

От автоматизации эксперимента к решению уравнений (Python и Wolfram Mathematica)

Факультет Физики НИУ ВШЭ, 2025

Аннотация

Навыки программирования в том или ином виде необходимы практически каждому современному ученому. В первой части курса мы рассмотрим задачи автоматизации эксперимента, общения с лабораторными приборами и работы с полученными данными с помощью языка программирования Python. Во второй части курса будут рассмотрены задачи численного и аналитического решения уравнений (в т.ч. решение задач методом размерности), взятия рядов и интегралов, построения качественных графиков и фитирования при помощи системы компьютерной алгебры Wolfram Mathematica.

Направления

- 03.03.02 Физика
- 04.03.01 Химия
- 06.03.01 Биология
- 05.03.02 География
- 01.03.01 Математика
- 01.03.02 Прикладная математика и информатика
- 01.03.04 Прикладная математика
- 09.03.01 Информатика и вычислительная техника
- 09.03.04 Программная инженерия
- 10.03.01 Информационная безопасность
- 11.03.02 Инфокоммуникационные технологии и системы связи

Разработчики курса

- Блуменау Марк Ильич (тема 1-4)
- Никитин Илья Сергеевич (тема 5-8)

Ответственный преподаватель

Блуменау Марк Ильич
miblumenau@edu.hse.ru
mblumenau@hse.ru
+7 (918) 954-63-14
tg: @markblumenau

О курсе

- Платных внешних слушателей - 5

- Бесплатных внешних слушателей - 5
- Всего слушателей - 70
- Гибридный формат

В первой части курса слушатели научатся основам работы с лабораторным оборудованием, автоматизации эксперимента и обработке данных при помощи языка Python и библиотек PyVisa, PySerial, Matplotlib, NumPy и SciPy. Во второй части курса слушатели познакомятся с функционалом языка программирования Wolfram Mathematica: научатся решать различные уравнения, строить качественные графики и работать с пакетами MaTeX и SciDraw.

Цели

- Научиться снимать данные с лабораторного оборудования при помощи Python
- Овладеть базовыми конструкциями языка Wolfram Mathematica
- Научиться обрабатывать данные и визуализировать полученные результаты

Планируемые результаты обучения

- При помощи пакетов PyVisa и PySerial использовать лабораторное оборудование
- Пакетами Matplotlib, SciPy, NumPy обрабатывать и визуализировать данные
- Численно и аналитически решать уравнения, брать суммы и интегралы с помощью языка Wolfram Mathematica
- Строить с помощью языка Wolfram Mathematica графики и кастомизировать их

Для кого

- Для студентов естественнонаучных, математических и компьютерных направлений
- Для всех желающих научиться языку Wolfram Mathematica и автоматизации эксперимента с помощью Python

Python для экспериментаторов

Тема 1. Numpy, Scipy, Matplotlib, Pandas.

- Установка библиотек при помощи менеджеров пакетов conda, pip.
- Сравнение скорости работы обычного python и функций numpy.
- Работа с таблицами данных (tsv, csv, xls) при помощи Pandas.
- Подгонка функций к данным при помощи scipy.optimize. Операции интегрирования, поиска пиков, FFT.
- Построение графиков при помощи Matplotlib. Как строить картинки высокого качества в Matplotlib?

Тема 2. Общение с приборами через pyserial и pyvisa. Работа с Arduino и Raspberry Pi Pico.

- Какие бывают протоколы передачи данных (и не только) у приборов и их особенности. Разница между GPIB, Serial, RS 485, TCP, UDP. Что такое SCPI?
- Разбор общения pyserial на примере Arduino и RPi Pico. Написание кодов для Arduino и RPi Pico для датчиков (температуры, оптопарного) и передача данных на компьютер.
- Что такое pyvisa и чем она отличается от LabView?
- Разбор нескольких идентичных программ на pyvisa и LabView, их сравнение.
- Считывание данных с мультиметров и осциллографов (доступных на факультете).

Тема 3. Общение с инструментами в локальной сети и сети Интернет. Общение с базами данных.

- Зачем приборам Ethernet, Wi-Fi? Что такое свитч, роутер, и как их настроить для работы с приборами?
- Библиотека requests. Какие бывают запросы? Различия между запросами GET, POST.
- Общение с приборами, поддерживающими REST API по сети (на примере эмулятора прибора, поднятого в локальной сети).
- Автоматизация скачивания данных при помощи python, requests и wget на примере астрофизического каталога.

Тема 4. Разделение потоков и использование нескольких ядер процессора в Python для работы с приборами.

- Зачем и где это может понадобиться?
- Threading для отрисовки графиков и обработки в реальном времени без ущерба чтению данных.
- Использование нескольких ядер процессора для сложной или объемной обработки данных.

Wolfram Mathematica

Тема 5. Зачем нужна Mathematica? Установка. Математические операции с символьными выражениями. Интеграция Wolfram Alpha. Функции. Чистые функции. Компиляция и параллелизм.

- Установка Mathematica.
- Запись простейших математических выражений, индексация переменных.
- Важные сочетания клавиш.
- Функции Simplify, FullSimplify, D, Series, Integrate, Sum, N.
- Важность использования Assuming.
- Решение дифференциальных уравнений функциями DSolve, DSolveValue, AsymptoticDSolveValue.
- Вызов Wolfram Alpha из Mathematica.
- Создание функций, чистые функции, функции Attributes, SetAttributes, ClearAttributes, Protect, Unprotect.
- Использование Compile, Parallelize.

Тема 6. Работа с единицами измерения. Решение задач методом размерности в Mathematica. Списки. Листы. Таблицы. Матрицы. Матричная экспонента.

- Работа с размерными объектами, функции Quantity, MixedUnit.
- Размерный анализ с помощью DimensionalCombinations (π - теорема).
- Работа со списками и таблицами.
- Матричное умножение. Решение линейных дифференциальных уравнений с помощью матричной экспоненты.

Тема 7. Численное интегрирование и суммирование. Численное решение дифференциальных уравнений. Импорт данных. Графики в Mathematica. Кастомизация. Фитирование. Базовая работа с фигурами. Функция Manipulate.

- Функции NIntegrate, NSum, N.
- Численное решение дифференциальных уравнений с помощью NDSolve, NDSolveValue, ParametricNDSolve.
- Функция Import, фитирование данных.
- Построение графиков с помощью функций Plot, ContourPlot, RegionPlot, ListLinePlot, DiscretePlot, ParametricPlot, LogPlot, LogLinearPlot, LogLogPlot, PolarPlot, Plot3D, Graphics, Show.
- Кастомизация графиков. Вывод легенды, подпись осей, заголовок, надписи на графике, палитры.
- Функция Grid и проблемы с таблицей графиков.

Тема 8. Установка библиотек. MaTeX. SciDraw. Кастомизация графиков в SciDraw.

- Установка дополнительных пакетов.
- Пакет MaTeX. Интеграция LaTeX в Mathematica.
- Пакет SciDraw. Новые возможности кастомизации. Решение проблемы Grid. Построение графиков статейного качества.

Оценивание

Курс содержит домашние задания и дополнительные задания. Для получения максимальной оценки 10 баллов студентам достаточно решить домашние задания. Каждая из частей курса весит по 5 баллов. Экзамена нет, оценка выставляется по накопленной оценке.

Python для экспериментаторов

Для получения 5 баллов достаточно идеально выполнить 4 домашних задания. Плохо решенные домашние задания можно компенсировать решением дополнительных задач. Оценка за данную часть не может превышать 5 баллов (т. е. формула $\min(5, \text{накоп})$).

Примеры домашнего задания:

- (10 баллов) Каждому студенту дается некий уникальный набор данных, записанный в табличку csv. К этим данным прилагается краткое описание и функция, которую предлагается подогнать (один из примеров - данные радиоактивного распада, из данных найти время полураспада). Решение оформляется при помощи рассказанных библиотек и включает в себя: чтение данных, обработка и подгонка при помощи `scipy`, построение графика средствами `matplotlib` (с подписыванием осей, легендой).
- (15 баллов) Общение с RPi Pico или Arduino через `pyserial` и считывание АЦП (код для микроконтроллера считать написанным за студента). Написание кода для микроконтроллера для какого-то датчика или девайса (несколько на выбор, например: акселерометр, датчик Холла, датчик освещенности, сервопривод, шаговый двигатель). Возможно использование онлайн симуляторов микроконтроллеров (<https://wokwi.com/micropython>, <https://micropython.org/unicorn/>).
- (10 баллов) Общение с прибором или микроконтроллером при помощи `pyvisa`. В качестве прибора предлагается использовать `pyvisa-sim` с набором разлных `yaml` (написанных преподавателем). `pyvisa-sim` эмулирует прибор, описанный в `yaml`. От студента требуется общаться с прибором, считывать данные и сохранять их в файл csv на диск.
- (15 баллов) Общение с эмулятором прибора по REST API. Эмулятор прибора развернут на сервере в сети Интернет и имеет несколько сценариев поведения. Запись считанных данных на диск. Отправка результатов обработки на другой сервер (симуляция общения с базой данных).

В качестве дополнительного задания для компенсации части дз можно реализовать что-то из списка (список может дополняться в том числе и идеями студентов):

- (5 баллов) Отправка на сервер картинок из `matplotlib` для дальнейшего отображения (например, вместо удаленного доступа установка отправляет график на ваш личный сервер).
- (5 баллов) Реализовать какое-то из домашних заданий с многопоточностью.
- (10 баллов) Разобраться с ШИМ, правильным использованием транзистора, и запрограммировать PID регулятор (транзистор, микроконтроллер, источник, нагревательный элемент и датчик температуры).
- (10 баллов) Перенести какую-то из лабораторных работ по механике (электричеству, оптике) на `pyvisa`.
- (12.5 баллов) Разобраться в Telegram API и реализовать бота, который отправляет результаты измерений вам по запросу в сообщении.

Wolfram Mathematica

Для получения 5 баллов достаточно выполнить 4 домашних задания. Оценка за данную часть не может превышать 5 баллов (т. е. формула $\min(5, \text{накоп})$).

Примеры домашнего задания:

- (10 баллов) Постройте численное решение дифференциального уравнения $\dot{x} = \sin(2x) \exp(-t)$ с начальным условием $x(0) = x_0$. Найдите стационарные точки и визуализируйте решения вблизи них в зависимости от x_0 . Кастомизируйте графики: подпишите оси, сделайте легенду с указанием какое начальное условие соответствует каждой кривой.
- (5 баллов) Линеаризуйте дифференциальное уравнение $\dot{x} = \sin(2x) \exp(-t)$ с начальным условием $x(0) = x_0$. Постройте аналитическое решение вблизи стационарной точки, сравните его с численным решением (кастомизируйте график таким образом, чтобы было наглядно видно отличие численного решения от аналитически приближенного).

Итоговая формула

$$\text{Итог} = \min(5, (HW1 + HW2 + HW3 + HW4 + Extra)/8) + \min(5, (HW5 + HW6 + HW7 + HW8)/8)$$