Описание генератора функций

Введение. Текущие возможности и актуальные файлы

Сейчас (13.07.15) генератор умеет генерировать функции в таких случаях:

- одномерный случай, ни в одном уравнении нет производных порядка выше второго генерируются **все** нужные функции;
- двумерный случай, ни в одном уравнении не содержится смешанных производных и производных порядка выше второго тоже все функции;
- двумерный случай, в уравнениях могут содержаться смешанные производные второго порядка, ни в одном уравнении нет производных порядка выше второго — правильно может быть обработана только ситуация, когда нет соединяющихся блоков (т.е. при генерировании функций не приходится приближать смешанные производные в местах соединений).

Для генерирования функций используются файлы, находящиеся в папке domainmodel:

- 1. customOfficer.py;
- 2. equationParser.py;
- 3. newFuncGenerator.py;
- 4. rhsCodeGenerator.py;
- 5. derivCodeGenerator.py;
- 6. someFuncs.py;
- 7. DerivHandler.py.

Файлы 6 и 7 используются для генерации, но функции, лежащие в них, могут использоваться и для других целей. Из файла 6 для генерации используются функции NewtonBinomCoefficient(), generateCodeFor-MathFunction(), determineNameOfBoundary(), RectSquare(), determineCellIndexOfStartOfConnection2D(), getRanges(). Функции factorial() и getCellCountAlongLine() из этого же файла используются функциями NewtonBinomCoefficient(), determineCellIndexOfStartOf-Connection2D(), getRanges(). Файл 7 содержит функцию, которая находит порядок старшей производной.

1 Файл customOfficer.py и проверка входных данных

Файл 1 (customOfficer.py) создан для проверки некоторых введенных в *.json данных на корректность перед запуском генерации функций. Этот файл содержит класс Reviewer, который связан с внешним миром методом ReviewInput(). В методе createCPPandGetFunctionMaps() класса Model создается экземпляр класса Reviewer и вызывается его метод ReviewInput(). Этот метод проверит правильность введения блоков и параметров.

Основные методы класса Reviewer:

- ReviewParameters(). Проверит, нет ли в списке параметров "Params" повторяющихся имен; совпадает ли множество ключей каждого из словарей в "ParamValues" с множеством элементов списка "Params"; правильно ли установлен "DefaultParamsIndex".
- ReviewBlocks(). Проверит каждый из блоков по таким критериям:
 - размеры блока ("Size") заданы неотрицательными числами;
 - индекс уравнения по умолчанию и индекс начального условия по умолчанию заданы корректно;
 - корректно заданы границы регионов уравнений, регионов начальных условий, регионов граничных условий (при этом нет контроля за наложением одного региона на другой, это остается на совести пользователя); этим будет заниматься метод ReviewEqRegOrInitRegOrBoundReg();
 - одинаково количество уравнений в каждой системе, участвующей в задаче (система участвует в задаче, если она задана в списке "Equations" и при этом есть блок или часть блока, на котором задана именно эта система) (метод ReviewEquations());
 - количество компонент для каждого начального условия совпадает с количеством уравнений в каждой системе (метод ReviewInitials()). То же самое и для граничных условий (метод ReviewBounds()).
- ReviewInput(). Вызывает методы ReviewParameters() и Review-Blocks().

Недостатки проверяльщика:

- Не определено до конца, какие данные нужно проверять на корректность, а какие нет. Поэтому некоторые проверки могут быть лишними, некоторые отсутствовать.
- Корректность ввода интерконнектов пока что нигде не проверяется!

2 Файл equationParser.py и парсинг уравнений, начальных и граничных условий

Мозги парсера — библиотека pyparsing. Этот файл (equationParser.py) содержит три класса:

- CorrectnessController. Занимается проверкой уравнений и математических функций (например, используемых в качестве начальных или граничных условий) на корректность ввода (например, правильность расстановки скобок, правильность расстановки операторов +, -, *, / и т.д.)
- ParsePatternCreater. Чтобы распарсить некое выражение средствами pyparsing, нужно составить подходящую под это выражение грамматику. Нам надо парсить уравнения (выделять их правые части) и отдельно функции. Для этого надо создать 2 разных (но очень похожих) грамматики. Еще надо получать из левых частей уравнений список компонент искомой функции. Надо поэтому уравнения парсить уже по-другому (выделять их левые части), т.е. есть необходимость создания третьей грамматики. Этот класс отвечает за создание этих грамматик.
- MathExpressionParser. С помощью созданной предыдущим классом грамматики либо парсит уравнение, либо математическую функцию, либо возвращает список компонент искомой функции.

Клиент использует только класс 2. Это происходит в методе generateAllPointInitials() класса abstractGenerator для того, чтобы парсить начальные условия; в методе generateCentralFunctionCode() того же класса для парсинга уравнений, необходимых для генерации центральных функций; в реализациях матода generateBoundsAndIcs() классов generator1D и generator2D (а в будущем и generator3D).

Недостатки парсера:

- Работает долго.
- Проверка на корректность ввода уравнений и математических функций (расстановка скобок и т.д.) сделана без использования средств pyparsing. Это порождает целый дополнительный класс, который занимается проверкой.

3 Файл newFuncGenerator.py, выполняющий основную работу

Класс **abstractGenerator** и его наследники **generator1D** и **generator2D** выполняют почти всю работу, связанную с генерацией (оставшуюся, но все же весьма значительную часть работы выполняют классы, находящиеся в файлах 4, 5).

В методе createCPPandGetFunctionMaps() класса Model создается экземпляр класса FuncGenerator, описание которого находится в рассматриваемом файле 3. В конструкторе этого класса в зависимости от размерности задачи выбирается конкретная реализация генератора (т.е. полем этого класса становится экземпляр одного из трех классов generator1D, generator2D, generator3D). В дальнейшем метод generateAll-Functions() класса FuncGenerator работает именно с этой конкретной реализацией. Также этот метод формирует список словарей function-Maps, по которому формируется матрица пересчета и структура которго описана в файле definition в папке doc.

Вот полный список классов файла newFuncGenerator.py с их описанием:

- FuncGenerator. Оперируя генератором для нужной размерности, определенная в нем функция generateAllFunctions() генерирует:
 - определения всех констант (дефайнов);
 - функции для работы с начальными условиями и параметрами;
 - для каждого блока набор центральных функций, набор граничных, угловых и соединительных (интерконнектов) функций.
- abstractGenerator. Содержит общие для всех трех генераторов поля и методы. Например, в нем определены методы генерирования констант (дефайнов) (метод generateAllDefinitions()), функций для начальных условий (generateAllPointInitials()), параметров (generateParamFunction()); методы генерирования функций для граничных условий Дирихле (generateDirichlet()) или Неймана, а также интерконнектов (generateNeumannOrInterconnect()) (функция, генерирующая интерконнект, совпадает с функцией, генерирующей Неймана, просто ей передаются параметры с другим смыслом); метод генерирования центральных функций generateCentralFunctionCode().
- generator1D, generator2D, generator3D. Содержат специфические методы и поля, нужные для обработки задачи указанной размерности. Генератор generator3D не работает и не изменялся очень очень давно. Важно то, что у этих классов есть общие методы get-BlockInfo() и generateBoundsAndIcs(), которые вызываются в

методе generateAllFunctions() класса FuncGenerator. В первом методе определяются все уравнения, заданные на блоке (т.е. копится информация для генерации центральных функций), и для каждой границы определяются граничные условия и интервалы в клетках, на которых они действуют. А также начинает формироваться словарь из списка functionMaps. Во втором методе генерируются граничные, угловые, соединительные функции и завершается формирование словаря из списка functionMaps.

- InterconnectRegion. Создан для того, чтобы унифицировать обработку границ двумерного (и может, трехмерного) блока, т.к. граничные условия и соединения с другими блоками для массива functionMaps надо представлять в одном и том же формате. Просто при создании экземпляра генератора для каждого блока создается список его соединительных регионов.
- BoundCondition и Connection. Метод getBlockInfo() в двумерном (и может, в трехмерном) случае составляет список элементов, которые есть экземпляры этих классов.

4 Файл rhsCodeGenerator.py и генерирование правых частей уравнений, заданных пользователем

Файл содержит класс **RHSCodeGenerator**, который отвечает за генерацию правой части одного уарвнения системы, заданной пользователем, с учетом краевых условий или соединений. Пример возврата такой функции — строка:

Этим занимается метод generateRightHandSideCode(). Методы generateDirichlet() и generateNeumannOrInterconnect() класса abstractGenerator используют именно этот метод. Отдельная задача — сгенерировать производную с нужным конечно-разностным приближением. Подготовкой к такой генерации занимаются методы callDerivGenerator() и callSpecialDerivGenerator(). А саму производную генерируют уже методы одного из двух классов, описанных в файле 5.

5 Файл derivCodeGenerator.py и генерирование производных

Т.к. в уравнении могут встретиться и чистые и смешанные производные, а смешанные производные в случае соединения блоков порождают много разных видов функций, которые необходимо сгенерировать, то удобно поручить генерирование чистых и смешанных производных разным классам. Эти классы:

- PureDerivGenerator;
- MixDerivGenerator.

5.1 PureDerivGenerator

Для центральной функции способен сгенерировать чистую производную любого порядка (потому что конечно-разностные приближения для них в этом случае содержат однотипные элементы, различно только их количество и коэффициенты перед слагаемыми). В зависимости от того, какими значениями был проинициализирован экземпляр этого класса, за генерацию производной отвечает одна из трех функций:

- commonPureDerivativeAlternative() генерировать производную для центральной функции или для граничной в случае, когда граничное условие не влияет на производную (например, первая производная по y вдоль границы x = 0);
- specialPureDerivativeAlternative() генерировать производную для граничной функции, когда граничное условие влияет на производную (например, производная по x вдоль границы $x = x_{max}$);
- interconnectPureDerivAlternative() генерировать производную для функции-соединения (для интерконнекта).

5.2 MixDerivGenerator

Пока что способен генерировать смешанные производные только второго порядка для несоединенных блоков. Функции-генераторы:

- commonMixedDerivativeAlternative() генерировать производную для центральной функции;
- specialMixedDerivativeAlternative() генерировать производную для граничной функции.

Производные в углах двумерного блока генерируются по частям, а потом объединяются в обну строку в методе callDerivGenerator() класса RHSCodeGenerator.