Informatika pro moderní fyziky (5) vstupní a výstupní soubory pro výpočetní programy

František HAVLŮJ

e-mail: haf@ujv.cz

ÚJV Řež
oddělení Reaktorové fyziky a podpory palivového cyklu

akademický rok 2015/2016
3. listopadu 2015

Obsah

- trocha přemýšlení při příležitosti
- rozšiřování možností jazyka Ruby (definice vlastních funkcí, doplnění nových metod)
- základ načítání výstupů

Obsah

HELIOS

Tabulka výstupů:

```
List name         : list
List Title(s)  1) This is a table
               2) of some data
               3) in many columns
               4) and has a long title!
```

	bup	kinf	ab	ab	u235	
0001	0.00E+00	1.16949	9.7053E-03	7.6469E-02	1.8806E-04	7.
0002	0.00E+00	1.13213	9.7478E-03	7.9058E-02	1.8806E-04	7.
0003	1.00E+01	1.13149	9.7488E-03	7.9070E-02	1.8797E-04	7.
0004	5.00E+01	1.13004	9.7521E-03	7.9093E-02	1.8760E-04	7.
0005	1.00E+02	1.12826	9.7559E-03	7.9218E-02	1.8714E-04	7.
0006	1.50E+02	1.12664	9.7594E-03	7.9407E-02	1.8668E-04	7.
0007	2.50E+02	1.12399	9.7657E-03	7.9869E-02	1.8577E-04	7.
0008	5.00E+02	1.12007	9.7812E-03	8.1065E-02	1.8351E-04	7.
0009	1.00E+03	1.11561	9.8203E-03	8.3169E-02	1.7914E-04	7.
0010	2.00E+03	1.10542	9.9329E-03	8.6731E-02	1.7088E-04	7.
0011	3.00E+03	1.09354	1.0067E-02	8.9717E-02	1.6316E-04	7.
0012	4.00E+03	1.08126	1.0207E-02	9.2299E-02	1.5591E-04	7.
0013	6.00E+03	1.05755	1.0474E-02	9.6562E-02	1.4258E-04	7.

Co bychom chtěli

- mít načtené jednotlivé tabulky (zatím jen jednu, ale bude jich víc)
- asi po jednotlivých sloupcích, sloupec = pole (hodnot po řádcích)
- sloupce se jmenují, tedy použijeme `Hash`
- `table['kinf']`
- pozor na `ab`, asi budeme muset vyrobit něco jako `ab1`, `ab2` (ale to až za chvíli)

Nástrahy, chytáky a podobně

- tabulka skládající se z více bloků
- více tabulek
- tabulky mají jméno `list name` a popisek `list title(s)`

Jak uspořádat data?

- pole s tabulkami + pole s názvy + pole s titulky?

Jak uspořádat data?

- pole s tabulkami + pole s názvy + pole s titulky?
- co hashe tabulky[název] a titulky[název]?

Jak uspořádat data?

- pole s tabulkami + pole s názvy + pole s titulky?
- co hashe tabulky[název] a titulky[název]?
- nejchytřeji: `{'a' => {:title => 'Table title', data => {'kinf' => ...}}}`

Jak uspořádat data?

- pole s tabulkami + pole s názvy + pole s titulky?
- co hashe tabulky[název] a titulky[název]?
- nejchytřeji: `{'a' => {:title => 'Table title', data => {'kinf' => ...}}}`
- 'nová' syntaxe: `{'a' => {title: 'Table title', data: {'kinf' => ...}}}`

Z příkazové řádky

- a co takhle z toho udělat skript, který lze pustit s argumentem = univerzální
- `ruby read_helios.rb helios1.out`
- vypíše seznam všech tabulek, seznam jejich sloupců, počet řádků
- pole `ARGV`
- vylepšení – provede pro všechny zadané soubory: `ruby read_helios.rb helios1.out helios2.out`

Obsah

Určení poloh tyčí

Ve vstupním souboru si najdeme relevantní část:

```
c ---------------------------------
c polohy tyci (z-plochy)
c ---------------------------------
c
67 pz 47.6000     $ dolni hranice absoberu r1
68 pz 40.4980     $ dolni hranice hlavice r1
69 pz 44.8000     $ dolni hranice absoberu r2
70 pz 37.6980     $ dolni hranice hlavice r2
```

Určení poloh tyčí

příklad `c1_10_20`:

```
c ---------------------------------
c polohy tyci (z-plochy)
c ---------------------------------
c
67 pz 47.6000    $ dolni hranice absoberu r1
68 pz 40.4980    $ dolni hranice hlavice r1
69 pz 44.8000    $ dolni hranice absoberu r2
70 pz 37.6980    $ dolni hranice hlavice r2
```

Výroba šablon

Jak dostat polohy tyčí do vstupního souboru? Vyrobíme šablonu, tzn nahradíme

```
67 pz 47.6000     $ dolni hranice absoberu r1
```

Výroba šablon

Jak dostat polohy tyčí do vstupního souboru? Vyrobíme šablonu, tzn nahradíme

```
67 pz 47.6000     $ dolni hranice absoberu r1
```

nějakou značkou (*placeholder*):

```
67 pz %r1%     $ dolni hranice absoberu r1
```

Chytáky a zádrhele

- kromě samotné plochy konce absorbéru je nutno správně umístit i z-plochu konce hlavice o 7,102 cm níže
- obecně je na místě ohlídat si, že placeholder nebude kolidovat s ničím jiným

Doporučené nástroje jsou:

- již známá funkce `sub` pro nahrazení jednoho řetězce jiným
- pro pragmatické lenochy funkce `IO.read` načítající celý soubor do řetězce (na což nelze v Pascalu ani pomyslet)
- možno ovšem použít i `IO.readlines` (v čem je to lepší?)

Realizace

```
DELTA = 44.8000 - 37.6980

template = IO.read("template")
(0..10).each do |i1|
  (0..10).each do |i2|
    r1 = i1 * 50
    r2 = i2 * 50
    File.open("inputs/c_#{i1}_#{i2}", "w") do |f|
      s = template.sub("%r1%", r1.to_s)
      s = s.sub("%r1_%", (r1 - DELTA).to_s)
      s = s.sub("%r2%", r2.to_s)
      s = s.sub("%r2_%", (r2 - DELTA).to_s)
      f.puts template
    end
  end
end
```

A co takhle trocha zobecnění?

- když budu chtít přidat další tyče nebo jiné parametry, bude to děsně bobtnat
- funkce `process("template", "inputs/c_#{i1}_#{i2}", {'r1' => r1, 'r2' => r2, .....})`
- všechno víme, známe, umíme

A to je vše, přátelé!