統計幾何学 — とくに球のランダム・パッキングをめぐって

統計数理研究所　樋口伊佐夫

統計的手法は複雑な現象を整理し，解析する方法であるが，幾何学的な複雑さを対象とするときは有力でない。融解現象に関連しては，分子配位の複雑なパターンの変化を適切に表現して解析する方法の確立が望ましいが，まだ殆んど進んでいない。ここでは球のランダムパッキングを中心に，統計幾何学の統計数理的側面からのアプローチの概観を述べ参考に資したい。

統計幾何学というのは1950年代の終りごろBernal[1]が提唱したのが始りかと思われる。それ以前からある幾何確率と特に大きな区別のあるわけではないが，ややニュアンスが異り，傾向として，空間の幾何学的不規則性を対象とする研究が増加しつつある。最近扱われた問題は，Moran[2]の分類によると，(1)ランダム点に関する問題，(2)ランダムな線に関する問題，(3)空間のランダム分割，(4)駐車（parking）と充塡（packing），(5)形と大きさの推定に大別される。これにさらに(6)ランダム・グラフ[3]が追加されよう。これらの中で融解現象に特に関連のあるのは(4)で，ついで(3)，(6)も有用になる可能性が多いだろう。

球のランダム（および非ランダム）・パッキングは，固い（tight）パッキングと，ゆるい配位，等大球の場合と，不等大球の（粒度分布のある）場合，さらに1次元の場合，さらに1次元の場合からn次元の場合まであるが適用対象の多様性から，いろいろの分野の人が研究している。パッキングの問題の共通の特徴は，一見容易のようで，数学的困難の大きいことである。ノンランダムの初等的な問題でもわかっていないことも多いが，ランダム・パッキングにいたっては，普通，存在概念として定義することすらむつかしい。これは計算アルゴリズムにより構成的に定義するしか仕方ないが，計算機でも乱数をつくり，それを用いて構成したからといって，出来たものがランダムであるとは限らないし，また，完全には規則的ではないというだけで，ランダムとはいい難いものもある。ここでランダムというのはMises流のCollective[4]を考えているのであるが，これは系列的な概念で定義されるので，幾何学的空間的な対象に適用されにくい本性をもっている。物理ではポテンシャルで規定するコアモデルのように，規則性は指

定しないという方法がとられることも多いようである。こうした場合のランダムネスがどのようなものであるかは，まだ数学的にはわからない。（確率論的取扱いがなされると，ランダムのような錯覚を起しがちであるが，確率論の計算の多くはランダムでないものにも問違いをひき起すことなく適用できる）。

現在のところ，ランダムパッキングが確率論的に厳密に扱えるのは，一次元の場合にかぎられる[5,6,7]。一次元の場合は粒子を1個充塡すれば，その粒子を境として空間が二つに分かれ，その二つの空間の以後の充塡は互いに影響しあわない。二次元以上ではこのような性質がないので，一次元の方法を拡張することはむつかしい。二次元以上ではWise-Hogendijk の四面体分布の方法（近似計算）[8,9]，よく知られた radial 分布の取扱い[10]，の他には，帯状領域に展開してゆく小川ー種村の Contiguous packingのの理論[11]があるのみである。

筆者はスチールボールを用いて，粒度分布が対数正規則に近似のランダム・パッキングをつくり，断面について種々の統計量を測定し，粒子が重なりあえるとして行った確率計算の結果と比較し，全域的な統計的性質についてはよく一致することをたしかめた[12]。最近ではコンピュータ実験も多く行われるようになったが，計算時間も増大して確実な結論を得るのはそう容易ではない。ソフト・コア・モデルについてはまだ統計幾何学的にきちんとした取扱いを知らない。

ランダム・パッキングの今後の研究は，数学的困難の解決をはかるよりは，幾何学的ランダムネスの諸性質を測定する尺度をこしらえ，それによっていろいろのパッキングの相互関係をしらべることが，統計学として本筋であろう。

参　考　文　献

1） J. D. Bernal ：Nature 183（1959） 141
2） P. A. P. Moran ： J. Appl. Prob. 3（1966） 453
3） P. Erdos & A. Renyi ： Publicationes Mathematicae 6（1959） 290
4） R. v. Mises ：Wahrscheinlichkeitsrechnung und ihre Anwendungen in der Statistik und theor. Physik（Deuticke, Leiprig Wien 1931）
5） A. Renyi ： Pub. Math. Inst. Hungar. Acad. Sci. 3（1958） 109
6） G. Bankovi ： Pull Math. Inst. Hungar. Acad. Sci. 7（1962） 395

7) A. Dvoretzky and H. Robbins : Publ. Math. Inst. Hungar. Acad. Sci 9 (1964) 209

8) M. E. Weise : Philips Res. Rep. 7 (1952) 321

9) M. J. Hogendijk : Philips Res. Rep. 18 (1963) 109

10) J. D. Kirkwood and E. M. Boggs : J. Chem. Phy. 10 (1942) 394

11) T. Ogawa and M. Tanemura : Prog. Theor. Phys. 49 (1973), No. 3

12) I. Higuti : Ann. Inst. Stat. Math. 12 (1961) 257