Banco de Modelos

.01

Generado por Doxygen 1.8.11

Índice general

1	Lani	mfe Ba	nk Models	S	1
2	Índio	ce de cl	ases		3
	2.1	Lista d	le clases .		3
3	Indic	ce de ai	chivos		5
	3.1	Lista d	e archivos	·	5
4	Doc	umenta	ción de la	as clases	7
	4.1	Refere	ncia de la	Clase File_Manage	7
		4.1.1	Descripo	sión detallada	8
		4.1.2	Docume	ntación del constructor y destructor	8
			4.1.2.1	File_Manage()	8
			4.1.2.2	File_Manage(const std::string &str, bool truncate)	8
			4.1.2.3	~File_Manage()	8
		4.1.3	Docume	ntación de las funciones miembro	8
			4.1.3.1	Add_a_File_to_Directory_Date(const char dir_name[])	8
			4.1.3.2	create_directory(const char *dir_name[])	8
			4.1.3.3	read_file_line_by_line_g(std::string)	8
			4.1.3.4	save_sk(double *sk, double *k, int Kpoints, int species)	9
			4.1.3.5	set_date_FILE_from_Options_file()	9
		4.1.4	Docume	ntación de los datos miembro	9
			4.1.4.1	date	9
			4.1.4.2	file name	9
			4.1.4.3	infile	9
			4.1.4.4	outfile	9
			4.1.4.5	truncate_file	9
	4.2	Refere		Clase Menu_Class	10
5	Doc	umenta	ción de a	rchivos	11
	5.1			rchivo main.cpp	11
		5.1.1		ntación de las funciones	11
			5.1.1.1	loop_simple_menu(int option_sk)	11
			5.1.1.2	main(int argc, const char *argv[])	12
ĺne	dice				13

Lanimfe Bank Models

This is a simple suit that allows you get some interesting structure factors like Hards Spheere between others.

Getting Started

There are two ways to use this application one of them is using of the menu guide, you can use this of the following way

Easy way

Open terminal in this source path and execute using the command

1 ./blds

and follow the structions.

A more advanced way

This program contains severals options that you can use for interact with the structures factors and their results.

For example if you type

1 ./blds HS

the process for calculate the Hard Spheere structure factor executes.

Here are the differents options that you can execute with this programm.

1 ./blds HS

Executes the process for calculate the Hard Sphere structure factor

2 Lanimfe Bank Models

1 ./blds SS

Executes the process for calculate the Soft Sphere structure factor

1 ./blds Yuk

Executes the process for calculate the Yukawa 3D structure factor

1 ./blds plot HS

Plot the Data of Hard Spheere Structure Factor

1 ./blds plot SS

Plot the Data of Soft Spheere Structure Factor

1 ./blds plot Yuk

Plot the Data of Yukawa 3D Structure Factor

1 ./blds print HS

Print the Data of Hard Spheere Structure Factor

1 ./blds print SS

Print the Data of Soft Spheere Structure Factor

1 ./blds print Yuk

Print the Data of Yukawa 3D Structure Factor

1 ./blds dir

■ List all the files avaible of the structures factors*

Special Notes

You can edit certains properties about the structures factors like volumen fractions if you edit the files of the config directory.

Índice de clases

2.1. Lista de clases

Lista de las clases, estructuras, uniones e interfaces con una breve descripción:

File_Manage	
Clase que se encarga de toda las funciones que tienen que ver con la manipulacion de archivos,	
ademas de la interaccion del sistema de archivos del host	7
Menu Class	10

4 Índice de clases

Indice de archivos

3.1. Lista de archivos

Lista de todos los archivos documentados y con descripciones breves:

main.cpp																			- 11
headers/file_manage.hpp																			??
headers/HPP_headers.hpp																			??
headers/main.hpp																			?
headers/menu_things.hpp																			??

6 Indice de archivos

Documentación de las clases

4.1. Referencia de la Clase File_Manage

Clase que se encarga de toda las funciones que tienen que ver con la manipulacion de archivos, ademas de la interaccion del sistema de archivos del host.

```
#include <file_manage.hpp>
```

Métodos públicos

- File_Manage ()
- File_Manage (const std::string &str, bool truncate)
- ~File_Manage ()
- void save sk (double *sk, double *k, int Kpoints, int species)
- bool read Sk ()
- void read_file_line_by_line_p ()
- std::vector< std::string > read_file_line_by_line_g (std::string)
- void set_date_FILE_from_Options_file ()
- void create_directory (const char *dir_name[])
- void Add_a_File_to_Directory_Date (const char dir_name[])
- void save_Sk_SSPhere (int nKas, double phi, double deltaK, double _dss, double *sk)
- char * get date ()
- std::vector< std::string > my_split (const std::string &str, char delim)
- std::vector< std::string > & split (const std::string &s, char delim, std::vector< std::string > &elems)
- $\verb| std::vector< std::string > \verb| get_just_numbrs| (std::vector< std::string > lines) |$
- void **save_SK_MONO** (double *sk, double *k, int Kpoints)
- void print_file (const std::string &str)
- int print directory ()

Atributos protegidos

- std::string file_name
- bool truncate file
- std::ofstream outfile
- std::ifstream infile
- char _date [50]
- char _directory_name [100]
- FILE * _directory

4.1.1. Descripción detallada

Clase que se encarga de toda las funciones que tienen que ver con la manipulacion de archivos, ademas de la interaccion del sistema de archivos del host.

4.1.2. Documentación del constructor y destructor

```
4.1.2.1. File_Manage::File_Manage()
```

brief Constructor default de la clase.

4.1.2.2. File_Manage::File_Manage (const std::string & str, bool truncate)

Crea un archivo con el nombre especificado, ademas de indicar si este mismo desea truncarlo o no.

Parámetros

str	nombre del archivo, este incluye la ruta del mismo.
truncate	simple bandera para indicar si desea que este sea truncado o no.

4.1.2.3. File_Manage::∼File_Manage ()

Destructor default de la clase.

4.1.3. Documentación de las funciones miembro

 $4.1.3.1. \quad \text{void File_Manage::Add_a_File_to_Directory_Date (\ const \ char \ \textit{file_name[]} \)}$

Add a file to a directory with the name in _date

4.1.3.2. void File_Manage::create_directory (const char * dir_name[])

Just create a simple normal directory.

Parámetros

dir_name	- Is the name of the directory.

4.1.3.3. std::vector< std::string > File_Manage::read_file_line_by_line_g (std::string str)

Read a text file line by line, load this information in a vector and return it.

4.1.3.4. void File_Manage::save_sk (double * sk, double * k, int Kpoints, int species)

Guarda el factor de estructura para esfera dura.

Parámetros

sk	arreglo que contiene los datos del factor de estructura.
k	arreglo que contiene datos relativos al factor de estructura.
kpoints	numero de puntos que contiene el factor de estructura.
species	numero de especies en el sistema.

4.1.3.5. void File_Manage::set_date_FILE_from_Options_file ()

Get the current date and time and set this in the _date array. this must to read the options file for read some properties as like final tempeture, incial tempeture between others. THIS IS CAN CHANGE IS A HORRIBLE SNI← PET CODE

4.1.4. Documentación de los datos miembro

```
4.1.4.1. char File_Manage::_date[50] [protected]
```

Para guardar la fecha actual.

4.1.4.2. std::string File_Manage::file_name [protected]

Nombre del archivo, este ademas incluye la ruta del mismo

4.1.4.3. std::ifstream File_Manage::infile [protected]

Para leer archivos.

4.1.4.4. std::ofstream File_Manage::outfile [protected]

Para escribir archivos.

4.1.4.5. bool File_Manage::truncate_file [protected]

Indica si el archivo se tiene que truncar o no.

La documentación para esta clase fue generada a partir de los siguientes ficheros:

- headers/file_manage.hpp
- file_manage.cpp

4.2. Referencia de la Clase Menu_Class

Métodos públicos

- void print_preface ()
- void print_help ()
- int print_directory ()
- void print_main_loop_menu ()
- void print_options (const std::string &str)

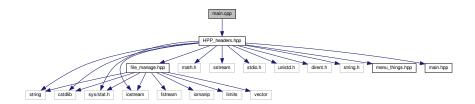
La documentación para esta clase fue generada a partir de los siguientes ficheros:

- headers/menu_things.hpp
- menu_things.cpp

Documentación de archivos

5.1. Referencia del Archivo main.cpp

#include "HPP_headers.hpp"
Dependencia gráfica adjunta para main.cpp:



Funciones

- int main (int argc, const char *argv[])
- bool loop_simple_menu (int option_sk)

5.1.1. Documentación de las funciones

5.1.1.1. bool loop_simple_menu (int option_sk)

Presenta un sencillo menu para las cosas relacionadas al factor de estructura de Esfera Dura y, por obvias razones ademas permite la operatividad de este. Es importante notar que aqui para la ruta de los archivos que manejan los distintos ejecutables, es decir el ejecutable para Esfera dura(01Hard_Spheere..) esfera suave y demas, toman la ruta del proceso padre es decir toman como referencia para indexarse en el arbol de directorios la ruta en la que se esta corriendo "blds":

Parámetros

option sk	indica que factor de estructura realizara sus operaciones.

5.1.1.2. int main (int argc, const char * argv[])

Esta funcion basicamente es el clasico main. Dicha funcion lo que hace es dirigir le interaccion con el usuario para permitirle usar los diversas opciones que permite el banco de modelos. En otras palabras, esta funcion lo que hace es presentar un menu para poder operar las distintas funcionalidades que ofrece Bank Models LANIMFE.

Índice alfabético

```
_date
     File_Manage, 9
\sim\!\!\mathsf{File}\_\mathsf{Manage}
     File_Manage, 8
Add_a_File_to_Directory_Date
     File_Manage, 8
create_directory
     File_Manage, 8
File_Manage, 7
     _date, 9
     ~File_Manage, 8
     Add_a_File_to_Directory_Date, 8
     create_directory, 8
     File_Manage, 8
     file name, 9
     infile, 9
     outfile, 9
     read_file_line_by_line_g, 8
     save sk, 8
     set_date_FILE_from_Options_file, 9
     truncate_file, 9
file_name
     File_Manage, 9
infile
     File_Manage, 9
loop_simple_menu
     main.cpp, 11
main
     main.cpp, 11
main.cpp, 11
     loop_simple_menu, 11
     main, 11
Menu_Class, 10
outfile
     File_Manage, 9
read_file_line_by_line_g
     File_Manage, 8
save sk
     File_Manage, 8
set_date_FILE_from_Options_file
     File_Manage, 9
truncate_file
     File_Manage, 9
```