データ解析と可視化の共通基盤を求めて -- 電脳Rubyの理念と実践

堀之内武（北大地球環境）

電脳davisプロジェクト

- data analysis and visualization
- 地球流体電脳倶楽部のソフト開発集積活動の一。
- この言葉を使いだしたのは90年代末頃だったような。
  - それ以前からDCL: Fortran用グラフィックライブラリ(GKS) by 塩谷雅人他

99年：JST 計算科学技術活用型特定研究開発推進事業「地球惑星流体現象を念頭においた多次元数値データの構造化」（林祥介代表）

- 現在のdavis活動の基礎構築に貢献
- 新しいGtoolに向けたデータ構造の設計，試作
  → Gtool4 NetCDF規約（メタデータ）

  その後の発展： Gtool5 Fortran90/95 IOライブラリ（電脳数値モデル群の足回り）
- オブジェクト指向スクリプト言語(Ruby/Python)の検討と試作 → RubyDCL

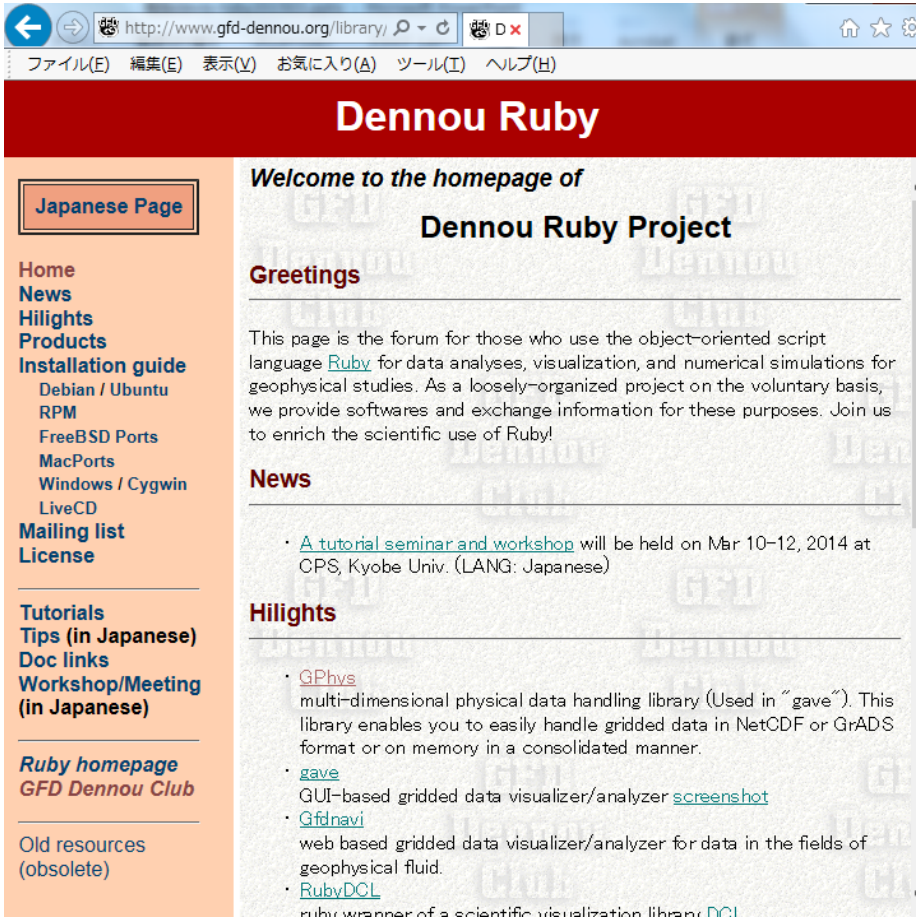
  その後の展開：電脳Rubyソフト群（本日の話題）

なぜ Ruby？

- 型なし、スクリプト言語（インタープリター）
  ⇒　素早くプログラムが開発できる
- 洗練され使いやすいオブジェクト指向言語　⇒　開発・保守効率がよく、汎用なソフトを作り易い　⇒　コミュニティーでツールを共有
- 対話的に利用可能　⇒　試行錯誤に良い
- 拡張性が高い ⇒ CやFortranのライブラリーの有効利用
- 増え続けるライブラリー（ネットワーク関連 / GUI / データベース等々）　⇒　高度なサービスを実現しやすい。
- 文字処理が容易（データ解析中に文字処理が必要になることは多い）
- ゴミ集め、例外処理等の近代的支援機能あり

電脳Ruby「プロジェクト」

- 地球流体研究のためのRuby用ライブラリを開発
- 成果はオープンソースで公開(BSD 2 clauseライセンス)
  - 電脳サーバーで（電脳davisサーバーに「小物置き場も」）



我々が扱うデータ

- 離散的（自由度有限：計算機上の必然）
- 多次元（時間，空間，波数空間…）(incl. 0次元)
  - 座標の存在（一次元以上で）
- 単位や名前があるのが普通

- データファイルの形式はいろいろ：NetCDF, GRIB, GrADS, テキスト, etc. etc.
  - 構造いろいろ，読み方いろいろ。
  - 伝統的アプローチだと，初めてのデータは読めるようになるだけで一苦労。

NetCDF:「自己記述型」データ形式

- 気象(地球流体)業界で広く使われる形式の一。バイナリ。(Ver.3は独自, Ver.4:HDFベース)
- バイナリ構造は隠蔽されていて，APIを通じて名前ベースでアクセス。(Ver.4 APIは後方互換)
- ユーザーズガイドによる規約が広く守られている。
  - 単位や名前を表す属性名
  - 座標を表す変数への辿り方

  ⇒ 物理量を表す変数名から芋づる式に辿れる:「自己記述」
- ユーザーズガイド規約の上に，より詳細なメタデータ規約も:CF, Gtool4,...(多くは互いの親和性大)

NetCDFファイルの構成例
（テキストダンプツールによる）

NCEP再解析（客観解析）の気温データを収めるNetCDFファイルの「ヘッダ」（メタデータ）の内容。

ダンプツール ncdump で表示後、一部省略。

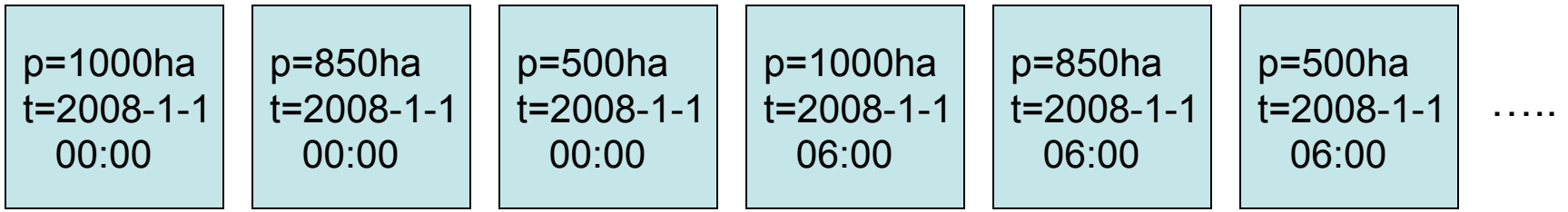
airが気温の4次元データ: lon, lat, level, timeの関数。

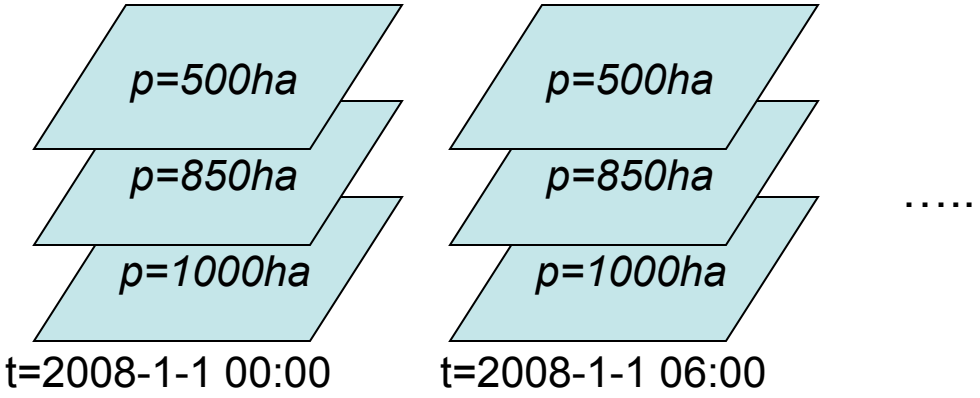
バイナリ構造は隠蔽され、名前ベースでアクセス。

```
$ ncdump -h air.2007.nc
netcdf air.2007 {
dimensions:
        lon = 144 ;
        lat = 73 ;
        level = 17 ;
        time = UNLIMITED ; // (365 currently)
variables:
        float level(level) ;
                level:units = "millibar" ;
                level:long_name = "Level" ;
        float lat(lat) ;
                lat:units = "degrees_north" ;
                lat:long_name = "Latitude" ;
        float lon(lon) ;
                lon:units = "degrees_east" ;
                lon:long_name = "Longitude" ;
        double time(time) ;
                time:units = "hours since 1-1-1 00:00:0.0" ;
                time:long_name = "Time" ;
        short air(time, level, lat, lon) ;
                air:long_name = "mean Daily Air temperature" ;
                air:valid_range = 150.f, 350.f ;
                air:units = "degK" ;
                air:add_offset = 477.66f ;
                air:scale_factor = 0.01f ;
                air:missing_value = 32766s ;
                air:precision = 2s ;
// global attributes:
                :Conventions = "COARDS" ;
                :title = "mean daily NMC reanalysis (2007)" ;
                :history = "created 2007/01/03 by Hoop (netCDF2.3)" ;
                :description = "Data is from NMC initialized reanalysis\n",
                        "(4x/day).  It consists of most variables interpolated to\n",
                        "pressure surfaces from model (sigma) surfaces." ;
```

参考：GRIB形式

- 気象予報機関の世界標準
- 水平2次元スライスに関する独立したバイナリデータの集合体。
- ヘッダはバイト（&ビット）単位で各種符号が規定されている。
  - 物理量の種類や時刻や高度はヘッダーに書かれている
  - 時系列や高度方向の次元の認識は解釈系に任されている
- NuSDAS、「国内二進」などの気象庁の形式も同様な構成





IO(特にI)のアプローチの転換へ

- ドキュメントを読みこなしてデータやメタデータの読み込みを逐一プログラミング

↓

- 自己記述性を活かして，芋づる自動処理
  - 自己記述でない場合も機械処理可能な形でメタデータを補えるはず。
  - ファイル形式が違っても，中身の論理構造が一緒なら，同じように扱えるはず。
  - さらに，オブジェクト指向なら「同じように」を「同じに」にできるはず：JST課題の基本発想
    - 堀之内は，それまでオブジェクト指向発想でFortran90やIDLを使って試みてたが，OO言語でないが故に「同じように」で止まる壁に当たっていた。（汎用にする手間が大きすぎ）

Meyer, 1997
Object-Oriented Software Construction (2nd Ed)

1st Edは1988

Rubyによるデータ解析可視化
基盤ライブラリ：GPhys

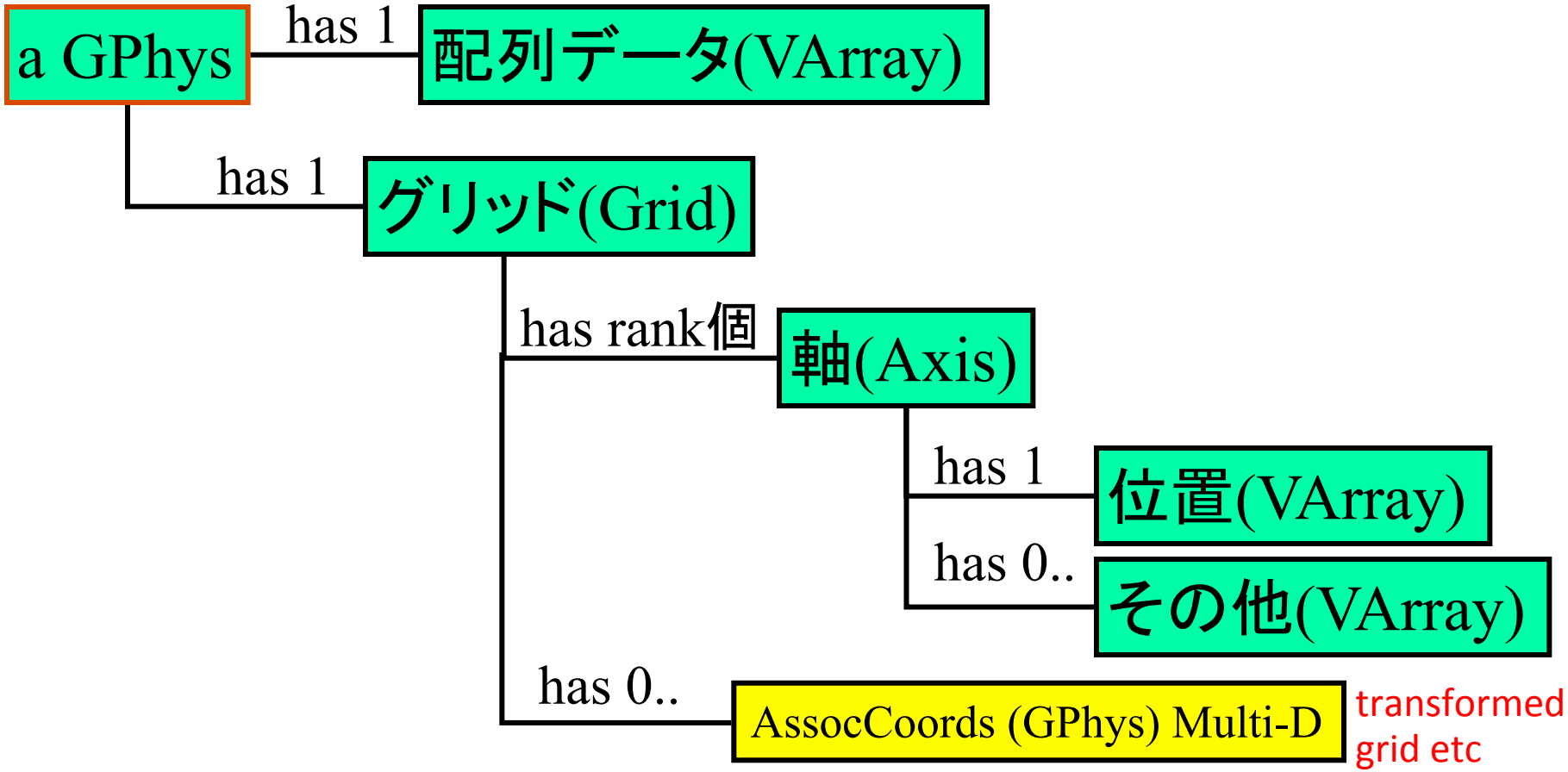
- GPhys = Gridded Physical quantity
- 任意次元（0,1,…）の座標系における物理量をあらわす「クラス」（型）であり、また、GPhysクラスを頂点とするライブラリ。
- データの物理的実体を隠蔽して（下位の諸ライブラリにそれぞれよろしくやってもらって）、ファイルの形式や次元性によらず、統一的なAPIで操作できる。

応用分野

- 流体等、連続空間における物理量に関するデータ解析（incl.可視化）と数値シミュレーション

GPhysオブジェクトの構成

- グリッド（座標データ）と配列データからなる。
- 数学・算術演算や、積分等の座標に関する演算が行なえる。

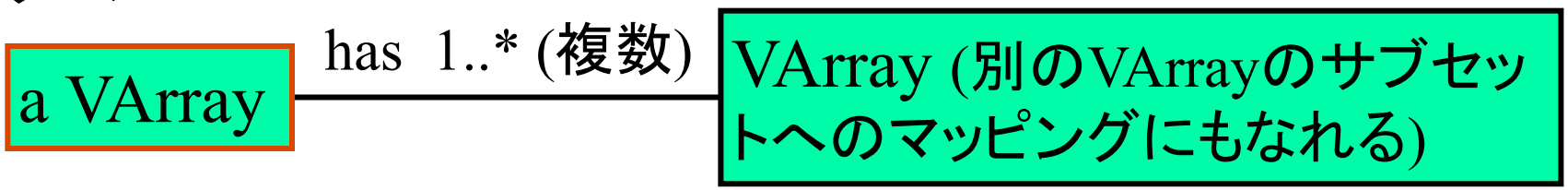


GPhysの重要な構成要素：VArray

- Virtual Arrayの略
- 配列のように振舞うが、データ実体は、Ruby用多次元配列(NArray)やファイル中の多次元データなど多様な場合を統一的にサポート。（サポート形式：NetCDF, GRIB, GrADS, NuSDAS, HDF5-EOS）
- 他のVArrayのサブセットだったり、複数のVArray合成の場合も。
- NetCDF同様「属性」を持てる。

パターン1

パターン2

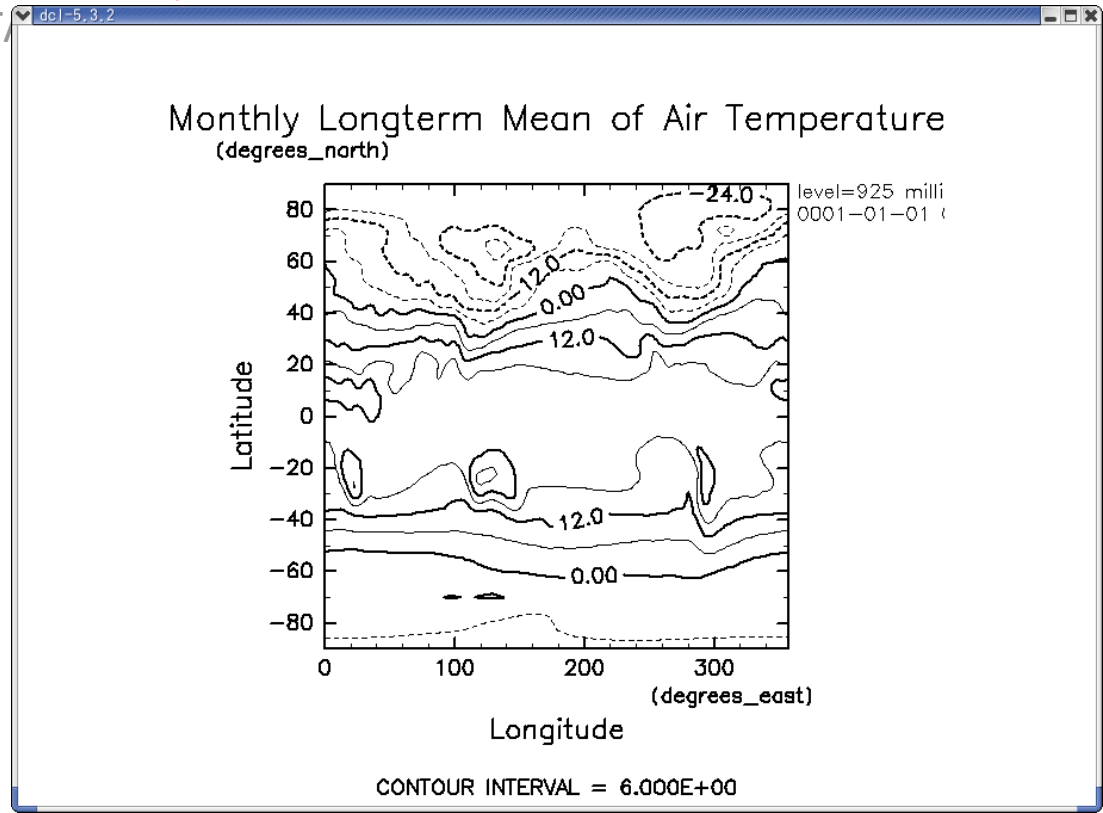


利用例（irbによる対話セッション）

スタートアップ用おまじないファイル

コマンドライン入力

```
% irb -r ggraph_startup.rb
 *** MESSAGE (SWDOPN) ***  GRPH1 : STARTED / IWS =  1.
irb(main):001:0> temp = gpopen('air.mon.ltm.nc/air')
=> <GPhys grid=<4D grid <axis pos=<'lon' in 'air.mon.ltm.nc'  sfloat[144]>>
       <axis pos=<'lat' in 'air.mon.ltm.nc'  sfloat[73]>>
       <axis pos=<'level' in 'air.mon.ltm.nc'  sfloat[17]>>
       <axis pos=<'time' in 'air.mon.ltm.nc'  float[12]>>>
   data=<'air' in 'air.mon.ltm.nc'  sfloat[144, 73, 17, 12]>>
irb(main):002:0> contour  temp.cut('level'=>925)
 *** WARNING (STSWTR) ***  WORKSTA
=> nil
irb(main):003:0>
```



演算例：

teddy = temp – temp.mean(“lon”)

（経度平均を引く。次元の対応は自動判断）

tfc = temp.fft(nil, 0,2)

（1次元目(0)および3次元目(2)に関するフーリエ変換. nil→forward。座標軸は波数軸に。単位も変換。）

さらに演算例

スタートアップファイルを用いた別表記だと
`u = gpopen("u.nc/U")`

```
u = GPhys::IO.open("u.nc","U")
v = GPhys::IO.open("v.ctl","V")
uv = u * v
outfl = NetCDF.create("out.nc")
GPhys::IO.write(outfl, uv)
```

← in NetCDF [m/s]
← in GrADS [m/s]
← result on memory [m^2s^{-2}]
← 出力ファイル
← 出力（座標も一緒に）

経度,緯度，高度，時刻の4次元データより経度,時間に関するスペクトルを求める．（前処理後処理いろいろ．メソッドチェーンで）

```
sp = u.detrend(3).cos_taper(3).
     fft(false,0,3).abs**2
pw = sp.rawspect2powerspect(0,3).
     spect_zero_centering(0).
     spect_one_sided(3)
```

GPhysのその他の特徴

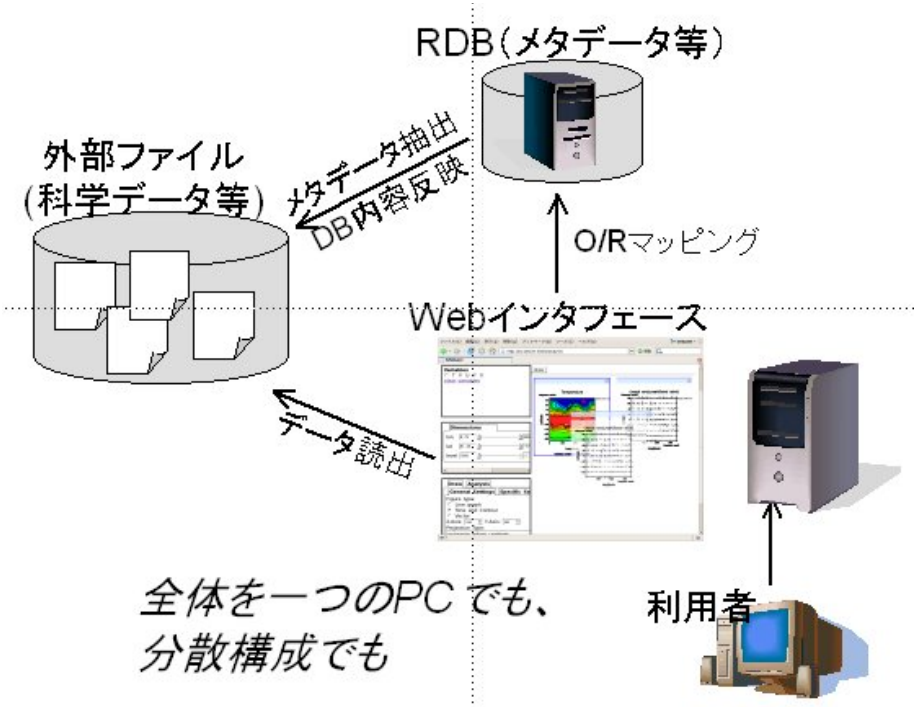
- 遅延評価
  - 必要になるまでデータは読まない／コピーしない．例：サブセット切り出しは対応写像だけをバーチャルに
- 大きな実データを無理なく扱う仕組み
  - 処理を自動分割するイテレータのサポートなど
- 演算時に単位を自動更新
- 付属ライブラリ
  - すばやく可視化できる描画ライブラリGGraph
    - クイックルックから論文用の凝った図まで（手数は凝り方に応じて。凝り出すと急に難しくなるギャップなしに）
  - データ解析ライブラリGAnalysis（気象学用などいろいろ）
  - 簡単なデータ解析や描画用の実行コマンド群

科研費特定領域 情報爆発IT基盤
2005年発足。翌年からの研究公募開始

GPhysの応用：Webベースのデータサーバ構築ツールGfdnavi（2007-）

- Ruby on Railsベース
- データベース（データ＆メタデータ）
- 多彩な検索
- 解析・可視化
- 得られた知見を文書化して登録できる（根拠となる解析可視化の再現スクリプト登録可）
- 現在開発中断中: Ruby on Railsバージョン対応問題

Gfdnaviの機能



- 指定されたフォルダの下を全スキャン

→ 見つかった数値データ、画像をフォルダ構造ごとデータベース化

- 利用者はWebブラウザでアクセス
- 個人のPCで手軽に使えるデータ解析ツールであり、同じものがデータ公開サイト構築にも使える

昨年度の飛躍：Gfdnavi利用で得られる知見の文書化＆DB化サポート

- Gfdnaviで行った可視化等をもとに文書を作成

→ 可視化再現スクリプト、元データへのリンクとともにDB – **応用性大**

利用例：共同研究プラットフォーム（共同作業や意思疎通の補助，文書アーカイブ）、データ公開サイトにおける情報発信(PR)、研究ノートなど多様

解析内容再現＆拡張機能 – 検証性の実現

まとめ

- オブジェクト指向言語を使うことでファイル形式に依らない統一的な入出力と，データハンドリングを実現
- Rubyを使うことでオープンソースの様々な枠組みが利用可能
  - Webベースのデータサーバー（DB, 解析可視化，知見文書蓄積）構築ツール Gfdnavi
  - ドキュメンテーション(RDoc)，テストフレームワーク，etc.
  - Cでポータブルな拡張→伝統的資源の拡張

展望

- GPhys（解析可視化ツール）
  - 着実な発展・増強が望まれる(inclドキュメント類)

- Gfdnavi（データ＆知見サーバ）
  - Gfdnavi：先進的・包括的な実験であった
  - 電脳倶楽部の野望の実現に，様々なGfdnaviのようなものが役立つのでは？： 構想から知的挑戦
    - 実験整理，検証できる知見アーカイブ
    - 共通基盤ライブラリプラットフォーム（テスト(incl解析)の実行環境，アーカイブ(DB)）
    - インテラクティブな，探究できる教科書
    - …
- 余談： *check out.. IRuby*