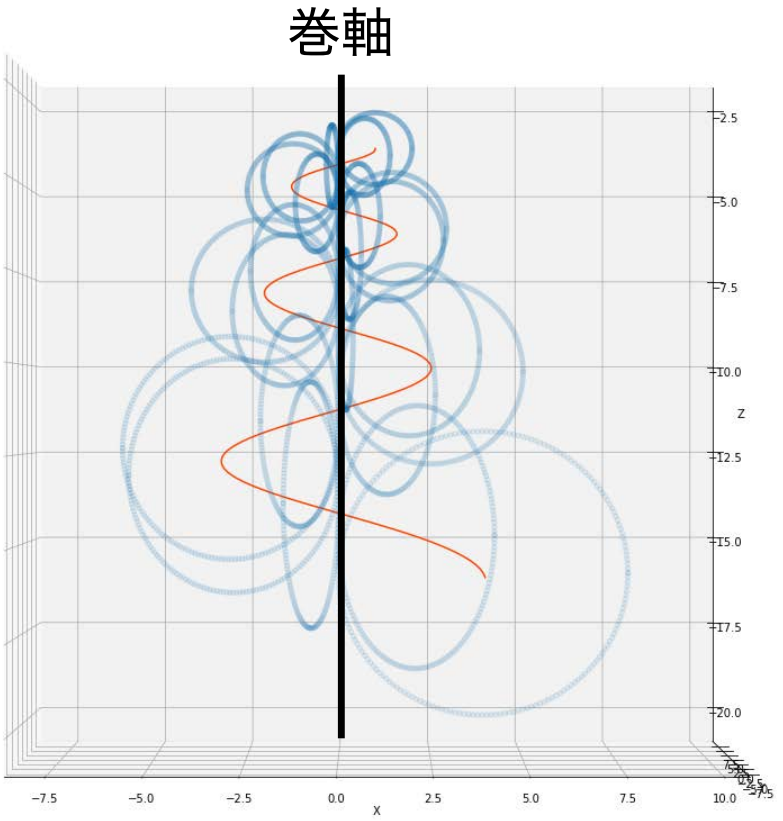
数理生物学演習

第7回　理論形態学：Raupのモデル

荒木 周
araki@morphometrics.jp
九州大学大学院システム生命科学府
数理生物学研究室

Raupのモデル*



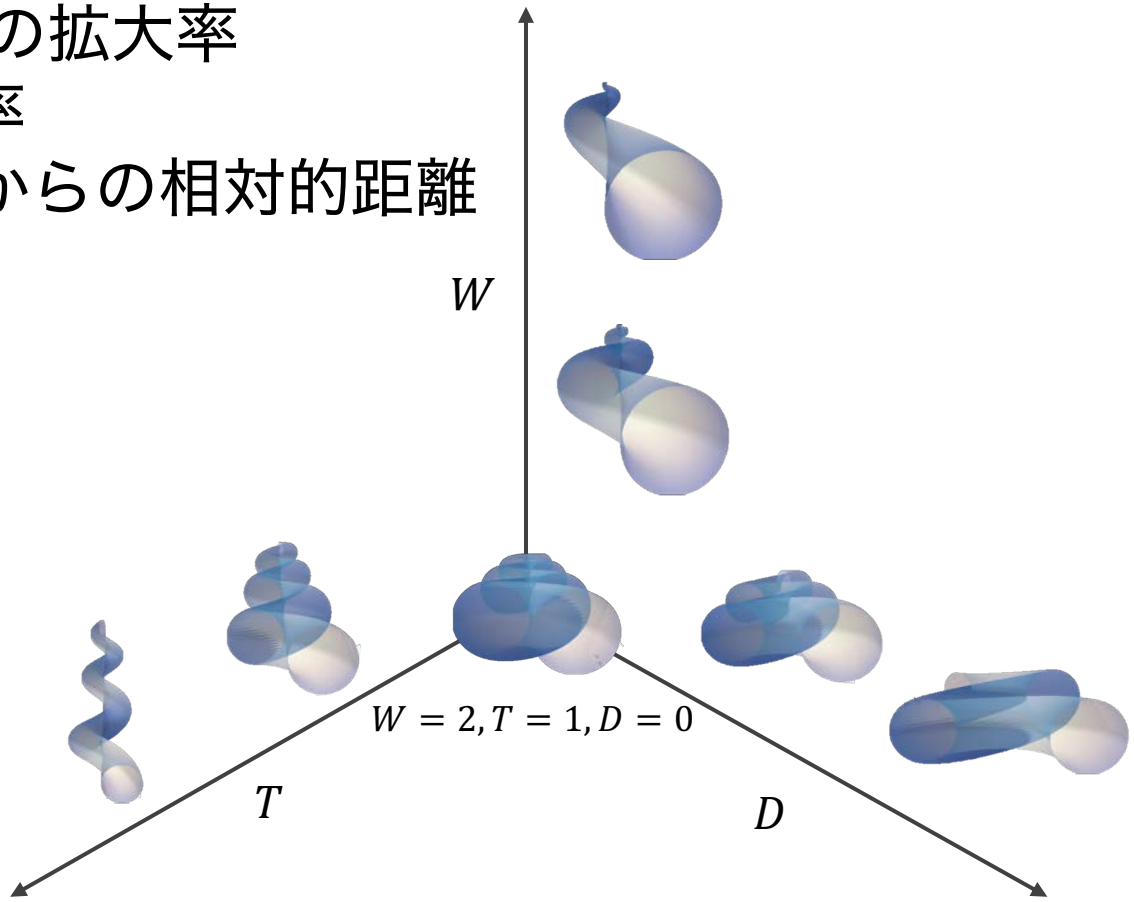
母曲線を巻き軸周りに回転させながら成長させることで
“巻き”のパタンを記述

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

Raupのモデル

パラメータを変えることで様々な巻パタンが表現できる

W：螺環の拡大率
T：転移率
D：巻軸からの相対的距離



第7回：理論形態モデル

本日の目標

- 回転行列
- Raupのモデル
- 3Dプロット

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
- さまざま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]]
```

```
#メモ
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]])
```

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
- 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:",a+C)
print(”D-b: ¥n",D-b)

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

ベクトルや行列の
演算とは別物
これらは後程

次元が異なる場合：
一番大きな次元に
合わせ、同一要素が
繰り返される
a+Cの出力結果は
array([a+C[0],
　　a+C[1],
　　a+C[2]])
となるイメージ

要素ごとの演算

```
# 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. ]]
```

```
#メモ
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]])
```

この辺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://numpy.org/doc/stable/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）処理をしたい時に便利な機能。

```
# 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 ]]
```

```
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]])
```

NumPy：数値計算・行列計算ライブラリ

ベクトル・行列演算（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行うこともできる

```
# 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. ]]
```

```
#メモ
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]])
```

NumPy：数値計算・行列計算ライブラリ

ベクトル・行列演算（2）

```
# 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))
```

```
#メモ
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]])
```

```
# 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

他にも配列関係の計算を便利に行うための関数が多数ある

```
# 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))
```

numpy

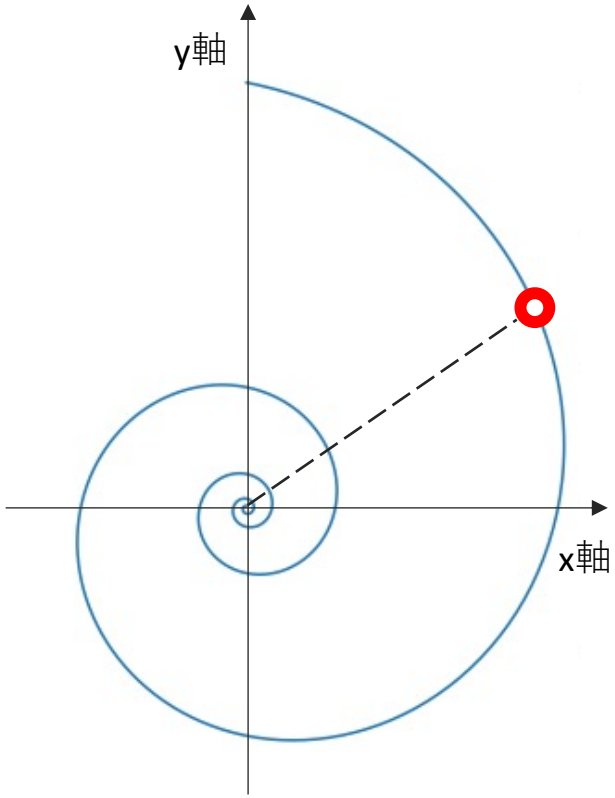
- zeros(shape)：形状をshapeとし、すべての要素がゼロの配 列を生成。
- identity(n)：n x nの単位行列を生成。
- linspace(start, stop, num)：startからstopまでの間 にnum個の値をもつ配列を生成（stopを含む）。

```
# 出力
Z:                      I:
[[0. 0. 0. 0.]          [[1. 0. 0.]
 [0. 0. 0. 0.]           [0. 1. 0.]
 [0. 0. 0. 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
```

対数らせんと可視化

対数らせん

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



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

指数増殖モデル

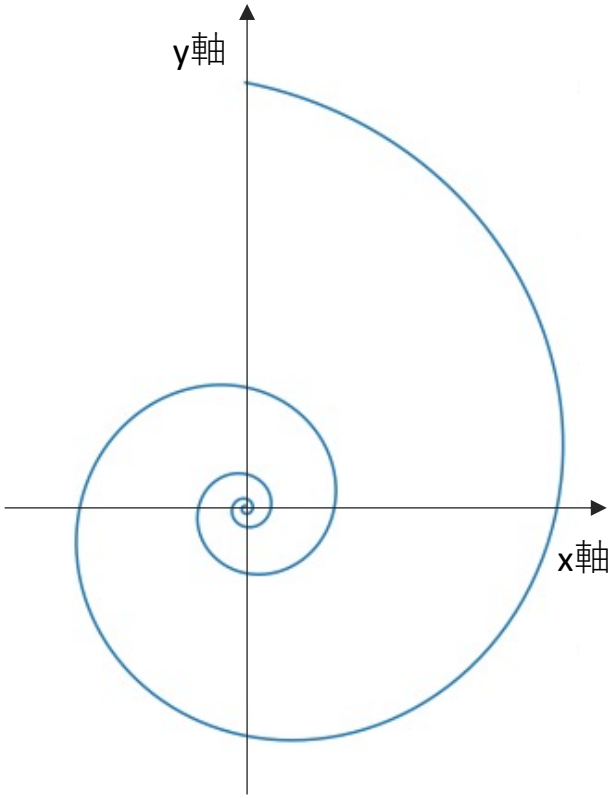
$$\frac{dx}{dt} = ax$$

初期条件 $x(0) = x_0$

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

対数らせん

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

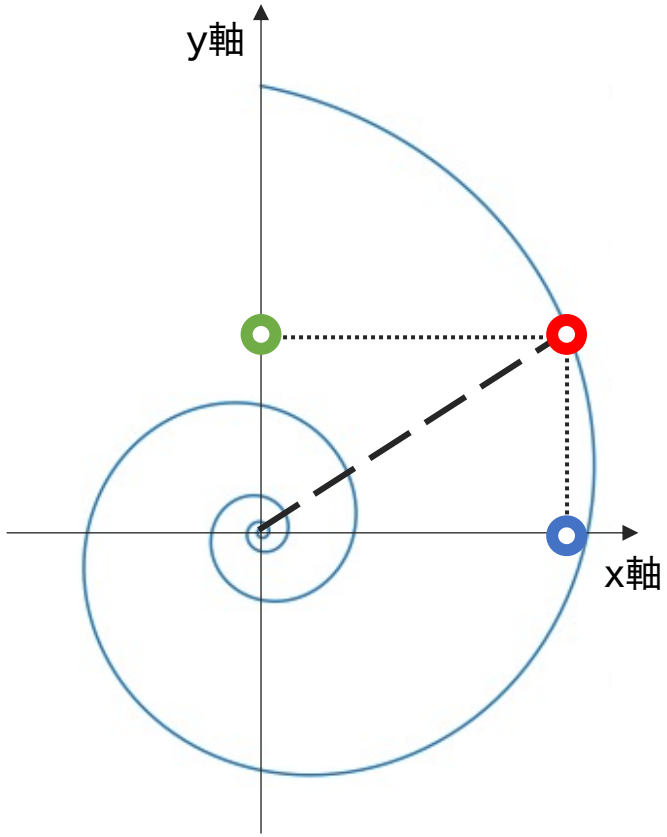


$$r(\theta) = r_0 e^{a\theta}$$

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

対数らせん



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

```
#02-01. 対数らせん
import numpy as np
def logSpiral(a,r0,theta):

    """対数らせん
    対数らせんの座標値を返す関数
    Args:
        a：対数らせんの拡大率
        r0：動径の初期値
        theta：回転角

    Returns：
        x,y：対数螺旋状の座標値

    """
    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

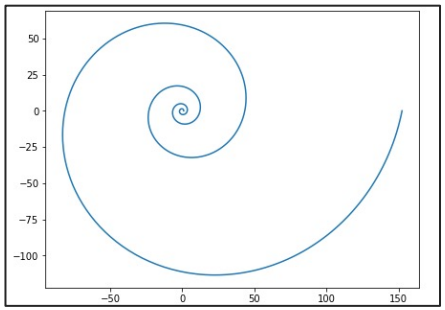
```
#02-02. 対数らせんのプロット
import matplotlib.pyplot as plt

#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)
```

出力例



パラメータを変えてプロットしてみよう！

(さっき定義した)logSpiral関数を利用した計算。x、yにはそれぞれ座標値を記録したnumpy配列が代入される

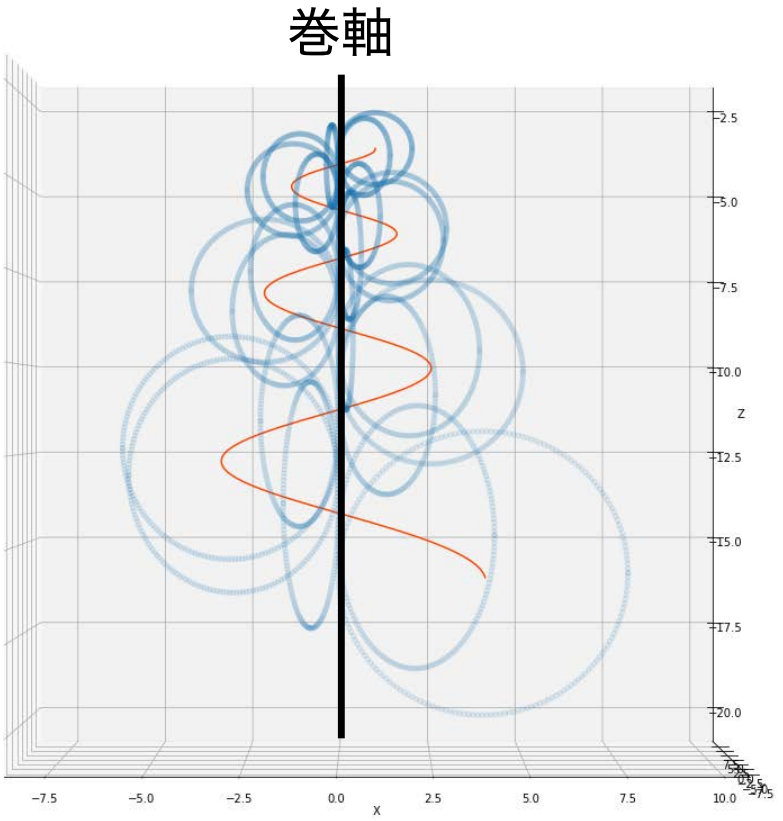
x軸とy軸のスケールを同じにする

matplotlib.pyplot

- axes() figure環境にaxes(座標値、様々な作図関連の要素を格納する入れ物)を追加する。
- axes.Axes
  - set_aspect() axesのアスペクト比（縦/横）を設定する。自動（‘auto’）、同じ（‘equal’）、あるいは具体的な値を指定できる。

Raupのモデルと3Dプロット

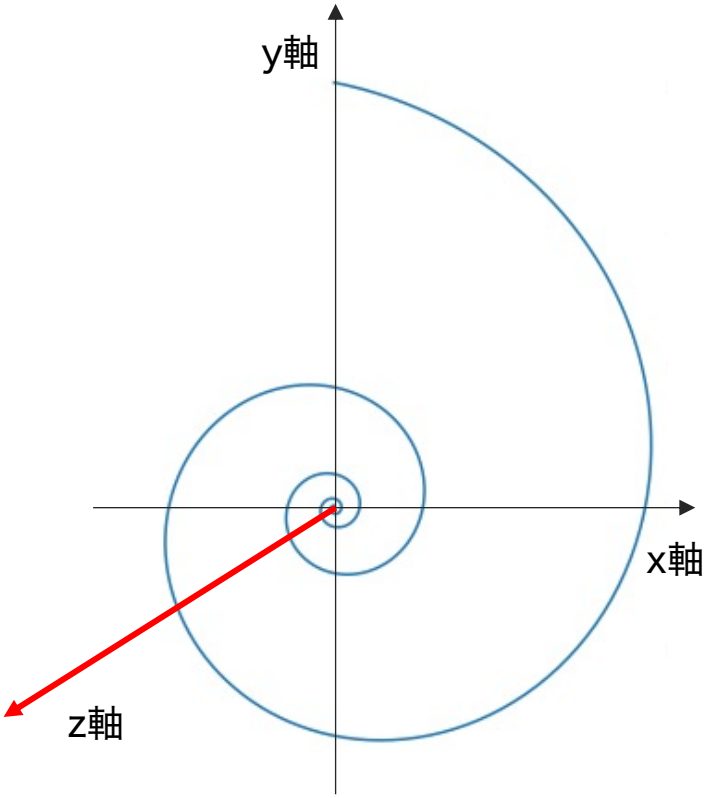
Raupのモデル*

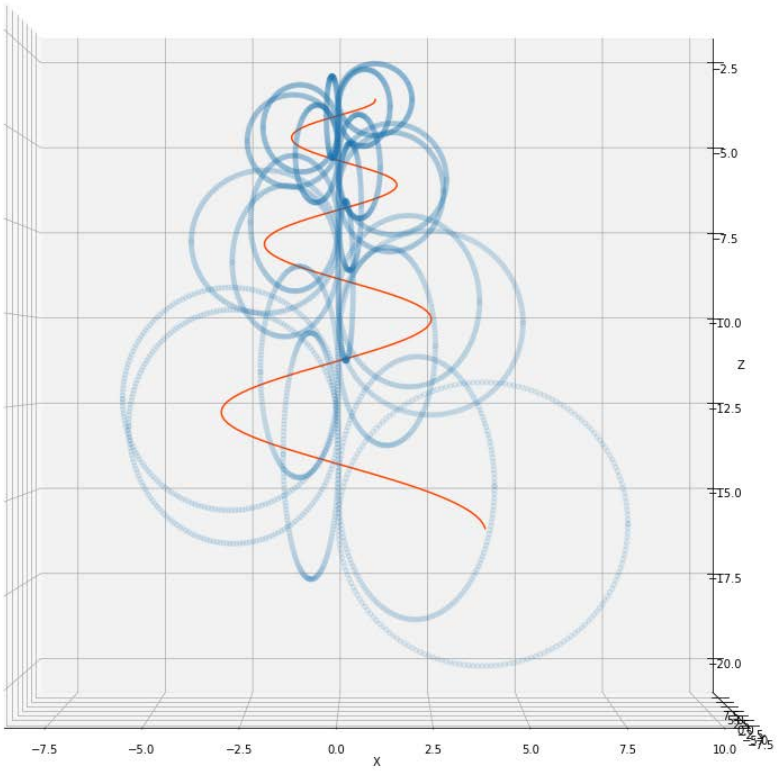


母曲線を巻き軸周りに回転させながら成長させることで
“巻き”のパタンを記述

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

Raupのモデル



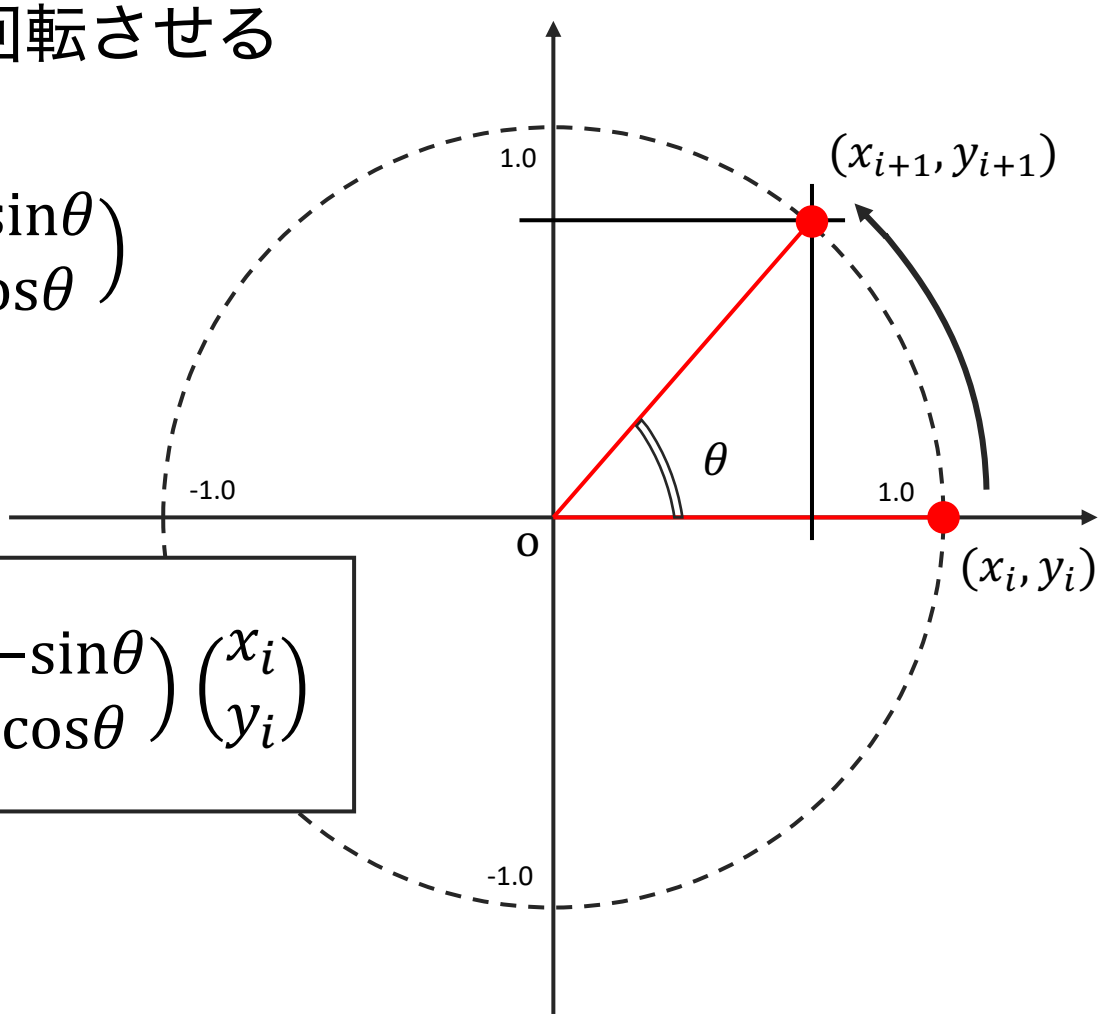


母曲線を巻き軸周りに回転させながら成長させることで
“巻き”のパタンを記述

回転行列 2次元

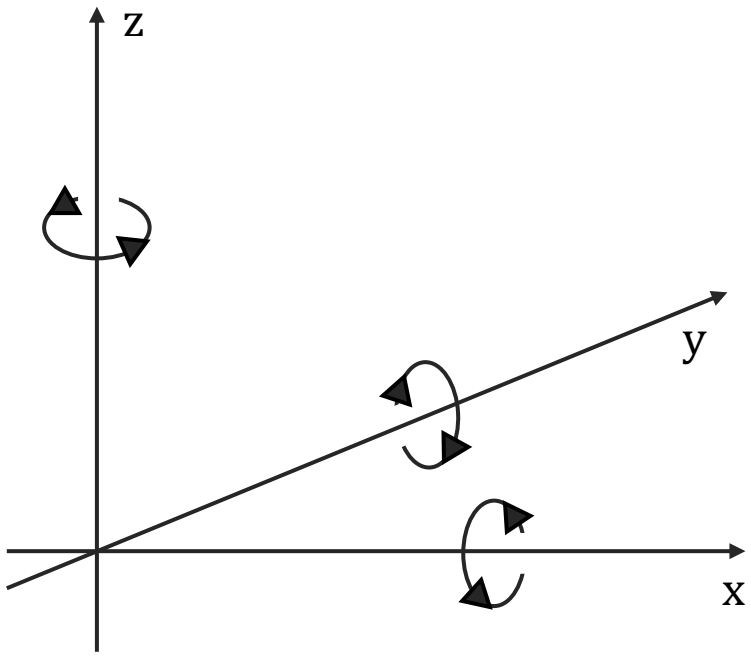
原点周りにθだけ回転させる
回転行列

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



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

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

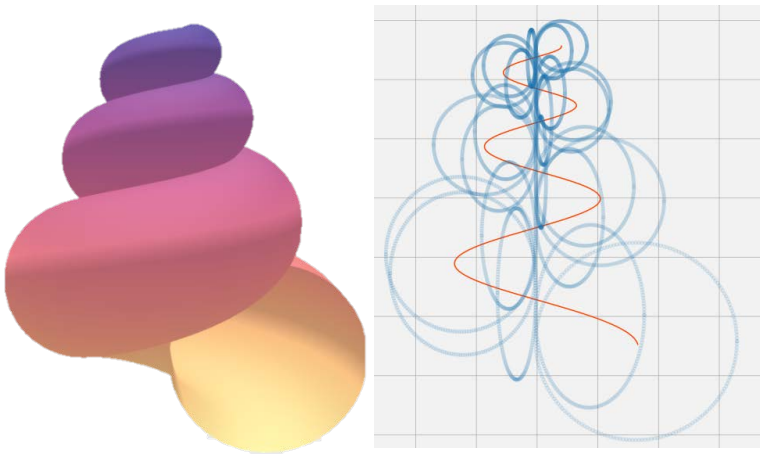
$$\mathbf{R_z}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

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

$$\mathrm{r}(\theta,\phi|W,T,D) = \underbrace{W^{\frac{\theta}{2\pi}}}_{\text{管の拡大}} \underbrace{\begin{pmatrix}\cos\theta & -\sin\theta & 0\\ \sin\theta & \cos\theta & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}}_{\text{z軸周りの回転}} \left[\underbrace{\begin{pmatrix}\cos\phi\\ 0\\ \sin\phi\end{pmatrix}}_{\text{母曲線}} + \underbrace{\begin{pmatrix}\frac{2D}{1-D}+1\\ 0\\ 2T\left(\frac{D}{1-D}+1\right)\end{pmatrix}}_{\text{初期位置}} \right]$$

ただし，$W > 1, T \in R, -1 < D < 1$とする



計算すると

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

これに基づきプロットする

Raupモデルの定義

```
#02-03. Raupのモデル
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)
```

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

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

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

```
#02-04. Raupのモデルのプロット
import plotly.graph_objs as go

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

thetaRange = np.linspace(0,8*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)

fig=go.Figure(go.Surface(x=x,y=y,z=z,
        showscale=False))

fig.update_layout(
        scene={"aspectmode":"data"})

fig.show()
```

３次元プロットのためにプロット用パッケージ（plotly）のgraphi_objsをgoという略称でインポート

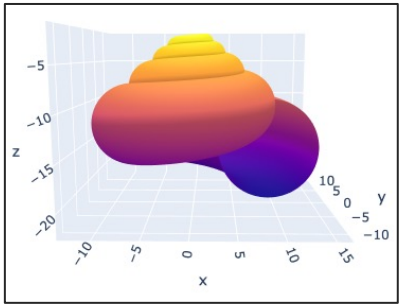
より詳しく知りたい人は公式ドキュメント参照　Plotly https://plotly.com/python/

numpy
- meshgrid(array1d_1,array1d_2)
一次元配array1d_1,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.

３次元プロットのための殻両面の３次元座標値を計算

入力した点に張られる表面を作成

プロット時に各軸のスケールを揃える



meshgridの補足

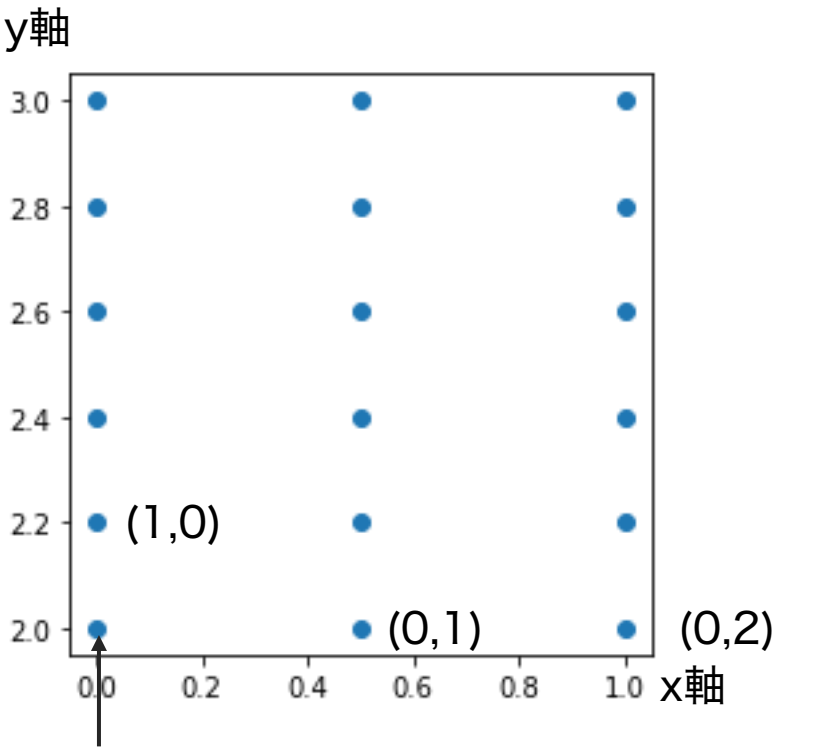
```
#meshgrid
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

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. ]])]
```



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　ノーマル

問1～3のうち、2つの問題に取り組む＋問4

選択　1.　生態やかたちについてあなたが興味を持った、巻貝の名前と興味を持った理由を教えてください。また、Raupモデルで再現可能な場合、その時のパラメータ（W、T、D）も教えてください。

選択　2.　Raupモデルで描ける“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。ではなぜ現実にはそうした“かたち”の巻貝が存在するのか、または存在しないのか、その要因について意見を述べよ。

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出し、なぜRaupモデルでは描けないのかを考察せよ。

必須　4.　質問，意見，要望等をお願いします。

課題をノートブック（.ipynbファイル）にまとめて，Moodleにて提出すること
ファイル名は[回数，01～15]_[難易度，ノーマルnかハードh].ipynb.
（例）07_h.ipynb

本日の課題　ハード

問1～4の全てに取り組む

1. 生態やかたちについてあなたが興味を持った、巻貝の名前と興味を持った理由を教えてください。また、Raupモデルで再現可能な場合、その時のパラメータ（W、T、D）も教えてください。
2. Raupモデルで描ける“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。ではなぜ現実にはそうした“かたち”の巻貝が存在するのか、または存在しないのか、その要因について意見を述べよ。
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出し、なぜRaupモデルでは描けないのかを考察せよ。
4. 質問，意見，要望等をお願いします。

課題をノートブック（.ipynbファイル）にまとめて，Moodleにて提出すること
ファイル名は[回数，01～15]_[難易度，ノーマルnかハードh].ipynb.
（例）07_h.ipynb

次回予告
第8回：研究を始めるために
5月30日

研究内容
別のスライドへ