

4-共研-40 判別関数の設定と市場調査・分析の手法研究

統計数理研究所 田口時夫

研究代表者は、これまでに度々線形及び非線形の集中回帰を提案し、それが特に所得分布の解析に有効である事を示して来た。今回この種の集中回帰諸係数の決定基準を分布関数・分配関数ベクトルによって構成される空間で表現される集中曲面の勾配をもとにして表現する事を試みた。本年度に行った各種の提案は猶若干の修正の必要が見出され、次年度に引続き研究する予定である。

4-共研-42 結晶の対称性の統計的分布と最密充填

統計数理研究所 伊藤栄明

どの空間群が出現しやすいかについて統計的研究を行った。データベース ICSD を用いて計算機により自動的に頻度が得られるようにした。2種類の結晶の間に距離を定義し、ICSD内での順番にしたがい、種を逐次定義してゆく。 n 個の種がすでに定義されたとすれば $n+1$ 個目の種はすでに定義された n 個の種より d 以上はなれていれば $n+1$ 個目の種であると定義する。得られた種について対称性の統計的分布を点群、空間群について整理した。ICSDが持っているキーワードにANX記号というものがある。これは、その化合物の分子式を元素の酸化数によっておおまかに表すものである。この34種類のANX記号ごとに点群の出現頻度をもとめた。また空間群の出現頻度をもとめた。これは結晶の対称性のランダム生成モデルの研究を進めるうえでの基礎となるものである。

また、結晶の対称性の統計的分布を議論する基礎として、楕円体の最密パッキングの問題をしらべた。

4-共研-45 スピン系の相転移理論

東京工業大学 理学部 小野昱郎

我々は典型的な多体問題であるスピン系の相転移のコンピュータシミュレーションを行っている。今回は正方格子上的6状態一般化クロック模型の相図を求めた。クロック模型の原型は古典XY模型である。XY模型のスピンは平面上の長さ1のベクトルで、その方向を正 q 角形の頂点の指す方向に制限、離散化したのがクロック模型である。最近接スピン間にはスピンの内積の形の相互作用が働いているが、これを内積形から離れて自由に変化させるのが一般化クロック模型である。この模型は $q=4$ のとき対称的なAshkin-Teller模型に一致し、クロック模型にない新たな秩序相を表すことが解析的に分かる。 $q>4$ ではKosterlitz-Thouless (K-T) 転移も加わった多様な相転移が期待できるが、系のもつ対称性の種類も増すので秩序変数の決定が困難になる。群論によると、この模型の対称性は点群によって分類できる。点群は全スピンに対してなされる回転、鏡映の対称操作より定義される群である。相転移には系の対称性の変化が伴い、秩序相のもつ対称性は点群の定められた部分群に属している。秩序変数は点群の既約表現の基底で表現されることになる。群論を適用した結果、秩序変数はスカラー型とベク