

Introduire une nouvelle structure de données

Résumé :

Ce document décrit la méthode pour introduire une nouvelle structure de données dans *Code_Aster* , en particulier la rédaction au format « python » du catalogue de la structure de données.

Table des Matières

| | |
|--|---|
| 1 Introduction..... | 3 |
| 2 Les SD locales..... | 3 |
| 3 Les SD globales..... | 3 |
| 3.1 SD purement en Python..... | 4 |
| 3.2 SD avec espace Fortran..... | 4 |
| 4 Classes de description des SD..... | 4 |
| 5 Utilisation des classes Python pour la vérification..... | 6 |
| 5.1 Nommage..... | 6 |
| 5.2 Objets facultatifs..... | 6 |
| 5.3 Méthode d'existence « exists »..... | 7 |
| 5.4 Méthodes de vérification « check_ »..... | 7 |
| 5.5 Accès au contenu des objets JEVEUX « get() »..... | 8 |
| 5.6 Héritage et typage..... | 8 |
| 5.7 Utilitaires..... | 9 |

1 Introduction

Il y a deux grands type de structures de données (SD) dans *Code_Aster* :

- Les SD locales aux commandes. Ces SD ne sortent pas des opérateurs et l'utilisateur n'y a pas accès. Elles sont uniquement présentes dans l'espace Fortran.
- Les SD globales, aussi appelées « concepts » dans la documentation. Ces SD servent à communiquer les informations entre les opérateurs et entre les exécutions de *Code_Aster*. Elles doivent respecter des règles beaucoup plus strictes, être accompagnées d'outils de vérification de leur intégrité (mode `SDVERI`) et documentées (section D4 de la documentation de développement).

2 Les SD locales

Les SD locales sont sous la seule responsabilité du développeur, qui est maître de ses choix. Cependant, un certain nombre de recommandations sont données dans la documentation D2.05.01 (« Règles concernant la Structuration des Données »). Les SD locales sont nécessairement créées sur la base volatile `JEVEUX`, elles ne sortent pas d'une commande (la base volatile est nettoyée automatiquement par le superviseur d'exécution à la fin de chaque commande).

3 Les SD globales

Toutes les structures de données globales échangées dans *Code_Aster* existent dans l'espace Python. Il existe trois types de SD globales :

- Les SD globales strictement Python : elles n'existent que dans l'espace Python et n'ont pas leur pendant dans l'espace Fortran.
- Les SD globales strictement Fortran : elles existent dans l'espace Python mais sont simplement déclarées comme étant des types. Elles n'ont ni méthode, ni attribut spécifique (c'est-à-dire autres que ceux de la classe `chapeau ASSD`).
- Les SD globales mixtes. Elles existent dans l'espace Python, ont des méthodes et/ou des attributs spécifiques. De plus, elles existent dans l'espace Fortran.

La déclaration des SD globales est faite dans les fichiers `code_aster/Cata/Legacy/DS/co_*.py`.

Ces SD globales qui sont transmises d'une commande à une autre sont baptisées « concepts » : ce sont les objets Python connus du jeu de commandes. Les concepts dérivent tous, directement ou indirectement, de la classe `chapeau ASSD`. L'attribut de classe `cata_sdj` (comme « catalogue de structure de données Jeux ») précise la classe Python qui définit la structure de données Fortran.

Par exemple :

```
cata_sdj = 'SD.sd_fonction.sd_fonction_aster'
```

qui indique que la structure de données Fortran des fonctions est définie par la classe `sd_fonction_aster` du module `sd_fonction.py` dans la bibliothèque SD.

Par la suite, on s'intéresse aux objets `JEVEUX` des SD et à leur vérification.

Le mécanisme de vérification des SD globales est activé dans la plupart des cas-tests, sauf lorsque cette vérification est trop coûteuse ou bien échoue. L'activation se fait de deux manières :

- Globalement, sur tout le fichier de commande, via le mot-clef `SDVERI='OUI'` dans la commande `DEBUT`

- Localement, entre chaque commande, via le mot-clef `SDVERI='OUI'` dans la commande `DEBUG`

La vérification est du ressort du développeur de la structure de données globales. Comme on utilise une classe Python, les vérifications peuvent être aussi poussées que nécessaires (nom et type des objets `JEVEUX`, cohérence des dimensions, `SD` spécialisées suivant les opérateurs, etc.).

3.1 SD purement en Python

Il en existe très peu. Il est recommandé de déclarer ce genre de classes, dans le fichier de commandes (ou dans un module Python importé dans le fichier de commandes). Il existe actuellement quatre classes de ce type. Voici leur déclaration dans `DataStructure.py` :

```
class no (GEOM): pass
class grno(GEOM): pass
class ma (GEOM): pass
class grma(GEOM): pass
```

Ces classes dérivent toutes de la classe mère `GEOM` décrite dans le fichier `N_GEOM` de la bibliothèque `bibpyt/Noyau`. Elles ne servent qu'à définir un type spécifique pour les entités géométriques pour la gestion des mots-clefs `GROUP_MA`/`GROUP_NO` dans le décodeur syntaxique du catalogue des commandes.

3.2 SD avec espace Fortran

Toutes ces classes sont importées dans l'entête du catalogue (`code_aster/Cata/DataStructure.py`). Exemples :

```
class cabl_precont(ASDD):
    cata_sdj = "SD.sd_cabl_precont.sd_cabl_precont"
```

`cabl_precont` est une classe purement Fortran, aucune méthode spécifique n'est définie.
`cham_elem` est une classe contenant, par exemple, une méthode `EXTR_COMP` qui lui est propre.

Les classes peuvent aussi hériter d'autres classes. Par exemple, la classe `evol_noli` hérite de la classe `evol_sdaster`, qui hérite elle-même de la classe `resultat_sdaster`.

Comme dit précédemment, l'attribut `cata_sdj` déclare la classe utilisée pour décrire et vérifier les objets `JEVEUX` de la `SD` fortran associée au concept (mode `SDVERI`). Ces classes sont toutes regroupées dans le répertoire (bibliothèque python) `bibpyt/SD`, sous le nom `sd_****.py`.

4 Classes de description des SD

La classe Python `sd_*` contient donc la description de la `SD` en termes d'objets Fortran, elle dérive de l'objet `AsBase`. La classe `AsBase` contient :

- le nom de la `SD` `nomj`
- un attribut pour classer la `SD` comme étant "optionnelle" ou pas : `optional`
- une méthode pour attribuer le `nomj` : `setname`
- une méthode pour vérifier la `SD` : `check`
- diverses méthodes pour l'impression (surcharge de `repr`)

Par héritage, on définit l'objet `JEVEUX` de base: `class OBJ(AsBase)`. Cette classe contient :

- la description des attributs JEVEUX (voir D6.02.01 Gestion mémoire : JEVEUX) dans des attributs protégés
- un attribut protégé sur l'existence ou pas de l'objet JEVEUX : `__exists`

Comme on le voit, les attributs de la classe `OJB` sont protégés, on y accède via des classes dérivées de `OJB` qui décrivent les objets existants. Il y a trois classes de base :

- `OJBVect` : un objet simple au sens JEVEUX
- `OJBPtnom` : un objet pointeur de noms au sens JEVEUX
- `OJB Collec` : un objet collection au sens JEVEUX

Il existe des "alias" de ces classes, pour des raisons de compatibilité et de lisibilité :

- `AsObject` est un autre nom de la classe `OJB`
- `AsPn` est un autre nom de la classe `OJBPtnom`
- `AsVect` est un autre nom de la classe `OJBVect`
- `AsColl` est un autre nom de la classe `OJB Collec`

La classe `OJBVect` est dérivée en objets encore plus élémentaires, ce qui permet de s'approcher de la syntaxe de la routine Fortran `WKVECT` :

- `AsVI` : l'objet est un vecteur d'entiers `INTEGER*8`
- `AsVR` : l'objet est un vecteur de réels `REAL*8`
- `AsVC` : l'objet est un vecteur de complexes `COMPLEX*16`
- `AsVL` : l'objet est un vecteur de booléens `LOGICAL*8`
- `AsVK8` : l'objet est un vecteur de caractères `CHARACTER*8`
- `AsVK16` : l'objet est un vecteur de caractères `CHARACTER*16`
- `AsVK24` : l'objet est un vecteur de caractères `CHARACTER*24`
- `AsVK32` : l'objet est un vecteur de caractères `CHARACTER*32`
- `AsVK80` : l'objet est un vecteur de caractères `CHARACTER*80`

Remarque : les types utilisés dans *Code_Aster* sont définis dans le fichier `asterf.config.h`

Le constructeur de ces objets peut contenir tous les attributs JEVEUX habituels. Par exemple, pour une collection :

```
TAVA = AsColl(SDNom(debut=19), acces='NU', stockage='CONTIG',  
             modelong='CONSTANT', type='K', ltyp=8, )
```

5 Utilisation des classes Python pour la vérification

5.1 Nommage

En premier lieu, il convient de nommer l'objet `JEVEUX` qui sert de base à la `SD`. On rappelle qu'à chaque objet `JEVEUX` est attribué un nom, qui est une chaîne de caractères de longueur 24 (`CHARACTER*24`). On rappelle également que l'utilisateur nomme ses concepts dans le fichier de commande via une chaîne de caractère de longueur 8 (`CHARACTER*8`). Un des principes de base pour la construction des `SD` globales dans `Code_Aster` est de **toujours** préfixer le nom des données `JEVEUX` relatifs au concept (produit par la commande) par le nom de ce dernier. Par exemple, le maillage contient un vecteur de réels avec les coordonnées des nœuds, il est créé ainsi :

```
COOVAL = MAIL(1:8) // '.COORDO      .VALE '  
CALL WKVECT(COOVAL, 'G V R', 3*NBNO, JCOOR)
```

Ici `MAIL` est le nom du concept donné par l'utilisateur (`MAIL = LIRE_MALLAGE(...)`). Quand on est dans la classe Python qui va être instanciée pour le concept que l'on doit vérifier, la première chose à faire est de déterminer le nom de tous les objets qui appartiendront à la `SD` :

```
class sd_maillage(sd_titre):  
    nomj = SDNom(fin=8)
```

Ainsi `nomj` sera le préfixe de tous les objets `JEVEUX` contenus dans la `SD`. On le construit en prenant les 8 premiers caractères de la `SD` (`fin=8`). Ensuite, il s'agit de vérifier la présence d'objets dans la `SD`. Par exemple, la `sd_maillage` contient obligatoirement un objet `DIME`, qui est un vecteur d'entiers de longueur 6 :

```
class sd_maillage(sd_titre):  
    nomj = SDNom(fin=8)  
    toto = AsVI(SDNom(nomj='.DIME'), lonmax=6,)
```

L'objet `toto` est un vecteur d'entiers (`AsVI`) dont l'attribut `LONMAX` vaut 6. On aurait pu aussi écrire de manière plus compacte :

```
class sd_maillage(sd_titre):  
    nomj = SDNom(fin=8)  
    DIME = AsVI(lonmax=6,)
```

Cette dernière construction (`DIME = AsVI(lonmax=6,)`) est une facilité offerte au développeur, basée sur le fait que le nom d'un objet `JEVEUX` est toujours construit de la même manière. De manière implicite, quand on écrit `DIME = AsVI()`, on construit une instance de nom `DIME` de la classe `AsVI` dont l'objet `JEVEUX` a pour nom `nomj(1:8) // '.DIME '`. Cette instanciation doit être privilégiée, afin de faciliter la lecture du catalogue. Il arrive parfois que les attributs d'un objet (comme son type) puissent être variables suivant l'opérateur créant cette `SD`. Dans ce cas, on peut utiliser la fonction membre `Parmi()`. Par exemple :

```
VALE = AsVect(ltyp=Parmi(4,8,16,24), type=Parmi('C', 'I', 'K', 'R'),  
             docu=Parmi('1', '2', '3'),)
```

Le `.VALE` d'un champ aux nœuds peut contenir des valeurs complexes, entières, réelles ou même des chaînes de caractères de longueur 8, 16 ou 24.

5.2 Objets facultatifs

On peut déclarer qu'un objet est facultatif dans la `SD`, par exemple, il peut ne pas y avoir de `GROUP_NO` dans la `SD` `maillage` :

```
class sd_maillage(sd_titre):
    nomj = SDNom(fin=8)
    GROUPENO = Facultatif(AsColl(acces='NO', stockage='DISPERSE',
                                modelong='VARIABLE', type='I',))
```

La fonction `Facultatif` positionne l'attribut optionnal à `True`. Par défaut, tous les objets sont obligatoires. Comme le mécanisme de vérification des SD (`SDVERI`) parcourt l'ensemble des objets `JEVEUX` attachés au concept, il est impératif que tous les objets (obligatoires ou facultatifs) aient été déclarés dans la classe de la SD !

5.3 Méthode d'existence « `exists` »

Il est parfois utile de savoir si une SD existe. Pour cela, on peut surcharger la méthode `exists` qui retourne un booléen :

```
def exists(self):
    # retourne "vrai" si la SD semble exister (et donc qu'elle peut etre
    # vérifiée)
    return self.REFE.exists
```

Pour vérifier l'existence, le plus simple est de contrôler la présence d'un objet obligatoire (ici `REFE`).

Il est important de noter que dans la classe `AsBase` (dont dérivent toutes les autres), `exists` est un **attribut** (prenant une valeur logique `True` ou `False`). Il est construit en faisant appel au plus bas niveau à la routine Fortran `JEEIXIN(OBJET, IRET)`.

Lorsque `exists` est surchargé comme ci-dessus, il devient une **méthode**. Dès lors il est impératif de l'appeler comme telle, c'est-à-dire sans oublier les parenthèses ouvrantes et fermantes « `()` ».

Par exemple la `sd_ligrel` redéfinit la méthode `exists`, on doit donc l'appeler ainsi :

```
if self.contact_resolu():
    # ne pas oublier les () car sd_ligrel.exists est une méthode
    assert self.LIGRE.exists()
```

5.4 Méthodes de vérification « `check_` »

Toutes les classes dérivées de `AsBase` contiennent la méthode `check`. Par défaut, cette fonction se contente de vérifier la conformité de la SD aux attributs de l'objet `JEVEUX`. Par exemple :

```
class sd_maillage(sd_titre):
    nomj = SDNom(fin=8)
    DIME = AsVI(lonmax=6, )
```

On se contente de vérifier que l'objet `JEVEUX nomj(1:8) // '.DIME '` est bien un vecteur d'entiers de longueur 8. Il est néanmoins possible (et souhaitable !) de surcharger une méthode `check` pour faire des vérifications plus poussées. Par exemple, toujours dans la `sd_maillage`, on voudrait vérifier que le pointeur de nom `MAIL(1:8) // '.NOMNOE'`, qui contient le nom des nœuds est bien de longueur égale au nombre de nœuds :

```
class sd_maillage(sd_titre):
    nomj = SDNom(fin=8)
    DIME = AsVI(lonmax=6, )
    NOMNOE = AsPn(ltyp=8)

    def check_NOEUDS(self, checker):
        dime = self.DIME.get()
```

```
nb_no      = dime[0]
assert self.NOMNOE.nomuti == nb_no
```

On a bien déclaré que l'objet `NOMNOE` était un pointeur de noms (contenus dans des chaînes de longueur `ltyp=8`). Puis on déclare une nouvelle méthode `check_NOEUDES`, dont un des arguments est obligatoirement `checker` (cette classe de base pour les vérifications contient en particulier un mécanisme pour contrôler la profondeur des vérifications et éviter de contrôler plusieurs fois les mêmes objets). Toutes les fonctions membres qui commencent par `check_` seront exécutées lors de l'instanciation de la classe `SD` que l'on vérifie. Il convient de noter que les deux obligations :

- la méthode doit obligatoirement commencer par `check_`
- la méthode doit avoir un objet `checker` en argument

La classe `checker` contient un dictionnaire de tous les objets `JEVEUX` déjà vérifiés, il suffit pour cela d'utiliser la donnée membre `names` :

```
if checker.names.has_key(nomsd): return
```

Cela se traduit par : si l'objet `JEVEUX` de nom `nomsd` a déjà été vérifié, alors `return`.

5.5 Accès au contenu des objets JEVEUX « get () »

Avec l'exemple précédent, nous avons introduit un autre mécanisme de contrôle, il s'agit de la ligne `dime = self.DIME.get()`. Il est en effet possible d'accéder au contenu des objets `Fortran` afin d'en récupérer des informations. Pour cela, le superviseur utilise les deux méthodes du module `aster` : `getvectjev` et `getcolljev`.

Il va de soi qu'il est tout à fait possible de définir des attributs et des méthodes spécifiques à la `SD` que l'on décrit. Par exemple, dans la `sd_maillage`, il existe une fonction membre `u_dime` donnant des informations génériques :

```
class sd_maillage(sd_titre):
    nomj      = SDNom(fin=8)
    DIME      = AsVI(lonmax=6, )
    def u_dime(self):
        dime=self.DIME.get()
        nb_no      =dime[0]
        nb_nl      =dime[1]
        nb_ma      =dime[2]
        nb_sm      =dime[3]
        nb_sm_mx   =dime[4]
        dim_coor   =dime[5]
        return nb_no, nb_nl, nb_ma, nb_sm, nb_sm_mx, dim_coor
```

Remarque : si l'objet est un objet simple, `get()` retourne une liste Python, si l'objet est une collection, `get()` retourne un dictionnaire Python.

5.6 Héritage et typage

Toutes les classes décrivant les `SD` peuvent être utilisées dans d'autres classes. Par exemple :

```
class sd_maillage(sd_titre):
    nomj = SDNom(fin=8)
    COORDO = sd_cham_no()
```

On voit dans cet exemple un double mécanisme. Le premier est l'héritage classique : la `sd_maillage` dérive de la `sd_titre` dont la description est :

```
class sd_titre(AsBase):
    TITR = AsVK80(SDNom(debut=19), optional=True)
```

La `sd_titre` ne contient qu'un vecteur de K80 stocké dans l'objet `JEVEUX` dont le nom commence au 19ème caractère. Cet objet est facultatif.

Le second mécanisme utilise le concept de typage des données propres à un langage objet comme Python. En effet, l'objet `nomj(1:8)//'.COORDO'` est une SD de type `cham_no` :

```
class sd_cham_no(sd_titre):
    nomj = SDNom(fin=19)
    VALE = AsVect(ltyp=Parmi(4,8,16,24), type=Parmi('C', 'I', 'K', 'R'),
                 docu=Parmi('', '2', '3'), )
    REFE = AsVK24()
    DESC = AsVI(docu='CHNO', )
```

Attention aux références circulaires (la SD `maillage` contient un objet `cham_no` qui contient un objet `maillage`). C'est au développeur d'y prendre garde (voir par exemple `sd_cham_no`).

5.7 Utilitaires

Un certain nombre d'opérations de vérification sont disponibles dans le module `sd_util` :

- `sdu_assert(obj, checker, bool, comment=)` : vérifie que le booléen (`bool`) est vrai ;
- `sdu_compare(obj, checker, val1, comp, val2,)` : vérifie que la relation de comparaison entre `val1` et `val2` est respectée avec `comp= '=='/ '!='/ '>='/ '>' / '<='/ '<'` ;
- `sdu_tous_differeents(obj, checker, sequence=None,)` : vérifie que les éléments de la séquence sont tous différents ;
- `sdu_tous_non_blancs(obj, checker, sequence=None,)` : vérifie que les éléments (chaines) de la séquence sont tous "non blancs" ;
- `sdu_tous_compris(obj, checker, sequence=None, vmin=None, vmax=None,)` : vérifie que toutes les valeurs de la séquence sont comprises entre `vmin` et `vmax` ;
- `sdu_monotone(seqini)` : vérifie qu'une séquence est triée par ordre croissant (ou décroissant) ;
- `sdu_nom_gd(numgd)` : retourne le nom de la grandeur de numéro (`numgd`) ;
- `sdu_licmp_gd(numgd)` : retourne la liste des cmps de la grandeur de numéro (`numgd`) ;
- `sdu_nb_ec(numgd)` : retourne le nombre d'entiers codés pour décrire les composantes de la grandeur (`numgd`) ;
- `sdu_ensemble(lojb)` : vérifie que les objets `JEVEUX` de `lojb` existent simultanément.