

たとえば、初期値を横方向にずらしたものは、無限平面の模様としては同一である。これを巡回合同と呼ぶならば、模様の総数は上述の w 分の 1 になる。また、 $w/2$ を越えた d は $w-d$ を上下対称にしたものと同じであるから、 w は 0 から $\text{INT}(w/2)$ までのものを調べれば十分である。同様に左右対称合同を考えることができ、厳密な評価は今後の課題であるが、概数として $1/2$ になる。また 2 種の状態を入れ換えた反転合同を考えることができるが、この数え上げも今後の課題である。

実際の模様データとしては、初期値 (w は暗に指定される)、ずらし量 d 、生成関数の指定が必要である。そのデータは、乱数などによって適当な初期値を作り、良い模様を選ぶ評価関数であらかじめスクリーニングし、人間が修正するか、モチーフを決めて、これを再現するようなデータを作ればよい。紹介した評価関数は、配置構造と同状態のセル結合数を利用したもので、ある程度の選抜効果があったが、もちろん改良の余地がある。モチーフの再現の場合には、横 1 列のセルの中に要素のすべての情報を持たなければならない関係上、実現不可能な配置がある。 d の値は不定方程式を解くことによって簡単に得られる。

このような手法を使って作った、小紋、縞、格子等の模様を 19 個紹介した。本方法の特徴としては陰陽交代模様と、関数の交換による対転の技法がある。バリエーションの作り方については若干のことが分っているが、詳しい説明はしなかった。バリエーションの導出を演算とみて、その体系を完璧なものとするべく研究中である。

多近傍のセル・オートマトンは環境内の相互干渉が現れるので、まったく違った様相を示す。しかも生成関数がすべての環境を再現するとは限らないので、解析は簡単ではない。2 近傍と 3 近傍の場合に生成される類似パターンの統計的性質についての資料を配付した。

参 考 文 献

- 1) 坂元宗和, 高木幹雄 (1986). 1次元1近傍のセル・オートマトンによる平面模様の生成, 情報処理学会研究資料グラフィクスとCAD 23-3.

結晶の対称性の統計的分布

統計数理研究所 伊藤 栄 明

結晶における幾何学的対称性を平行移動の操作を考慮に入れずに記述する方法として 32 個の点群がある。点群は結晶の形態を記述する際にもちいられる。点群における対称操作に平行移動の操作を組み合わせたものが 230 個の空間群であり、各空間群は 32 個の点群のいずれかにもとづいて構成される。各点群に属する結晶の個数についてのデータを考える。これについての確率モデルを考えることは興味ある問題であり、乱数をもちいた計算機シミュレーションを以前に行った (伊藤 (1986))。ここでは乱数をもちいずに数値計算による方法について議論する。

Nowacki, Matsumoto, Edenharter (1967) は結晶の対称性についてのデータを物理的、化学的な性質にもとづいて分類し、各空間に属する結晶の個数を表にまとめた。彼等による分類 III は酸化物及び水酸化物からなり、点群を考えると C_{2h} を部分群として含むことがわかる。 C_{2h} にランダムに対称操作が加わったというモデルについて考える。

正六面体を合同な位置にもたらすような合同変換の全体はひとつの有限群をつくる。この有限群で位数が最大であるものは結晶学において O_h と呼ばれている群である。正六角形の柱から同様にして得られる群は、 D_{6h} と呼ばれている。 O_h 及び D_{6h} を幾何学的意味にもとづいて

3次元の行列により表現する。まず O_h の表現を考える。頂点の各座標が+1あるいは-1であるような正六面体を考える。それと合同な位置にもたらしうような合同変換のすべてを行列により表現し48個の行列を得る(伊藤(1986), 表2)。それらの行列より回転軸が(1, 1, 1)と(-1, -1, -1)を通る $\bar{3}$ (仁田勇監修, 『X線結晶学』参照)を含む D_{3d} の表現となる12個の行列をえらびだす。さらにその12個の行列を含み, D_{6h} の表現となる24個の行列を考える。このようにして60個の行列が得られる。そのうち48個は O_h の表現であり24個は D_{6h} の表現であり, 12個は双方に共通である(伊藤(1986), 表2)。60個の行列より得られる行列の組み合わせをすべて考える。それらのうち, 積に関して閉じているものをすべてえらびだすと, 136個ある。これらの各々は32個の点群のいずれかの表現である。上記60個の行列による表現にもとづいた, これら136個の組のあらかず点群は位数の構成, 固有和の構成及び行列式の構成をしらべることにより定めることができる。上記136個の組に1から順に適当に番号をつける。組 i に等確率で60個の行列からえらんで行列を加え可能な積をすべて考えたときに組 j が得られる確率を P_{ij} とする。可能な積が閉じていない場合もあり, その場合を組137とすることになれば 137×137 の行列 $\{P_{ij}\}$ が得られる。 $\sum_{j=1}^{137} P_{ij} = 1$ であり, これは遷移確率行列である。

上記60個の行列より得られる C_{2h} である行列の組は13個ある。そのひとつの組 a に重複をゆるして N 個ランダムに60個の行列から等確率でえらばれた行列を加えたときに各組の得られる確率は,

$$\vec{P} = \sum_{k=0}^{\infty} \Pr(N=k) \{P_{ij}\}^k \vec{I}_a$$

となる。 \vec{I}_a は a 番目の要素が1で他は0であるようなベクトルである。 C_{2h} である13個の組が同程度に確からしいという仮定をおけば,

$$\vec{P} = \sum_{k=0}^{\infty} \Pr(N=k) \{P_{ij}\}^k \vec{I}$$

であり, \vec{I} は13個の C_{2h} である行列の組に対応する要素が $1/13$, 他は0であるようなベクトルである。乱数をもちいた計算機シミュレーションによりこの確率を推定することもできるが計算時間がかかり, N について様々な分布を仮定して議論をするのは困難である。上記の方法によれば計算時間が短く様々な分布について検討することができる。

参 考 文 献

- 1) 伊藤栄明(1986). 幾何学的対称性の統計的分布, 統計数理, 34, 19-27.

Statistical Aspects of Form in the Structure of Simple Liquids

筑波大学物理工学系 Robert Collins*・小川 泰

当日の講演はCollinsが英語で行った。以下の文の責任はその筆者である小川にある。先ずJ.D. Bernalに創まる¹⁾液体の幾何学的理論について概観²⁾した後, 半年間の滞日中に筆者らと行った共同研究について報告した。詳細は, R. Collins-Tohru Ogawa-Taeko Ogawa³⁾に述べる。

* 現 Department of Physics, University of York, England.