

Библиотека aiwlib

Иванов А.В., Хилков С.А.

5 сентября 2017 г.

Оглавление

1	Начало работы	5
1.1	Сборка и установка библиотеки	5
2	Ядро библиотеки	9
2.1	Средства отладки — модуль <code>debug</code>	9
2.1.1	Общие замечания	9
2.1.2	Синтаксические ограничения	10
2.1.3	Режимы работы	11
2.1.4	Вывод информации со стека при обработке исключения	12
2.1.5	Детали реализации	12
2.2	Выделение и освобождение ресурсов в контейнерах и потоках ввода/вывода — модуль <code>alloc</code>	13
2.3	Потоки ввода/вывода — модули <code>iosream</code> , <code>gzstream</code> и <code>binaryio</code>	14
2.3.1	Общие замечания	14
2.3.2	Типобезопасный форматированный вывод	15
2.3.3	Абстрактный класс <code>aiw::IOstream</code>	15
2.3.4	Класс <code>aiw::File</code>	16
2.3.5	Класс <code>aiw::GzFile</code>	16
2.3.6	Операторы бинарного ввода/вывода — модуль <code>binaryio</code>	16
2.3.7	Детали реализации	17
2.4	Вектора и индексы — модуль <code>vec</code>	17
2.4.1	Общие замечания	17
2.4.2	Конструкторы и порождающие функции	18
2.4.3	Арифметические операции и операции сравнения	19
2.4.4	Операции и методы для доступа к элементу, изменения размерности и различные преобразования	22
2.4.5	Другие операции и методы	23
2.4.6	Детали реализации	23
2.5	Равномерные многомерные прямоугольные (картезианские) сетки — модуль <code>mesh</code>	24
2.5.1	Общие замечания	24
2.5.2	Поля и методы для получения информации о сетке	25
2.5.3	Инициализация сетки и настройка осей	25
2.5.4	Доступ к ячейкам	26
2.5.5	Обход сетки	27
2.5.6	Преобразования сеток	28

2.5.7	Сохранение и загрузка сеток	29
2.5.8	Другие методы	30
2.5.9	Инстацирование в Python	31
2.6	Операции над равномерными многомерными прямоугольными (картезианскими) сетками — модуль meshop	31
2.6.1	Общие замечания	31
2.6.2	Детали реализации	32
2.7	Различные варианты интерполяции — модуль interpolations	32
2.7.1	Локальный кубический сплайн	32
2.7.2	Кубический B -сплайн	33
2.7.3	Функции модуля interpolations	34
2.8	Загрузка сеток из .dat -файлов — модуль dat2mesh	34
2.9	Построение линий постоянного уровня для двумерной сетки — модуль isolines	36
2.10	Многомерный кубический массив на основе Z -кривой Мортон — модуль zcube	37
2.11	Чтение и запись сейсмических данных в формате seg-Y — модуль seg_y	39
2.12	Контрольные точки для остановки и последующего восстановления расчета — модуль checkpoint	42
2.13	Сериализация данных в формате pickle языка Python — модуль pickle	43
2.14	Дискретизация разбиения Вороного на равномерной сетке в D -мерном пространстве — модуль voronoy	45
2.15	Описание пользовательских типов — модуль typeinfo	45
2.16	Некоторые элементы аналитической геометрии — модуль angem	46
2.17	Решение СЛАУ с трехдиагональными матрицами (методы прогонки) — модуль 3diag	47
2.18	Источник случайных чисел и специфические операции в трехмерном декартовом пространстве — модуль gauss	47
2.18.1	Определение поворота	48
2.18.2	Разложение поворота в ряд	49
2.19	Операции бинарного потокового ввода/вывода — модуль binaryio	53
2.20	Настройка пользовательских классов — модуль objconf	53
2.21	Чтение и запись конфигурационных файлов — модуль configfile	54
3	Система контроля результатов и алгоритмов численного моделирования RACS	57
3.1	Введение	57
3.2	Структура данных	58
3.3	Подключение системы RACS к готовому приложению численного моделирования на языке Python	60
3.4	Подключение системы RACS к готовому приложению численного моделирования на языке C++11	63
3.5	Запуск расчетов подключенных к системе RACS	65
3.6	Анализ и обработка результатов — утилита командной строки racs	67

Глава 1

Начало работы

1.1 Сборка и установка библиотеки

Для сборки библиотеки используется утилита GNU `Make`. Для работы в C++ достаточно собрать ядро библиотеки командой

```
make libaiw.a
```

Для работы в Python необходимо собрать ряд модулей с применением утилиты `SWIG`, что требует вызова команды

```
make
```

из директории библиотеки.

Для установки библиотеки используйте команды (из под `root`)

```
make install
```

для копирования собранных модулей и заголовочных файлов в системные директории, либо

```
make install-links|links-install
```

для создания мягких ссылок на собранные модули и заголовочные файлы в системных директориях. Второй вариант предпочтительней с точки зрения простоты обновления библиотеки, но может иметь некоторые уязвимости с точки зрения безопасности при работе в многопользовательском режиме — гипотетически пользователь установивший у себя библиотеку может подсунуть другим пользователям вредоносный код.

Предыдущая версия, библиотека `aivlib`, имела два существенных недостатка — сложную установку и проблемы при работе с несколькими версиями библиотеки на одной машине. Текущая версия допускает локальную установку произвольного числа версий/копий библиотеки, более того это рекомендуется для упрощения переноса проектов на другие машины, где библиотека `aiwlib` не установлена — в этом случае вместо копирования всей библиотеки достаточно создать мягкую ссылку на библиотеку в директории проекта.

Для упрощения сборки проекта рекомендуется использовать файл `include/aiwlib/user.mk`. При этом пользовательский `Makefile` должен иметь вид

```
name=NAME #имя проекта
headers=... #список хидеров обрабатываемых SWIG-ом
modules=... #список .cpp модулей проекта
sources=... #другие исходные файлы проекта
```

```
include aiwlib/user.mk
```

или

```
include local-path-to-aiwlib/include/aiwlib/user.mk
```

При этом заголовочные файлы библиотеки всегда включаются как `<aiwlib/...>`, путь к локально установленной библиотеке при необходимости определяется автоматически на основе пути к файлу `user.mk`.

По умолчанию, такой Makefile собирает модуль для питона, и предоставляет еще ряд целей

- **sources** — выводит список исходных файлов проекта включая `make`-файл, хидеры определяются автоматически при помощи вызова `g++ -M` на основе переменной `modules`, заголовочные файлы библиотеки `aiwlib` **НЕ** включаются в список. Если при вызове `make` указать опцию `with=swig`, в список будут включены файлы `NAME.i`, `NAME.py` и `NAME_wrap.cxx`
- **all_sources** — выводит список всех исходных файлов проекта включая `make`-файл, хидеры определяются автоматически при помощи вызова `g++ -M` на основе переменной `modules`, заголовочные файлы библиотеки `aiwlib` включаются в список **ПРИ УСЛОВИИ ЕЕ ЛОКАЛЬНОЙ УСТАНОВКИ**. Если библиотека `aiwlib` установлена локально и при вызове `make` указана опция `with=aiwlib`, в список включаются необходимые файлы `.py` и `.i` библиотеки `aiwlib`. Если библиотека `aiwlib` установлена локально и при вызове `make` указана опция `with=aiwlib,swig`, (последовательность не имеет значения) в список включаются все файлы `.py`, `.i` и `_wrap.cxx` библиотеки `aiwlib`, а так же файлы `NAME.i`, `NAME.py` и `NAME_wrap.cxx`.
- **clean** — удаляет все созданные объектные файлы и файл `_NAME.so`.
- **cleanall** — удаляет все созданные объектные и `.so` модули, а так же файлы `NAME.i`, `NAME.py` и `NAME_wrap.cxx`.
- **NAME.tgz NAME.md5** — создает сжатый архив и файл с контрольной суммой **несжатого** архива со списком файлов проекта `sources`, опция `with` влияет на список файлов.
- **tar NAME-all.tgz** — создает сжатый архив `NAME-all.tgz` со списком файлов проекта `all_sources`, опция `with` влияет на список файлов.
- **export to=...** — переносит проект в другую директорию (если опция `to` имеет вид `to=PATH`) либо на другую машину (если опция `to` имеет вид `to=HOST:PATH`). Для переноса используется список файлов `all_sources`, опция `with` влияет на список файлов. Перенос на другую машину осуществляется при помощи утилиты `SSH`, если у Вас не настроена

авторизация по открытому ключу то пароль придется вводить трижды. Директория `PATH` создается при необходимости, включая родительские каталоги. Корректный перенос файлов библиотеки `aiwlib` возможен только при условии ее установки в поддиректорию проекта.

Таким образом, опция `with=swig` необходима, если на целевой машине отсутствует утилита `SWIG`. Опция `with=aiwlib` необходима, если библиотека `aiwlib` была установлена локально в поддиректорию проекта.

В питоне, при импорте модулей библиотеки `aiwlib` будут импортироваться модули из локальной копии библиотеки, при условии что до этого был импортирован собранный пользовательский модуль.

Глава 2

Ядро библиотеки

2.1 Средства отладки — модуль `debug`

2.1.1 Общие замечания

Модуль `debug` предоставляет ряд макросов для вывода отладочной информации в процессе исполнения (фактически удобную альтернативу традиционным отладочным `printf`) и генерации исключений:

- `WOUT(expressions...)` — вывод информации в `std::cout`;
- `WERR(expressions...)` — вывод информации в `std::cerr`;
- `WSTR(S, expressions...)` — вывод информации в поток `S`, являющийся наследником `std::ostream`;
- `WCHK(expressions...)` — проверка результатов вычисления выражений при помощи `isnan` и `isinf`, генерация исключения если хотя бы одно из выражений не прошло проверку;
- `WEXC(expressions...)` — вывод информации со стека в `std::cerr` при обработке исключения (потокбезопасный вариант);
- `WEXT(expressions...)` — вывод информации со стека в `std::cerr` при обработке исключения или ошибке сегментирования (**не** потокбезопасный вариант);
- `WASSERT(condition, message, expressions...)` — вывод информации в `std::cerr` при нарушении условия `condition`;
- `WARNING(message, expressions...)` — вывод информации в `std::cerr`;
- `WRAISE(message, expressions...)` — вывод информации в `std::cerr` и генерация исключения типа `const char *` содержащего выведенную информацию.

Например

```
int a; double b[3];
...
WOUT(a, a*b[1], b[0]+b[2]);
```

Все макросы выводят информацию в виде

```
#filename function() LLL: expr1=value1, expr2=value2 ...
```

или

```
#filename function() LLL: message [SYSERR] expr1=value1, expr2=value2 ...
```

где LLL — номер строки в файле `filename` в которой был сгенерирован вывод сообщения, `function()` — имя функции в которой был сгенерирован вывод сообщения, `expr` — выражение, `value` — значение выражения.

Макрос `WRAISE` дополнительно включает в сообщение информацию о системной ошибке `[SYSERR]` (результат работы функции `strerror(errno)`), если состояние ошибки установлено.

Кроме того, модуль `debug` предоставляет функцию

```
void init_segfault_hook();
```

устанавливающий перехватчик сигнала `SIGSEGV` возбуждающегося при ошибке сегментирования. В этом случае на `stderr` выводится информация со стека исключения (помещенная туда при помощи макроса `WEXT`), выводится стек вызовов и инструкция (команда для `bash`) по его раскрутке.

2.1.2 Синтаксические ограничения

В качестве выражений (аргументов макросов) могут использоваться любые `rvalue` выражения, для значений которых реализованы операторы вывода в поток

```
std::ostream& operator << (std::ostream&, expr_type)
```

В выражениях могут присутствовать скобки `() [] {}`, операции `<>` скобками **не** считаются. Если в выражении есть запятые, части содержащие запятые так же должны быть в скобках, например

```
pow(a, b)
```

В противном случае макросы сохраняют работоспособность, но вывод может иметь странный вид, например

```
template <int D, typename T> struct V{
    T p[D];
    V(T x){ for(int i=0; i<D; ++i) p[i] = x; }
};
```

```
template <int D, typename T>
```

```
std::ostream& operator << (std::ostream& out, const V<D,T> &v){
    out<<"{"<<v.p[0];
    for(int i=1; i<D; ++i) out<<" "<<v.p[i];
    return out<<"}";
}
...
    int a=2;
    WOUT(V<3,int>(a), a*2);
```

даст вывод

```
# ... : V<3={2 2 2}, int>(a), a*2=4
```

вместо ожидаемого

```
# ... : V<3, int>(a)={2 2 2}, a*2=4
```

Для корректного вывода необходимо использовать дополнительные скобки

```
WOUT((V<3,int>(a)), a*2);
```

В одной строке может использоваться только один макрос WEXC (или WEXT).

2.1.3 Режимы работы

Макросы WOUT, WERR, WSTR, WCHK, WEXC, WEXT и WASSERT работают только если определен макрос EBUG (например при помощи опции компилятора `-DEBUG`). При сборке на основе шаблонного `aiwlib/Makefile` макрос EBUG по умолчанию отключен, для его подключения необходимо использовать команду

```
make ... debug=on ...
```

Отличие между вызовом

```
WASSERT(condition, ...)
```

и

```
if(!(condition)) WRAISE(...)
```

заключается в том, что при отключенном режиме отладки макрос WASSERT игнорируется полностью (включая проверку условия).

Макросы WARNIG и WRAISE работают всегда, вне зависимости от макроса EBUG.

2.1.4 Вывод информации со стека при обработке исключения

Макросы `WEXC` и `WEXT` выводят свои аргументы на стандартный поток ошибок `std::cerr` при обработке исключения. Типовой ситуацией является возбуждение исключения в C++ функции, вызываемой из Python, если модуль был собран при помощи шаблонного `aiwlib/Makefile` — в этом случае в Python происходит вызов стандартного обработчика исключений.

Выводятся только аргументы макросов `WEXC` и `WEXT`, размещенных на стеке до возбуждения исключения. Для каждого аргумента выводится значение, которое принимал аргумент в момент вызова макросов `WEXC` и `WEXT`.

В одной строке может использоваться только один макрос `WEXC/WEXT` — это связано с размещением в строке экземпляра класса `aiw::DebugStackTupleFrame`, с именем формируемым на основе номера строки. При этом копии аргументов макроса хранятся внутри экземпляра класса в виде `std::tuple`, сообщение формируется и выводится в `std::cerr` деструктором экземпляра класса только при необходимости, если возникла исключительная ситуация или сигнал `SIGSEGV`. Наличие исключительной ситуации проверяется при помощи функции `std::uncaught_exception()`.

Если режим отладки выключен (макрос `EBUG` не определен), макросы `WEXC` и `WEXT` игнорируются.

При работе макросов `WEXC` и `WEXT` экземпляры классов `aiw::DebugStackTupleFrame` размещаются на стеке, но макрос `WEXT` дополнительно размещает указатели на создаваемые экземпляры классов в глобальной таблице, что не является потокобезопасным. В случае возникновения сигнала `SIGSEGV` (и если до этого была вызвана функция `init_segfault_hook()`), все зарегистрированные в глобальной таблице экземпляры классов `aiw::DebugStackTupleFrame` выводят сообщения в поток `stderr`.

2.1.5 Детали реализации

Модуль `debug` это легкий (звголовочный файл около 100 строк и файл `src/debug.cpp` около 50-ти строк), независимый от остальных частей библиотеки `aiwlib` модуль.

Вывод выражений построен на рекурсивной функции

```
template <typename ... Args>
void aiw::debug_out(std::ostream& out, const char* str, Args ... args);
```

вызываемой из макросов, в качестве `str` подставляются аргументы макроса в виде строки и затем еще раз в виде аргументов (уже значений соответствующих выражений).

Функция `aiw::debug_out` разбирает `str` по запятым, учитывая при этом скобки `() [] {}`.

Работа макроса `WCHK` основана на функции `is_bad_value`:

```
template <typename T> bool is_bad_value(T){ return false; }
inline bool is_bad_value(float x){ return (isnan(x)) || (isinf(x)); }
inline bool is_bad_value(double x){ return (isnan(x)) || (isinf(x)); }
template <typename T, typename ... Args> bool is_bad_value(T x, Args ... args){
    return is_bad_value(x) || is_bad_value(args...);
}
```

которая так же перегружена для векторов из раздела 2.4. Аргументами макроса могут являться выражения любых типов (для которых перегружен оператор вывода в `std::ostream`), но если значения этих выражений необходимо проверять — необходимо перегрузить функцию `is_bad_value` для соответствующих типов.

При выводе сообщений от всех макросов метод потока вывода `flush` не вызывается.

Модуль `debug` подключает и использует следующие стандартные библиотеки:

- `<cerrno>`, `<cstring>` — доступ к глобальной переменной `errno` и функции `strerror(errno)`;
- `<iostream>` — работа со стандартными потоками вывода;
- `<sstream>` — работа с потоком `std::stringstream` в макросах `WEXC`;
- `<exception>` — определение наличия исключительной ситуации в деструкторе объекта `aiw::DebugStackFrame` при помощи функции `std::uncaught_exception()`.
- `<tuple>` — контейнер для сбора информации со стека для вывода исключения.
- `<cmath>` — макросы `isnan` и `isinf`.

2.2 Выделение и освобождение ресурсов в контейнерах и потоках ввода/вывода — модуль `alloc`

Для безопасного копирования экземпляров потоков ввода/вывода `aiw::Iostream`, контейнеров библиотеки `aiwlib` и освобождения ресурсов используются «умные» указатели `std::shared_ptr`.

В заголовочном файле `alloc` объявлен абстрактный класс `aiw::BaseAlloc`, предоставляющий интерфейс для работы с выделенным ресурсом (областью памяти или мапированным файлом). Класс имеет следующие методы

- `void* get_addr()` — возвращает адрес контролируемой области памяти;
- `size_t get_size() const` — возвращает размер контролируемой области памяти в байтах;
- `virtual ~BaseAlloc(){} — виртуальный деструктор;`
- `virtual size_t get_sizeof() const = 0` — возвращает размер элемента (ячейки массива) в байтах.

Класс `template<T> aiw::MemAlloc` является наследником класса `aiw::BaseAlloc`, и кроме перегрузки соответствующих методов предоставляет конструктор

```
template<typename ... Args> MemAlloc(size_t sz, Args ... args)
```

создающий в памяти массив размера `sz` из элементов типа `T` с аргументами конструктора `args`.

Класс `aiw::MMapAlloc` является наследником класса `aiw::BaseAlloc`, и кроме перегрузки соответствующих методов предоставляет конструктор

```
MMapAlloc(const std::shared_ptr<FILE> &pf, size_t sz, int flags)
```

мапирующий в память (с флагами `flags`) область размера `size` байт из файла `pf` от текущей позиции в файле.

Модуль `alloc` является легким (около 60-ти строк) файлом, зависящими только от модуля `debug`. Модуль `alloc` подключает и использует следующие библиотеки:

- `aiwlib/debug` — генерация исключений;
- `<memory>` — доступ к классу `std::shared_ptr`;
- `<sys/mman.h>`, `<unistd.h>`, `<fcntl.h>` — мапирование файлов.

При кросс-компиляции под ОС Windows компилятором `minGW` необходимо указывать опцию `-DMINGW`, при этом библиотеки `<sys/mman.h>`, `<unistd.h>`, `<fcntl.h>` не подключаются и класс `MMapAlloc` является недоступным.

2.3 Потоки ввода/вывода — модули `iosream`, `gzstream` и `binaryio`

2.3.1 Общие замечания

При создании приложений численного моделирования потоки ввода/вывода `std::iostream` из стандартной библиотеки оказываются не всегда удобны. В частности желательно:

1. обеспечить максимально возможную производительность, особенно при бинарном вводе/выводе — в этом смысле потоки `std::iostream` сделаны не вполне оптимально;
2. иметь абстрактный базовый класс потока и его наследников для работы с обычными файлами и с файлами сжатыми библиотекой `zlib.h` — такую возможность предоставляет например библиотека `boost`, но использование `boost` только ради потоков представляется чрезмерным;
3. иметь возможность мапировать файл (стандартная функция `mmap`) при помощи метода потока, с текущей позиции, указав лишь размер области и режим, и обеспечивать при этом автоматическую сборку мусора;
4. иметь возможность применять для форматированного вывода типобезопасный аналог функций `fprintf`;
5. иметь возможность формировать имя файла в аргументах конструктора при помощи типобезопасного аналога функций `fprintf`;
6. использовать перегруженные операции `<>` для бинарного ввода/вывода — впрочем эта возможность может быть реализована и для `std::iostream`.

Библиотека `aiwlib` предоставляет свои потоки ввода/вывода — абстрактный класс `aiw::IOstream` и его наследников `aiw::File` (модуль `iosream`) и `aiw::GzFile` (модуль `gszstream`). В модуле `binaryio` перегружены операции `<` и `>` для бинарного ввода/вывода для большинства актуальных типов.

2.3.2 Типобезопасный форматированный вывод

Модуль `iostream` предоставляет функцию

```
template <typename S, typename ... Args>
void aiw::format2stream(S &&str, const char *format, Args ... args);
```

обеспечивающую типобезопасный форматированный вывод в поток `str` согласно строке `format`. Аргументы `args` подставляются вместо символов `%`. Для вывода символа `%` необходимо использовать строку `%%`. Может выводиться любой аргумент `x` для которого определен оператор форматированного вывода `str<<x`.

2.3.3 Абстрактный класс `aiw::IOstream`

Абстрактный класс `aiw::IOstream` определен в заголовочном файле `iostream`.

Класс `aiw::IOstream` имеет поле `std::string name`, содержащее имя открытого файла.

Класс предоставляет следующие методы:

- `virtual ~IOstream(){} — виртуальный деструктор;`
- `virtual void close() = 0 — закрывает поток;`
- `virtual size_t tell() const = 0 — возвращает текущую позицию в потоке;`
- `virtual void seek(size_t offset, int whence=0) = 0 — устанавливает позицию в потоке относительно точки указываемой параметром whence, допустимые значения: 0 (SEEK_SET) — начало файла, 1 (SEEK_CUR) — текущая позиция, 2 (SEEK_END) — конец файла;`
- `virtual size_t read(void* buf, size_t size) = 0 — читает size байт в буфер buf из файла, возвращает число прочитанных байт;`
- `virtual size_t write(const void* buf, size_t size) = 0 — записывает в файл size байт из буфера buf, возвращает число записанных байт;`
- `virtual void flush() = 0 — принудительно сбрасывает содержимое буфера на диск;`
- `virtual std::shared_ptr<BaseAlloc> mmap(size_t size, bool write_mode=false) — мапирует из файла область размерами size (начиная с текущей позиции), возвращает проху-объект (см. описание модуля alloc), если мапирование невозможно (например при работе со сжатым файлом) происходит копирование соответствующей области в память, при этом мапирование с доступом на запись невозможно (если аргумент write_mode=true возбуждается исключение);`
- `virtual int printf(const char * format, ...) = 0 — обеспечивает не типобезопасный форматированный вывод при помощи функции ::fprintf(...);`
- `template<typename...Args> IOstream& operator ()(const char *format, Args...args) — обеспечивает типобезопасный форматированный вывод вызывая функцию aiw::format2stream(*this, format, args...);`
- операторы форматированного вывода `<` и `<<` для встроенных типов.

2.3.4 Класс `aiw::File`

Класс `aiw::File` определен в заголовочном файле `iostream`.

Класс `aiw::File` является наследником класса `aiw::IOstream`. Кроме перегрузки необходимых виртуальных методов класса `aiw::IOstream`, класс `aiw::File` предоставляет следующие методы:

- `File(){} —` конструктор по умолчанию, создает неактивный поток;
- `template<typename...Args>`
`void open(const char *format, const char *mode, Args...args) —` открывает файл в режиме `mode` с именем, формируемым на основе строки `format` и аргументов `args` при помощи функции `aiw::format2stream()`;
- `template<typename...Args> File(const char *format, const char *mode, Args...args) —` конструктор, открывает файл при помощи описанного выше метода `open`.

2.3.5 Класс `aiw::GzFile`

Класс `aiw::GzFile` определен в заголовочном файле `gzstream`.

Класс `aiw::GzFile` является наследником класса `aiw::IOstream`. Кроме перегрузки необходимых виртуальных методов класса `aiw::IOstream`, класс `aiw::GzFile` предоставляет следующие методы:

- `GzFile(){} —` конструктор по умолчанию, создает неактивный поток;
- `template <typename ... Args>`
`void open(const char *format, const char *mode, Args ... args) —` открывает файл в режиме `mode` с именем, формируемым на основе строки `format` и аргументов `args` при помощи функции `aiw::format2stream()`;
- `template<typename...Args> GzFile(const char *format, const char *mode, Args...args) —` конструктор, открывает файл при помощи описанного выше метода `open`.

2.3.6 Операторы бинарного ввода/вывода — модуль `binaryio`

Модуль `binaryio` предоставляет перегруженные операции `<` (для бинарного вывода) и `>` (для бинарного ввода) в потоки `aiw::IOstream`.

Встроенные типы, объекты `std::complex<T>` и вектора `aiw::Vec` выводятся обычным копированием «байт-в-байт».

Для типов `std::vector`, `std::string`, `std::list`, `std::map` сначала записывается размер контейнера (тип `uint32_t` для строк и `uint64_t` для остальных типов), затем содержимое контейнера.

Во избежании подключения лишних модулей, операции `<` и `>` в модуле `binaryio` для **не** встроенных типов перегружаются только если в единице трансляции был подключен заголовочный файл с определением соответствующего типа **до** заголовочного файла `binaryio`.

Например, для перегрузки операций `<` и `>` для комплексных чисел `std::complex<T>`, заголовочный файл `binaryio` должен быть включен **после** заголовочного файла `complex`.

Допускается многократное включение заголовочного файла `binaryio`, при этом можно считать, что с точки зрения перегрузки операций `<` и `>` актуальным является последнее включение.

2.3.7 Детали реализации

Модули `iostream` (порядка 100 строк), `gzstream` (40 строк) и `binaryio` (порядка 100 строк) являются довольно легкими модулями, зависящими только от модулей `debug` и `alloc`. Модуль `iostream` подключает и использует следующие библиотеки:

- `aiwlib/debug` — генерация исключений;
- `aiwlib/alloc` — доступ к объекту `MMapAlloc` при мапировании файлов;
- стандартная библиотека `<cstdio>` — работа с файлами `FILE*`;
- стандартная библиотека `<string>` — доступ к классу `std::string`.

Модуль `gzstream` подключает и использует следующие библиотеки:

- `aiwlib/iostream` — доступ к абстрактному классу `aiw::IOstream`;
- стандартная библиотека `<zlib.h>` — работа со сжатыми файлами `gzFile`.

Модуль `binaryio` подключает и использует следующие библиотеки:

- `aiwlib/iostream` — доступ к абстрактному классу `aiw::IOstream`.

2.4 Вектора и индексы — модуль `vec`

2.4.1 Общие замечания

Под вектором в декартовом пространстве размерности D понимается массив объектов (по умолчанию типа `double`) длиной D , в дальнейшем мы будем кратко обозначать их как \mathbf{a}_D , \mathbf{b}_D , \mathbf{c}_D или \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} если размерность очевидна. Вектора реализованы в виде параметризованного класса

```
template <int D, typename T=double> class Vec;
```

в заголовочном файле `<aiwlib/vec>`.

Под индексом понимается массив целых чисел (тип `int`) длиной D , в дальнейшем мы будем кратко обозначать их как \mathbf{m}_D , \mathbf{n}_D , \mathbf{l}_D или \mathbf{m} , \mathbf{n} , \mathbf{l} если размерность очевидна. Индексы реализованы в виде `alias-a`

```
template<int D> using Ind = Vec<D, int>;
```

в заголовочном файле `<aiwlib/vec>`.

Кроме того доступен `alias`

```
template<int D> using Vecf = Vec<D, float>;
```

Таким образом индексы и вектора имеют практически одинаковые наборы операций, поскольку являются по сути одним и тем же параметризованным классом, и все сказанное для векторов справедливо и для индексов. Для индексов дополнительно перегружены операции

```
template<int D> inline Ind<D>& operator ++ (Ind<D> &I);
template<int D> inline bool operator ^= (Ind<D> &pos, const Ind<D> &Up);
template<int D> inline Ind<D> operator % (size_t x, const Ind<D> &p);
```

применяющиеся для индексации и обхода D -мерной прямоугольной области.

Во всех бинарных операциях, при вызове конструкторов и операций копирования одномерный вектор трактуется как вектор произвольной размерности состоящий из одинаковых компонент.

Для инстаирования C++ векторов в Python при импорте модуля `vec.py` специальным образом подправляется таблица типов SWIG, в результате явного инстаирования (при помощи директивы `%template` в `.i`-файле) не требуется. Модуль `vec.py` предоставляет класс `Vec`, экземпляры которого в зависимости от типа и количества компонент трактуются как экземпляры соответствующих классов `Vec` в C++.

2.4.2 Конструкторы и порождающие функции

Для индексов и векторов реализованы следующие конструкторы — конструктор принимающий один аргумент для инициализации всех компонент, по умолчанию аргумент равен нулю:

```
explicit Vec(T val=0);
```

конструктор копирования:

```
template <class T2> Vec(const Vec<D, T2> &v);
```

конструктор принимающий D аргументов для инициализации:

```
template <typename ... Args> explicit Vec(const Args&... xxx);
```

конструктор принимающий одномерный вектор (трактуются как D -мерный вектор с одинаковыми компонентами):

```
Vec(const Vec<1, T> &v);
```

Кроме того реализованы порождающие функции

```
template <typename T, typename ... Args>
    inline Vec<1+sizeof...(Args), T> vec(T x, Args ... args);
template <typename ... Args> inline Vecf<sizeof...(Args)> vecf(Args ... args);
template<typename ... Args> inline Ind<sizeof...(Args)> ind(Args ... args);
```

В Python для класса `Vec` реализован конструктор, принимающий произвольное число аргументов (компонент) либо кортеж, список или вектор значений компонент (объектов, допускающих приведение к типам `bool/int/long/float/complex`). Тип вектора по умолчанию равен `double` либо явно задается через именованный аргумент конструктора `T`. Размерность вектора определяется по числу компонент, либо явно задается через именованный аргумент конструктора `D`. Реализована порождающая функция `vec`, возвращающая вектор с размерностью равной числу аргументов и типом определяемым на основе типа первого аргумента.

В Python классы `Ind` и `Vecf` определены как наследники класса `Vec`; определены порождающие функции `ind` и `vecf`.

Примеры использования (распространяются так же на классы `Ind` и `Vecf`):

C++:

```
Vec<3> a;      // вектор с D=3, заполненный нулями.
Vec<5> b(1.);  // вектор с D=5, заполненный единицами.
// вектора с D=7 и компонентами (1,2,3,4,5,6,7)
Vec<7> c = Vctr(1,2,3,4,5,6,7);
Vec<7> e = vec(1,2,3,4,5,6,7);
Vec<7> f(1,2,3,4,5,6,7);
```

Python:

```
a = Vec(D=3)      # вектор с D=3, заполненный нулями.
b = Vec(1, D=5)    # вектор с D=5, заполненный единицами.
# вектор с D=7 и компонентами (1,2,3,4,5,6,7)
c = Vec(1,2,3,4,5,6,7)
f = vec((1,2,3,4,5,6,7))
```

2.4.3 Арифметические операции и операции сравнения

Для всех арифметических операций, кроме операций вида `OP=`, тип результата (тип скаляра или тип компонент вектора) определяется на основе оператора `decltype` (в C++11, в Python такое поведение эмулируется). Например при сложении

```
Vec<3, int>(1,2,3)+Vec<3>(1.5, 2.5, 3.5) ==> Vec<3, double>(2.5, 4.5, 6.5)
```

Исключением из этого правила является лишь операция скалярного произведения индексов.

Все арифметические операции для векторов перегружены одинаково в C++ и Python.

Во всех операциях, где это имеет смысл, вектор единичной размерности может трактоваться как D -мерный вектор составленный из одинаковых компонент.

Традиционно для векторов перегружены операции `+`, `-`, `+=`, `-=`, операции умножения на скаляр (`a * x`, `x * a` и `a *= x`), операции деления вектора на скаляр (`a/x` и `a/= x`), операция доступа к элементу `[]`.

Операция умножения `*` вектора на вектор перегружена как скалярное произведение векторов¹. Для индексов операция скалярного умножения возвращает тип `int64_t` во избежании переполнения `int32_t` при индексации многомерных массивов.

¹В отличие от системы `Matlab` транспонирования вектора при этом не требуется

$\mathbf{a} = -\mathbf{b} \rightarrow a_i = -b_i$ $\mathbf{a} = \mathbf{b} + \mathbf{c} \rightarrow a_i = b_i + c_i$ $\mathbf{a} = \mathbf{b} - \mathbf{c} \rightarrow a_i = b_i - c_i$ $\mathbf{a} = \mathbf{b} * x \rightarrow a_i = b_i x$ $\mathbf{a} = x * \mathbf{c} \rightarrow a_i = x c_i$ $\mathbf{a} = \mathbf{b} / x \rightarrow a_i = b_i / x$ $x = \mathbf{b} * \mathbf{c} \rightarrow x = \sum_i b_i c_i$	$\mathbf{a} = +\mathbf{b} \rightarrow a_i = +b_i$ $\mathbf{b} += \mathbf{c} \rightarrow b_i = b_i + c_i$ $\mathbf{b} -= \mathbf{c} \rightarrow b_i = b_i - c_i$ $\mathbf{b} *= x \rightarrow b_i = b_i x$ $\mathbf{b} /= x \rightarrow b_i = b_i / x$
$\mathbf{a} = \mathbf{b} \& \mathbf{c} \rightarrow a_i = b_i c_i$ $\mathbf{a} = \mathbf{b} / \mathbf{c} \rightarrow a_i = b_i / c_i$ $\mathbf{a} = x / \mathbf{c} \rightarrow a_i = x / c_i$	$\mathbf{b} \&= \mathbf{c} \rightarrow b_i = b_i c_i$ $\mathbf{b} /= \mathbf{c} \rightarrow b_i = b_i / c_i$
$\mathbf{a} = \mathbf{b} \ll \mathbf{c} \rightarrow a_i = \min(b_i, c_i)$ $\mathbf{a} = \mathbf{b} \gg \mathbf{c} \rightarrow a_i = \max(b_i, c_i)$	$\mathbf{b} \ll= \mathbf{c} \rightarrow b_i = \min(b_i, c_i)$ $\mathbf{b} \gg= \mathbf{c} \rightarrow b_i = \max(b_i, c_i)$
$\mathbf{a}_3 = \mathbf{b}_3 \% \mathbf{c}_3 \rightarrow \mathbf{a}_3 = [\mathbf{b}_3 \times \mathbf{c}_3]$ $x = \mathbf{b}_2 \% \mathbf{c}_2 \rightarrow x = b_0 c_1 - b_1 c_0$	$\mathbf{l} = k \% \mathbf{m} \quad \text{см. текст}$ $\mathbf{l} \wedge= \mathbf{m} \quad \text{см. текст}$ $++ \mathbf{m} \rightarrow ++ m_0$
$q = \mathbf{b} == \mathbf{c} \rightarrow q = (b_i = c_i \forall i)$ $q = \mathbf{b} < \mathbf{c} \rightarrow q = (b_i < c_i \forall i)$ $q = \mathbf{b} > \mathbf{c} \rightarrow q = (b_i > c_i \forall i)$ $q = \text{bool}(\mathbf{b}) \rightarrow q = (\exists i) b_i \neq 0$	$q = \mathbf{b} != \mathbf{c} \rightarrow q = (\exists i) b_i \neq c_i$ $q = \mathbf{b} <= \mathbf{c} \rightarrow q = (b_i \leq c_i \forall i)$ $q = \mathbf{b} >= \mathbf{c} \rightarrow q = (b_i \geq c_i \forall i)$ $q = !\mathbf{b} \rightarrow q = (b_i = 0 \forall i)$

Таблица 2.1: Арифметические операции и операции сравнения класса `Vec<D,T>`

$x = \mathbf{b}[i] \rightarrow x = b_i$ $x = (\mathbf{a}_D).\text{periodic}(i) \rightarrow x = \mathbf{a}_{(i \% D)}$	$\mathbf{a}[i] = x \rightarrow a_i = x$ $(\mathbf{a}_D).\text{periodic}(i) = x \rightarrow \mathbf{a}_{(i \% D)} = x$
$\mathbf{a}_{D+1} = \mathbf{b}_D x \rightarrow a_i = b_i, a_D = x$ $\mathbf{a}_{D+1} = x \mathbf{b}_D \rightarrow a_0 = x, a_{i+1} = b_i$ $\mathbf{a}_{D_1+D_2} = \mathbf{b}_{D_1} \mathbf{c}_{D_2} \rightarrow a_i = b_i, a_{(i+D_1)} = c_i$	$\mathbf{a}_D = \mathbf{b}_E(\mathbf{m}_D) \rightarrow a_i = b_{m_i}$ $\mathbf{a}_D = \mathbf{b}_E(k_1, \dots, k_D) \rightarrow a_i = b_{k_i}$ $\mathbf{a} = \mathbf{b}.\text{circ}(k) \rightarrow a_i = b_{((i+k) \% D)}$
$x = \mathbf{b}.\text{abs}() \rightarrow x = \sqrt{\sum_i b_i^2}$ $\mathbf{a} = \mathbf{b}.\text{fabs}() \rightarrow a_i = b_i $ $\mathbf{a} = \mathbf{b}.\text{pow}(k) \rightarrow a_i = b_i^k$ $x = \mathbf{b}.\text{sum}() \rightarrow x = \sum_i b_i$ $x = \mathbf{b}.\text{prod}() \rightarrow x = \prod_i b_i$ $x = \mathbf{b}.\text{min}() \rightarrow x = \min b_i$ $x = \mathbf{b}.\text{max}() \rightarrow x = \max b_i$ $k = \mathbf{b}.\text{imin}() \rightarrow x = \arg \min_i b_i$ $k = \mathbf{b}.\text{imax}() \rightarrow x = \arg \max_i b_i$	$\mathbf{a} = \mathbf{b}.\text{ceil}() \rightarrow a_i = ::\text{ceil}(b_i)$ $\mathbf{a} = \mathbf{b}.\text{floor}() \rightarrow a_i = ::\text{floor}(b_i)$ $\mathbf{a} = \mathbf{b}.\text{round}() \rightarrow a_i = ::\text{round}(b_i)$ $\mathbf{a} = \mathbf{b}.\text{fmod}(x) \rightarrow a_i = ::\text{fmod}(b_i, x)$ $\mathbf{a} = \mathbf{b}.\text{fmod}(\mathbf{c}) \rightarrow a_i = ::\text{fmod}(b_i, c_i)$ $\mathbf{m} = \mathbf{b}.\text{nan}() \rightarrow m_i = ::\text{isnan}(b_i)$ $\mathbf{m} = \mathbf{b}.\text{inf}() \rightarrow m_i = ::\text{isinf}(b_i)$ $q = \mathbf{b}.\text{cknan}() \rightarrow q = (\exists i) ::\text{isnan}(b_i)$ $q = \mathbf{b}.\text{ckinf}() \rightarrow q = (\exists i) ::\text{isinf}(b_i)$

Таблица 2.2: Операции и методы для доступа к элементу, изменения размерности и различные преобразования класса `Vec<D,T>`

Операции `a/b`, `a/= b`, `a&b` и `a&= b` перегружены как покомпонетное деление и умножение векторов.

Перегружены операторы побитового сдвига `<<`, `>>`, `<<=`, `>>=`. Выражение `c = a << b` интерпретируется как покомпонетный результат вычисления выражения $c_i = \min(a_i, b_i)$. Такие операторы позволяют эффективно определять границы области значений множества векторов.

Сравнение векторов проводится нетрадиционным образом. Перегружены операторы `<`, `>`, `<=`, `>=`, `==`, `!=`. Считается, что `a < b` при $a_i < b_i \quad \forall i$ и `a ≤ b` при $a_i \leq b_i \quad \forall i$. Аналогично, `a > b` при $a_i > b_i \quad \forall i$ и `a ≥ b` при $a_i \geq b_i \quad \forall i$. Такие операции сравнения позволяют эффективно задавать прямоугольные области как множество индексов/векторов `x` удовлетворяющих условию `a < x < b`.

Для использования векторов в качестве ключей контейнера `std::map` библиотеки STL специализирована структура `std::less`, сравнивающая вектора в обратном лексикографическом порядке. Во избежании влияния ошибок округления, структура `std::less` для векторов использует структуры `std::less` специализированные для типа компонент вектора. В частности, для `double` и `float` в модуле `vec` специализированны структуры `std::less`, не учитывающие при сравнении последний байт (для `float`) и последние два байта (для `double`) мантииссы.

Для использования векторов в качестве ключей словаря Python реализован метод `__hash__`, возвращающий `hash`-значение кортежа, составленного из компонент вектора.

Реализован оператор приведения вектора к типу `bool` (возвращает истину если хотя бы одна компонента не равна нулю) и оператор отрицания `!` (возвращает истину если все компоненты равны нулю).

Для двумерных и трехмерных векторов перегружена операция `%` как операция векторного умножения.

Для индексов перегружена операция

```
Ind<D> operator % (size_t x, const Ind<D> &m);
```

возвращающая индекс — позицию i -го (по счету) элемента в D -мерной области размера `m`, первая компонента считается самой быстрой осью. Операция может использоваться для организации обхода D -мерной области в одном цикле:

```
Ind<D> m = ...;
size_t sz = m.prod();
for(size_t i=0; i<sz; ++i){
    Ind<D> pos = i%m;
    ...
}
```

Операция относительно дорогая и такой вариант не очень эффективен, но зато цикл может быть легко распараллелен средствами библиотеки `OpenMP`.

Для эффективного обхода D -мерных областей в C++ у индексов перегружены операции префиксного инкремента и `^=`:

```
Ind<D>& operator ++ (Ind<D> &l);
bool operator ^= (Ind<D> &l, const Ind<D> &m);
```

Операция инкремента всегда увеличивает нулевую компоненту индекса. Операция $\widehat{l} = m$ проверяет, не вышла ли нулевая компонента индекса l за размеры области m (правая граница не включается) — при необходимости компонента обнуляется, следующая компонента инкрементируется и проверяется ее выход за пределы области. Оператор возвращает истину, если проверенный (и измененный при необходимости) индекс находится внутри области, и ложь если индекс вышел за пределы области (стал равен m). Обход области выглядит как

```
Ind<D> m = ...;
for(Ind<D> l=0; l^=m; ++l){ ... }
```

Такой обход куда эффективнее, но не может быть легко распараллелен средствами библиотеки OpenMP.

Арифметические операции и операции сравнения приведены в таблице 2.1.

2.4.4 Операции и методы для доступа к элементу, изменения размерности и различные преобразования

Для доступа к элементу традиционно перегружена операция `[]`, в C++ при включенном режиме отладки (опция `debug=on` при вызове `make` либо опция `-DEBUG` компилятора) проверяется корректность номера компоненты вектора. В Python для операции `[]` традиционно реализовано взятие среза и адресация с конца при отрицательном значении аргумента. Кроме того, в C++ реализован метод

```
T periodic(int i) const;
T& periodic(int i);
```

использующий положительный остаток от деления i на размерность вектора.

Метод

```
Vec circ(int l) const;
```

возвращает вектор с циклически переставленными на l позиций компонентами.

Операция `|` (побитовое или) обеспечивает «склейку» числа и вектора, вектора и числа или двух векторов.

Операция `()` принимает номера компонент вектора (произвольное количество аргументов) либо индекс произвольной длины с номерами компонент вектора (в Python так же список и кортеж), и возвращает вектор составленный из указанных компонент.

Метод `abs()` возвращает модуль (длину) вектора как корень из суммы квадратов компонент.

Метод `pow(n)` возвращает вектор покомпонентно возведенный в степень n . Предоставляется эффективная реализация для целочисленных степеней, как положительных так и отрицательных.

Методы `fabs()`, `ceil()`, `floor()`, `round()` возвращают вектор с результатами покомпонентного применения соответствующих функций библиотеки `math.h`.

Метод `fmod(y)` принимает скаляр либо вектор и возвращает вектор с результатами покомпонентного применения функции `::fmod(x, y)` библиотеки `math.h`, тип результирующего

вектора определяется на основе оператора `decltype` (в C++11, в Python такое поведение эмулируется).

Методы `sum()` и `prod()` возвращают скаляр — сумму и произведение компонент вектора. На случай расчета размера больших D -мерных прямоугольных областей, во избежании переполнения `int32_t`, предоставляется метод

```
template <typename T2> inline void prod(T2 &res) const;
```

Методы `min()` и `max()` возвращают значение минимальной и максимальной компоненты вектора. Методы `imin()` и `imax()` возвращают номер минимальной и максимальной компоненты вектора (первой по счету из минимальной/максимальной, если есть компоненты с одинаковыми значениями).

Методы `nan()` и `inf()` возвращают индекс, содержащий результаты проверки компонент вектора при помощи функций `::isnan()` и `::isinf()` библиотеки `math.h`. Методы `cknan()` и `ckinf()` возвращают истину, если хотя бы одна из компонент вектора содержит значение `NAN` или `INF` (проверяется функциями `::isnan()` и `::isinf()` библиотеки `math.h`).

Операции и методы для доступа к элементу, изменения размерности и различные преобразования приведены в таблице 2.2.

2.4.5 Другие операции и методы

Для сериализации векторов в Python перегружены специальные методы `__get/setstate__`.

Для векторов перегружены операции форматированного ввода/вывода в потоки `std::iostream` и операция форматированного вывода в потоки `aiw::IOstream`.

Для векторов перегружены операции бинарного ввода/вывода `<>` в потоки `aiw::IOstream`.

2.4.6 Детали реализации

При написании модуля `vec` основной проблемой являлась необходимость инстанцирования шаблона `Vec` в Python при помощи SWIG. Ситуация усугублялась тем, что модуль `vec` написан с широким использованием возможностей C++11 (шаблонов с переменным числом аргументов, оператора `decltype`, принципа `SFINAE`) — в момент написания модуля утилита SWIG эти возможности не поддерживала. Кроме того, сама необходимость инстанцирования большого числа шаблонов `Vec` с разными наборами параметров существенно усложняла сборку и эксплуатацию библиотеки.

В итоге было решено отказаться от прямого инстанцирования шаблонов `Vec` при помощи директивы `%template` утилиты SWIG. Вместо этого на Python был написан отдельный модуль `vec.py`, использующий служебный класс `PVec` и несколько функций из заголовочного файла `aiwlib/swig`. При импорте модуль `vec.py` анализирует таблицу типов SWIG и устанавливает дополнительные связи между всеми использованиями шаблонов `Vec` в импортируемом C++-коде и служебным классом `PVec`. В итоге, поведение шаблонов класса `Vec` полностью эмулируется в Python, единственным ограничением является размер вектора в памяти, ограниченный размером памяти выделяемой под класс `PVec` — в настоящий момент он не должен превышать 1024 байта.

Для корректной работы с C++ методами имеющими аргументы (возвращающими значения) и переменными типа `Vec`, достаточно проимпортировать модуль `aiwlib.vec` как

```
import aiwlib.vec
```

или

```
from aiwlib.vec import *
```

Для удобства работы рекомендуется второй вариант, хотя и в первом варианте переменные и возвращаемые значения типа `Vec` оказываются полностью работоспособными в Python.

Модуль `vec` подключает и использует следующие библиотеки:

- `<math.h>` — стандартные математические функции;
- `"aiwlib/debug"` — средства отладки (проверка диапазона номеров компонент).

2.5 Равномерные многомерные прямоугольные (картезианские) сетки — модуль `mesh`

2.5.1 Общие замечания

Равномерные прямоугольные сетки реализованы в заголовочном файле `<aiwlib/mesh>` в виде параметризованного класса `Mesh<T,D>`, где T — тип ячейки массива, D — размерность массива.

Многомерные сетки поддерживают настройку осей координат — для каждой оси могут быть заданы пределы, шаг и опционально логарифмический масштаб. Поддерживается обращение к ячейкам сетки как по индексу (номеру по всем осям) так и по координате, которая пересчитывается в индекс на основе настроек осей. Кроме того, возможно использование интерполяции различных порядков, задание периодических граничных условий, продолжение сетки за область ее определения на основе граничных значений.

Многомерная сетка (массив) эмулируется при помощи одномерного массива, смещение в котором пересчитывается с учетом размеров многомерной области. Предоставляются средства для организации эффективного обхода содержимого сетки с учетом локальности данных.

Многомерные сетки `aiw::Mesh` обеспечивают упорядоченный доступ к некоторому участку памяти. Возможно создание сеток с другими размерами, обеспечивающих доступ к тому же участку. В частности, конструкторы копирования сеток не выделяют новых участков памяти под данные — копии ссылаются на тот же участок. Сборка мусора производится на основе подсчета ссылок. С одной стороны это существенно ускоряет копирование объектов, с другой стороны копии не являются независимыми, т.е. изменение данных в одной копии влечет за собой изменение всех остальных копий. Для полноценного копирования с выделением нового участка памяти под данные используется метод `copy()`.

Многомерные сетки допускают проведение ряда преобразований — разворот и изменение порядка нумерации осей координат, вырезание подобластей, построение срезов и т.д. При этом не происходит копирование данных исходной сетки, а лишь предоставляется альтернативный способ доступа к исходным данным, что открывает широкие возможности для манипуляций с данными.

Многомерные сетки обеспечивают запись и чтение данных на диск в бинарном формате (сейчас используется старый формат библиотеки `aivlib`) и форматированный вывод данных в текстовом виде для `gnuplot`.

2.5.2 Поля и методы для получения информации о сетке

Класс `Mesh<T, D>` содержит следующие открытые поля:

```
std::string head; // произвольный текстовый заголовок
T out_value;      // значение (ячейка) за пределами сетки
aiw::Vec<D> bmin;  // координаты левого нижнего угла области
aiw::Vec<D> bmax;  // координаты правого верхнего угла области
aiw::Vec<D> step;  // размер ячейки сетки
aiw::Vec<D> rstep; // обратный размер ячейки
int logscale;     // битовая маска отмечающая логарифмические масштабы осей
```

Класс `Mesh<T, D>` предоставляет следующие методы для получения информации о состоянии сетки

```
size_t size() const; // общее число элементов сетки
aiw::Ind<D> bbox() const; // размеры сетки по всем осям
size_t mem_size() const; // размер области памяти в ячейках
size_t mem_sizeof() const; // размер ячейки в байтах
```

Методы `mem_size()` и `mem_sizeof()` выдают информацию об области памяти сетки без учета проведенных преобразований.

2.5.3 Инициализация сетки и настройка осей

Для настройки осей сетки предназначен метод

```
void set_axes(const aiw::Vec<D> &bmin, const aiw::Vec<D> &bmax, int logscale=0);
```

Метод настраивает оси на основе текущих размеров сетки в ячейках.

Для инициализации сетки (выделения памяти) служат методы

```
void init(const aiw::Ind<D> &box);
void init(const aiw::Ind<D> &box,
          const aiw::Vec<D> &bmin, const aiw::Vec<D> &bmax, int logscale=0);
```

Вторая версия метода `init` производит настройку осей после выделения памяти. Первая версия метода `init` настраивает оси по умолчанию — размеры области от нуля до `box` (шаг равен единице), логарифмического масштаба нет.

Каждый вызов метода `init` приводит к выделению новой области памяти под данные, однако старая область памяти может оказаться используемой другой сеткой и не обязательно будет освобождена, см. раздел [2.5.6](#)

Все настройки осей хранятся в открытых полях `bmin`, `bmax`, `step`, `rstep` и `logscale`. Несогласованное изменение этих полей может привести к некорректному преобразованию координат точки в индекс ячейки сетки.

Кроме того, для настройки граничных условий и интерполяции используются поля

```

int periodic; // битовая маска, задающая периодические граничные условия для осей
Ind<2> bound_min, bound_max; // битовые маски, задающие обработку границ слева/справа
                        // 0 - ничего не делать (при выходе за границу выкидывает искл
                        // 1,0 - возвращает out_value
                        // 1,1 - возвращает крайнее значение
Ind<3> Itype; // битовые маски, задающие типы интерполяции по осям:
                // 0 - без интерполяции, 1,0 - линейная, 1,1,0 - кубическая, 1,1,1 - В-с

```

2.5.4 Доступ к ячейкам

Сетки обеспечивают доступ к ячейкам по координате (вектору) или индексу (набору номеров ячейки по всем осям).

Базовыми являются методы

```

inline aiw::Ind<D> coord2pos(const aiw::Vec<D> &r) const;
inline double pos2coord(int pos, int axe) const;
inline aiw::Vec<D> pos2coord(const aiw::Ind<D> &p) const;
inline aiw::Vec<D> cell_angle(const aiw::Ind<D> &p, bool up) const;

```

пересчитывающие координаты в индексы и обратно согласно настройкам осей. Метод `pos2coord` возвращает координаты центра ячейки. Метод `cell_angle` в зависимости от аргумента `up` возвращает координаты левого нижнего или правого верхнего угла ячейки.

Для доступа к ячейкам служат методы

```

inline const T& get(const aiw::Ind<D> &pos) const;
inline const T& get(const aiw::Vec<D> &r) const;

```

В зависимости от значений полей `periodic`, `bound_min` и `bound_max` при промахе (выходе за границы сетки) реализуются периодические граничные условия (если поднят соответствующий бит маски `periodic`), выкидывается исключение (если не поднят соответствующий бит в маске `bound_min/max[0]`), обеспечивается доступ к полю `out_value` (если поднят соответствующий бит в маске `bound_min/max[0]`) либо к граничной ячейке (если поднят соответствующий бит в маске `bound_min/max[1]`). В настоящий момент функция `get` обеспечивает довольно гибкое управление поведением сетки при промахах, но при этом проводится довольно много проверок.

Метод доступа по вектору требует дополнительных вычислений для перевода вектора в индекс ячейки. При промахе (если вектор попадает за пределы обоасти сетки) обеспечивается доступ к открытому полю сетки `out_value`.

Для традиционного доступа в C++ перегружены операции

```

inline const T& operator [] (const aiw::Ind<D> &p) const;
inline          T& operator [] (const aiw::Ind<D> &p);
inline const T& operator [] (const aiw::Vec<D> &r) const;
inline          T& operator [] (const aiw::Vec<D> &r);

```

вызывающие функции `get`, те же операторы перегружены в Python как

```
inline const T& __getitem__(const aiw::Ind<D> &p) const;
inline const T& __getitem__(const aiw::Vec<D> &r) const;
inline void __setitem__(const aiw::Ind<D> &p, const T& v);
inline void __setitem__(const aiw::Vec<D> &r, const T& v);
```

Для реализации доступа с периодическими граничными условиями предназначены методы²

```
template<int P> inline const T& periodic_bc(Ind<D> pos) const;
template<int P> inline T& periodic_bc(Ind<D> pos);
```

где P — битовая маска, указывающая по каким осям необходимо создать периодичность. Например $P = 5$ задаст периодические граничные условия по осям x и z . Методы `periodic_bc` корректируют компоненты индекса по тем осям, для которых указаны периодические граничные условия, и затем вызывают метод `get`.

Для интерполяции перегружена операция

```
inline T operator () (const aiw::Vec<D> &r) const;
```

тип интерполяции задается при помощи битовых масок `Ind<3> Itype`, при этом используются функции из модуля `interpolations` (см. 2.7). Соответствующие некоторой оси axe биты в `Itype` означают: `Itype[0]&(1<<axe)==0` — интерполяция нулевого порядка (кусочно-постоянная в рамках ячейки), `Itype[0]&(1<<axe)==1, Itype[1]&(1<<axe)==0` — линейная интерполяция между центрами ячеек, `Itype[0]&(1<<axe)==1, Itype[1]&(1<<axe)==1, Itype[2]&(1<<axe)==0` — локальный кубический сплайн, `Itype[0]&(1<<axe)==1, Itype[1]&(1<<axe)==1, Itype[2]&(1<<axe)==1` — кубический B -сплайн.

При интерполяции на границе сетки важны настройки `periodic` и `bound_min/max`. Функции из модуля `interpolations` не проверяют выход за границы, поэтому при `bound_min/max[0]&(1<<axe)==1` возможна генерация исключения.

2.5.5 Обход сетки

Для оптимального обхода сетки предназначены методы

```
inline aiw::Ind<D> inbox(size_t offset) const;
inline aiw::Ind<D> first() const;
inline bool next(aiw::Ind<D> &pos) const;
```

Метод `inbox` преобразует номер элемента сетки (от начала области памяти) в его индекс. Для непреобразованной сетки его результат будет совпадать с результатами операции `offset%bbox()`, однако для преобразованной сетки это может быть неверно. Метод `inbox` является относительно дорогостоящим, но обеспечивает оптимальный (с точки зрения локальности данных) порядок обхода сетки и позволяет легко распараллеливать циклы обходы средствами библиотеки `OpenMP`.

²Пока оставлено для обратной совместимости

```

Mesh<T,D> M;
...
size_t sz = M.size();
#pragma omp parallel for
  for(size_t i=0; i<sz; ++i){
    Ind<D> pos = M.inbox(i);
    ...
  }

```

Аналогичный порядок обхода (с меньшими накладными расходами, но без такого простого распараллеливания) можно получить при помощи конструкции

```

Ind<D> pos=M.first();
do{...} while(M.next(pos));

```

Для непреобразованных сеток этот обход эквивалентен конструкции

```

for(Ind<D> pos; pos~=M.bbox(); ++pos){...}

```

но после преобразований такой вариант может оказаться неэффективным.

2.5.6 Преобразования сеток

Для преобразования сеток служат методы

```

Mesh flip(int a, bool axe=true) const;
Mesh transpose(int a, int b) const;
Mesh crop(aiw::Ind<D> l, aiw::Ind<D> m, aiw::Ind<D> n=Ind<D>(1)) const;
template <class T2, int D2>
  Mesh<T2, D2> slice(Ind<D> pos, size_t offset_in_cell) const;

```

Все эти методы не приводят к выделению новых областей памяти для данных сетки, а лишь создают альтернативные способы доступа к уже выделенной памяти в исходной сетке. После создания преобразованной сетки исходная сетка может быть удалена/перенициализирована, однако освобождение памяти произойдет лишь после уничтожения/перенициализации всех преобразованных сеток. Сборка мусора осуществляется при помощи подсчета ссылок на основе указателя `std::shared_ptr<BaseAlloc>`, исходная сетка и построенные на ее основе преобразованные сетки являются равноправными владельцами выделенной под данные памяти.

Метод `flip(int a, bool axe=true)` разворачивает (отражает) ось *a*, параметр *axe* указывает следует ли преобразовать так же настройки оси (пределы и шаг).

Метод `transpose(int a, int b)` меняет оси *a* и *b* местами, при этом преобразуются так же настройки осей.

Метод `crop(aiw::Ind<D> l, aiw::Ind<D> m, aiw::Ind<D> n=Ind<D>(1))` вырезает фрагмент сетки с левым нижним углом в ячейке *l*, правым верхним углом в ячейке *m*, правая верхняя граница не включается. При задании *l* и *m* допускается использовать отрицательные значения, которые отсчитываются от верхней границы (размера сетки) по соответствующей оси. Необязательный параметр *n* позволяет задать шаг, т.е. использовать каждую *n*-ю ячейку внутри указанной области.

Метод `slice<D2, T2>(Ind<D> pos, size_t offset_in_cell)` позволяет строить срезы — уменьшать размерность сетки и изменять тип хранимых данных, например составляя новую сетку из отдельных полей структуры хранящейся в исходной сетке.

Для уменьшения размерности необходимо указать в аргументе `pos` значения -1 по тем осям, которые должны войти в срез (ровно D_2 штук), и положение среза по остальным осям.

Для изменения типа данных необходимо указать новый тип и сдвиг данных внутри исходной структуры в байтах. Следует с осторожностью использовать этот вариант вызова метода `slice`, поскольку неверно вычисленное смещение может привести к непредсказуемым результатам. Допустим есть структура

```
struct Cell{ double a, b; int c[10];};
```

для которой создана сетка `Mesh<Cell,2> A`; Тогда, вызов

```
Mesh<int,1> B = A.slice<1, int>(Indx(10,-1), 2*8+2*4);
```

создаст срез `B` в виде одномерного массива развернутого по оси y , проходящего через десятые ячейки по оси x , и обеспечивающий доступ к полям `c[2]` соответствующих ячеек.

В настоящий момент метод `slice` доступен из Python-а как семейство методов

```
sliceX(self, pos, offset=0)
```

где X пробегает значения от 1 до $D-1$. Таким образом в Python возможно построение срезов, но невозможно изменение типа ячеек³.

2.5.7 Сохранение и загрузка сеток

Для сохранения и загрузки содержимого сеток в бинарном формате предназначены методы

```
void dump(aiw::IOstream &&S) const;
void load(aiw::IOstream &&S, int use_mmap=0);
void dump(aiw::IOstream &S) const;
void load(aiw::IOstream &S, int use_mmap=0);
```

В настоящий момент используется старый формат библиотеки `aivlib`. Необязательны параметр `use_mmap` указывает на использование мапирования файла, 0 — не использовать мапирование, 1 — мапировать файл только на чтение, 2 — мапировать файл на чтение и запись.

Кроме того перегружены операции `<>` для бинарного ввода/вывода

```
IOstream& operator < (IOstream &S, const Mesh<T, D> &M);
IOstream& operator > (IOstream &S, Mesh<T, D> &M);
```

Для форматированного вывода (`.dat`-файлы для `gnuplot`) предназначен метод

```
template <typename S>
void out2dat(S &&str, Ind<D> coords=Ind<D>(2), const char* prefix=nullptr) const;
```

³Поскольку изменение типа ячейки невозможно, изначальный смысл аргумента `offset` в Python теряется, однако возможны экзотические ситуации когда этот аргумент все же будет востребован

и его оболочки для конкретных видов потоков для инстаирования в Python

```
void out2dat(std::ostream &str=std::cout, aiw::Ind<D> coords=aiw::Ind<D>(2),
            const char* prefix=nullptr) const;
void out2dat(aiw::IOstream &str, aiw::Ind<D> coords=aiw::Ind<D>(2),
            const char* prefix=nullptr) const;
```

Аргумент `coords` содержит режимы вывода для каждой из координатных осей, возможны следующие режимы:

- 0 — выводить значения из сетки вдоль оси в одну строку через пробел;
- 1 — выводить номер ячейки;
- 2 — выводить координату центра ячейки;
- 3 — не выводить ни номер ячейки ни координату центра ячейки;
- +4 — не выводить пустую строку при изменении номера ячейки, не влияет на режим 0.

Аргумент `prefix` задает префикс перед каждой (не пустой) строкой при выводе. Для загрузки сеток из `.dat`-файлов используется C++ модуль `dat2mesh` (см. раздел 2.8).

Для сериализации сеток при помощи модуля `pickle` в Python реализованы методы

```
std::string __getstate__() const;
void __C_setstate__(const std::string &state);
```

2.5.8 Другие методы

Для получения копии сетки (с отдельной областью памяти) предназначен метод

```
Mesh copy() const;
```

Новая сетка является упорядоченной, в ее память переносятся лишь те данные, к которым обеспечивала доступ исходная сетка.

Для заполнения сетки предназначены методы

```
void fill(const T &x);
template <typename T2> void fill(const Mesh<T2, D> &M);
void fill(const Mesh &M);
void fill(aiw::IOstream &&S);
void fill(aiw::IOstream &S);
```

Метод `fill(const T &x)` заполняет все ячейки значением x .

Метод `fill(const Mesh<T2, D> &M)` копирует в сетку содержимое сетки M , при этом должен существовать оператор приведения типа T_2 к T . Если размеры (в ячейках) заполняемой сетки и сетки M не совпадают, копируются данные лишь из области пересечения сеток.

Метод `fill(aiw::IOstream)` загружает сетку из потока (при этом предполагается что тип данных совпадает с заполняемой сеткой), и вызывает метод `fill(const Mesh &M)`.

Метод `min_max(T &a, T &b, aiw::Ind<D> &pos_a, aiw::Ind<D> &pos_b)` находит минимальное a и максимальное b значения в ячейках сетки, а так же их индексы.

2.5.9 Инстацирование в Python

Для каждого набора параметров шаблон сетки должен быть инстацирован в питон при помощи утилиты `make`. Для этого в директории библиотеки `aiwlib` надо набрать команду

```
make MeshXXX-T-D
```

где `MeshXXX` — имя инстацируемого шаблона в Python (оно же имя модуля содержащего инстацированный шаблон), `T` — тип данных ячейки в C++, `D` — размерность. Например команда

```
make MeshF3-float-3
```

создаст модуль `MeshF3` содержащий класс `MeshF3` отвечающий шаблону `Mesh<float,3>`.

2.6 Операции над равномерными многомерными прямоугольными (картезианскими) сетками — модуль `meshop`

2.6.1 Общие замечания

Модуль `meshop` перегружает операции «унарный минус», бинарные `+`, `-`, `*`, `/`, `^` (как степень) и функции `abs`, `acos`, `asin`, `atan`, `ceil`, `cos`, `exp`, `fabs`, `floor`, `log`, `log10`, `sin`, `sinh`, `sqrt`, `tan`, `tanh`, `atan2`, `fmod`, `pow` над экземплярами классов `Mesh<T,D>`.

Допускаются выражения произвольной сложности, содержащие перегруженные операции и функции, операндами которых являются экземпляры классов `Mesh<T,D>` или любые другие данные, для которых выражение будет иметь смысл если вместо экземпляров классов `Mesh<T,D>` подставляется значения из одной ячейки (типа `T`).

Само по себе выражение не приводит к выполнению каких либо действий, пока не будет выполнена операция `<=<` левым операндом которого должен быть экземпляр класса `Mesh<T,D>`, а правым построенное выражение. При этом запускается цикл по ячейкам сетки стоящей слева от операции `<=<`, для каждой ячейки сетки слева отдельно вычисляется и записывается результат выражения справа. Например:

```
#import <aiwlib/meshop>
using namespace aiw;

...
Mesh<float, 3> f; f.init(ind(10,10,10));
f <=<= 1; // заполнить сетку f единицами
f = f*2; // умножить значения f на два
Mesh<double, 3> g;
...
f <=<= g*f+2*sin(g); // выражение выполняется по ячейкам независимо
```

Пределы, шаги и логарифмические масштабы всех сеток задействованных в выражении игнорируются, значение имеют лишь размеры сеток в ячейках.

2.6.2 Детали реализации

В модуле `meshop` для каждой перегруженной операции и функции объявлен свой класс, параметризованный по типу операндов. Все эти классы, как и класс `Mesh`, являются наследниками пустой структуры `BaseMeshOp` объявленной в модуле `mesh`.

При помощи технологии `SFIANE`⁴, реализованной через шаблоны `std::enable_if` и `std::is_base_of`, операции и функции перегружаются только для тех случаев, когда хотя бы один из операндов является наследником структуры `BaseMeshOp`. В итоге компилятор превращает выражение справа от оператора `<<=` в AST (абстрактное синтаксическое дерево) собранное из объявленных в модуле `meshop` классов, которое позволяет вычислить значение выражение для произвольной (формально) позиции в сетке.

2.7 Различные варианты интерполяции — модуль `interpolations`

2.7.1 Локальный кубический сплайн

Локальный кубический сплайн строится по четырем отсчетам интерполируемой функции $f_{-1,0,1,2}$ как

$$\tilde{f}(x) = \sum_{i=-1}^2 W_i(x) f_i = \sum_{j=0}^3 S_j x^j, \quad x \in [0, 1].$$

При этом должны выполняться следующие условия

$$\tilde{f}(0) = f_0, \quad \tilde{f}(1) = f_1, \quad \tilde{f}'(0) = \frac{f_1 - f_{-1}}{2}, \quad \tilde{f}'(1) = \frac{f_2 - f_0}{2},$$

что дает в итоге СЛАУ на коэффициенты S_i :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} \cdot \mathbf{S} = \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ \frac{f_1 - f_{-1}}{2} \\ \frac{f_2 - f_0}{2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -3 & 3 & -2 & -1 \\ 2 & -2 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ \frac{f_1 - f_{-1}}{2} \\ \frac{f_2 - f_0}{2} \end{pmatrix},$$

откуда

$$\begin{aligned} \tilde{f} &= f_0 + \frac{f_1 - f_{-1}}{2} x + \left[-3f_0 + 3f_1 + f_{-1} - f_1 + \frac{f_0 - f_2}{2} \right] x^2 + \left[2f_0 - 2f_1 + \frac{f_1 - f_{-1} + f_2 - f_0}{2} \right] x^3 = \\ &= \left(-\frac{x}{2} + x^2 - \frac{x^3}{2} \right) f_{-1} + \left(1 - \frac{5}{2}x^2 + \frac{3}{2}x^3 \right) f_0 + \left(\frac{x}{2} + 2x^2 - \frac{3}{2}x^3 \right) f_1 + \left(-\frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{2} \right) f_2. \end{aligned}$$

Веса при $f_{-1...2}$ рассчитываются при помощи функции C++ модуля `interpolations`

```
inline Vec<4> interpolate_cube_weights(double x);
```

⁴ «Substitution failure is not an error» — неправильная подстановка не является ошибкой

2.7.2 Кубический B -сплайн

Фрагмент кубического B -сплайна на участке $[x_j, x_{j+1}]$ определяется как

$$\tilde{f}(x) = \sum_{i=j-1}^{j+2} f_i N_{i,4}(x), \quad x \in [0, 1],$$

где⁵ на равномерной сетке по x , при $x_{i+1} - x_i = 1 \forall i$

$$\begin{aligned} N_{i,k}(x) &= \frac{\left(x - x_{i-\frac{k}{2}}\right) N_{i-\frac{1}{2},k-1}(x) + \left(x_{i+\frac{k}{2}} - x\right) N_{i+\frac{1}{2},k-1}(x)}{k-1} = \\ &= \frac{\chi_{-k} N_{i-\frac{1}{2},k-1} - \chi_k N_{i+\frac{1}{2},k-1}(x)}{k-1}, \quad N_{i,1}(x) \equiv \Pi_i = \begin{cases} 1, & x_{i-\frac{1}{2}} \leq x < x_{i+\frac{1}{2}}, \\ 0, & \text{else,} \end{cases} \end{aligned}$$

где $\chi_k = x - x_{i+\frac{k}{2}}$. Тогда, с учетом того что $x - \left(x_{i+\frac{k}{2}} + \Delta\right) = \chi_{k+2\Delta}$, получаем

$$N_{i,2}(x) = \chi_{-2} \Pi_{i-\frac{1}{2}} - \chi_2 \Pi_{i+\frac{1}{2}},$$

$$\begin{aligned} N_{i,3}(x) &= \frac{\chi_{-3} N_{i-\frac{1}{2},2} - \chi_3 N_{i+\frac{1}{2},2}}{2} = \frac{1}{2} \left\{ \chi_{-3} [\chi_{-3} \Pi_{i-1} - \chi_1 \Pi_i] - \chi_3 [\chi_{-1} \Pi_i - \chi_3 \Pi_{i+1}] \right\} = \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \chi_{-3}^2 \Pi_{i-1} - [\chi_{-3} \chi_1 + \chi_{-1} \chi_3] \Pi_i + \chi_3^2 \Pi_{i+1} \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} N_{i,4}(x) &= \frac{\chi_{-4} N_{i-\frac{1}{2},3} - \chi_4 N_{i+\frac{1}{2},3}}{3} = \frac{1}{6} \left\{ \chi_{-4}^3 \Pi_{i-\frac{3}{2}} - \chi_{-4} [\chi_{-4} \chi_0 + \chi_{-2} \chi_2] \Pi_{i-\frac{1}{2}} + \chi_{-4} \chi_2^2 \Pi_{i+\frac{1}{2}} - \right. \\ &\quad \left. - \chi_{-2}^2 \chi_4 \Pi_{i-\frac{1}{2}} + [\chi_{-2} \chi_2 + \chi_0 \chi_4] \chi_4 \Pi_{i+\frac{1}{2}} - \chi_4^3 \Pi_{i+\frac{3}{2}} \right\} = \\ &= \frac{1}{6} \left\{ \chi_{-4}^3 \Pi_{i-\frac{3}{2}} - [\chi_{-4}^2 \chi_0 + \chi_{-4} \chi_{-2} \chi_2 + \chi_{-2}^2 \chi_4] \Pi_{i-\frac{1}{2}} + [\chi_{-4} \chi_2^2 + \chi_{-2} \chi_2 \chi_4 + \chi_0 \chi_4^2] \Pi_{i+\frac{1}{2}} - \chi_4^3 \Pi_{i+\frac{3}{2}} \right\}. \end{aligned}$$

В итоге получаем

$$\tilde{f} = \frac{1}{6} \left\{ -\chi_2^3 f_{-1} + [\chi_{-4} \chi_2^2 + \chi_{-2} \chi_2 \chi_4 + \chi_0 \chi_4^2] f_0 - [\chi_{-2}^2 \chi_2 + \chi_{-2} \chi_0 \chi_4 + \chi_0^2 \chi_6] f_1 + \chi_0^3 f_2 \right\},$$

или после преобразований в `Mathematica`:

$$\chi_{-4} \chi_2^2 + \chi_{-2} \chi_2 \chi_4 + \chi_0 \chi_4^2 \rightarrow$$

(%i1) `expand((x+2)*(x-1)^2 + (x+1)*(x-1)*(x-2)+x*(x-2)^2);`

(%o1)
$$3x^3 - 6x^2 + 4x$$

⁵почему то во всех источниках выражения для $N_{i,k}$ сдвинуты вперед на единицу, что приводит к ассиметрии. На самом деле центр функции $N_{i,k}$ должен совпадать с точкой x_i ?

$$\chi_{-2}^2 \chi_2 + \chi_{-2} \chi_0 \chi_4 + \chi_0^2 \chi_6 \rightarrow$$

```
(%i2) expand((x+1)^2*(x-1)+(x+1)*x*(x-2)+x^2*(x-3));
```

```
(%o2)          3      2
          3 x  - 3 x  - 3 x - 1
```

$$\tilde{f} = \frac{1}{6} \left\{ \left[-x^3 + 3x^2 - 3x + 1 \right] f_{-1} + \left[3x^3 - 6x^2 + 4 \right] f_0 + \left[-3x^3 + 3x^2 + 3x + 1 \right] f_1 + x^3 f_2 \right\}.$$

Веса при $f_{-1\dots 2}$ рассчитываются при помощи функции C++ модуля `interpolations`

```
inline Vec<4> interpolate_Bspline_weights(double x);
```

2.7.3 Функции модуля `interpolations`

Для проведения интерполяции используется параметризованная функция (`frontend`)

```
template<typename C>
typename C::cell_type interpolate(const C& arr,          // контейнер
                                const Ind<C::dim> &pos, // позиция ячейки
                                const Vec<C::dim> &x,   // координаты в ячейке
                                const Ind<3> &Itype);   // тип интерполяции
```

где `Itype` — битовые маски. Соответствующие некоторой оси `axe` биты в `Itype` означают: `Itype[0]&(1<<axe)==0` — интерполяция нулевого порядка (кусочно-постоянная в рамках ячейки), `Itype[0]&(1<<axe)==1, Itype[1]&(1<<axe)==0` — линейная интерполяция между центрами ячеек, `Itype[0]&(1<<axe)==1, Itype[1]&(1<<axe)==1, Itype[2]&(1<<axe)==0` — локальный кубический сплайн, `Itype[0]&(1<<axe)==1, Itype[1]&(1<<axe)==1, Itype[2]&(1<<axe)==1` — кубический B -сплайн.

2.8 Загрузка сеток из `.dat`-файлов — модуль `dat2mesh`

Модуль предназначен для загрузки сеток `Mesh<T, D>` из `.dat`-файлов, содержащих данные в текстовом формате в несколько колонок. Строки, начинающиеся с символа `#` и пустые строки игнорируются.

Возможно два режима работы — заполнение готовой сетки (с известными размерами, пределами и шагами по осям и т.д. и т.п.) или создание новой сетки (при этом шаги и пределы выбираются автоматически, необходимо лишь указать по каким осям используется логарифмический масштаб).

Для заполнения готовых сеток используются функции

```
template <typename T, int D, typename S>
void dat2Mesh(S&& str, Mesh<T, D> &dst, int vcol=0, Ind<D> rcols=Ind<D>());
template <typename T, int D, typename S>
void dat2Mesh(S&& str, Mesh<T, D> &dst, std::vector<int> vcols={}, int vaxe=-1,
              Ind<D> rcols=Ind<D>());
```

и их оболочки для конкретных типов потока ввода-вывода

```

template <typename T, int D>
void dat2Mesh(std::istream& str, aiw::Mesh<T, D> &dst,
              int vcol=0, aiw::Ind<D> rcols=aiw::Ind<D>());
template <typename T, int D>
void dat2Mesh(aiw::IOstream& str, aiw::Mesh<T, D> &dst,
              int vcol=0, aiw::Ind<D> rcols=aiw::Ind<D>());
template <typename T, int D>
void dat2Mesh(std::istream& str, aiw::Mesh<T, D> &dst,
              std::vector<int> vcols={}, int vaxe=-1,
              aiw::Ind<D> rcols=aiw::Ind<D>());
template <typename T, int D>
void dat2Mesh(aiw::IOstream& str, aiw::Mesh<T, D> &dst,
              std::vector<int> vcols={}, int vaxe=-1,
              aiw::Ind<D> rcols=aiw::Ind<D>());

```

Аргумент `vcol` содержит номер столбца файла, в котором лежат значения (либо номера столбцов, если по одной из координат сетки значения записаны в строку, в этом случае соответствующая ось сетки задается при помощи аргумента `vaxe`). Аргумент `rcols` содержит номера столбцов файла, в которых лежат координаты. Допускается индексация столбцов с конца строки с минусом, как в Python.

Для создания новых сеток используются функции

```

template <typename T, int D, typename S>
Mesh<T,D> dat2Mesh(S &&str, T def_val=0., // значение по умолчанию
                  int vcol=0, // столбец из которого берутся значения
                  Ind<D> rcols=Ind<D>(), // соответствие столбцов координатам сетки,
                  int logscale=0, // логарифмический масштаб (битовая маска)
                  Vec<D> eps=Vec<D>(1e-6)); // ошибка (окно кластеризации) при разборе координат
template <typename T, int D, typename S>
Mesh<T,D> dat2Mesh(S &&str, T def_val=0., // значение по умолчанию
                  std::vector<int> vcols={}, // столбцы из которых берутся значения
                  int vaxe=-1, // координата сетки по которой значения развернуты в строку
                  Ind<D> rcols=Ind<D>(), // соответствие столбцов координатам сетки,
                  int logscale=0, // логарифмический масштаб (битовая маска)
                  Vec<D> eps=Vec<D>(1e-6)); // ошибка (окно кластеризации) при разборе координат

```

и их оболочки для конкретных типов потока ввода-вывода.

При создании новой сетки необходимо явно указать битовую маску `logscale`, задающую логарифмический масштаб по отдельным осям. Для вычисления параметров осей (пределов, числа ячеек и шагов) используется алгоритм кластеризации. Для каждой оси все отсчеты (координаты) $\{x_i\}$, $i \in [1, N]$ упорядочиваются по возрастанию. Затем отсчеты объединяются в группы, расстояние между соседними отсчетами в группе не должно превышать значения аргумента `eps` (для логарифмического масштаба отношение соседних отсчетов не должно превышать $1+\text{eps}$). Для каждой группы вычисляется координата центра группы X_j , $j \in [1, M]$, $M \leq N$ как среднее арифметическое (для логарифмического масштаба как среднее геометрическое). Число ячеек по соответствующей оси принимается равным M , пределы сетки b_{\min} и

b_{\max} рассчитываются как

$$b_{\min} = X_1 - \frac{\Delta}{2}, \quad b_{\max} = X_M + \frac{\Delta}{2}, \quad \Delta = \begin{cases} \frac{X_M - X_1}{M - 1}, & M > 1, \\ x_N - x_1 + 2\text{eps}, & M = 1, \end{cases}$$

или для логарифмического масштаба

$$b_{\min} = \frac{X_1}{\sqrt{\Delta}}, \quad b_{\max} = X_M \sqrt{\Delta}, \quad \Delta = \begin{cases} \exp \frac{\log X_M / X_1}{M - 1}, & M > 1, \\ \frac{x_N}{x_1} + 2\text{eps}, & M = 1. \end{cases}$$

2.9 Построение линий постоянного уровня для двумерной сетки — модуль `isolines`

Для построения изолиний (линий постоянного уровня) на сеточных функциях $f(x, y)$ C++ модуль `isolines` предоставляет класс

```
class IsoLines{
public:
    init(const aiw::Mesh<float, 2> &arr, double z0, double dz, bool logscale=false);

    int count() const; // число изолиний
    size_t size(int l) const; // число точек в изолинии l
    float level(int l) const; // значений уровня на изолинии l
    aiw::Vecf<2> point(int l, int i) const; // координаты узла изолинии l

#ifdef SWIG
    template <typename T> void out2dat(T &&S) const;
#endif //SWIG
    void out2dat(aiw::Iostream &S) const;
    void out2dat(std::ostream &S) const;
    void out2dat(const char *path) const;
};
```

Реализация методов класса `IsoLines` находится в файле `src/isolines.cpp`

Метод `init` принимает сетку `arr`, опорное значение функции `z0` (которому точно соответствует изолиния), шаг изолиний `dz` и флаг `logscale` задающий логарифмический масштаб по z (в этом лучшем параметр `dz` трактуется как отношение значения на двух соседних изолиниях, `dz>0`), и строит изолинии.

При построении считается, что функция `arr` билинейно интерполируется внутри ячеек. Каждая изолиния представляет ломанную линию, узлы которой попадают на границы ячеек сеточной функции.

Изолинии могут быть прочитаны из экземпляра класса `IsoLines` при помощи методов `count`, `size`, `level` и `point`, либо выведены в файловый поток вывода (или файла) при помощи методов `out2dat`.

2.10 Многомерный кубический массив на основе Z-кривой Мортонa — модуль zcube

Традиционные многомерные массивы, реализованные в модуле `mesh` (раздел 2.5), не всегда эффективны с точки зрения локальности данных, в этом смысле многомерные массивы, основанные на Z-кривой Мортонa, оказываются предпочтительнее. Кроме того, такие массивы оказываются удобнее для проведения ряда операций по рекурсивному разбиению сеток.

Модуль `zcube` предоставляет следующие функции для преобразования смещения от начала массива `f` в позицию ячейки `f` для массива размерности `D` и ранга `R` и обратно:

```
inline uint64_t interleave_bits_any(int D, int32_t x, int R);
inline int32_t de_interleave_bits_any(int D, uint64_t f, int R);
inline uint64_t interleave_bits(int D, int32_t x, int R);
inline int32_t de_interleave_bits(int D, uint64_t f, int R);
```

Функции с постфиксом `_any` реализуют преобразование для массива любой размерности на основе `R` смещений, условий и побитовых операций и/или. Функции без постфикса `_any` оптимизированы для массивов размерности `D=2,3` и вызывают функции с постфиксом `_any` для массивов других размерностей.

Класс `ZCube<T, D>` реализует контейнер с типом ячейки `T` размерности `D`

```
template <typename T, int D> class ZCube{
public:
    int rank() const;           // ранг массива
    uint64_t size() const;      // число ячеек в массиве
    aiw::Ind<D> bbox() const;   // размеры массива по всем осям

    void init(int R_);          // инициализация массива
    ZCube(int R_=0);            // конструктор (вызывает метод init)

    // возвращает объект, обеспечивающий расчет сдвигов к соседям ячейки f
    inline ZCubeNb<D> get_nb(uint64_t f, int periodic=0) const;

    // преобразование позиции ячейки в сдвиг и обратно
    inline uint64_t pos2offset(const aiw::Ind<D> &pos) const;
    inline aiw::Ind<D> offset2pos(uint64_t f) const;

    // методы для организации обхода массива
    inline aiw::Ind<D> first() const;
    inline bool next(aiw::Ind<D> &pos) const;

    // доступ к ячейкам
    inline T& operator [] (uint64_t f);
    inline const T& operator [] (uint64_t f) const;
    inline T& operator [] (const Ind<D> &pos);
    inline const T& operator [] (const Ind<D> &pos) const;
```

```

// проверка принадлежности ячейки к границе массива
inline bool is_bound(uint64_t f, int axes=0xFF) const;
inline bool is_bound_up(uint64_t f, int axes=0xFF) const;
inline bool is_bound_down(uint64_t f, int axes=0xFF) const;

operator Mesh<T, D>() const; // приведение к типу традиционной сетки Mesh<T, D>
};

```

Доступ к ячейке массива возможен как по D -мерной позиции `pos` так и по смещению от начала массива `f`, оптимизированы методы доступа и обхода по смещению.

Для обхода массива `zarr` можно использовать либо традиционный цикл

```
for(size_t i=0; i<zarr.size(); ++i){ ... zarr[i] ... }
```

либо цикл по позиции, аналогичный циклу для традиционных сеток `Mesh`

```
Ind<D> pos=zarr.first();
while(zarr.next(pos)){ ... zarr[pos] ... }
```

порядок обхода ячеек у обоих вариантов совпадает, но первый вариант требует меньше (практически не требует) накладных расходов.

Для обхода соседей ячейки со смещением `f` используется метод

```
inline ZCubeNb<D> get_nb(uint64_t f, int periodic=0) const;
```

где битовая маска `periodic` задает периодические граничные условия по нужным осям. метод возвращает экземпляр класса

```
template <int D> struct ZCubeNb{
    inline int64_t operator [] (const Ind<D> &nb) const;
};
```

который в свою очередь позволяет получать смещения к соседям ячейки при помощи перегруженной операции `[]`, принимающей аргумент `nb` компоненты которого могут содержать числа 0 (сосед слева), 1 (центр) либо 2 (сосед справа), фактически `nb` содержит позицию соседа внутри куба размерами $3 \times 3 \times \dots$, в котором исходная ячейка имеет координаты $(1, 1, \dots)$. Перегруженная операция возвращает ненулевое значение если соседняя ячейка находится внутри массива и не является исходной ячейкой. Например, для численной схемы с шаблоном «крест», фрагмент кода с обходом соседей будет иметь вид

```
for(size_t f=0; f<zarr.size(); ++f){ // цикл по ячейкам
    ...
    auto znb = zarr.get_nb(f);
    for(int k=0; k<D; k++) // цикл по осям массива
        Ind<D> nb(1); // центр куба
        for(int nb[k]=0; nb[k]<=2; nb[k]+=2){ // левый-правый сосед
            int64_t df = znb[nb];
```

```

        if(df){ // если соседняя ячейка находится внутри области
            ... zarr[f+df] ... // доступ к соседней ячейке
        }
    }
}

```

Операции с ZCubeNb оптимизированы настолько, насколько это возможно, в частности никаких преобразований к позиции ячейки и обратно не производится.

В настоящий момент контейнер ZCube реализован достаточно примитивно, для хранения данных используется `std::vector<T>`. В дальнейшем планируется перейти на управление памятью через `std::shared_ptr<T>` (аналогично контейнеру Mesh), добавить операции `copy`, `crop`, `slice`, `flip` и `transpose`, интерполяцию и т.д. — в общем провести унификацию с Mesh насколько это возможно.

В настоящий момент контейнер ZCube не инстацируется в Python.

2.11 Чтение и запись сейсмических данных в формате seg-Y — модуль segy

В C++ модуле segy (файлы `include/aiwlib/segy` и `src/segy.cpp`) определены функции и классы для работы с сейсмическими данными в формате Seg-Y.

Метод

```

int segy_raw_read(IOstream &S, std::list<std::vector<float> > &data,
                  std::vector<Vecf<8> > &heads, size_t count, bool read_data);

```

читает все трассы из входного потока `S` (считается что заголовок файла длиной 3600 байт уже прочитан), записывает их в список трасс `data` и возвращает число прочитанных трасс. Информация из заголовков трасс записывается в вектор `heads`, для каждой трассы сохраняется восемь чисел — координаты источника (PVx, PVy, PVz), координаты приемника (PPx, PPy, PPz), шаг дискретизации `dt`, число отсчетов в трассе `trace_sz`. Максимальное число трасс для чтения задается параметром `count` (-1 без ограничений, до конца файла), если параметр `read_data=false` производится чтение только заголовков трасс.

Методы

```

#ifndef SWIG

```

```

    Mesh<float, 2> segy_read_geometry(IOstream &&S, bool read_file_head=true,
                                     size_t count=-1);

```

```

    Mesh<float, 2> segy_read(IOstream &&S, Mesh<float, 2> &data,
                           bool read_file_head=true, size_t count=-1);

```

```

    Mesh<float, 3> segy_read(IOstream &&S, Mesh<float, 3> &data);

```

```

#endif //SWIG

```

```

    Mesh<float, 2> segy_read_geometry(IOstream &S, bool read_file_head=true,
                                     size_t count=-1);

```

```

    Mesh<float, 2> segy_read(IOstream &S, Mesh<float, 2> &data, bool read_file_head=true,
                           size_t count=-1);

```

```

    Mesh<float, 3> segy_read(IOstream &S, Mesh<float, 3> &data);

```

возвращают геометрию — сетку размерами

[8={PVx,PVy,PVz,PPx,PPy,PPz,dt,trace_sz}] [Nx] [опционально Ny].

Параметр `read_file_head` указывает на необходимость чтения заголовка файла, параметр `count` задает максимальное число трасс для чтения. Данные записываются в сетку `data`, при этом ось времени в сейсмограммах всегда отвечает оси номер 0, шаги отвечают шагам сеток.

Методы

```
#ifndef SWIG
    void segy_write(IOstream &&S, const Mesh<float, 1> &data, double z_pow,
                    Vec<2> PV, Vec<3> PP);
    void segy_write(IOstream &&S, const Mesh<float, 2> &data, double z_pow,
                    Vec<2> PV, Vec<3> PP0, double rotate=0.,
                    bool write_file_head=true);
    void segy_write(IOstream &&S, const Mesh<float, 3> &data, double z_pow,
                    Vec<2> PV, Vec<3> PP0, double rotate=0.,
                    bool write_file_head=true);
#endif //SWIG
    void segy_write(IOstream &S, const Mesh<float, 1> &data, double z_pow,
                    Vec<2> PV, Vec<3> PP);
    void segy_write(IOstream &S, const Mesh<float, 2> &data, double z_pow,
                    Vec<2> PV, Vec<3> PP0, double rotate=0.,
                    bool write_file_head=true);
    void segy_write(IOstream &S, const Mesh<float, 3> &data, double z_pow,
                    Vec<2> PV, Vec<3> PP0, double rotate=0.,
                    bool write_file_head=true);
```

записывают сейсмические данные из `data` в поток `S`. Параметр `z_pow` задает степень в шкалирующем амплитуду множителе z^{z_pow} , параметр `rotate` задает поворот системы координат в плоскости xy относительно точки `PP0`. Ось времени в сейсмограммах всегда отвечает оси номер 0, шаги по времени и по латерали отвечают шагам сеток.

Для более низкоуровневой работы предназначены класс заголовка файла и класс заголовка трассы.

```
class SegyFileHead{
char head[3600];
public:
    double dt;          // шаг по времени, в секундах
    int trace_sz;       // число отсчетов в трассе
    int profile_sz;     // число трасс в профиле (магнитограмме)

    SegyFileHead();

// pos --- позиция в байтах
    void set_int16(int pos, int value);
    void set_int32(int pos, int value);
    int get_int16(int pos) const;
```


название поля	размер	позиция	комментарий
SegyFileHead::dt	2B	16	в МКС
SegyFileHead::trace_sz	2B	20, 22	
SegyFileHead::profile_sz	2B	12	
SegyTraceHead::dt	2B	116	в МКС
SegyTraceHead::trace_sz	2B	114	
SegyTraceHead::PV[0]	4B	72	
SegyTraceHead::PV[1]	4B	76	рельеф ПП
SegyTraceHead::PP[0]	4B	80	
SegyTraceHead::PP[1]	4B	84	
SegyTraceHead::PP[2]	4B	40	

Таблица 2.3: размеры и позиции в заголовке стандартных полей формата seg-Y

```

int get_int32(int pos) const;

void dump(aiw::IOstream&);
void load(aiw::IOstream&);
};
class SegyTraceHead{
    char head[240];
public:
    double dt;           // шаг по времени, в секундах
    int trace_sz;        // число отсчетов в трассе
    aiw::Vec<3> PV, PP;  // координаты ПВ и ПП

    SegyTraceHead();

    // pos --- позиция в байтах
    void set_int16(int pos, int value);
    void set_int32(int pos, int value);
    int get_int16(int pos) const;
    int get_int32(int pos) const;

    void dump(aiw::IOstream&);
    bool load(aiw::IOstream&);

    void write(aiw::IOstream &S, float *data); // запись трассы
    aiw::Mesh<float, 1> read(aiw::IOstream&);   // чтение трассы
};

```

Методы `get/set_int16/32(pos, value)` предназначены для чтения/записи данных (чисел) в произвольные места заголовка. Поля `dt`, `trace_sz`, `profile_sz`, `PP` и `PV` автоматически записываются/читаются при вызове методов `dump/load` на позиции указанные в таблице [2.3](#).

Методы `SegyTraceHead::write/read` записывают/читают трассу вместе с заголовком (вызывают методы `dump/load`).

Все числа в с плавающей точкой сохраняются в формате IEEE, поэтому в заголовок файла на позицию 24 пишется двухбайтовое число 5 (да, это магия). В планах ввести конфреты из/в формата IBM, но пока это не сделано.

2.12 Контрольные точки для остановки и последующего восстановления расчета — модуль checkpoint

Модуль `checkpoint` состоит из файлов `aiwlib/checkpoint` и `src/checkpoint.cpp` и предоставляет макрос `CHECKPOINT(ARGS...)`, обеспечивающий сохранение в контрольных точках и последующее восстановление расчета. Макрос работает через глобальный экземпляр класса `Checkpoint`

```
class CheckPoint{
public:
    void init(const char *path, int mode=0); // 0 - auto, 1 - read, other - write
#ifdef SWIG
    template <typename ... Args>
    bool operator()(const char* fname, int line,
                   const char *argnames, Args& ... args);
#endif //SWIG
};
extern CheckPoint checkpoint;
#define CHECKPOINT(ARGS...) aiw::checkpoint(__FILE__, __LINE__, #ARGS, ARGS)
```

Метод `init` задает путь к файлу, содержащему состояние расчета, и режим работы — по умолчанию автоматический режим (восстановление состояния если файл существует и сохранение состояния если файла нет, `mode=0`), предварительное восстановление состояния расчета (`wmode=1`) или сохранение состояния расчета (`mode!=0,1`). . Без вызова метода

```
checkpoint.init(...)
```

все макросы `CHECKPOINT` всегда возвращают `true`.

В режиме записи состояния расчета, вызовы макросов `CHECKPOINT` всегда возвращают `true`, при этом каждый вызов приводит к записи аргументов макроса в файл, указанный при вызове метода `checkpoint.init`. Запись производится в бинарном формате, для аргументов макроса должны быть перегружены операции

```
aiw::IOstream& operator < (aiw::IOstream&, const T&);
aiw::IOstream& operator > (aiw::IOstream&, T&);
```

см. раздел 2.19 (этому требованию удовлетворяют практически все контейнеры `aiwlib`, встроенные типы, типы `std::string`, `std::vector`, `std::list` и `std::map`).

В режиме восстановления состояния расчета вызовы макроса `CHECKPOINT` возвращают `false` до тех пор, пока очередь не дойдет до последнего вызова в режиме записи при предыдущем запуске расчета⁶ — при этом производится восстановление значения аргументов макроса, макрос возвращает `true`, а глобальный экземпляр класса `checkpoint` переводится в режим записи и может быть снова использован для сохранения состояния расчета с последующим восстановлением.

Расстановка вызовов макроса `CHECKPOINT` вдоль трассы выполнения программы (в условиях, циклах и т.д.) позволяет при восстановлении расчета пропускать уже пройденные ранее участки трассы выполнения. Недостатком такого подхода является некоторое замедление работы — при каждом вызове макроса в режиме записи происходит сохранение данных на диск.

Пример использования

```
...
int main(int argc, const char **argv){
    ...
    checkpoint.init(argv[1], !(argc>2 && std::string(argv[2])=="-load"));
    aiw::Mesh<float, 3> data; // сетка определяющая состояние расчета
    ...
    for(int i=0; CHECKPOINT(i, data) && i<100; i++){
        // основной расчетный цикл
        ...
    }
    ...
}
```

2.13 Сериализация данных в формате pickle языка Python — модуль pickle

Модуль `pickle` позволяет выгружать сериализовываемые данные из C++ в формате `pickle`, что бывает полезно при подготовке данных для последующей обработки в Python.

Для сериализации предоставляются следующие структуры и функции

```
struct NoneType{};
const NoneType None;

struct Pickle{
    // основные операторы для вывода объектов
    Pickle& operator << (const Pickle& other);
    Pickle& operator << (NoneType);
    Pickle& operator << (bool x);
    Pickle& operator << (int x);
    Pickle& operator << (long x);
```

⁶Определение соответствующего вызова производится на основе имени файла с исходным кодом, номера строки в файле и набора имен аргументов

```

Pickle& operator << (double x);
Pickle& operator << (const std::string& x);
Pickle& operator << (const char* x);

template <typename T> Pickle& operator << (const std::complex<T> &x);

// для сериализации записи в словаре вида k:v
template <typename T1, typename T2>
Pickle& operator ()(const T1& k, const T2& v);

// для модуля objconf
template <typename T> void get(const std::string& k, const T& v);
template <typename T> void set(const std::string& k, T& v);
};

template <typename ... Args> Pickle pickle_tuple(const Args& ... args);
template <typename ... Args> Pickle pickle_list(const Args& ... args);
template <typename ... Args> Pickle pickle_set(const Args& ... args);
inline Pickle pickle_dict();
inline Pickle pickle_class(const char* module, const char *name, bool dict=true);

inline std::ostream& operator << (std::ostream& S, const Pickle &P);

```

Для сериализации рекомендуется использовать функции вида `pickle_XXX`.

Сериализованы могут быть любые данные типа `T`, для которых перегружена операция

```
Pickle& operator << (Pickle &P, const T &x);
```

допускается перегрузка операций для своих типов данных, например код

```

struct A{ int x; double y; bool z; };
Pickle& operator << (Pickle &P, const A &a){ P<<pickle_tuple(a.x, a.y, a.z); }

```

будет сериализовывать экземпляры структуры `A` как кортежи.

Сформированный в итоге экземпляр структуры `Pickle` может быть выведен в поток `std::ostream` (при этом обязательно нужно вывести финальный символ «точка») и далее загружен в `Python`, например код

```

std::cout<<pickle_tuple(
    pickle_list(vec(1.,2,3), ind(2,3), vecf(3,4,5,6)),
    std::complex<double>(1,2),
    pickle_dict()(ind(1), "qwe"),
    None)
<<'.';

```

выдаст в итоге сериализованную структуру данных `Python`

```
([Vec(1.0,2.0,3.0), Ind(2,3), Vecf(3.0,4.0,5.0,6.0)],
 (1+2j),
 {Ind(1): 'qwe'},
 None)
```

2.14 Дискретизация разбиения Вороного на равномерной сетке в D -мерном пространстве — модуль `voronoy`

Модуль `voronoy` предоставляет функцию

```
template <int D, typename T1, typename T2>
void voronoy(const std::vector<Vec<D, T1> > &src, aiw::Mesh<T2, D> dst);
```

дискретизирующую разбиение Вороного в D -мерном пространстве. Вектор `src` содержит множество исходных точек, после вызова функции в ячейках сетки `dst` будут прописаны номера ближайших к центрам ячеек сетки `dst` из множества `src` (считая с нуля до `src.size()-1` включительно).

При дискретизации сетка `dst` разбивается на 2^D одинаковых D -мерных параллелепипедов, затем для каждого угла перебором находится ближайшая точка из множества `src`. Если все углы параллелепипеда относятся к одной и той же точке, весь параллелепипед относится к этой точке. В противном случае параллелепипед снова разбивается на 2^D частей, и т.д. — вплоть до того момента как элементом разбиения будет одна ячейка сетки `dst`.

2.15 Описание пользовательских типов — модуль `typeinfo`

Модуль `typeinfo` предоставляет механизм для описания пользовательских типов, обеспечивающий некоторые возможности для интроспекции. В частности, описание пользовательского типа может быть сохранено (например как описание типа ячейки сетки), и использовано в дальнейшем при анализе данных, построении графиков и т.д.

На уровне конечного пользователя работа с модулем `typeinfo` выглядит как вызов макросов

```
#define TYPEINFO(ARGS...)
#define TYPEINFOX(T, ARGS...)
```

перегружающих для пользовательского типа `T` операции

```
aiw::TypeInfo operator ^ (aiw::TypeInfoObj& tio) const;
aiw::TypeInfo operator ^ (const T& X, aiw::TypeInfoObj& tio);
```

Макрос `TYPEINFO` перегружает операцию внутри пользовательского типа, макрос `TYPEINFOX` перегружает операцию снаружи. Например

```
struct A{
    int x;
    double y[10];
```

```

    bool f;
    TYPEINFO(x, y, f);
};
struct B{
    A a[2][3];
    Vec<3> v;
};
TYPEINFOX(B, X.a, X.v);

```

Предполагается, что использование этого механизма позволит эффективно обрабатывать результаты расчетов, сохраненных в виде сеток из пользовательских типов. Находится на стадии реализации.

2.16 Некоторые элементы аналитической геометрии — модуль `angem`

Модуль `angem` предоставляет несколько функций из аналитической геометрии.

```

template <int D, typename T> Vec<D, T>
point2plane(const Vec<D, T> &r, const Vec<D, T> &p, const Vec<D, T> &n);

```

проекция точки \mathbf{r} на плоскость проходящую через точку \mathbf{p} с нормалью \mathbf{n} , $n = 1$, вычисляется как $\mathbf{r} - (\mathbf{r} - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}$.

```

template <int D, typename T>
bool cross_plane(Vec<D, T> &res, const Vec<D, T> &r, const Vec<D, T> &g,
                const Vec<D, T> &p, const Vec<D, T> &n, bool ray=false);

```

расчет точки пересечения прямой (или луча) проходящей через точку \mathbf{r} в направлении \mathbf{g} , $g = 1$ и плоскости проходящей через точку \mathbf{p} с нормалью \mathbf{n} , $n = 1$ вычисляется как

$$\mathbf{res} = \mathbf{r} - \mathbf{r} \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{n}}{\mathbf{n} \cdot \mathbf{g}}.$$

Функция возвращает `true` если проекция существует — если луч перескает плоскость, должно выполняться условие

$$(\mathbf{r} - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} \cdot \mathbf{g} < 0,$$

кроме того для существования проекции необходимо что бы $|\mathbf{n} \cdot \mathbf{g}| > 10^{-8}$. В случае если проекция существует, функция возвращает `true`, результат записывается в `res`.

Упрощенным (оптимизированным) вариантом этой функции является

```

template <int D, typename T>
bool cross_plane(Vec<D, T> &res, const Vec<D, T> &r, const Vec<D, T> &g,
                const Vec<D, T> &p, int axe, bool ray=false);

```

где ориентация плоскости задается ортогональной ей осью координат `axe`.

```
template <int D, typename T> Vec<D, T>
shoot_box_out(const Vec<D, T> &r, const Vec<D, T> &g,
              const Vec<D, T> &a, const Vec<D, T> &b);
```

расчитывает точку пересечения луча выходящего из точки \mathbf{r} в направлении \mathbf{g} , $g = 1$ и параллелипеда заданного точками \mathbf{a} , \mathbf{b} , $\mathbf{a} \leq \mathbf{r}$, $\mathbf{r} \leq \mathbf{b}$.

2.17 Решение СЛАУ с трехдиагональными матрицами (методы прогонки) — модуль 3diag

Модуль 3diag предоставляет методы прогонки (обычной и циклической) для решения СЛАУ с трехдиагональными матрицами

$$M_{i-1,i}X_{i-1} + M_{i,i}X_i + M_{i+1,i}X_{i+1} = R_i,$$

```
template <typename T>
void shuttle_alg(const Mesh<T, 2> &M, const Mesh<T, 1> &R, Mesh<T, 1> &X);
template <typename T>
void cyclic_shuttle_alg(const Mesh<T, 2> &M, const Mesh<T, 1> &R, Mesh<T, 1> &X);
```

где \mathbf{M} — тридиагональная матрица, сетка размерами $3 \times N$, главная диагональ расположена в ячейках $(1, 0 \dots N-1)$, для обычной прогонки ячейки $(0, 0)$ и $(2, N-1)$ игнорируются; \mathbf{R} — правая часть, \mathbf{X} — решение. Сетки \mathbf{R} и \mathbf{N} должны иметь размер N ячеек.

Алгоритм для обычной прогонки взят из английской Википедии⁷, алгоритм для циклической прогонки взят у Самарского⁸ с изменением знаков у главной диагонали и правой части.

Проверка на диагональное преобладание **не** проводится.

2.18 Источник случайных чисел и специфические операции в трехмерном декартовом пространстве — модуль gauss

Модуль **gauss** предоставляет ряд функций для генерации случайных чисел⁹, а так же специфические операции в трехмерном декартовом пространстве — операции поворота и методы генерации вектора, ортогонального данному. Макрос `MINGW` определяется при кросс-компиляции под OS Windows.

```
#ifndef MINGW
const double rand_alpha = 1./(1.+RAND_MAX), rand_alpha2PI = 2*M_PI/(1.+RAND_MAX);
inline void rand_init(); // инициализация генератора случайных чисел
```

⁷https://en.wikipedia.org/wiki/Tridiagonal_matrix_algorithm

⁸Самарский А.А. «Введение в теорию разностных схем». М.: Наука, 1971. — 553 с.

http://info.alnam.ru/book_sub.php?id=91

⁹Планируется сделать потокобезопасный вариант таких источников

```

// случайное число с нормальным распределением,
// нулевым матожиданием и единичной дисперсией
inline double rand_gauss();
// вектор случайных чисел с нормальным распределением,
// нулевым матожиданием и единичной дисперсией
template <int D, class T> inline Vec<D, T> rand_gaussV();
#else //MINGW
    inline void sincos(double phi, double *s, double *c);
#endif //MINGW
// оператор поворота вектора a вокруг единичного вектора n на угол phi
template <typename T> inline aiw::Vec<3, T>
    rotate(const aiw::Vec<3, T>& a, const aiw::Vec<3, T>& n, double phi);
// оператор поворота вектора a вокруг вектора b
template <typename T> inline aiw::Vec<3, T>
    rotate(const aiw::Vec<3, T>& a, const aiw::Vec<3, T>& b);
// оператор поворота вектора a вокруг вектора b в виде ряда длины R
template <int R, typename T> inline aiw::Vec<3, T>
    rotate(const aiw::Vec<3, T>& a, const aiw::Vec<3, T> &b);
// вычисление поворота, необходимого для перевода a в b (|a|=|b|=1)
template <typename T> inline aiw::Vec<3, T>
    arc_rotate(const aiw::Vec<3, T>& a, const aiw::Vec<3, T> &b);
// перевод из полярных координат в декартовы
inline aiw::Vec<3, double> polar(double theta, double phi);
// перевод из декартовых координат в полярные, возвращает theta, phi
template <typename T>
inline aiw::Vec<2, double> polar(const aiw::Vec<3, T> &n);
// генерация вектора перпендикулярного вектору a в 2D, длины a
template <typename T>
inline aiw::Vec<2, T> perp(const aiw::Vec<2, T> &a);
// генерация вектора перпендикулярного вектору a в 3D, единичной длины
template <typename T>
inline aiw::Vec<3, T> perp(const aiw::Vec<3, T> &a);
#endif MINGW
// источник шума, отклоняющий вектор a с сохранением его длины, с дисперсией g
template <typename T>
aiw::Vec<3, T> gauss_rotate(const aiw::Vec<3, T>& a, double g);
#endif //MINGW

```

Для реализации оператора поворота использовано выражение

$$\mathbf{a} \odot \mathbf{b} = \mathbf{a} \cos b - \mathbf{a} \times \mathbf{b} \frac{\sin b}{b} + \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \frac{1 - \cos b}{b^2}.$$

2.18.1 Определение поворота

Введем матрицу вращения $\Xi(\mathbf{n}, \delta)$ вокруг произвольного единичного вектора \mathbf{n} на произвольный угол δ против часовой стрелки в правой системе координат, если смотреть против направ-

ления \mathbf{n} :

$$\begin{aligned}\Xi(\mathbf{n}, \delta) &= \begin{pmatrix} (n_x^2 - n_y^2 - n_z^2) \sin^2 \frac{\delta}{2} + \cos^2 \frac{\delta}{2} & 2 \sin \frac{\delta}{2} (n_x n_y \sin \frac{\delta}{2} - n_z \cos \frac{\delta}{2}) & 2 \sin \frac{\delta}{2} (n_x n_z \sin \frac{\delta}{2} + n_y \cos \frac{\delta}{2}) \\ 2 \sin \frac{\delta}{2} (n_x n_y \sin \frac{\delta}{2} + n_z \cos \frac{\delta}{2}) & (n_y^2 - n_x^2 - n_z^2) \sin^2 \frac{\delta}{2} + \cos^2 \frac{\delta}{2} & 2 \sin \frac{\delta}{2} (n_y n_z \sin \frac{\delta}{2} - n_x \cos \frac{\delta}{2}) \\ 2 \sin \frac{\delta}{2} (n_x n_z \sin \frac{\delta}{2} - n_y \cos \frac{\delta}{2}) & 2 \sin \frac{\delta}{2} (n_y n_z \sin \frac{\delta}{2} + n_x \cos \frac{\delta}{2}) & (n_z^2 - n_x^2 - n_y^2) \sin^2 \frac{\delta}{2} + \cos^2 \frac{\delta}{2} \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} n_x^2(1 - \cos \delta) + \cos \delta & n_x n_y(1 - \cos \delta) - n_z \sin \delta & n_x n_z(1 - \cos \delta) + n_y \sin \delta \\ n_x n_y(1 - \cos \delta) + n_z \sin \delta & n_y^2(1 - \cos \delta) + \cos \delta & n_y n_z(1 - \cos \delta) - n_x \sin \delta \\ n_x n_z(1 - \cos \delta) - n_y \sin \delta & n_y n_z(1 - \cos \delta) + n_x \sin \delta & n_z^2(1 - \cos \delta) + \cos \delta \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Введем бинарный оператор поворота \circlearrowright , поворот некоторого вектора \mathbf{a} вокруг \mathbf{n} на угол δ будем обозначать как $\mathbf{a} \circlearrowright \delta \mathbf{n}$

$$\mathbf{a} \circlearrowright \delta \mathbf{n} \equiv \Xi(\mathbf{n}, \delta) \cdot \mathbf{a}.$$

Очевидно оператор \circlearrowright некоммутативен

$$\mathbf{a} \circlearrowright \mathbf{b} \neq \mathbf{b} \circlearrowright \mathbf{a},$$

неассоциативен

$$(\mathbf{a} \circlearrowright \mathbf{b}) \circlearrowright \mathbf{c} \neq \mathbf{a} \circlearrowright (\mathbf{b} \circlearrowright \mathbf{c}),$$

и недистрибутивен слева

$$\mathbf{a} \circlearrowright (\mathbf{b} + \mathbf{c}) \neq (\mathbf{a} \circlearrowright \mathbf{b}) + (\mathbf{a} \circlearrowright \mathbf{c}).$$

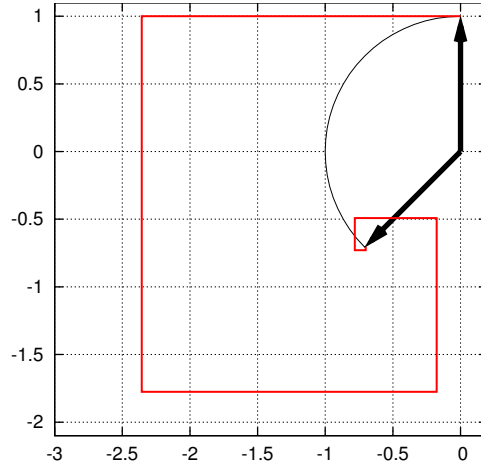
Рассмотрим некоторые его свойства:

$$\begin{aligned}(\mathbf{a} + \mathbf{b}) \circlearrowright \mathbf{c} &= (\mathbf{a} \circlearrowright \mathbf{c}) + (\mathbf{b} \circlearrowright \mathbf{c}), \\ (\alpha \mathbf{a}) \circlearrowright \mathbf{b} &= \alpha(\mathbf{a} \circlearrowright \mathbf{b}), \\ \mathbf{a} \circlearrowright \alpha \mathbf{a} &= \mathbf{a}, \\ \mathbf{a} \circlearrowright \mathbf{b} \circlearrowright (-\mathbf{b}) &= \mathbf{a}, \\ \mathbf{a} \circlearrowright \alpha \mathbf{b} \circlearrowright \beta \mathbf{b} &= \mathbf{a} \circlearrowright (\alpha + \beta) \mathbf{b}, \\ (\mathbf{a} \circlearrowright \mathbf{b}) \circlearrowright \mathbf{c} &= (\mathbf{a} \circlearrowright \mathbf{c}) \circlearrowright (\mathbf{b} \circlearrowright \mathbf{c}), \\ (\mathbf{a} \circlearrowright \mathbf{b}) \circlearrowright \alpha \mathbf{a} &= \mathbf{a} \circlearrowright (\mathbf{b} \circlearrowright \alpha \mathbf{a}), \\ \mathbf{a} \circlearrowright (\mathbf{b} \circlearrowright \mathbf{c}) &= \mathbf{a} \circlearrowright (-\mathbf{c}) \circlearrowright \mathbf{c} \circlearrowright (\mathbf{b} \circlearrowright \mathbf{c}) = \mathbf{a} \circlearrowright (-\mathbf{c}) \circlearrowright \mathbf{b} \circlearrowright \mathbf{c}.\end{aligned}$$

2.18.2 Разложение поворота в ряд

Не теряя общности рассуждений, рассмотрим поворот вектора $(0, r_y, r_z)$ вокруг вертикальной оси на угол α , и разложим $\sin \alpha$ и $\cos \alpha$ в ряд в окрестностях точки $\alpha = 0$:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ r_y \\ r_z \end{pmatrix} \circlearrowright \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -r_y \sin \alpha \\ r_y \cos \alpha \\ r_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -r_y \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \alpha^{2n+1} \\ r_y \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \alpha^{2n} \\ r_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -r_y \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \alpha^n \sin \frac{\pi n}{2} \\ r_y \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \alpha^n \cos \frac{\pi n}{2} \\ r_z \end{pmatrix}.$$

Рис. 2.1: Пример поворота вектора $(0, 1, 0)$ на угол $3\pi/4$

Пусть $\mathbf{a} \times^n \mathbf{b} \equiv \underbrace{[\dots[\mathbf{a} \times \mathbf{b}] \times \dots \mathbf{b}]}_n$ и $\mathbf{a} \times^0 \mathbf{b} \equiv \mathbf{a}$. Рассмотрим последовательность векторных произведений:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 0 \\ r_y \\ r_z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \alpha \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \alpha r_y \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ r_y \\ r_z \end{pmatrix} \times^2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\alpha^2 r_y \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ r_y \\ r_z \end{pmatrix} \times^3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\alpha^3 r_y \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} 0 \\ r_y \\ r_z \end{pmatrix} \times^4 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \alpha \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha^4 r_y \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \dots, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ r_y \\ r_z \end{pmatrix} \times^n \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha^n r_y \sin \frac{\pi n}{2} \\ \alpha^n r_y \cos \frac{\pi n}{2} \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Тогда, с учетом четности $\cos \alpha$ и нечетности $\sin \alpha$, поворот можно представить как

$$\mathbf{a} \circlearrowleft \mathbf{b} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \mathbf{a} \times^n (-\mathbf{b}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \mathbf{a} \times^n \mathbf{b}.$$

Этот же результат можно получить другим способом. Рассмотрим уравнение вида

$$\dot{\mathbf{a}} = - \left[\mathbf{a} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \omega \end{pmatrix} \right] \quad (2.1)$$

описывающее очевидно вращение вектора \mathbf{a} вокруг вертикальной оси с угловой скоростью ω против часовой стрелки (если смотреть сверху). Дифференцируя обе части уравнения (2.1) по времени получаем рекуррентное соотношение для произвольной производной вектора \mathbf{a} по времени:

$$\frac{\partial^n \mathbf{a}}{\partial t^n} = - \left[\frac{\partial^{n-1} \mathbf{a}}{\partial t^{n-1}} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \omega \end{pmatrix} \right] = \dots = (-1)^n \left[\mathbf{a} \times^n \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \omega \end{pmatrix} \right].$$

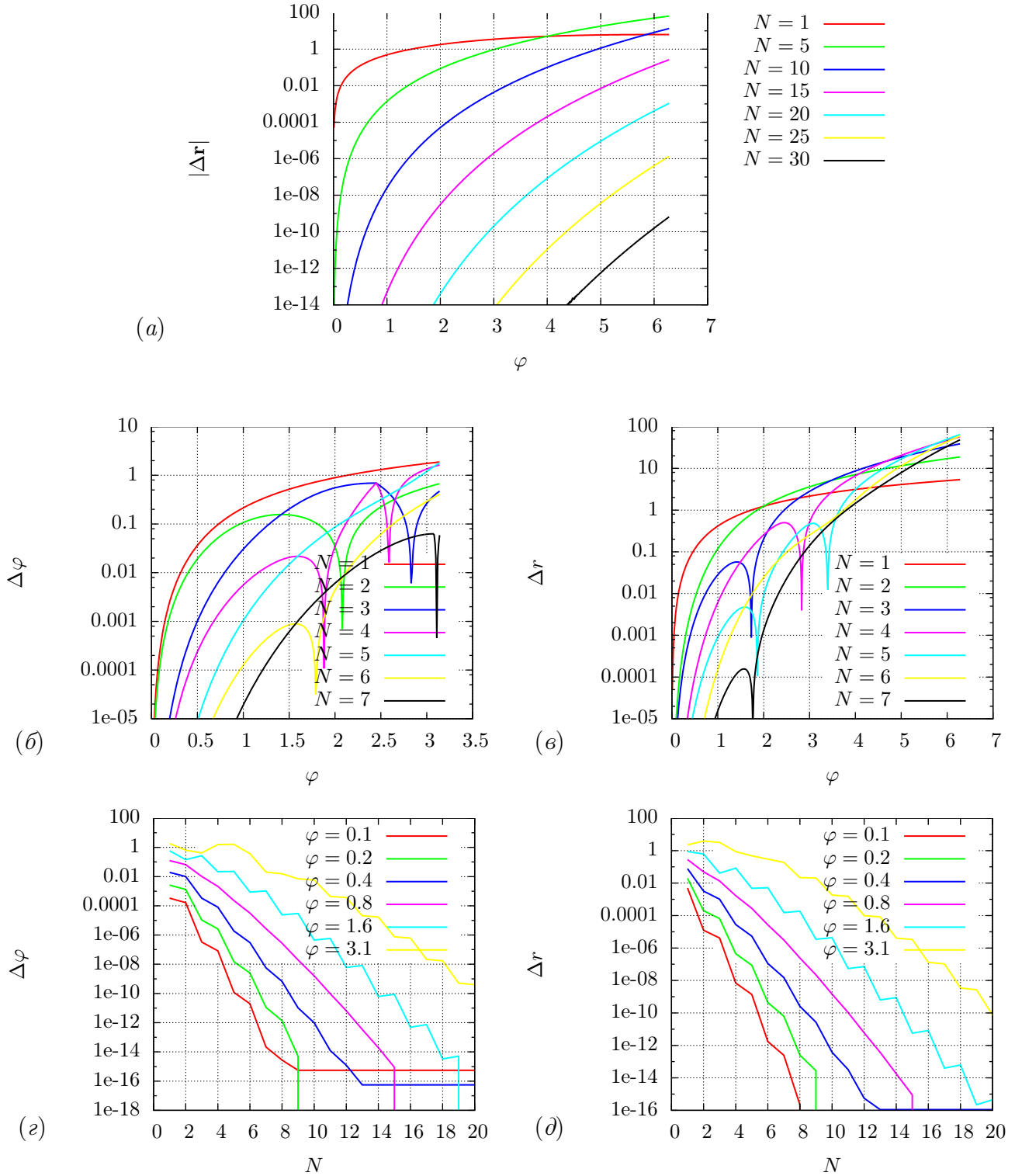


Рис. 2.2: Зависимости модуля ошибки \vec{r} от угла поворота φ единичного вектора $(0, 1, 0)$ для различного числа членов разложения N (a). Зависимости абсолютной ошибки по углу $\Delta\varphi$ (б) и модулю радиуса Δr (в) от угла поворота φ при использовании конечного числа членов разложения N . Зависимости абсолютной ошибки по углу $\Delta\varphi$ (г) и радиусу Δn (д) от числа членов разложения N для различных углов поворота φ

Пусть начальное значение вектора $\mathbf{a}|_{t=0} = \mathbf{a}_0$, тогда

$$\mathbf{a}_0 \circlearrowleft \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \omega t \end{pmatrix} = \mathbf{a}(t).$$

Разложим вектор \mathbf{a} в ряд Тейлора в окрестности точки $t = 0$:

$$\mathbf{a}_0 \circlearrowleft \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \omega t \end{pmatrix} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \frac{\partial^n \mathbf{a}}{\partial t^n} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \left[\mathbf{a} \times^n \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \omega t \end{pmatrix} \right].$$

Пример поворота на угол $3\pi/4$ приведен на рис. 2.1. Зависимости ошибок разложения приведены на рис. 2.2.

Разложение оператора поворота в ряд может существенно ускорить численные схемы, использующие подобные конструкции. Так, поворот через матрицу (функция `rotate` из модуля `derart` библиотеки `aivlib`) занимает на процессоре Intel(R) Core(TM)2 CPU U7500 около 170 тактов, а поворот через ряд (параметризованная по числу членов разложения R функция `rotor<R>` из того же модуля) требует примерно 10 тактов на каждый из членов разложения.

Поскольку

$$\mathbf{a} \times^{n+2} \mathbf{b} = -b^2 \mathbf{a} \times^n \mathbf{b}$$

можно представить оператор поворота в виде суммы трех векторов

$$\begin{aligned} \mathbf{a} \circlearrowleft \mathbf{b} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \mathbf{a} \times^n \mathbf{b} = \mathbf{a} - [\mathbf{a} \times \mathbf{b}] \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n b^{2n}}{(2n+1)!} + \\ &+ [[\mathbf{a} \times \mathbf{b}] \times \mathbf{b}] \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n b^{2n}}{(2n+2)!} \equiv \mathbf{a} - [\mathbf{a} \times \mathbf{b}] \beta_1(b) - [\mathbf{b} \times [\mathbf{a} \times \mathbf{b}]] \beta_2(b) = \\ &= \mathbf{a}(1 - b^2 \beta_2(b)) - [\mathbf{a} \times \mathbf{b}] \beta_1(b) + \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \beta_2(b), \quad (2.2) \end{aligned}$$

где

$$\beta_1(b) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n b^{2n}}{(2n+1)!} = \frac{\sin b}{b}, \quad \beta_2(b) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n b^{2n}}{(2n+2)!} = \frac{1 - \cos b}{b^2},$$

или

$$\mathbf{a} \circlearrowleft \mathbf{b} = \mathbf{a} \cos b - [\mathbf{a} \times \mathbf{n}_b] \sin b + \mathbf{n}_b(\mathbf{a} \cdot \mathbf{n}_b)(1 - \cos b).$$

Рассмотрим выражение $\partial(\mathbf{a} \circlearrowleft \varphi \mathbf{b})/\partial \varphi$, где \mathbf{b} вектор задающий ось вращения.

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\mathbf{a} \circlearrowleft \varphi \mathbf{b})}{\partial \varphi} &= \frac{\partial}{\partial \varphi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \mathbf{a} \times^n \varphi \mathbf{b} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \varphi^{n-1}}{(n-1)!} \mathbf{a} \times^n \mathbf{b} = \\ &= - \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{(n-1)!} \mathbf{a} \times^n \varphi \mathbf{b} \right] \times \mathbf{b} = -(\mathbf{a} \circlearrowleft \varphi \mathbf{b}) \times \mathbf{b} = \mathbf{b} \times (\mathbf{a} \circlearrowleft \varphi \mathbf{b}). \end{aligned}$$

2.19 Операции бинарного потокового ввода/вывода — модуль binaryio

Модуль `binaryio` перегружает операции

```
template<typename T> inline Iostream& operator < (Iostream& S, const T& X);
template<typename T> inline Iostream& operator > (Iostream& S,      T& X);
```

как операции бинарного ввода/вывода в поток `aiw::Iostream` для большинства актуальных типов `T`. Операции перегружены для встроенных типов `int8_t`, `uint8_t`, `int16_t`, `uint16_t`, `int32_t`, `uint32_t`, `int64_t`, `uint64_t`, `char`, `bool`, `float`, `double`, типов `std::complex<T>`, `std::string`, `T[D]`, `std::vector<T>`, `std::list<T>`, `std::map<T1,T2>`, `aiw::Vec<D,T>`, и типов для которых определены публичные методы

```
void dump(aiw::Iostream &S) const;
void load(aiw::Iostream &S);
```

Кроме того модуль предоставляет макрос

```
#define BINARYIO4POD \
    inline void dump(aiw::Iostream &S) const { S.write(this, sizeof(*this)); } \
    inline void load(aiw::Iostream &S)      { S.read(this, sizeof(*this)); }
```

вызов которого в POD-типе объявляет методы `dump/load` и автоматически перегружает операции `<` и `>`.

2.20 Настройка пользовательских классов — модуль objconf

Модуль `objconf` предоставляет макрос

```
#define CONFIGURATE(ARGS...)
```

который при вызове внутри пользовательского класса

```
struct A{
    int x; double y; bool z;
    CONFIGURATE(x, y, z);
};
```

создает в классе метод

```
template<typename ConfT>
void configurate(ConfT &conf, bool wmode, const char *prefix="");
```

который в зависимости от значения аргумента `wmode` вызывает методы

```
conf.set(prefix+name, parametr); // wmode==true
conf.get(prefix+name, parametr); // wmode==false
```

для каждого из полей класса, перечисленных в аргументах макроса `CONFIGURATE`. Аргумент `prefix` позволяет добавить префикс к именам всех полей при чтении/записи.

Созданный метод `configurate(...)` может использоваться при чтении/записи конфигурационных файлов (раздел [2.21](#)), записи состояния объекта в формате `pickle` (раздел [2.13](#)) и т.д.

2.21 Чтение и запись конфигурационных файлов — модуль configfile

Модуль `configfile` состоит из заголовочного файла `configfile` и файла `src/configfile.cpp`, и предоставляет средства для чтения/записи конфигурационных файлов в текстовом формате

```
# комментарий
имя_параметра=значение параметра
```

для каждого параметра может использоваться **только одна** строка.

Модуль определяет функции чтения/записи для различных типов из потоков ввода/вывода `std::istream`

```
template <typename T> void printf_obj(std::ostream &S, const T &X){ S<<X; }
template <typename T> void scanf_obj(std::istream &S, T &X){ S>>X; }
```

которые могут быть перегружены специальным образом для отдельных типов

```
void printf_obj(std::ostream &S, bool X);
void scanf_obj(std::istream &S, bool &X);

template <typename T> void printf_obj(std::ostream &S, const std::complex<T> &X);
template <typename T> void scanf_obj(std::istream &S, std::complex<T> &X);

void scanf_obj(std::istream &S, std::string &X);
```

для типа `bool` допустимыми являются значения в конфигурационном файле

```
Y y YES Yes yes ON On on TRUE True true V v 1
N n NO No no OFF Off off FALSE False false X x 0
```

Для типа `std::complex` используется формат Python $x \pm yj$.

Для типа `std::string` при чтении из конфигурационного файла используется строка после знака `=` с отброшенными с конца и начала символами пробела, `\t` и `\r` (аналог вызова функции `str.strip()` языка Python).

Непосредственно для чтения/записи конфигурационного файла используется класс

```
class ConfigFile{
public:
    int no_key_act = 2; // 0 - ignore, 1 - warning, 2 - exception
#ifdef SWIG
    // получает значение параметра par с именем key из другого объекта
    //      для записи в конфигурационный файл
    template <typename T>
    void get(const std::string &key, const T &par);
    // устанавливает значение параметра par с именем key в другом объекта
    //      на основе конфигурационного файла
    template <typename T>
```

```

    void set(const std::string &key, T &par);

    void load(std::istream &&fin);
    void dump(std::ostream &&fout) const;
    void load(std::istream &fin);
    void dump(std::ostream &fout);
#endif //SWIG
    void load(const char *path);
    void dump(const char *path) const;
    void clear();
};

```

При чтении конфигурационного файла для экземпляра класса `ConfigFile` вызывается один из методов `load`, затем экземпляр класса передается первым аргументом в методы `configure` настраиваемых пользовательских объектов, см. раздел 2.20. Поле `no_key_act` управляет реакцией на отсутствие какого либо параметра в конфигурационном файле: 0 — игнорировать, 1 — выдать предупреждение, 2 — сгенерировать исключение.

При записи конфигурационного файла экземпляра класса `ConfigFile` передается первым аргументом в методы `configure` настраиваемых пользовательских объектов, см. раздел 2.20, затем для него необходимо вызвать один из методов `dump`.

Глава 3

Система контроля результатов и алгоритмов численного моделирования RACS

3.1 Введение

Интерфейс приложения численного моделирования должен позволять легко изменять параметры задачи (число которых иногда доходит до сотен или даже тысяч), выбирать тот или иной алгоритм (в том числе различные варианты начальных и граничных условий), обеспечивать анализ и визуализацию результатов. Практика показала, что для сложных задач оптимальным является не оконный интерфейс, а интерфейс командной строки. Фактически речь идет о использовании собственного (или уже существующего) высокоуровневого интерпретируемого языка, адаптированного к специфике задачи.

При проведении массовых расчетов (например при анализе зависимости поведения устройства от нескольких параметров и построении фазовых диаграмм) требуется механизм, обеспечивающий многократный автоматический запуск приложения с меняющимися заданным образом параметрами, желательно с контролем распределения ресурсов в рамках локальной сети или на кластере.

Для каждого расчета полученные зависимости должны сопровождаться информацией о использованных параметрах расчета и алгоритмах. Если для сохранения параметров существует большое количество методик и библиотек, то сохранение алгоритмов является проблемой, и единственным приемлемым решением на сегодняшний день является сохранение исходного кода приложения.

Для анализа результатов необходим многопараметрический поиск по проведенным расчетам, для чего результаты расчетов должны храниться специальным, упорядоченным образом. Необходимо обеспечить возможность поиска по версиям исходного кода. Эту проблему можно решать в ручную, например размещая результаты расчетов на хорошо структурированном дереве каталогов — однако такой подход требует строгой внутренней культуры пользователя, и усложняется тем, что в процессе расчетов критерии упорядоченности могут расширяться и изменяться кардинальным образом.

При массовых расчетах аккуратное решение вышеописанных проблем может отнимать зна-

чительное время и силы. В разных рабочих группах разработаны собственные библиотеки, позволяющие упростить процесс написания окружения, но единый подход до сих пор не выработан.

Описанная в данной главе система RACS (**R**esults & **A**lgorithms **C**ontrol **S**ystem — система контроля результатов и алгоритмов) обеспечивает:

- задание параметров расчетов при запуске для приложений на языках **Python** и **C++**;
- автоматическое сохранение параметров и исходных кодов расчетов;
- пакетный запуск расчетов (циклы по значениям параметров) и балансировка загрузки, как на локальных машинах так и на кластерах под **MPI**;
- работа с контрольными точками для приложений **C++**, в том числе кластерах под **MPI** (*в разработке*);
- развитые средства для многопараметрического поиска, анализа и обработки результатов.

При разработке RACS делались следующие акценты:

- простота подключения (требуется минимальная модификация отлаженного кода);
- лаконичный и интуитивно понятный синтаксис при запуске расчетов;
- возможность обработки результатов средствами операционной системы и сторонними утилитами без потери целостности данных;
- интеграция с другими утилитами — вывод данных в формате **gnuplot** с заголовками **gplt**, чтение метаданных о расчетах другими утилитами.

Даже для низкоквалифицированного пользователя RACS автоматически обеспечивает необходимый минимум «культуры» проведения расчетов (сохранение исходных кодов и параметров). В результате пользователь имеет возможность полностью сконцентрироваться на работе непосредственно над задачей.

RACS написан на языке **Python** и ориентирован в первую очередь на приложения написанные на языках **C++** (высокопроизводительное вычислительное ядро) и **Python** (верхний управляющий слой приложения и интерфейсные части), связанные при помощи утилиты **SWIG** [?].

К настоящему моменту (первые версии появились в 2003 году, первая публикация [?] в 2007 году) RACS хорошо зарекомендовал себя при организации массовых расчетов в различных областях — сейсмике, моделировании разработки керогеносодержащих месторождений с учетом внутрипластового горения, моделировании магнитных систем и разработке устройств спинтроники, газодинамике горения, изучении резонансных свойств нелинейных систем и т.д.

3.2 Структура данных

Как правило расчет запускается из текущей (рабочей) директории, содержащей исходные коды, головные исполняемые файлы на **Python**-е или **C++** и т.д. Для каждого расчета должна

быть создана уникальная директория, в которой будут храниться параметры расчета, исходные коды и результаты.

Директория создается в репозитории, который по умолчанию имеет имя `repo/`. Название уникальной директории расчета формируется из года, номера недели, дня недели и некоторого трехзначного порядкового номера уникального для данной даты — таким образом расчеты внутри репозитория автоматически упорядочиваются по дате (например `s18_00_1005` — пятый расчет проведенный в понедельник первой недели 2018 года). При создании уникальной директории расчета, в текущей директории на нее автоматически создается ссылка `'_'` (единичный символ подчеркивания).

Набор параметров расчета образует словарь, который сохраняется в файле `.RACS` уникальной директории расчета, в формате стандартного модуля `pickle` языка `Python`. Для служебных целей системой `RACS` в каждом расчете автоматически резервируются следующие параметры:

- `args` — аргументы командной строки при запуске расчета (копия списка `sys.argv`);
- `runtime` — время выполнения расчета (экземпляр класса `aiwlib.chrono.Time`);
- `progress` — степень выполнения расчета (число от нуля до единицы, устанавливается пользователем в процессе расчета);
- `statelist` — список состояний расчета;
- `tags` — множество (экземпляр класса `set`) тэгов расчета.

Расчет может иметь одно из следующих состояний:

- `started` — расчет запущен;
- `finished` — расчет успешно завершен;
- `stopped` — расчет завершен с ошибкой.

Каждое новое состояние расчета добавляется в список `statelist`, текущее состояние определяется на основе последнего элемента списка. Каждое состояние (элемент списка `statelist`) представляется кортежем вида

```
( state, user, host, date [,info] )
```

где `state` — состояние расчета, `user` — пользователь установивший состояние, `host` — хост с которого было установлено состояние, `date` — дата (экземпляр класса `aiwlib.chrono.Date`) установки состояния, `info` — необязательная дополнительная информация. В частности, для состояния `started` в конец кортежа дописывается PID расчета. Для состояния `stopped` в конец кортежа дописывается отчет об ошибке (список строк), приведшей к остановке. Отчет генерируется функцией `except_report` модуля `mixt.py` и содержит стек исключения.

При непосредственном запуске расчета, расчет получает состояние `started`. Такой подход позволяет проследить историю любого расчета, что играет большую роль для диагностики.

Тэги расчета воспринимаются при построении выборки как одноименные параметры расчета имеющие значение `True`.

Кроме файла `.RACS` в уникальной директории расчета могут создаваться файлы `.src.tgz` (архив с исходным кодом приложения выполнявшего расчет) и в случае «демонизации» расчета `logfile` (объединенные стандартный вывод и стандартный поток ошибок).

В репозитории при анализе результатов создается файл `.RACS-CACHE`, содержащий информацию из файлов `.RACS` для всех расчетов репозитория. Кэш предназначен для ускорения построения выборок и поддерживается в актуальном состоянии автоматически.

Репозиторий может быть структурирован произвольным образом, т.е. являться деревом директорий, в котором расчеты группируются согласно требованиям пользователя (например на основе значений ключевых параметров).

Отдельные расчеты и репозитории могут перемещаться средствами операционной системы, пересылаться по сети и т.д.

3.3 Подключение системы RACS к готовому приложению численного моделирования на языке Python

Для подключения системы `RACS` к готовому приложению на языке `Python` необходимо как минимум проимпортировать модуль `aiwlib.racs` и создать экземпляр класса `aiwlib.racs.Calc`:

```
from aiwlib.racs import *
calc = Calc()
```

Аргументы конструктора класса `Calc` являются параметрами расчета по умолчанию, их значения могут быть перекрыты при помощи аргументов командной строки при запуске расчета либо при серийном запуске. Кроме того, некоторые аргументы могут играть служебную роль (показаны значения по умолчанию):

- `_repo="repo"` — задает путь к репозиторию для создания расчета;
- `path` — (строка) явно задает путь к директории расчета, если расчет существовал словарь расчета будет обновлен из директории расчета;
- `_clean_path=True` — требует очищать явно заданную директорию расчета, при этом словарь расчета не обновляется из директории;
- `_symlink=True` — создавать символическую ссылку `_` на последнюю директорию расчета;
- `_daemonize=False` — «демонизировать» расчет при запуске (освободить терминал, вывод будет перенаправлен в `logfile` в директории расчета), «демонизация» происходит при создании экземпляра класса `Calc`;
- `_statechecker=true` — запускать демона, фиксирующего в файле `.RACS` аварийное завершение расчета;
- `_copies=1` — число копий процесса при проведении расчетов с серийными параметрами;
- `_on_exit=True` — по завершении расчета автоматически фиксировать время работы, состояние расчета и сохранять изменения параметров на диск;

3.3. ПОДКЛЮЧЕНИЕ СИСТЕМЫ RACS К ГОТОВОМУ ПРИЛОЖЕНИЮ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

- `_calc_num=3` — число знаков в номере расчета (в текущем дне) при автоматической генерации имени директории расчета;
- `_auto_pull=True` — автоматически сохранять все параметры расчета из контролируемых расчетом объектов;
- `_commit_sources=True` — сохранять исходные коды расчета.

Все перечисленные аргументы конструктора класса `Calc` (кроме аргумента `path`) не будут являться полями экземпляра класса.

Уникальная директория расчета создается автоматически при первом обращении к полю `path` экземпляра класса `Calc`. При этом название репозитория формируется при помощи форматирования аргумента `_repo` (строки) по экземпляру класса `Calc` (выступающего в роли словаря). Это позволяет автоматически распределять расчеты по различным репозиториям на основе значений ключевых параметров, например если было указано

```
calc = Calc(_repo='repo-a%(a)s')
```

в зависимости от значения параметра `a` расчеты будут помещаться в репозитории `repo-a1`, `repo-a2.5`, и т.д.

В файл `.RACS` сохраняется содержимое объекта `calc`, необходимо обеспечить перенос значений параметров из `calc` в объекты использующиеся в расчете и обратно. Для этого существует по крайней мере три возможности:

1. непосредственное чтение и запись полей объекта `calc`;
2. методы `calc.push(...)` и `calc.pull(...)`;
3. метод `calc.wrap(...)` реализующий технологию «monkey patch».

Первый вариант хорошо подходит для каких то ключевых параметров — максимального времени счета, выбора типа численной схемы и т.д., например:

```
while model.t<calc.t_max:
    if calc.scheme==1: model.euler() # схема Эйлера
    if calc.scheme==2: model.RK2()   # схема Рунге--Кутты второго порядка
```

Второй вариант хорошо подходит для задания и сохранения целой группы параметров, относящихся к экземпляру какого-либо класса, в том числе C++-класса импортированного при помощи утилиты SWIG:

```
def push(self, X, ignore_list=[], _prefix='', **kw_args):
    '''устанавливает атрибуты объекта X согласно объекту расчета,
    параметры расчета имеют более высокий приоритет, чем параметры kw_args'''
def pull(self, X, ignore_list=[], _prefix='', **kw_args):
    '''устанавливает атрибуты объекта расчета согласно объекту X,
    параметры kw_args имеют более высокий приоритет, чем параметры расчета
    автоматически устанавливаются атрибуты имеющие методы __get/setstate__
    (но не имеющие атрибута _racs_pull_lock) или не-являющиеся объектами swig'''
```

Третий вариант требует минимальной модификации кода, но может показаться безумным. Пусть для проведения расчета используется экземпляр C++-класса `Model` импортированного при помощи утилиты `SWIG`¹:

```
...
model = Model()
model.h = .1      #@ шаг по времени
model.N = 1000    #@ размер сетки
model.omega = 1e-3 #@ частота
...
```

Тогда достаточно в коде модифицировать всего одну строчку

```
...
model = calc.wrap(Model()) # <== инициализация monkey patch
model.tau = 0.1      #@ шаг по времени
model.N = 1000      #@ размер сетки
model.omega = 1e-3  #@ частота
...
```

При этом переменная `model` будет ссылаться на объект специального вида, содержащий экземпляр класса `Model` и связанный с объектом `calc`. задание параметров такого объекта будет трактоваться как задание параметров по умолчанию, значения которых может быть перекрыто при помощи аргументов командной строки или при серийном запуске. например, если указать в аргументах командной строки

```
./run.py ... tau=0.01 ...
```

то в строке

```
model.tau = 0.1      #@ шаг по времени
```

параметру `tau` будет на самом деле присвоено значение 0.01. Такой патч возможен лишь один раз для каждого параметра за все время расчета, дальше код работает ожидаемым образом.

Метод `wrap` может вызываться произвольное количество раз для различных объектов. Во избежании конфликтов имен параметров, метод `wrap` принимает вторым необязательным аргументом префикс, который нужно будет добавлять к именам параметров в командной строке.

Объекты, подключенные к `calc` при помощи метода `wrap` автоматически опрашиваются при помощи метода `pull` при записи содержимого объекта `calc` на диск (вызове метода `commit`).

Методы `push/pull` и технология «monkey patch» автоматически приводят типы аргументов, заданных в командной строке, к типам аргументов контролируемого объекта.

Еще одним полезным методом объекта `calc` является метод

```
set_progress(self, progress, prompt='', runtime=-1)
```

¹Комментарии в виде `#@` необходимы лишь для того, что бы соответствующие строчки выводились в автоматически генерирующейся справке при запуске с ключем `-h` или `-help`

3.4. ПОДКЛЮЧЕНИЕ СИСТЕМЫ RACS К ГОТОВОМУ ПРИЛОЖЕНИЮ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

устанавливающий степень завершенности расчета (число от 0. до 1.). При его вызове устанавливаются атрибуты `progress` и `runtime` объекта `calc`, а так же соответствующие им значения в файле `.RACS` (если файл `.RACS` отсутствует, вызывается метод `commit`).

Если приглашение `prompt` не пустое, создается экземпляр класса `aiwlib.mixt.ProgressBar`, отображающий при помощи ASCII-графики диаграмму степени завершения расчета, время прошедшее с момента старта и ориентировочное время до окончания расчета. Для длинных расчетов настоятельно рекомендуется вызывать метод `set_progress(...)`.

При успешном завершении расчета автоматически устанавливается `calc.progress=1`, фиксируется время выполнения `runtime`, состояние расчета изменяется на `finished`. В случае возникновения исключения фиксируется время выполнения `runtime`, состояние расчета изменяется на `stopped`, при этом в `calc.statelist` дописывается стек исключения и сообщение об ошибке. Все объекты, находившиеся подключенные к `calc` опрашиваются при помощи метода `pull`, вызывается метод `calc.commit()`. Однако, если в течении расчета не было ни одного обращения к полю `calc.path`, уникальная директория расчета не создается и эти действия **не** выполняются — если расчет не сохранил никакие данные в свою уникальную директорию то она ему не нужна, и видимо не требуется метаданная (файл `.RACS`).

3.4 Подключение системы RACS к готовому приложению численного моделирования на языке C++11

Несмотря на гибкость связки языков C++ и Python, в некоторых случаях применение Python может быть существенно затруднено — например в связи с отсутствием пакета `python-dev` на целевой машине, или при необходимости запуска приложения из под MPI с некоторыми системами управления на кластерах.

Специально для таких случаев библиотека `aiwlib` содержит ряд модулей на C++ позволяющих использовать систему RACS для запуска расчетов без языка Python. Ниже приведен пример кода для подключения системы RACS к приложению на C++11:

```
#include <aiwlib/racs>      // система RACS
#include <aiwlib/objconf>   // макрос CONFIGURATE
using namespace aiw;
...
struct Model{ // пример класса вычислительного ядра
    int a=1;      // параметры ядра
    double b=2.5;
    bool c=true;
    std::string s="qwe";
    CONFIGURATE(a, b, c, s); // список параметров для обработки

    double t = 0; // не обязательно все параметры перечислять в CONFIGURATE
    ...
};

int main(int argc, const char **argv){
```

```

...
RacsCalc calc(argc, argv); // экземпляр класса расчета
...
Model model;
// подключаем модель к RACS, при этом все параметры
// перечисленные в CONFIGURATE становятся доступны для обработки
calc.control(model);
...
double t_max = 25; // отдельные параметры
int Nsteps = 10;
calc("t_max", t_max)("Ns", Nsteps); // подключаем их к RACS
...
while(model.t < t_max){
    ...
    calc.set_progress(model.t/t_max); // отмечаем степень выполнения расчета
}
...
}

```

Для получения пути к уникальной директории расчета используется метод `calc.path()`, директория создается автоматически при первом вызове метода. Репозиторий формируется на основе поля объекта `calc`

```
std::string repo = "repo";
```

форматируемой по параметрам **задаваемым в аргументах командной строки**².

В отличие от варианта на языке Python, у объекта `calc` есть только служебные поля и атрибуты, то есть невозможно написать например

```

calc.my_parametr = ...;
...
... = calc.my_parametr + ...;

```

Все параметры расчета создаются в виде обычных переменных и ставятся в RACS на контроль при помощи перегруженного оператора

```

template <typename T>
RacsCalc& RacsCalc::operator ()(const char *key, T& val);

```

либо при помощи метода

```

template <typename T>
void RacsCalc::control(T &data, const char *prefix="");

```

Оператор `()` запоминает **адрес** параметра, и возвращает объект `calc`, что позволяет использовать цепочки операторов `()`. Метод `control` так же запоминает адрес объекта, у которого должен быть задан метод `configure` (см. раздел).

²В будущем будут использоваться все параметры поставленные на контроль

При постановке на контроль значение параметра может быть изменено на основе аргументов командной строки или в случае серийного запуска. При вызове метода `calc.commit()` значения всех контролируемых параметров сохраняются в файл `.RACS`.

Метод `calc.commit()` может быть вызван явно, кроме того он вызывается в методе `calc.set_progress` и при завершении расчета (в деструкторе объекта `calc`). При успешном завершении расчета автоматически устанавливается `calc.progress=1`, фиксируется время выполнения `runtime`, состояние расчета изменяется на `finished`. В случае возникновения исключения фиксируется время выполнения `runtime`, состояние расчета изменяется на `stopped`.

Однако, если в течении расчета не было ни одного вызова метода `calc.path()`, уникальная директория расчета не создается и эти действия **не** выполняются — если расчет не сохранил никакие данные в свою уникальную директорию то она ему не нужна, и видимо не требуется метainформация (файл `.RACS`).

3.5 Запуск расчетов подключенных к системе RACS

При запуске расчета, в момент создания объекта `calc`, происходит разбор аргументов командной строки. При этом возможна настройка (отложенная) параметров расчета, организация серийного запуска и т.д.

Если в аргументах командной строки присутствует `-h` или `--help` запуск расчета не производится, вместо этого печатается справочная информация и приложение завершает работу. В справочную информацию, кроме описания синтаксиса задания параметров расчета и различных специальных опций, для Python может включаться информация о параметрах расчета — фактически печатаются все строки из исходного файла содержащие последовательность `#@`.

При задании параметров расчета используется синтаксис `KEY=VALUE`, где `KEY` — имя параметра, `VALUE` — значение параметра, которое будет сконвертировано к нужному типу автоматически. Для приложений на Python допустим синтаксис `KEY=@EXPRESSION`, где выражение `EXPRESSION` вычисляется функцией `eval` в словаре модуля `math` и на основе уже заданных параметров, затем конвертируется к типу значения параметра по умолчанию.

При серийном запуске возможны варианты

- `KEY=[EXPRESSION]` — выражение `EXPRESSION` вычисляется функцией `eval` (только для языка Python);
- `KEY=[X1,X2..Xn]` — хаскелль-стиль для арифметической прогрессии;
- `KEY=[X1:STEP..Xn]` — арифметическая прогрессия с шагом `STEP`;
- `KEY=[X1@STEP..Xn]` — геометрическая прогрессия с множителем `STEP`;
- `KEY=[X1#SIZE..Xn]` — арифметическая прогрессия из `SIZE` элементов;
- `KEY=[X1^SIZE..Xn]` — геометрическая прогрессия из `SIZE` элементов;

В языке Python значения `X1`, `Xn`, `STEP`, `SIZE` вычисляются функцией `eval` в словаре модуля `math` и уже заданных аргументов. В языке C++ значения `X1`, `Xn`, `STEP`, `SIZE` приводятся к типу `double` функцией `::atof`. Параметры `X1` и `Xn` **всегда** включаются в серию. При явном задании параметра `STEP` шаг всегда корректируется для точного попадания в `Xn`. Параметр `SIZE`

должен быть целочисленным (не менее двух). Если серии заданы для нескольких параметров, вычисляются все возможные комбинации значений (декартово произведение).

При серийном запуске на одном компьютере процесс дублируется при помощи вызова `fork` нужное число раз, родительский процесс передает каждому потомку необходимую комбинацию параметров расчета, ожидает окончания работы всех потомков и завершается не выходя из конструктора объекта `calc`. Максимальное число копий процесса `N` задается опцией `-c=N` или `--copies=N`.

При серийном запуске из под `MPI` число копий задается системной утилитой из под которой был запущен расчет, параметр `copies` игнорируется. При запуске из под `MPI` процесс с нулевым идентификатором выполняет роль мастер-процесса — создает уникальные директории расчетов, раздает задания вычислителям, но сам никаких вычислений не производит. На каждом из вычислителей в свою очередь процесс дублируется при помощи системного вызова `fork`, дочерний процесс проводит расчет а родительский процесс дождавшись его завершения обращается к мастер-процессу за следующим заданием.

Аргумент командной строки вида `TAG+` — добавляет тэг `TAG` к расчету.

Для булевых параметров можно указывать значения `Y, y, YES, Yes, yes, ON, On, on, TRUE, True, true, V, v, 1, N, n, NO, No, no, OFF, Off, off, FALSE, False, false, X, x, 0`.

Кроме того доступны следующие служебные параметры

- `-r` или `--repo` — задает путь к репозиторию для создания расчета (по умолчанию значение `repo`);
- `path` — явно задает путь к директории расчета, в языке `Python` если расчет существовал словарь расчета будет обновлен из директории расчета;
- `-p` или `--clean-path` — очищать явно заданную директорию расчета, при этом словарь расчета не обновляется из директории (по умолчанию включено);
- `-s` или `--symlink` — создавать символическую ссылку `'_'` на последнюю директорию расчета (по умолчанию включено);
- `-d` или `--daemonize` — «демонизировать» расчет при запуске (освободить терминал, вывод будет перенаправлен в `logfile` в директории расчета), «демонизация» происходит при создании объекта `calc` (по умолчанию выключено);
- `-S` или `--statechecker` — запускать демона, при необходимости фиксирующего в файле `.RACS` аварийное завершение расчета (по умолчанию включено);
- `-c` или `--copies` — число копий процесса при проведении расчетов с серийными параметрами (по умолчанию 1);
- `-e` или `--on-exit` — по завершении расчета автоматически фиксировать время работы, состояние расчета и сохранять изменения параметров на диск (работает только если в процессе расчета была создана его уникальная директория, по умолчанию включено);
- `-n` или `--calc-num` — число знаков в номере расчета (в текущем дне) при автоматической генерации имени уникальной директории расчета (по умолчанию 3);

- `-a` или `--auto-pull` — автоматически сохранять все параметры расчета из контролируемых расчетом объектов (по умолчанию включено, работает только в языке `Python`);
- `-m` или `--commit-sources` — сохранять исходные коды расчета (по умолчанию включено, работает только в языке `Python`).
- `-mpi` — работа из под `MPI` (по умолчанию отключено, работает только в языке `C++`).

Булевы служебные параметры достаточно просто упомянуть что бы они приняли значение `true`, например `-d` и `-d=Y` эквивалентные записи.

Для всех параметров (кроме серийных) возможно дублирование, актуальным является последнее значение. Значения параметров по умолчанию могут быть изменены при вызове конструктора (создании объекта `calc`, за исключением параметров `daemonize` и `copies`), но параметры командной строки их перекрывают. Длинные имена параметров могут задаваться как с одним, так и с двумя минусами, короткие имена только с одним. Параметр `path` задается без минусов.

3.6 Анализ и обработка результатов — утилита командной строки `racs`

Для многопараметрического поиска, анализа и обработки результатов численного моделирования используется утилита командной строки `racs`. Утилита написана на языке `Python` и имеет интерфейс командной строки. В 2010-м году предпринимались попытки создать версию с оконным интерфейсом пользователя, однако быстро выяснилось что это не дает никаких преимуществ, но при этом существенно усложняется взаимодействие с другими утилитами командной строки и возникают проблемы с удаленной работой по `ssh`.

Утилита может быть запущена без аргументов или с аргументом `--help` для просмотра справки.

Утилита может быть запущена с аргументом `--ghelp` для просмотра справки по глобальному пространству имен, используемому при вычислении выражений.

Утилита может быть запущена с одним аргументом — путем к отдельному существующему расчету для просмотра метаданных (содержимого файла `.RACS'`).

Во всех остальных случаях утилита запускается в виде

```
racs REPO/ EXPR ... ACTION [ACTIONS-ARGUMENTS]
```

Утилита способна совместно обрабатывать нескольких репозиторий, репозитории обрабатываются последовательно (в том порядке в котором были указаны) результаты сливаются в общую выборку (совокупность расчетов); Репозитории указываются с символом `'/'` на конце, и могут указываться вперемешку с выражениями, расположение репозиторий относительно выражений значения не имеет.

Выражения — фрагменты кода на языке `Python`, которые вычисляются для каждого расчета выборки, при этом словарь с параметрами расчета выступает как локальное пространство имен, а в качестве глобального пространства выступает специально сформированный словарь с рядом служебных функций, макросов, функций из модуля `math` и т.д. В начале и в конце выражений могут присутствовать специальные символы, управляющие режимами вычисления

выражений фильтрации, сортировки и постобработки результатов. В итоге выборку можно рассматривать как таблицу, каждой строке которой отвечает расчет, а колонке значение вычисленного выражения.

Выражения могут иметь синтаксис `[~|^][TITLE=][$]EXPR[?|%|#][-]` либо `[$]EXPR![!]` либо `TAG+`.

Если в конце выражения стоит символ `'?'`, производится фильтрация по результатам вычисления выражения — остаются лишь те расчеты, для которых выражение дает истину при приведении к булевому типу. Допускается фильтрация по нескольким выражениям, в итоге они фактически будут объединены логическим `AND`. После фильтрации колонки с такими выражениями выбрасываются из таблицы.

Если в конце выражения стоит символ `'-'` (всегда в **самом** конце), после обработки (например сортировки) такая колонка выбрасывается из таблицы.

Если в конце выражения стоит символ `'%'`, в таблицу добавляется разделитель (горизонтальная линия или пустая строка в зависимости от формата вывода) между строками, у которых различаются значения выражения, при этом столбец может быть скрыт как `EXPR%-`.

Если в конце выражения стоит символ `'#'`, из выборки удаляются все расчеты с одинаковыми значениями выражения кроме первого, при этом столбец может быть скрыт как `EXPR#-` (аналог функции `DISTINCT` в `SQL`).

Рассмотрим теперь специальные символы, которые могут появляться в начале выражений. Аргументы вида `... ~EXPR1 ... ^EXPR2...` означают, что необходимо сортировать расчеты в выборке (после всех фильтров) по результату вычисления выражений, знак `~` означает сортировку по возрастанию, знак `^` означает сортировку по убыванию, сортировки проводятся последовательно (сортировка по `EXPR1` затем по `EXPR2` и т.д.).

Символ `'$'` означает, что выражение должно быть отформатировано по словарю с параметрами расчета при помощи оператора `%` и выполнено как команда `shell`, результатом является стандартный вывод команды (строка), к результатам могут применяться символы `~?#%-`.

В случае сложных выражений можно давать краткие заголовки колонкам таблицы как `TITLE=...`, при этом допустима сортировка, фильтрация и т.д.

Описанные выше возможности не могут модифицировать расчеты выборки (за исключением команд `shell`) поскольку выполняются при помощи функции `eval`. Для модификации расчетов используется синтаксис `TAG+` (добавляет тэг `TAG`) либо `[$]EXPR!` (вычисление выражения функцией `exec` в словаре с параметрами расчета). Два восклицательных знака означают вычисление выражения функцией `exec` в глобальном словаре.

Символ `'$'` означает, что выражение должно быть отформатировано по словарю с параметрами расчета при помощи оператора `%` и выполнено как команда `shell`, а его результаты уже будут выполняться функцией `exec`. Это позволяет писать различные утилиты для сложной постобработки расчетов и легко заносить результаты их работы под `RACS`.

Колонки с выражениями, модифицирующими расчеты в выборке, всегда выбрасываются из таблицы.

Вне зависимости от того, в каком порядке были выставлены выражения, сначала проводится вычисление всех выражений и фильтрация (если хотя бы один из фильтров не пройден расчет выбрасывается из выборки немедленно), затем вся сортировка, затем обрабатываются все символы `'#'`, затем вставляются горизонтальные сепараторы, и только после этого скрываются (по необходимости) оставшиеся столбцы.

Если в процессе вычисления выражения генерируется исключение, то исключение перехватывается а результатом вычисления считается значение `None`. Отчет об исключении будет выведен в стандартный поток ошибок.

В обязательном порядке должно быть указано действие над сформированной выборкой, после указания действия могут присутствовать необязательные аргументы, относящиеся уже к этому действию. Доступны следующие действия:

- `racs ... --keys [or|and|xor]` — выводить сводный список имен параметров в построенной выборке, необязательный аргумент `or` (по умолчанию) означает объединение всех имен параметров, `and` пересечение и `xor` исключающее или;
- `racs ... --rm` — удалить с диска все расчеты выборки;
- `racs ... --co` или `--commit` — сохранить на диск все изменения в расчетах выборки (модификация расчетов не означает их сохранения на диск);
- `racs ... --ps [FNAME]` или `--paths [FNAME]` — вывести пути ко всем расчетам (если `FNAME` не указан) либо пути к файлам `FNAME` лежащим в директориях расчетов выборки;
- `racs ... --ast [[Y|N] TERMWIDTH]` или `--astable [[Y|N] TERMWIDTH]` — вывести выборку в виде таблицы, первый необязательный заголовок позволяет отключить заголовок таблицы (по умолчанию включен), второй необязательный аргумент задает ширину терминала;
- `racs ... --asd [[[head] pattern] filename]` или `--astdata ...` — вывести выборку в виде `.dat`-файла (текстового) с заголовками в стиле утилиты `gplt`. Необязательный аргумент `filename` задает шаблон имени файла который будет отформатирован по словарию с общими (имеющими одинаковые значения) для всех расчетов выборки параметрами (по умолчанию пустая строка, то есть выводит на стандартный вывод). При необходимости под файл рекурсивно создаются все необходимые директории. Необязательный аргумент `pattern` задает шаблон для имен общих для всех расчетов параметров, которые будут выведены в заголовок `.dat` файла (по умолчанию пустая строка, т.е. не выводить никаких). Необязательный булевый аргумент `head` указывает на необходимость вывода заголовков столбцов выборки (по умолчанию включен).

Опция `--astdata` позволяет в духе идеологии `Unix-Way` направлять через неименованный пайп вывод утилиты `racs` на вход утилите `gplt` для визуализации в `gnuplot`.

Кроме того, доступны следующие опции (по умолчанию отключены):

- `--pb` или `--pbar` или `--progressbar` — отображать процесс построения выборки;
- `--csz` или `--calc-size` — определять размер расчетов (требуется дополнительного времени);
- `--ctr` или `--check-tree` — двигаться вглубь репозитория, по дереву каталогов;
- `--force` — не запрашивать подтверждения на удаление расчетов и сохранение изменений;

- `--cl` или `--clustering` — разворачивает значения в первой колонке горизонтально и кластеризует выборку по первой и второй колонке, в результате получается двумерная таблица.

Опция `-clustering` особенно удобна при сравнении различных серий расчетов отличающихся одним параметром.

Еще одной возможностью утилиты `racs` является пакетная обработка выборок и вывод их в разные `.dat`-файлы. Пусть нам необходимо построить множество однотипных выборок с параметрами `X` и `Y`, отличающихся например параметром `N=2,4,8...256`. Одна выборка может быть построена как

```
racs repo/ N==2? ~X Y --asd > results/XY-N2.dat
```

а серия выборок может быть получена средствами `shell`:

```
for N in 2 4 8 16 32 64 128 256; \
do racs repo/ N==$N? ~X Y --asd > results/XY-N$N.dat; done
```

что немного громоздко, но еще приемлемо. Однако, если речь идет о серии выборок по двум параметрам, например `N` и `T=0.2,0.4...2` то в командной строке это начинает немного смахивать на кошмар:

```
for T in 'seq .2 .2 2'; do for N in 2 4 8 16 32 64 128 256; \
do racs repo/ N==$N? T==$T? ~X Y --asd results/XY-T$T-N$N.dat; \
done; done
```

Конечно можно написать `bash`-скрипт, но `racs` позволяет этого не делать:

```
racs repo/ N: T: ~X Y --asd 'results/XY-T%(T)s-N%(N)s.dat'
```

Для серийной обработки используются выражения вида `[TITLE=] [$]EXPR:` — эти выражения выделяются из общего списка аргументов, и одновременно производится построение целой серии выборок, каждая выборка отвечает своему набору значений выражений `...EXPR:`. При выводе в `datfile` производится последовательный вывод для всех выборок из серии, за счет форматирования имени файла каждая выборка может быть выведена в свой файл.