

Informatika pro moderní fyziky (1) základy automatizace; jednoduché zpracování a vizualizace dat

František HAVLŮJ

e-mail: haf@ujv.cz

ÚJV Řež

oddělení Reaktorové fyziky a podpory palivového cyklu

zimní semestr 2022/2023

21. září 2022

1 Úvod

- Syllabus semináře
- K čemu je počítač?
- Problém č. 1: vykreslování dat z detektoru
- Problém č. 2: jehla v kupce sena
- Problém č. 3: zmatek v laborce
- Problém č. 4: mnoho výpočtů, inženýrova smrt

2 Ruční a poloautomatická řešení

- Problém č. 1: rozbor situace
- Řešení
- Zhodnocení
- Problém č. 2, 3, 4: jak na to?

3 Skriptovací jazyky

- Úvod do skriptování
- Úvod do jazyka Ruby
- První kroky s Ruby

Úvod

Ruční a poloautomatická řešení
Skriptovací jazyky

Sylabus semináře

K čemu je počítač?

Problém č. 1: vykreslování dat z detektoru

Problém č. 2: jehla v kupce sena

Problém č. 3: zmatek v laborce

Problém č. 4: mnoho výpočtů, inženýrova smrt

Obsah

1 Úvod

- Sylabus semináře
- K čemu je počítač?
- Problém č. 1: vykreslování dat z detektoru
- Problém č. 2: jehla v kupce sena
- Problém č. 3: zmatek v laborce
- Problém č. 4: mnoho výpočtů, inženýrova smrt

2 Ruční a poloautomatická řešení

3 Skriptovací jazyky

Profil absolventa předmětu

- chápe počítač nikoli jako psací stroj anebo černou skříňku pro specializované aplikace, ale především jako flexibilní a vysoce univerzální nástroj pro každodenní úkoly ve zpracování dat, jejich prezentaci a tvorbě dokumentů
- orientuje se v moderních paradigmatěch praktické informatiky, programování na úrovni běžných skriptů je pro něj samozřejmostí a díky solidnímu přehledu je schopen se v daném problému zorientovat a vybrat si pro jeho řešení vhodný nástroj
- není nucen vykonávat mechanickou a nudnou činnost, ale úkoly řeší kreativně - raději si ad hoc vytvoří na míru šitý skript, který jej ochrání před lidskou chybou i frustrací z monotónnosti

Průběh výuky

- zadání praktické úlohy, jejíž vyřešení je motivací pro obsah lekce
- přednáška na probírané téma, poskytující jak teoretický základ, tak přehled konkrétních nástrojů a postupů
- samostatná práce na řešení daného problému
- společná diskuse nad jednotlivými řešeními a jejich zhodnocení

Organizačně

- středa 15:00-17:30 bez organizované přestávky (každý dle vlastních potřeb)
- předpokládá se aktivní účast (v uvozovkách povinná)
- v případě absence: vyžaduju po vás, abyste si **doplnili vše z lekce a měli hotové to, co ostatní** – lekce na sebe většinou navazují!
- těm, kdo celý semestr chodili, zadám v posledním týdnu před Vánoci zápočtovou úlohu

K čemu je počítač?

- počítače udělají cokoliv, pokud na to existuje postup
- pokud na něco existuje postup, není na to potřeba člověk
- existuje-li postup, existuje také algoritmus
- kdo má algoritmus, může napsat program



Proč se zabývat automatizací?

- mechanická práce je otravná
- program neudělá (náhodnou) chybu
- skript trvá stejně dlouho pro libovolný objem dat
- pokud je potřeba něco pozměnit nebo jen zpracování zopakovat, je ruční práce vepsí



Zadání

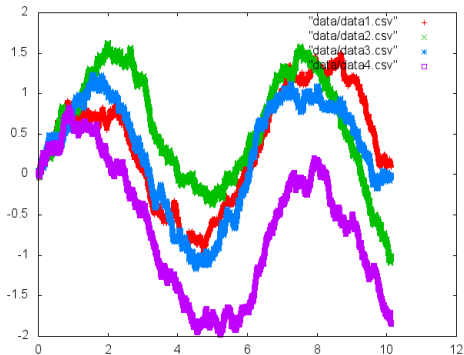
1

Na konci provozní směny je potřeba vyhodnotit signály ze čtyř detektorů a vykreslit je do grafu (signál v závislosti na čase). Data dostáváte v jednoduchém textovém souboru (dva sloupce, spousta řádků). Je potřeba vykreslit do jednoho grafu všechny čtyři detektory. Potíž je, že taková data přicházejí každý den - tento úkol je tedy potřeba řešit opakovaně.

S hvězdičkou

Počet detektorů je proměnný (1 až 9).

Příklad



Zadání

2

Adresář plný CSV souborů (stovky souborů) obsahuje data, která jsou záznamy signálů s lineární závislostí.

V pěti z nich jsou ale poruchy - data ležící zcela mimo přímku. Kde?

Úvod

Ruční a poloautomatická řešení
Skriptovací jazyky

Sylabus semináře

K čemu je počítač?

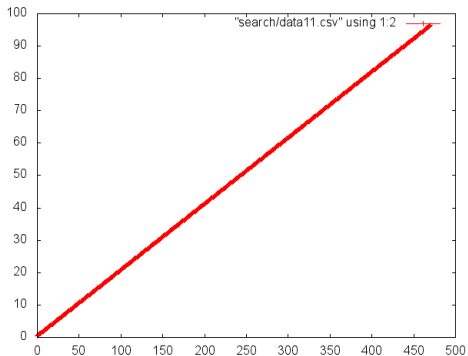
Problém č. 1: vykreslování dat z detektoru

Problém č. 2: jehla v kupce sena

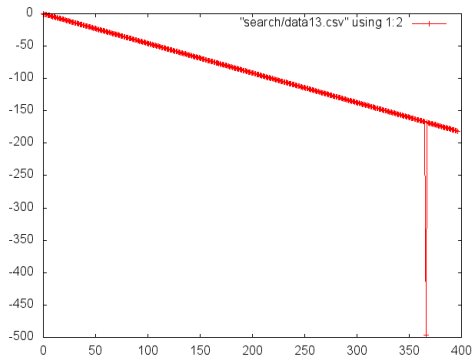
Problém č. 3: zmatek v laborce

Problém č. 4: mnoho výpočtů, inženýrova smrt

Příklad - dobrý signál



Příklad - špatný signál



Zadání

3

V jedné tabulce máme seznam vzorků půdy, jejich datum pořízení a místo odběru, v jiné změřenou aktivitu z laboratoře. To všechno musíme dostat dohromady a dopočítat se původní aktivity vzorků v době jejich odběru.

Do toho je potřeba výsledky nějak dostat do excelu. Navíc bychom se možná rádi trochu předvedli a vzorky a jejich aktivity vykreslili do mapy.

Zadání

4

Při přípravě základního kritického experimentu je pomocí MCNP potřeba najít kritickou polohu regulační tyče R2. Jak se tato poloha změní při změně polohy tyče R1?

Obsah

- 1 Úvod
- 2 **Ruční a poloautomatická řešení**
 - Problém č. 1: rozbor situace
 - Řešení
 - Zhodnocení
 - Problém č. 2, 3, 4: jak na to?
- 3 Skriptovací jazyky

Vstupní data

```
0.00000e+00 0.00000e+00  
1.00000e-04 1.01447e-03  
2.00000e-04 4.62446e-04  
3.00000e-04 6.92465e-04  
4.00000e-04 4.48142e-03  
5.00000e-04 6.95896e-03  
6.00000e-04 5.12501e-03  
7.00000e-04 2.62076e-03  
...
```

Formát CSV

- comma separated values
- zobecnělo ale jako libovolný formát po sloupcích uložených dat
- dobře se zpracovává, importuje do Excelu atd.

Klasické řešení (MS Excel)

- jaké všechny kroky je potřeba udělat?
- na který z provedených kroků byl potřeba člověk – co z toho by nemohl stejně dobře udělat počítač sám?
- jaké jsou výhody a nevýhody ručního řešení?
- jak by mělo takové automatické řešení fungovat?

Co by takové automatické řešení mohlo umět?

- načte z daného adresáře soubory se záznamy
- vykreslí graf a uloží ho do souboru
- soubor jednoznačně pojmenuje a zkopíruje na vhodné místo
- uživatel by neměl v ideálním případě dělat vůbec nic

Komponenty pro automatizaci

Funkční části

výkonné programy (např. kreslení grafů, generování tabulek/reportů, spouštění výpočtů) – předpokladem je možnost spouštět program v neinteraktivním (dávkovém) režimu

Komponenty pro automatizaci

Funkční části

výkonné programy (např. kreslení grafů, generování tabulek/reportů, spouštění výpočtů) – předpokladem je možnost spouštět program v neinteraktivním (dávkovém) režimu

Jak to slepit dohromady

dávkový soubor (BAT) nebo skript – je nutno vždy vhodně volit použité prostředky ve vztahu k jednoduchosti, požadavkům na funkce, přenositelnosti

Jak postupovat s automatickým řešením?

- 1 vykreslit graf s jedním detektorem

Jak postupovat s automatickým řešením?

- 1 vykreslit graf s jedním detektorem
- 2 se všemi detektory

Jak postupovat s automatickým řešením?

- 1 vykreslit graf s jedním detektorem
- 2 se všemi detektory
- 3 z příkazové řádky

Jak postupovat s automatickým řešením?

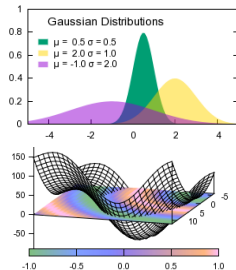
- 1 vykreslit graf s jedním detektorem
- 2 se všemi detektory
- 3 z příkazové řádky
- 4 z batch souboru

Jak postupovat s automatickým řešením?

- 1 vykreslit graf s jedním detektorem
- 2 se všemi detektory
- 3 z příkazové řádky
- 4 z batch souboru
- 5 se jménem adresáře jako parametrem

Gnuplot

- interaktivní i dávkový režim – ideální pro automatizaci
- slušně konfigurovatelné 2D i 3D grafy
- i bez nastavení funguje velmi přijatelně
- široká paleta výstupních formátů

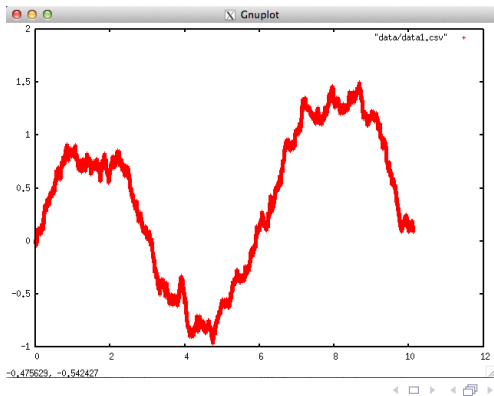


Vykreslení jednoho grafu v gnuplotu

```
gnuplot> plot "data1.csv"
```

Vykreslení jednoho grafu v gnuplotu

```
gnuplot> plot "data1.csv"
```

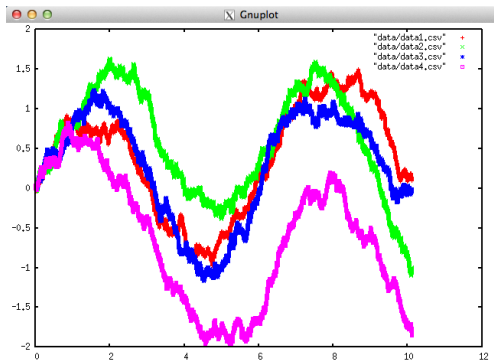


Vykreslení všech grafů v gnuplotu

```
gnuplot> plot "data1.csv", "data2.csv",  
             "data3.csv", "data4.csv"
```

Vykreslení všech grafů v gnuplotu

```
gnuplot> plot "data1.csv", "data2.csv",  
             "data3.csv", "data4.csv"
```

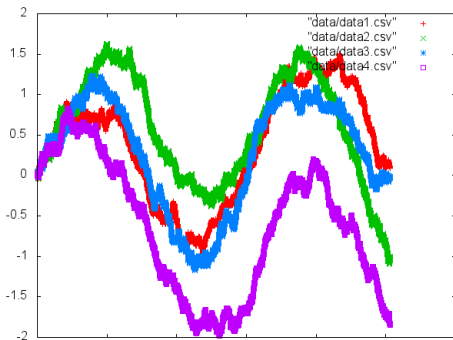


Dávkové použití

```
set terminal png
set output "plot4.png"
plot "data/data1.csv", "data/data2.csv", \
     "data/data3.csv", "data/data4.csv"
```


Dávkové použití

```
set terminal png  
set output "plot4.png"  
plot "data/data1.csv", "data/data2.csv", \  
      "data/data3.csv", "data/data4.csv"
```



BAT soubor (Windows)

Je pracné pokaždé vypisovat parametry na příkazovou řádku.
.BAT soubory ve Windows fungují jednoduše, prostě se do nich dá psát jako do terminálu a připravit si tak jednodušší skript.

```
"C:/Program Files/Gnuplot/bin/gnuplot.exe" plot.gp
```

(pozor na uvozovky kvůli mezeře v cestě. cestu upravte podle skutečnosti na svém počítači.)

Shell skript (MacOS, Linux)

Skript bude trochu jednodušší a velmi podobný:

```
gnuplot plot.gp
```

Uložte ho (konvence) s kocovkou `.sh`. Pozor, ještě je nutno jej změnit na spustitelný pomocí `chmod`, tedy pokud se jmenuje `plot.sh`, použijte:

```
chmod +x plot.sh
```

– to stačí udělat jednou, pak ho můžete libovolně editovat.
Skript se pak z terminálu spustí:

```
./plot.sh
```

BAT soubor s parametrem

Co takhle adresář pro každý den? Nemá smysl pokaždé ručně kopírovat vstup pro gnuplot a tak dále...

Stačí vědět, že BAT soubor může mít na příkazové řádce parametry. První parametr je uložen do proměnné %1 a to se nám bude hodit.

```
cd %1  
"C:/Program Files/Gnuplot/bin/gnuplot.exe" ../plot.gp  
cd ..
```

Opět alternativa pro shell skript

Proměnné se označují místo procenta dolarem, tj. \$1:

```
cd $1  
gnuplot ../plot.gp  
cd ..
```

BAT soubor s parametrem - vylepšení

Pokud si budeme chtít prohlédnout grafy, bude nutné vždy vlézt do adresáře a otevřít `plot.png`. Jde to ovšem vylepšit pomocí jednoduchého triku:

```
cd %1  
"C:/Program Files/Gnuplot/bin/gnuplot.exe" ../plot.gp  
copy plot.png ../%1.png  
cd ..
```

Totéž v shellu

```
cd $1  
gnuplot ../plot.gp  
cp plot.png ../$1.png  
cd ..
```

Jak moc jsme si pomohli?

- jeden skript místo excelovské anabáze
- máme znovupoužitelný nástroj – můžeme proces kdykoliv zopakovat
- nelze udělat žádnou “ruční chybu”
- skript můžeme dát kolegovi a ten má práci hotovou úplně zadarmo
- skript lze periodicky spouštět bez účasti uživatele, možnost např. zobrazovat na intranetu aktuální grafy atd.

Stačí nám to na řešení problému č. 2 a 3?

Zatím nevíme, jak:

- prohledat adresář a vygenerovat spoustu grafů
- vygenerovat vstupní soubory pro MCNP
- spustit hromadu MCNP výpočtů
- vytahat výsledky z MCNP výstupního souboru
- propojovat data z více tabulek (i když se to dá v excelu naučit)
- získávat a vykreslovat geografická data

Budeme potřebovat nějaký těžší kalibr.

Obsah

- 1 Úvod
- 2 Ruční a poloautomatická řešení
- 3 Skriptovací jazyky**
 - Úvod do skriptování
 - Úvod do jazyka Ruby
 - První kroky s Ruby

“klasické” programování – Pascal, C++

- napsat zdroják, zkompilovat, slinkovat ...
- ... muset řešit binárku, která někde funguje a někde ne ...
- ... moc práce!
- (i když výhody jsou zřejmé – rychlost, distribuce binárek místo zdrojáků, “uzavřené” prostředí)
- bylo by lepší mít někdy místo motorové pily sekeru

Interpretované jazyky / skripty

- textový vstupní soubor (zdrojový kód) + interpret
- vhodné pro aplikace bez vysokých nároků na systém
- nebo tam, kde je zásadní snížit nároky na vývoj
- tj. ideální pro jednoúčelové a krátkodobě žijící programy
- většinou “volnějš” pojetí programování, z čehož plyne například řádově elegantnější práce s textem

Vlastnosti skriptovacích jazyků

Výhody

- dokonalá přenositelnost (textové vstupní soubory)
- nic se nekompiluje
- většinou syntakticky úsporné

Vlastnosti skriptovacích jazyků

Výhody

- dokonalá přenositelnost (textové vstupní soubory)
- nic se nekompiluje
- většinou syntakticky úsporné

Nevýhody

- zdrojový kód je otevřený (ne vždy se to hodí)
- pomalé a paměťově náročné
- bez kontroly správnosti při kompilaci

Přehled hlavních jazyků

- BAT** – vhodné pouze pro to nejjednodušší použití; i když jsou k mání některé trochu složitější funkce, jejich použití je hodně neobratné a neefektivní
- BASH** – podstatně mocnější alternativa BAT souborů v prostředí Unixu; nepřiliš intuitivní syntaxe a absence náročnějších operací
- Perl** – kompaktní a efektní jazyk, který je všude nainstalovaný, ale nedá se (vůbec) číst a už i pole apod. jsou nekřesťansky obskurní
- Python** – velmi slušný jazyk, který snese i “vážnější” využití, ale za cenu trochu vyšší obtížnosti
- Ruby** – elixír síly a zázračná pilulka: intuitivní, snadný, všemocný, rozšířený a k tomu ryze objektový

Jazyk Ruby

- čistě objektový interpretovaný jazyk
- interprety existují pro širokou škálu platformem
- velmi elegantní syntaxe
- nevýhodou je stále ještě relativní pomalost
- aktuální verze 2.7 (rozumné minimum je 2.3.0, míň nebrat)

Ukázka Ruby (1)

Každý programátor tím začíná ...

```
puts "Hello world!"
```

Ukázka Ruby (1)

Každý programátor tím začíná ...

```
puts "Hello world!"
```

```
Hello world!
```

Ukázka Ruby (2)

Proměnné, `print` vs. `puts`, aritmetika

```
a = 4  
b = 5  
print "4 + 5 = "  
puts a + b
```

Ukázka Ruby (2)

Proměnné, `print` vs. `puts`, aritmetika

```
a = 4  
b = 5  
print "4 + 5 = "  
puts a + b
```

```
4 + 5 = 9
```

Ukázka Ruby (3)

In-line výrazy v řetězcích

```
a = 4  
b = 5  
puts "#{a} + #{b} = #{a+b}"
```

Ukázka Ruby (3)

In-line výrazy v řetězcích

```
a = 4  
b = 5  
puts "#{a} + #{b} = #{a+b}"
```

```
4 + 5 = 9
```

Důležitá vsuvka

Řetězec

"a"

Důležitá vsuvka

Řetězec

```
"a"
```

Proměnná

```
a
```


Důležitá vsuvka

Řetězec

```
"a"
```

Proměnná

```
a
```

Řetězec s proměnnou uvnitř

```
"#{a}"
```

Ukázka Ruby (4)

Rozsahy a cykly

```
(1..5).each do |i|  
  puts "#{i} * #{i} = #{i * i}"  
end
```

Ukázka Ruby (4)

Rozsahy a cykly

```
(1..5).each do |i|  
  puts "#{i} * #{i} = #{i * i}"  
end
```

```
1 * 1 = 1  
2 * 2 = 4  
3 * 3 = 9  
4 * 4 = 16  
5 * 5 = 25
```

Ukázka Ruby (4)

Pětkrát nic umožilo osla (opakování, ne cyklus)

```
5.times do  
  puts "nic"  
end
```

Ukázka Ruby (4)

Pětkrát nic umožřilo osla (opakování, ne cyklus)

```
5.times do  
  puts "nic"  
end
```

```
nic  
nic  
nic  
nic  
nic
```

IRb

Pro první ozkoušení (a i pro některé úkoly v praktickém životě) se hodí “příkazová řádka” Ruby, tzv. **Interactive Ruby** (IRb):

IRb

Pro první ozkoušení (a i pro některé úkoly v praktickém životě) se hodí “příkazová řádka” Ruby, tzv. **Interactive Ruby** (IRb):

```
1.9.2-p290 :001 > 2+2  
=> 4  
1.9.2-p290 :002 > a = 5  
=> 5  
1.9.2-p290 :003 > b = 6  
=> 6  
1.9.2-p290 :004 > a * b  
=> 30
```

Proměnné, výpis na terminál

V Ruby (jak je u skriptů zvykem) se proměnné nedeklarují:

```
a = 5  
a = a * a  
long_string = "loooooong string"
```


Proměnné, výpis na terminál

V Ruby (jak je u skriptů zvykem) se proměnné nedeklarují:

```
a = 5  
a = a * a  
long_string = "loooooong string"
```

Výpis se děje pomocí `print`, resp. `puts` (bez/s koncem řádku);
`#{...}` vkládá do řetězce libovolný výraz:

```
print a  
puts "a = #{a}"
```

Pole a hashe

Pole je seznam:

```
a = []  
a << 5  
a += [6]  
puts a.size
```

Pole a hashe

Pole je seznam:

```
a = []  
a << 5  
a += [6]  
puts a.size
```

Hash, neboli slovník či asociativní pole:

```
b = {}  
b[3] = 7  
b["foo"] = "bar"
```

Rozsahy a cykly

Rozsahy (ranges) - se dvěma tečkami včetně posledního elementu, se třemi bez něj

```
a = (1..5)
b = (1...5)
puts "yay!" if a.size == b.size + 1
```

Rozsahy a cykly

Rozsahy (ranges) - se dvěma tečkami včetně posledního elementu, se třemi bez něj

```
a = (1..5)
b = (1...5)
puts "yay!" if a.size == b.size + 1
```

Ruby nepoužívá klasický cyklus, ale iterátor (přes téměř cokoliv):

```
(1..5).each do |i|
  puts i * i
end
b = {}; b["key1"] = 6; b["key2"] = 8
b.each do |key, value|
  puts "#{key} => #{value}"
end
```

Práce s řetězci, include, split, sub

Řetězce v Ruby jsou neomezené délky (pár mega se tam určitě vejde) a dá se s nimi provádět ledacos.

```
s = "lazy dog"
if s.include?("lazy")
  puts "lazy!!!"
end
```

Práce s řetězci, include, split, sub

Řetězce v Ruby jsou neomezené délky (pár mega se tam určitě vejde) a dá se s nimi provádět ledacos.

```
s = "lazy dog"
if s.include?("lazy")
  puts "lazy!!!"
end
```

Rozdělit? Nahradit?

```
puts s.sub("lazy", "crazy")
a = s.split
puts "#{a[1]} #{a[0]}"
```

Načítání a zápis do souboru

Soubor a terminál, to je vlastně jedno:

```
File.open("animals.txt", "w") do |f|  
  f.puts "quick brown fox"  
end
```


Načítání a zápis do souboru

Soubor a terminál, to je vlastně jedno:

```
File.open("animals.txt", "w") do |f|  
  f.puts "quick brown fox"  
end
```

Nejjednodušší čtení je po řádcích:

```
IO.foreach("data.csv") do |line|  
  ...  
end
```

Práce s adresářem

Jak projít všechny soubory v adresáři? V Pascalu utrpení,
v Ruby iterátor:

```
Dir["*"].each do |filename|  
  puts filename  
end
```

Práce s adresářem

Jak projít všechny soubory v adresáři? V Pascalu utrpení,
v Ruby iterátor:

```
Dir["*"].each do |filename|  
  puts filename  
end
```

Lze použít podle očekávání libovolnou masku nebo cestu:

```
Dir["data/*.csv"].each do |filename|  
  IO.foreach(filename) do |line|  
    puts line  
  end  
end
```

Úvod
Ruční a poloautomatická řešení
Skriptovací jazyky

Úvod do skriptování
Úvod do jazyka Ruby
První kroky s Ruby

A to je vše, přátelé!

