数理生物学演習

第7回　理論形態モデル

第7回：理論形態モデル

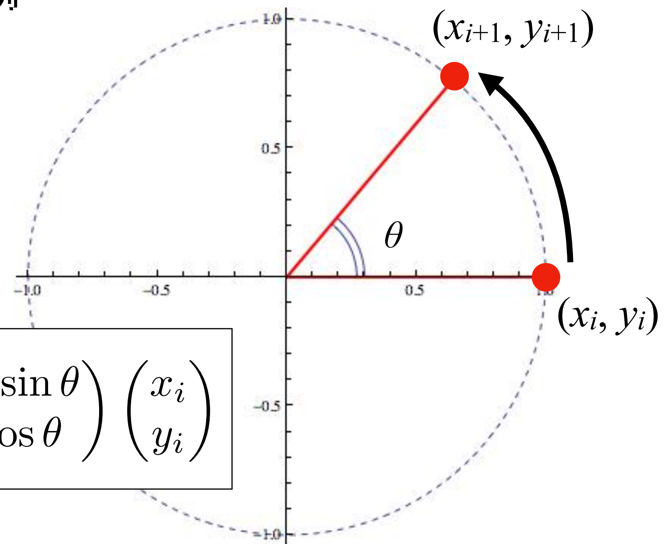
本日の目標

- Raupのモデル
- 回転行列
- 3Dプロット

回転行列 2次元

原点周りにθだけ回転させる回転行列

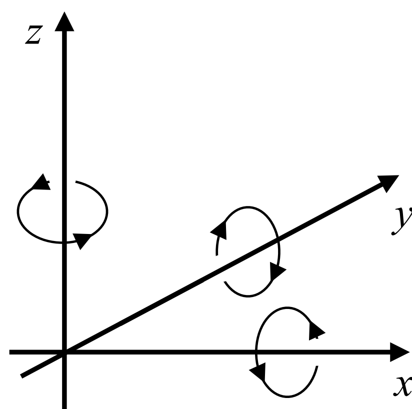
$$\mathbf{R}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$



$$\begin{pmatrix} x_{i+1} \\ y_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix}$$

θだけ逆回転させる場合や
2θ回転だけ回転させる場合を考えてみよう

回転行列 3次元



右ねじ

x軸周り

$$\mathbf{R}_x(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta \\ 0 & \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

y軸周り

$$\mathbf{R}_y(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix}$$

z軸周り

$$\mathbf{R}_z(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

指数増殖モデルのおさらい

$$\frac{dx}{dt} = ax$$

初期条件

$$x(0) = x_0$$

$$x(t) = x_0 e^{at}$$

解いてみよう

対数らせん

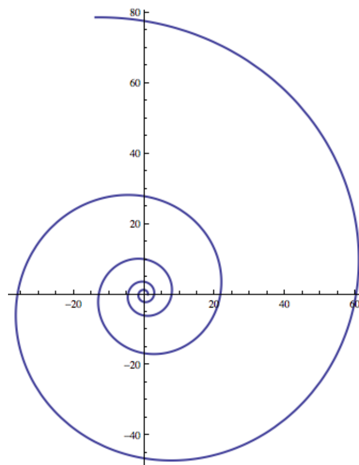
対数らせんで近似できる“巻き”パタン

オウムガイ

唐沢 與希 氏（三笠市立博物館）提供

$$\frac{dr}{d\theta} = a\theta$$ (aは定数)

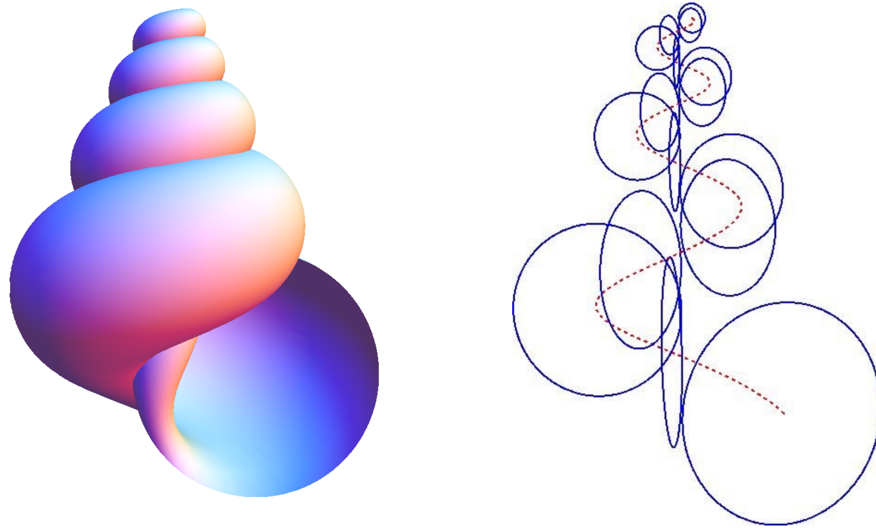
初期条件



$$r(\theta) = r_0 e^{a\theta}$$

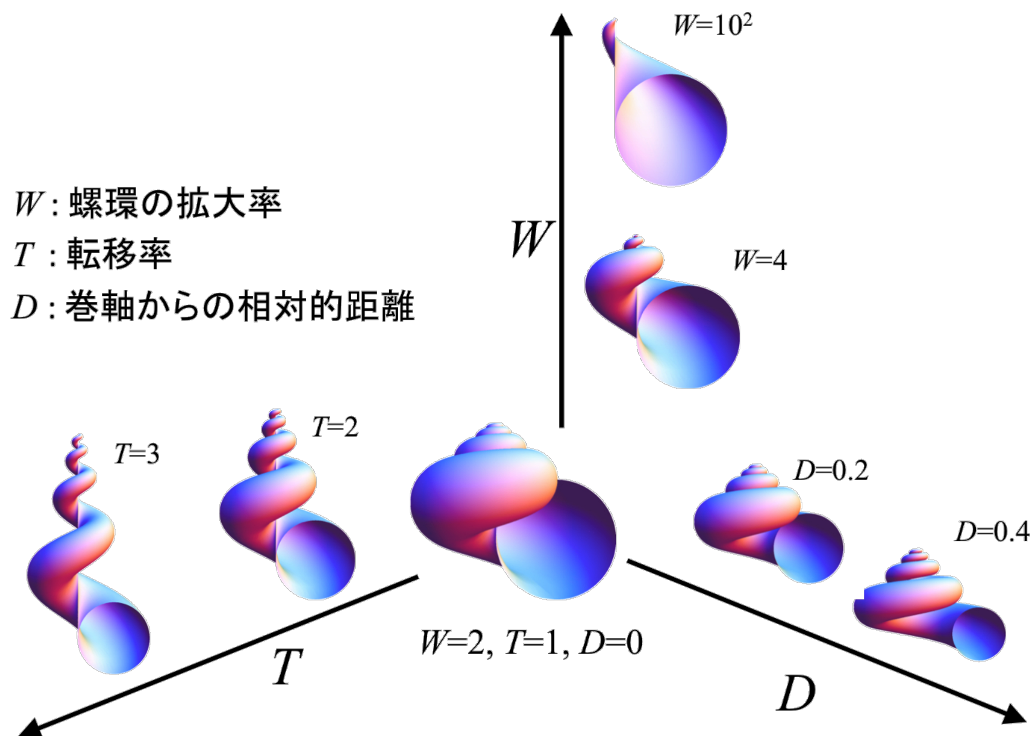
Raupのモデル

Raup (1962, 1966), Raup & Michelson (1965)



母曲線を巻軸周りに回転させながら成長させることで
“巻き”のパタンを記述

パラメータを変えることで様々な巻きパタンを表現できる



実際にプログラムを組んでみよう！

NumPy：数値計算・行列計算ライブラリ

- **多次元配列を効率よく計算するためのパッケージ**
- **様々な数値計算用の便利な関数も実装されている**

多次元配列 ndarray

固定長の配列．要素は同じ型でなければならない．

Pythonのリストは可変長
要素の型も別々で良かった

NumPyのimportを忘れずに．
慣例でnpという別名をつけることが多い．

```
# 7-1. ndarray

import numpy as np

# 7.1 ndarray
a = np.array([1,2,3])
b = np.array([6, 3.3, 1])
C = np.array([[1, 5, 6],
              [7, 8, 9],
              [4, 2, 3]])
D = np.array([[2.3, 4, 7.2],
              [7, 9, 1],
              [11, 2, 9]])
```

```
# 7-2. ndarrayの属性

# 配列の形状
print(a.shape)
print(C.shape)

# 次元
print(b.ndim)
print(D.ndim)

# （要素の）型
print(a.dtype)
print(D.dtype)

# 配列のキャスト
e = a.astype(float)
F = D.astype(int)
print(e)
print(F)
```

```
#出力
(3,)
(3, 3)
1
2
int64
float64
[1. 2. 3.]
[[ 2  4  7]
 [ 7  9  1]
 [11  2  9]]
```

- array(リスト)：リストに基づき多次元配列を作成する関数．要素は同じ型でなければならない（型が異なる場合はより基本的な型へ変換（アップキャスト）される）．

NumPy：数値計算・行列計算ライブラリ

基本的な演算（1）

```
# 7-3-1. 基本的な演算

import numpy as np

# 同次元の加算・減算
print("a+b: ", a + b)
print("b-c: ",b - c)
print("C+D: \n", C + D)
print("C-F: \n",C - F)

# 異なる次元の加算・減算
print("a+C: \n", a + C)
print("D-b: \n", D - b)

# 乗算・除算
print("a*b: ", a * b)
print("C/a: \n", C / a)
```

要素ごとの演算

注意：ベクトルや行列の演算とは別物．これらは後ほど．

次元が異なる場合は一番大きな次元に合わせ，同一要素が繰り返される．

```
a+Cは
の出力結果は
array([a+C[0],
       a+C[1],
       a+C[2]])
となるイメージ
```

```
#出力
a+b:  [7.  5.3 4. ]
b-c:  [ 5.   1.3 -2. ]
C+D:
 [[ 3.3  9.  13.2]
 [14.  17.  10. ]
 [15.   4.  12. ]]
C-F:
 [[-1  1 -1]
 [ 0 -1  8]
 [-7  0 -6]]
a+C:
 [[ 2  7  9]
 [ 8 10 12]
 [ 5  4  6]]
D-b:
 [[-3.7  0.7  6.2]
 [ 1.   5.7  0. ]
 [ 5.  -1.3  8. ]]
a*b:  [6.  6.6 3. ]
C/a:
 [[1.  2.5 2. ]
 [7.  4.  3. ]
 [4.  1.  1. ]]
```

このあたりの細かいルールを知りたい場合は公式ドキュメントを参照．
https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/ufuncs.html#broadcasting

NumPy：数値計算・行列計算ライブラリ

基本的な演算（2）

NumPyの関数は基本的に配列の要素ごとに適用される．

同じ関数で処理したいときに便利な機能．こうした処理をベクトル化した（vectrized）計算と呼ぶことがある．

```
# 7-3-2. 基本的な関数による演算

import numpy as np

# 指数
print("a**2: ", a**2)
print("np.exp(2): ", np.exp(2))
print("np.exp(a): ", np.exp(a))

# 対数
print("np.log(2): ", np.log(2))
print("np.log(C): \n", np.log(C))

# 平方根
print("np.sqrt(2): ", np.sqrt(2))
print("np.sqrt(b): ", np.sqrt(b))

# 三角関数
print("np.sin(np.pi/2): ", np.sin(np.pi/2))
print("np.sin(D): \n", np.sin(D))
print("np.cos(e): ", np.cos(e))
```

```
#出力
a**2:  [1 4 9]
np.exp(2):  7.38905609893065
np.exp(a):  [ 2.71828183  7.3890561
20.08553692]
np.log(2):  0.6931471805599453
np.log(C):
 [[0.         1.60943791 1.79175947]
 [1.94591015 2.07944154 2.19722458]
 [1.38629436 0.69314718 1.09861229]]
np.sqrt(2):  1.4142135623730951
np.sqrt(b):  [2.44948974 1.81659021 1.
]
np.sin(np.pi/2):  1.0
np.sin(D):
 [[ 0.74570521 -0.7568025   0.79366786]
 [ 0.6569866   0.41211849  0.84147098]
 [-0.99999021  0.90929743  0.41211849]]
np.cos(e):  [ 0.54030231 -0.41614684
-0.9899925 ]
```

NumPy：数値計算・行列計算ライブラリ

ベクトル・行列計算（1）

配列をベクトルや行列あるいはテンソルとみなして計算をおこなうこともできる

```
# 7-4-1. ベクトル・行列計算
# ベクトル・行列計算

# ベクトルの基本演算
print("a+b: ", a + b)
print("a-b: ", a - b)
print("3*a: ",3 * a)

# ベクトルの内積・外積
print("a.b, np.dot(a,b): ", np.dot(a,b))
print("axb, np.cross(a,b): ", np.cross(a,b))

# 行列の基本演算
print("C+D: \n", C + D)
print("C-D: \n", C - D)
print("2*C: \n", 2 * C)

# 行列の乗算
print("C.a, np.dot(C,a): ", np.dot(C,a))
print("C.D, np.dot(C,D): \n", np.dot(C,D))
print("D.C, np.dot(D,C): \n", np.dot(D,C))
```

```
#出力
a+b:  [7.  5.3 4. ]
a-b:  [-5.  -1.3  2. ]
3*a:  [3 6 9]
a.b, np.dot(a,b):  15.6
axb, np.cross(a,b):  [-7.9 17.  -8.7]
C+D:
 [[ 3.3  9.  13.2]
 [14.  17.  10. ]
 [15.   4.  12. ]]
C-D:
 [[-1.3  1.  -1.2]
 [ 0.  -1.   8. ]
 [-7.   0.  -6. ]]
2*C:
 [[ 2 10 12]
 [14 16 18]
 [ 8  4  6]]
C.a, np.dot(C,a):  [29 50 17]
C.D, np.dot(C,D):
 [[103.3  61.   66.2]
 [171.1 118.  139.4]
 [ 56.2  40.   57.8]]
D.C, np.dot(D,C):
 [[ 59.1  57.9  71.4]
 [ 74.  109.  126. ]
 [ 61.   89.  111. ]]
```

NumPy：数値計算・行列計算ライブラリ

ベクトル・行列計算（2）

線形代数向けの便利な関数も用意されている

```
# 7-4-2. 線形代数向け関数

# 転置行列
print("C^T, C.transpose(): ", C.transpose())
print("C^T, np.transpose(C): ", np.transpose(C))

# 行列式
print("|D|, np.linalg.det(D): ", np.linalg.det(D))

# 逆行列
print("F^-1, np.linalg.inv(F)", np.linalg.inv(F))

# 固有値・固有ベクトル
print("np.linalg.eig(F)", np.linalg.eig(C))
print("固有値のみ, np.linalg.eigvals(F)",
np.linalg.eigvals(C))
```

```
#出力
C^T, C.transpose():  [[1 7 4]
 [5 8 2]
 [6 9 3]]
C^T, np.transpose(C):  [[1 7 4]
 [5 8 2]
 [6 9 3]]
|D|, np.linalg.det(D):
-638.3000000000005
F^-1, np.linalg.inv(F) [[-0.12248062
0.03410853  0.09147287]
 [ 0.08062016  0.09147287
-0.07286822]
 [ 0.13178295 -0.0620155
0.01550388]]
np.linalg.eig(F) (array([14.72735221,
-3.28537742,  0.55802521]),
array([[ 0.43801562,  0.85468529,
-0.00703173],
       [ 0.84944136, -0.12913467,
-0.76794748],
       [ 0.29426465, -0.50282928,
0.64047421]]))
固有値のみ, np.linalg.eigvals(F)
[14.72735221 -3.28537742  0.55802521]
```

NumPy：数値計算・行列計算ライブラリ

その他の関数

その他にも配列関係の計算を便利におこなうための関数が多数用意されている.

- zeros(shape)：形状がshapeのすべての要素がゼロの配列を生成する
- identity(n)：n x nの単位行列を生成する
- linspace(start, stop, num)：startからstopまでの間にnum個の値をもつ配列を生成する（stopを含む）.

```
# 7-5. その他の便利な関数

# 配列の生成
Z = np.zeros([3,4])
I = np.identity(3)
r = np.linspace(1, 2, 10)
print("Z: \n", Z)
print("I: \n", I)
print("r: ", r)

# 集約・統計
print("np.max(a)", np.max(a), a)
print("a.max()", a.max(), a)
print("np.min(C)", np.min(C), C)
print("C.min()", C.min(), C)
print("np.sum(b): ", np.sum(b), b)
print("b.sum(): ", b.sum(), b)
print("np.mean(b): ", np.mean(b))
print("b.mean(): ", b.mean(), b)
print("np.median(b): ", np.median(b))
print("np.std(D): ", np.std(D))
```

```
#出力
Z:
 [[0. 0. 0. 0.]
 [0. 0. 0. 0.]
 [0. 0. 0. 0.]]
I:
 [[1. 0. 0.]
 [0. 1. 0.]
 [0. 0. 1.]]
r:  [1.         1.11111111 1.22222222 1.33333333 1.44444444 1.55555556
 1.66666667 1.77777778 1.88888889 2.        ]
np.max(a) 3 [1 2 3]
a.max() 3 [1 2 3]
np.min(C) 1 [[1 5 6]
 [7 8 9]
 [4 2 3]]
C.min() 1 [[1 5 6]
 [7 8 9]
 [4 2 3]]
np.sum(b):  10.3 [6.  3.3 1. ]
b.sum():  10.3 [6.  3.3 1. ]
np.mean(b):  3.4333333333333336
b.mean():  3.4333333333333336 [6.  3.3 1. ]
np.median(b):  3.3
np.std(D):  3.3973846149975753
```

関数を鍛える：ローカル変数

関数の内部で作成された変数は内部でのみ利用される

- グローバル変数（関数などの外側で定義された変数）に対して特定の範囲内でのみ利用できる変数のことをローカル変数という.
- 利用できる範囲を絞ることで，意図しない動作を防ぐことができる.
- より詳しく知りたい人は「変数 スコープ」などのキーワードで調べてみよう.

```
# 7-6. ローカル変数

def add(a, b):
    local_c = a + b
    return local_c

def mean_01(input_list):
    s = 0
    for elem in input_list:
        s = s + elem
    m = sum(input_list)/len(input_list)
    return m

def mean_02(input_list):
    m = sum(input_list)/len(input_list)
    return m
```

local_cには関数の外側からはアクセスできない.

- len(リスト)：リストの長さ（要素数）を返す
- sum(リスト)：リストの要素の総和を返す

関数を鍛える：docstring

関数定義へのdocstringの追加

```
def 関数名(パラメータ):
    """
    文章（docstring）
    """
    処理1
    処理2
    …
    処理n
    return 戻り値
```

Jupyter Notebook上でもdocstringを呼び出すことができる.

- Shift+Tab

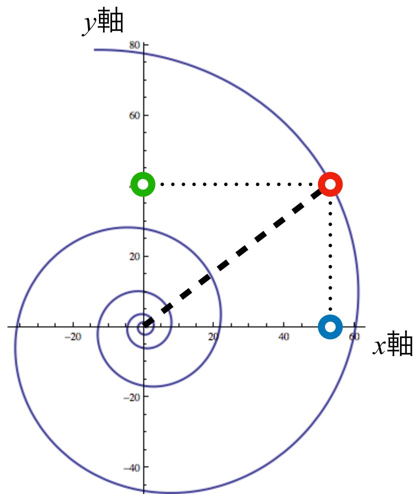
```
In [ ]: np.cos
Call signature:  np.cos(*args, **kwargs)
Type:            ufunc
String form:     <ufunc 'cos'>
File:            ~/.local/share/virtualenvs/code-5WzJ11sL/lib/python3.7/site-packages/numpy/__init
```

- ?関数名

```
In [2]: ?np.cos

Call signature:  np.cos(*args, **kwargs)
Type:            ufunc
String form:     <ufunc 'cos'>
File:            ~/.local/share/virtualenvs/code-5WzJ11sL/lib/python3.7/site-packages/numpy/__init__.py
Docstring:
cos(x, /, out=None, *, where=True, casting='same_kind', order='K', dtype=None, subok=True[, signature, extobj])

Cosine element-wise.

Parameters
----------
x : array_like
    Input array in radians.
out : ndarray, None, or tuple of ndarray and None, optional
    A location into which the result is stored. If provided, it must have
```

- docstring：関数などの説明文. 宣言後すぐに書き込む.
  NumPyスタイルやGoogleスタイルが有名.
  http://www.sphinx-doc.org/ja/stable/ext/napoleon.html

対数らせん



$$r(\theta) = r_0 e^{a\theta}$$

```
# 7-7-1. 対数螺旋

import numpy as np

def logSpiral(a, r0, theta):
    """対数螺旋

    対数螺旋の座標値を返す関数

    Args:
        a: 対数螺旋の拡大率
        r0: 動径の初期値
        theta: 回転角

    Returns:
        x, y: 対数螺旋上の座標値

    """
    r = r0*np.exp(a*theta)
    x = r*np.cos(theta)
    y = r*np.sin(theta)

    return (x,y)
```

対数らせんのプロット

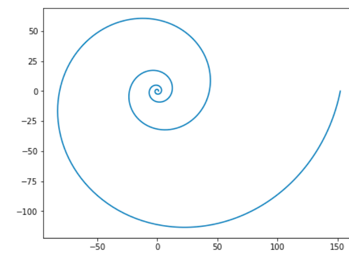
```
# 7-7-2. 対数螺旋のプロット

import matplotlib.pyplot as plt

# パラメータの設定
r0 = 1
a = 0.2

theta = np.linspace(0, 8*np.pi,1000)

# 座標値の計算
x, y = logSpiral(a, r0, theta)

# プロット
plt.figure(figsize=(7,7))
plt.axes().set_aspect('equal')
plt.plot(x,y)
```

回転角0〜8πまでプロット

logSpiral関数を利用した計算

アスペクト比の制御：x軸とy軸の幅を同じにする

出力例



パラメータを変えてプロットしてみよう！

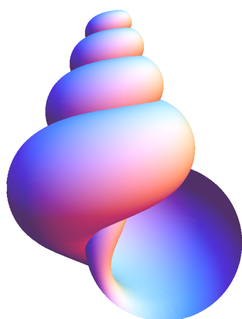
Raupのモデル

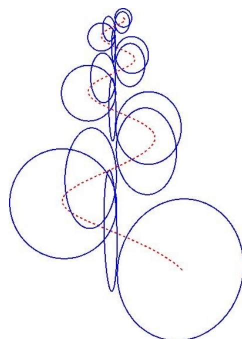
θ, φでパラメータ表示された母曲線の軌跡（曲面）で巻貝の殻形態を近似する

$$\mathbf{r}(\theta,\phi|W,T,D) = W^{\frac{\theta}{2\pi}} \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} \cos\phi \\ 0 \\ \sin\phi \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{2D}{1-D}+1 \\ 0 \\ 2T\left(\frac{D}{1-D}+1\right) \end{pmatrix} \right]$$

管の拡大　**z軸周りの回転**　**母曲線**　**初期位置**

ただし, $W > 1, T \in \mathbf{R}, -1 < D < 1$　とする.





計算すると

$$= \begin{pmatrix} W^{\frac{\theta}{2\pi}}\left(\frac{2D}{1-D}+1+\cos\phi\right)\cos\theta \\ W^{\frac{\theta}{2\pi}}\left(\frac{2D}{1-D}+1+\cos\phi\right)\sin\theta \\ W^{\frac{\theta}{2\pi}}\left(2T\left(\frac{D}{1-D}+1\right)+\sin\phi\right) \end{pmatrix}$$

これに基づきプロットする

Raupモデルの定義

```
# 7-8-1. Raupのモデル
import numpy as np

def raupModel(W, T, D, theta, phi):
    """Raupのモデル

    Raupのモデルに基づき殻表面の座標(x, y, z)を計算する.

    Args:
        W: 螺層拡大率
        T: 転移率(殻の高さ)
        D: 巻軸からの相対的距離(臍の大きさ)
        theta: 成長に伴う回転角
        phi: 殻口に沿った回転角

    Returns:
        x, y, z: 殻表面のx座標, y座標, z座標の
        それぞれの座標値(の配列)

    """
    w = W**(theta/(2*np.pi))
    x = w * (2*D/(1 - D) + 1 + np.cos(phi))*np.cos(theta)
    y = - w * (2*D/(1 - D) + 1 + np.cos(phi))*np.sin(theta)
    z = - w * (2*T*(D/(1 - D) + 1) + np.sin(phi))
    return (x, y, z)
```

$$\mathbf{R}_x(\pi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

プロット時に見やすくするためにx軸周りで180°回転させている

Raupモデルのプロット(1)

```
# 7-8-2. Raupのモデル用プロット関数の定義
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
import numpy as np

def plotSurf(X, Y, Z):
    """Raupのモデルをプロットする関数

    Raupのモデルに基づき計算された殻表面座標(X,Y,Z)に基づき
    殻の表面をプロットする.

    Args:
        X, Y, Z: 殻表面のx座標, y座標, z座標の
        それぞれの座標値の配列

    """
    fig = plt.figure(figsize=(10,10))
    ax = fig.gca(projection = '3d')
    ax.plot_surface(X, Y, Z)
    ax.set_xlabel('x-axis')
    ax.set_ylabel('y-axis')
    ax.set_zlabel('z-axis')

    # バウンディングボックス
    max_range = np.array([X.max()-X.min(), Y.max()-Y.min(), Z.max()-Z.min()]).max()
    Xb = 0.5*max_range*np.mgrid[-1:2:2,-1:2:2,-1:2:2][0].flatten() + 0.5*(X.max()+X.min())
    Yb = 0.5*max_range*np.mgrid[-1:2:2,-1:2:2,-1:2:2][1].flatten() + 0.5*(Y.max()+Y.min())
    Zb = 0.5*max_range*np.mgrid[-1:2:2,-1:2:2,-1:2:2][2].flatten() + 0.5*(Z.max()+Z.min())
    for xb, yb, zb in zip(Xb, Yb, Zb):
        ax.plot([xb], [yb], [zb], 'w')

    plt.grid()
    plt.show()
```

3次元プロットのための領域作成 (fig.gca(projection = '3d'))

入力した点に張られる表面をプロット (ax.plot_surface)

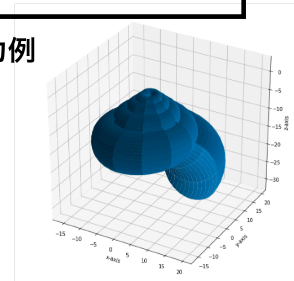
プロット時に各軸のスケールを揃えるため (バウンディングボックス)

Raupモデルのプロット（2）

```
# 7-8-3. Raupのモデルのプロット
%matplotlib notebook
import numpy as np

# Raupモデルに基づく殻表面座標の計算
W = 10**0.2
T = 1
D = 0.2

thetaRange = np.linspace(0,9*np.pi, 3600 )
phiRange= np.linspace(0, 2*np.pi, 90)
theta, phi = np.meshgrid(thetaRange, phiRange)

x,y,z = raupModel(W,T,D,theta, phi)

#プロット
plotSurf(x,y,z)
```

インタラクティブなプロットをおこなうため

出力例



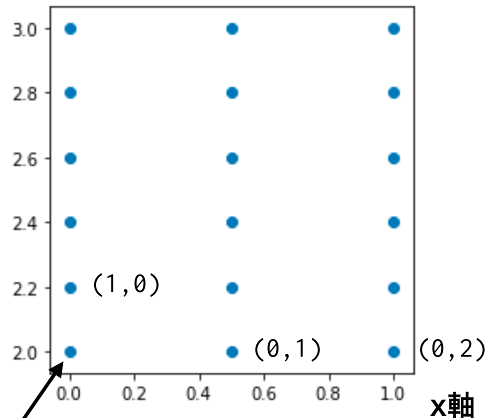
- numpy.meshgrid(array1d_1, array1d_2)：一次元配列 array1d_1とarray1d_2に従い，それらのなす格子点の（座標ごとの）配列のリストを生成する．

meshgridの補足

```
# 7-9. meshgrid
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

a = np.linspace(0,1,3)
b = np.linspace(2,3,6)
mesh = np.meshgrid(a,b)
x, y = np.meshgrid(a,b)

print(mesh)

plt.axes().set_aspect("equal")
plt.scatter(x,y)
```

```
#出力
[array([[0. , 0.5, 1. ],
       [0. , 0.5, 1. ],
       [0. , 0.5, 1. ],
       [0. , 0.5, 1. ],
       [0. , 0.5, 1. ],
       [0. , 0.5, 1. ]]),
array([[2. , 2. , 2. ],
       [2.2, 2.2, 2.2],
       [2.4, 2.4, 2.4],
       [2.6, 2.6, 2.6],
       [2.8, 2.8, 2.8],
       [3. , 3. , 3. ]])]
```

y軸



x軸

座標値として(x[0,0], y[0,0])をもつ点

- plt.scatter(X, Y)：配列（やリスト）XとYを座標値とした散布図を描く

n（>2）個の配列からなる格子点の生成にも利用可能

本日の課題

1. Raupモデルのパラメータを変化させて，様々な“かたち”を描け（4つ程度）

選択 2. 1.で描いた“かたち”を巻貝の形態的なモデルとしよう．すると様々なかたちの中には現実の巻貝に存在する“かたち”と，現実には存在しない“かたち”が現れる．では何故現実にはそうした“かたち”の巻貝が存在するのか，または存在しないのかを究極要因と至近要因の両面から考察し，意見を述べよ．

選択 3. 現実の巻貝にはRaupモデルによって描けない“かたち”が存在する．そうした，巻貝を探しだし，何故Raupモデルでは描けないのかを考察せよ．

4. 質問，意見，要望等をどうぞ．

ノーマル：２・３いずれか選択
ハード：２・３両方

課題をPDFファイルにまとめて，Moodleにて提出すること

（引用元を示さない）コピペはやめよう．「盗用」という不正行為です．

課題に（Webあるいは他者からの）コピペだと見受けられる画像や文章が利用されているケースを発見しました．

これらは不正行為にあたります．絶対にやめてください．

何かの例や参考として画像や文章を利用したい場合は適切に**引用**してください．

第８回で少し取り上げます．

次回予告
第8回：研究をはじめるために
6月10日

復習推奨

- 参考文献の引用方法