Ruby/GSL

常定　芳基
Yoshiki Tsunesada
東京工業大学

第1回　電脳 Ruby ワークショップ
15.Mar.2002

Ruby/GSLとは？

- GSLのための Ruby インターフェース

GSLとは？

- GNU Scientific Library
- Cにおける数値計算のためのライブラリ
  featuring
  - ベクトル、行列
  - 線形代数計算、固有値問題
  - 数値積分
  - 特殊関数
  - FFT (高速フーリエ変換)
  - 乱数生成, ...

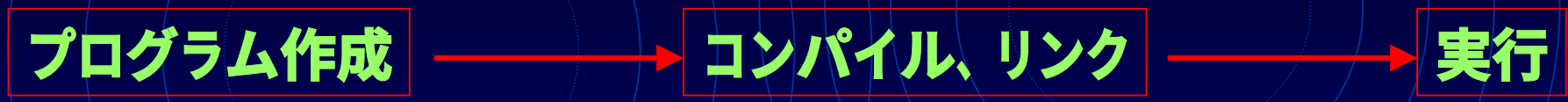
なぜGSL？

- C である
- 基本的データ構造が用意されている
  (as gsl_vector, gsl_matrix, . . .)
- フリーである

★ 他のC用数値計算ライブラリ

- NRC (Numerical Recipes in C)
  - ベクトル・行列をうまく扱う
    double* vector, double** matrix
  - フリーではない。
  - 本が出ていて詳しい。

GSLプログラミング in C



- メモリ確保（構造体生成）
- データ入出力
- 計算
- データ入出力
- メモリ開放

```
% gcc -o xxx x.c -lgsl -lgslcblas -lm % ./xxx
```

例：連立方程式 $Ax = b$ を解く

```
#include <stdio.h>
#include <gsl/gsl_linalg.h>
int main ()
{
  double a_data[] = { 0.18, 0.60, 0.57, 0.96,
                      0.41, 0.24, 0.99, 0.58,
                      0.14, 0.30, 0.97, 0.66,
                      0.51, 0.13, 0.19, 0.85 };
  double b_data[] = { 1.0, 2.0, 3.0, 4.0 };
  gsl_vector *x = gsl_vector_alloc (4);
  gsl_matrix_view m  = gsl_matrix_view_array(a_data, 4, 4);
  gsl_vector_view b = gsl_vector_view_array(b_data, 4);
  int s; gsl_permutation * p = gsl_permutation_alloc (4);

  gsl_linalg_LU_decomp (&m.matrix, p, &s);
  gsl_linalg_LU_solve (&m.matrix, p, &b.vector, x);
  gsl_vector_fprintf(stdout, x, "%g");
  gsl_permutation_free (p);
  return 0;
}
```

行列

右辺のベクトル

解ベクトル

作業領域

LU分解

方程式を解く

結果出力：ベクトル x

メモリ開放

そしてコンパイル、、、

- たったこれだけで連立方程式が解けてしまう！
  すごいぞ GSL!
- やけにまわりくどい、タイプ量が多い、
  コンパイルが面倒、、、

楽をするには？

- 構造体メモリの確保
- データの与え方

← 簡単にしたい
メモリ確保とデータ初期化を同時に

- 作業領域の確保

← やりたくない

- メモリ開放

← やりたくない

Ruby/GSLの基本概念

- GSLの構造体 → Rubyオブジェクトにラップ
  (対応するクラスを定義)
- GSLの構造体に対して何かする関数
  → オブジェクトのメソッドとして実装
- メモリ確保、構造体生成
  → newメソッドなどによってオブジェクト生成
  使い慣れたクラスから.to_xxx
- メモリ開放
  → Ruby GC!

★ 面倒なことはコンピュータがやれ
→ GSLをRubyの哲学に基づいて再構成

C/GSL と Ruby/GSL

C/GSL

Cプログラム作成 → コンパイル、リンク → 実行

```
% gcc -o xxx x.c -lgsl -lgslcblas -lm
% ./xxx
```

- メモリ確保（構造体生成）
- データ入出力
- 計算 （関数）
- メモリ開放

Ruby/GSL

Rubyプログラム作成 → 実行

```
% ./xxx.rb
```

- オブジェクト生成
- データ入出力
- 計算 （メソッド）
- メモリ開放は Ruby GC

Ruby/GSL で連立方程式を解く

```
#!/usr/bin/ruby
# 拡張ライブラリ gsl.so をロード
require 'gsl'

# 行列をクラス GSL_Matrix として実現
m = GSL_Matrix.new([0.18, 0.60, 0.57, 0.96],
                   [0.41, 0.24, 0.99, 0.58],
                   [0.14, 0.30, 0.97, 0.66],
                   [0.51, 0.13, 0.19, 0.85])
# 右辺のベクトル: to_gv は配列を GSL_Vector にするメソッド
b = [1, 2, 3, 4].to_gv
# LU分解:lu は分解された行列、p は置換情報が入る。
lu, p = m.LU_decomp
# LU分解した行列を使って連立方程式を解く。解はベクトル x に。
x = lu.LU_solve(p, b)
p x
```

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b},\ A = [m]$$

m, b から一気に x を求めるメソッドを作ることはもちろん可能。

乱数

```
#!/usr/bin/ruby
require 'gsl'

# 乱数オブジェクト
r = GSL::Rng.new
10.times {          # 10回やれ
  # 一様乱数
  p r.uniform
}
```

C では、、、

```
#include <stdio.h>
#include <gsl/gsl_rng.h>

int main () {
  int i;
  gsl_rng * r;          /* 乱数発生器の構造体 */
  const gsl_rng_type * T = gsl_rng_default;
  gsl_rng_env_setup();
  r = gsl_rng_alloc (T); /* 乱数生成器の初期化 */
  for (i = 0; i < 10; i++) {
    printf("%f¥n", gsl_rng_uniform(r));
  }
  return 0;
}
```

そしてコンパイル。

数値積分

```
# 被積分関数をクラス GSL_Function で定義
f = GSL_Function.new{ |x|
  exp(-x*x)              ← exp(−x²)
}
# オブジェクト f に積分用メソッド integration_qng を起動
# 引数は積分の下端、上端、絶対精度、相対精度
# 戻り値は [積分値、誤差、関数値の評価回数、積分関数の返したステータス]
#     を要素とする配列
ans = f.integration_qng(-10.0, 10.0, 0.0, 1.0e-7)
p ans
```

出力: [1.772453851, 1.967820304e-14, 87, 0]

$\sqrt{\pi}$

統計

```
# 配列データを GSL_Vector に
v = [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10].to_gv
p v.stats_mean          # 平均
p v.stats_variance      # 分散
p v.stats_sd            # 標準偏差
p v.max                 # 最大値
p v.min_index           # 最小値のインデックス
```

現在までの進行状況

- ベクトル、行列
- 線形代数、固有値問題
- 数値積分
- 統計、ヒストグラム
- 特殊関数
- ソート
- 乱数

Ruby/GSL の今後

- GSL の機能の網羅（？）
  - ODE
  - Nonlinear Least-Square Fitting
  - Interpolation
- ラッパーの自動生成 (SWIG)
- Arno Erpenbeck 氏との collaboration
  （もう1つの GSL の Ruby 化）
- フロントエンドプログラムを作るか？
  - 例えば octave, MaTX のような
  - irb との親和性を高める
- ドキュメント（！）