



TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI
Fakulta mechatroniky, informatiky
a mezioborových studií ■

Editor konfiguračních souborů Flow123d

Diplomová práce

Studijní program: N2612 – Elektrotechnika a informatika

Studijní obor: 1802T007 – Informační technologie

Autor práce: **Bc. Tomáš Křížek**

Vedoucí práce: doc. Ing. Jiřina Královcová, Ph.D.





TECHNICAL UNIVERSITY OF LIBEREC
Faculty of Mechatronics, Informatics
and Interdisciplinary Studies ■

Editor for Flow123d configuration files

Master thesis

Study programme: N2612 – Electrotechnology and informatics

Study branch: 1802T007 – Information technology

Author: **Bc. Tomáš Křížek**

Supervisor: doc. Ing. Jiřina Královcová, Ph.D.



Tento list nahrad'te
originálem zadání.

Prohlášení

Byl jsem seznámen s tím, že na mou diplomovou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb., o právu autorském, zejména § 60 – školní dílo.

Beru na vědomí, že Technická univerzita v Liberci (TUL) nezasahuje do mých autorských práv užitím mé diplomové práce pro vnitřní potřebu TUL.

Užiji-li diplomovou práci nebo poskytnu-li licenci k jejímu využití, jsem si vědom povinnosti informovat o této skutečnosti TUL; v tomto případě má TUL právo ode mne požadovat úhradu nákladů, které vynaložila na vytvoření díla, až do jejich skutečné výše.

Diplomovou práci jsem vypracoval samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím mé diplomové práce a konzultantem.

Současně čestně prohlašuji, že tištěná verze práce se shoduje s elektronickou verzí, vloženou do IS STAG.

Datum:

Podpis:

Abstrakt

Český abstrakt

Abstract

English abstract

Poděkování

Obsah

Seznam zkratek	8
1 Problematika	11
1.1 Software Flow123d	11
1.2 Konfigurační soubory	12
1.3 Formát pro výměnu dat	15
2 Analýza	19
2.1 Zápis konfiguračních souborů ve formátu YAML	19
2.2 Specifikace formátu konfiguračních souborů	21
2.3 Autokonverze	25
3 Návrh	31
3.1 Autokonverze	31
3.2 Validace	31
3.3 Kontextová dokumentace	31
3.4 Automatické doplňování textu	31
3.5 Funkce editoru	31
3.6 GUI	31
4 Implementace a testování	32
5 Uživatelská příručka	33
5.1 Zápis konfiguračních souborů pomocí YAML	33
5.2 Vytváření a editace konfiguračních souborů	33
5.3 Validace a odstranění chyb	33
5.4 Nastavení	33
Literatura	35

Seznam zkratek

Úvod

Existuje celá řada softwarů, která pro zajištění požadované funkce potřebuje správné nastavení, podle kterého pak daný program přizpůsobí svoji činnost. Může se jednat o počáteční konfiguraci, jako je tomu například u serverových aplikací nebo e-mailových klientů. Tato konfigurace se zpravidla dále nemění, pokud nedojde k nějakým podstatným změnám.

Oproti tomu existují programy, od kterých se očekává, že budou spouštěny s širokou škálou různých nastavení. U těchto aplikací se typicky konfigurace předává při spuštění jako jeden ze vstupních parametrů. Činnost těchto programů se pak zásadně liší dle zvolené konfigurace.

Takovou aplikací je například simulátor Flow123d, který se používá pro modelování procesů v horninovém prostředí. Vstupem do této aplikace je výpočetní síť společně se zadáním úlohy. Tato úloha je definovaná pomocí konfiguračního souboru, který vytváří uživatel. Po zadání vstupních dat provede simulátor výpočty na dané síti a výsledky uloží do datového souboru, který je výstupem z aplikace.

Software Flow123d podporuje různé typy úloh. Konfigurace jednotlivých úloh vyžaduje odlišné nastavení a může tedy dojít k tomu, že uživatelem zadaná konfigurace je nevalidní – například kvůli tomu, že definice dané úlohy neobsahuje některé povinné parametry a je tedy neúplná. V souboru může vzniknout i syntaktická chyba, která způsobí, že zadaná data nelze správně interpretovat.

Popis formátu konfiguračních souborů pro Flow123d je poměrně rozsáhlý – samotná referenční příručka, která ho popisuje, obsahuje několik desítek stran. To klade na uživatele velké nároky. Pokud chce například ověřit, že byly zadány všechny povinné parametry, buď musí mít se softwarem rozsáhlé zkušenosti, nebo musí trávit velké množství času prohledáváním dokumentace.

Celá situace je dále komplikována tím, že formát konfiguračních souborů se mění s tím, jak se vyvíjí nové a upřesňují stávající funkcionality softwaru Flow123d. Může dojít k tomu, že některé změny ve formátu konfiguračních souborů nemusí být zpětně kompatibilní. Uživatel tedy potřebuje znovu prostudovat rozsáhlou referenční doku-

mentaci, aby zjistil, jakým způsobem zadat dříve realizovanou úlohu pro novou verzi Flow123d.

Pokud se stane, že uživatel spustí Flow123d s nevalidní konfigurací, potom během inicializace dojde k chybě, o které se uživatel dozví pomocí textového rozhraní, ve kterém se Flow123d spouští. Jelikož se může jednat o výpočetně náročné úlohy, které se často pouští na vzdáleném výpočetním clusteru, je tento proces poměrně časově náročný a uživatelsky nepříjemný.

Při vzdáleném spouštění Flow123d se úloha zařadí do fronty na výpočetním clusteru, kde dále čeká na přidělení zdrojů. Ty se přidělují na základě aktuálního vytížení. Bud' jsou k dispozici okamžitě, nebo je nutné čekat na dokončení některých předchozích úloh. Může tedy nastat situace, kdy uživatel zařadí úlohu do fronty a poté čeká na výsledky několik hodin nebo dokonce dní, a teprve potom zjistí, že v konfiguračním souboru, který vytvořil, byla chyba. Kvůli nemohlo dojít k inicializaci úlohy a tím pádem ani neproběhla simulace.

Tyto důvody byly hlavní motivací ke vzniku speciálního editoru pro konfigurační soubory Flow123d, který práci s nimi značně zjednoduší a usnadní. Editor zrychlí proces odstranění chyb tím, že je odhalí už v průběhu vytváření nebo upravování konfiguračních souborů. To uživateli umožní chyby odstranit ještě před tím, než předloží konfigurační soubor softwaru Flow123d. Tím dojde ke značné časové úspoře obzvláště v případech, kdy se výpočetní úloha spouští vzdáleně.

Součástí editoru má být grafické uživatelské rozhraní. Jedním z jeho hlavních přínosů bude zjednodušení přístupu k dokumentaci. Uživatel bude mít k dispozici tu část dokumentace, která bezprostředně souvisí s právě upravovanou částí konfiguračního souboru. Tato forma nápovědy by měla uživateli poskytnout alternativu k prohledávání rozsáhlé referenční dokumentace.

Dále bude editor umožňovat zobrazit datovou strukturu, která tvoří konfigurační soubor. Kromě toho bude editor poskytovat základní funkce pro práci s textovými soubory, jako je podpora operací se schránkou, možnost vrátit či opakovat změny, vyhledávání či nahrazení textu a další. Editor má podporovat platformy Windows a Linux.

1 Problematika

1.1 Software Flow123d

Flow123d je software, který slouží k výpočtu proudění v porézním médiu, transportu látek nebo transportu tepla. Jedná se o aplikaci, která je orientována na práci s daty, a vzhledem k tomu neobsahuje žádné grafické uživatelské rozhraní. Uživatel tedy s aplikací pracuje v textovém režimu prostřednictvím terminálu, kde může aplikaci předat vstupní soubory a případně další parametry.

Na obrázku 1 jsou znázorněny vstupy a výstupy simulátoru Flow123d spolu s pomocnými aplikacemi, které uživatelé často používají. Vstupem do simulátoru Flow123d jsou dva soubory. První z těchto souborů popisuje výpočetní síť pomocí seznamu uzlů a elementů. Jedná se o textový soubor ve formátu `.msh`. Tuto síť generují softwary GMSH nebo SALOME. Druhým vstupním souborem je konfigurační soubor, který popisuje řešenou úlohu. Tento soubor si prozatím uživatelé tvořili sami pomocí obvyklých textových editorů.

Pro tento konfigurační soubor vzniká v rámci této práce specializovaný editor s označením ModelEditor, který má oproti obvyklému textovému editoru poskytnout např. validaci zadaných dat, zobrazení kontextové dokumentace nebo automatické doplňování textu. Vytváření a editace konfiguračních souborů se tak uživateli značně zjednoduší. ModelEditor je jednou ze součástí aplikace GeoMop, která obsahuje i další komponenty.

GeoMop má sloužit jako nástroj, který usnadní práci se simulátorem Flow123d. Jeho další komponenty mají za úkol např. zajišťovat vzdálené spouštění Flow123d na výpočetních clusterech. To bude zajišťovat modul JobsScheduler, který sjednotí rozhraní a postup spouštění Flow123d na různých výpočetních clusterech. Další součástí aplikace GeoMop bude modul Analysis, který umožní úlohy parametrizovat a dále je potom provádět pro různé sady hodnot. GeoMop je aktuálně ve vývoji a je možné, že se bude rozšiřovat o další funkce.

Výstupem ze softwaru Flow123d je datový soubor, který obsahuje výsledky si-



Obrázek 1: Simulátor Flow123d a pomocný software

mulace. U tohoto souboru si uživatel může vybrat požadovaný formát, podle toho, kterou aplikaci chce použít pro zpracování výsledků. Typicky uživatelé používají buď opět GMSH nebo ParaView. Existuje také celá řada jednoúčelových nástrojů, které si uživatelé často tvoří sami, nebo vznikají v rámci různých projektů.

1.2 Konfigurační soubory

V současné době (verze Flow123d 1.8.2), se pro specifikaci úlohy používá jeden konfigurační soubor, který obsahuje všechna potřebná data pro definici a inicializaci úlohy. Z pohledu Flow123d je úloha definovaná pomocí konkrétních objektů, které mají nastavené různé atributy na požadované hodnoty.

Vzhledem k tomu, že úlohy definují lidé, je potřeba určit nějaké společné rozhraní, pomocí kterého budou moci definovat tyto objekty a jejich obsah. Tato definice zároveň musí být strojově čitelná, aby ji simulátor Flow123d mohl zpracovat a

nakonfigurovat se podle ní do správného počátečního stavu pro zahájení výpočtu.

Jelikož se pro předávání dat používají soubory, existují v principu dvě možnosti, jak předat tato data. Formát souboru může být buď binární, nebo textový. Vzhledem k tomu, že soubory mají vytvářet lidé, tak by bylo krajně nepraktické, kdyby se použil binární formát souboru.

Textová reprezentace konfiguračních souborů s sebou kromě čitelnosti přináší i další výhody. Oproti binárnímu formátu není závislá na architektuře, jelikož všechna data jsou kódována ve formě textu. Navíc díky tomu, že textový soubor umožňuje kromě přenosu samotných dat i tyto data nějakým způsobem popsat, potom se změny v interní struktuře Flow123d nemusí nutně projevit ve formátu konfiguračních souborů.

1.2.1 Datová struktura

Použití textového formátu konfiguračních souborů s sebou však přináší otázku, jakým způsobem tato data v textu reprezentovat. Je důležité, aby pomocí vybraného formátu bylo možné inicializovat libovolnou strukturu tříd v C++. Takové třídy obsahují atributy, které mají název (dále označován jako klíč), typ a hodnotu. Ve většině případů platí, že klíč jednoznačně implikuje typ. Potom je tedy dostačující ukládat dvojici klíč a hodnota.

Existují i situace, kdy z názvu atributu nelze jednoznačně určit jeho typ. To je způsobené použitím polymorfismu. Z klíče lze tedy odvodit pouze jakého typu musí být předek. Pokud má tento předek více potomků, pak je nutné vybraný typ explicitně uvést. Tyto situace jsou prozatím zanedbány a jsou popsány samostatně v kapitole X.

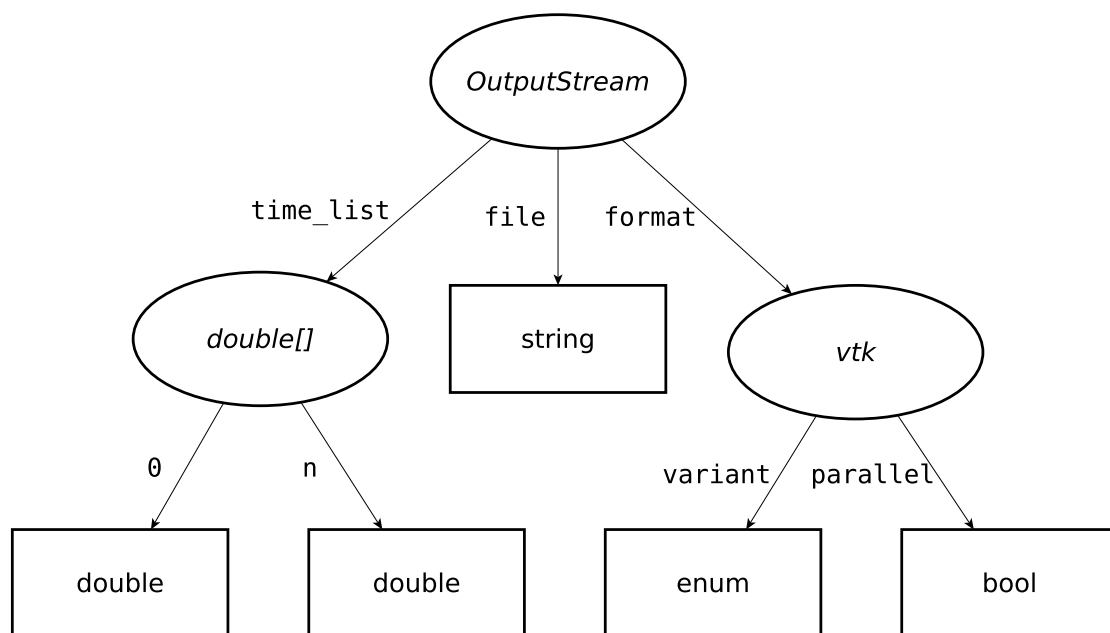
V konfiguračních souborech je tedy potřeba ukládat dvojice klíč a hodnota. Hodnotou může být buď jednoduchého nebo složeného datového typu. Reprezentace jednoduchých datových typů je většinou triviální a spočívá pouze v převodu hodnoty na textový řetězec, pokud jím není. Povolené jednoduché datové typy v rámci konfiguračních souborů jsou následující:

- booleovské hodnoty,
- celá čísla,
- desetinná čísla,
- hodnoty výčtového typu (tzv. enum),

- řetězce¹.

Složeným datovým typem z pohledu použitých konfiguračních souborů může být buď homogenní pole, nebo jiný objekt. Tím pádem vzniká hierarchická datová struktura, která může mít teoreticky nekonečný počet vnořených úrovní. V praxi je samozřejmě počet úrovní vždy konečný, ale důležité je, aby použitý formát umožňoval reprezentovat libovolný počet vnoření.

Na obrázku 2 je znázorněna hierarchická struktura složeného datového typu *OutputStream*. Pro názornost jsou vynechány některé atributy. Datový typ *OutputStream* obsahuje řetězec *file*, což je jednoduchý datový typ. Dále obsahuje pole desetinných čísel *time_list*, které dále obsahuje konkrétní desetinná čísla. Posledním znázorněným atributem objektu *OutputStream* je *format*, který obsahuje referenci na objekt typu *vtk*. Objekt tohoto typu pak dále obsahuje atributy *variant* a *parallel*, které jsou jednoduchých datových typů.



Obrázek 2: Příklad složeného datového typu s různými typy atributů

¹Konkrétní implementace typu řetězec je typicky pole znaků, tedy složený datový typ. Z pohledu konfiguračních souborů se však jedná o jednoduchý datový typ, protože je dále nedělitelný.

1.3 Formát pro výměnu dat

1.3.1 Formát CON

Ve verzi Flow123d 1.8.2 se pro reprezentaci výše popsané datové struktury používá speciální formát CON, který byl navržen vývojáři Flow123d pro účel zápisu konfiguračních souborů. Jedná se o formát, který vychází z JavaScript Object Notation, který je specifikován standardem ECMA-404. Oproti tomuto standardu se liší v několika detailech.

Příklad části konfiguračního souboru ve formátu CON je znázorněn na obrázku 3. Jednou z ihned zřejmých odlišností od formátu JSON je použití znaku „=“ místo „:“ pro oddělení klíče a hodnoty. Dále není nutné psát názvy klíčů do uvozovek. Další odlišnosti a kompletní specifikaci formátu CON lze nalézt v dokumentaci k Flow123d 1.8.2.

Během používání tohoto formátu se ale jeho odlišnost od JSON projevila jako jeden z nedostatků. Kvůli nekompatibilitě formátu s formátem JSON nelze použít pro zpracování CON formátu standardní knihovny. To je jeden z důvodů, proč bylo rozhodnuto, že ve verzi Flow123d 2.0 bude použit nějaký standardní formát pro výměnu dat.

To však nebylo jediným nedostatkem tohoto formátu. Uživatelé, kteří tento soubor upravovali, naráželi často na dva problémy. Bylo pro ně velice nepohodlné neustále hlídat správné uzávorkování objektů nebo zda na konci řádku nebyla zapomenuta čárka pro oddělení položek. To představoval problém obzvlášť u rozsáhlejších konfiguračních souborů, které obsahovaly velký počet úrovní vnoření. Jelikož formát JSON sdílí tyto vlastnosti, tak byl zavržen jako možný nástupce formátu CON.

1.3.2 Formát XML

Extensible Markup Language (XML) je rozšiřitelný značkovací jazyk, který slouží pro popis dat. Tento jazyk vznikl z jazyka Standard Generalized Markup Language (SGML), z kterého je odvozen i jazyk HTML. Všechny správně zformátované XML dokumenty tedy zároveň i SGML dokumenty. Popis a doporučení týkající se jazyka XML lze nalézt na webových stránkách konsorcia W3C.

Použití jazyka XML pro zápis konfiguračních souborů bylo jednou ze zvažovaných možností. Ukázku takového zápisu lze vidět na obrázku 3, na němž si lze zároveň všimnout odlišností zápisu XML oproti jiným možnostem.

Soubor ve formátu CON

```
1 output = {
2   output_stream = {
3     file = "./flow_test16.pvd",
4     format = {
5       TYPE = "vtk",
6       variant = "ascii"
7     },
8     name = "flow_output_stream"
9   },
10  output_fields = [ "pressure_p0",
11                   "pressure_p1",
12                   "velocity_p0" ]
13 }
```

Soubor v jazyce XML

```
1 <output>
2   <output_stream>
3     <file>./flow_test16.pvd</file>
4     <format type="vtk">
5       <variant>ascii</variant>
6     </format>
7     <name>flow_output_stream</name>
8   </output_stream>
9   <output_fields>pressure_p0</output_fields>
10  <output_fields>pressure_p1</output_fields>
11  <output_fields>velocity_p0</output_fields>
12 </output>
```

Soubor v jazyce YAML

```
1 output:
2   output_stream:
3     file: ./flow_test16.pvd
4     format: !vtk
5     variant: ascii
6     name: flow_output_stream
7   output_fields:
8     - pressure_p0
9     - pressure_p1
10    - velocity_p0
```

Obrázek 3: Ukázky různých formátů pro zápis konfiguračního souboru

Velkou výhodou tohoto jazyka je, že umožňuje nadefinovat si vlastní strukturu dokumentu. Lze tedy specifikovat kde se mohou vyskytnout jaké elementy, jaké mohou mít atributy a tak podobně. K tomu slouží DTD nebo XML Schema, které má oproti DTD více funkcí, např. dokáže omezit počet výskytů elementů.

Použití XML Schema by velice usnadnilo validaci datové struktury a navíc existuje celá řada nástrojů, které jsou schopné ověřit, zda je daný XML dokument validní pro dané XML Schema. Úskalím použití této validace by však byly tzv. autokonverze, které jsou popsány v kapitole ??.

Jedná se o speciální zápis, který lze použít v datové struktuře při zapisování polí nebo záznamů. V těchto speciálních případech lze místo pole či záznamu zapsat pouze hodnotu. To znemožňuje běžnou validaci pomocí XML Schema a bylo by nutné validaci XML upravit tak, aby byla schopná brát ohled na autokonverze. To znamená, že by bohužel nebylo možné použít univerzální nástroje pro validaci XML.

Nevýhodou tohoto formátu je jeho „výřečnost“. Té si lze na první pohled všimnout na obrázku 3. Jazyk XML vyžaduje z uvedených možností pro zápis stejných dat nejvíce znaků. Hlavní nevýhodu v použití jazyka XML pro zápis konfiguračních souborů vývojáři Flow123d viděli v jeho zásadní odlišnosti oproti dosavadně používanému formátu CON. Dle jejich názoru by to pro uživatele Flow123d byla příliš velká změna.

1.3.3 Formát YAML

Poslední z uvažovaných možností bylo použití jazyka YAML, který je zobecněním formátu JSON. Kterýkoliv JSON dokument je tím pádem i YAML dokumentem. Oproti formátu JSON ovšem umožňuje syntaktický zápis, který byl speciálně navržen s ohledem na to, aby ho mohli jednoduše zapisovat lidé.

Toho si lze všimnout opět na obrázku 3. Ze všech uvedených možností je zápis v jazyce YAML nejkratší, a to jak počtem napsaných řádek, tak i počtem potřebných znaků. Zároveň ovšem elegantně řeší problémy původně použitého formátu CON, resp. formátu JSON.

Jelikož pro zápis vnořených dat používá odsazení, není nadále nutné používat závorky pro uzavření záznamů a polí. Dále podporuje zápis polí pomocí odrážek, což je dobře čitelné a pohodlné pro zápis. Oproti formátu JSON také odpadá nutnost psaní čárek na koncích řádků pro oddělení klíčů v záznamů nebo položek v poli. Dále není nutné psát řetězce do uvozovek, protože se datové typy odlišují implicitně².

Všechna tato vylepšení vedou k tomu, že soubory zapsané v jazyce YAML jsou

²V případě potřeby lze datový typ specifikovat i explicitně.

velice dobře čitelné a jednoduché pro zápis. Navíc se jazyk YAML od původního formátu CON neliší natolik, jako jazyk XML. To vedlo k rozhodnutí, že ve verzi Flow123d 2.0 bude použit jazyk YAML pro zápis konfiguračních souborů. Vytvářená aplikace tedy bude pracovat s konfiguračními soubory napsanými v jazyce YAML. Předchozí formát CON bude možné v rámci aplikace importovat³, ale již nebude podporován export ve formátu CON.

³Import formátu CON je nad rámec této diplomové práce a v rámci projektu ho řešil Ing. Pavel Richter.

2 Analýza

Tato kapitole se skládá ze dvou hlavních částí. V první z nich je rozebrána specifikace konfiguračních souborů, kterou generuje Flow123d. Tato specifikace je zásadní pro validaci, generování dokumentace a automatické doplňování textu. Zároveň jsou v této části popsány speciální případy zápisu polí nebo záznamů (tzv. autokonverze). Autokonverze mají zásadní vliv na validaci dat.

V druhé části této kapitoly je popsán proces zpracování souborů ve formátu YAML. Dále je v této části navrženo vhodné použití syntaxe pro zápis datové struktury, referencí a abstraktních záznamů, které jsou popsány v první části této kapitoly.

2.1 Zápis konfiguračních souborů ve formátu YAML

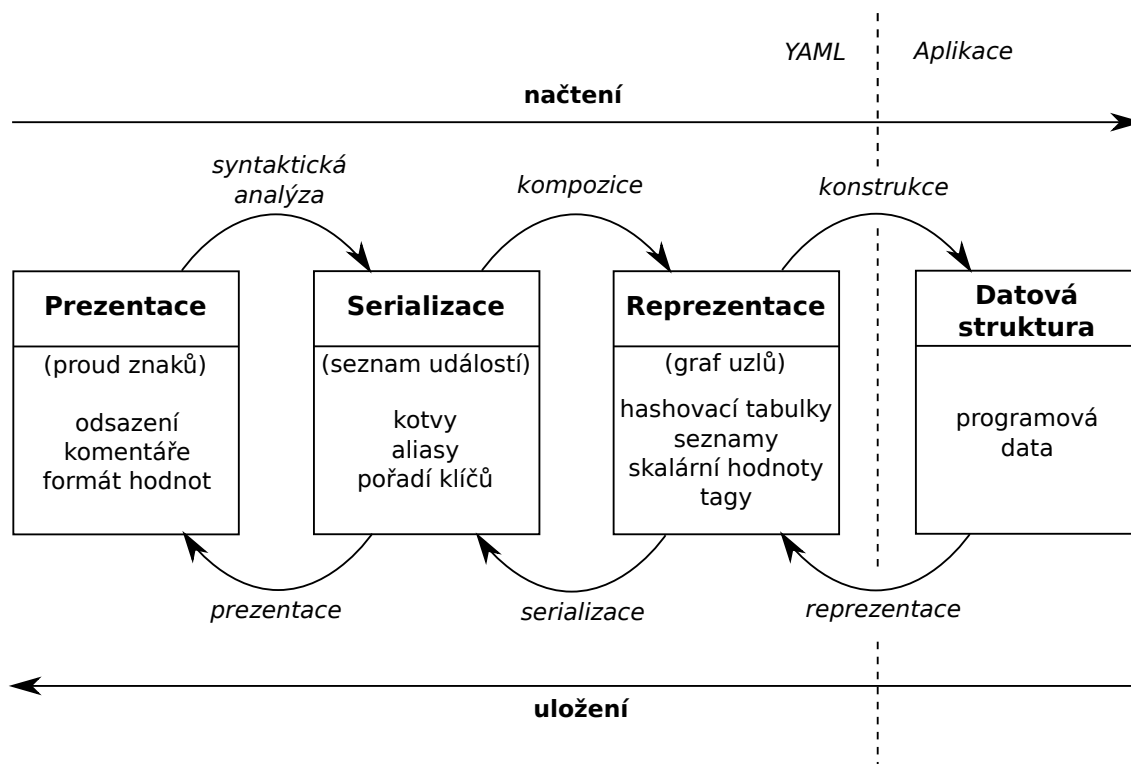
Jak již bylo zmíněno v kapitole 1.3.3, pro zápis konfiguračních souborů se bude používat formát YAML. Jedná se o univerzální formát pro serializaci dat založený na kódování Unicode. Je navržen pro jednoduchý zápis seznamů, hashovacích tabulek a primitivních hodnot.

Mezi cíle formátu YAML patří mimo jiné jednoduchá čitelnost a přenositelnost, což jsou pro konfigurační soubory ideální vlastnosti. Dalším z cílů je čtení pomocí jediného průchodu, což s sebou oproti formátu CON přináší určité komplikace a změny, které jsou dále rozvedeny v kapitole ??.

2.1.1 Uložení a načtení formátu YAML

Jelikož je formát YAML navržen tak, aby k jeho přečtení a reprezentaci stačil jediný průchod, je možné ho zpracovávat dvěma způsoby. Buď je možné pracovat s proudem dat a na základě detekovaných symbolů generovat události, nebo z dat vytvořit objektovou reprezentaci.

Oficiální dokumentace formátu YAML popisuje proces zpracování, ve kterém se využijí oba výše zmíněné způsoby, které se liší hlavně úrovní abstrakce. Na obrázku 4 lze vidět proces zpracování formátu YAML.



Obrázek 4: Zpracování formátu YAML

Proces načtení souboru ve formátu YAML prochází třemi fázemi. V první fázi proběhne syntaktická analýza, která převede vstupní soubor na posloupnost událostí. Syntaktická analýza hledá symboly a hodnoty na základě syntaxe YAML, kontroluje správné odsazení a vypustí ze vstupu komentáře.

V druhé fázi proběhne kompozice, která převede posloupnost událostí na reprezentaci dat pomocí grafu. V této fázi se z dat odstraní kotvy a aliasy se nahradí příslušnými daty. Použití kotev a aliasů je dále vysvětleno v kapitole ??.

V poslední fázi se převede graf reprezentující data na datovou strukturu dané aplikace. Tato fáze reprezentuje rozhraní mezi reprezentací formátu YAML a nativními datovými strukturami dané aplikace.

V každé fázi se ztratí část informace.

2.1.2 Zápis datových typů

2.1.3 Reference

2.2 Specifikace formátu konfiguračních souborů

Simulátor Flow123d umožňuje exportovat popis vstupní datové struktury konfiguračních souborů. Tento popis struktury bude v textu nadále označován jako *specifikace formátu*. Oproti tomu slovo *formát* udává použitou textovou reprezentaci pro zápis konfiguračního souboru – nejčastěji tedy označuje buď starší souborový formát CON, nebo nově používaný formát YAML.

Zatímco formát udává syntaktická pravidla pro vytváření dokumentů, specifikace formátu popisuje sémantický význam zapsaných dat, definuje použitelné uživatelské typy a klade různá omezení na vstupní datovou strukturu. Formát a specifikaci formátu lze považovat za analogii k XML, resp. XML Schema.

Mezi vývojáři Flow123d se specifikace formátu také označuje jako Input Structure Tree (IST). S tím, jak se vyvíjí nová a rozšiřuje stávající funkcionality simulátoru Flow123d, se mění i tato specifikace. Z toho plyne zásadní požadavek na validaci konfiguračních souborů – proces validace musí být možné přizpůsobit konkrétní specifikaci formátu, která je závislá na verzi Flow123d.

Specifikace formátu je generována simulátorem Flow123d na základě jeho interní datové struktury. Reprezentace této struktury je exportována do formátu JSON. Tato specifikace formátu obsahuje kromě požadavků na datovou strukturu i dokumentační řetězce, ze kterých se vytváří referenční dokumentace. Specifikace formátu je tedy úplným popisem datové struktury konfiguračních souborů, ze kterého vychází hlavní funkce ModelEditoru, jako je validace konfiguračních souborů, kontextová dokumentace nebo automatické doplňování textu.

2.2.1 Datové typy

Jak již bylo zmíněno v kapitole 1.2.1, konfigurační soubory obsahují hierarchickou datovou strukturu, která tvoří strom. Specifikace formátu definuje datový typ pro každý uzel stromu, ať už se jedná o interní uzel nebo list stromu. Datové typy definované ve specifikaci formátu mohou mít následující parametry:

- `id`.....unikátní řetězec označující datový typ
- `input_type` základní typ, ze kterého je datový typ odvozen
- `name` název datového typu, nemusí být unikátní
- `description`... dokumentační řetězec popisující datový typ
- `attributes` pomocné atributy obsahující dodatečné informace

Základní typ `input.type` udává pouze typ, ze kterého je konkrétní datový typ odvozen. Konkrétní datové typy navíc obsahují výše vyjmenované informace a případná další upřesnění či omezení. Specifikace formátu může takových datových typů definovat neomezený počet. Oproti tomu je možné využít pouze následující základní datové typy:

- *Integer* pro celá čísla,
- *Double* pro reálná čísla,
- *String* pro řetězce,
- *Filename* pro jména souborů,
- *Selection* pro výčtové typy,
- *Array* pro homogenní pole,
- *Record* pro záznamy,
- *Abstract* pro abstraktní záznamy.

Primitivní datové typy

Mezi tyto datové typy patří všechny typy odvozené z *Integer*, *Double*, *String*, *Filename* nebo *Selection*. Jedná se o datové typy, jejichž hodnota je z pohledu datové struktury konfiguračního souboru dále nedělitelná. Ve stromové datové struktuře se tedy vždy jedná o listy stromu.

Datové typy odvozené z *Filename* a *String* nemají v současné verzi Flow123d žádné další parametry, které by omezovaly jejich možné hodnoty (např. omezení délky řetězce). Datové typy, které slouží pro reprezentaci čísel, tedy typy odvozené od *Integer* a *Double*, mohou mít navíc omezený rozsah povolených hodnot pomocí zadání intervalu `range`.

`range` dvojice čísel, která vymezuje rozsah platných hodnot

Datové typy odvozené z typu *Selection* slouží pro specifikaci výčtového typu. Tyto typy mají pevně definovanou množinu platných hodnot, která je zadána pomocí parametru `values`. Každý záznam v tomto poli je definován pomocí jejich názvu `name` a popisu `description`.

`values` seznam přípustných hodnot včetně jejich popisu

Pole

Všechna pole ve specifikaci datové struktury jsou homogenní – obsahují tedy prvky, které jsou stejného datového typu (případně jsou odvozeny ze stejného abstraktního datového typu, viz dále). Datový typ potomků pole definuje parametr **subtype**, která obsahuje identifikátor datového typu. Pole dále mohou obsahovat omezení minimálního a maximálního počtu prvků, zadaného pomocí **range**.

range dvojice čísel udávající minimální a maximální počet prvků
subtype datový typ jednotlivých prvků pole

Záznamy

Záznamy slouží pro inicializaci tříd a jejich atributy tvoří dvojice klíč a hodnota. Každý datový typ odvozen z typu **Record** má v rámci specifikace formátu definován množinu klíčů **keys**. Dále mohou mít záznamy definován parametr **reducible_to_key**, který se používá pro autokonverzi na záznam (viz kapitola ??).

keys definuje množinu klíčů daného záznamu
reducible_to_key ... obsahuje název klíče použitého pro autokonverzi

Definice každého klíče dále obsahuje další parametry. Mezi ně patří **key**, který udává název klíče, poté opět popis **description**, datový typ klíče **type** a parametr **default**.

key název klíče
description dokumentační řetězec popisující klíč záznamu
type identifikátor očekávaného datového typu klíče
default upřesňuje typ klíče a případně jeho výchozí hodnotu

Parametr **default** se skládá z dvojice parametrů **type** a **value**. Parametr **value** udává výchozí hodnotu klíče. Tato hodnota se použije v případě, že se v konfiguračním souboru nevyskytne daný klíč. Parametr **type** udává, zda je potřeba klíč explicitně zadat či nikoliv a může nabývat následujících hodnot:

obligatory klíč je povinný a jeho hodnota musí být explicitně zadána
optional klíč je nepovinný a nemá žádnou výchozí hodnotu
value at declaration .. výchozí hodnota je součástí deklarace typu
value at run time výchozí hodnota se načte při spuštění

Z pohledu aplikace ModelEditor je podstatná pouze hodnota *obligatory*, která udává, že klíč musí být v konfiguračním souboru uveden. Ostatní typy klíčů nemusí být v konfiguračním souboru explicitně uvedeny. Pokud se však objeví, provede se jejich validace jako stejně jako u ostatních klíčů.

Abstraktní záznamy

Posledním speciálním typem, který se používá ve struktuře konfiguračních souborů je abstraktní záznam. Jedná se o všechny typy, které jsou odvozené ze základního typu označovaného jako *Abstract*. Abstraktní záznamy slouží jako zástupný typ, který se ve specifikaci formátu datové struktury objevuje na místech, kde se mohou vyskytovat různé typy (ovšem ne zcela libovolné).

Příkladem je například záznam, který udává řešenou rovnici. Existuje několik typů rovnic, které je možné řešit, a každá z nich má jinou datovou strukturu. V takových případech se na místě, kde se očekává rovnice uvede abstraktní datový typ. V konkrétních datových typech (např. pro jednotlivé typy rovnic) se pak pomocí klíče *implements* definuje, které abstraktní záznamy implementují.

Použitá terminologie se rozchází s programátorskou terminologií, kde by se tento abstraktní záznam označil spíše jako rozhraní. Abstraktní záznamy totiž nemohou mít definované žádné klíče – tím pádem se nepoužívají pro dědičnost. Navíc jeden konkrétní typ může implementovat více abstraktních typů, což je z pohledu objektového programování typické spíše pro rozhraní. Pro zachování jednotné terminologie se specifikací formátu Flow123d a její dokumentací bude ale nadále tento typ označován jako abstraktní záznam.

default_descendant výchozí typ abstraktního záznamu
implementations seznam implementací abstraktního záznamu

Jak již bylo řečeno, oproti záznamům neobsahují abstraktní záznamy žádnou definici klíčů. Obsahují však navíc parametr *default_descendant*, který udává identifikátor záznamu, který se použije v případě, že záznam, který je uveden na místě, kde se očekává abstraktní záznam, nemá explicitně uvedený typ. Abstraktní

záznam navíc obsahuje parametr `implementations`, který obsahuje seznam identifikátorů všech jeho implementací. Jedná se o duplicitní informaci a v rámci aplikace ModelEditor není využita, protože se používá parametr `implements` u konkrétních záznamů.

2.3 Autokonverze

V konfiguračních souborech pro Flow123d se používají speciální zápisy záznamů a polí, které vývojáři a uživatelé Flow123d označují jako automatické konverze, nebo zkráceně pouze autokonverze. Cílem autokonverzí je zjednodušení a zkrácení zápisu.

Pomocí autokonverzí lze například vynechat definici typu a klíče a místo toho zapsat pouze hodnotu. Zápis se tím výrazně zkrátí, ale zároveň to způsobí značné komplikace z pohledu validace konfiguračního souboru nebo určení přesné polohy v rámci datové struktury. Situace se dále zkomplikuje tím, že je možné použít vnořené autokonverze – tedy provést autokonverzi v rámci jiné autokonverze.

Logika autokonverzí je zhruba následující. Pokud datový typ neodpovídá očekávanému datovému typu dle specifikace formátu, zkusí se provést některá z autokonverzí, pokud je na tomto místě použitelná. V případě, že po autokonverzi již datový typ odpovídá očekávanému, postupuje se standardně dál a datový typ se prochází do hloubky, kde dojde k dalším případným autokonverzím.

Autokonverze jsou hlavní důvodem, proč není možné použít XML Schema a souborový formát XML pro validaci konfiguračních souborů. Kvůli autokonverzím by nebylo možné pouze triviálně použít nástroj pro validaci XML schématu k validaci konfiguračního souboru.

Z pohledu neznalého uživatele se jedná o poměrně matoucí záležitost, protože datová struktura ve skutečnosti obsahuje něco jiného, než je napsáno v konfiguračním souboru. Z praktického hlediska jsou ovšem autokonverze pro zkušené uživatele Flow123d přínosem a jsou zvyklí je používat. S přechodem na nový formát konfiguračního souboru se funkcionality autokonverzí zachovává.

Aplikace ModelEditor tedy musí podporovat používání autokonverzí a je nutné je zohlednit při validaci konfiguračních souborů a určování pozice v rámci datového stromu, která je dále použita pro funkce kontextové dokumentace nebo automatického doplňování textu.

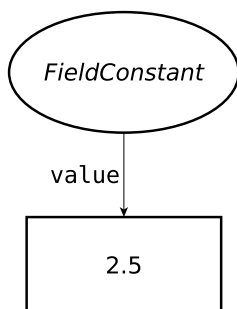
Používají se tři základní typy autokonverzí, které jsou dále popsány. Kromě dvou doposud používaných (autokonverze na pole a autokonverze na záznam) nově přibyla i nová autokonverze nazývaná transpozice, která je zobecněním transpozice

na záznam.

2.3.1 Autokonverze na pole

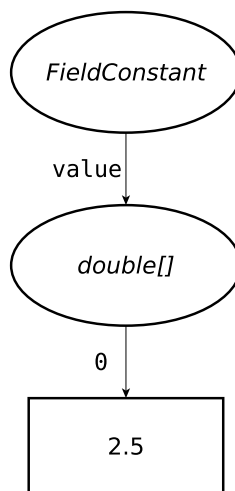
Zapsaná datová struktura

`value: 2.5`



Skutečná datová struktura

`value: [2.5]`



Obrázek 5: Autokonverze na jednorozměrné pole

Autokonverze na pole je konverze, která se použije, pokud se dle specifikace formátu na dané pozici v datové struktuře očekává pole (typ *Array*) a místo něj je nalezen libovolný jiný datový typ – ať už se jedná o primitivní datový typ nebo o záznam.

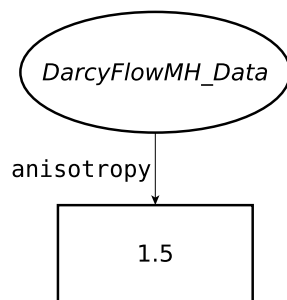
Obrázek 5 znázorňuje autokonverzi hodnoty na jednorozměrné pole. V klíči `value` v záznamu `FieldConstant` se očekává jednorozměrné pole, ale místo něj se na dané pozici vyskytla hodnota `2,5`. Interní datová struktura tedy obsahuje jednorozměrné pole o jednom prvku, kterým je právě tato hodnota.

Autokonverze na pole funguje obdobně i pro vícerozměrná pole. Příklad této autokonverze je uveden na obrázku 6. Klíč `anisotropy` v záznamu `DarcyFlowMH_Data` má být dvourozměrné pole. Místo toho se v datové struktuře vyskytla hodnota. Ta se zkonvertuje na dvourozměrné pole, jehož jediným prvek je právě tato hodnota.

Autokonverze na vícerozměrné pole proběhne i v případě, pokud je v datové struktuře pole o menší dimenzi, než se očekává. Pokud takový případ nastane, tak se zadané pole zkonvertuje na pole vyšší dimenze obdobně jako to bylo popsáno u konverzí hodnot na pole.

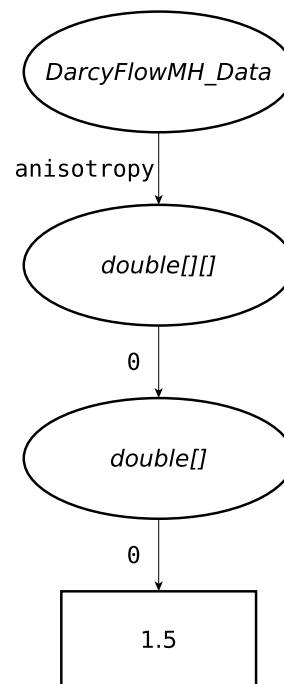
Zapsaná datová struktura

anisotropy: 1.5



Skutečná datová struktura

anisotropy: [[1.5]]



Obrázek 6: Autokonverze na vícerozměrné pole

2.3.2 Autokonverze na záznam

Autokonverze na záznam se provádí v případě, že se v datové struktuře na dané pozici očekává záznam¹ a místo něj se v datové struktuře nachází pole či primitivní datový typ. Oproti autokonverzi na pole, která proběhne vždy, musí být autokonverze na záznam explicitně povolena ve specifikaci formátu pro daný záznam.

Záznam musí mít ve specifikaci formátu uvedený parametr `reducible_to_key`², který udává, do kterého klíče se má nalezená datová struktura vložit. Pokud tento parametr není uveden, tak záznam autokonverzi nepodporuje a nelze ji provést.

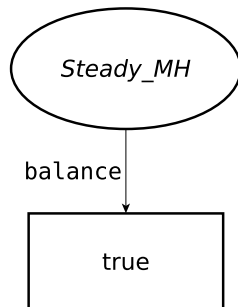
Příklad autokonverze na záznam je znázorněn na obrázku 7. Záznam `Steady_MH` obsahuje klíč `balance`. V zapsané datové struktuře je pro tento klíč uvedena hodnota `true`, tedy datový typ `Boolean`. Podle specifikace formátu se zde však očekává záznam typu `Balance`. Jelikož má záznam `Balance` uvedený klíč `reducible_to_key`, který je nastaven na hodnotu `balance_on`, tak dojde k autokonverzi na záznam. Ve skutečné

¹typ `Record` nebo `Abstract`, viz dále

²pokud je uveden `reducible_to_key`, obsahuje vždy jeden z klíčů, který je v rámci daného záznamu definován

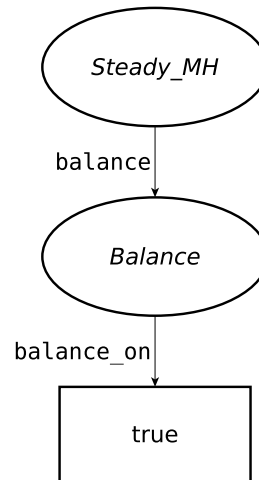
Zapsaná datová struktura

```
balance: true
```



Skutečná datová struktura

```
balance:  
  balance_on: true
```



Obrázek 7: Autokonverze na záznam

datové struktury tedy v klíči `balance` je záznam `Balance`, jehož klíč `balance_on` je nastaven na původně uvedenou hodnotu `true`.

U záznamů, které podporují tuto autokonverzi, jsou typicky nadefinované výchozí hodnoty klíčů. Uživatel chce však nejčastěji měnit pouze jeden z nich a právě tento klíč je ve specifikaci formátu uveden jako `reducible_to_key`. Přínos této autokonverze spočívá v tom, že uživatel ve většině případů nemusí psát navíc název klíče.

Existuje speciální případ této autokonverze, kdy se podle specifikace formátu očekává v datové struktuře abstraktní záznam. Abstraktní záznamy samy o sobě nepodporují autokonverzi na záznam. Pokud ovšem mají definovaný klíč `default_descendant`, který udává výchozí typ záznamu, je možné provést autokonverzi, pokud ji daný záznam podporuje. Tento případ je dále rozebrán v kapitole ??.

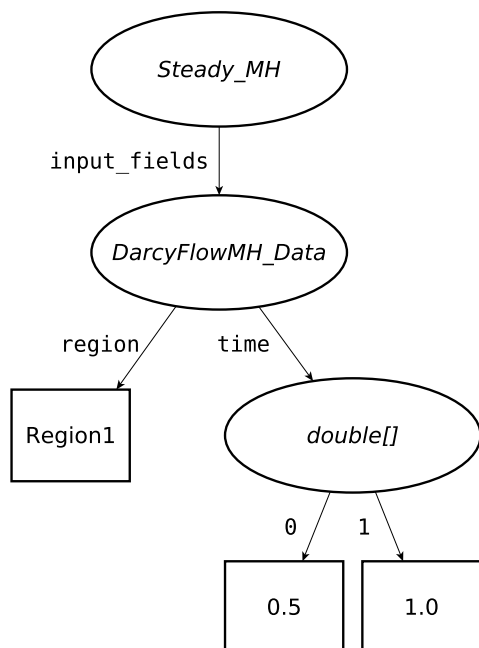
2.3.3 Transpozice

Transpozice je nově přidaná autokonverze, která umožňuje definovat více záznamů naráz pomocí speciálního zápisu pro jeden záznam. Přínos této konverze je především při definování několika záznamů, které obsahují více klíčů, přičemž některé z nich zůstávají totožné, zatímco jiné se mění.

Transpozice je speciálním případem autokonverze na pole. Provádí se v případě, kdy se v datové struktuře očekává pole záznamů, ale místo něj je nalezen pouze

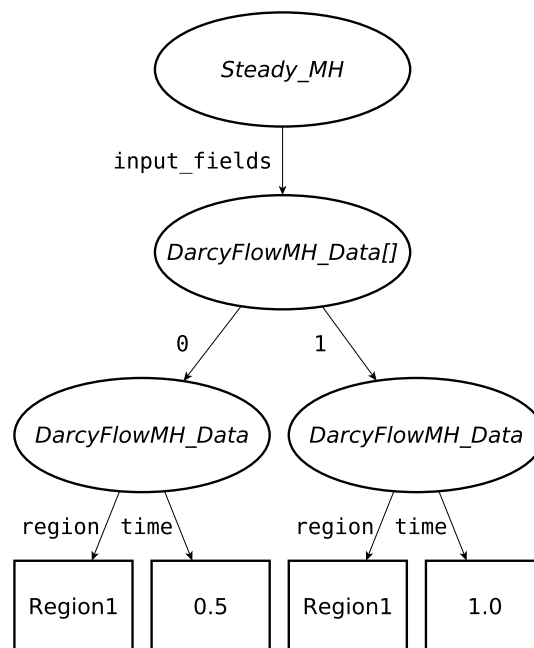
Zapsaná datová struktura

```
input_fields:
  region: Region1
  time:
    - 0.5
    - 1.0
```



Skutečná datová struktura

```
input_fields:
  - region: Region1
    time: 0.5
  - region: Region1
    time: 1
```



Obrázek 8: Autokonverze – transpozice

jeden záznam. Pokud nastane tato situace, proběhnou další kontroly, zda je možné transpozici provést (viz kapitola ??), a pokud je to možné, tak se zapsaná datová struktura převede následujícím způsobem.

Nejprve se vytvoří pole záznamů, které se očekávalo podle specifikace formátu, Dále se provede expanze polí, kdy se pro každou hodnotu v poli původního zapsaného záznamu vytvoří samostatný záznam, který se uloží do nově vytvořeného pole záznamů. Během této expanze se do nově vytvořených záznamů vkládají konkrétní hodnoty místo původních polí hodnot. Pokud v daném klíči v původním záznamu nebylo pole, ale hodnota či jiný záznam, tak se tato hodnota zkopíruje.

Nejjednodušší případ této konverze je znázorněn na obrázku 8. Zde se pomocí transpozice definuje pole záznamů `input_fields`. Každý z těchto záznamů má uveden klíč `region` a `time`. Zapsaná datová struktura se transponuje tak, že místo pole `time`, které obsahuje hodnoty 0,5 a 1,0 se vytvoří dva záznamy. Každý z těchto záznamů bude mít klíč `time`, přičemž první záznam bude mít hodnotu `time` 0,5, zatímco

druhý záznam bude mít hodnotu time nastavenou na 1,0. Klíč region bude v obou záznamech totožný.

Pokud zapsaný záznam obsahuje více polí, tak jejich expanze probíhá souběžně. První záznam bude tedy obsahovat vždy první prvky z polí, druhý záznam druhé prvky z polí atd. Vhodně použitá transpozice může výrazně zkrátit zápis, viz obrázek ?? . Na obrázku je zároveň znázorněna expanze více polí naráz.

Zapsaná datová struktura	Skutečná datová struktura
<pre>1 input_fields: 2 region: MyRegion 3 bc_type: neumann 4 time: [0.5, 1.0, 1.5] 5 anisotropy: [2.5, 1.5, 1.8]</pre>	<pre>1 input_fields: 2 - region: MyRegion 3 bc_type: neumann 4 time: 0.5 5 anisotropy: 2.5 6 - region: MyRegion 7 bc_type: neumann 8 time: 1.0 9 anisotropy: 1.5 10 - region: MyRegion 11 bc_type: neumann 12 time: 1.5 13 anisotropy: 1.8</pre>

Obrázek 9: Ukázka použití transpozice

3 Návrh

3.1 Autokonverze

3.2 Validace

3.3 Kontextová dokumentace

3.4 Automatické doplňování textu

3.5 Funkce editoru

3.6 GUI

4 Implementace a testování

5 Uživatelská příručka

5.1 Zápis konfiguračních souborů pomocí YAML

5.2 Vytváření a editace konfiguračních souborů

5.3 Validace a odstranění chyb

5.4 Nastavení

Závěr

V rámci této diplomové práce byl vytvořen editor konfiguračních souborů pro Flow123d. Jedná se o samostatně funkční aplikaci, která je ovšem navržena s ohledem na její použití jako součást softwarového balíku GeoMop, který obsahuje další nástroje, které usnadňují práci uživatelům Flow123d.

Editor uživatelům zjednodušuje vytváření a upravování konfiguračních souborů. Umožňuje ověřit správnost zadané konfigurace pro zvolenou verzi Flow123d a případně uživatele upozornit na detekované chyby. Tato funkce uživateli přináší časovou úsporu a uživatelsky příjemnější rozhraní při odhalování chyb.

Editor dále uživatelům poskytuje kontextovou dokumentaci a našeptávač. Obě tyto funkce přizpůsobují svůj obsah na základě pozice kurzoru v textu, tedy oblasti, kterou uživatel zrovna upravuje. Pro uživatele to představuje značné zjednodušení, jelikož může využít tyto funkce místo prohledávání rozsáhlé dokumentace.

V neposlední řadě editor obsahuje komponentu pro grafické znázornění datové struktury, která poskytuje alternativní pohled na zadaná data, a umožňuje rychlejší orientaci v rozsáhlých konfiguračních souborech. Kromě těchto stěžejních funkcí editor poskytuje i běžné nástroje pro manipulaci s textem, jako jsou například operace se schránkou, možnost vrácení provedených změn, vyhledávání a nahrazení nebo změna úrovně odsazení.

Aplikace je multiplatformní a podporuje systémy Windows (XP nebo novější) a Linux. S ohledem na požadavek multiplatformní aplikace byl pro vývoj použit jazyk Python 3 a grafická knihovna PyQt 5. K aplikaci byly vytvořeny instalační balíčky pro Windows a Debian.

V rámci budoucího vývoje jsou plánovány další dodatečné funkce. Jedná se např. o zlepšení zvýraznění syntaxe, které se by se mohlo přizpůsobit přímo formátu Flow123d. Další možné vylepšení spočívá v rozšíření funkcionality komponenty pro vizualizaci datové struktury. Ta by mohla v budoucnu podporovat kromě zobrazení i editaci dat nebo vylepšené zobrazení speciálních datových typů.

Literatura

- [1] BŘEZINA, Jan et al. *Flow123d version 1.8.2: Documentation of file formats and brief user manual*. [online]. Liberec, 2015 [cit. 2016-02-24]. Dostupné z: http://flow.nti.tul.cz/packages/1.8.2_release/flow123d_1.8.2_doc.pdf