Informatika pro moderní fyziky (3) rozšíření RubyGems, ladění programů a zpracování textu

František HAVLŮJ

e-mail: haf@ujv.cz

ÚJV Řež oddělení Reaktorové fyziky a podpory palivového cyklu

akademický rok 2016/2017, 19. října 2016



- Co jsme se naučili minule
- Rozšíření Ruby: RubyGems a Bundler Vytvoříme excelovskou tabulku
- 3 Kde je chyba?
- Dodělávka z minula: jehla v kupce sena
- Zpracování textu
 - Óbecný rozbor
 - Načítání výstupního souboru
- Automatizace tvorby vstupů
 - Zápis všech výsledků do tabulky
 - Co dál?



Obsah

- 1 Co jsme se naučili minule
- 2 Rozšíření Ruby: RubyGems a Bundler
- 3 Kde je chyba?
- 4 Dodělávka z minula: jehla v kupce sena
- Zpracování textu
- 6 Automatizace tvorby vstupů

- základy jazyka Ruby na všechny způsoby
- vstup a výstup na terminál i do souboru
- první kroky ve zpracování dat (čtení ze souboru, zpracování CSV tabulky - ještě musíme dodělat)

Vytvoříme excelovskou tabulku

Obsah

- 1 Co jsme se naučili minule
- Rozšíření Ruby: RubyGems a Bundler

 Vytvoříme excelovskou tabulku
- 3 Kde je chyba?
- 4 Dodělávka z minula: jehla v kupce sena
- 5 Zpracování textu
- 6 Automatizace tvorby vstupů

Knihovny (gemy) jsou základ

- existují mnohá rozšíření, tzv. knihovny v ruby se jim říká rubygems
- aktuálně nás zajímá něco na práci s excelovskými soubory
- gemy jdou sice instalovat na systémové úrovni, ale z toho je pak zase jenom neštěstí
- použijeme radši bundler, správce gemů pro každého: vyřeší za nás závislosti a postará se o snadnou instalaci

Máme bundler?

- otestujeme rubygems: gem -v
- pokud není, zapláčeme, protože jsme asi špatně nainstalovali Ruby
- otestume bundler: bundle -v
- pokud bundler není, doinstalujeme gem install bundler

Jak na to

- najdu si, která knihovna mě zajímá (třeba na rubygems.org nebo kdekoli jinde): my bychom rádi rubyXL https://github.com/weshatheleopard/rubyXL
- vytvořím si prázdný Gemfile tam se specifikuje, které gemy chci používat: bundle init
- do gemfilu je to normální Ruby skript! dopíšu gem "rubyXL"
- nainstaluju: bundle install -path vendor/bundle (ten parametr stačí poprvé, bundler si to pak pamatuje v konfiguráku bundle/.config)

Jak použít?

- na začátku svého skriptu pak musím nahrát bundler:
- require "bundler/setup"
- a teď už můžu nahrát jakýkoli gem:
- require "rubyXL"

RTFM, RTFM, RTFM

- na stránkách rubyXL se nachází spousta příkladů a návodů – https://github.com/weshatheleopard/rubyXL
- kromě toho má i slušnou dokumentaci (GIYF / "rubyxl docs") – http://www.rubydoc.info/gems/rubyXL/3.3.15
- napoprvé navedu do začátku:

```
workbook = RubyXL::Workbook.new
worksheet = workbook[0]
workboek.add_cell(0, 0, 'A1')
workbook.write("data.xlsx")
```

Jednoduché cvičení

- použijte soubor data_two_1.csv
- vytvořte excelovský soubor se dvěma listy, na obou bude sloupec 1, sloupec 2 a součet
- na jednom součet bude jako číslo (sečte to váš skript)
- na druhém bude součet jako excelovský vzorec

Obsah

- 1 Co jsme se naučili minule
- Rozšíření Ruby: RubyGems a Bundler
- 3 Kde je chyba?
- 4 Dodělávka z minula: jehla v kupce sena
- Zpracování textu
- 6 Automatizace tvorby vstupů

Ladění programů

- v každém programu je aspoň jedna chyba
- není důležité nedělat chyby, ale je nutné je umět najít
- když si program/Ruby na něco stěžuje, tak si to přečtěte, jinak se nic nedozvíte
- pokud nepoznám, v čem je chyba, jsem bezezbytku ztracen
- následují tři úlohy, kde je úkolem najít všechny chyby
- z didaktických důvodů postupujte metodou tupého spouštění a postupného opravování



Úloha 1

```
# vypsat nasobilku (na kazdem radku deset soucinu)
(1..10),each do |i|
   (1..10).each do |i|
   puts "#{i} * #{j} = #{i*j} "
   end
   puts
end
```

Úloha 2

```
# vypsat soucet vsech cisel z prvniho sloupce souboru "data.csv"
File.foreach("data.csv") do |row|
   ary = line.strip.split
   y = ary[1]
   x += y
end
puts x
```

Úloha 3

```
# v souboru "data.txt" najde nejmensi a nejvetsi cislo
File.read lines("data.txt").each do |line|
  ary = line.strip.split
  ary.each do |x|
    if x > max
      max = x
   end
    if x < min
     min = x
   end
 end
end
puts "Minimum = #{min}"
puts "Maximum = #{max}"
```

Obsah

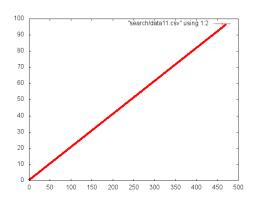
- 1 Co jsme se naučili minule
- Rozšíření Ruby: RubyGems a Bundler
- 3 Kde je chyba?
- Dodělávka z minula: jehla v kupce sena
- Zpracování textu
- 6 Automatizace tvorby vstupů

Zadání

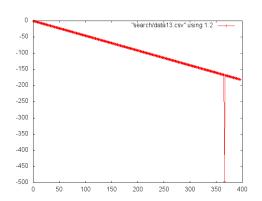
1

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?

Příklad - dobrý signál



Příklad - špatný signál



Řešení

- stačí vykreslit grafy pro všechny
- Dir pro najití souborů
- připravit a spustit gnuplot
- kouknu a vidím

Řešení 2

- trocha matematiky po inženýrsku
- odečtu vhodnou lineární funkci
- podívám se na rozdíl mezi minimem a maximem

nebo

- sleduju rozdíl dvou po sobě jdoucích hodnot
- pokud se mi sgn(dx) změní, tak je jasno

Obecný rozbor

Obsah

- Kde je chyba?
- Dodělávka z minula: jehla v kupce sena
- Zpracování textu
 - Obecný rozbor
 - Načítání výstupního souboru

Obecný rozbor Načítání výstupního souboru

Problém č. 2: mnoho výpočtů, inženýrova smrt

Zadání

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?

Co máme k dispozici?

MCNP

Pokud připravíme vstupní soubor (v netriviální formě obsahující polohy regulačních tyčí R1 a R2), spočítá nám keff.

Potřebovali bychom ale něco na:

- vytvoření velkého množství vstupních souborů
- extrakci keff z výstupních souborů
- popřípadě na vyhodnocení získaných poloh tyčí a keff



Obecný rozbor Načítání výstupního souboru

Pracovní postup

načíst keff z výstupního souboru MCNP

Obecný rozbor Načítání výstupního souboru

- načíst keff z výstupního souboru MCNP
- vygenerovat potřebné vstupní soubory

Obecný rozbor Načítání výstupního souboru

- načíst keff z výstupního souboru MCNP
- vygenerovat potřebné vstupní soubory
- vyrobit BAT soubor na spuštění výpočtů

- načíst keff z výstupního souboru MCNP
- vygenerovat potřebné vstupní soubory
- vyrobit BAT soubor na spuštění výpočtů
- načíst výsledky ze všech výstupních souborů do jedné tabulky

- načíst keff z výstupního souboru MCNP
- vygenerovat potřebné vstupní soubory
- vyrobit BAT soubor na spuštění výpočtů
- načíst výsledky ze všech výstupních souborů do jedné tabulky
- buď zpracovat ručně (Excel), nebo být Myšpulín a vyrobit skript (úkol s hvězdičkou)

Nejprve najdeme, kde je ve výstupu z MCNP žádané keff:

the k(trk length) cycle values appear normally distributed at the 95 percent confide

the final estimated combined collision/absorption/track-length keff = 1.00353 with an estim the estimated 68, 95, & 99 percent keff confidence intervals are 1.00329 to 1.00377, 1.0030 to the final combined (col/abs/tl) prompt removal lifetime = 1.0017E-04 seconds with an estima

Obecný rozbor Načítání výstupního souboru

Algoritmus

najít řádek s keff

- najít řádek s keff
- vytáhnout z něj keff, takže například:

- najít řádek s keff
- vytáhnout z něj keff, takže například:
- rozdělit podle rovnítka

- najít řádek s keff
- vytáhnout z něj keff, takže například:
- rozdělit podle rovnítka
- druhou část rozdělit podle mezer

- najít řádek s keff
- vytáhnout z něj keff, takže například:
- rozdělit podle rovnítka
- druhou část rozdělit podle mezer
- vzít první prvek

Obecný rozbor Načítání výstupního souboru

Realizace (1/5)

```
keff = nil
File.foreach("c1_1o") do |line|
end
puts keff
```

Obecný rozbor Načítání výstupního souboru

Realizace (2/5)

```
keff = nil
File.foreach("c1_1o") do |line|
  if line.include?("final estimated combined")
  end
end
puts keff
```

Obecný rozbor Načítání výstupního souboru

Realizace (3/5)

```
keff = nil
File.foreach("c1_1o") do |line|
  if line.include?("final estimated combined")
    a = line.split("=")
  end
end
puts keff
```

Realizace (4/5)

```
keff = nil

File.foreach("c1_1o") do |line|
   if line.include?("final estimated combined")
        a = line.split("=")
        b = a[1].split
   end
end
puts keff
```

Realizace (5/5)

```
keff = nil

File.foreach("c1_1o") do |line|
   if line.include?("final estimated combined")
        a = line.split("=")
        b = a[1].split
        keff = b[0]
   end
end

puts keff
```

Obsah

- 1 Co jsme se naučili minule
- 2 Rozšíření Ruby: RubyGems a Bundlei
- 3 Kde je chyba?
- 4 Dodělávka z minula: jehla v kupce sena
- 5 Zpracování textu
- Automatizace tvorby vstupů
 Zápis všech výsledků do tabulky

Určení poloh tyčí

Ve vstupním souboru si najdeme relevantní část:

```
c ------
c polohy tyci (z-plochy)
c ------
c
67 pz 47.6000 $ dolni hranice absoberu r1
68 pz 40.4980 $ dolni hranice hlavice r1
69 pz 44.8000 $ dolni hranice absoberu r2
70 pz 37.6980 $ dolni hranice hlavice r2
```

Výroba šablon

Jak dostat polohy tyčí do vstupního souboru? Vyrobíme šablonu, tzn nahradíme

67 pz 47.6000

\$ dolni hranice absoberu r1

Výroba šablon

Jak dostat polohy tyčí do vstupního souboru? Vyrobíme šablonu, tzn nahradíme

67 pz 47.6000

\$ dolni hranice absoberu r1

nějakou značkou (*placeholder*):

67 pz %r1%

\$ dolni hranice absoberu r1

Chytáky a zádrhele

- kromě samotné plochy konce absorbéru je nutno správně umístit i z-plochu konce hlavice o 7,102 cm níže
- obecně je na místě ohlídat si, že placeholder nebude kolidovat s ničím jiným

Doporučené nástroje jsou:

- již známá funkce sub pro nahrazení jednoho řetězce jiným
- pro pragmatické lenochy funkce File.read načítající celý soubor do řetězce (na což nelze v Pascalu ani pomyslet)
- možno ovšem použít i File.readlines (v čem je to lepší?)



Realizace

```
DELTA = 44.8000 - 37.6980

template = File.read("template")
(0..10).each do |i1|
  (0..10).each do |i2|
    r1 = i1 * 50
    r2 = i2 * 50
    s = template.sub("%r1%", r1.to_s)
    s = s.sub("%r1_%", (r1 - DELTA).to_s)
    s = s.sub("%r2%", r2.to_s)
    s = s.sub("%r2_%", (r2 - DELTA).to_s)
    File.write("inputs/c_#{i1}__#{i2}", s)
    end
end
```

Jak na to

Máme všechno, co potřebujeme:

- načtení keff z jednoho výstupního souboru (File.foreach, include a split)
- procházení adresáře (Dir.each)
- zápis do souboru (File.open s parametrem w anebo File.write)

Takže už to stačí jen vhodným způsobem spojit dohromady!

Realizace

```
Dir["*o"].each do |filename|
  keff = nil

File.foreach(filename) do |line|
  if line.include?("final estimated combined")
    a = line.split("=")
    b = a[1].split
    keff = b[0]
  end
  end

puts "#{filename} #{keff}"
end
```

Výstup

Výsledkem je perfektní tabulka:

```
outputs/c_0_0o 0.94800
outputs/c_0_10o 0.99800
outputs/c_0_1o 0.94850
outputs/c_0_2o 0.95000
outputs/c_0_3o 0.95250
outputs/c_0_4o 0.95600
```

Hloupé je, že nikde nemáme tu polohu tyčí.

Chytrá horákyně

... by jistě vyrobila toto:

```
0 0 0.94800
0 10 0.99800
0 1 0.94850
0 2 0.95000
0 3 0.95250
0 4 0.95600
```

Nápovědou je funkce split (podle podtržítka) a funkce to_i (co asi dělá?)

Realizace chytré horákyně

```
Dir["outputs/*o"].each do |filename|
  keff = nil

File.foreach(filename) do |line|
  if line.include?("final estimated combined")
    a = line.split("=")
    b = a[1].split
    keff = b[0]
  end
  end

s = filename.split("_")
  puts "#{s[1].to_i} #{s[2].to_i} #{keff}"
end
```

Navážeme na úspěchy z minulých týdnů

- vykreslit graf! pro každou z 11 poloh R1 jedna čára (závislost keff na R2)
- (= csv soubor, gnuplot, znáte to)
- najít automaticky kritickou polohu R2 pro každou z 11 poloh R1
- a zase graf... (kritická poloha R2 v závislosti na R1)

Co jsme se naučili minule Rozšíření Ruby: RubyGems a Bundler Kde je chyba? Dodělávka z minula: jehla v kupce sena Zpracování textu Automatizace tvorby vstupů

Zápis všech výsledků do tabulky Co dál?

A to je vše, přátelé!

