

Simulationsprojekte – einfacher mit Subversion und Trac

Workshop

Simulation in den Umwelt- und Geowissenschaften,
Medizin und Biologie

Stefan Schwarzer, SSchwarzer.com

Mike Müller, IBGW GmbH

Berlin, 2007-03-22

Überblick

- Motivation
- Simulationsbeispiel: Abbaureaktion
- Subversion
Versionskontrollsystem;
Erklärung anhand des Simulationsbeispiels, typische Verwendung
- Trac
Web-Anwendung zur Projektverwaltung;
Zugriff auf Subversion-Daten aus dem Simulationsbeispiel,
Schreiben von Dokumentation im Wiki
- Zusammenfassung

Motivation

Probleme bei der Simulation:

- fehlender Überblick über Änderungen von Simulationsparametern und/oder Programmcode
- verlorene Ergebnisse, weil überschrieben oder nicht mehr zuzuordnen
- nach Programmänderung nicht mehr lauffähige Simulation

Hilfreiche Werkzeuge:

- **Subversion** – Zeitmaschine für Dateien
- **Trac** – grafische Schnittstelle zur Zeitmaschine (plus weitere Hilfen für die Dokumentation und Fehlerbehebung)

Beispiel: Abbaureaktionen

Modellbeschreibung

- Abbau eines Schadstoffs A zu B und weiter zu C
 $A \rightarrow B, B \rightarrow C$
- instationär
- isotherm und isochor
- Modellgleichungen:

$$\frac{dc_A}{dt} = -r_1$$

$$c_A(t=0) = c_{A,0}$$

$$\frac{dc_B}{dt} = r_1 - r_2$$

$$c_B(t=0) = c_{B,0}$$

$$\frac{dc_C}{dt} = r_2$$

$$c_C(t=0) = c_{C,0}$$

$$r_1 = k_1 c_A \exp\left(-\frac{E_{A,1}}{RT}\right)$$

$$r_2 = k_2 c_B \exp\left(-\frac{E_{A,2}}{RT}\right)$$

Beispiel: Abbaureaktionen

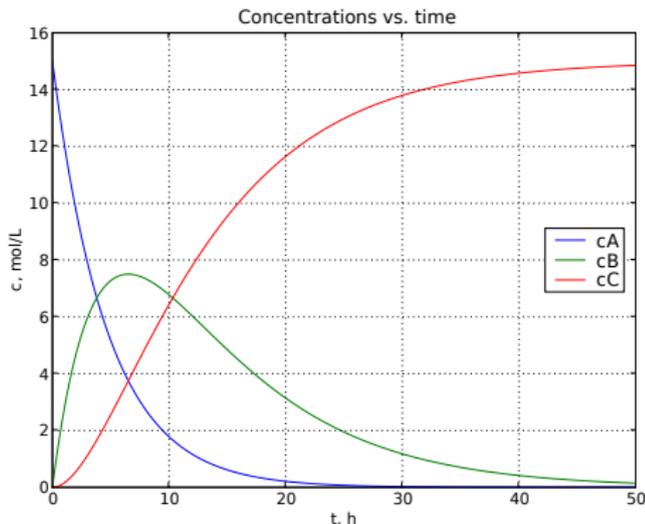
Implementierung

- `solver.py`
allgemeiner Löser für Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung
- `simulate.py`
Simulation der Abbaureaktion mit grafischer oder tabellarischer Ausgabe der Ergebnisse
- `input_data.py`
alle Simulationsparameter;
`simulate.py` muss nicht geändert werden

Beispiel: Abbaureaktionen

Simulation

- Temperatur: $T = 298 \text{ K}$
- Anfangswerte: $c_{A,0} = 15 \text{ mol/dm}^3$, $c_{B,0} = c_{C,0} = 0 \text{ mol/dm}^3$
- Reaktionskinetik: $k_1 = 2 \cdot 10^{13} \text{ 1/s}$, $E_{A,1} = 100 \text{ kJ/mol}$,
 $k_2 = 1 \cdot 10^{13} \text{ 1/s}$, $E_{A,2} = 100 \text{ kJ/mol}$



Subversion – eine Zeitmaschine für Dateien



- Versionskontrollsystem
- üblicherweise per Kommandozeile bedient, es gibt aber auch grafische Schnittstellen
- Zwischenstände („Revisionen“) der Arbeit werden durch „Commits“ in einem Archiv gespeichert
- alle Zwischenstände sind nachträglich abrufbar
- mehrere Anwender können gleichzeitig Änderungen an Dateien vornehmen
- Open-Source-Software, <http://subversion.tigris.org>
- kostenloses Online-Buch, <http://svnbook.red-bean.com>

Einige Subversion-Befehle

Alle Befehle werden durch das svn-Kommando ausgeführt,
zum Beispiel `svn commit solver.py`

Befehl	Bedeutung
help	Kurzhilfe ausgeben
add	Unterverzeichnis/Datei unter Versionskontrolle stellen
commit	Zwischenstand merken (für alle oder für bestimmte Verzeichnisse/Dateien)
revert	eigene Änderungen seit dem letzten Commit verwerfen
status	anzeigen, ob ein Verzeichnis/eine Datei seit dem letzten Commit verändert wurde
diff	Unterschiede zweier Versionen anzeigen
log	Versionsgeschichte anzeigen (was wurde wann von wem geändert?)

Subversion-Anwendungsbeispiel

Datei editieren und Commit

Projekt-Archiv einrichten

```
$ edit simulate.py
```

Datei im Editor bearbeiten

Testen

```
$ svn add simulate.py
```

```
$ svn commit simulate.py
```

Log-Text im automatisch aufgerufenen Editor schreiben

```
$ edit simulate.py
```

Datei im Editor bearbeiten

Testen

```
$ python simulate.py table > result.dat
```

```
$ svn commit simulate.py result.dat
```

Log-Text im automatisch aufgerufenen Editor schreiben

Subversion-Anwendungsbeispiel

Versionsgeschichte anzeigen

```
$ svn log simulate.py
```

```
-----  
r893 | schwa | 2007-03-20 08:18:03 +0100 (Tue, 20 Mar 2007)
```

```
Benutze R aus input_data.py.
```

```
-----  
r892 | schwa | 2007-03-20 08:15:25 +0100 (Tue, 20 Mar 2007)
```

```
Einheit mol/m3 nach der Liste der Konzentrationen im  
Endergebnis.
```

Subversion-Anwendungsbeispiel

Unterschiede zwischen den beiden Versionen anzeigen

```
$ svn diff -r892:893 simulate.py
Index: simulate.py
=====
--- simulate.py (revision 892)
+++ simulate.py (revision 893)
@@ -22,8 +22,7 @@
     c mol/m^3
     r mol/(m^3*s)
     """
-
- R = 8.314 # J/(mol*K)
- RT = R * input_data.T
+ RT = input_data.R * input_data.T
+ r1 = input_data.k1 * c[0] * math.exp(-input_data.EA1/RT)
+ r2 = input_data.k2 * c[1] * math.exp(-input_data.EA2/RT)
+ return r1, r2
```

Subversion-Anwendungsbeispiel

Zwischenstand jeweils unter einem Namen speichern

```
$ cd /home/ich/mein_projekt

$ python simulate.py table > result.dat
$ svn commit result.dat
$ svn copy . file:///var/svn/mein_projekt/ausgangssituation

$ edit input_data.py
Simulationsparameter editieren,
  z.B. Temperatur um 5 K erhöhen
$ python simulate.py table > result.dat
$ svn commit result.dat
$ svn copy . file:///var/svn/mein_projekt/hoehere_temperatur
```

Trac – eine grafische Schnittstelle zur Zeitmaschine



- Projektverwaltungs-Software
- Web-Schnittstelle zu Subversion (nur Anzeige; Änderungen weiter über Kommandozeile)
 - Versionsgeschichte = Timeline
 - Unterschiede zwischen Versionen = Changesets
 - Dateien zu verschiedenen Zeiten (Revisionen)
- darüber hinaus ...
 - Wiki (einfache Dokumentation)
 - Fehlerverwaltung = Issue-Tracker, hier nicht gezeigt
 - Roadmap = Meilenstein-Verwaltung, hier nicht gezeigt
- Open-Source-Software, <http://trac.edgewall.org>

Trac – Timeline

The screenshot shows a Mozilla Firefox browser window displaying the Trac Timeline page for SSchwarzer.com. The browser's address bar shows the URL: `http://.../trac/timeline?from=2007-03-20&daysback=30&milestone=on&ti`. The page header includes the SSchwarzer.com logo and navigation links: [Wiki](#), **Timeline**, [Roadmap](#), [Browse Source](#), [View Tickets](#), [New Ticket](#), and [Search](#). The user is logged in as 'schwa' with links for [Logout](#), [Settings](#), [Help/Guide](#), and [About Trac](#).

The main content area is titled "Timeline" and shows a list of changesets for the date 2007-03-20. Each entry includes a timestamp, a changeset ID in brackets, the author's name, and a brief description of the change. A filter box on the right allows viewing changes from 2007-03-20 and 30 days back, with checkboxes for Milestones, Ticket changes, Repository checks, and Wiki changes. The status bar at the bottom shows "Done", "MLB", and "Adblock".

Timeline

2007-03-20:

- 08:18 Changeset [893] by schwa
Benutze R aus input_data.py.
- 08:15 Changeset [892] by schwa
Einheit mol/m³ nach der Liste der Konzentrationen im Endergebnis.
- 07:59 Changeset [891] by schwa
Präziser: "start conditions" -> "start concentrations".
- 00:17 Changeset [890] by schwa
Kommentare zu Einheiten ueber die Zuweisungen gezogen.
- 00:15 Changeset [889] by schwa
Reaktion ist isochor (V=const.). Parameter ergaenzt.
- 00:12 Changeset [888] by schwa
Anfangskonzentration von A auf 15 mol/dm³ erhoert. Kommentare fuer ...
- 00:10 Changeset [887] by schwa
Ruehrkesselgrafik wird nicht benoetigt, da von einer ...
- 00:04 Changeset [886] by schwa
Realistischere Kinetik-Parameter.

2007-03-19:

Timeline

2007-03-20:

- 08:18 Changeset [\[893\]](#) by schwa
Benutze R aus input_data.py.
- 08:15 Changeset [\[892\]](#) by schwa
Einheit mol/m³ nach der Liste der Konzentrationen im Endergebnis.

Changeset 893

Timestamp: 2007-03-20 08:18:03 (11 hours ago)

Author: schwa

Message: Benutze R aus input_data.py.

Files:  [trunk/projekte/asim_workshop/simulate.py](#) (1 diff)

Unmodified

Added

Removed

Modified

Copied

Moved

trunk/projekte/asim_workshop/simulate.py

r892	r893	
23	23	r mol/(m ³ *s)
24	24	"""
25		R = 8.314 # J/(mol*K)
26		RT = R * input_data.T
	25	RT = input_data.R * input_data.T
27	26	r1 = input_data.k1 * c[0] * math.exp(-input_data.EA1/RT)
28	27	r2 = input_data.k2 * c[1] * math.exp(-input_data.EA2/RT)

Trac – Dateianzeige (simulate.py)

[Wiki](#)[Timeline](#)[Roadmap](#)[Browse Source](#)

[root](#) / [trunk](#) / [projekte](#) / [asim_workshop](#) / [simulate.py](#)

Revision 893, 2.3 kB (checked in by schwa, 11 hours ago)

Benutze R aus input_data.py.

Property `svn:eol-style` set to `native`

Line	
1	<code># encoding: latin1</code>
2	
3	<code>import math</code>
4	<code>import sys</code>
5	
6	<code>import input_data</code>
7	<code>import solver</code>
8	
9	<code>try:</code>
10	<code>import pylab</code>
11	<code>has_matplotlib = True</code>
12	<code>except ImportError:</code>
13	<code>has_matplotlib = False</code>
14	
15	
16	<code>def kinetics(c):</code>
17	<code>"""</code>
18	Return a tuple (r1, r2) for given vectorial concentration c.
19	<code>"""</code>
20	Units are

Trac – Dateianzeige (Simulationsdaten)

	Wiki	Timeline	Roadmap	Browse Source
--	------	----------	---------	----------------------

[root](#) / [trunk](#) / [projekte](#) / [asim_workshop](#) / [beispiel0.dat](#)

Revision 899, 293.8 kB (checked in by schwa, 5 hours ago)

Ergebnisse fuer das Ausgangsbeispiel in Tabellenform.

HTML preview not available, since the file size exceeds 262144 bytes. Try [downloading](#) the file instead.

Note: See [Tr.](#)

[View changes...](#)

Trac – Wiki (Seite erstellen)

The screenshot shows a Mozilla Firefox browser window displaying a Trac Wiki page. The browser's address bar shows the URL `http://.../trac/wiki/TestSeite`. The page header includes the logo for "SSchwarzer.com Softwareentwicklung für Technik und Wissenschaft" and a search box. Below the header, the user is logged in as "schw", with links for "Logout", "Settings", "Help/Guide", and "About Trac". A navigation menu contains "Wiki", "Timeline", "Roadmap", "Browse Source", "View Tickets", "New Ticket", and "Search". Underneath, there are links for "Start Page", "Index by Title", "Index by Date", and "Last Change". The main content area contains the text "Describe 'TestSeite' here" and a "Create this page" button. A section titled "Download in other formats:" includes a link for "Plain Text". The footer features the Trac logo, the text "Powered by Trac 0.10.3.1 By Edgewall Software.", and a link to the Trac open source project at `http://trac.edgewall.com/`. The browser's status bar at the bottom shows "Done", "MLB", and "Adblock".

Trac – Wiki (Seite erstellen)

The screenshot shows a Mozilla Firefox browser window titled "TestSeite (edit) - S Schwarzer,com - Trac - Mozilla Firefox". The address bar shows the URL "http://.../trac/wiki/TestSeite?action=edit". The page content includes a logo for "SSchwarzer.com Softwareentwicklung für Technik und Wissenschaft" and a search bar. A navigation menu contains "wiki", "Timeline", "Roadmap", "Browse Source", "View Tickets", "New Ticket", and "Search". Below the menu, it says "logged in as schwa" with links for "Logout", "Settings", "Help/Guide", and "About Trac". There are also links for "Start Page", "Index by Title", "Index by Date", and "Last Change". The main heading is "Editing 'TestSeite'" with a rich text editor toolbar. The editor contains the following text: "==" Überschrift ==", "'Dieser Text erscheint fett.'" "Und dieser kursiv.", "Das ist ein externer Link: [http://sschwarzer.com Homepage von S Schwarzer.com]. Links innerhalb des Wikis sind besonders einfach: TestSeite.", "Auch Verweise auf Changesets sind möglich: [893].", "Eine Liste:", and a bulleted list with "Punkt 1" and "Punkt 2". At the bottom, there is a "Change information" field and a "Comment about this change (optional):" field. The status bar at the bottom of the browser shows "Done", "MLB", and "Adblock".

Trac – Wiki (erzeugte Seite)

The screenshot shows a Mozilla Firefox browser window displaying a Trac Wiki page. The browser's address bar shows the URL `http://[redacted]/trac/wiki/TestSeite`. The page header includes the SSchwarzer logo and navigation links such as `logged in as schwa`, `Logout`, `Settings`, `Help/Guide`, and `About Trac`. A breadcrumb trail shows `Wiki` > `Timeline` > `Roadmap` > `Browse Source` > `View Tickets` > `New Ticket` > `Search`. Below the breadcrumb trail are links for `Start Page`, `Index by Title`, `Index by Date`, and `Last Change`. The main content area features a section titled `Überschrift` with the following text: `Dieser Text erscheint fett. Und dieser kursiv.`, `Das ist ein externer Link: Homepage von SSchwarzer.com. Links innerhalb des Wikis sind besonders einfach: TestSeite.`, and `Auch Verweise auf ChANGESets sind möglich: \[893\].` Below the text is a list with two items: `• Punkt 1` and `• Punkt 2`. At the bottom of the content area are buttons for `Edit this page`, `Attach file`, `Delete this version`, and `Delete page`. A section titled `Download in other formats:` includes a link for `Plain Text`. The footer contains the Trac logo, version information (`Powered by Trac 0.10.3.1 By Edgewall Software.`), and a link to the Trac open source project (`http://trac.edgewall.com/`). The browser's status bar at the bottom shows `Done`, `MLB`, and `Adblock`.

Trac – Wiki (Beispielseite)

TestSeite - S5chwarzer.com - Trac - Mozilla Firefox

File Edit View History Bookmarks Tools Help

Back Forward Reload Stop Print http:// /trac/wiki/TestSeite

TestSeite - S5chwarzer.c...

Wiki Timeline Roadmap Browse Source View Tickets New Ticket Search

[Start Page](#) [Index by Title](#) [Index by Date](#) [Last Change](#)

Schadstoffabbau bei Temperaturerhöhung

Die Ausgangslage war dieser Abbau (bei 25 Grad Celsius):

Erhöht man die Temperatur um nur *fünf Grad Celsius*, beschleunigen sich die Reaktionen erheblich. Zur Verdeutlichung ist der Zeitmaßstab beibehalten.

Attachments

- [simulation0.png](#) (39.6 kB) - added by schwa on 2007-03-21 22:02:10.
- [simulation1.png](#) (35.0 kB) - added by schwa on 2007-03-21 22:07:05.

[Edit this page](#) [Attach file](#) [Delete this version](#) [Delete page](#)

Done MLB Adblock

Zusammenfassung

- mit Subversion kann man, **regelmäßige Commits vorausgesetzt**, auf frühere Programme und Daten zurückgreifen
- **das funktioniert auch, wenn diese zwischenzeitlich überschrieben oder gelöscht wurden!**
- Subversion-Kommandozeile erfordert einen gewissen Lernaufwand, der bei regelmäßiger Benutzung aber nur einmal anfällt
- Trac bietet eine Web-Schnittstelle zu den im Subversion-Archiv gespeicherten Daten
- darüber hinaus kann man im Wiki sehr einfach Informationen zum Projekt erstellen
- Trac besitzt außerdem eine Fehler- und eine Meilenstein-Verwaltung