

**Pokročilé programování
v jazyce C pro chemiky
(C3220)**

**Šablony, knihovna STL,
algoritmy**

Šablony funkcí

- Šablony funkcí používáme tam, kde potřebujeme použít **stejnou funkci pro odlišné typy argumentů** a návratových hodnot
- Šablonu definujeme podobně jako funkci, ale před hlavičkou funkce uvedeme **template <typename T>** nebo **template <class T>**, kde T je volitelný symbol zastupující jméno typu
- Typů můžeme specifikovat i více: **template <typename T1, typename T2, typename T3>**
- V okamžiku volání jména šablony posoudí překladač typ předávaných argumentů a vygeneruje příslušnou funkci
- Šablony samostatných funkcí se v praxi používají v menší míře, ve standardní knihovně jsou však definovány některé užitečné šablonové funkce (např. `swap()`, `min()`, `max()`)
- Šablony lze definovat také pro metody (podobným způsobem jako pro funkce)

Šablony funkcí - příklad 1

```
// Klasické řešení bez použití šablon (používáme přetížení funkce)
int getMax(int value1, int value2)
{ if (value1 > value2) return value1; else return value2; }

double getMax(double value1, double value2)
{ if (value1 > value2) return value1; else return value2; }

int main()
{
    int i1 = 3, i2 = 5, imax = 0;
    double d1 = 2.12, d2 = 6.78, dmax = 0.0;
    imax = getMax(i1, i2); // Tady se volá první funkce
    dmax = getMax(d1, d2); // Tady se volá druhá funkce
    return 0;
}
```

```
// Řešení s použitím šablony funkce
template <typename T> T getMax(T value1, T value2)
{ if (value1 > value2) return value1; else return value2; }

int main()
{
    int i1 = 3, i2 = 5, imax = 0;
    double d1 = 2.12, d2 = 6.78, dmax = 0.0;
    imax = getMax(i1, i2); // Na základě šablony vygeneruje funkci pro int
    dmax = getMax(d1, d2); // Na základě šablony vygeneruje funkci pro double
    return 0;
}
```

Šablony funkcí - příklad 2

```
// Šablona funkce pro zamenu dvou hodnot
template <typename T> void swapItems(T &item1, T &item2)
{
    T itemAux;
    itemAux = item1;
    item1 = item2;
    item2 = itemAux;
}

int main()
{
    int i1 = 3, i2 = 5;
    string s1 = "Prvni retezec", s2 = "Druhy retezec";
    Vector3D v1(3.1, 4.7, -9.0), v2(6.4, -1.2, 7.8);

    swapItems(i1, i2); // Vygeneruje se funkce pro typ int
    swapItems(s1, s2); // Vygeneruje se funkce pro typ string
    swapItems(v1, v2); // Vygeneruje se funkce pro typ Vector3D

    return 0;
}
```

Šablony tříd

- Šablony tříd fungují podobným způsobem jako šablony funkcí, ale na jejich základě se **generují celé třídy**
- Šablony tříd se intenzivně využívají při tvorbě knihoven, hojně je využívá například standardní knihovna C++
- Příslušné objektové proměnné deklarujeme:
jmeno_sablony<jmeno_typu> jmeno_promenne

```
template <typename T> class Vector3D // Šablona tridy pro 3D vektor
{
public:
    Vector3D() { x = 0; y = 0; z = 0; };
    Vector3D(T ax, T ay, T az) { x = ax; y = ay; z = az; };
    // Zde budou definovany dalsi cleny sablony tridy
private:
    T x, y, z;
};

int main()
{
    Vector3D<int> vectInt;
    Vector3D<double> vectDouble;
    // Zde je mozne pracovat s objektovymi promennymi vectInt a
    // vectDouble obvyklym zpusobem
}
```

Šablony tříd - příklad

```
// Nasledujici prikklad ukazuje, jak definovat metodu mimo sablonu
template <typename T> class Vector3D
{
    public:
        Vector3D() { x = 0; y = 0; z = 0; }
        void printValues(); // Metoda bude definovana mimo sablonu tridy
    private:
        T x, y, z;
};

template<typename T> void Vector3D<T>::printValues()
{
    cout << "Souradnice vektoru:" << x << y << z << endl;
}

int main()
{
    Vector3D<int> vectInt;
    Vector3D<double> vectDouble;

    vectInt.printValues();
    vectDouble.printValues();

    return 0;
}
```

STL - standardní šablonová knihovna

- Součástí standardní knihovny jazyka C++ je standardní šablonová knihovna STL (standard template library)
- Knihovna STL nabízí mnoho **šablonových tříd**, z nichž jsou nejpoužívanější **kontejnery** (zásobníky), které slouží k ukládání objektů libovolného typu
- Kromě kontejneru **vector**, jsou k dispozici například i množiny (**set**) či mapy klíč-hodnota (**map**)
- Podrobnější dokumentace k STL na https://en.cppreference.com/w/cpp/standard_library

Kontejner map

- Pro použití kontejneru `map`, musíme vložit hlavičkový soubor `#include <map>` a deklarovat `using namespace std;`
- Tento kontejner obsahuje páry klíč-hodnota. Každému klíči je přiřazena právě jedna hodnota. Klíče jsou v mapě vždy vzestupně seřazeny (při iteraci je dostáváme od nejmenšího klíče po největší).
- Kontejner `map` obsahuje například následující metody:
 - `operator[]` - vrací prvek s příslušným klíčem. Pokud prvek s daným klíčem v mapě není, je vložen s výchozí hodnotou a vrácena reference na ni.
 - `erase()` - smaže prvek s daným klíčem, je-li přítomen
 - `count()` - vrací počet prvků s daným klíčem v mapě (0 nebo 1)
 - `clear()` - vyjímá všechny prvky (kontejner je pak prázdný)
 - `size()` - vrací aktuální počet prvků
 - `empty()` - vrací informaci o tom, zda je kontejner prázdný (totéž jako `size() == 0`)
- Nezáleží-li nám na pořadí prvků v mapě, používáme rychlejší variantu `unordered_map`
- Podrobnější výčet všech metod kontejneru `map` lze najít na:
<https://en.cppreference.com/w/cpp/container/map>

Kontejner map - příklad

```
#include <iostream>
#include <map>
using namespace std;

int main()
{
    map<string, int> dnyVTydney; // Definice kontejneru s textovými klíči
                                // a celočíselnými hodnotami

    dnyVTydney["pondeli"] = 1;
    dnyVTydney["utery"] = 2;
    // atd.

    string den = "čtvrtek";

    cout << "Dnes je " << den << ", "
          << dnyVTydney[den] << ". den v tomto týdnu." << endl;
    // Vypíše: Dnes je čtvrtek, 4. den v tomto týdnu.
}
```

Iterátory

- Mnoho operací s kontejnery v STL používá tzv. **iterátory**, což jsou speciální objekty podobné ukazatelům, ukazující do daného kontejneru na nějaký prvek
- Každý kontejner má následující metody, vracející příslušný iterátor
- **begin()** - vrací iterátor na první prvek kontejneru
- **end()** - vrací iterátor ukazující **těsně za poslední prvek**
- Iterátory jsou interně využívány range-based for cykly, ale můžeme je použít i přímo
- Hodnotu, na kterou iterátor ukazuje, získáme dereferencováním pomocí ***** či **->**
- Iterátory můžeme porovnávat pomocí **==** a **!=** a
- K posunu na další prvek použijeme **++**, některé iterátory umí i přejít na předchozí prvek pomocí **--**

Iterátory - příklad

```
#include <iostream>
#include <map>
#include <string>
using namespace std;

int main()
{
    map<string, int> dnyVTydn; // Definice kontejneru s textovými klíči
                             // a celočíselnými hodnotami
    map<int, string> cisloNaDen; // Mapa pro překlad obráceným směrem

    dnyVTydn["pondeli"] = 1;
    // atd.

    // iterujeme od begin(), dokud nenarazíme na end()
    for (map<string,int>::iterator it = dnyVTydn.begin();
         it != dnyVTydn.end(); ++it) {
        // u mapy je it->first klíč, it->second příslušná hodnota
        cisloNaDen[it->second] = it->first;
    }
}
```

Dedukce typů pomocí auto

- Často se setkáme se situací, kdy je typ nějaké proměnné “jasný” (např. daný návratovým typem nějaké funkce), ale je pracné jej ručně vypisovat
- Použijeme-li místo typu klíčové slovo `auto`, kompilátor si potřebný typ vydedukuje z kontextu (pokud to nejde jednoznačně, kompilátor ohlásí chybu)
- Místo `map<string, int>::iterator it = kontejner.begin()` tedy stačí jen `auto it = kontejner.begin()`
- Klíčové slovo `auto` můžeme dále dekorovat pomocí `const` či `&` a upřesnit tím, co má kompilátor udělat
- Pro obecnou iteraci tedy můžeme psát
`for (const auto &x : kontejner) { ... }`
- `auto` nelze použít pro typy parametrů funkce (nejsou při definici funkce známy), funguje jen pro proměnné a návratové typy funkcí
- Nadužívání `auto` ale může kód zneprůhlednit, používáme jej jen tam, kde je to prospěšné, nepíšeme tedy `auto i = 5` místo `int i = 5`

Standardní knihovna algoritmů

- STL obsahuje také **šablony funkcí** implementující některé běžné algoritmy nad souborem dat (třídění, vyhledávání, kopírování)
- Tyto funkce jsou k dispozici v hlavičkovém souboru `<algorithm>`
- `find()` - najde první odpovídající prvek
- `count_if()` - vrací počet prvků odpovídajících nějakému kritériu
- `reverse()` - obrátí pořadí prvků
- `sort()` - seřadí prvky vzestupně
- `copy()` - zkopíruje daný rozsah do jiného kontejneru
- Většina algoritmů přijímá dva iterátory ukazující na začátek a konec rozsahu hodnot, nad nímž mají pracovat (typicky předáváme `begin()` a `end()` nějakého kontejneru).
- Mnoho dalších funkcí naleznete v detailní dokumentaci na <https://en.cppreference.com/w/cpp/header/algorithm>

Algoritmy - příklad

```
#include <algorithm>
#include <vector>
using namespace std;

bool je_sude(int x) { return x % 2 == 0 }

int main()
{
    vector<int> ciska; // naplněný nějakými čísly

    sort(ciska.begin(), ciska.end()); // seřadí ciska vzestupně

    int pocetTrojek = count(ciska.begin(), ciska.end(), 3);

    int pocetSudych = count_if(ciska.begin(), ciska.end(), je_sude);
}
```

Lambda funkce

- Zejména při práci se standardními algoritmy potřebujeme často funkce specifikující kritérium pro počítání, řazení apod.
- Abychom nemuseli pro každý případ vždy definovat globální funkci, existují v jazyku C++ tzv. **lambda funkce**, což jsou dočasné (lokální) funkce
- Lambda funkce může mít přístup ke proměnným z bloku, ve kterém je definována
- Lambda funkci definujeme v místě použití takto:
`[promenna1, promenna2] (int parametr1) { těloFunkce; }`
- V **hranatých závorkách** uvedeme seznam vnějších **proměnných**, které chceme pro lambda funkci zpřístupnit (buďto kopií-hodnotou, nebo jako referenci přidáním & před proměnnou)
- Kulaté závorky specifikují typ parametrů jako u běžné funkce

Lambda funkce - příklad

```
#include <algorithm>
#include <vector>
using namespace std;

int main()
{
    vector<int> cisla; // naplněný nějakými čísly
    int hranice = 5;

    // lambda s jedním parametrem, zpřístupníme jí proměnnou hranice
    int pocetVetsichNez = count_if(cisla.begin(), cisla.end(),
        [hranice] (int x) { return x > hranice; }
    );

    // lambda s jedním parametrem, nemá přístup k žádným proměnným z
    main()
    int pocetSudych = count_if(cisla.begin(), cisla.end(),
        [] (int x) { return x % 2 == 0; }
    );
}
```


Cvičení - část 1

1. Vytvořte program vycházející z programu z úlohy 2 z minulého cvičení s následujícími úpravami:
 - Třída Vector3D bude šablonou, přičemž **parametrem šablony bude datový typ T** použitý k uložení souřadnic x, y, z
 - Upravte metody **getX/Y/Z()** a **set()**, tak aby přijímaly a vracely typ T (ne napevno float či double)
 - **operator*** bude **vracet vždy typ double** (bez ohledu na typ T)
 - Můžete smazat **operator+** a funkci **swapVectors()**
 - Funkce **main()** vytvoří **dvě dvojice vektorů**, jednu jako **Vector3D<double>** a druhou **Vector3D<float>**
 - Od uživatele vyžádejte a **načtěte souřadnice obou double vektorů**
 - Každý double vektor **zkopírujte do odpovídajícího float vektoru** pomocí **set()** a **getX/Y/Z()**
 - Nakonec program spočítá a vytiskne **skalární součin double vektorů** a **skalární součin float vektorů**.

Program otestujte s vektory [1, 1, 0] a [1.00000001, -1, 0]. Skalární součin ve vyšší přesnosti by měl být nenulový, v nižší přesnosti nulový. **2 body**

Cvičení - část 2

2. Vytvořte program zpracovávající soubor `data1.dat` (z adresáře `/home/tootea/C3220/data/`). Soubor obsahuje na každém řádku textový identifikátor komplexu protein-ligand, následovaný dvěma hodnotami vazebných energií (referenční a predikovanou). Pro uložení jednotlivých záznamů **definujte třídu `Complex`**, která bude obsahovat:
- Tři soukromé datové položky (string a dva double)
 - Metodu `void readLine(const string &line)` pro načtení hodnot do třídy
 - Metodu `void print(void) const` pro výpis hodnot na standardní výstup
 - Metody `getReference()` a `getPredicted()`, vracející hodnoty energií.

Funkce `main()` vytvoří **vektor tříd `Complex`** a do něj po řádcích načte obsah souboru, jehož jméno bude specifikováno jako **první argument na příkazovém řádku**.

Vektor komplexů napřed **seřadte vzestupně dle predikovaných hodnot energie** voláním `sort()` s vhodnou lambda funkcí (ta bude přijímat dva argumenty `const Complex &` a vrátet `true`, pokud první argument má menší predikovanou energii než druhý). Položky seřazeného vektoru **vypište pomocí `print()`**.

(pokračování na další straně)

Cvičení - část 3

2. (pokračování) Vytvořte histogram referenčních energií tak, že použijete mapu, jejímž klíčem bude **referenční energie převedená (oříznutá) na int** a hodnotou bude **počet komplexů** spadajících pod daný klíč. Výslednou **mapu vypište** (na každém řádku bude celočíselná energie následovaná počtem).

Pomocí **count_if** a vhodné **lambda funkce** spočítejte, pro kolik komplexů je **absolutní hodnota (abs())** rozdílu referenční a predikované energie menší, než číslo zadané jako **druhý argument programu** na příkazovém řádku. Výsledný počet vypište. **3 body**