

АНО «Институт логики, когнитологии и развития личности»
ALT Linux
НОУ «ИПС-Университет г. Переславля им. А. К. Айламазяна»
Институт Программных Систем РАН

**Седьмая конференция
«Свободное программное обеспечение
в высшей школе»**

Переславль, 28–29 января 2012 года

Тезисы докладов

Москва,
Альт Линукс,
2012

Седьмая конференция «Свободное программное обеспечение в высшей школе»: Тезисы докладов / Переславль, 28–29 января 2012 года. М.: Альт Линукс, 2012. — XX с. : ил.

В книге собраны тезисы докладов, одобренных Программным комитетом седьмой конференции «Свободное программное обеспечение в высшей школе».

ISBN 978-5-905167-08-9

© Коллектив авторов, 2012

Филипп Занько

Казань, Исследовательский центр проблем энергетики КазНЦ РАН

Свободные инструменты на языке Python в исследованиях турбулентности

Аннотация

Свободные научные программы — достойная современная альтернатива коммерческим продуктам. На примере реальной научной проблемы, относящейся к исследованию турбулентности, демонстрируются возможности некоторых известных научных пакетов, написанных на языке Python, анализируются их сильные и слабые стороны.

Чтобы работать с данными, полученными в результате экспериментального или численного моделирования турбулентных потоков, требуется соответствующее программное обеспечение. Как минимум, необходимо иметь возможность строить научные графики и проводить математическую обработку больших массивов чисел. Как правило, для такого рода задач используют профессиональные коммерческие пакеты, например Origin, MATLAB или Tecplot. Не подвергая сомнению высокий уровень подобных программ, их удобство и большие возможности, укажем лишь, что их законное использование — очень дорогое удовольствие. Только одной этой причины достаточно, чтобы начать поиск альтернативы из мира свободного программного обеспечения.

Таких достойных альтернатив, на самом деле, не мало. Их обзор, а также анализ причин, по которым выбраны именно свободные научные продукты на языке Python, не входит в цели этой статьи. Вместо этого сформулируем требования, которые предъявляет одна из задач по исследованию турбулентности к языку программирования и вспомогательным научным пакетам, а также проанализируем полученный опыт их применения.

Задача: написать программу, рассчитывающую и строящую графики основных интегральных статистических характеристик для любого несжимаемого пограничного слоя на плоской пластине.

Требования к программе (см. Рис. 1):

- входные данные отличаются большим разнообразием, поэтому бессмысленно делать программу с графическим интерфейсом

пользователя; вместо этого лучше всё время работать непосредственно с *кодом*, написанном в *стиле языка MATLAB*, который всегда можно быстро модифицировать, если нужно обработать данные нового вида;

- перед обработкой числовые *данные* требуется *записать в файл формата hdf5* универсальной структуры;
- программа обработки должна *считывать данные*, приведённые к единому виду, *из файла формата hdf5*;
- для математической обработки числовых данных нужны *библиотечные функции* линейной интерполяции, численного интегрирования и пр.;
- для представления результатов необходим *пакет научной графики* публикационного качества с поддержкой ввода формул, русского языка и др.

Для решения задачи были задействованы следующие свободные научные пакеты на языке Python:

- NumPy — пакет, поддерживающий большие многомерные массивы и матрицы, а также соответствующие математические операции над ними
- Matplotlib — библиотека научной графики с поддержкой формул Latex
- PyTables — пакет для работы с очень большими объёмами числовых данных, поддерживает ввод/вывод в файлы формата hdf5.

От работы с указанными инструментами сложились следующие впечатления:

- Все пакеты *устанавливаются без осложнений*, также их можно *быстро начать использовать*.
- Следует отметить *сравнительную простоту, выразительность и гибкость языка программирования*. Код легко пишется и легко читается.
- Показательно, что по научным инструментам на Python уже появилась серьёзная образовательная литература, по крайней мере на английском языке [1–4].
- Все инструменты достаточно хорошо отлажены; с ошибками, с непредсказуемым поведением сталкиваться не приходилось.

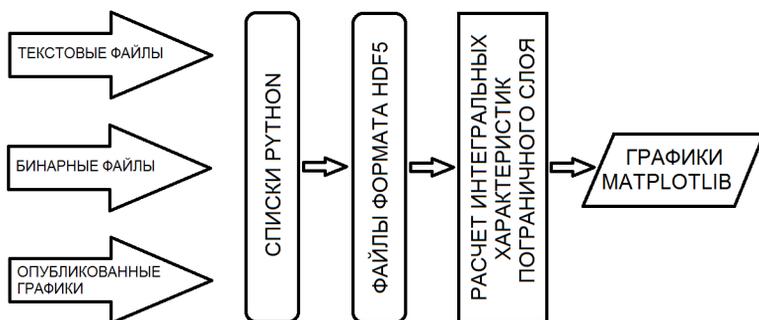


Рис. 1: Схема преобразования данных

- Качество графики не уступает коммерческим пакетам, поддерживаются сложные формулы и русский язык (см. Рис. 2).
- Все инструменты — кроссплатформенные, как и сам Python. Проект делался на Linux OpenSuse 11.3.
- При обработке большого количества численных данных, скажем 500 массивов размерностью 2×193 из чисел формата float64, суммарное время ожидания результата выросло до 3 минут (процессор AMD Phenom II X4 945, оперативная память 4Гб).

Выводы. Свободный инструментарий на языке Python способен оказать большую помощь в решении небольших проблем, часто возникающих в рутинной научной работе. Заменить калькулятор, написать небольшое GUI-приложение с помощью Tkinter, считать данные нестандартного формата, построить график для научной статьи, выполнить не очень громоздкие расчёты и многое другое можно сделать быстро и с удобством. Особенно важно, что Python и его расширения не предъявляют слишком серьёзных требований к квалификации учёных как программистов. Крупные же проекты, связанные с большим объёмом вычислений, вероятно, лучше выполнять с применением других языков программирования.

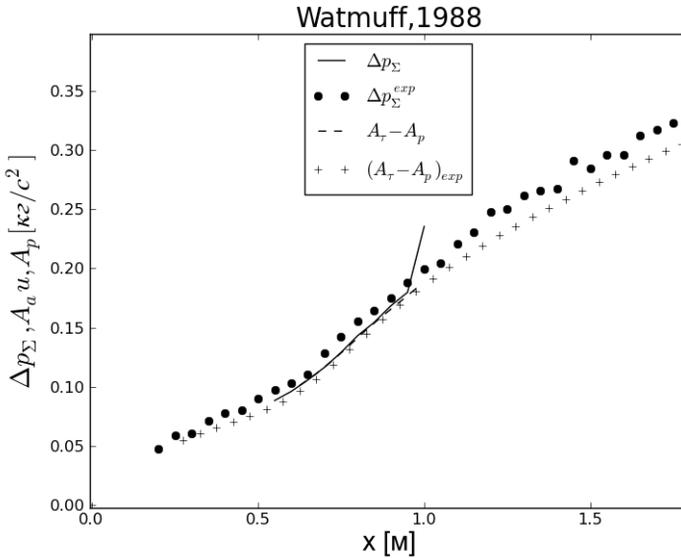


Рис. 2: Пример научного графика, полученного с помощью пакета Matplotlib

Литература

- [1] *Kiusalaas J.* Numerical Methods in Engineering with Python. — New York: Cambridge University Press, 2005. — 424 p.
- [2] *Langtangen H.P.* Python Scripting for Computational Science. — Springer, 2008. — 750 p.
- [3] *Langtangen H.P.* A Primer on Scientific Programming with Python. — Springer, 2009. — 693 p.
- [4] *Tosi S.* Matplotlib for Python Developers. — Birmingham-Mumbai: Packt Publishing, 2009. — 293 p.