

医学における数理科学的諸問題 4 電子顕微鏡写真による幾何確率を用いる 2 種類の球体半径の推定

川崎医科大学 情報科学教室*, 生化学教室**

近藤芳朗*・石川哲也**§・湊川洋介**

(平成13年12月11日受理)

Mathematical Problems in Medical Science 4

Estimate of sphere radii of two kinds of spherical bodies
by the theory of geometrical probability

Yoshiro KONDO*, Tetsuya ISHIKAWA** and Yosuke MINATOGAWA**

*Department of Information Sciences,

**Department of Biochemistry,

Kawasaki Medical School,

577 Matsushima, Kurashiki, Okayama, 701-0192 Japan

(Received on December 11, 2001)

概 要

2種類の球体が一定の比率でランダムに分布している場合、ランダムな平面で切り取られる球体の切口の大きさの分布から幾何確率と最小2乗法を用いて球体半径とその比率を推定できることを示した。1種類の球体しか分布していない場合には、球体半径は解析的に推定できることも示した。キーワード: ペルオキシソーム, 幾何確率, 最小2乗法

Abstract

It is found that the sphere radii of two kinds of spherical bodies which are placed at random in a space and its concentration ratio, are both estimated by the least squares method with the theory of geometrical probability. It is also found that in the case of one kind of spherical body, the sphere radius of the body is estimated analytically. Key words: peroxisome, geometrical probability, the least squares method

1. はじめに

神経細胞内には大小2種類の球体をしたペルオキシソームがある。小さいのはマイクロ・ペルオキシソームといい神経突起中を動いている。この神経細胞の切片を電子顕微鏡写真に撮れば大小2種類のペルオキシソームの任意の切口がランダムに撮れることになる。神経細胞内にこの大小2種類のペルオキシソームが一定の比率でしかもランダムに存在し、これをランダム

な平面で切るとき、切口の大きさの分布は幾何確率¹⁻⁴⁾を用いて理論的に計算できる。したがって、電子顕微鏡写真による球体切口の実データから、理論的計算結果と合わせることにより2種類の球体半径が推定できるのではないかと予想される。

この研究では、2種類の球体が一定の割合で空間内にランダムに分布しているとき、ランダムな平面で切り取られる球体の切口の大きさの分布から2種類の球体半径の推定が実際に可能であることを示す。

2. 幾何確率

この論文では球をランダムな平面で切ったときの切口の半径の分布を問題にする。ランダムな平面とは何か。ランダムな点についてはともかく、歴史上ランダムな直線については混乱があった。ベルトランのパラドックスというのがそれである。

—— ベルトランのパラドックス ——

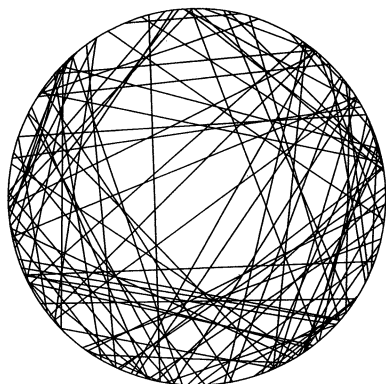
円内で任意の弦を引いたとき、この弦の長さが円に内接する正三角形の一辺より大きくなる確率はいくらか。

任意の弦を引くということは、弦をランダムに引くということであるが、この弦をランダムに引く引き方によって問題の確率 P は異なるというのがパラドックスなる所以である。ランダムな弦の引き方として

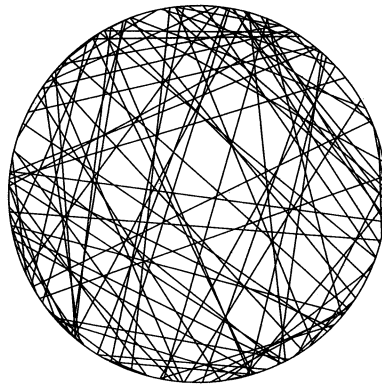
- | | |
|-------------------------------|---|
| (a) 弦の midpoint が円内で一様に分布する。 | $P = \frac{1}{4} = 0.250$ |
| (b) 弦の端点 が円周上で一様に分布する。 | $P = \frac{1}{3} = 0.333$ |
| (c) 弦の midpoint が半径上で一様に分布する。 | $P = \frac{1}{2} = 0.500$ |
| (d) 円内の任意の点を任意の角度で弦が通過する。 | $P = \frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2\pi} = 0.609$ |

などが考えられ、確率 P はそれぞれの場合によって異なる。このパラドックスはランダムさにもいろいろな種類があるということを理解せぬために起きたものである。典型的なランダムさとは、乱数における一様乱数に相当するもので一様なランダムさである。点・直線・平面がランダムに一様に分布するとはどのような状態をさすのか。それは点・直線・平面が分布しているとき、これらを平行移動しても回転移動してもその分布が変わらないことをいい、そのとき、これらは一様に分布しているという。上記の例では(c)の場合がそうである。以後、「ランダム」という用語はこの一様ランダムの意味に用いる。要するに、点・直線・平面に限らず物体などのランダムな分布とは平行移動と回転移動に対して不変である分布のことである。図1(a)~(d)は上記ベルトランのパラドックスの(a)~(d)の場合を乱数を用いるシミュレーションによって描

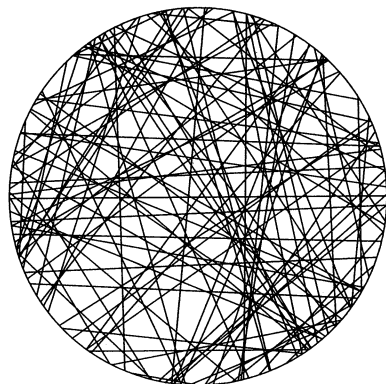
いたものである。この図をひと目見ても(c)の場合が一様であることがわかる。このように確率を幾何学的に求める学問は幾何確率の理論あるいは積分幾何学と呼ばれ1777年のビュッフォンの論文⁵⁾に端を発する。この論文でビュッフォンは後に「ビュッフォンの針の問題」と呼ばれる問題を論じ積分幾何学とモンテカルロ法の創始者とみなされるようになった。



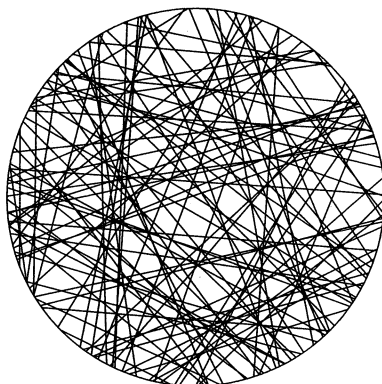
(a) 弦の中点が円内で一様に分布する。 $P=0.250$



(b) 弦の端点が円周上で一様に分布する。 $P=0.333$



(c) 弦の中点が半径上で一様に分布する。 $P=0.500$



(d) 円内の任意の点を任意の角度で弦が通過する。
 $P=0.609$

図1 ベルトランのパラドックス

3. 1つの球をランダムな平面で切ったときの切口の半径の分布

球体がランダムに分布する場合、ランダムな平面によって切り取られる切口は円であって、この円の半径の分布は球体が中心対称なので x 軸に垂直に一様分布する平面だけによって切り取られる場合の分布に等しい。以下では切口の半径の分布を求める場合、 x 軸に垂直な平面によって切り取られるものとして考察を進める。

原点を中心とする半径 a の球を x 軸に垂直な平面で一様に切る。座標 x で切ったときの切口の半径 r は

$$r = \sqrt{a^2 - x^2} \tag{1}$$

であり, 対称性から $0 \leq x \leq a$ としてよい。切口の半径が r のときの確率密度関数を $f(r, a)$ とすると

$$\frac{1}{a} dx = |f(r, a) dr| \quad (2)$$

が成り立つ。したがって,

$$f(r, a) = \frac{r}{a\sqrt{a^2 - r^2}} \quad (3)$$

となり, 分布関数 $F(r)$ は

$$F(r) = 1 - \sqrt{1 - (r/a)^2} \quad (4)$$

となる。

4. 最小2乗法による球体半径の推定

任意の切片による電子顕微鏡写真から n 個の球体の切口が得られ, これらの切口の半径を $r_i (i=1, 2, \dots, n)$ とし

$$r_1 \leq r_2 \leq \dots \leq r_i \leq \dots \leq r_n \quad (5)$$

とする。また, 切口の半径が r までの累積相対度数を F とすると, (4)式から

$$r = a\sqrt{2F - F^2} \quad (6)$$

が成り立つ。 i 番目の半径 r_i までの累積相対度数を F_i とすると(6)式から得られる半径 $a\sqrt{2F_i - F_i^2}$ は累積相対度数が F_i のときの理論的な切口の半径となる。これと実測値 r_i との差, つまり残差 δ_i は

$$\delta_i = r_i - a\sqrt{2F_i - F_i^2} \quad (7)$$

となる。ここで, 球体の半径 a を次式で与えられる残差平方和 S が最小となるように定める。

$$S = \sum_{i=1}^n \{r_i - a\sqrt{2F_i - F_i^2}\}^2 \quad (8)$$

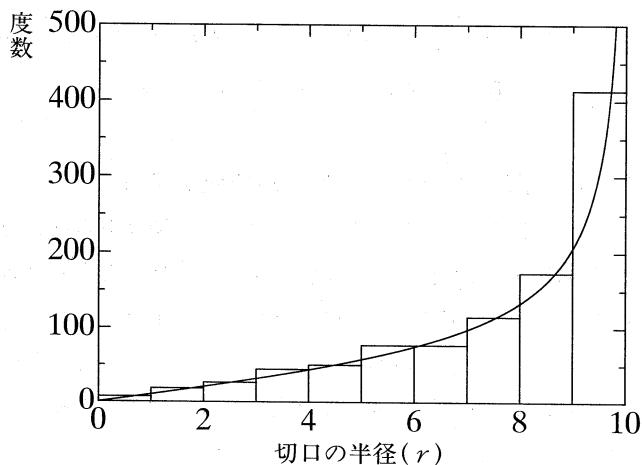


図2 1種類の球体の場合の度数と切口の半径の関係 $a=10$

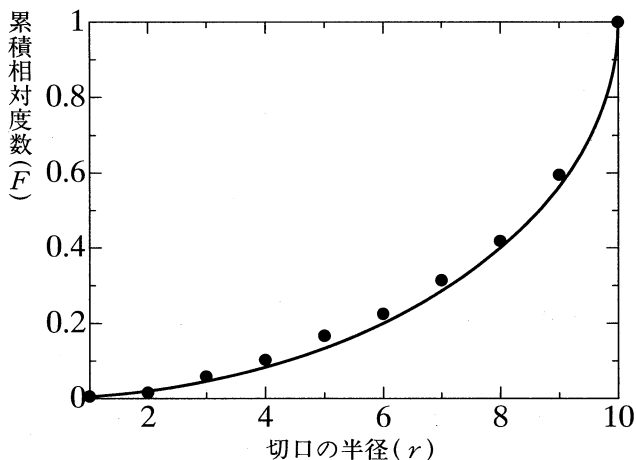


図3 1種類の球体の場合の累積相対度数と切口の半径の関係
●印はシミュレーションによる値 $a=10$

その結果、球体半径の推定値 \hat{a} は

$$\hat{a} = \frac{\sum_{i=1}^n r_i \sqrt{2F_i - F_i^2}}{\sum_{i=1}^n (2F_i - F_i^2)} \tag{9}$$

として与えられる。図2, 3は半径10の球体についての1000回のシミュレーションによる結果である。図2は、横軸が切口の半径 r 、縦軸が度数を表すヒストグラムである。実線は密度関数 $f(r, a)$ を表す。図3は累積相対度数と切口の半径の関係を表すもので●印はシミュレーションで得た値である。またこの図で実線は理論的な分布関数 $F(r)$ を描いたものである。

5. 2種類の球がランダムに分布している場合

半径 a と b の2種類の球がランダムに分布しているとき、ランダムな平面で切ったときの切

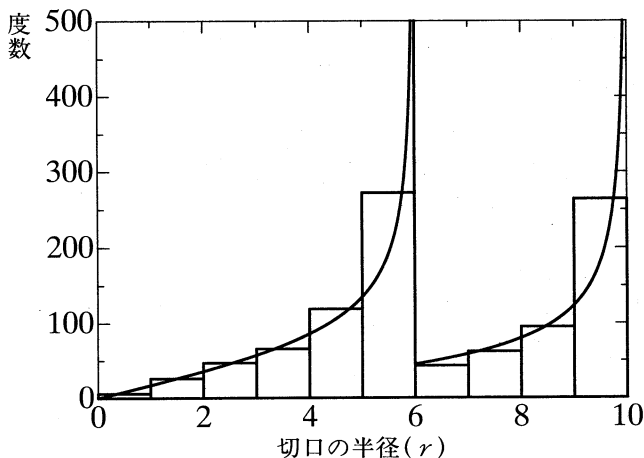


図4 2種類の球体の場合の度数と切口の半径の関係
 $a=10, b=6, p=0.5$

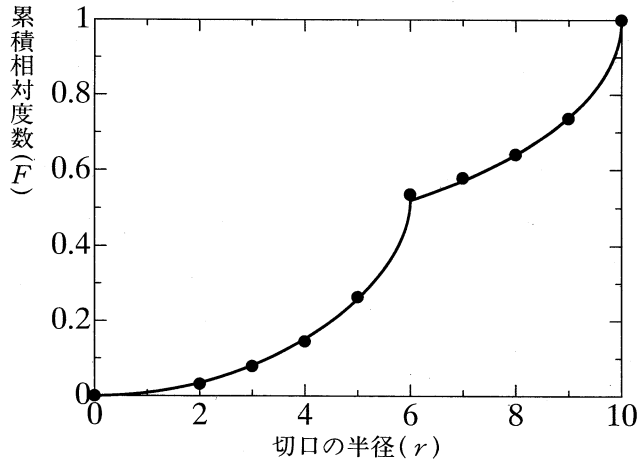


図5 2種類の球体の場合の累積相対度数と切口の半径の関係
 $a=10, b=6, p=0.5$

口の半径 r の確率密度関数を $f(r)$ とし, また, 半径 a と b の球体が $p:q$ ($p+q=1$) の比で混ざっているとする。したがって確率密度関数 $f(r)$ は

$$f(r) = pf(r, a) + qf(r, b) \quad (10)$$

で与えられる。図4, 5は前節の図3, 4に対応するもので $a=10, b=6, p=1/2$ の場合のシミュレーションの結果である。

図4では横軸は球体の半径 r を表し, 縦軸は度数を表し, シミュレーションで得たヒストグラムと理論的な密度関数を表している。図5では累積相対度数と切口の半径の関係を表し, ●印はシミュレーションで得た値を表し, 実線は理論的な分布関数を表している。

6. 最小2乗法による2種類の球体半径の推定

第4節と同様に, 切口の小さい順に i 番目の切口の半径を r_i ($i=1, 2, \dots, n$) とし, 半径 r_i までの累積相対度数を F_i とする。この場合の残差 δ_i は

$$\delta_i = r_i - F^{-1}(r_i) \quad (12)$$

で与えられる。ここに, $F^{-1}(r)$ は分布関数 $F(r)$ の逆関数を表す。したがって, 残差平方和 S は

$$S = \sum_{i=1}^n \{r_i - F^{-1}(r_i)\}^2 \quad (13)$$

となる。2種類の球体半径 a と b および混合比 p は第4節と同様 S を最小にするように決定する。そのためには, 連立方程式

$$\frac{\partial S}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial S}{\partial b} = 0, \quad \frac{\partial S}{\partial p} = 0 \quad (14)$$

を解かなければならない。この解が a, b, p の最小2乗法による推定値 $\hat{a}, \hat{b}, \hat{p}$ を与える。式(14)に対応する基礎方程式は次のようになる。

$$\alpha = \frac{1}{a}, \quad \beta = \frac{1}{b} \tag{15}$$

$$F_i = 1 - p\sqrt{1 - (ar_i^*)^2} - q\sqrt{1 - (\beta r_i^*)^2} \tag{16}$$

$$f(r_i^*) = p \frac{\alpha^2 r_i^*}{\sqrt{1 - (ar_i^*)^2}} + q \frac{\beta^2 r_i^*}{\sqrt{1 - (\beta r_i^*)^2}} \tag{17}$$

とおくと、基礎方程式は

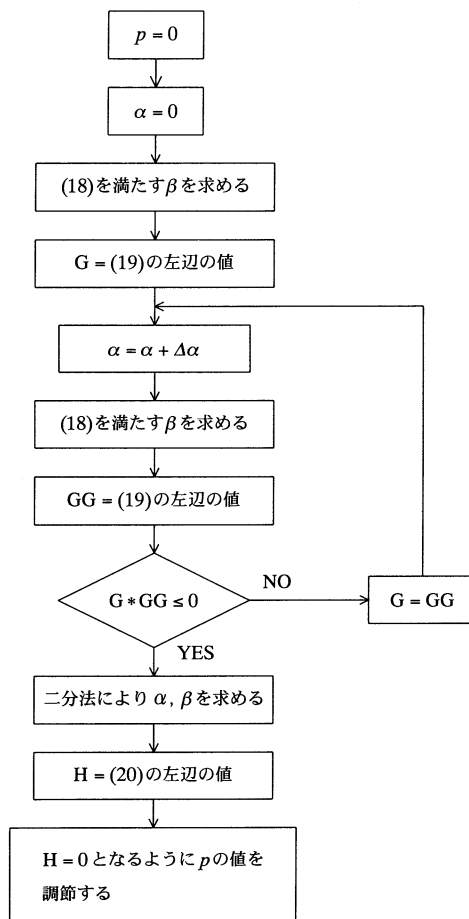
$$\sum_i \frac{(r_i^*)^2}{\sqrt{1 - (ar_i^*)^2}} \times \frac{r_i - r_i^*}{f(r_i^*)} = 0 \tag{18}$$

$$\sum_i \frac{(r_i^*)^2}{\sqrt{1 - (\beta r_i^*)^2}} \times \frac{r_i - r_i^*}{f(r_i^*)} = 0 \tag{19}$$

$$\sum_i \{\sqrt{1 - (ar_i^*)^2} - \sqrt{1 - (\beta r_i^*)^2}\} \times \frac{r_i - r_i^*}{f(r_i^*)} = 0 \tag{20}$$

となる。この連立方程式の数値解を求めるためのアルゴリズムのフローチャートを末尾に表す。

フローチャート



7. おわりに

この論文では, 2種類の球体が存在する場合ランダムな平面で切り取ることにより, 切口の大きさの分布から2種類の球体の半径 a , b とその混合比 p が少なくとも原理的に推定できることを示した。1種類の球体しか存在しない場合は球体の半径 a は解析的に推定できることも示した。今回は推定のための基礎的検討にとどめた。今後, 実データを用いての推定値を得ることと, 推定された値の信頼性を求めるためにシミュレーションによる検討が必要となる。

参 考 文 献

- 1) Luis A. Santaló: Integral Geometry and Geometric Probability, Addison-Wesley, London, 1976
- 2) E. F. Harding and D. G. Kendall (eds.): Stochastic Geometry, John Wiley & Sons, London, 1974
- 3) R. E. Miles and J. Serra (eds.): Geometrical Probability and Biological Structures: Buffon's 200th Anniversary, Springer-Verlag, Berlin, 1978
- 4) 腰塚武志: 積分幾何について(1)~(5), オペレーションリサーチ, 1976年9月号~1977年1月号
- 5) G. L. C. Buffon: Essai d'Arithmétique morale, in vol.4 of the Supplément à l'Histoire Naturelle, 1777