第二回 研究プログラミング WINGS-ABC チュートリアル

登壇者：片岡麻輝、関森祐樹、堀口修平

2021年10月23日（土）17：00-19：00

登壇者紹介

片岡麻輝　総合文化研究科広域科学専攻、修士一年。WINGS-ABC三期生。大泉研究室にて、計算神経科学および理論神経科学の研究を行っている。現在はシミュレーションベースでの研究テーマに取り組んでいる。株式会社ACESで機械学習アルゴリズムの開発にも従事。

関森祐樹　海洋技術環境学専攻、修士二年。WINGS-ABC二期生。生産技術研究所2部、巻研究室で、複数の海中ロボットシステムの研究をしている。複数の海中ロボットシステムを可能とする、基礎的なシステム設計や情報処理アルゴリズムを検証するために、ソフトウエアを作成している。株式会社FullDepthで水中ロボットの制御研究開発にも従事。

堀口修平　情報理工学系研究科数理情報学専攻、博士一年。WINGS-ABC一期生。生産技術研究所の小林徹也研究室で、免疫系の理論研究をしている。数理モデルのシミュレーションのほか、Webアプリ・ロボット・生物画像処理や機械学習アルゴリズムの開発でプログラミングを行う。

研究プログラミングチュートリアル　概要

研究現場のプログラミングで起こりうる問題をスキット（寸劇）形式で紹介し、それぞれについて選択問題と解説を行う形式で進行します。扱うテーマは以下の通りです。最後に、皆さんと研究プログラミングについて一緒に考える、ディスカッションの時間を設けてます。

第一回（情報収集と共有）

- コードの共有
- 環境構築
- パラメータ管理
- バージョン管理

第二回（信頼性と再現性の担保）

- コードの読みやすさ
- Linterと型チェック
- テスト
- 再現性

用語集

コード:コンピュータに解釈や実行させること目的として命令やデータ

プログラム:コンピュータへの命令や処理が記載されたもの

スクリプト:ソースコードで即座に実行できるもの

ソフトウエア:コンピュータの物理的な部分(ハード)の総称

アプリケーションソフトウエア(アプリケーション):オペレーティングシステム(OS)上で動作するソフトウエア

リポジトリ：アプリケーション開発で、システムを構成するデータやプログラムの情報を収納したデータベース

ライブラリ：ある特定の昨日を持ったプログラムを他のプログラムから引用しできるように部品化し、それらを集めてファイルに収納したもの

モジュール：ある機能を実現する、ひとまとまりのプログラム機能や要素

クラス：オブジェクトを生成するための設計図や雛形

シンタックス：プログラミング言語の構文や文法

フレームワーク：アプリケーションなどの実装に必要な機能や定型コードをライブラリとして事前に用意したもの

プラットフォーム：アプリケーションでは、ミドルウエア、ライブラリ、言語処理系（ランタイム）等のこと

バージョン：同名プログラムの新旧を区別する、番号や符号

参考文献

Boswell, D., Foucher, T., & Kado, M. (2012). リーダブルコード より良いコードを書くためのシンプルで実践的なテクニック. (角 征典, Trans.). オライリージャパン.

Cormen, T. H., & Leiserson, C. E. (2009). Introduction to algorithms (3rd ed.). The MIT Press.

Dutta, S., Legunsen, O., Huang, Z., & Misailovic, S. (2018). Testing probabilistic programming systems. Proceedings of the 2018 26th ACM Joint Meeting on European Software Engineering Conference and Symposium on the Foundations of Software Engineering. https://doi.org/10.1145/3236024.3236057

Lubanovic, B., Suzuki, H., & Nagao, T. (2015). 入門 Python 3. オライリージャパン.

Microsoft. (2016, April 14). Developing inside a container using Visual studio code remote development. RSS. Retrieved October 19, 2021, from https://code.visualstudio.com/docs/remote/containers.

Pressman, R. S. (2010). Software engineering: A practitioner's approach (7th ed.). McGraw-Hill Higher Education.

SHIFT. コンポーネント（単体、ユニット）テストとは？手法などを例で紹介. *ソフトウェアテストのSHIFT*. Retrieved October 20, 2021, from https://service.shiftinc.jp/column/3636/.

Software Freedom Conservancy. (n.d.). git. Git. Retrieved October 19, 2021, from https://git-scm.com/.

van Rossum, G., Warsaw, B., & Coghlan, N. (2014). Python コードのスタイルガイド. pep8-ja. Retrieved October 19, 2021, from https://pep8-ja.readthedocs.io/ja/latest/.

呉 珍詰. (2020). 初心者のためのコンテナ入門教室. Think IT（シンクイット）. Retrieved October 19, 2021, from https://thinkit.co.jp/series/9490.

湊川 あい, & DQNEO. (2017). わかばちゃんと学ぶ Git使い方入門. シーアンドアール研究所.

河野 晋策 . あなたの生産性を向上させるJupyter Notebook Tips. リクルート メンバーズブログ. Retrieved October 20, 2021, from https://blog.recruit.co.jp/rtc/2018/10/16/jupyter_notebook_tips/.

チュートリアル用Github

WINGS-ABC-programming-tutorial/mlflow-demo

第二回
研究用ソフトの信頼性と再現性の担保

登場人物

片岡：主人公のM1大学院生

堀口：先輩

関森：教授

（この物語はフィクションです。実際の人物・団体とは一切関係ありません。）

第一回のあらすじ

神経科学分野の研究室に入室したM1の片岡は、神経回路モデルにダイナミクスと情報処理の関係を研究するために、シミュレーションプログラムを作成している。先輩の堀口にプログラムを共有してもらい、シミュレーションを使うための環境構築をした。研究を進める準備が整ったところで、パラメータを管理しながら、モデルをシミュレーションした。片岡は、シミュレーションプログラムを、他のメンバーと共有できるよう、バージョン管理を始めた。

スキット5:「コードの読みやすさ」

あらすじ

M1片岡が入学からしばらく経ち、堀口先輩の神経モデルもわかるようになってきた。片岡はこれまでの知見に基づいて新しいモデルを考案した。ここからは自分で考案したモデルをコードに落とし込んでいく作業が必要になるが、できるだけトラブル等の少ないコーディングを行っていきたい、と片岡は思っている。

（この物語はフィクションです。実際の人物・団体とは一切関係ありません。）

問5:「コードの読みやすさ」

以下のうちプログラムを書く上でどれが一番大事でしょうか

1. 高速に動作するプログラムを早くつくること
2. コードを短くすること
3. 誰が見たとしても最短時間で理解できるように書くこと

解答と解説5:「コードの読みやすさ」

1. 高速に動作するプログラムを早くつくること
2. コードを短くすること
3. 誰が見たとしても最短時間で理解できるように書くこと

意図したとおりに動作することがまずは最も重要でしょう。1のように高速に動作すること、素早く書くことは大事ですが後回しで良いです。

もちろん冗長なプログラムはだめですが、2のように短くすればよいというわけではありません。

3は一見どうでも良いように思えますが、他人が理解しにくいものは3ヶ月後の自分も理解に苦しむでしょう。また自分が深く理解できていないから理解しにくいものを書いてしまうことも多いです。理解できていないと想像していなかったバグを生む原因となってしまいます。

良い名前を選ぶ

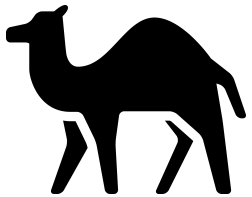
変数名を見て何をするのかがわかるようにする

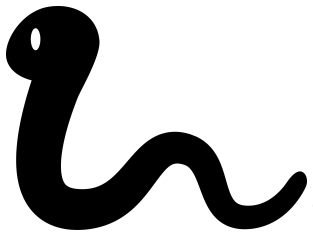
- ブール値の変数には先頭にisやhasをつける
- 汎用性の高い名前・見分けにくい文字・省略形はなるべく避ける

CamelCase　クラス名

snake_case　変数名　関数名

UPPERCASE　定数





コメント(#)とdocstring(""")

コメントの目的は、書き手の意図を読み手に知らせること
自明なコメントはかえって読みづらい

関数やクラスの説明ではdocstringを用いる

関数の例であれば

- 関数の概要
- 引数の型と説明
- 戻り値の型と説明

を明記する。例：Numpyスタイル

```
def run_simulation(
    seed: int = 0, x0: float = 10, sigma: float = 0.1
) -> None:
    """
    ブラウン運動のシミュレーション

    Parameters
    ----------
    seed: int
        ランダムシード
    x0: float
        初期値
    sigma: float
        ノイズの強さ
    """
    print("seed:", seed, "x0:", x0, "sigma:", sigma)
    # 乱数シードを固定する
    rng = np.random.default_rng(seed)
    # mlflowのexperiment nameを設定する
```

コーディング規約

Pythonのプログラムを書くときのルール(コーディング規約)を決めて一貫性をもたせると読みやすい

例：PEP8 https://pep8-ja.readthedocs.io/ja/latest/

規約を気にしすぎるのも良くない

他人のコードを読んでみよう

自動で規約チェック・修正してくれるツール（Linter, コード整形）を活用しよう

スキット6:「Linterと型チェック」

あらすじ

コードを書いていく中、片岡は、プログラム実装を補助する、様々なツールが存在することを知った。どうやらプログラミングの研究の多い先輩の中にはVS Codeというアプリを使う人が多いみたいなので、自分も使ってみることにする。

EXPLORER

PROGRAMMING_TUTORIAL [DE...
- .devcontainer
- .mypy_cache
- .pytest_cache
- mlflow
  - mlruns
  - simulation.py 8, M
- .gitignore
- requirements.txt

OUTLINE

TIMELINE

requirements.txt | simulation.py 8, M

mlflow > simulation.py > run_simulation

```
9
10  def run_simulation(seed, x0, sigma):
11      """
12      ブラウ
13
14      Para
15      ----
16      seed:
17
18      x0:
19
20      sigm
21
22      """
23          print("seed:", seed, "x0:", x0, "sigma:", sigma)
24      rng = np.random.default_rng(seed)
25      with mlflow.start_run():
26          mlflow.log_params({
27              "seed": seed,
28              "x0": x0,
29              "sigma": sigma,
30          })
31          x = x0
32          for epoch in range(100):
```

```
(function) print: (*values: object, sep: str | None = ..., end:
str | None = ..., file: SupportsWrite[str] | None = ..., flush:
bool = ...) -> None

print(value, ..., sep=' ', end='\n', file=sys.stdout, flush=False)

Prints the values to a stream, or to sys.stdout by default. Optional keyword
arguments:
file: a file-like object (stream); defaults to the current sys.stdout.
sep: string inserted between values, default a space.
end: string appended after the last value, default a newline.
flush: whether to forcibly flush the stream.
```

（この物語はフィクションです。実際の人物・団体とは一切関係ありません。）

問6：「Linterと型チェック」

Linter 使ってシンタックスエラー（文法的な誤り）を解消したから、プログラムは問題なく実行するだろう。何が問題でしょう？

1. インデントや改行のずれは解消されない
2. データ型(float, int, str, ndarrayなど)が間違っていても見逃される
3. 変数が定義されてなくても見逃される

解答と解説6:「Linterと型チェック」

1. インデントや改行のずれは解消されない
2. データ型が間違っていても見逃される
3. 変数が定義されてなくても見逃される

Linterはシンタックスエラーを自動で解消してくれる、素晴らしいツールであるので、是非セットアップして欲しい。ただし、データフローはコードを実行するまで検証されないため、テストコードを用いてデータ型を確認する必要がある。

VSCodeエディタは、Linterを拡張機能で簡単にインストールして使えて、お勧めです。

データ型

Pythonでは、プログラムを実行するまでデータ型とデータフローがチェックされない

- データ型
  - int, float, char などの決まったデータフォーマットから、ndarray, str などのデータ列、更には sturct などの色々な要素が組み合わさったデータ型がある
  - Pythonはデータ型を明記しないと、自動で解釈してしまうので、注意が必要
  - 基礎知識を知りたい方は、Cormen, T. H., & Leiserson, C. E.の「Introduction to algorithms」を参考にするとよい
- データフロー
  - プログラムやソフトウェアなどで変数などのデータを受け渡しをするときに、データ型が合っていないとエラーが発生する
  - データフローは、Pythonのようなスクリプト言語だけでなく、コンパイル言語でも、要チェック

型アノテーションと型チェック

Pythonのソースコード上でデータ型を明記してあげる(Python3.5以降の機能)ことで、データ型やデータフローが正しいかどうかを部分的にチェックするツールも存在する。

例えば、mypy が有名で、VSCodeやPyCharmなどで自動でmypyの型チェックを実行する設定にすると便利。

```
def run_simulation(
    seed: int = 0, x0: float = 10, sigma: float = 0.1
) -> None:
    """
    ブラウン運動のシミュレーション
```

参考:

icoxfog417 Pythonではじまる、型のある世界, Qiita

澁川喜規 2021年版Pythonの型ヒントの書き方 (for Python 3.9)

スキット7:「テスト」

あらすじ

片岡は、Linterではシンタックスなどしかデバッグできないことや、データ型が正しく実装されている必要があることを学んだ。加えて、これらをデバッグしても、意図した通りのアルゴリズムでプログラムが動くことは保証できないことにも気づく。

（この物語はフィクションです。実際の人物・団体とは一切関係ありません。）

問7:「テスト」

テストを用いて可能な限り想定通りの動作をするプログラムを短い時間で作ることを目的にした場合、クラス、関数などへの分割は次のどの方針を意識するのが適切でしょうか？（どれが一番理想に近いでしょうか？）

1. 一部の繰り返し現れる処理だけを切り出してモジュールにする
2. 意味的な区切りのある部分はすべて異なるモジュールとして切り出す
3. 処理が煩雑になってきた場合に限り、見やすいようにモジュール分割する

解答と解説7:「テスト」

1. 一部の繰り返し現れる処理だけを切り出してモジュールにする
2. 意味的な区切りのある部分はすべて異なるモジュールとして切り出す
3. 処理が煩雑になってきた場合に限り、見やすいようにモジュール分割する

テストのうち、もっとも単純でよく使われるものに単体テストがあります。これは、関数などモジュール単位ごとに、決められた入力(引数)に対して想定通りの出力が返されるかどうかを検証するものです。処理の意味(〇〇指数を計算する、xxのデータを△△の形式に変換する)ごとに細かくモジュールを分割しておけば、単体テストを用いてバグの原因箇所を素早く特定することができます。テストを書くのは面倒ですが、エラーに対して原因箇所の特定→修正→確認…を繰り返せば、それ以上に手間のかかる作業になるケースがほとんどです。

ユニットテストってどんなもの？

ユニットテストのPythonでの実装例

- 各関数に関して、十分なケースでのテストを実行
- 振る舞いの性質が変化する入力の境目で、ちゃんと振る舞いが変わることを確認するのが大事
- 実装自体よりも先に、わかっている性質の範囲内でテストケースを記述しておけば、“受動的なデバッグ”の手間が省ける！

```python
import unittest

import numpy as np

import main


class TestMain(unittest.TestCase):
    def test_sum_values_scalar(self):
        self.assertEqual(5, main.sum_values(2, 3))

    def test_sum_values_vector(self):
        a = np.array([1, 2, 3])
        b = np.array([4, 5, 6])
        ret = main.sum_values(a, b)
        self.assertEqual(5, ret[0])
        self.assertEqual(7, ret[1])
        self.assertEqual(9, ret[2])

    def test_is_positive_all(self):
        all_positive = np.array([1, 2, 3])
        all_negative = np.array([-1, -2, -3])
        self.assertTrue(main.is_positive(all_positive))
        self.assertFalse(main.is_positive(all_negative))

    def test_is_positive_any(self):
        one_positive = np.array([1, -2, -3])
        self.assertFalse(main.is_positive(one_positive))

    def test_absolute_scalar(self):
        self.assertEqual(1, main.absolute(1))
        self.assertEqual(1, main.absolute(-1))
        self.assertEqual(0, main.absolute(0))

    def test_absolute_vector(self):
        self.assertEqual(5, main.absolute(np.array([4, 3])))
        self.assertEqual(5, main.absolute(np.array([-4, -3])))
```

スキット8:「再現性」

あらすじ

片岡が研究室に配属されてから9ヶ月が経った。かなり研究も進み、来年度の学会投稿に向けて、研究室内で進捗を共有することになった。
他の研究者がシミュレーションや計算の結果をハンズオン的に触れられる状態を作ると良い、と片岡は教授にアドバイスを貰った。将来的には、インターネット上で公開し、論文や学会の発表でも広く検証してもらえるようにしたい、と教授は考えている。片岡は、Jupyter Notebookを介して計算方法などを共有したいが、どのように書き進めていくのが良いかわからない。

（この物語はフィクションです。実際の人物・団体とは一切関係ありません。）

問8:「再現性」

実験やデータ解析を多くの人に再現してもらえるように、Jupyter notebookで処理の結果を公開することにしました。より再現性の高い共有のためには、次のどの方針でnotebookを書くのが適切でしょうか？

1. 処理をすべてひとつのnotebookファイルにまとめて書く
2. 計算自体は他のスクリプト等で完結させておいて、notebook内では出力データの描画や表示のみを行う
3. 複雑で時間のかかる計算は別のスクリプトに分けて、比較的時間のかからない計算処理と結果の表示だけをnotebookに残す

解答と解説8:「再現性」

1. 処理をすべてひとつの notebookファイルにまとめて書く
2. 計算自体は他のスクリプト等で完結させておいて、 notebook内では出力データの描画や表示のみを行う
3. 複雑で時間のかかる計算は別のスクリプトに分けて、比較的時間のかからない計算処理と結果の表示だけをnotebookに残す

実際には状況に依存して適切な選択は変わりますが、多くの標準的なシチュエーションでは、時間のかからない処理だけをnotebookに残すのが良いでしょう。すべての計算処理を別スクリプトに分けると、もはやnotebookを利用する意味がなくなりますが、すべてnotebookにまとめすぎると、処理がスクリプトで実行した時よりも重くなってしまったり、巻き戻っての変数の変化などに気づきづらいといった状況が生じ得ます。なるべく単純で重要な処理はnotebookに残し、時間のかかりすぎる部分はスクリプトに分けて別で実行できるようにしましょう。さらに、時間のかかる部分の計算結果を何らかのファイルに書き出して一緒に公開するとなお良いかもしれません。

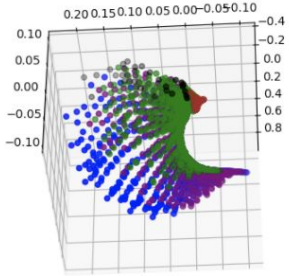
よいnotebook、よくないnotebook

In [ ]:
```
import pickle
with open('output.pickle', 'rb') as f:
    outputs = pickle.load(f)
```

In [15]:
```
isomap = manifold.Isomap(n_neighbors=10, n_components=3)
isomap = isomap_fc7.fit_transform(outputs)
```

In [16]:
```
%matplotlib notebook

fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
for group in group_list:
    target_pts = isomap[group_names == group]
    ax.scatter(target_pts[:, 0], target_pts[:, 1], target_pts[:, 2], color=group_color)
plt.show()
```

<IPython.core.display.Javascript object>



In [13]:
```
_all_outputs = []
for i in range(0, len(images)):
    _all_outputs.append(model.get_intrep(img_tensors[i].unsqueeze(0))[1])

all_outputs = {}
for _out in _all_outputs:
    for k, v in _out.items():
        if k not in all_outputs:
            all_outputs[k] = [v]
        else:
            all_outputs[k].append(v)
for k in all_outputs.keys():
    all_outputs[k] = torch.stack(all_outputs[k])
```

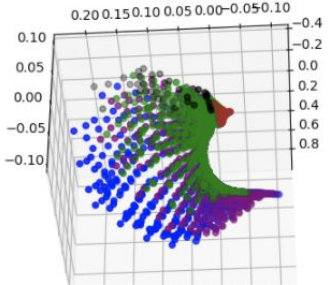
In [14]:
```
output = all_outputs['output_layer'].squeeze(1).numpy()
```

In [ ]:
```

```

In [15]:
```
isomap = manifold.Isomap(n_neighbors=10, n_components=3)
isomap = isomap_fc7.fit_transform(fc7)
```

In [16]:
```
%matplotlib notebook

fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
for group in group_list:
    target_pts = isomap[group_names == group]
    ax.scatter(target_pts[:, 0], target_pts[:, 1], target_pts[:, 2], color=group_color)
plt.show()
```

<IPython.core.display.Javascript object>



ディスカッション（10分）

今まで作成してきたプログラムを振り返り、チュートリアルで紹介された知識/テクニックと照らし合わせて、改善できそうなポイントを考えてみましょう。

第二回のまとめ

1. コードの読みやすさ
   - 誰が見ても理解できるコードを心がける
   - 変数名の付け方、コメントの書き方、コーディング規約などは、一貫性を持たせる
2. Linterと型
   - Linterを活用してシンタックスエラーを減らす
   - データ型が正しく設定されているか確認する
3. テスト
   - 単体テストをつくるだけでも、デバッグの労力を大幅に減らすことができる
   - プログラムは適度に分解して、テストがしやすいように作成することを心がける
4. 再現性
   - 計算処理のすべてをnotebookにまとめてはならない
   - 時間のかかる処理はスクリプト、単純な処理は notebookを使う