数理生物学演習

第7回　理論形態学：Raupのモデル

野下 浩司（Noshita, Koji）

noshita@morphometrics.jp

https://koji.noshita.net

理学研究院 数理生物学研究室

第7回：理論形態モデル

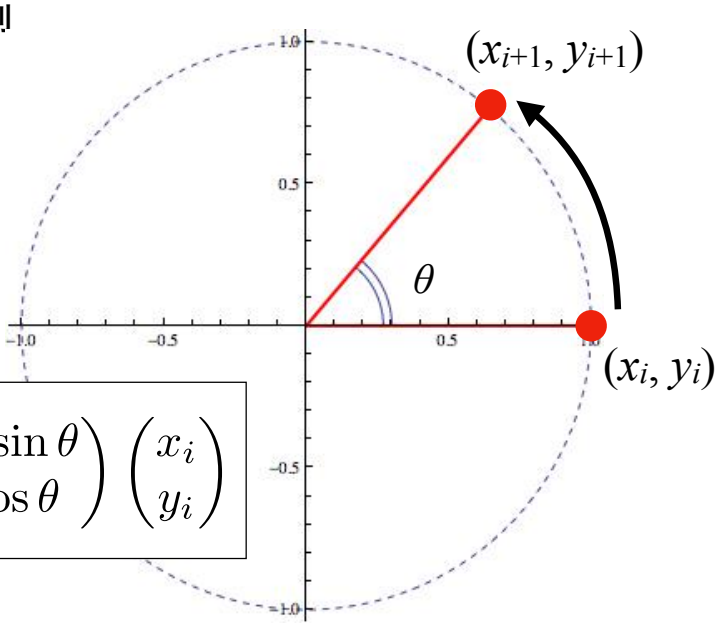
本日の目標

- 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

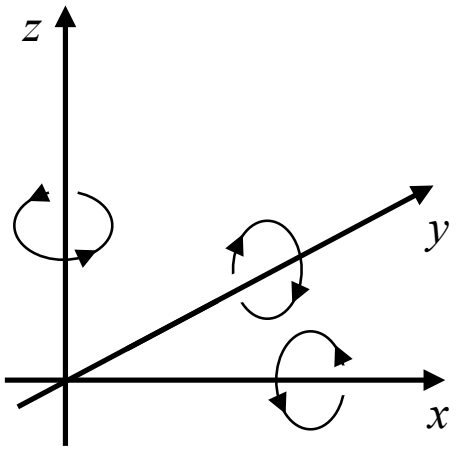
$$\mathbf{R}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$



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

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

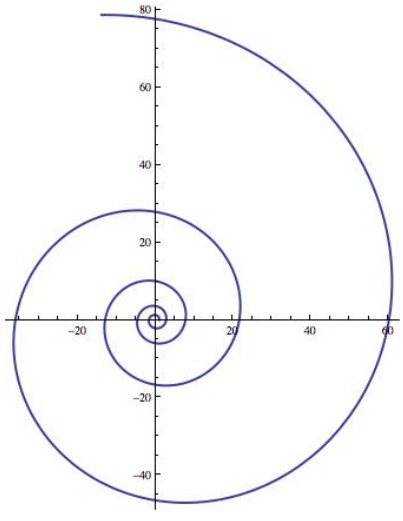
対数らせんで近似できる“巻き”パタン

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)

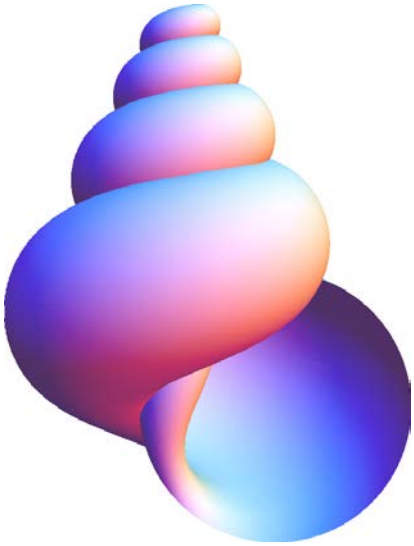
初期条件

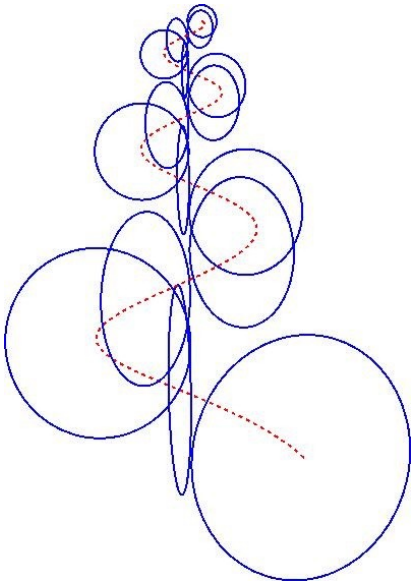


$$r(\theta) = r_0 e^{a\theta}$$

Raupのモデル

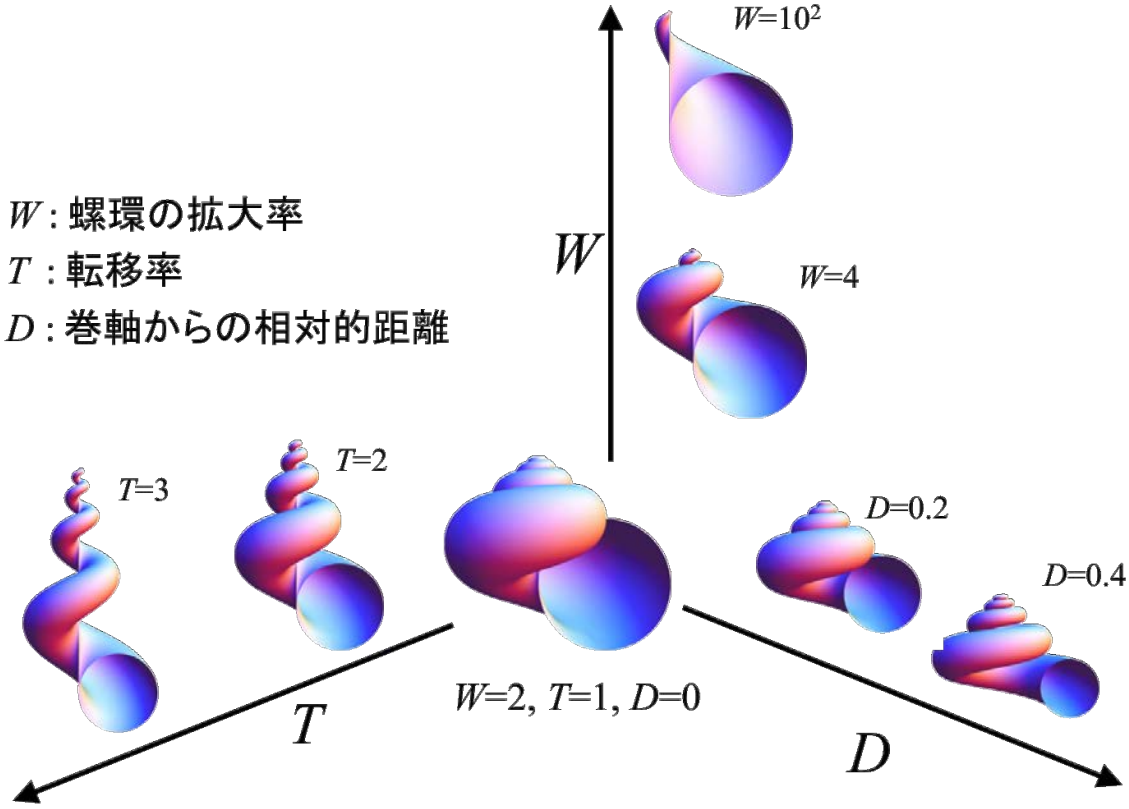
Raup (1962, 1966), Raup & Michelson (1965)





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



NumPy，NumPy配列

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

```
# 01-01. 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]])
```

- `import numpy as np`
  NumPyを使用する際はnpという略称でインポートすることが一般的．

numpy
- 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

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

```
# 01-02. 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]]
```

numpy
- 配列.shape 配列の形状（高さ，幅，深さ，…など）を記録したタプル
- 配列.ndim 配列の次元
- 配列.dtype 配列の型（要素にどの型を持つか）
- 配列.astype 配列のキャスト．特定の型へ変換できる．

NumPy：数値計算・行列計算ライブラリ

基本的な演算（1）

```
# 01-03. 基本的な演算

# 同次元の加算・減算
print("a + b: ", a + b)
print("b - a: ",b - a)
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)
```

！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．

要素ごとの演算

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 - a:  [ 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.

```
# 01-04. 基本的な関数による演算

# 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))
```

同じ関数で（複数の要素を）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.

```
#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

```
# 01-05. 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

```
# 01-06. 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(C): ", np.linalg.eig(C))
print("固有値のみ, np.linalg.eigvals(C): ”, 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.

numpy
- 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）.

```
# 01-07. 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：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

- ?関数名

- 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