of Fisher score statistics with respect to σ of the interaction potential Φ . The middle solid line indicates level of zero, and dotted lines represent one or two-fold standard errors.

表 2. 松の幼木・若木の配置データ (図 4a) へのモデルのあてはめ: モデル $\langle \Psi \rangle$ は $\Phi = 0$ の仮定の下で外場のみを考慮したあてはめを表し, モデル $\langle \Phi \rangle$ はその逆の場合を表す. モデル $\langle \Phi + \Psi \rangle$ は Φ と Ψ を同時に考慮した場合に対応する. AIC の値から, モデル $\langle \Phi + \Psi \rangle$ が最良であることが分かる. そのパラメタ値は図 4b に与えられている.

Table 2. Example of fitting the model (4.9) to the seedlings and saplings of Japanese black pines in Fig. 4a: The model $\langle \Psi \rangle$ means that only the external field was fitted to the data by assuming $\Phi = 0$, and the model $\langle \Phi \rangle$ means the opposite case $\Psi = 0$. The model $\langle \Psi + \Phi \rangle$ corresponds to the case of the existence of the both of Φ and Ψ . The minimum AIC is attained by the $\langle \Psi + \Phi \rangle$ model whose estimated parameters are given in the caption of Fig. 4b.

Model	$\ln L$	Number of parameters	AIC
$\langle \Psi \rangle$	13.82	6	-15.64
$\langle \Phi \rangle$	11.23	1	-20.47
$\langle \Phi + \Psi \rangle$	26.70	7	-39.39

アソン（不均質ポアソンも含む）であるか否かの検証には、尤度比検定として高感度な解析が期待できる。しかし実際に相互作用があるとなった場合、配置データ X は推定されたポテンシャル Φ_0 （および Ψ_0 ）のもとで平衡状態と言えるのか、また対数尤度の値が充分正しく近似されているのか、その点の保証が欲しい。その検証のために、まず推定されたポテンシャルを用いて3節で紹介したシミュレーションを行なう。データ X を初期配置（すなわち $X(1)=X$ ）として得られた点配置の時空間パターン列 $[X(t)=\{(x_i(t), y_i(t)); i=1, 2, \dots, N\}, t=1, 2, \dots, T]$ を生成する。もし X が平衡配置と見做せるならば $X(t)$ の全ポテンシャルの時系列 $U(X(t))$ は定常でなければならない。そして初期値 $U(X(1))$ は時系列 $U(X(t))$ の周辺分布から見て異常値であってはならない。次に近似尤度の有効性の検証の為に (4.8)（または 4.10 式）のパラメタに関する微分を考える。これは sensitivity とも Fisher score 統計量とも呼ばれるものであるが、これに上の生成された時空間点配置列を代入したときの時系列

$$(4.12) \quad \frac{\partial}{\partial \theta} \log L_t(\hat{\theta}) = -\frac{\partial}{\partial \theta} U(X(t); \hat{\theta}) - \frac{\partial}{\partial \theta} \log \bar{Z}(\hat{\theta})$$

が値 0 から偏っていないことが必要である。ここに $\bar{Z}(\theta)$ はこれまでに述べたように近似された規格化因子である。例えば図 4a のパラメタに対する時系列 (4.12) を図 4b に示す。これから偏りが無いことが見てとれる。

5. 反撥の強さと堅さを測るモデルとモンテカルロ尤度近似法

前節では点密度が低く相互作用の弱い、いわゆる希薄気体を仮定した上で近似尤度を得た。これとは別の方法で高密度のデータにも有効である近似法を解説するのが本節の目的である。そもそもポテンシャルとの関係でも点配置は高密度にも低密度にもなることがあるので、その点を明確にするのも本節の役割である。そういった密度はポテンシャルの及ぶ範囲を特徴づけるスケールパラメタ σ に関係するので、ポテンシャルモデルを

$$(5.1) \quad \Phi_\sigma(r) = \Phi_1\left(\frac{r}{\sigma}\right)$$

と表現する。ここで Φ_1 は標準化されたポテンシャルで、別のパラメタを含んでも良い。点配置の密度は点密度 (intensity) N/V にも依存するので空間が 2 次元ということから新しいパラメタ $\tau = (N/V)\sigma^2$ （換算密度, reduced density と呼ばれる）を考える。これは雑に言って、ポテンシャル影響領域の総面積の全領域に対する割合、すなわち点配置の混み合い度、と考えられる。ポテンシャル (5.1) の性質から距離のスケール変換 $r_{ij}^* = r_{ij}/(N/V)^{1/2}$ によって対数尤度 (2.3) は

$$(5.2) \quad \frac{1}{2N} \log L(\tau; X) = -\sum_{i<j} \Phi_1\left(\frac{r_{ij}^*}{\sqrt{\tau}}\right) - \log \bar{Z}(\tau, \Phi_1; N)$$

と表すことができる。ここで \bar{Z} は V に直接的には依存しない量になることに注意する。(5.2) の両辺を τ で微分し、Gibbs 場による平均をとったとき $E[\partial \log L(\tau; X)/\partial \tau] = 0$ が自然な正則条件で期待できるので

$$(5.3) \quad \frac{1}{2N} E\left[\sum_{i<j} \left(\frac{r_{ij}^*}{\sqrt{\tau}}\right) \Phi_1'\left(\frac{r_{ij}^*}{\sqrt{\tau}}\right)\right] = -\left(\frac{\tau}{N}\right) \left(\frac{\partial}{\partial \tau}\right) \log \bar{Z}(\tau, \Phi_1; N)$$

を得る。 Φ_1' は Φ_1 の微分である。実は (5.3) の両辺は compressibility factor と呼ばれ、理想気体（ポアソン場）からの隔たりの程度を示す量、 $\phi(\tau) = P(\tau)V/N - 1$ 、の別表現である（但し

$P(\tau)$ は圧力に対応し, $\phi(\tau)=0$ のときポアソンである). 左辺が運動力学的な立場から, そして右辺が統計力学の立場から導かれたもので, (5.3) の等式はこれらが一致していることを示す. $\phi(\tau)$ は (N が小さ過ぎなければ) N に依存しないという安定した好ましい性質をもっている. もしこの関数 $\phi(\tau)$ を求めることができたとするならば (5.3) の右辺より

$$(5.4) \quad \frac{1}{N} \log \bar{Z}(\tau, \Phi_1; N) = - \int_0^\tau \frac{\phi(t)}{t} dt$$

が導かれ, これによって Z を得ることができる. Φ_1 が他のいかなるパラメタを含んでいても, そのパラメタに関して $\phi(t)$ が表現されていれば \bar{Z} に反映されるのである.

それでは $\phi(\tau)$ をどのように求めるのであろうか. 1 つは $\phi(\tau)$ の級数展開 (virial 展開) の, はじめの 5, 6 個の係数を求め, τ の小さい時に virial 展開に一致するような Padé 近似によって外挿する方法がある. Hard-core ポテンシャルでは Ree and Hoover (1967) による 2 次元の結果がある. それによると

$$(5.5) \quad \phi(\tau) = \frac{q_1\tau + q_2\tau^2 + q_3\tau^3}{1 + p_1\tau + p_2\tau^2}$$

の形で表される (係数 p_1, p_2, q_1, q_2, q_3 の値は表 3 に掲げる). 同様に (4.2) または (4.3) に於いて $\alpha=0$ とおいたモデル (Very-soft-core, O & T (1984); 図 5 参照) についても (5.5) の形で求めることができ, かなり高密度まで有効である (係数は表 3 に掲げる). (5.5) を使って, (5.4) の計算を行なうことができる. すなわち, $A=q_3/p_2, B=q_1-q_3/p_2, C=q_2-p_1q_3/p_2, D=C/(2p_2), E=(2p_2B-p_1C)/p_2$ そして $F=(4p_2-p_1^2)^{1/2}$ とおくと

$$(5.6) \quad \frac{1}{N} \log \bar{Z}(\tau, \Phi_1; N) = A\tau + D \log(1 + p_1\tau + p_2\tau^2) + \frac{E}{F} \left[\tan^{-1}\left(\frac{2p_2\tau + p_1}{F}\right) - \tan^{-1}\left(\frac{p_1}{F}\right) \right]$$

表 3. Hard-core モデルおよび Very-soft-core モデルにおける $\phi(\tau)$ の Padé 近似 (5.5) の係数.

Table 3. Coefficients of the Padé approximation (5.5) of the ϕ function for the models of Hard-core (4.2) and Very-soft-core ($\alpha=0$ in (4.3)).

	p_1	p_2	q_1	q_2	q_3
V-S-C	0.908426	0.636299	1.57080	2.55353	1.48128
H-C	-1.545797	0.599371	1.570796	-0.498612	0.021662

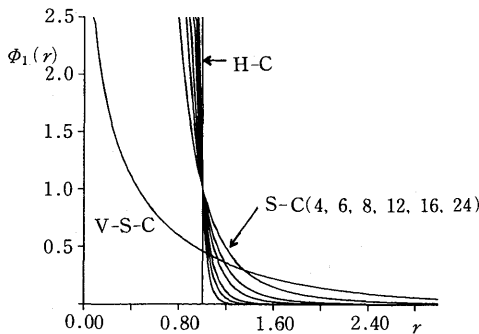


図 5. 種々の反撥型ポテンシャルモデルの $\sigma=1$ における曲線. V-S-C: Very-soft-core ポテンシャルモデル, S-C(n): Soft-core ポテンシャルモデル (指数 $n=4, 6, 8, 12, 16, 24$), H-C: Hard-core ポテンシャルモデル.

Fig. 5. Curves of potential models for $\sigma=1$. The model corresponding to each curve is nearby indicated where H-C, S-C(n) and V-S-C correspond to Hard-core, Soft-core with index n and Very-soft-core.

となる。

しかし virial 展開の係数を求めるためには膨大な組み合わせ論的な計算を強いられ、一般にこの級数展開を高次まで求めるのは困難である。我々が将来にわたって組織的に押し進めたいと考えている方法は、3節に述べたようなモンテカルロ法による計算機実験を重ねて $\phi(\tau_k)$ をその誤差とともに実験値として貯え、 $\phi(\tau)$ を滑らかな関数として内挿する方法である。実際 (5.3) 式の左辺によっても ϕ 関数が定義されているのだから Gibbs 場による平均 $E\{\cdot\}$ の代りに、エルゴード性は成立しているので、次のような時間平均を使うと

$$(5.7) \quad \phi(\tau) = -\left(\frac{1}{2N}\right)\left(\frac{1}{M}\right) \sum_{i=1}^M \sum_{i < j} \sum \left(\frac{r_{ij}^*(t)}{\sqrt{\tau}} \right) \cdot \Phi_1 \left(\frac{r_{ij}^*(t)}{\sqrt{\tau}} \right)$$

が得られ、これを計算する。たとえば Soft-core モデル $\Phi_\sigma(r) = (\sigma/r)^n$, $n > 2$ (図5) については

$$(5.8) \quad \phi(\tau) = \left(\frac{n}{2N}\right)\left(\frac{1}{M}\right) \sum_{i=1}^M \sum_{i < j} \sum \left(\frac{\sqrt{\tau}}{r_{ij}^*(t)} \right)^n$$

となる。現状では計算機の時間的な制約上あまり頻繁に実験はできないが $M \approx 10^6$ ステップ、粒子数 $N = 500$ で得られる $\phi(\tau)$ は τ に関して単調増加で滑らかで、実験値の誤差は小さいので標本点は、たとえば $0 < \tau < 0.8$ で 15 点の τ_k についてで充分である。一例として $n=12$ の場合の実験について結果を表4に与える。

そこで最小二乗法などを使って有限次数多項式で近似内挿する。 $n=4, 6, 8, 12, 16, 24$ について 90 点の計算機実験値 $\phi_n(\tau_k)$ が得られ、(5.4) によって

表4. Soft-core ポテンシャルモデル S-C (12) に対するモンテカルロシミュレーションによって得られた $\phi(\tau)$ の標本平均 (5.8) と標本平均誤差。

Table 4. An example of the results of the computer experiments for the Soft-core potential $\Phi(r) = (\sigma/r)^n$ with $n=12$: sample mean (5.8) of $\phi(\tau_i)$ for each τ_i , and its standard error.

τ	$\phi(\tau)$	s. e.
0.05	0.09449	0.0031227
0.10	0.20593	0.0054074
0.15	0.32557	0.0059192
0.20	0.47426	0.0063351
0.25	0.63616	0.0063793
0.30	0.83994	0.0067837
0.35	1.06117	0.0070654
0.40	1.34459	0.0076298
0.45	1.65606	0.0081459
0.50	2.04039	0.0088665
0.55	2.51227	0.0095496
0.60	3.04830	0.0098797
0.65	3.70757	0.0105537
0.70	4.53279	0.0112354
0.75	5.50700	0.0114122

表 5. Soft-core モデルに対する対数規格化因子の推定多項式 (5.9) を与える係数.
Table 5. Coefficients in (5.9) for each n of Soft-core models.

	d_1	d_2	d_3	d_4	d_5	d_6
$n=4$	2.78416	1.83131	0.385663	—	—	—
$n=6$	2.12702	1.45725	0.901590	0.354135	—	—
$n=8$	1.92488	1.31114	1.00084	0.257483	0.545264	—
$n=12$	1.77310	1.18121	0.941880	—	1.39604	—
$n=16$	1.71162	1.12148	0.894070	0.438325	0.0787974	1.20384
$n=24$	1.65805	1.06538	0.983873	—	0.163823	1.66863

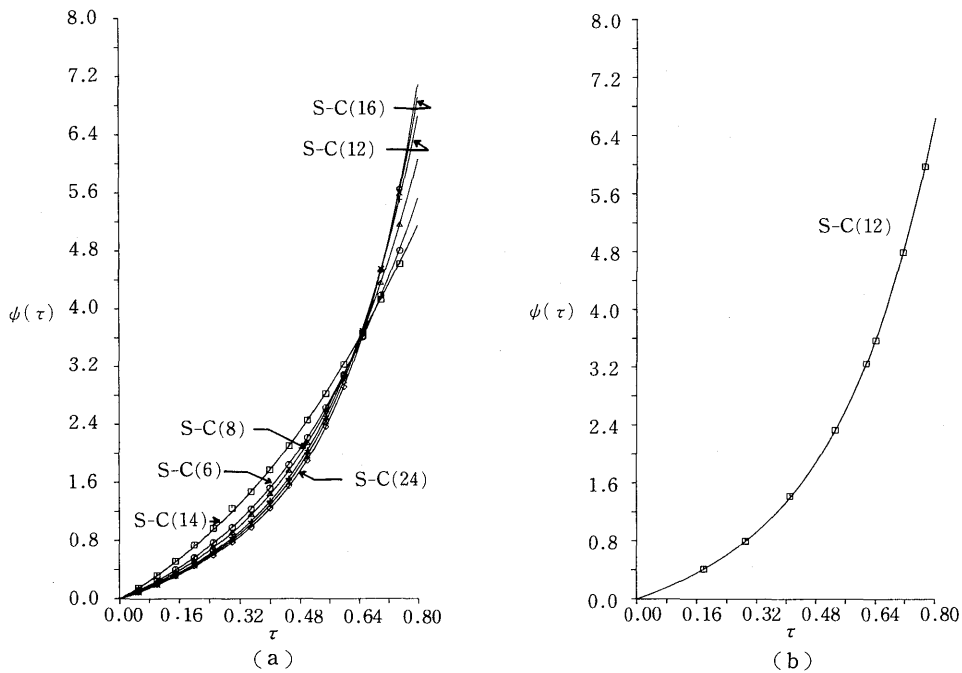


図 6. Soft-core ポテンシャルモデルに対する $\phi(\tau)$ の計算機実験値のプロットと内挿曲線: (a) $n=4, 6, 8, 12, 16$ および 24 の Soft-core モデルにおける $\phi(\tau)$ の推定多項式の曲線 (多項式の係数は (5.4) の関係式を使って, 表 5 の係数から計算できる). 各曲線上に沿って示されているプロットは計算機実験より求めた (5.8) 式の値である. (b) ポテンシャルモデル S-C (12) に対して推定された $\phi(\tau)$ の曲線 (実線) と, 分子動力学法によって Swol, Woodcock and Cape (1980) が独立に得た $\phi(\tau)$ の値 (\square 印) との比較. $0 < \tau < 0.8$ の範囲で両者の一致は良い.

Fig. 6. Results of the Monte-Carlo experiments and the interpolation of ϕ -functions: (a) The ϕ -functions for the Soft-core models. Curves are the fitted polynomials for respective models $n=4, 6, 8, 12, 16$ and 24 , where the coefficients are related to Table 5 by the relation (5.4). Plots along each curve are the results (5.8) of the Monte-Carlo simulations. (b) Comparison of the estimated ϕ -function of S-C (12) (solid curve) with the ϕ -values (open squares) obtained independently by Swol, Woodcock and Cape (1980) through molecular dynamics simulations. The fit in the range $0 < \tau < 0.8$ is excellent.

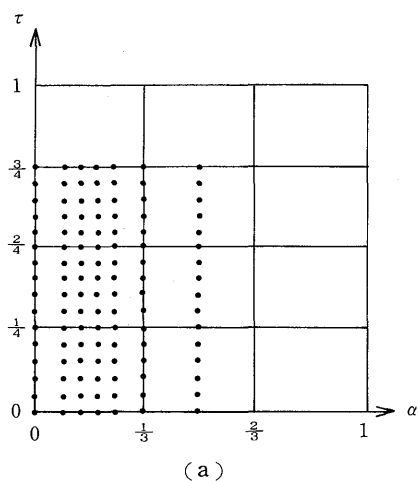
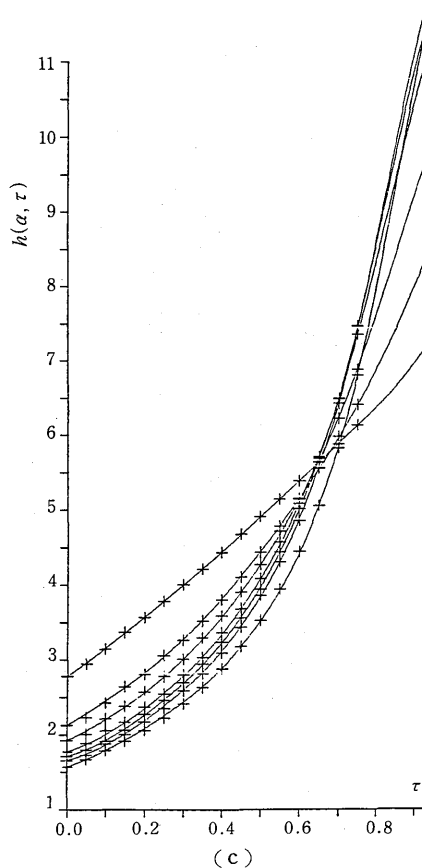
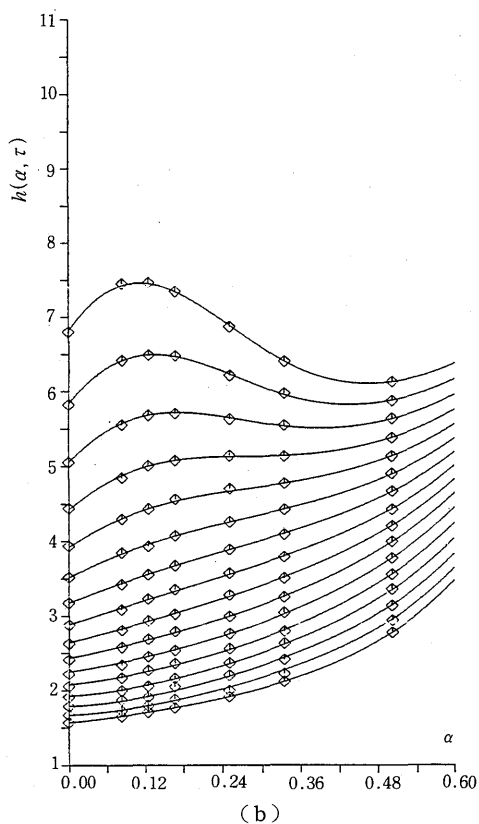


図7. Soft-core ポテンシャルモデルの2パラメタ (α, τ) に関する同時推定: (a) パラメタ空間 (α, τ) における標本点 (●印) およびスプライン近似のための区画 (3×4 に等分割された小領域). (b) 関数 $\phi(\alpha, \tau)/\tau$ のスプライン近似 $h(\alpha, \tau)$ における, 図7aの標本点列に沿った τ 軸へのプロフィール (実線) と実験値 (◇印). (c) 関数 $\phi(\alpha, \tau)/\tau$ のスプライン近似 $h(\alpha, \tau)$ における, 図7aの標本点列に沿った α 軸へのプロフィール (実線) と実験値 (+印).

Fig. 7. Fitted $h(\alpha, \tau)$ function to $\phi(\alpha, \tau)/\tau$ in the integrand in (5.4) for extended Soft-core potential (5.11): (a) Sample points (dots in the figure) for ϕ -values in the parameter space $[0, 1]^2$ of (α, τ) which is divided into 3×4 identical rectangles for the definition of spline function (5.12). (b) Profiles of the spline surface along sample points for fixed τ 's (solid lines) and related experimental values (symbol ◇). (c) Profiles of the spline surface along sample points for fixed α 's (solid lines) and related experimental values (symbol +).



$$(5.9) \quad \log \bar{Z}(\tau, \Phi_1; N) = N(d_1\tau + d_2\tau^2 + \cdots + d_6\tau^6)$$

の形で与えられる係数を決めた(O & T(1984), 表5および図6参照)。これらの近似は従って $0 < \tau < 0.8$ の範囲で有効である。 τ が 0.8 を超えると結晶固体のように規則的な配置への相転移の問題が絡んでくるので、ランダムな点配置としては十分な範囲と言える。

Soft-core の柔らかさを示す値 n の選択には AIC を比較することにした。このようにしてシミュレーションで生成された人工データを解析してみると、ほとんどの場合に於いて真のモデルが選択され真のパラメタ値に近い推定値が得られることが確認されている(O & T (1984))。パラメタ推定の誤差分布は Fisher の情報量によって理論的に得られるが、これは

$$(5.10) \quad -E[\partial^2 \log L / \partial \sigma^2] = 2 \left(\frac{N}{V} \right) \{ n\phi(\tau)/\tau - 2\psi'(\tau) \}$$

のように ϕ 関数で表現され、推定値の真のパラメタからのずれの \sqrt{N} 倍は理論的な推定誤差分布に従っていることが見てとれる (Hard-core については \sqrt{N} 倍ではなく N 倍である)。

これを更に発展させて Soft-core モデル $\Phi_\sigma(r) = (\sigma/r)^n$, $n > 2$ のパラメタ n を連続的に考えるために $\alpha = 2/n$, $0 \leq \alpha < 1$, とおき

$$(5.11) \quad \Phi(r; \theta) = \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{2/\alpha}, \quad \theta = (\sigma, \alpha),$$

を考える。たとえば $\alpha = 0$ のときは Hard-core になる。このとき $\log \bar{Z}$ を τ と α の関数として表現することができる。ここでは $\phi(\tau)$ の代りに $\phi(\tau)/\tau$ を τ と α の 2 次元スプライン関数 $h(\alpha, \tau)$ で内挿する方法をとった。このスプライン関数は次のように定義される：単位平方領域 $[0, 1] \times [0, 1]$ を、図 7a に示すように、 3×4 等分したときの部分領域 $[i/3, (i+1)/3] \times [j/4, (j+1)/4]$ に (α, τ) が属しているとき

$$(5.12) \quad h(\alpha, \tau) = \sum_{k=0}^3 \sum_{m=0}^3 c(i+k, j+m) B_{4-k}(r_\alpha) B_{4-m}(r_\tau)$$

という値を取る。ここで B スプライン $\{B_k(r); k=1, 2, 3, 4\}$ は $[0, 1]$ での 3 次多項式

$$(5.13) \quad \begin{aligned} B_1(r) &= r^3/6, \\ B_2(r) &= (-3r^3 + 3r^2 + 3r + 1)/6, \\ B_3(r) &= (3r^3 - 6r^2 + 4)/6, \\ B_4(r) &= (-r^3 + 3r^2 - 3r + 1)/6 \end{aligned}$$

表 6. Soft-core モデル族に対する 2 次元スプライン関数 $h(\alpha, \tau)$ (5.12) の推定係数行列 $C = \{c(p, q)\}$.

Table 6. Coefficients matrix $C = \{c(p, q)\}$ of the 2-dimensional spline function in (5.12)

$\begin{matrix} p \\ \backslash \\ q \end{matrix}$	1	2	3	4	5	6
1	-6.2628	3.1550	0.41372	3.4324	8.5895	11.245
2	3.3230	0.93849	2.1801	3.0206	9.5866	10.733
3	1.0112	2.2701	2.6552	4.7195	9.1765	13.105
4	2.7570	3.1222	4.4722	5.1175	9.8713	10.652
5	-3.2697	8.1699	5.7940	6.2979	8.7423	11.957
6	-7.8934	21.519	6.1032	7.8280	8.8784	12.984
7	69.293	4.8399	19.569	4.1605	13.848	1.1280

であり, $r_a = 3(\alpha - i/3)$ および $r_\tau = 4(\tau - j/4)$ である. そして $C = \{c(p, q)\}$ は 6×7 の係数行列であり表 6 にその数値を与えている (この係数を導いた方法は O & T (1986b) 参照). こうして得られたスプライン関数の曲面の切断曲線を図 7b および c に示した. (5.12) を (5.4) の被積分関数に代入し, (2.3) を使って, シミュレーションで作成されたデータに対して検討すると $0 \leq \alpha < 1/2$, $0 \leq \tau < 0.8$ で有効であることが分かった.

この節をまとめると, Soft-core ポテンシャルの n または α が反撥の柔らかさを, σ が点の相互作用の広がり, 換算密度 $\tau = N\sigma^2/V$ が粒子系の混みぐあいを, そして関数 $\phi(\tau)$ がポアソン場からのずれぐあいおよび粒子系の反撥の強さを表現している. これらは最尤法 (必要なら AIC) を適用することによって客観的に得られることになる. これらの近似尤度の実データへの適用例については O & T (1986b) を参照されたい.

6. マーク付き平衡点配置の近似尤度 (O & T (1985))

この節で対象となるデータは V 中の点の配置 $X = \{(x_i, y_i), i = 1, \dots, N\}$ にマーク $\xi = \{\xi_i; i = 1, \dots, N\}$ が付加されている場合である. 粒子 i と j に働く相互作用 $\Phi_\theta(r_{ij}; \xi_i, \xi_j)$ が点間の距離 r_{ij} だけでなく, それぞれのマーク ξ_i, ξ_j に依存しているものとする. 点の数 N と各点に付加されたマーク ξ について条件付のもとの Gibbs 分布は

$$(6.1) \quad f(X | \xi) = \exp \left\{ - \sum_{i < j} \Phi_\theta(r_{ij}; \xi_i, \xi_j) \right\} / Z(\theta; \xi)$$

によって与えられる. ここで規格化因子は $2N$ 重積分

$$(6.2) \quad Z(\theta; \xi) = \int_{V^N} \exp \left\{ - \sum_{i < j} \Phi_\theta(r_{ij}; \xi_i, \xi_j) \right\} dx_1 dy_1 \cdots dx_N dy_N$$

で与えられる. 従って対数尤度関数は

$$(6.3) \quad \log L(\theta | X) = - \sum_{i < j} \Phi_\theta(r_{ij}; \xi_i, \xi_j) - \log Z(\theta; \xi)$$

となる. これを希薄気体近似にするマークに依存するポテンシャル関数を特殊な形で与える必要がある.

まず 2 種類の点が混在している配置が考えられる. 均質な 2 種類の点配置, $X^1 = \{(x_i^1, y_i^1); i = 1, 2, \dots, N_1\}$ および $X^2 = \{(x_i^2, y_i^2); i = 1, 2, \dots, N_2\}$ が同一の領域 V 内に相互作用をしながら混在しているとき, ポテンシャルは同種間に働く $\Phi_i^{11}(r) = \Phi_i(r; 1, 1)$, $\Phi_i^{22}(r) = \Phi_i(r; 2, 2)$ そして異種間に働く $\Phi_i^{12}(r) = \Phi_i(r; 1, 2) = \Phi_i(r; 2, 1)$ の 3 つが考えられる (図 8). いまパラメタベクトル ζ, η, ε の成分に共通なものがなくて互いに無関係ならば, 希薄気体近似

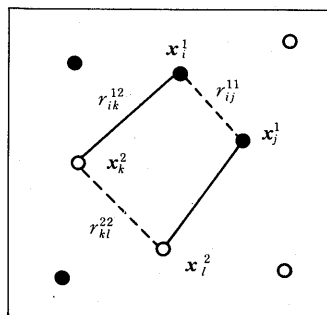


図 8. 2 種のマーク付き点配置とそれに対応する 3 種のポテンシャル関数.

●印: 種 1; ○印: 種 2.

Fig. 8. Pattern of points with two species 1 (sign ●) and 2 (sign ○), where three types of potentials (see (6.4)) defined on the following three kinds of distances: r_{ij}^{11} and r_{kl}^{22} are distances between points of the same species, respectively; and r_{ik}^{12} is a distance between points i and k of the different species.

によって対数尤度 (6.3) は次のような和に分解され、それぞれ独自に最尤法を遂行できる：

$$(6.4) \quad \log L^{11}(\xi | X^1) + \log L^{22}(\eta | X^2) + \log L^{12}(\varepsilon | X^1, X^2)$$

ただし

$$(6.5) \quad \begin{aligned} \log L^{11} &= -\sum_{i < j}^{N_1} \Phi_{\xi}^{11}(r_{ij}^{11}) - \{N_1(N_1-1)/2\} \log [1 + a_{11}(\xi)/V], \\ \log L^{22} &= -\sum_{i < j}^{N_2} \Phi_{\eta}^{22}(r_{ij}^{22}) - \{N_2(N_2-1)/2\} \log [1 + a_{22}(\eta)/V], \\ \log L^{12} &= -\sum_{i < j}^{N_1 N_2} \Phi_{\varepsilon}^{12}(r_{ij}^{12}) - N_1 N_2 \log [1 + a_{12}(\varepsilon)/V], \end{aligned}$$

ここで $a_{kl} = \int_0^{\infty} 2\pi r [\exp \{-\Phi^{kl}(r)\} - 1] dr$ ($k, l=1, 2$) である。特に (6.5) の最後の部分対数尤度は 2 種間に相互作用があるか否かを判定するのに有用である。それぞれのポテンシャル選択は AIC で別々に実行できる。

次にスカラー量をマークとする点の配置が考えられる。均質な点配置 X の各点 (x_i, y_i) がマーク ξ_i なるスカラーをもっているとき、相互作用ポテンシャルが $\Phi_{\theta}(r_{ij}/z_{ij})$ という形をしていると考える。ここで $z_{ij} = f(\xi_i, \xi_j)$ は対応するマークの適当な関数である。関数 f としては、たとえば $z_{ij} = (\xi_i^d + \xi_j^d)/2$ や $z_{ij} = (\xi_i \xi_j)^{d/2}$ が考えられ、そして d のようなパラメタを含んでいても良い。簡単な計算の結果、希薄気体近似によって

$$(6.6) \quad \log L = -\sum_{i < j} \Phi_{\theta}\left(\frac{r_{ij}}{z_{ij}}\right) - \sum_{i < j} \log [1 - z_{ij} a(\theta)/V]$$

が得られる。ここで $a(\theta)$ は $\Phi_{\theta}(r)$ の第 2 クラスター積分 (4.7) である。この対数尤度は上に掲げた d の如く、関数 f のパラメタも含むことができる。

以上の対数尤度近似が有効であるか否かは、それぞれのパラメタに関する Fisher-score 時系列 (4.12) が 0 から偏っていないかどうかで判断する。もしバイアスがあるときは、解析的に可能なら、より高次の多変数 virial 展開を試してみる価値がある。たとえばスカラーマークのポテンシャルについて (4.4) および (4.5) では 3 次 virial 展開まで得られ、この近似ならば Fisher-score のバイアスがなくなるような実データ例が O & T (1985) に掲げられている。しかし現状では、より高次の virial 展開は困難であり、前節のようなモンテカルロによる方法も (6.1) における ξ の分布ごとに尤度のための表を作成するのは現実的でない。Penttinen (1984) は関係式 (5.3) を導いたのと同様の方法を使って、ニュートン法の各ステップで対数尤度の 1 階微分だけでなく 2 階微分もモンテカルロ法で推定し、収束するまで繰り返してパラメタを推定するという方法を提案している。この方式は目下のところパラメタ 1 個がせいぜいで、収束も安定しないという状況にある。その上にこの方法では (対数) 尤度の値そのものを計算できない為にモデルの適合度の比較ができない。他に何か新しい方法が必要とされている。

参 考 文 献

- Gates, D.J. and Westcott, M. (1986). Clustering estimates for spatial point distributions with unstable potentials, *Ann. Inst. Statist. Math.*, **38**, 123-135.
- 長谷川政美, 種村正美 (1986). なわばりの生態学——生態のモデルと空間パターンの統計(動物・その適応戦略と社会 ①), 第 II 部, 東海大学出版会.
- Metropolis, N., Rosenbluth, A.W., Rosenbluth, M.N., Teller, A.H. and Teller, E. (1953). Equation of state calculations by fast computing machines, *J. Chem. Phys.*, **21**, 1087-1092.

- 尾形良彦 (1983). 点過程・空間パタンの最尤法における非正則漸近性の例について, 京都大学数理解析研究所講究録, **507**, 33-43.
- Ogata, Y. and Tanemura, M. (1981a). Estimation of interaction potentials of spatial point patterns through the maximum likelihood procedure, *Ann. Inst. Statist. Math.*, **33**, 315-338.
- Ogata, Y. and Tanemura, M. (1981b). A simple simulation method for quasi-equilibrium point patterns, *Research Memorandum No. 210*, The Institute of Statistical Mathematics, Tokyo.
- Ogata, Y. and Tanemura, M. (1984). Likelihood analysis of spatial point patterns, *J. Roy. Statist. Soc. Ser. B.*, **46**(3), 496-518.
- Ogata, Y. and Tanemura, M. (1985). Estimation of interaction potentials of marked spatial point patterns through the maximum likelihood method, *Biometrics*, **41**, 421-433.
- Ogata, Y. and Tanemura, M. (1986a). Likelihood estimation of interaction potentials and external fields of inhomogeneous spatial point patterns, *Pacific Statistical Congress* (eds. I.S. Francis, B.F.J. Manly and F.C. Lam), North-Holland, Amsterdam, 150-154.
- Ogata, Y. and Tanemura, M. (1986b). The likelihood analysis for spatial point patterns, *Proceedings* (invited papers), The XIIIth International Biometric Conference, Seattle.
- Penttinen, A. (1984). Modelling interactions in spatial point patterns: parameter estimation by the maximum likelihood method, Ph. D. Thesis, *Jyvaskyla Studies in Computer Science, Economics and Statistics*, **7**, University of Jyvaskyla, Finland.
- Ree, F.H. and Hoover, W.G. (1967). Seventh virial coefficients for hard spheres and hard disks, *J. Chem. Phys.*, **46**, 4181-4197.
- Strauss, D.J. (1975). A model for clustering, *Biometrika*, **63**, 467-475.
- Swol, F. van, Woodcock, L.V. and Cape, J.N. (1980). Melting in two dimensions: determination of phase transition boundaries. *J. Chem. Phys.*, **73**, 913-922.
- Wood, W.W. (1968). Monte Carlo studies of simple liquid models, *Physics of Simple Liquids* (eds. H.N.V. Temperley, J.S. Rowlinson and G.S. Rushbrooke), Chap. 5, North-Holland, Amsterdam, 115-230.

Likelihood Analysis for Gibbsian Point Patterns

Yosihiko Ogata and Masaharu Tanemura

(The Institute of Statistical Mathematics)

This paper reviews some progress in the likelihood analysis of spatial point patterns made by the present authors. Suppose a map of planar pattern of points is given. Since the data have no time axis, a natural statistical model describing the configuration of the point pattern is the Gibbs equilibrium distribution (2.1) with (2.2) which is characterized by the pairwise potential function between points. The potential function describes the interaction between points, and by this we can simulate the series of the equilibrium point patterns as is described in Section 3.

Our naive idea was to estimate the shape of potential function, given coordinates of a point pattern. That is to say, parameterizing the function and substituting the coordinates of the points to the Gibbs distribution (2.1), we have the likelihood function with respect to the parameter, in principle. The difficulty, however, is in the normalizing factor (2.2) for carrying out the computation of the log likelihood (2.3). To avoid such difficulty we have suggested several approximation methods for the normalizing factor.

First, when the point pattern is supposed to be sparse, a dilute gas approximation (4.6) is made using the second cluster integral (4.7), which leads to the approximated log likelihood (4.8). A variety of examples of potentials (4.1)–(4.5) is provided together with their second cluster integrals in Table 1. Similar approximation is extended to the case where the pattern is not homogeneous: besides the pairwise interaction the external field of the location is assumed to get the approximated log likelihood (4.10) for the total potential (4.9) of a pattern. The time series of the Fisher score statistics of every simulated point patterns is useful to check the validity of the approximation of the log likelihood. If the average of time series deviates from zero, the approximation of the normalizing factor is not close enough to the true one. Nevertheless, it should be stressed that the present approximations works quite well, and are the most sensitive, to test the homogeneous or non-homogeneous Poisson point patterns, respectively, against a point pattern which is suspected to have an interaction.

For the useful approximation of the log normalizing factor for higher density point patterns, the role of the function $\psi(\tau)$, called by the name of the compressibility factor in statistical mechanics, is important. This is defined here to be equal to the both hand sides of the equality (5.3) which is derived from a certain basic equality in likelihood theory. The relation of the normalizing factor to the ψ function is given in (5.4). Since the density of point patterns is related to the scale parameter σ of the potential function as well as to the number N of points in the area V , potential functions are standardized as in (5.1), and the reduced density $\tau = (N/V)\sigma^2$ is considered. If a number of virial coefficients is calculated, the Padé approximation (5.5) is useful up to considerable high density, which lead to the normalizing factor (5.6). The coefficients of the Padé are given in Table 3 for the Hard-core (4.2) and Very-soft-core ($\alpha=0$ in (4.3)), respectively. The more general

and useful approximation can be implemented by the Monte-Carlo experiments in simulating the large number of equilibrium point patterns, so that estimates of $\psi(\tau)$ (5.7) for some τ , instead of the right hand side of the equality (5.3), are computed. An example of the results of the experiments for the Soft-core potential $\Phi(r) = (\sigma/r)^n$ with $n=12$ is shown in Table 4, together with standard error of the sample mean (5.8). By the interpolation of these values, polynomials are obtained for every n as ψ -functions, which are shown in Figure 6. This leads (5.9) whose parameters are listed in Table 5. To estimate n as well as σ , the Soft-core potentials are extended to the form (5.11), and the 2-dimensional spline function (5.12) with the base functions in (5.13) is fitted to the experimental data for $\psi(\tau)/\tau$ in (5.4). The coefficients of the spline in (5.12) are listed in Table 6, and the spline surface is shown in Figure 7. By the maximum likelihood estimation of σ and $\alpha=2/n$ (softness), we have another useful indicators τ (reduced density) and $\psi(\tau)$ (deviation from the Poisson pattern).

Finally, patterns of points accompanying their marks are considered. In this case a pairwise potential function of distance between two points and their marks is assumed for the model. The Gibbs distribution (6.1) with the normalizing factor (6.2), conditional on the marks, is used for the likelihood function. Two types of situations are implemented: that is, patterns of points with two species, and with scalar marks relating to the scale factor of the potential function. In the former case, three potentials are assumed: two potentials works between points of the same species, respectively, and the rest works between points of the different species. If the sparseness of the pattern is assumed, then the second order approximation similar to the above described case is available, and the log likelihood is decomposed into three components (6.5), each of which can be maximized independently to get the estimates. In the latter case, the second order cluster approximation leads to (5.6) where $a(\theta)$ is the second cluster integral in (4.7), and z_{ij} is the specified function of two scalar marks ξ_i and ξ_j which can include another parameter like d given in the text.