

二種の細胞によるランダム充填

種村 正美 (統計数理研究所)

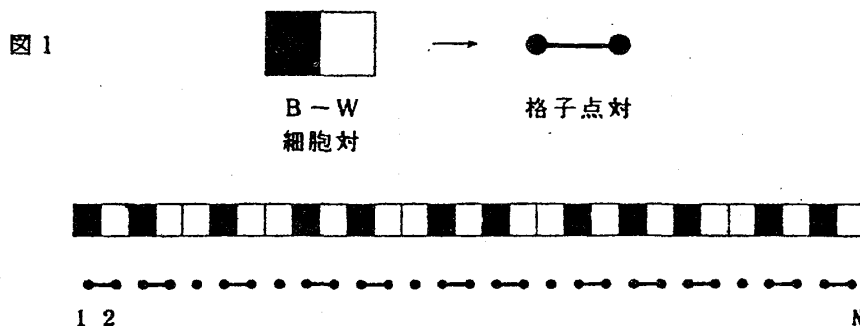
1. はじめに

ある制約条件の下で二種の細胞が敷き詰められて出来るパターンと細胞数比には、本研究会の主題である「形と空間」の幾何学的確率の観点からも興味がある。本多氏の講演要旨で問題の由来とそれに対する考察の大部分が述べられるが、ここではモデルの数学的側面に焦点を当てて、一次元と二次元のモデルと理論的および実験的結果について議論する。

われわれが興味を持っている現象の生物学的プロセスの機構の詳細は本多氏の講演要旨に委ねて、あとの定式化のためにわれわれの問題の要点だけを述べると

「B, Wの二種の細胞が存在して、W細胞群の中にB細胞がランダムに発生して、B細胞同士はお互いに接することがないものとする。B細胞の個数が出来るだけ多くなるように細胞を配置するとき、B細胞W細胞の個数比はどれぐらいか？」 (*)

となる。



2. 一次元格子上のランダム充填モデル

問題(*)を一次元線上で考えると、一次元のランダム充填問題と密接な関連がある。最初、この問題が本多氏から提示されたとき、筆者は解析的に解けるものと予想したが、

結局、30年程前に提出されている一次元格子上的ランダム逐次充填の厳密解を援用すれば良いことが分かった。この節では、それについて解説する。

2.1 ランダム完全充填

一次元格子上的ランダム逐次充填の問題とは次のような問題である。いま、格子間隔が a で、格子点数が N の一次元格子を考える。この格子空間上に、隣接する格子点二個を占有する分子が以下のプロセスによって逐次配置される。まず、分子1個が $N-1$ 個の隣接格子点对からランダムに選ばれた格子点对の上に配置される。次に第二の分子の位置が、残った格子点对からランダムに選ばれる。その個数は第一の分子の位置によって $N-3$ 個、または $N-4$ 個になる。続いて、第二の分子が収容された後に残った隣接格子点对の中からランダムに一对を選び、第三の分子を収容する。この過程を繰り返して行くと、最後にはこれ以上分子を収容できないという状態に達する。この状態を便宜的に「完全充填」と呼ぶことにする。完全充填においては隣接格子点对は残っていないことになる。しかし、孤立した格子点が所々に残っている。

一次元格子空間におけるランダム逐次充填問題は、上の完全充填において残された孤立格子点 (空孔 *vacancy*) の個数を議論することが元々の目的であった (たとえば Page [1959], Mackenzie [1962] 参照)。そして、この問題はある化学者によって提出された「表面への分子吸着の問題」に端を発している。この点は、Renyi (1958) が厳密解を与えた「一次元ランダム駐車問題」が、物理化学者 Bernal が提出した連続空間における円 (二次元) または球 (三次元) のランダム逐次充填問題に端を発しているという事情と似通っていて興味がある。

2.2 二種の細胞による一次元ランダム充填の厳密解

B, W二種の細胞による充填に関するわれわれの問題 (*) は、上記の一次元ランダム充填問題において、一つの分子 B-W細胞の一对と見立てて、BとWの細胞がそれぞれ隣接格子点を占有すると見なせば、厳密に対応関係が付く (図1参照)。そして、完全充填

において残された孤立格子点（空孔）はW細胞に対応すると考えればよい。

いま、完全充填における空孔の全個数を X_N とする。m番目およびm+1番目の格子点が分子によって占められているとき、この格子点对の右側と左側の事象が全く独立になるという点が一次元空間の特性として挙げられる。これが次元の多くの問題において理論的に取り扱いが容易であり、しばしば厳密解が得られる理由である。従って、最初に選ばれた分子は線分を二つの区間に分け、それぞれの区間における空孔の個数は互いに独立だから、

$$X_N = X_m + X_{N-m-2}$$

の積率母関数に対して、最初の分子がどの位置にも同等の確立 $1/(N-1)$ で場所を占めることを考慮すれば、

$$\begin{aligned} E[\exp(tX_N)] &= \sum_{m=0}^{N-2} E[\exp(tX_m + tX_{N-m-2})] \\ &\quad / (N-1) \\ &= \sum_{m=0}^{N-2} E[\exp(tX_m)] E[\exp(tX_{N-m-2})] / (N-1) \end{aligned}$$

が成立する。この式から X_N のモーメントに関する公式が得られ、たとえば

$$U_N = E(X_N), \quad S_N = E(X_N^2)$$

については

$$(N-1)U_N = 2 \sum_{i=0}^{N-2} U_i, \quad N \geq 2$$

$$(N-1)S_N = 2 \sum_{i=0}^{N-2} S_i + 2 \sum_{i=1}^{N-3} U_i U_{N-2-i}, \quad N \geq 3$$

が成り立つ。これらの漸化式に対する解は知られており、それぞれ次のようになる [Page, 1959] :

$$U_N = (N + 2) \left\{ \sum_{r=0}^{N+1} \frac{(-2)^r}{r!} + \frac{(-2)^{N+2}}{[2(N+2)!]} \right\}$$

$$S_N = \sum_{j=0}^{N-2} \left\{ \frac{N}{j!} - \frac{(2N-1)}{(j-1)!} + \frac{1}{(j-2)!} \right\} \cdot (-4)^j + \frac{(-4)^{N-1}}{(N-1)!}$$

これらの式から、 $N \rightarrow \infty$ のとき X_N の期待値と分散はそれぞれ

$$\begin{aligned} U_N &\sim (N+2) \exp(-2) \\ \sigma_N^2 &\sim 4(N+2) \exp(-4) \end{aligned} \quad (1)$$

となることが分かる。

さて、上の議論から空孔がW細胞に対応し、各格子点对がB-W細胞対に対応するから、結局、完全充填におけるW細胞とB細胞の個数の比は次のようにして求められる。(1)式より、 $N \rightarrow \infty$ のときB-W対の個数は $N - (N+2) \exp(-2)$ となるから、B細胞の個数は

$$(1/2) \{ N - (N+2) \exp(-2) \},$$

そしてW細胞の個数は

$$(N+2) \exp(-2) + (1/2) \{ N - (N+2) \exp(-2) \}$$

となる。従って、W細胞とB細胞の個数の比の期待値は

$$\{ N + (N+2) \exp(-2) \} / \{ N - (N+2) \exp(-2) \}$$

すなわち、 $N \rightarrow \infty$ に対して

$$\begin{aligned} &\text{W細胞の個数} / \text{B細胞の個数} \\ &= [1 + \exp(-2)] / [1 - \exp(-2)] \approx 1.3130 \end{aligned} \quad (2)$$

が得られる。

(2) の数値がチヨウ翅上皮細胞の実際のデータとよく一致することは本田氏の講演要旨に示されている通りである。

3. 二次元三角格子上のランダム充填

二次元空間においては、前節のような厳密な取り扱いが困難である。従って、計算機実験に頼らざるを得ない。

二次元空間の場合、格子空間としては種々のものが考えられるが、ここでは最密格子である三角形格子を考える。一次元の場合と同様に、問題はB種の細胞を三角形格子空間に出来るだけ多数、B細胞同士を隣接させないように詰めたとき、その相対密度を求めることである。但し、この場合は細胞Bの形は六角形である(図2参照)。

計算機実験を実行する際、有限の系の境界の影響をできるだけ避けるため、通常良く用いられている周期境界条件を付けた。そのため、実際に実験に用いる領域は図2に点線で示すような菱形である。

問題の条件(*)を二次元へ当てはめるには、一次元におけるB-W細胞対に対応して今度は、B細胞一個を中心にしてその周囲にW細胞の部分が6個付着した単位(図3参照)を分子と考えて逐次充填を行なえばよい。

このモデルに対する計算機実験の方法は以下の通りである。まず、図3の形の分子の中心位置となる格子点を図2に示す菱形領域内にランダムに選び、それを第一の分子とする。次に試験格子点を一様ランダムに選び、もしもその点が第一の分子が占める格子点でなければ、第二の分子の中心をそこに配置する。逆にその点が第一の分子に占められていれば、新しくランダムに試験格子点を選び、その点を調べ、第二の分子が配置できるまでこの過程を繰り返す。このようにして、もうこれ以上、分子が入らなくなるまで充填を続けていくのである。

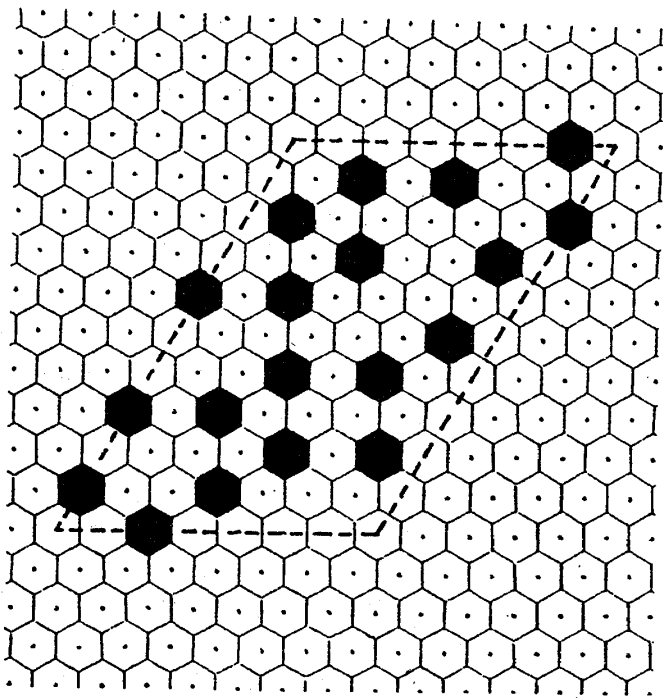


図2 三角格子上的ランダム充填:

黒い六角形はB細胞、白い六角形はW細胞に対応する。図では $NX=8$, $NY=11$ の領域 (点線で囲まれた部分; 点線上の六角形も含む) におけるランダム完全充填の一例が与えてある。平面の他の部分はこの領域の周期的繰り返しで覆われていると見なす。

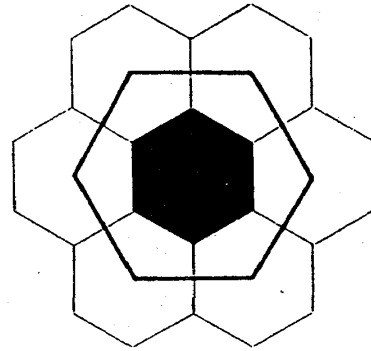


図3

三角格子上的充填単位。中央がB細胞を表し、周囲のW細胞の部分を含んだ大線で囲まれた領域が充填単位である。

実際上は、ある程度の個数の分子が入ると、一個の分子を充填するために発生する試験格子点の個数が急激に増加する (入りにくくなる)。それは分子の中心が占有可能な格子点の個数が少なくなっているのにも関わらず、全格子点から一様ランダムに試験格子点を選ぼうとするからである。充填の効率を上げるには、その段階で逆に、充填可能な格子点の方を捜し出して登録しておき、それらの候補の中からランダムに格子点を選択するという手続きを取る方がよい。このやり方を行なうと、一つのサンプルについて候補の格子点が無くなった時点で完全充填が達成される。この二段階の手続きを用いて行なった計算結果が表1にまとめてある。 NX , NY はそれぞれ x 方向および 30° 傾斜させた y 方向の領域のサイズを格子点数で表したものである。実験は各々のサイズの領域に関して k 回繰り返した。 W/B は完全充填における W 細胞および B 細胞の個数の比の平均値を表し、 s_b は k 回の試行に対する W/B の値の標本標準偏差を表す。

この表から、 B 細胞と W 細胞の個数の比は

$$B : W = 1 : 3.32 \quad (3)$$

となることが計算機シミュレーションの結果として与えられることが分かる。サイズの小さいシミュレーションの方が W/B の高い値を示すのは、小さい系ほど周期境界条件の影響が大きく、相対的に充填が規則的になるためであると考えられる。

表1 二次元三角格子上での二種の細胞によるランダム逐次充填の計算機実験の結果

格子空間：三角格子（六角形分割），境界条件：周期境界

NX	NY	k	W/B	s. b.
50	50	1000	3.3249	0.0497
100	100	500	3.3220	0.0265
150	150	200	3.3215	0.0164

4. おわりに

B, W二種の細胞のランダム充填に対する一次元の厳密解 $1 : 1.31 \dots$ は、細胞数比に対する値として観察結果とよく合う実際のデータが存在することが示されたが、二次元における $1 : 3.32$ という結果は、

実際の観察データに比べると、B細胞の個数比が高いようである。

その理由として、二次元の観察例では必ずしも、われわれのモデルのような三角格子で表現できず、隣接細胞数にバラツキがあること、細胞の大きさにもバラツキが存在することなどが考えられる。そこで、現実のデータに合う二次元モデルを考えるには、規則格子構造ではなく、乱れた構造を導入することが今後必要であろう。

参 考 文 献

- Mackenzie, I. K. (1962). *J. Chem. Phys.* 37, 723-728.
 Page, E. S. (1959). *J. Roy. Statist. Soc.* B21, 364-374.
 Renyi, A. (1958). *Publ. Math. Inst. Hung. Acad. Sci.* 3, 109-123.

討論 (DISCUSSION)

- Q (小川 泰・筑波大学物理工学系) : 基本図形をつないだ見方をするとき、自由度の数、変数の独立性に十分な配慮はなされていますか。
- A : 御質問は二次元の計算機実験に関するものと思いますが、本文に示したやり方で作った完全充填配置が基本図形を繋ぎ合わせることによって作られたと解釈した場合、問題が生じるかという点が御質問の趣旨だと思います。基本図形を繋ぎ合わせるプロセスを、個々の基本図形の出現確率が与えられていて、その確率に基づいて基本図形を、たとえばある一点を中心にして順々にその外側に組み立てながら空間を敷き詰めるというプロセスと考えるならば、それはランダム逐次充填とは違った配置を作ります。なぜならば、このプロセスを取れば、ある時点で最外殻に位置する図形は内側の図形の配置にのみ影響を受けるのに対し、逐次充填では、全ての方向から影響を受けるからです。したがって、この解釈をする場合、ランダム逐次充填を基本図形をつないだものという見方自体が出来なくなります。
- また、自由度の数、変数の独立性に対する配慮が、計算機実験においてなされているかの点についてですが、(それらの意味がまだ充分理解できていませんが) 実験における条件は本文に述べた通りで、実験の各試行において完全充填が確認できていることだけは言明できます。
- C (小川 泰) : 細矢先生は、先程帰られましたが、畳敷きの数え上げなど関連するお仕事をなさっておられます。