トロイダル調和関数解析に基づく三次元管状構造の定量評価法の開発

野　下　浩　司*

A Novel Phenotyping Method for Three-dimensional Tubular Structures Based on Toroidal Harmonic Analysis

Koji NOSHITA*

Quantitative evaluation of three-dimensional (3D) morphology is essential across various fields, yet its application to complex biological structures remains limited. While spherical harmonic analysis has been widely used for 3D shape quantification, it is restricted to structures topologically equivalent to a sphere (genus 0) and cannot be applied to tubular structures such as blood vessels (genus 1 or higher). In this study, we developed a phenotyping method for 3D tubular structures using toroidal harmonic analysis. The method represents the surface coordinates of a tubular structure as a two-dimensional Fourier series in a toroidal coordinate system, enabling quantitative shape description via the estimated coefficients. We validated the method by generating and reconstructing virtual morphologies with varying aspect ratios and confirmed that shapes can be accurately reconstructed from the coefficients. Furthermore, we constructed a quantification pipeline and performed principal component analysis on the estimated coefficients to construct a morphospace, demonstrating that the principal components capture the major morphological variation among tubular structures. We are currently extending this framework to other structures with different topological characteristics using eigenfunction expansion based on harmonic functions defined on the surfaces.

１．研究の背景と目的

生物の「かたち」は機能や適応度に関わる重要な表現型であるが，三次元的に多様で複雑な形態の定量的な記述と解析は限定的である．形態は平行移動と回転に対する幾何学的不変量であり，球面調和関数解析に基づく三次元形態の定量評価が進んでいる（材料科学[1]，生命科学[2]）．

しかし，球面座標系へのマッピングが可能（種数0）である必要があるため，血管や管腔などの管状構造（種数1以上）には適用できない．

本研究では，トーラス上の調和関数解析に基づき，三次元管状構造の形態を幾何学的不変量として定量化し，逆解析可能な網羅的フェノタイピングを実現する解析パイプラインの構築を目的とする．

２．トーラス状構造の定量的表現

三次元管状形態を過不足なく定量的に記述するため，2次元フーリエ級数に基づく手法を開発した．本手法では，三次元表面がポリゴンメッシュにより表現されると仮定し，このメッシュをトーラス座標系にパラメタライズする．得られたパラメータメッシュに基づき，表面座標$\mathbf{x}(\theta,\phi)$を2次元フーリエ級数により展開する．この展開により，三次元管状構造はフーリエ係数 $\mathbf{c}_{m,n}$のセットとして定量化される．

手法の妥当性を検証するため，トーラスを基本形とした仮想形態生成を実施した．アスペクト比の変化（x-y方向，x-z方向）を含む多様な変形形態を生成し，それらが正確に再構築できることを確認した．これにより，推定された係数からの逆解析（三次元形態の再構築）が可能であり，特徴量としての可逆性が実証された．

2026年3月1日　受理
* 豊田理研スカラー
九州大学大学院理学研究院生物科学部門

３．定量化パイプラインの構築と形態空間解析

開発したトロイダル調和関数解析法を実装し，推定されたフーリエ係数を特徴量とした定量化パイプラインを構築した．このパイプラインを仮想形態データセットに適用し，推定された係数に対して主成分分析（PCA）を実施することで形態空間を構築した（図 1）．その結果，第 1 主成分（PC1）は全体的なアスペクト比（扁平なトーラスと縦長の管状構造の間の変動）を捉え，第 2 主成分（PC2）以降は x-y 方向や x-z 方向の非対称性，断面形状の変動を反映することが明らかになった．形態空間上での形態クラスターの可視化により，三次元管状形態の多様性と制約を定量的に評価できることが示された．

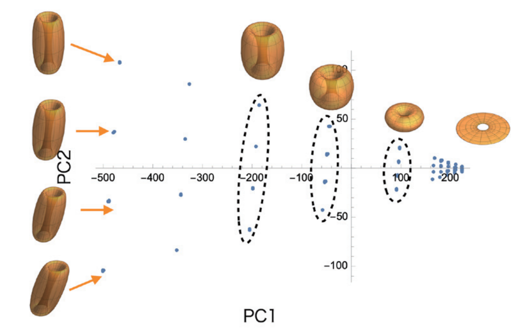

図１　管状構造の形態空間．

一方，パイプラインの課題として，パラメタライゼーション（対象表面のトーラス座標系へのマッピング）の計算コストが大きいことがわかった．メッシュの各辺の長さや角度，面の面積の歪みを最小化する最適化が必要であり，計算の効率化が今後の重要な課題である．

４．円板調和関数解析による曲面片の定量化

トロイダル調和関数解析の開発を進める中で，本研究の枠組みが管状構造にとどまらず，異なる位相的特徴をもつ三次元形態にも拡張可能であることが明らかになった．当初の計画では種数 1 の閉多様体を主な対象としていたが，発展的な成果として，葉や細胞表面の一部のような境界をもつ曲面片（境界付き多様体）に対する円板調和関数解析法を新たに開発した．本手法では，単位円板上のラプラス演算子の固有関数である円板調和関数 $D_{k,m}(r,\theta) = n_{k,m}J_m(l_{k,m}\, r)\exp\,(im\theta)$を基底とし，対象の三次元表面を円板座標系にパラメタライズした上で，表面座標を$\mathbf{x}(r,\theta) = \sum_{k,m}\mathbf{c}_{k,m}D_{k,m}(r,\theta)$と展開することで，曲面片の形態が円板調和係数 $\mathbf{c}_{k,m}$ により定量化される．

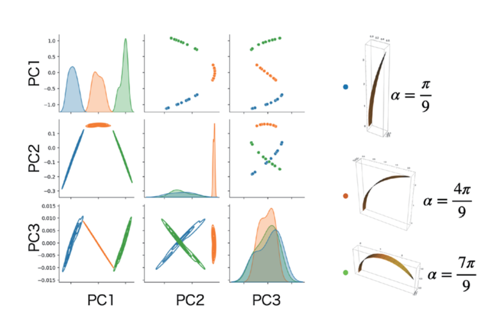

図２　葉様構造の形態空間．

本手法の検証として，葉様構造の三次元幾何モデルを用いた解析を実施した．エラスティカモデルに基づき，先端角度 α を変化させた 3 種類の曲げパターン（$\alpha=\pi/9, 4\pi/9, 7\pi/9$）をもつ仮想葉形態を生成し，円板調和係数を推定した．推定された係数に対して PCA を実施したところ，PC1 において 3 つの曲げタイプが明瞭に分離され，曲げの程度に応じた形態変動が主要な変動成分として捉えられることが確認された（図 2）．

５．今後の展望

本研究では，当初の計画であったトーラス状構造（種数 1 の閉多様体）に対するトロイダル調和関数解析に加え，境界をもつ曲面片に対する円板調和関数解析の開発にも至った．これらの成果により，球面調和関数解析（種数 0 の閉多様体）では扱えなかった，異なる位相的特徴をもつ三次元形態の定量化への道筋が拓かれた．現在，より一般的な種数 g の三次元閉曲面への拡張を進めており，対象表面上で定義される調和関数の固有関数を基底として形態を展開する枠組みを検討している．拡張に伴う主要な課題として，与えられた三次元境界に対する基底関数の計算，および複数標本間での相同性の確立が挙げられる．

今後は，血管などの実際の生体データへの適用を進め，形態的多様性と機能的要請・発生的制約の関係を解明する．また，推定された特徴量は逆解析が可能であるため，他のオミクスデータとの関連解析（GWAS，発現変動解析など）への展開も目指す．

REFERENCES

1) T. Ueda, *Powder Technol.*, **404** (2022) 117461.
2) A. Medyukhina, M. Blickensdorf, Z. Cseresnyés, N. Ruef, J. V. Stein and M. T. Figge, *Sci. Rep.*, **10** (2020) 6072.