

2023年度  
藤澤研 卒研トレーニング

## Python 入門

岐阜大学工学部化学・生命工学科  
生命化学コース  
藤澤研究室

藤澤 哲郎

2024年4月8日

# 目次

|       |                                |    |
|-------|--------------------------------|----|
| 第 1 章 | はじめに                           | 1  |
| 1.1   | 目標                             | 1  |
| 1.2   | 全体計画                           | 1  |
| 1.3   | 注意事項                           | 2  |
| 1.4   | このチュートリアル pdf                  | 2  |
| 第 2 章 | 計算機プログラミングの基本、テキストエディタの使用法     | 3  |
| 2.1   | 今回の目的                          | 3  |
| 2.2   | プログラミング                        | 3  |
| 2.3   | コンピュータの動作原理と OS (オペレーティングシステム) | 4  |
| 2.4   | Linux の基本                      | 6  |
| 2.5   | プログラミング作成の流れ                   | 8  |
| 2.6   | テキストエディタ                       | 9  |
| 2.7   | 参考文献                           | 12 |
| 2.8   | 課題 1. テキストエディタ習得               | 12 |
| 第 3 章 | python を電卓として使う                | 13 |
| 3.1   | 今回の目的                          | 13 |
| 3.2   | python とは                      | 13 |
| 3.3   | Spyder の起動                     | 13 |
| 3.4   | 在宅で python を勉強するには             | 15 |
| 3.5   | 四則演算                           | 16 |
| 3.6   | 変数                             | 18 |
| 3.7   | モジュールと import                  | 19 |
| 3.8   | 文字列                            | 20 |
| 3.9   | 変数の型                           | 21 |
| 3.10  | ヒストリ機能                         | 22 |
| 3.11  | 課題 1 cmath モジュール               | 22 |
| 3.12  | 課題 2 整数型と実数型                   | 22 |
| 3.13  | 課題 3 文字列                       | 22 |
| 3.14  | リスト                            | 23 |
| 3.15  | 課題 4: リストと range               | 26 |
| 3.16  | 文字列のインデックス表現                   | 26 |
| 3.17  | スライス                           | 26 |
| 3.18  | 課題 5: スライス                     | 27 |
| 3.19  | リストのリスト                        | 27 |
| 3.20  | 応用編: モジュールの短縮名                 | 28 |
| 第 4 章 | matplotlib によるグラフ作成            | 29 |
| 4.1   | 今回の目的                          | 29 |
| 4.2   | matplotlib の使用                 | 29 |
| 4.3   | pylab モジュールの plot の基本          | 30 |
| 4.4   | array 型                        | 30 |
| 4.5   | 最初の例をもう一度                      | 32 |
| 4.6   | グラフの表示設定                       | 32 |
| 4.7   | 課題 1 関数のプロット 1                 | 33 |

|            |                           |           |
|------------|---------------------------|-----------|
| 4.8        | 課題2 関数のプロット2              | 34        |
| 4.9        | エラーバー付きのグラフ               | 34        |
| 4.10       | 課題3 エラーバー付きグラフ            | 35        |
| 4.11       | ヒストグラム                    | 35        |
| 4.12       | 課題4 ヒストグラム                | 36        |
| 4.13       | 参考文献                      | 37        |
| <b>第5章</b> | <b>プログラミング事始め I</b>       | <b>39</b> |
| 5.1        | 今回の目的                     | 39        |
| 5.2        | プログラム入門                   | 39        |
| 5.3        | コマンドラインからの変数入力            | 41        |
| 5.4        | 課題1 かけ算プログラム              | 43        |
| 5.5        | ifによる条件分岐とブロック文           | 43        |
| 5.6        | 課題2 ifをつかったプログラミング        | 45        |
| 5.7        | 条件式と True, False          | 45        |
| 5.8        | True と False, if文 の真実     | 47        |
| 5.9        | ブロック文の詳細                  | 48        |
| 5.10       | while文を使ったループ             | 48        |
| 5.11       | 課題3 while文                | 49        |
| 5.12       | 補遺1 デバッグ                  | 50        |
| 5.13       | 補遺2 ディレクトリ                | 54        |
| <b>第6章</b> | <b>プログラミング事始め II</b>      | <b>55</b> |
| 6.1        | 今回の目的                     | 55        |
| 6.2        | forを使ったループ                | 55        |
| 6.3        | range と for の組み合わせ        | 56        |
| 6.4        | 課題1 for と range()         | 57        |
| 6.5        | ifをもう少し。if-elif-else 構文   | 57        |
| 6.6        | 課題2 if と else             | 58        |
| 6.7        | break と continue          | 58        |
| 6.8        | for, while文 の else        | 59        |
| 6.9        | 少し実際のなプログラム               | 61        |
| 6.10       | 課題3 素因数分解                 | 61        |
| 6.11       | input文による変数入力             | 63        |
| 6.12       | 課題4 input()               | 63        |
| 6.13       | tkinterによる変数入力            | 64        |
| 6.14       | 課題5 GUIの使用                | 66        |
| 6.15       | python2におけるTkinterによる変数入力 | 66        |
| <b>第7章</b> | <b>データ入出力</b>             | <b>67</b> |
| 7.1        | 今回の目的                     | 67        |
| 7.2        | ファイル入出力                   | 67        |
| 7.3        | 課題1: ファイル入力テスト            | 69        |
| 7.4        | ファイル出力のための型変更             | 69        |
| 7.5        | 改行文字                      | 70        |
| 7.6        | データ解析入門                   | 71        |
| 7.7        | 課題2: 標本偏差                 | 72        |
| 7.8        | 複数列のデータ読み込み               | 72        |
| 7.9        | 課題3 データプロット               | 73        |
| 7.10       | 課題4 ヒストグラムプロット            | 74        |
| 7.11       | csv file                  | 74        |
| 7.12       | 課題5 csv ファイル              | 75        |
| 7.13       | Guiを使ったファイルの入出力           | 75        |
| 7.14       | 課題6 GUIによるファイルの入出力        | 77        |
| 7.15       | pythonコードからのdirectory操作   | 77        |

|             |                              |                      |            |
|-------------|------------------------------|----------------------|------------|
| 7.16        | 課題7                          | pythonからのdirectory操作 | 77         |
| <b>第8章</b>  | <b>関数とメソッド</b>               |                      | <b>79</b>  |
| 8.1         | 今回の目的                        |                      | 79         |
| 8.2         | 関数の基礎                        |                      | 79         |
| 8.3         | 課題1 標本偏差と関数                  |                      | 82         |
| 8.4         | モジュール                        |                      | 82         |
| 8.5         | 課題2 モジュール                    |                      | 83         |
| 8.6         | メソッドと変数型                     |                      | 84         |
| <b>第9章</b>  | <b>ディレクショナリとアミノ酸配列</b>       |                      | <b>87</b>  |
| 9.1         | 今回の目的                        |                      | 87         |
| 9.2         | ディレクショナリ(辞書)                 |                      | 87         |
| 9.3         | ディレクショナリの関数とメソッド             |                      | 88         |
| 9.4         | ディレクショナリを使ったループ              |                      | 88         |
| 9.5         | アミノ酸配列データとディレクショナリ           |                      | 89         |
| 9.6         | 課題1: タンパク質の電荷                |                      | 90         |
| 9.7         | アミノ酸配列(シーケンス)データベース          |                      | 90         |
| 9.8         | 課題2 タンパク質の分子量                |                      | 92         |
| 9.9         | 課題3 データベースシーケンスの処理           |                      | 93         |
| <b>第10章</b> | <b>統計学入門</b>                 |                      | <b>95</b>  |
| 10.1        | 今回の目的                        |                      | 95         |
| 10.2        | 統計学とは                        |                      | 95         |
| 10.3        | 乱数とシミュレーション                  |                      | 96         |
| 10.4        | データ分布の数値による表現法               |                      | 98         |
| 10.5        | 確率分布                         |                      | 101        |
| 10.6        | 累積分布関数                       |                      | 103        |
| 10.7        | 二項分布                         |                      | 104        |
| 10.8        | 課題1 二項分布のパラメータ               |                      | 106        |
| 10.9        | 課題2 期待値と分散の計算                |                      | 106        |
| 10.10       | ポアソン分布                       |                      | 107        |
| 10.11       | 課題3 ポアソン分布のパラメータ             |                      | 109        |
| 10.12       | 正規分布                         |                      | 109        |
| 10.13       | 課題4 正規分布のパラメータ               |                      | 111        |
| 10.14       | 正規分布の重要な性質                   |                      | 111        |
| 10.15       | 課題5 正規分布と他の確率分布との関係の確認       |                      | 113        |
| 10.16       | 課題6 正規分布の正規化                 |                      | 113        |
| 10.17       | 中心極限定理                       |                      | 114        |
| <b>第11章</b> | <b>統計モデリング(統計的推定)と仮説検定入門</b> |                      | <b>119</b> |
| 11.1        | 今回の目的                        |                      | 119        |
| 11.2        | 統計モデリング(推定)とは                |                      | 119        |
| 11.3        | 統計モデリングの手順                   |                      | 119        |
| 11.4        | 推定の実例: 店長大変です!!              |                      | 121        |
| 11.5        | パラメーターの点推定: 最尤推定             |                      | 122        |
| 11.6        | 区間推定                         |                      | 126        |
| 11.7        | 仮説検定                         |                      | 129        |
| 11.8        | 具体例(検定): 当社はブラックか?           |                      | 129        |
| 11.9        | 有意水準                         |                      | 131        |
| 11.10       | 検定統計量                        |                      | 132        |
| 11.11       | 片側検定と両側検定                    |                      | 133        |
| 11.12       | 具体例(カイ二乗検定): ABテスト           |                      | 134        |
| 11.13       | 課題                           |                      | 135        |
| 11.14       | 統計学的差異(効果量)                  |                      | 135        |

|               |                                      |            |
|---------------|--------------------------------------|------------|
| 11.15         | 検出力                                  | 136        |
| 11.16         | 必要なサンプルサイズ                           | 137        |
| <b>第 12 章</b> | <b>回帰分析 (データフィッティング)</b>             | <b>139</b> |
| 12.1          | 今回の目的                                | 139        |
| 12.2          | 回帰分析 (データフィッティング) の目的                | 139        |
| 12.3          | 化学反応 (指数関数) のシミュレーション                | 140        |
| 12.4          | 課題 1 熱容量のシミュレーション                    | 142        |
| 12.5          | 安定性 (シグモイダル関数) のシミュレーション             | 143        |
| 12.6          | 課題 2 CD の実測値のシミュレーション                | 144        |
| 12.7          | フィッティングの基礎                           | 145        |
| 12.8          | 最小二乗法による直線回帰 (フィッティング)               | 145        |
| 12.9          | scipy.optimize.leastsq() の解説         | 148        |
| 12.10         | scipy.optimize.leastsq() を使ったプログラミング | 151        |
| 12.11         | 課題 3 指数関数近似                          | 153        |
| 12.12         | 課題 4 CD データに対する非線形関数近似               | 155        |
| <b>第 13 章</b> | <b>機械学習入門</b>                        | <b>157</b> |
| 13.1          | 今回の目的                                | 157        |
| 13.2          | 機械学習とデータサイエンス                        | 157        |
| 13.3          | 機械学習の分類                              | 158        |
| 13.4          | 線形回帰モデルで機械学習の基礎を学ぶ                   | 159        |
| 13.5          | 勾配降下法                                | 160        |
| 13.6          | 勾配降下法の実装                             | 162        |
| 13.7          | Python による重回帰分析の実行例                  | 170        |
| 13.8          | 課題 1 水質汚染指標                          | 174        |
| 13.9          | 参考文献                                 | 175        |
| <b>第 14 章</b> | <b>python による線形代数入門</b>              | <b>177</b> |
| 14.1          | 今回の目標                                | 177        |
| 14.2          | 行列                                   | 177        |
| 14.3          | 行列の積                                 | 179        |
| 14.4          | 課題 1 行列の積                            | 180        |
| 14.5          | 課題 2 行列の乗法                           | 180        |
| 14.6          | 線形変換                                 | 181        |
| 14.7          | 課題 3 線形変換の図示                         | 182        |
| 14.8          | 課題 4 代表的な変換行列                        | 183        |
| 14.9          | 逆行列                                  | 183        |
| 14.10         | 課題 5 逆行列の計算                          | 184        |
| 14.11         | 転置行列と対称行列                            | 184        |
| 14.12         | 線形方程式系 (連立一次方程式)                     | 186        |
| 14.13         | 線形独立 (一次独立)                          | 188        |
| 14.14         | 基底                                   | 190        |
| 14.15         | 階数                                   | 190        |
| 14.16         | 課題 6 行列の階数                           | 192        |
| 14.17         | 行列式                                  | 192        |
| 14.18         | 固有値問題                                | 193        |
| 14.19         | 行列の対角化と固有ベクトル                        | 195        |
| 14.20         | 課題 7 行列の対角化                          | 196        |
| 14.21         | ベクトルの直交と直交行列                         | 196        |
| 14.22         | 対称行列の対角化                             | 198        |
| <b>第 15 章</b> | <b>データ圧縮</b>                         | <b>201</b> |
| 15.1          | 今回の目的                                | 201        |
| 15.2          | 次元圧縮                                 | 201        |

|               |                                         |            |
|---------------|-----------------------------------------|------------|
| 15.3          | 主成分分析 (2次元)                             | 202        |
| 15.4          | 多次元データの主成分分析                            | 206        |
| 15.5          | Python を用いた主成分分析の実行例                    | 208        |
| 15.6          | 課題 1                                    | 210        |
| 15.7          | 特異値分解                                   | 211        |
| 15.8          | Python を用いた特異値分解の実行例                    | 216        |
| 15.9          | 混合物中の成分数                                | 218        |
| 15.10         | 総合課題                                    | 220        |
| <b>第 16 章</b> | <b>pdb フォーマットと蛋白質構造</b>                 | <b>223</b> |
| 16.1          | 今回の目的                                   | 223        |
| 16.2          | PDB (Protein Data Bank) database        | 223        |
| 16.3          | pdb file とは                             | 224        |
| 16.4          | Pdb viewer <b>chimera</b>               | 226        |
| 16.5          | 複数のポリペプチド鎖がある場合                         | 228        |
| 16.6          | 課題 1 <b>chimera</b> の習得                 | 229        |
| 16.7          | Pdb file の操作                            | 229        |
| 16.8          | chimera による C 原子の抜き出し                   | 230        |
| 16.9          | 課題 2 特定 Chain ID の抜き出し                  | 230        |
| 16.10         | Python による分子間インタフェースの同定                 | 230        |
| 16.11         | <b>Chimera</b> の python スクリプトと、残基リストの表現 | 232        |
| 16.12         | Structural alignment                    | 234        |
| 16.13         | 課題 3 matchmaker を実際に使う                  | 236        |
| 16.14         | 構造の比較                                   | 236        |
| 16.15         | 課題 4 構造変化部位の同定                          | 239        |
| <b>第 17 章</b> | <b>Python による画像処理</b>                   | <b>241</b> |
| 17.1          | 今回の目的                                   | 241        |
| 17.2          | 準備                                      | 241        |
| 17.3          | 画像データの形式                                | 241        |
| 17.4          | 圧縮をかけていない画像フォーマットの例 PBM/PGM/PPM         | 242        |
| 17.5          | PGM ファイルを作る例題                           | 244        |
| 17.6          | 圧縮画像形式                                  | 245        |
| 17.7          | 画像作成プログラムの例                             | 246        |
| 17.8          | python image library の活用                | 247        |
| 17.9          | 課題 1 画像の濃淡ヒストグラム                        | 248        |
| 17.10         | 課題 2 画像の濃淡値の変換                          | 249        |
| 17.11         | 課題 3 画像変換の総合演習                          | 251        |
| 17.12         | 画像編集・表示の代表的なソフト                         | 251        |
| <b>第 18 章</b> | <b>習熟度試験</b>                            | <b>255</b> |
| 18.1          | 条件:                                     | 255        |
| 18.2          | 問題                                      | 255        |
|               | 索引                                      | <b>257</b> |