ENVISIoN teknisk dokumentation

Contents

1 Bakgrund

Elektronstrukturberäkningar är ett viktigt verktyg inom teoretisk fysik för att förstå hur materials och molekylers egenskaper kan härledas från kvantmekaniska effekter. För att förstå dessa egenskaper är det viktigt att kunna analysera data från beräkningarna, något som förenklas och görs möjligt genom visualisering. ENVISIoN är en kraftfull mjukvara som är avsedd för visualisering av data från beräkningsprogram som VASP. Mjukvaran bygger på forskningsverktyget Inviwo, utvecklad av Visualiseringscenter i Norrköping. Idén med ENVISIoN är att underlätta visualiseringarna från kvantmekaniska beräkningar. Det ska vara enkelt och smidigt att visualisera önskade och relevanta egenskaper hos olika system bestående av atomer. Mjukvaran tillgängliggör olika reglage och knappar för att på ett interaktivt sätt kunna ändra dess egenskaper. I följande dokument kommer de tekniska aspekterna av hur systemet är implementerat att redovisas.

1.1 Definitioner

- **Inviwo:** Ett forskningsverktyg som utvecklas vid Linköpings universitet och ger användaren möjlighet att styra visualisering med hjälp av programmering i Python3 eller grafiskt. Det tillhandahåller även användargränssnitt för interaktiv visualisering [1].
- **Processor:** Benämningen på ett funktionsblock i Inviwos nätverksredigerare som tar emot indata och producerar utdata. I detta dokument avser en processor alltid en inviwoprocessor om inte annat anges.
- **Canvas:** En processor i Inviwo som ritar upp en bild i ett fönster.
- **Data frame:** En tabell med lagrad data i form av tal. Varje kolumn i tabellen har ett specifikt namn.
- **Transferfunktion:** Begrepp inom volymrendering för den funktion som används för att översätta volymdensiteter till en färg.
- **Transferfunktionspunkt:** Ett värde i transferfunktionen som definerar en färg vid ett speciellt densitetsvärde.
- **Port:** Kanal som processorer använder för att utbyta data av specifika typer.
- **Property:** En inställning i en Inviwoprocessor.
- **Länkar:** Kanaler som processorer använder för att länka samman properties av samma typ så att deras tillstånd synkroniseras.
- **Nätverk:** Ett antal processorer sammankopplade via portar och länkar.
- **Volymdata:** Tredimensionell data som beskriver en volym.
- **API:** Application Programming Interface, en specifikation av hur olika applikationer kan användas och kommunicera med en specifik programvara.

Detta utgörs oftast av ett dynamiskt länkat bibliotek [2].

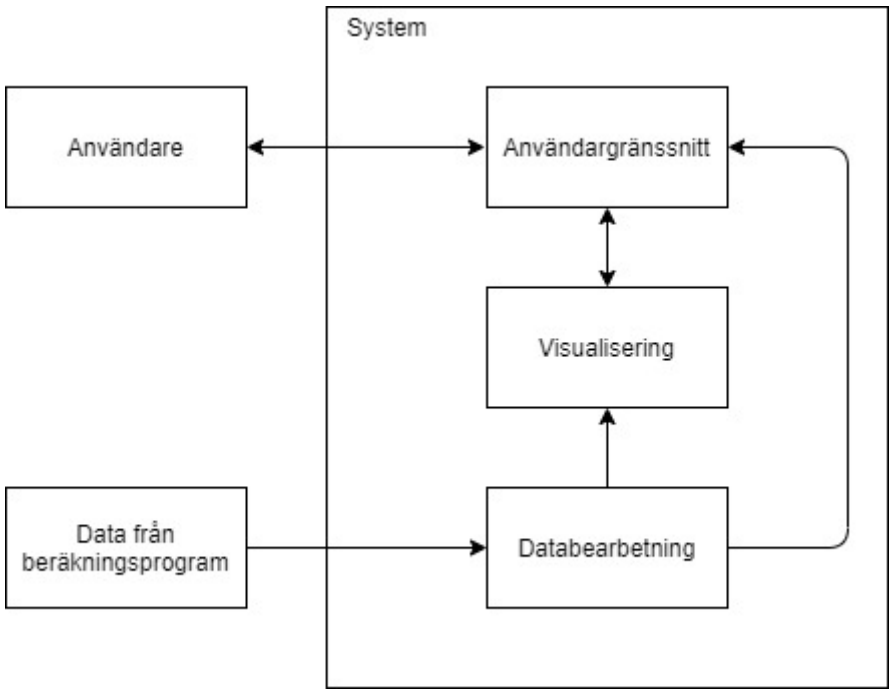
- **BSD2:** En licens för öppen källkod [3].
- **C++:** Ett programmeringsspråk [4]. I Inviwo används C++ för att skriva programkod till processorer.
- **Python3:** Ett programmeringsspråk [11] [12]. I Inviwo används Python3 för att knyta samman processorer.
- **Fermienergi:** Energinivån där antalet tillstånd som har en energi lägre än Fermienergin är lika med antalet elektroner i systemet [6].
- **Git**: Ett decentraliserat versionshanteringssystem [7].
- **GUI:** (Graphical User Interface) Ett grafiskt användargränssnitt [8].
- **PyQT:** En python-modul för GUI-programmering [13].
- **wxPython:** En samling av python-moduler för GUI-programmering [16].
- **PKF** En förkortning på Parkorrelationsfunktionen. Vilket ibland slarvigt kan anges synonymt som RDF, Radial Distribution Function [19].
- **HDF5:** Ett filformat som kan hantera stora mängder data. Alla HDF5-objekt har en rotgrupp som äger alla andra objekt i datastrukturen. Denna grupp innehåller i sin tur all övrig data i form av andra grupper, länkar till andra grupper eller dataset. Dataset innehåller rådata av något slag. Rådata kan i sammanhanget vara bilder, utdata från beräkningar, programdata, etc. [20][21].

  De övriga objektstyperna gås inte igenom i detalj i detta dokument, men finns väl beskrivna i *High Level Introduction to HDF5* [21].
- **VASP:** The Vienna Ab initio simulation package, ett program för modellering på atomnivå, för t.ex. elektronstruktusrberäkningar och kvantmekanisk molekyldynamik [23].
- **Parser:** Ett system som översätter en viss typ av filer till en annan typ av filer. I detta fall sker översättningen från textfiler, genererat i beräkningsprogrammet VASP, till HDF5-filer.
- **Parsning:** Översättning utförd av parsern.
- **Mesh** - Beskriver ett geometriskt objekt som en uppsättning av ändliga element.
- **Array** - Ett dataobjekt som fungerar som behållare för element av samma typ [14].
- **UNIX** - Benämning av en grupp operativsystem som härstammar från UNIX System from Bell Labs [15].
- **Molekyldynamik** - Simuleringsmetod för att estimera atomers och molekylers rörelse. Vid simuleringen ges varje atom/molekyl ett startläge

och en begynnelsehastighet. Därefter beräknas krafterna och accelerationen på atomerna/molekylerna. Slutligen genomförs ett tidssteg så att nya lägen och hastigheter fås och processen kan genomföras igen. [10]

- **Kraftvektor** - En tredimensionell vektor som visualiserar den kraft som påverkar ett objekt.

2 Översikt av systemet



Figur 1: Enkel skiss över systemet

Den produkt som utvecklas är ett verktyg för att visualisera viktiga egenskaper från elektronstrukturberäkningar. Systemet skall bestå av ett användargränssnitt där användaren får välja vilka beräkningsresultat som skall konverteras och visualiseras.

I figur 1 visas en grov systemskiss med de olika delsystem som ingår. Systemet kan grovt delas upp i tre olika delar. Ett system för databearbetning som parsar filer från VASP eller Elk, ett system för att visualisera det som parsas i tidigare nämnt system, och ett GUI-system vilket användaren interagerar med visualiseringen via.

2.1 Ingående delsystem

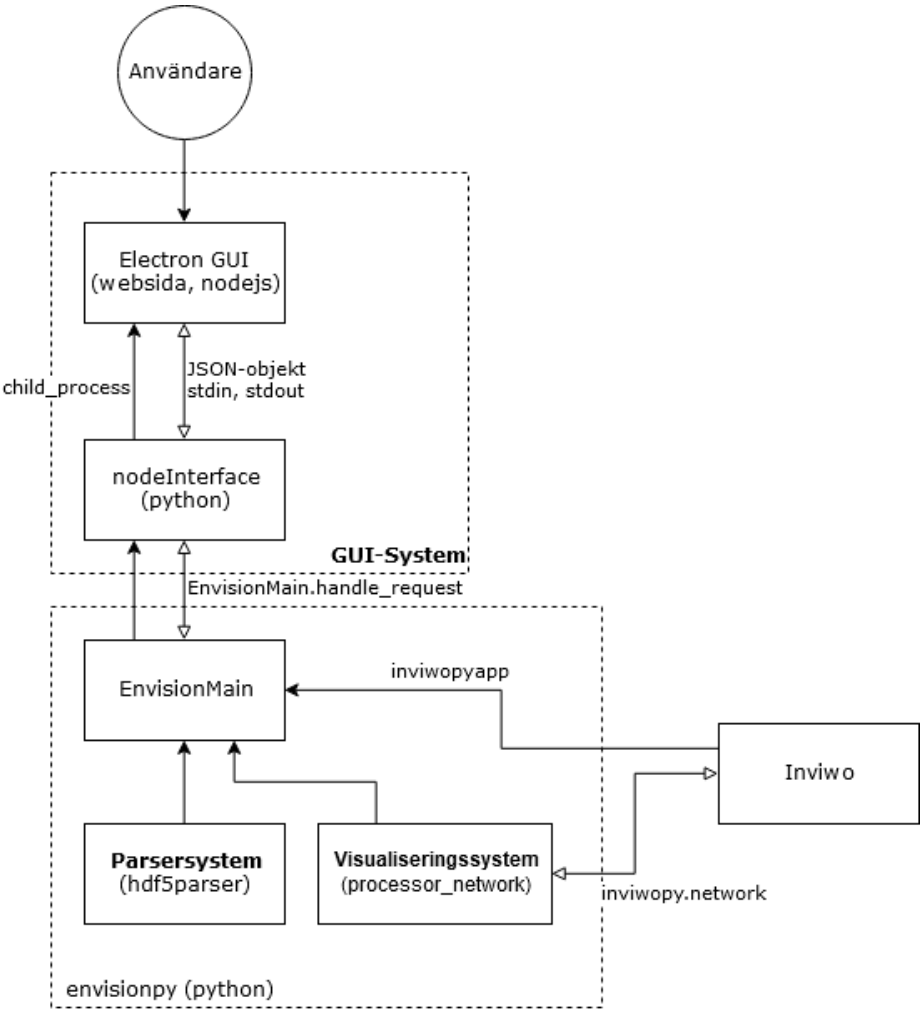
Systemet för elektronvisualisering består i huvudsak av tre delar. Dels består systemet av en databearbetningsdel där parsning av textfiler genererade från beräkningsprogrammet VASP skall översättas till det, med vår mjukvara, kompatibla filformatet HDF5. Det går även att överföra filer från beräkningsprogrammet ELK till HDF5 filer.

När denna filkonvertering är klar så ska de genererade filerna behandlas i ett visualiseringssystem för att skapa önskade visualiseringar. Visualiseringen i Inviwo byggs upp av processorer vilka datan låts flöda igenom för att skapa önskat slutresultat.

Den sista delen av systemet är det som möter användaren, det grafiska användargränssnittet, GUI:t. Genom detta system skall tillgång till att starta och göra ändringar i visualiseringen ges. Målet är att kunna styra hela systemet från GUI:t som en fristående del från de två första delsystemen.

2.2 Ingående delsystem, mer avancerat

Detta kapitel beskriver översiktligt delsystemens relationer och kommunikation med varandra. Det är menat som en sammanfattning av det som kan läsas mer utförligt i kapitlen om de specifika systemen. För att läsa detta rekomenderas en allafall grundläggande kunskap om hur inviwo de olika delsystemen fungerar.



Figur 2: Skiss över delsystemens relationer till varandra.

Parsersystemet och visualiseringssystemet ingår i en pythonmodul kallad *envisionpy*. Se 5 för mer detaljerad beskrivning. Denna modul kan importeras från pythonskript för att få tillgång till ENVISIoNs funktionalitet. Envisonpy har också en klass *EnvisionMain* (se 5.1 för mer ingående). EnvisionMain har som uppgift att vara ett gränssnitt där envisionpy kan styras från ett utomliggande pythonskript. EnvisionMain initierar en instans av Inviwo, genom pythonmodulerna inviwopyapp och inviwopy, som den kör i bakggrunden. Detta gör att Inviwos funktioner kan användas utan att Inviwos gränssnitt visas.

EnvisionMain-klassen har funktioner för att starta parsning genom att köra funktioner från *envisionpy.hdf5parser* (parsning beskrivet i 3), och starta visu-

aliseringar genom att initiera och styra *NetworkHandler*-klasser (se 4, 4.3).

Gränssnittet är inte en del av envisionpy, utan är ett eget relativt isolerat system. Gränssnittet bygger på electron och nodejs och är skrivet med HTML, CSS, och JavaScript. Se 7 för mer detaljerad information.

När systemet startas så laddas först den websida som är gränssnittet som användaren ser. Från JavaScript-koden startas sedan, med hjälp av node-modulen child_process, en pythonprocess som kör skriptet *nodeInterface.py*. Detta skript initerar ett *EnvisionMain*-objekt. Det tar också hand om kommunikation mellan javascript och python-processerna. Javascript- och pythonprocesserna kommunicerar med varandra genom att läsa och skriva JSON-object i pythonprocessens *stdin* och *stdout*.

Gränssnittet kan alltså nu begära att *EnvisionMain* ska utföra olika funktioner genom att skicka JSON-paket till den pythonprocess som startats.

3 Parsersystemet

Parserystemets uppgift är att omvandla information från VASP-filer till data i HDF5-format, som visualiseringssystemet kan använda. Parsersystemet är det delsystem i ENVISIoN som ser till att avläsa korrekt data från VASP-filer och spara denna data i en lämplig HDF5-filstruktur. Följande kapitel beskriver hur parsersystmet har implementerats, samt redogör bakgrundskunskaper om HDF5, VASP och ELK.

Parsersystemet är implementerat i pythonkod och ligger under envisionpy-modulen i envitionpy.hdf5parser.

3.1 Bakgrundskunskap

För förståelse över hur parsersystemet implementerats krävs det lite bakgrundskunskaper om hur HDF5 är uppbyggt och vad VASP är.

3.1.1 VASP

VASP är ett beräkningsprogam som använder sig av Hartree-Fock metoden eller täthetsfunktionalteori (DFT) för att approximera en lösning för Schrödingerekvationen för mångpartikelfallet [18]. VASP-filer kan delas upp i indatafiler och utdatafiler. I indatafiler anges information som användaren kan manipulera, dessa indatafiler styr hur beräkningarna ska utföras. Efter beräkningar genereras sedan ett antal utdatafiler som innehåller kalkylresultaterna. Varje datafil korresponderar till specifik information om systemet. Nedan återfinns några viktiga VASP-filer.

Utdatafiler:

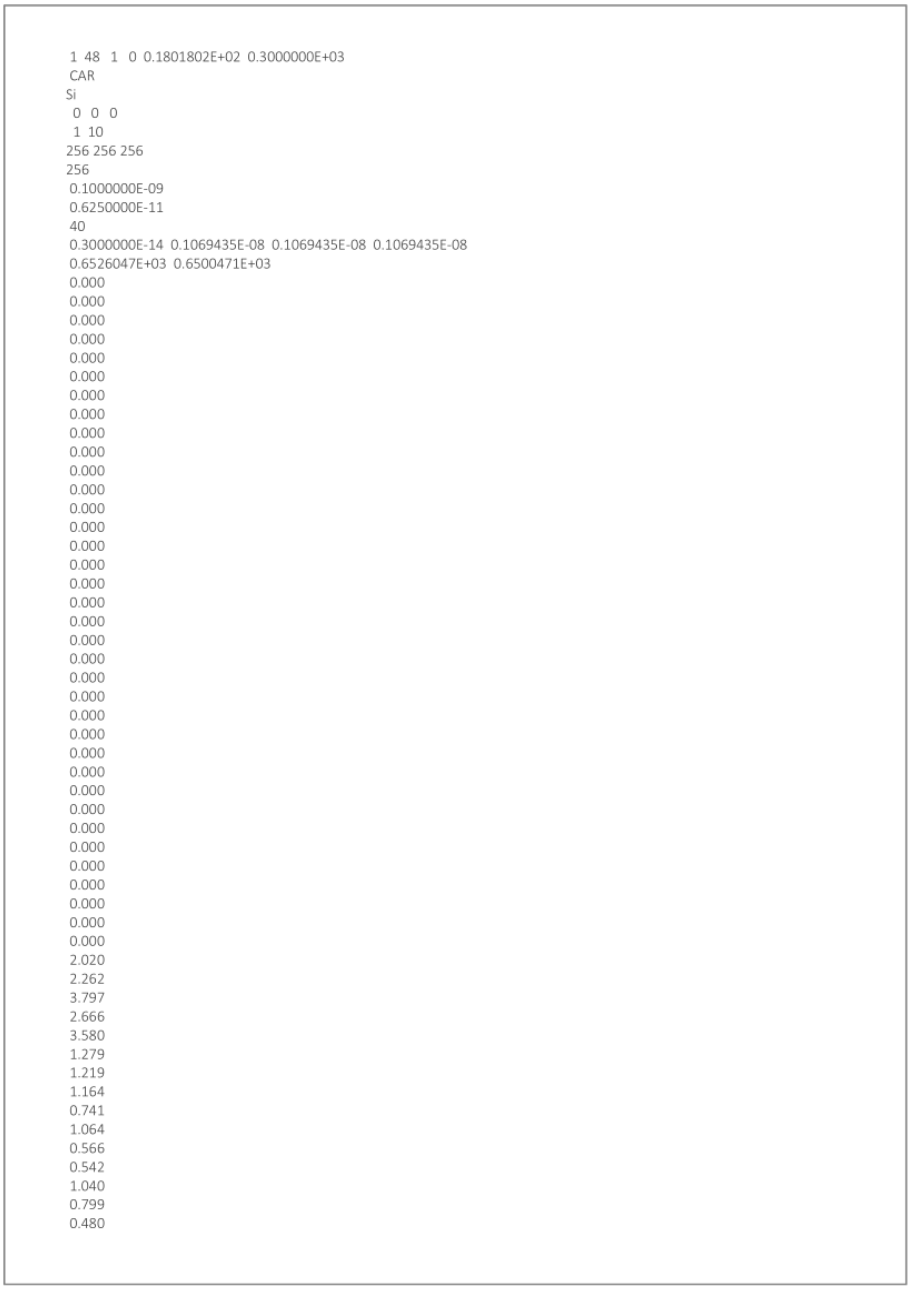
- CHG innehåller data om laddningstäthet.
- DOSCAR innehåller data om tillståndstäthet.
- EIGENVAL innehåller data för alla energier för k-rummet.
- OUTCAR innehåller alla utdata.
- XDATCAR innehåller data om enhetscell, atompositioner för varje beräkningssteg och även atomstyp.
- CONTCAR innehåller data som den återfunnen i POSCAR, men innehåller information om atompositioner uppdateras.
- PCDAT Innehåller data för parkorrelationsfunktionen, PKF.

Indatafiler:

- KPOINTS innehåller information om k-parametrarnas koordinater och vikter, alternativt instruktioner om hur en k-punkts mesh genereras av VASP.
- INCAR innehåller information, i form av flaggor över hur beräkningar ska ske.
- POSCAR innehåller data om enhetcellen och atompositionering.
- POTCAR innehåller data om atomtyper.

Vid exempelvis beräkning av PKF för Si i temperaturen 300K, specificeras information om hur systemet ser ut i filer som POSCAR. Sedan kan information om hur beräkningarna ska genomföras specificeras i exempelvis INCAR eller POTCAR. Detta kan röra sig om hur många iterationer som ska ske och i vilka avstånd PKF ska beräknas. Då kan exempelvis flaggor som NPACO och APACO sättas i INCAR-filen. Där flaggan NPACO specificerar hur många iterationer som sker och APACO bestämmer det längsta avståndet som sista iteration ska ha.

Efter beräkningen genereras flera utdatafiler, däribland PCDAT, som innehåller värdena av PKF. Utdatafilen, PCDAT, kan då ha följande utseende:



Figur 3: En demonstrativ bild över utseendet för PCDAT från VASP. Notera att värdena inte riktigt stämmer.

Bilden ovan beskriver utseendet hos en del av PCDAT-filen för PKF för systemet Si i 300K, med 40 olika tidsteg. Viktigaste är den långa kolumnen av siffror som utgör definitionsmängden till funktionen.

3.1.2 ELK

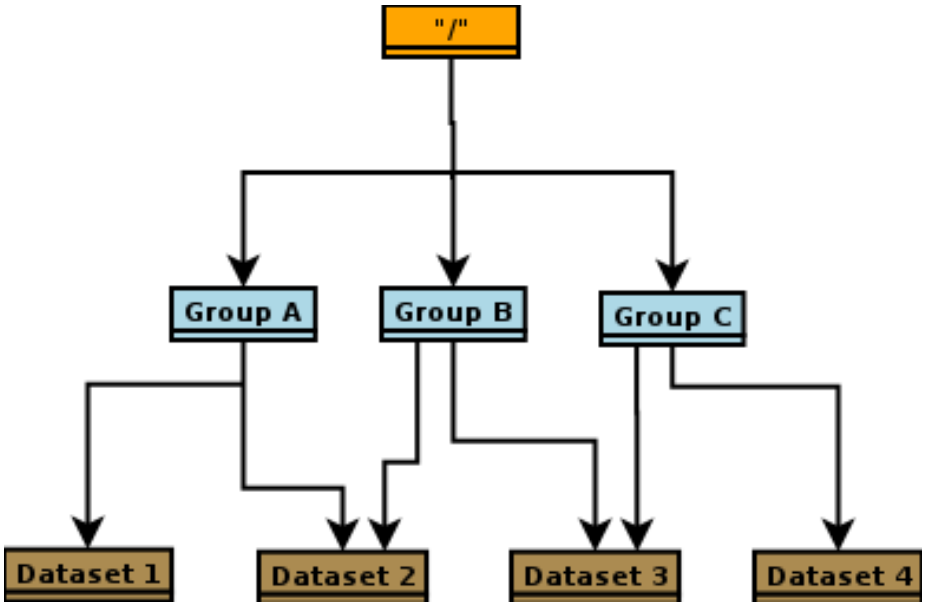
ELK är ett beräkningsprogramm som anvädner sig av full-potential linjär förstärkt-planvåg (FP-LAPW) kod för att lösa Schrödingerekvationen. På samma sätt som för VASP kan man dela upp ELK i indata och utdatafiler. Filerna har samma syfte för ELK som de har för VASP.

Till skillad från VASP så brukar ELK ofta ha en huvudinputfil, *elk.in*. Efter *elk.in* har körts i programmer så genereras det ett stort antal olika filer med ändelsen *.OUT*. På samma sätt som för VASP så finns det en fil som innehåller mest data, *INFO.OUT*.

3.1.3 HDF5-format

Vid hantering av stora mängder data, sådana genererade av beräkningsprogram som VASP eller ELK, är HDF5-formatet mycket användbart. Det gör specificiering av olika dataförhållanden och beroenden enkla, samt tillgängliggör bearbetning av delar av data åt gången.

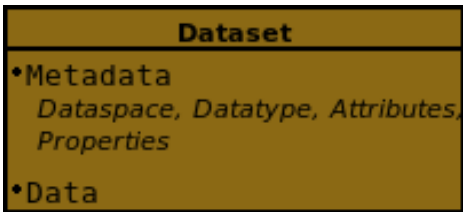
En HDF5-fil är ett objekt som innehåller en rotgrupp, som äger alla andra grupper under den. Denna rotgrupp kan symboliseras av /. Exempelvis /foo/zoo symboliserar *zoo* som är en medlem till *group foo*, som vidare är en medlem till rotgruppen. Ett *dataset* kan pekas av flera *groups* [21].



Figur 4: Schematisk bild över HDF5 struktur

Mer ingående består *dataset*-objektet av metadata och rådata. Metadata beskriver rådatan, till den ingår *dataspace*, *datatype*, *properties* och *attributes*. Alla dessa är HDF5-objekt som beskriver olika saker.

datatype beskriver vad för datatyp varje individuell dataelement i ett dataset har. Exempelvis kan detta vara ett 32-bitars heltal, eller ett 32-bitars flyttal. I det mer komplexa fallet kan det också vara en sammansättning av flera, vanligt benämnda, datatyper. *Datatype* beskriver då en följd av olika datatyper. Exempelvis en sammansättning som int16, char, int32, 2x3x2 array av 32-bit floats beskriver att varje dataelement i det gällande datasetet har en datatyp som består av 16 bitars heltal, en bokstav, 32-bitars heltal och slutligen en array av flyttal med dimensionen 2x3x2. *dataspace* är en HDF5-objekt som beskriver hur datasetet sparar sin data, den kan exempelvis vara tom. Ett dataset kan även bestå av ett enda tal, eller vara en array. *Properties* är mindre konkret än de två tidigare nämnda egenskaperna och beskriver minneshanteringen av ett dataset. I dess defaultläge exempelvist är dataset sparade kontinuerligt. Slutligen återfinns HDF5-objektet *attributes*, som kan valbart skapas. Typiskt sätt skapas *attributes* som ett sätt för att ytterligare beskriva några egenskaper hos ett dataset. En *attribute* innehåller ett namn och ett värde, och skapas i samband med att ett dataset öppnas [21].



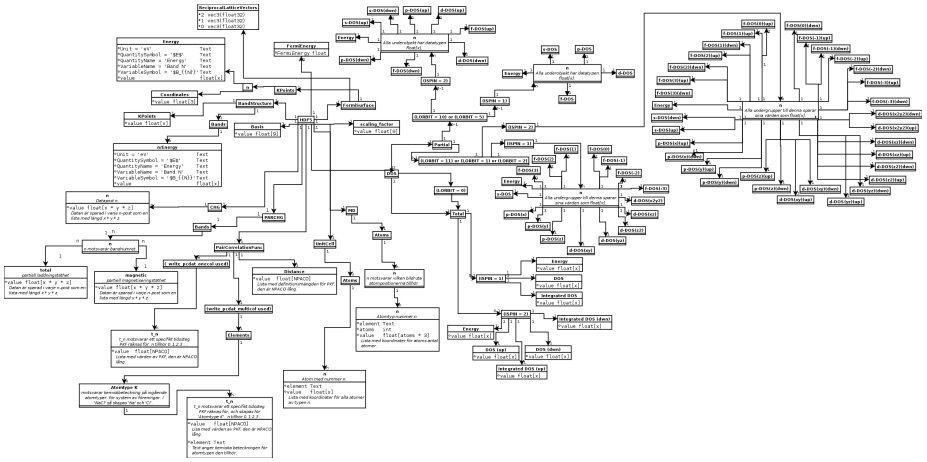
Figur 5: Schematisk bild över *dataset*.

ENVISIoN arbetar med HDF5-formatet. Python ger tillgång till hantering av HDF5-formatet via paketet *h5py*. Detta tillgängliggör exempelvis läsandet av specifika element i massiva arrayer med användandet av syntaxer tillgängliga av paketet *numpy* [9].

Paketet *h5py* ger upphov till HDF5-filer vilket kan ses som behållare för två sorters objekt, *datasets* och *groups*. *datasets* är array-liknande ihopsättning av data, medan *groups* fungerar som behållare för andra *groups* eller *datasets* [9]. Elementen i *datasets* kan vara komplexa objekt. *groups* kan återfinnas i andra *groups*, detta ger därmed möjlighet till konstruktion av grupperingar av olika sammanhängande data. *groups* och medlemmarna till *groups* fungerar som mappar och filer i UNIX. Varje *dataset* karaktäriseras exempelvis av en sökväg [21].

3.2 ENVISIoNs HDF5-fil

ENVISIoNs parsersystem använder sig av pythonmodulen *h5py* för att generera en lämplig HDF5-filstruktur vid parsning. Den HDF5-strukturen som genereras återfinns i nedstående diagram. Notera att figuren visas som helbild i Appendix 9.



Figur 6: En bild över HDF5-filstruktur som används i ENVISIoN.

I figur 6 representeras olika grupper (*groups*) av lådor med pilar (förutom lådorna vars brödtext är angiven i parantes), de sista lådorna i slutet av varje förgrening representerar olika *dataset*. Diagrammet beskriver alltså hur information struktureras i en HDF5-fil som parsersystemet skapat. För att få tillgång till ett visst *dataset* måste en sökväg anges. Denna sökväg är inget mer än en sträng bestående av olika grupper som beskriver hur ett *dataset* nås från rotgruppen, se under rubrik sec:rotgruppstr_. 3.1.3

Varje *dataset* kan bestå av ett antal olika fältnamn. Det fältnamn som alltid förekommer är *value*, vilket beskriver den huvudsakliga datan som datasetet innehåller. Utöver det kan vissa andra fältnamn också förekomma, exempelvis "VariableName" vilket är olika attribut, *attributes*, som beskriver andra egenskaper hos *dataset* som kan vara intressant.

Notera att diagram 6 saknar viss information för DOS och för kraftvektorer. DOS står för Density of States, översatt till tillståndstäthet. På grund av platsbrist har inte attributen skrivits ut för DOS. p-DOS, d-DOS(xy), Energy, grupper under DOS, med mera har attributen

- VariableName är fältets namn.
- VariableSymbol är en symbol som representerar variabeln.
- QuantityName är ett för en människa lättligt namn på fältet.
- QuantitySymbol är symbol som representerar storheten.
- Unit är storhetens fysikaliska enhet.

Kraftvektorer har samma struktur som unitcell har, förutom att *value* anger både start- och slutpunkt för vektorn.

Notera också att *float[x]* avser en lista med längd x, samt att alla grupper som är märkta med n är en metod att ange att det kan finnas flera grupper

på den nivån. Lådor vars rubrik är angivet inom parentes anger ett villkor för att den resterande sökvägen ska kunna skapas. Viktig anmärkning här är därför att dessa villkor inte ingår i HDF5-strukturen, de är inga grupper, och ingår därmed inte med sökvägen till de respektive dataseten. Under *DOS* förekommer exempelvis en sådan låda med brödtexten *(LORBIT=0)*, samt under förgreningen hos *DOSPartial* förekommer en låda med angivelsen *(ISPIN=0)*. Båda *ISPIN* och *LORBIT* är flaggor som kan sättas i INCAR-filen. I detta fall anger lådorna villkoren att *(LORBIT=0)* och *(ISPIN=0)* för att den fortsatta respektive grupperna under ska kunna skapas. Lådan under *PairCorrelationFunc* anger dock ingen sådan flagga. Det den anger är villkoret som har med huruvida *__write_pcdat_onecol* eller *__write_pcdat_multicol* används.

Parsning av PKF ges av olika möjligheter, parsern behandar en av följande fall:

1. System av flera atomtyper, det som beräknas är en genomsnittlig PKF över alla atomtyper.
2. System av flera atomtyper, det som beräknas är en genomsnittlig PKF för varje atomtyp. Ingår det K atomtyper i systemet ska parsern ge upphov till K stycken parkorrelationsfunktioner.
3. System av 1 atomtyp.

För fall 2 och 3 används *__write_pcdat_multicol* medan fall 1 använder *__write_pcdat_onecol*, se under 3.3. Villkoren är därmed enbart ett sätt att ange vad för fall parsern behandlar.

3.3 Skrivning till HDF5-fil

Det som skapar strukturen i HDF5-filen är skrivningsmodulen *h5writer* I ENVISIoN. *h5writer.py* är ett skript som innehåller alla skrivningsfunktioner som ingår i parsersystemet. Funktionernas uppgift är att skapa *datasets* (rådata) i rätt plats i HDF5-fil objektet. Nedan listas alla funktioner som ingår i modulen.

__write_coordinates Denna funktion skriver koordinater för atompositioner där varje atomslag tilldelas ett eget *dataset*. Attribut sätts för respektive grundämnesbeteckning per *dataset*.

Parametrar:

- h5file: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.
- atom_count: Lista med antalet atomer av de olika atomslagen.
- coordinates_list: Lista med koordinater för samtliga atomer.
- Elements: None eller lista med atomslag.

Returnerar:

- None

__write_basis Denna funktion skriver gittervektorerna i ett dataset med namn basis.

Parametrar:

- h5file: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.
- basis: Lista med basvektorerna.

Returnerar:

- None

__write__scaling__factor Denna funktion skriver skalfaktorn för gittret i ett dataset med namn scaling_factor.

Parametrar:

- h5file: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.
- scaling_factor: Skalfaktorn för gittret.

Returnerar:

- None

__write__fermi__energy Denna funktion skriver fermi-energin i ett dataset med namn FermiEnergy.

Parametrar:

- h5file: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.
- fermi_energy: Fermi-energin för den aktuella uträkningen.

Returnerar:

- None

__write__bandstruct Denna funktion skriver ut data för bandstruktur i en grupp med namn Bandstructure. Inom denna grupp tilldelas specifika K-punkter, energier samt bandstrukturer egna dataset. Högsymmetripunkter och deras symboler tilldelas egna dataset. Diverse attribut sätts även för bl.a. specifika energier.

Parametrar:

- h5file: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.
- band_data: Lista med bandstrukturdata.
- kval_list: Lista med K-punkter för specifika bandstrukturdata.

Returnerar:

- None

__write__dos Denna funktion skriver ut DOS-data i en grupp med namn DOS där total och partiell DOS tilldelas grupper med namn Total respektive Partial. Inom gruppen Total tilldelas energin samt specifika DOS egna dataset och inom gruppen Partial tilldelas varje partiell DOS egna grupper där energin samt specifika DOS tilldelas egna dataset.

Parametrar:

- h5file: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.

- total: En lista med strängar av de olika uträkningarna som har utförts av VASP för total DOS.
- partial: En lista med strängar av de olika uträkningarna som har utförts av VASP för partiell DOS.
- total_data: En lista med alla beräkningar för total DOS för varje specifik atom.
- partial_list: En lista med alla beräkningar för partiell DOS för varje specifik atom.
- fermi_energy: Fermi-energin för den aktuella uträkningen.

Returnerar:

- None

__write__volume Denna funktion skriver ut elektrontäthetsdata och elektronlokaliseringsfunktionsdata (ELF) till grupper med namn CHG respektive ELF. Inom dessa grupper tilldelas varje iteration ett dataset.

Parametrar:

- h5file: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.
- i: Skalär som anger numret på iterationen.
- partial: En lista med strängar av de olika uträkningarna som har utförts av VASP för partiell DOS.
- array: Array med parsad data för respektive iteration.
- data_dim: Lista som anger dimensionen av data för respektive iteration.
- hdfgroup: En textsträng med namnet på vad man vill kalla gruppen i HDF5-filen.

Returnerar:

- None

__write__incar Denna funktion skriver ut parsad data från INCAR i ett dataset med namn Incar där varje datatyp tilldelas egna dataset.

Parametrar:

- h5file: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.
- incar_data: Datalexikon med all data från INCAR-filen.

Returnerar:

- None

__write__pcdat__onecol Denna funktion skapar ett HDF5-struktur för ett system med flera atomtyper, där en genomsnittlig PKF beräknas för alla atomtyper. Funktionen skapar en HDF5-struktur som innehåller data från huvudsakligen PCDAT.

Parametrar:

- h5file: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.

- pcdat_data: Tillhör Python-datatypen *dictionary* [5]. Detta argument innehåller alla värden av PKF som parsats.
- APACO_val: Värdet på APACO-flaggan i VASP-filen INCAR eller POTCAR. Defaultvärde är 16 Ångström. Flaggan anger det längsta avståndet sista iteration för beräkning av PKF har.
- NPACO_val: Värdet på NPACO-flaggan i VASP-filen INCAR eller POTCAR. Defaultvärde är 256. Flaggan anger hur många iterationer ska ske för beräkning av PKF.

Returnerar:

- None

__write__pcdat__multicol Denna funktion skapar ett HDF5-struktur för ett system med flera atomtyper, där en genomsnittlig PKF beräknas för varje atomtyp som ingår i systemet. Funktionen anropas också i fallet då systemet enbart består av en atomtyp. Funktionen skapar en HDF5-struktur som innehåller data från huvudsakligen PCDAT.

Parameterar:

- h5file: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.
- pcdat_data: Tillhör Python-datatypen *dictionary* [5]. Detta argument innehåller alla värden av PKF som parsats.
- APACO_val: Värdet på APACO-flaggan i VASP-filen INCAR eller POTCAR. Defaultvärde är 16 Ångström. Flaggan anger det längsta avståndet sista iteration för beräkning av PKF har.
- NPACO_val: Värdet på NPACO-flaggan i VASP-filen INCAR eller POTCAR. Defaultvärde är 256. Flaggan anger hur många iterationer ska ske för beräkning av PKF.

Returnerar:

- None

__write__force Denna funktion skapar ett HDF5-struktur för ett system där det finns krafter som verkar mellan atomerna. Funktionen skriver vektorernas start och slutpunkter till HDF5 där vektorernas startpunkt sammanfaller med atomens position.

Parameterar:

- h5file: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.
- force_list: Innehåller en lista över all vektorinformation för varje atom.
- atom_count: Antalet atomer som en int.

Returnerar:

- None

__write__md Denna funktion skriver ut data för molekyldynamik till en grupp med namn MD. Varje tidssteg placeras i gruppen MD i ett eget dataset.

Parametrar:

- h5file: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng
- atom_count: lista med fördelningen i antal av de olika atomerna
- cordinates_list: lista med kordinaterna för varje atom i tidssteg
- elements: lista över atomtyper
- step: nuvarande tidssteg

3.4 Inläsning av VASP-filer

Innan en funktion kan skriva till HDF5-objektet krävs det att rätt inläsning av innehåll från relevant VASP-fil har skett. Detta är vad de olika läsningsfunktionerna i parsersystemet gör. Typiskt återfinns en pythonmodul för varje egenskap hos ett system som ska parsas. Nedan listas alla sådana moduler.

3.4.1 Bandstrukturparser

Bandstrukturparsern läser in alla energier för k-parametrar från EIGENVAL-filen i användarens VASP-mapp, som skrivs till /Bandstructure i HDF5-filen och dessutom skrivs de inlästa k-parametrarnas koordinater från EIGENVAL-filen in i /BandStructure i HDF5-filen. Högsymmetripunkteroch dess symboler läses av från KPOINTS-filen och Bravais-gittrets typ läses av från OUTCAR-filen i användarens VASP-mapp och dessa punkter och tillhörande symboler skrivs in i egna datasets under /Highcoordinates i HDF5-filen.

Funktionsanrop: envisionpy.hdf5parser.bandstructure(h5file, vasp_dir)

Parameterar:

- h5file: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.
- vasp_dir: Sökväg till VASP-katalog, anges som en sträng.

Returnerar:

- Bool: True om parsning skett felfritt, False annars.

3.4.2 Incarparser

Incarparsern består av en pythonfil med namnet incar som innehåller funktionerna, incar och parse_incar. Dessa funktioner läser in och sparar information från INCAR-filen samt anropar en separat pythonmodul som skriver en HDF5-fil.

Funktionen incar kontrollerar att HDF5-filen redan innehåller INCAR-data och anropar funktionen parse_incar om så inte är fallet. Existerar INCAR-filen i användarens VASP-katalog parsas data av funktionen parse_incar som då sparar ett dataset för varje datatyp och namnger dataseten därefter. Funktionen incar anropar sedan pythonmodulen som skriver HDF5-filen där varje enskilt *dataset* tilldelas en egen grupp.

Funktionsanrop: envisionpy.hdf5parser.incar(h5file, vasp_dir)

Parameterar:

- h5file: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.
- vasp_dir: Sökväg till VASP-katalog, anges som en sträng.

Returnerar:

- Lista med namn på data (*datasets*) som parsas.
- Bool: True om parsning skett felfritt, False annars.

3.4.3 Volymparser

Volymparsern består av en mängd funktioner i en pythonfil som används för parsning av CHG och ELFCAR. Den kan läsa in och spara data på HDF5-format från båda dessa filer genom att anropa en pythonmodul. Detta är för att CHG och ELFCAR har samma struktur och består av ett antal iterationer av volymdata från volymberäkningar. Således innehåller den sista iterationen data som är mest korrekt. Därför skapar volymparsern också en länk till den sista iterationen i HDF5-filen för att data av högst kvalitet lätt ska kunna plockas ut.

Funktionsanrop vid parsning av CHG-data: envisionpy.hdf5parser.charge(h5file, vasp_dir)

Funktionsanrop vid parsning av ELFCAR-data: envisionpy.hdf5parser.elf(h5file, vasp_dir)

Parameterar:

- h5file: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.
- vasp_dir: Sökväg till VASP-katalog.

Returnerar:

- Bool: True om parsning skett felfritt, False annars.

3.4.4 Tillståndstäthetsparser

Tillståndstäthetsparsern består av en mängd funktioner i en pythonfil som används för parsning av DOSCAR. DOSCAR-filen består först av den totala tillståndstätheten och sedan partiell tillståndstäthet för varje atom i kristallen. Beroende på vad som står i INCAR kan dock denna data se väldigt olika ut. Flaggorna ISPIN, RWIGS och LORBIT i INCAR-filen avgör vad som skrivs i DOSCAR-filen. ISPIN-flaggan informerar om spinn har tagits hänsyn till vid beräkningar, RWIGS-flaggan specificerar Wigner-Seitz-radien för varje atomtyp och LORBIT-flaggan (kombinerat med RWIGS) avgör om PROCAR- eller PROOUT-filer (som DOSCAR-filen refererar till) skrivs. Parsern läser därför från data givet av incarparsern i HDF5-filen för att se hur DOSCAR ska parsas. Parsern delar upp data i två grupper i HDF5-filen, total och partiell. I gruppen partiell finns det en grupp för varje atom. Ett dataset för varje undersökt fenomen skrivs sedan ut för varje atom under partiell, och för total tillståndstäthet under total.

Funktionsanrop: envisionpy.hdf5parser.dos(h5file, vasp_dir)

Parameterar:

- h5file: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.
- vasp_dir: Sökväg till VASP-katalog.

Returnerar:

- Bool: True om parsning skett felfritt, False annars.

3.4.5 Enhetscellsparser

Enhetscellparsern läser in gittervektorer, som multipliceras med skalfaktorn och skrivs till /basis i HDF5-filen. Atompositioner läses från POSCAR och om dessa är angivna med kartesiska koordinater räknas de om till koordinater med gittervektorerna som bas. Koordinaterna skrivs till HDF5-filen uppdelade efter atomslag och attribut sätts med respektive grundämnesbeteckning. Om dessa inte ges med parametern elements letar parsern i första hand i POTCAR och i andra hand i POSCAR.

Funktionsanrop: envisionpy.hdf5parser.unitcell(h5file, vasp_dir, elements = None)

Parameterar:

- h5file: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.
- vasp_dir: Sökväg till VASP-katalog.
- elements = None: None eller lista med atomslag.

Returnerar:

- Bool: True om parsning skett felfritt, False annars.

3.4.6 Parkorrelationsfunktionsparser

Parkorrelationsfunktionsparser använder sig av ett antal olika funktioner, vilka alla anropas med funktionen *paircorrelation(h5file, vasp_dir)*. Parsningen görs genom inläsning av korrekt data från PCDAT-filen, samt inläsning av flaggor som NPACO och APACO. Parsen letar efter dessa flaggor i INCAR eller POTCAR för att se om de är satta. I fallet de inte är det antas deras defaultvärden.

Funktionsanrop: envisionpy.hdf5parser.paircorrelation(h5file, vasp_dir)

Parameterar:

- h5file: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.
- vasp_dir: Sökväg till VASP-katalog.

Returnerar:

- Bool: True om parsning skett felfritt. Ett undantag kan kastas om PCDAT-fil inte hittas.

3.4.7 Fermi-yta parser

Reads OUTCAR and EIGNVAL to create datastructure for visualization of fermi surfaces

Parameters: hdf_file_path: str Path where hdf file will be written to

vasp_dir_path: str Path of direcotry containing OUTCAR and EIGENVAL files

Returns: True if succesfull else False

3.4.8 Kraftparser

Läser in data om vilka krafter som verkar på atomerna från OUTCAR och atomernas positioner från POSCAR för att ta fram relevant information om kraftvektorerna som tillhör de enskilda atomerna.

Funktionsanrop: envisionpy.hdf5parser.force_parser(h5file, vasp_dir, inviwo = False)

Parameterar:

- h5file: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.
- vasp_dir: Sökväg till VASP-katalog.
- inviwo = False: Ska sättas till True om körning sker från Inviwo

Returnerar:

- Bool: True om parsning skett felfritt, False annars.

3.4.9 Molekyldynamikparser

Molekyldynamikparser består av en mängd funktioner i en pythonfil som används för parsning av XDATCAR om molekyldynamik är möjligt. För att avgöra om molekyldynamik är möjligt granskas IBRION flaggan i OUTCAR filen. Om IBRION flag är satt till 0 är molekyldynamik ok.

Funktionsanrop: envisionpy.hdf5parser.mol_dynamic_parser((hdf5_file_path, vasp_dir_path, element = None)

Parametrar:

- Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.
- Sökväg till VASP-katalog.
- elements = None: None eller lista med atomslag.

3.4.10 parse_all

parse_all är en funktion för parsning av allt som finns i katalogen som ges som inparameter. Funktionen kallar på alla systemets parsers och skriver ut meddelande om vad som parsas och om parsningen gjordes eller ej.

Funktionsanrop: envision.parse_all(h5_path, dir)

Parameterar:

- h5_path: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.
- vasp_dir: Sökväg till katalog med utdata-filer från beräkningsprogram.

Returnerar:

- Bool: True om parsning skett felfritt, False annars.

3.5 Inläsning av Elk-filer

För att en funktion ska kunna skrivas till ett HDF5-objektet krävs det att rätt inläsning av innehåll från relevanta ELK-filer har skett. Detta sker via läsningsfunktionerna i parsersystemet. Typiskt återfinns en pythonmodul för varje egenskap som ska parsas. Nedan listas alla sådana moduler implementerade för ELK.

3.5.1 Enhetscellparser

Enhetscellparsern läser in gittervektorer, som multipliceras med skalfaktorn och skrivs till /basis i HDF5-filen. Atompositioner läses från INFO.OUT. Koordinaterna skrivs till HDF5-filen uppdelade efter atomslag och attribut sätts med respektive grundämnesbeteckning. Typ av atomslag och hur många av varje atomslag tas fram ur filen EQATOMS.OUT.

Funktionsanrop: envisionpy.hdf5parser.unitcell_parser(h5file, ELK_dir)

Parameterar:

- h5file: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.
- ELK_dir: Sökväg till ELK-katalog.

3.5.2 Kraftparser

Läser in data om vilka krafter som verkar på atomerna samt atomernas positioner från ELK filen INFO:OUT för att ta fram relevant information om kraftvektorerna som tillhör de enskilda atomerna. Typ av atomslag och hur många av varje atomslag tas fram ur filen EQATOMS.OUT.

Funktionsanrop: envisionpy.hdf5parser.parse_force_elk(h5file, elk_dir, inviwo = False, elements = None)

Parameterar:

- h5file: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.
- elk_dir: Sökväg till ELK-katalog.
- inviwo = False: Ska sättas till True om körning sker från Inviwo
- elements = None: None eller lista med atomslag.

Returnerar:

- Bool: True om parsning skett felfritt.

3.5.3 ELF-parser

Funktionsanrop: envisionpy.hdf5parser.parse_elf(h5file, ELK_dir)

Parameterar:

- h5file: Sökväg till HDF5-fil, anges som en sträng.
- ELK_dir: Sökväg till ELK-katalog.

Returnerar:

- Bool: True om parsning skett felfritt.

3.6 Testning

För att varje års projekt ska kunna kontrollera att alla parsersystem fungerar är det viktigt med testfiler. Detta kan också ge inblick i hur parsern är tänkt att fungera. En generell testmapp i ENVISIONs filstruktur för parsersystemet finns vid namn /unit_testing. Mappen innehåller tester för parsning av bandstrukturer, tillståndstätheter, elektrontäthet, enhetscell, fermi-ytor, kraftvektorer och molekyldynamik. Testerna är skapade att testa om HDF5-filer genereras ur parsersystemen och om de genererade HDF5-filerna har korrekt datastruktur.

Test för exempelvis parsersystemet för bandstrukturer har implementerats med en testfil med namnet *test_bandstructure_parsing.py* samt en mapp vid namn *resources*. I *resources* finns det olika mappar med VASP-filer för olika kristaller, som därmed testar att parsern fungerar korrekt för olika filer. Det är tanken att framtida utvecklare använder sig av denna mapp för att lägga in tester för nyskapade funktioner för parsning av någon ny egenskap.

4 Visualiseringssystemet

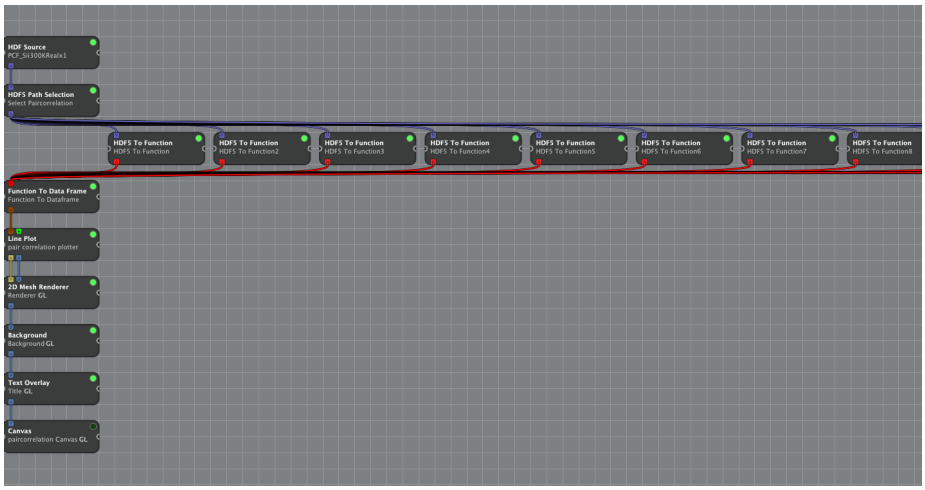
Visualiseringssystemet är det delsystem som använder den HDF5-fil som parsersystemet genererar för att visualisera beräkningsresultaten. Detta görs genom olika nätverk, bestående av processorer. Nedstående kapitel redovisar de olika befintliga nätverk ENVISIoN består av.

4.1 Nätverk

För att visualiseringssytemet ska vara kompatibelt med den HDF5-strukturen som parsersystemet genererar kommer utseendet hos nätverken att se olika ut för varje visualisering. Nedan återfinns olika nätverk som olika skript genererar för olika visualiseringar.

4.1.1 Parkorrelationsfunktionen

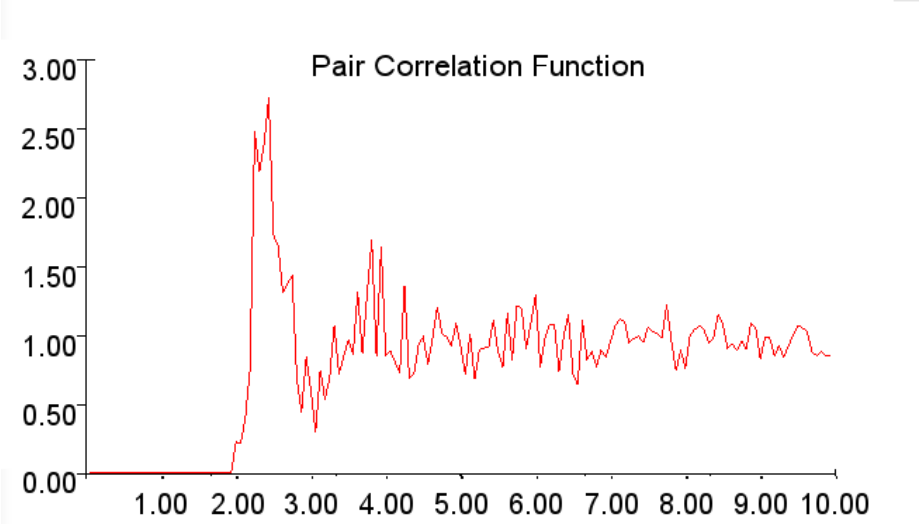
Ett nytt skript med processorer för visualisering av parkorrelationsfunktionen har utvecklats. Det nätverk som skapas av skriptet visas i figur 8.



Figur 7: Nätverk för parkorrelationsfunktion.

Nätverket startar med att öppna en HDF5-fil. Efter det kontrollerats om gruppen *PairCorrelationFunc* finns i den parsade filen med hjälp av *HDF5PathSelection*-processorn. Därefter läggs det till en *HDF5ToFunction*-processor som extraherar den parsade datan och gör om det till en funktion. Nästkommande processorn, dvs *LinePlot*, används för att rita upp den data som tas emot från föregående processron. En mesh byggs upp med hjälp av *MeshRenderer*-processorn, *Background*-processorn bygger upp bakgrunden och *TextOverlay*-processorn används för att skriva ut text till canvasen. Figur 8 och 7 demonstrerar ett exempel på ett nätverk och respektive 2D-graf som visualiserar paircorrelation funktionen

för Si med 40 steg i temperaturen 300K. Observera att alla *HDF5ToFunction*-processorer inte syns i figur 8. Den 2D-grafen som genereras av nätverken visas i figur 8.

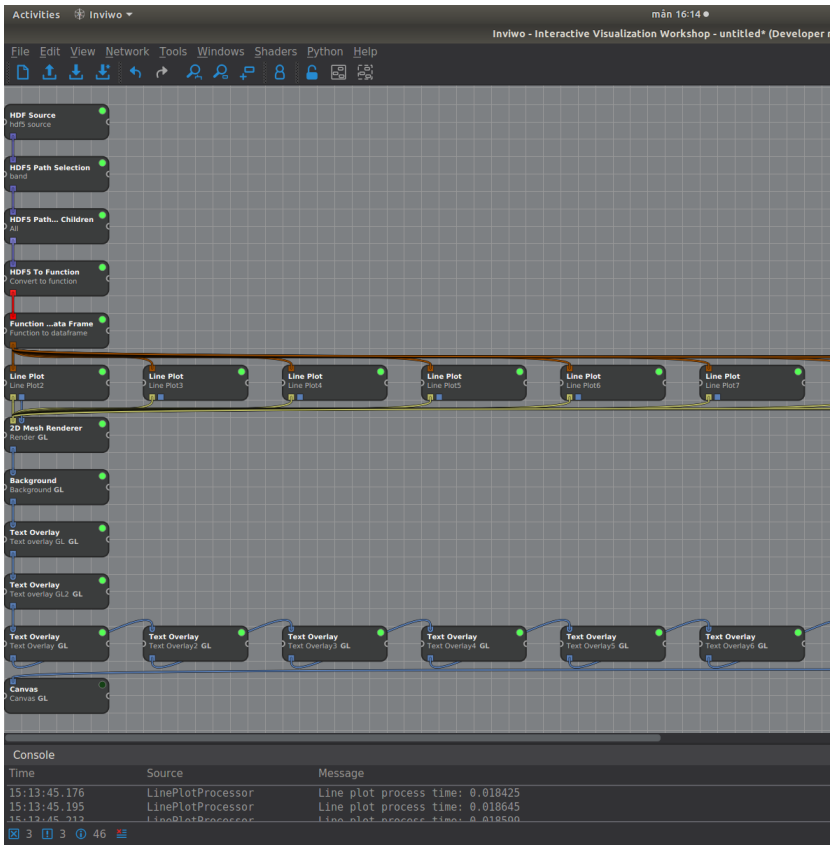


Figur 8: 2D-graf från parkorrelationsfunktion.

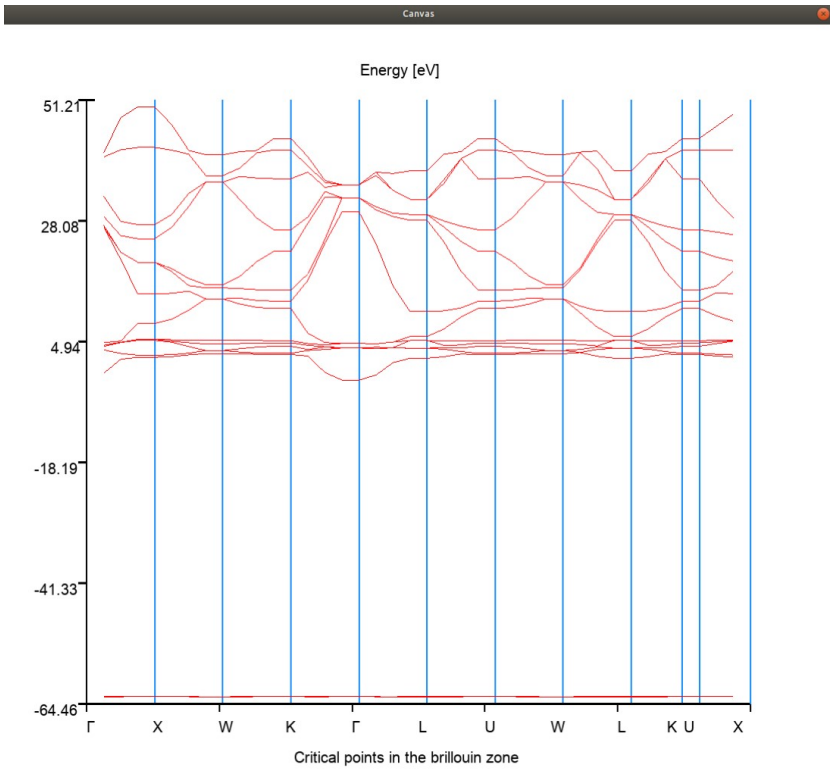
4.1.2 Bandstruktur

Nätverket startar med att öppna en HDF5-fil. Därefter skapas en process som extraherar data. Sedan navigeras det genom HDF5-filen till platsen där alla band, högkarakteristiska punkter (symboler) i Brillouin-zonen och högkarakteristiska punkternas koordinater är sparade. Alla band sparas i en DataFrame där varje kolumn innehåller alla värden för ett band. Alla högkarakteristiska punkter med tillhörande koordinat sparas i varsina DataFrames. Därefter ritas alla band och symboler upp. Det ritas även upp linjer som ligger i lod med symbolerna för att enklare se var i plotten symbolerna är. X-axeln visar symbolerna och y-axeln visar energierna i eV. X-axeln är även baserad på antalet iterationer av k-punkterna ur VASP-filerna.

Med den kunskapen gruppmedlemmarna besitter idag skulle inte x-axeln vara baserad på iterationer av k-punkter utan på avståndet mellan två symboler i Brillouin-zonen.



Figur 9: Nätverk för visualisering av bandstruktur.



Figur 10: 2D-graf för bandstruktur.

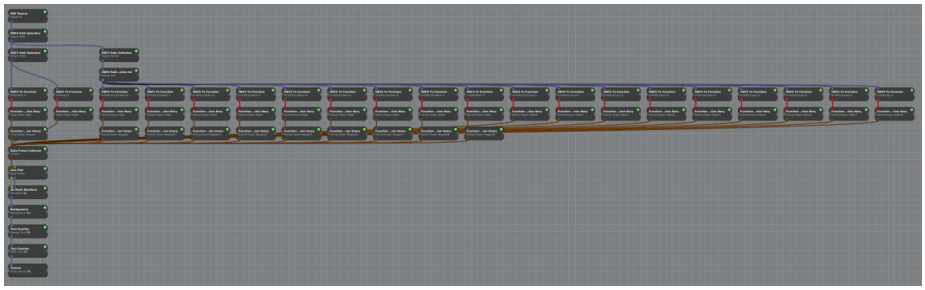
Plott över bandstrukturen med inmarkerade högkarakteristiska punkter (symboler) och linjer för att markera symbolernas läge i plotten.

4.1.3 Tillståndstäthet

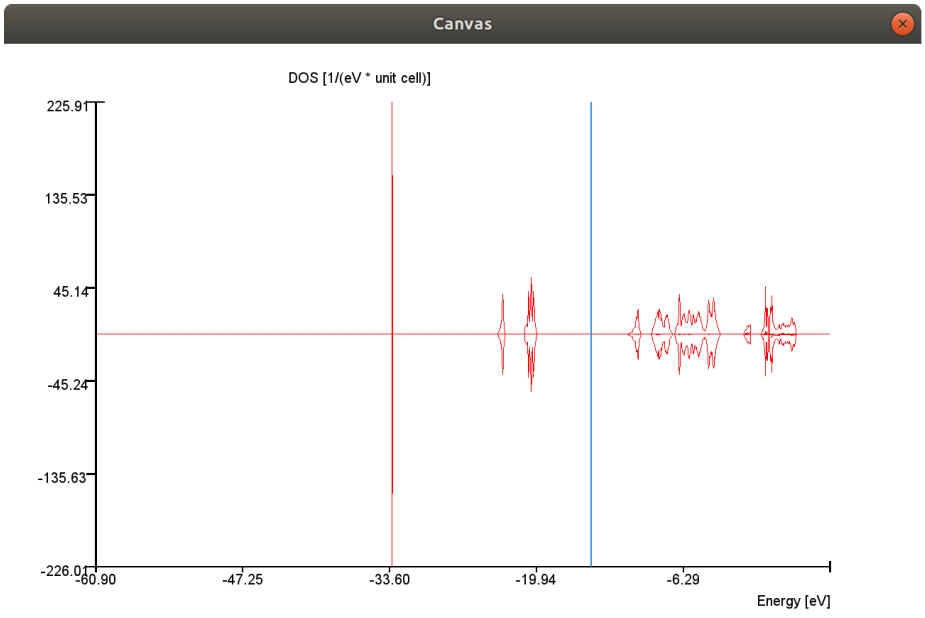
Nätverket för visualisering av tillståndstäthetsdata laddar en *HDFSource*-processor som anger HDF5-filen som data laddas från. Sedan kopplas en *HDF5PathSelection*-processor, som tar ut den givna HDF5-gruppens alla undergrupper direkt till den redan befintliga *HDFSource*-processorn. Denna processor anger att data ska laddas från DOS-gruppen i HDF5-filen. Två till *HDF5PathSelection*-processorer laddas sedan som anger grupperna Total och Partial i HDF5-filen.

För Total-delen laddas sedan kontinuerligt *HDF5ToFunction*-processorer som gör funktioner av all data i Total-gruppen. För Partial-gruppen laddas en *HDF5PathSelection*-processor som tar ut dataset för en vald atom genom att välja den givna HDF5-filens relevanta undergrupp. Denna processor har namnet *Partial Pick* i nätverket. Därefter laddas *HDF5ToFunction*-processorer för alla dataset i grupperna under Partial-gruppen. All data matas sedan in i en *LinePlot-*

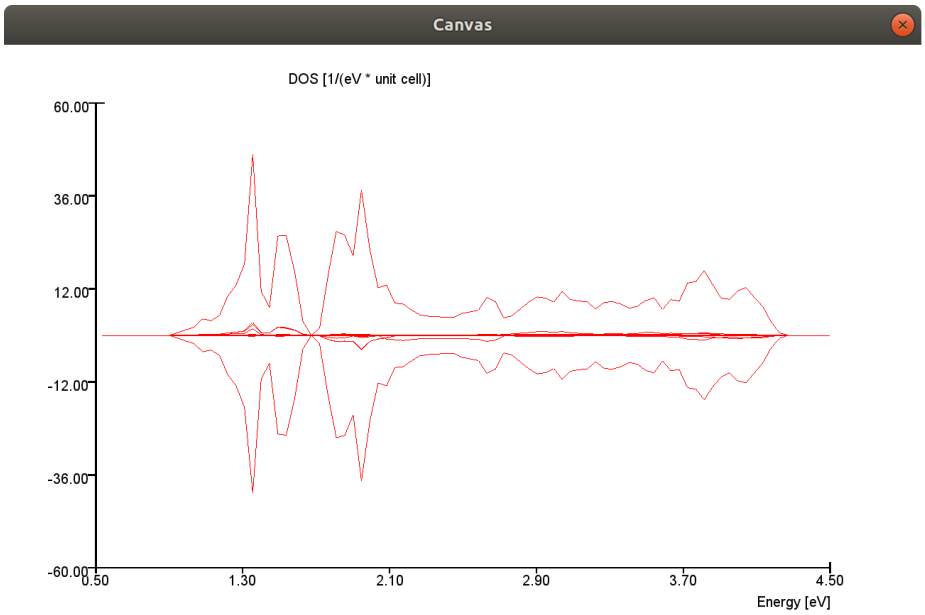
processor som gör en 2D-graf. Detta matas in i en *Canvas*-processor som visar själva grafen. Dessutom finns två textOverlay processorer som skriver ut text för x- och y-axeln. Figur 12 visar total tillståndstäthet för titanfosfat, TiPO4. Figur 11 visar nätverket som ger 2D-grafen i figur 12. Användaren kan även välja att visa en 2D-graf av den partiella tillståndstätheten med hjälp av sammma nätverk.



Figur 11: Nätverk för visualisering av tillståndstäthet.



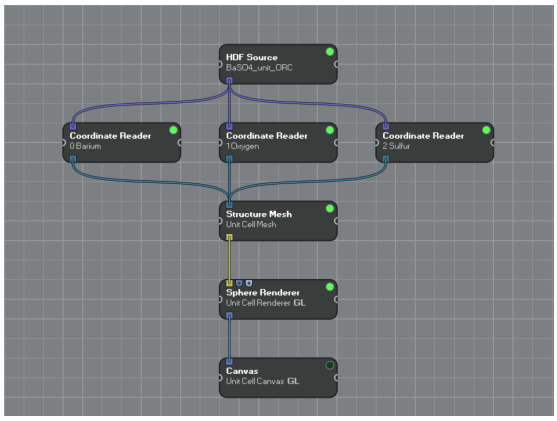
Figur 12: Visualisering av tillståndstäthet för TiPO4.



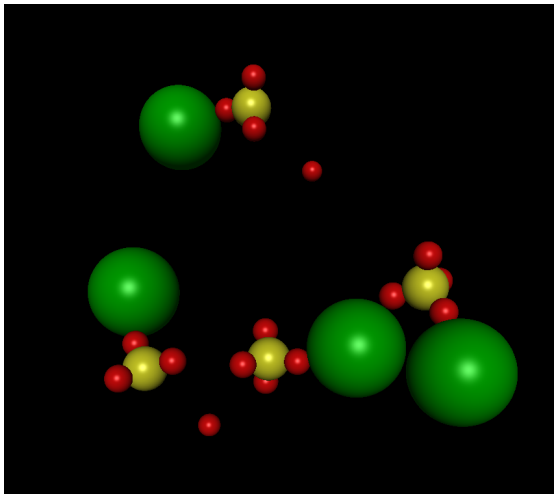
Figur 13: Inzoomad visualisering av tillståndstäthet för TiPO4.

4.1.4 Enhetscell

Hos nätverket för visualisering av enhetscellen hämtar först en *HDFSource*-processor HDF5-filen. Under *HDFSource*-processorn ligger ett antal *CoordinateReader*-processorer, en för varje atomslag i enhetscellen. Från HDF5-filen hämtar var och en av *CoordinateReader*-processorerna koordinaterna för atomslagens alla enhetscellsatomer. En *StructureMesh*-processor skapar sedan en mesh utifrån koordinaterna. Efter det skapar en *SphereRenderer*-processor en bild utifrån meshen, där en sfär ritas ut för varje atom i enhetscellen. Bilden skickas sedan till en *Canvas*-processor, som skapar ett fönster där bilden visas. Figuren nedan visar hur nätverket ser ut för bariumsulfat (BaSO4) och figuren under den visar den resulterande bilden.



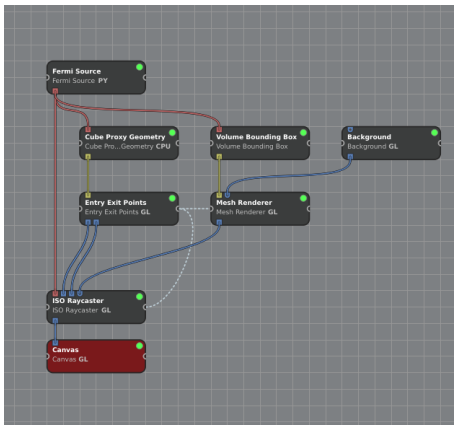
Figur 14: Nätverk för visualisering av enhetscellen.

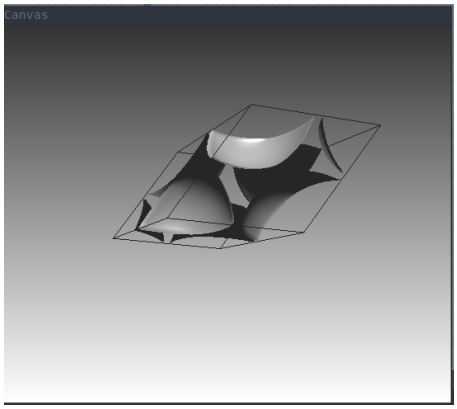


Figur 15: Den resulterande bilden.

4.1.5 Fermi-yta

Visualisering av fermi ytan görs med en skapad python process *HDF5FermiSource*. *HDF5FermiSource* läser in en hdf5 fil skapad av parsesystemen. Genom attributet *energy_band* väljs vilken data ska visualiseras, datan normalisersas och sedan omvandlas till en *Inviwo-Volume* som output. Resterande delarana av nätverket är inbygga inviwo processorer. Volymen skickas till två mesh renderare som omvandlare meshen till en bild. *ISO-Raycaster* kan sedan välja ut vilka värden i volymen att visa i den resulterande bilden som *Canvas* målar upp.





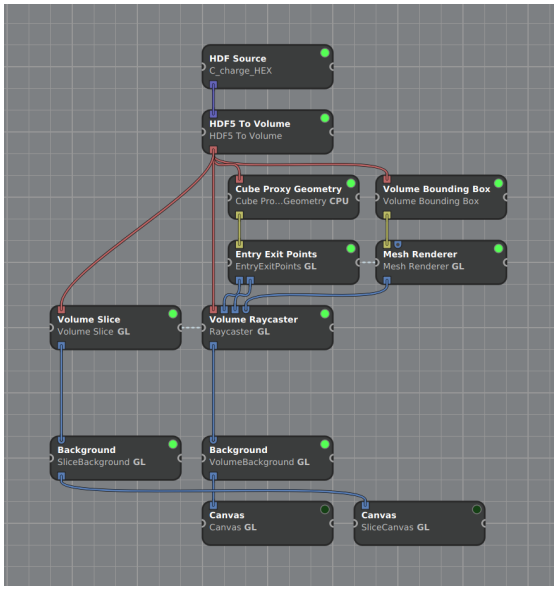
Fermi-yta (höger) Inviwo-nätverket (vänster) resulterande bild.

4.1.6 Elektrontäthet

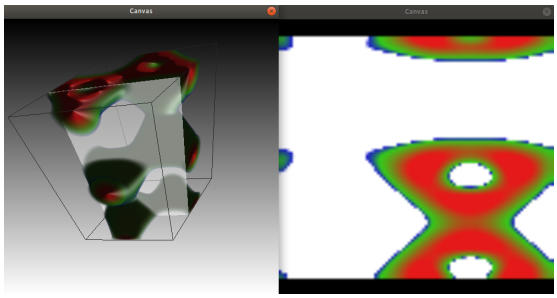
Figuren nedan visar nätverket för visualisering av elektrontäthet. Först hämtar en *HDFSource*-processor HDF5-filen. En *HDF5ToVolume*-processor hämtar sedan elektrontätheten från HDF5-filen och genererar en volym för den. Processorerna *CubeProxyGeometry*, *EntryExitPoints* och *VolumeRayCasyer* skapar en bild utifrån volymen. Denna bild är en 3D-bild av elektrontätheten hos materialets enhetscell. Processorerna *VolumeBoundingBox* och *MeshRenderer* skapar en parallellepiped som omsluter volymen. Parallellepipeden skickas sedan vidare till *VolumeRayCaster*-processorn, där den sammanfogas med elektrontäthetsbilden. Till den resulterande bilden läggs det sedan på en bakgrund med hjälp av en *Background*-processor. Slutligen skickas bilden till en *Canvas*-processor, som gör att bilden visas upp.

Volymen som skapas av *HDF5ToVolume*-processor skickas även parallellt till en *VolumeSlice*-processor, som genererar ett tvådimensionellt tvärsnitt av elektrontätheten. Till den läggs det sedan till en bakgrund med hjälp av en *Background*-

processor och slutligen skickas tvärsnittsbilden till en egen *Canvas*-processor, där den visas upp.



Figur 16: Nätverket för visualisering av elektrontäthet.

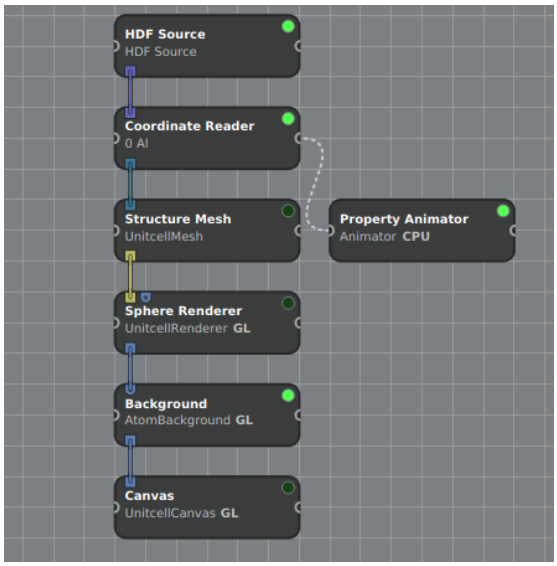


Figur 17: De resulterande bilderna.

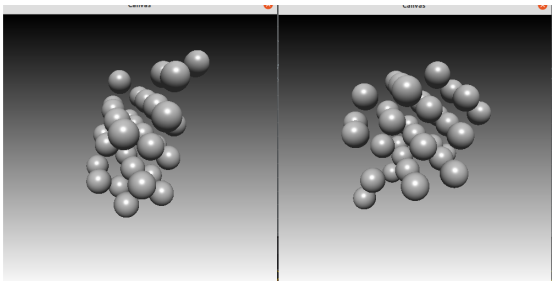
4.1.7 Molekyldynamik

Nätverket för visualisering av molekyldynamik hämtar först en HDF5-fil med hjälp av en *HDFSource*-processor. För varje typ av atom finns en *CoordinateReader*-processor som hämtar data från HDF5-filen. Denna data består av information om atomernas position i ett tidssteg. Varje *CoordinateReader*-processor är kopplad med en *Property Animator*-processor. En *Property Animator*-processor kan ändra olika egenskaper hos *CoordinateReader*-processorn.

Exempel på dessa är vilken typ av animering som ska ske, hur snabbt resultatet ska animeras och om det ska finnas en fördröjning i resultatet. *StructureMesh*-processorn skapar sedan ett mesh utifrån atomernas koordinater. Sedan ritar en *SphereRender*-processor ut en bild av atomerna, representerade som sfärer. Till den resulterande bilden läggs sedan en bakgrund, med hjälp av en *Background*-processor. Sedan ritas det grafiska resultatet ut av en *Canvas*-processor.



Figur 18: Nätverket för visualisering av molekyldynamik.



Figur 19: Grafiskt resultat av molekyldynamiksvisualiseringen. Bilden visar atomernas positioner vid två olika tidpunkter.

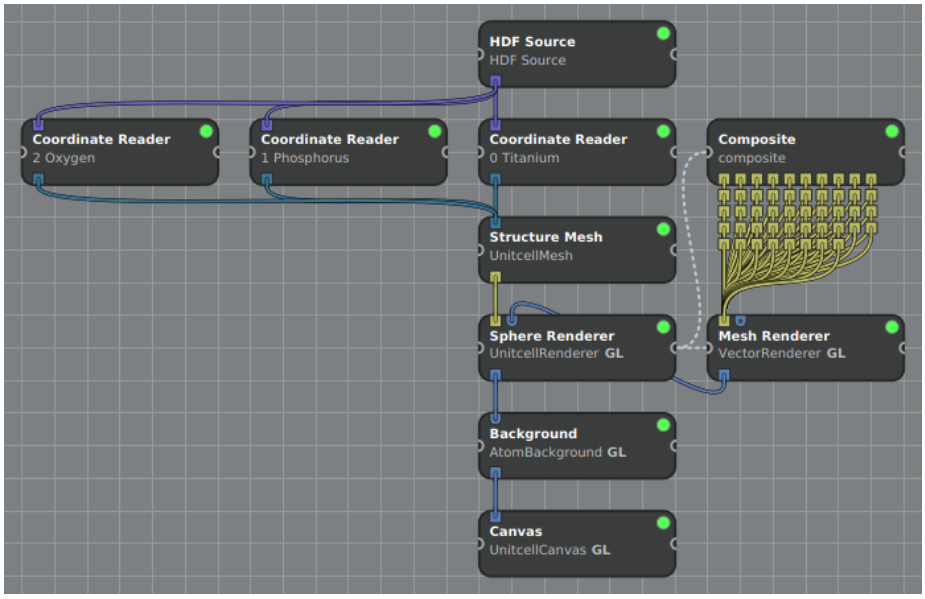
4.1.8 Kraftvektorer

I nätverket för kraftvektorer hämtas HDF5-filen med hjälp av en *HDF Source* processor. Denna är sedan inkopplad i lika många *Coordinate Reader* processorer

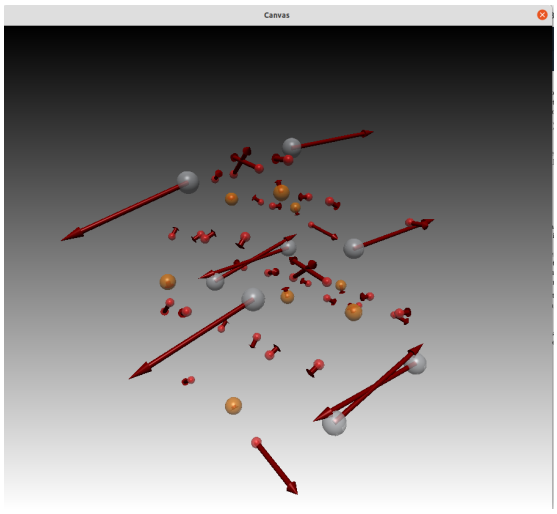
som det finns typer av atomer i HDF5-filen. En *Structure Mesh* processor följt av en *Sphere Renderer* processor skapar atomerna och dess attribut i 3D.

Vektorerna alstras från *Composite* processorn till höger, den består av en samling *Mesh Creator* processorer, en för varje vektor. En *Mesh Renderer* processor skapar sedan vektorerna och dess attribut i 3D.

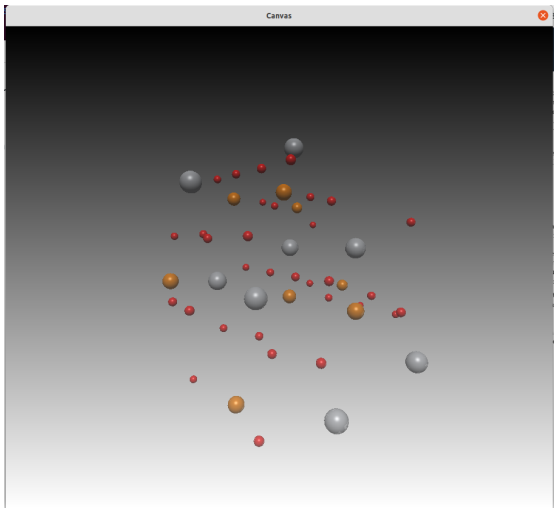
Slutligen skickas all atom och vektorinformation igenom en *Background* processor och *Canvas* processor där visualiseringen åskådliggörs.



Figur 20: Nätverket för visualiseringar av kraftvektorer.



Figur 21: Visualisering av kraftvektorer.



Figur 22: Visualisering av samma struktur utan kraftvektorer.

4.2 NetworkManager och Subnetwork

För att hantera mer avancerade inviwonätverk och för att kunna köra flera visualiseringar parallellt så finns en pythonklass *Subnetwork*. Implementationer av denna klass har i uppgift att överse en specifik visualisering och har funktioner för att sätta upp och påverka denna visulisering. Alla visualiseringar som ska startas via detta system kräver att en klass vilken ärver *Subnetwork* skapas. Se

filen *ExampleSubnetwork.py* för ett exempel på hur en klass som ärver *Subnetwork* bör implementeras.

En klass för att hantera de *Subnetworks* som intieras har också skapats. Denna heter *NetworkManager*. *NetworkManager*-klassen har funktioner för att initera och spara olika *Subnetworks*. Den hanterar också interaktion mellan olika *Subnetworks* då detta behövs.

Filer relaterade till detta ligger under *envisionpy*-modulen i *envisionpy/network*.

För nuvarande så finns de visualiseringar relaterade till 2d-grafvisualisering inte implementerade i detta system. Dessa använder fortfarande det gamla *NetworkHandler*-systemet.

4.3 NetworkHandlers

Detta system är ersatt med *NetworkManager och Subnetwork* som beskrivs i ovanstående kapitlet. Kapitlet finns kvar då det beskriver hur visualiserningarna fungerar även om det inte längre är det som används för att implementera nya visualiserningar.

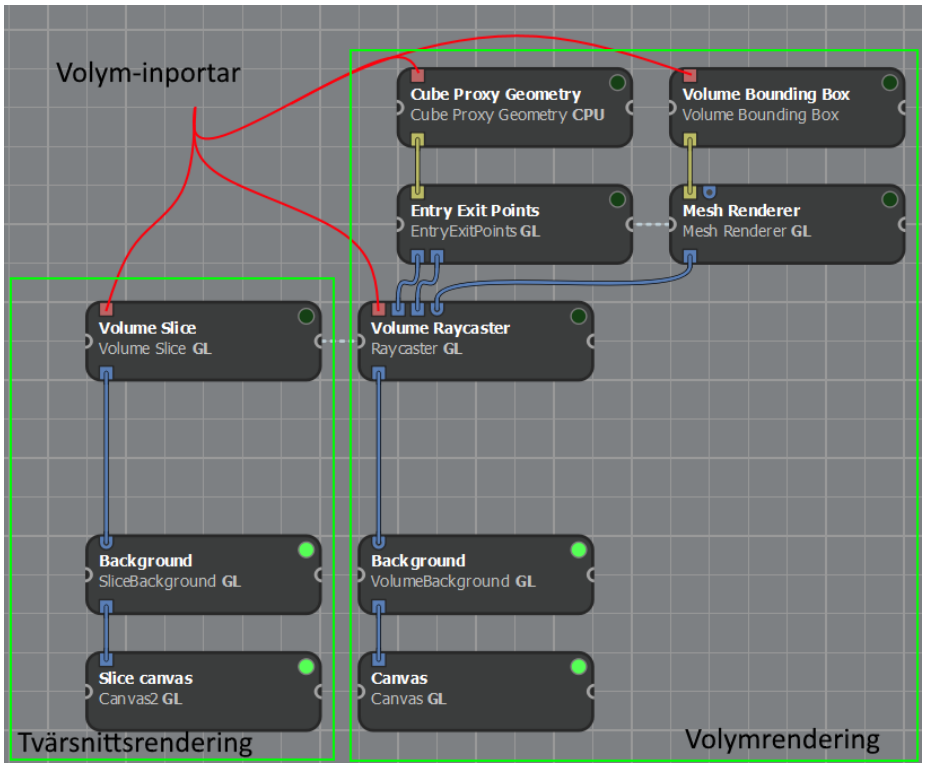
För att andra delsystem enkelt ska kunna sätta upp och ändra parametrar i inviwonätverken så har python-klasser, kallade *NetworkHandlers*, skrivits. Dessa klasser initierar specifika delar av nätverket och har funktioner för att ändra speciella properties i de processorer de har ansvar över. *NetworkHandlers* finns för nuvarande inte för alla visualiseringar utan bara för de relaterade till volymrendering.

Alla dessa klasser ärver en basklass kallad *NetworkHandler*. Denna har i uppgift att ta hand om ett set av processorer som hör till en speciell visualisering.

NetworkHandler-klasserna tillhör envisionpy-modulen och ligger under envisionpy.processor_network.

4.3.1 VolumeNetworkHandler

En klass som sätter upp ett generiskt nätverk för volymrendering. Nätverket som byggs upp kan inte självstående ge upphåv till någon visualisering då ingen volymdatakälla initieras. Detta måste istället göras från en mer specificerad *VolumeHandler*-klass som ärver denna.



Figur 23: Nätverket som byggs upp då en VolumeNetworkHandler-instans initieras.

Som visas i figur 23 så kan nätverket delas upp i två delar. En volymrenderingsdel och en tvärsnittsrenderingsdel.

Processorerna *Cube Proxy Geometry*, *Entry Exit Points*, och *Volume Raycaster*, visade i mitten av figur 23 kommer att generera bilddata direkt baserat på den volymdata de tar emot.

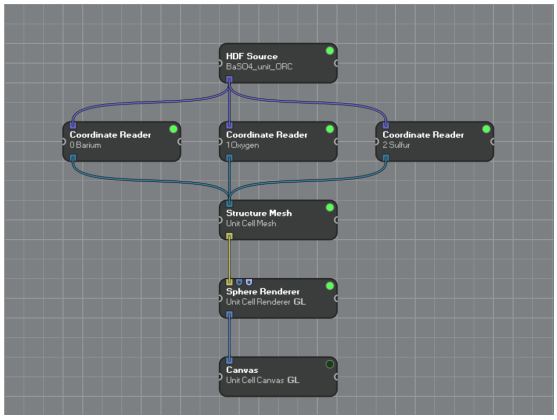
Processorerna *Volume Bounding Box* och *Mesh Renderer* visade i högra delen av figur 23 kommer att generera bilddata av den parallellepiped som stänger in volymen. Bilddatan skickas sedan till *Volume Raycaster* och sammanfogas där med bilddatan av volymen. Detta skickas sedan till *Volume Background*-processorn där en bakgrund adderas till bilddatan som sedan skickas till *Canvas*-processorn där den slutgiltiga visualiseringen visas.

Tvärsnittsrenderingen tar emot samma volymdata som volymrenderingen, skickar det till *Volume Slice*-processorn, vilken genererar bilddata baserat på ett plan som skär volymen. Bilddatan skickas sedan till en egen canvas. Volymrenderingens *Raycaster*-processor har förmågan att rita ut ett plan på en godtycklig position i volymen. Detta plan länkas till planet i *Volume Slice*-processorn så att ett delvis

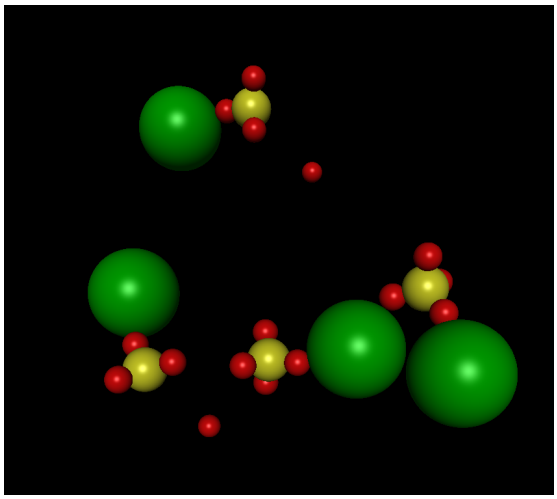
transparent plan ritas i volymen på samma position som planet *Volume Slice* använder sig av för att hämta sin data. Tvärsnittsrenderingen kan aktiveras och inaktiveras genom att dess *Canvas*-processor raderas eller läggs till, och att planrenderingen i *Raycaster*-processorn aktiveras eller inaktiveras.

4.3.2 UnitcellNetworkHandler

En klass som sätter upp ett och hanterar nätverk för atompositionsrendering. Nätverket som sätts upp kan självstående generera en visualisering för bara atompotitioner men kan också kombineras med andra nätverk genom att denna ärvs i mer specificerade *NetworkHandler*-klasser.



Figur 24: Nätverket som byggs upp då en UnitcellNetworkHandler-instans initieras.



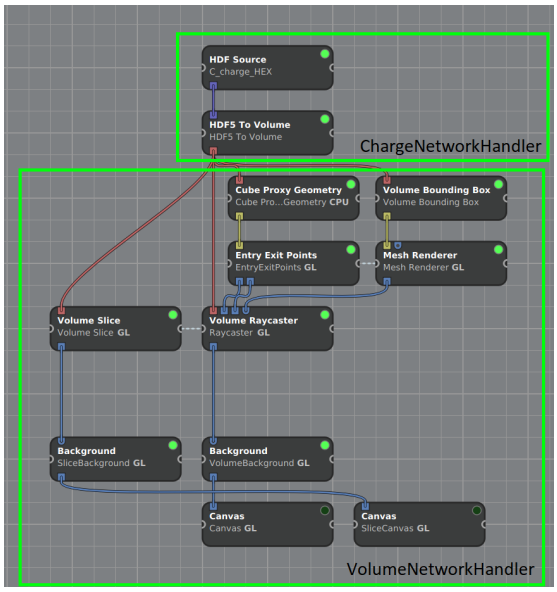
Figur 25: Resulterande bild från nätverk i figur 24

UnitcellNetworkHandler börjar med kontrollera att den givna HDF5-filen har data för en atompositionsvisualisering och kastar ett *AssertionError* om den inte har det. Den fortsätter sedan med att sätta upp en *HDF5 Source*-processor, om en sådan redan existerar så används den existerande processorn istället. Vilka atomtyper som HDF5-filen innehåller information om läses sedan.

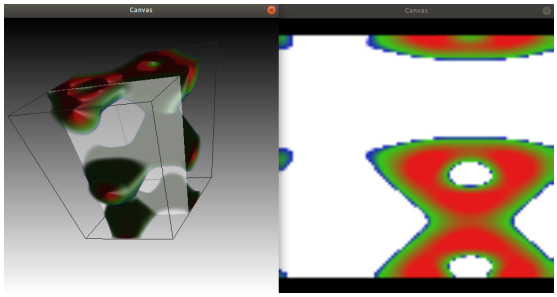
En *Coordinate Reader*-processor för varje atomtyp läggs till. Koordinatdatan skickas vidare till en *Structure Mesh*-processor, en ENVISIoN processor som konverterar koordinaterna till en *mesh*. Meshen skickas till *Sphere Renderer* där den konverteras till bilddata med en sfär vid varje tidigare koordinat. Bilddatan ritas sedan ut på en *Canvas*.

4.3.3 ChargeNetworkHandler

En specificerad klass för att sätta upp och hantera laddningstäthetsvisualiseringen. Klassen genererar ett fullständigt nätverk för laddningstäthetsvisualisering och har funktioner för att alla parameterändringar som där behövs. Ärver *VolumeNetworkHandler* för att hantera volymrenderingsaspekten av visualiseringen.



Figur 26: Nätverket som byggs upp då en ChargeNetworkHandler-instans initieras.



Figur 27: Resulterande bild från nätverk i figur 26

ChargeNetworkHandler börjar med kontrollera att den givna HDF5-filen har data för en laddningstäthetsvisualisering och kastar ett *AssertionError* om den inte har det. Den fortsätter sedan med att initera sin superklass *VolumeNetworkHandler*. Denna sätter up sin del av nätverket som indikerat i figur 26.

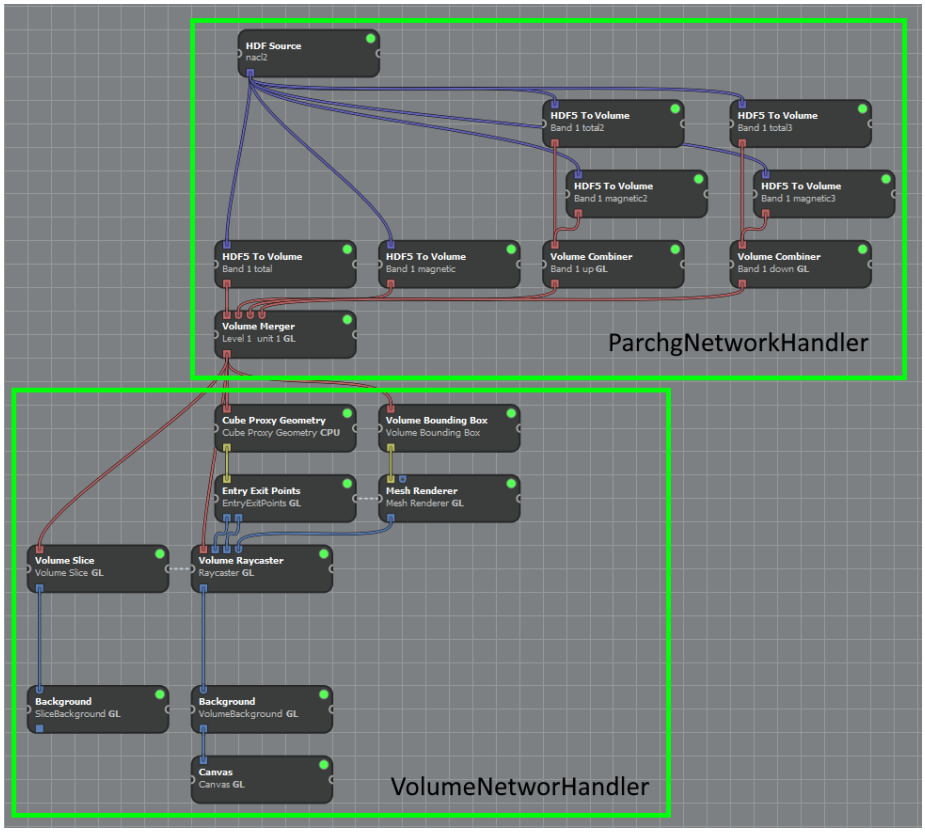
En *HDF5 Source* sätts upp och sedan sätts en *HDF5 To Volume* upp och anslutes till *HDF5 Source*. *HDF5 To Volume* hämtar ut volymdata från HDF5-filens */CHG/* sökväg. Processorn genererar volymdata som i sin tur ansluts med volymrenderingsdelens volymdatainportar.

4.3.4 ELFNetworkHandler

ELFNetworkHandler är identisk i jämförelse med ChargeNetworkHandler med ett fåtal skillnader. Volymdata från HDF5-filen hämtas från sökvägen */ELF/* istället för */CHG/*. Detta gör att funktioner för att hämta och sätta aktiva band också är olika.

4.3.5 ParchgNetworkHandler

En specificerad klass för att sätta upp och hantera visualiseringen för partiell laddningstäthet. Ärver *VolumeNetworkHandler* och *UnitcellNetworkHandler* för att hantera volymrenderingsaspekten respektive atompositionsaspekten av visualiseringen.

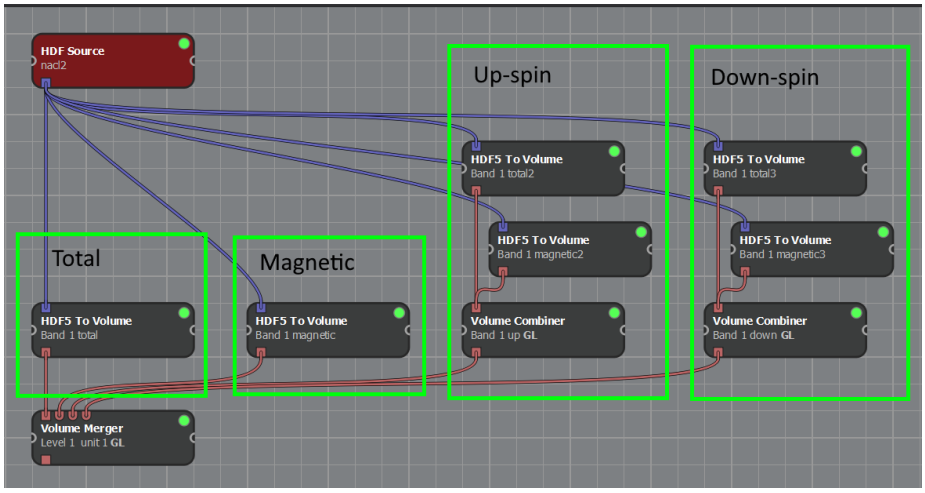


Figur 28: Nätverket som byggs av ParchgNetworkHandler (utan atomposition-srendering).

Till att börja med initieras superklassen *VolumeNetworkHandler* detta sätter upp det generiska volymrenderingsnätverket.

Efter detta initieras volymdatakällan och volymdataoutporten ansluts till volymrenderingsdelen av nätverket.

Volymkällan är här mer komplicerad i jämförelse mot övriga visualiseringar, eftersom flera olika volymdataset här ska visualiseras som en volym. Precis hur denna del ser ut beror på de bandval som görs av användaren.



Figur 29: Exempel på nätverkets volymdatakälla med ett bandval för varje läge.

Den partiella laddningstäthetsvisualiseringen tillåter användaren att välja ett godtyckligt antal band som ska visualiseras och ett av fyra olika lägen för varje band. Dessa lägen är *Total*, *Magnetic*, *Up-spin*, och *Down-spin*. De olika lägena hämtar ut volymdata ur HDF5-filen på olika sätt.

- **Total:** Hämtar direkt volymdatan från det valda bandets */total/* sökväg.
- **Magnetic:** Hämtar direkt volymdatan från det valda bandets */magnetic/* sökväg.
- **Up-spin:** Hämtar ut både */total/* och */magnetic/* volymdatan som *v1* och *v2*. Volymerna summeras sedan med formeln *0.5*(v1+v2)
- **Down-spin:** Hämtar ut både */total/* och */magnetic/* volymdatan som *v1* och *v2*. Volymerna summeras sedan med formeln *0.5*(v1-v2)

Volymdatan från de olika bandvalen kombineras sedan med en *Volume Merger*-processor. *Volume Merger* kan summerar upp till fyra volymer till en. Om mer än fyra bandval har gjorts så används flera lager av *Volume Merger*-processorer för att kunna summera alla dessa till en. Volymdatan från den sista *Volume Merger* skickas sedan till volymrenderingsnätverket.

4.3.6 LinePlotNetworkHandler

Hanterar den generella delen av en 2D-graf visualisering. Styr allt som har med 2D-grafen att göras, som skalning, axlar på grafen, med mera.

4.3.7 BandstructureNetworkHandler

Ärver LinePlotNetworkHandler och sätter upp den specifika delen för bandstructure visualiseringen. Styr HDF5-källan och bandval.

4.3.8 DOSNetworkHandler

Ärver LinePlotNetworkHandler och UnitcellNetworkHandler och sätter upp den specifika delen för tillståndstäthets visualiseringen. Styr HDF5-källan och val av tillstånd.

4.3.9 PCFNetworkHandler

Ärver LinePlotNetworkHandler och sätter upp den specifika delen för parkorrelationsfunktions visualiseringen. Styr HDF5-källan och val av tidssteg.

4.3.10 FermiSurfaceNetworkHandler

Ärver Network handler och skapar en gränsnitt med några *Inviwo-properties*. Specifict i *HDF5FermiSource*: *energy_band expand*, *brillouin_zone* och *ISO-Raycaster*: *iso-value*. Mer detaljer finns i respective *Inviwo-process* dokumentation.

4.4 Datastrukturer

Två datastrukturer, Point och Function, har introducerats. En datastruktur är en form av behållare av olika typer av data som kan skickas mellan processorer. Dessa används i vissa av de implementerade processorerna.

4.4.1 Point

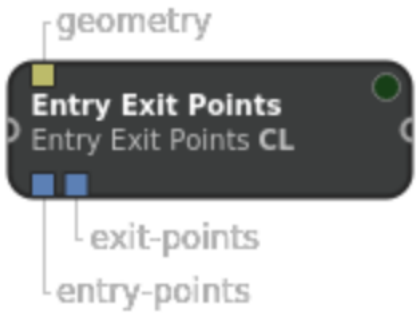
Denna datatyp representerar en reell 1D-punkt och inkapslar punktens värde (ett flyttal) samt variabel metadata.

4.4.2 Function

Denna datatyp representerar en reellvärd funktion av en reell variabel och inkapslar sampelvärden och variabel-metadata för x- och y-axlarna.

4.5 Processorer

För att kunna omvandla den data som översatts från VASP-beräkningar till en visualisering krävs processorer som utför specifika uppgifter. Figur 30 demonstrerar ett typiskt utseende på en processor.



Figur 30: Exempel på en processors utseende.

De färgade rutorna till vänster på processorn i figur 30 är olika typer av ingångar och utgångar. Cirkeln i det övre högra hörnet på processorn i samma figur är en lampa som lyser då processorn är aktiv. De processorer som ENVISIoN skapat kategoriseras och beskrivs nedan.

4.5.1 Kristallstruktur

Nedanstående processorer är relaterade till visualiseringen av kristallstrukturer. De tillhör en modul vid namn Crystalvisualization.

CoordinateReader Från en HDF5-fil läser denna processor koordinater för atompositioner. En sökväg till ett dataset sätts via en StringProperty path_. I molekyldynamiksfall så används en tidstegsräknare IntProperty timestep_ som varierar värdet som på path_. Utdata från CoordinateReader är n stycken vec3.

Inport:

- Hdf5::Inport inport_

Utport:

- DataOutport< std::vector<vec3> > outport_

Properties:

- StringProperty path_
- IntProperty timestep_

StructureMesh Atompostionsdata kopplas ihop med rätt atomfärg och radie med StructureMesh-processorn. StructureMesh har en multiinport, dit en eller flera CoordinateReader-processorer kan kopplas in. Indata för StructureMesh är atompositionsdata i form av vec3 för varje atomslag. Till denna indata läggs properties för färg, radie och antal till för varje atomslag/processor som kopplas in. Den ger en mesh, som har buffrar för position, färg och radie.

Inport:

- DataInport< std::vector<vec3>, 0> structure_

Utport:

- MeshOutport mesh_

Properties:

- FloatProperty scalingFactor_
- FloatMat3Property basis_
- BoolProperty fullMesh_
- IntProperty timestep_
- std::vector< std::unique_ptr<FloatVec4Property> > colors_: vektor som innehåller färgproperty för varje atomslag
- std::vector< std::unique_ptr<FloatProperty > > radii_: vektor som innehåller radieproperty för varje atomslag
- std::vector< std::unique_ptr<IntProperty> > num_: vektor som innehåller antalet atomer per tidssteg för varje atomslag
- BoolProperty enablePicking_: sann då picking-funktionen är påslagen
- IntVectorProperty inds_: vektor med index på valda atomer

4.5.2 HDF5

Nedanstående processorer är ämnade att fungera väl med de HDF5-relaterade processorer som är inkluderade i Inviwo.

HDF5PathSelection* Detta är en grupp av processorer som har funktionalitet liknande den inbyggda processorn HDF5PathSelection. En eller flera av dessa processorer placeras med fördel mellan en HDFSource och en eller flera HDF5To*.

Gemensamt för dessa processorer är att de på inporten tar en Hdf5-grupp och på utporten skriver noll eller flera av dessa omedelbara undergrupper.

Nedan beskrivs de olika processorerna i denna grupp.

HDFpathSelectionInt Denna processor väljer en HDF5-grupp med heltalsnamn, baserat på värdet på processorns intProperty_, eventuellt utökat med ledande nollor till bredden specificerat på processorns zeroPadWidthProperty_.

HDF5PathSelectionInt kan med fördel användas tillsammans med en OrdinalPropertyAnimator för att plocka ut relevant data ur en HDF5-fil.

Anledningen till att utdata ges som en vektor av HDF5-grupper, trots att processorn alltid skriver exakt en grupp på utporten, är att processorn ska följa samma mönster som, och fungera väl med, resterande processorer.

Inport:

- DataInport<hdf5::Handle> hdf5HandleInport_

Utport:

- DataOutport< std::vector<hdf5::Handle> > hdf5HandleVectorOutport_

Properties:

- IntProperty intProperty_
- IntSizeTProperty zeroPadWidthProperty_

HDF5PathSelectionIntVector Denna processor väljer noll eller flera HDF5-grupper med heltalsnamn, baserat på värdet på processorns intVectorProperty_, eventuellt utökat med ledande nollor till berdden specificerat av processorns zeroPadWidthProperty_.

HDF5PathSelectionIntVector kan med fördel användas tillsammans med ”picking” för att plocka ut relevant data ur en HDF5-fil.

Inport:

- DataInport<hdf5::Handle> hdf5HandleInport_

Utport:

- DataOutport< std::vector<hdf5::Handle> > hdf5HandleVectorOutport_

Properties:

- IntVectorProperty intVectorProperty_
- IntSizeTProperty zeroPadWidthProperty_

HDF5PathSelectionAllChildren Denna processor väljer den givna HDF5-gruppens alla undergrupper.

Inport:

- DataInport<hdf5::Handle> hdf5HandleInport_

HDF5To* Detta är en grupp av processorer som har funktionalitet liknande den inbyggda processorn HDF5ToVolume. Processorerna placeras med fördel efter en HDFSource-processor, med en eller flera mellan liggande HDF5PathSelection*.

Gemensamt för dessa är att de som indata tar noll eller flera HDF5-grupper (baserat på *pathSelectionProperty_), plockar ut dataset för varje grupp och omvandlar dessa till relevanta objekt (Point eller Function) som sedan skrivs till utporten. Objektens variabel-metadata tas, om de finns tillgängliga, från attributen associerade med dataseten. Vidare kan, om så väljs med *namePrependParentsProperty_, metadat utökas med namnen på de grupper var i dataseten ligger.

Vilka dataset som kan väljas med *pathSelectionProperty_ uppdateras dynamiskt beroende på vilka grupper som ligger på inporten. När ett lämpligt dataset valts kan *pathFreezeProperty_ användas för att stänga av denna dynamik, så att värdet sparas även om grupperna på inporten (antagligen tillfälligt) ändras. Detta underlättar manuellt experimenterande samt användandet av processorer som tillfälligt ger noll grupper som utadat, t.ex. HDF5PathSelectionIntVector.

HDF5ToPoint Denna processor konverterar HDF5-data till noll eller flera Point-objekt.

Inport:

- DataInport<hdf5::Handle, 0, true> hdf5HandleFlatMultiInport_

Utport:

- DataOutport< std::vector<Point> > pointVectorOutport_

Properties:

- OptionPropertyString pathSelectionProperty_
- BoolProperty pathFreezeProperty_
- IntSizeTProperty namePrependParentsProperty_

HDF5ToFunction Denna processor konverterar HDF5-data till noll eller flera Function-objekt.

Normalt plockas två dataset per grupp ut, ett för x-axeln och ett för y-axeln. Om endast data för y-axeln finns tillgänglig kan implicitXProperty_ sättas, varvid processorn automatgenererar data för x-axeln.

Inport:

- DataInport<hdf5::Handle, 0, true> hdf5HandleFlatMultiInport_

Utport:

- DataOutport< std::vector<Function> > functionVectorOutport_

Properties:

- BoolProperty implicitXProperty_
- OptionPropertyString xPathSelectionProperty_
- OptionPropertyString yPathSelectionProperty_
- BoolProperty xPathFreezeProperty_
- BoolProperty yPathFreezeProperty_
- IntSizeTProperty xNamePrependParentsProperty_
- IntSizeTProperty yNamePrependParentsProperty_

4.5.3 2D

Nedanstående processorer är ämnade att bearbeta och presentera 2D-data, närmare bestämt data av typen Point och Function.

FunctionOperationUnary Denna processor implementerar en unär operator, antingen negation ($g_i(x) = -f_i(x)$) eller (multiplikativ) inversion ($g_i(x) = 1/f_i(x)$). Operatorn appliceras på funktioner på inporten, en i taget, och skriver respektive resultat på utporten.

Inport:

- DataFrameInport dataframeInport_

Utport:

- DataFramOutport dataframOutport_

Properties:

- OptionPropertyString operationProperty_

FunctionOperationNary Denna processor implementerar en operator med variabel aritet (engelska n-ary), antingen addition/summa ($g(x) = \Sigma_i f_i(x)$) eller multiplikation/produkt ($g(x) = \Pi_i f_i(x)$). Operatorn appliceras på samtliga funktioner på inporten och skrver resultatet på utporten.

Då funktionerna på inporten kan vara samplade vid olika x-värden behöver processorn ta beslut om var ut-funktionen ska samplas. Processorn utgår från att sampla i samtliga x-värden för samtliga in-funktioner. sampleFilterEnableProperty_ kan sättas för att filtrera dessa. Då sampleFilterEnableProperty_ är satt ser processorn till att sampelavståndet är minst det värde som anges i sampleFilterEpsilonProperty_. När processorn skapas är sampleFilterEnableProperty_ satt och sampleFilterEpsilonProperty_ är 0 vilket innebär att x-värden som är identiska filtreras bort.

Om ett värde behöver beräknas vid ett x-värde där en in-funktion inte är samplat används linjär interpolation om x-värdet ligger innanför funktionens definitionsintervall. Om x-värdet ligger utanför detta intervall används undefinedFallbackProperty_ för att avgöra vilket värde som används istället. Detta kan antingen vara noll eller funktionens värde vid intervallets relevanta ändpunkt.

Inport

- org.envision.FunctionFlatMultiInport functionFlatMultiInport_

Utport:

- DataFramOutport dataframOutport_

Properties:

- OptionsPropertyString operationProperty_
- OptionsPropertyString undefinedFallbackProperty_
- BoolProperty sampleFilterEnableProperty_
- FloatProperty sampleFilterEpsilonProperty_

LinePlot LinePlot tar en *DataFrame* som förväntas innehålla minst två kolumner med data. Den konstruerar en mesh som representerar en linjegraf. Denna mesh renderas sedan, förslagsvis med hjälp av en *2D Mesh Renderer*-processor för att generera en bild av grafen.

LinePlot genererar även en utbild att lägga över grafen som innehåller axelgraderingen. Axelgraderingen kan också den skickas in i *2D Mesh Renderer*-processorn och kommer då läggas ovanpå grafen.

Användaren väljer vilken kolumn i den *DataFrame* som processorn tar in som ska representeras på vardera axel genom val i *xSelectionProperty_* och *ySelectionProperty_*. Vill användaren välja multipla kolumner som ska representeras på y-axeln sätts *boolYSelection_* till sant för att sedan välja vilka kolumner i med hjälp av en sträng i *groupYSelection_*. Användaren kan även välja alla kolumner som inte representeras på x-axeln att representeras på y-axeln genom att sätta *allYSelection_* till sant.

Inställningar som har *range* i namnet justerar minimum- och maximumvärden på koordinataxlarna. Inställningar med *width* eller *colour* justerar bredd respektive färg för olika linjer ritade i diagrammet.

*label_number_* anger antalet divisioner på koordinataxlarna. Är värdet till exempel satt till tjugo innebär det att varje axel kommer ha tjugo divisioner och tjugo axelgraderingsetiketter, utöver de etiketter på startvärdena på vardera axel.

*font_* ställer in vilket typsnitt axelgraderingen skall ha.

*enable_line_* aktiverar ritandet av en vertikal linje på x-koordinaten specificerad i *line_x_coordinate_*. Denna är avsedd att ge en visuell markering av var specifika x-värden finns på x-axeln.

Inport:

- DataFrameInport dataFrameInport_
- DataInport<Point, 0, true> pointInport_

Utports:

- MeshOutport meshOutport_
- ImageOutport labels_

Properties:

- OptionPropertyString xSelectionProperty_
- OptionPropertyString ySelectionProperty_
- StringProperty groupYSelection_
- BoolProperty boolYSelection_
- BoolProperty allYSelection_
- FloatVec4Property colour_
- FloatVec2Property x_range_
- FloatVec2Property y_range_
- FloatProperty scale_
- BoolProperty enable_line_
- FloatProperty line_x_coordinate_
- FloatVec4Property line_colour_
- BoolProperty show_x_labels_
- BoolProperty show_y_labels_
- FloatVec4Property axis_colour_
- FloatProperty axis_width_

- BoolProperty enable_grid_
- FloatVec4Property grid_colour_
- FloatProperty grid_width_
- FontProperty font_
- FloatVec4Property text_colour_
- IntProperty label_number_

DataFrameCollector
Processorn utför inga beräkningar, utan den samlar endast ihop DataFrame från ett godtyckligt antal andra processorer till endast en DataFrame. Behovet för denna processor dök upp då visualiseringen för tillståndstäthet uppdaterades. Önskan att välja specifika partiella tillstånd kunde uppfyllas med hjälp av denna processor.

Inport:

- DataInport<DataFrame, 0> dataframeInport_

Utport:

- DataFrameOutport dataframeOutport_

FunctionToDataFrame
Denna processor extraherar data från funktioner till en DataFrame där varje funktion ger upphov till två kolumner. All data i en funktion har även information om densamma, t.ex. variabelnamn och enhet. Namnet på vardera kolumn som skapas är dess variabelnamn från funktionen.

Processorn skapades då det tidigare inte funnits ett sätt att extrahera data från flera funktioner samtidigt. Då har lösningen varit att använda en processor för varje funktion som har data att extrahera. Problematiken med den lösningen är att en visualisering kan vara väldigt tidskrävande. En visualisering av bandstruktur kan potentiellt ha flera hundra funktioner. Med FunctionToDataFrame kan detta göras med endast en processor.

Inport:

- DataInport<Function, 0, true> functionFlatMultiInport_

Utport:

- DataFrameOutport dataframeOutport_

4.5.4 Fermi

HDF5FermiSource

Process used for reading HDF5 data pertaining to fermi surface data

Outport:

volumeOutport: ivw.data.VolumeOutport Final processed data

Properties:

energy_band: ivw.properties.IntProperty Specifiees the band that should be read from the HDF5 file

is_brillouin_zone: ivw.propertiesBoolProperty Specifies if the data should be translated to birllouin zone

is_expanded_zone: ivw.propertiesBoolProperty Specifies if the data should be translated to expanded zone. Note if is_brillouin_zone is set this property will be overriden

___init___(self, id, name): id: str ID given to the process

name: str name given to the process

brillouin_zone(self, matrix, basis) Transforms reciprocal lattice to brillouin zone

Parameters: matrix: numpy.array 3D Matrix should represent reciprocal lattice

basis: Reciprocal basis vectors

Return: Matrix representing the brillouin zone

expanded_zone(self, matrix) Expands given matrix 4 quadrents

Parameters: matrix: numpy.array 3D Matrix should represent reciprocal lattice

Return: Expanded matrix

process(self, matrix, basis) Reads hdf_file set in self.filename, normalises the data and translates it to an *Inviwo-Volum*

Additional options to expand the data and to translate the data to brillouin zone are possible through the *Inviwo-properties*

Returns: None

4.5.5 Molekyldynamik

Property Animator För animeringen av Molekyldynamik används processorn Property Animator. Processorn ändrar en *property* hos en annan processor över tiden.

Först måste en property skapas i processorn. Denna property är någon form av taltyp t.ex. ett float-tal eller en interger. Propertyn har ett *value* som är dess siffervärde och ett värde kallat *delta* som bestämmer hur snabbt *value* förändras med tiden. Förändring av *value* med tiden initieras av att trycka *play*-knappen i property Animator. *Value* kan länkas till en property hos en annan processor. Detta gör att propertyn i denna processor sätts till värdet som *value* har. När *value* förändras av *delta* förändras även den property som *value* är länkat till.

4.6 Properties och widgets

4.6.1 IntVectorpropety

Denna property består av en vektor av int-värden.

4.6.2 IntVectorPropertyWidget

En widget för IntVectorProperty. ”Textbox”, satt till endast läsning (read only), som innehåller de värden som finns i tillhörande IntVectorProperty.

5 Envisionpy

ENVISIoNs pythonkod ligger i en modul kallad envisionpy. Det är i denna som all pythonfunktionalitet som diskuteras i andra kapitel ligger. Modulen har skapats för att man relativt enkelt ska kunna importera ENVISIoNs funktionalitet från ett annat godtyckligt pythonskript (exempelvis som det används i det senare beskrivna GUI-systemet [8]).

Envisionpy har två undermappar, *processor_network* och *hdf5parser*. I dessa ligger de pythonfiler som beskrivs i 4.3 respektive 3. Den har även en undermapp *utils* där speciella Exception-klasser och fil med atomdata ligger.

5.1 EnvisionMain

Envisionpy har en klass kallad *EnvisionMain*. Denna klass har som uppgift att bilda ett gränssnitt som annan pythonkod kan styra all ENVISIoNs visualiserings- och parsningsfunktionalitet från. När ett *EnvisionMain*-objekt initieras så startar denna sin egen instans av Inviwo, med hjälp utav *inviwopyapp*, som den kör i bakgrunden. Detta tillåter att Inviwos visualiseringsfunktionalitet används utan att dess gränssnitt visas.

EnvisionMain kan genom funktionsanrop köra parsning och starta ett godtyckligt antal visualiseringar genom att initera *NetworkHandler*-klasser allternativt *Subnetwork*-klasser beroende på vilken visualisering som ska köras.

Alla *NetworkHandler*-objekt sparas i en dictionary, *networkHandlers*, under en speciell identifikations-sträng som specificeras då objektet initieras.

De funktioner som primärt används i EnvisionMain är *handle_request* och *parse_vasp*. Det är via dessa funktioner som parsnings- och visualiseringssystemen styrs. Det finns även en funktion parse_ELK som används vid inläsning av ELK-filer.

5.1.1 handle_request

För att påverka visualiseringarna så används *handle_request*-funktionen. Denna tar ett argument kallat *request*. *request* en lista på följande form :

[ACTION, HANDLER_ID, [PARAMETERS...]].

ACTION är en sträng som beskriver vilken funktion som ska köras. En dictionary, *action_dict*, finns som översätter olika strängar till funktioner.

HANDLER_ID ska innehålla en identifikationssträng för det *NetworkHandler*-objekt/*Subnetwor*-objekt som funktionen ska köras på. Om en ny visualisering ska startas så specificerar den id för det nya *NetworkHandler*-objekt/*Subnetwor*-objekt som kommer att skapas.

[PARAMETERS...] är en lista av parametrar som den specificerade funktionen ska kallas med.

Funktionen returnerar en lista på följande form:

[ACTION, STATUS, HANDLER_ID, RESPONSE_DATA] där:

ACTION och HANDLER_ID är samma strängar som funktionen tog emot.

STATUS är en bool som signalerar om funktionen lyckades eller misslyckades.

RESPONSE_DATA är någon godtycklig data som funktionen som körts har returnerat, sätts till *None* om ingen data returneras.

5.1.2 parse_vasp

För att köra parsningsfunktioner för inläsning av filer från VASP körs funktionen parse_VASP. Funktionen tar in tre argument på följande form:

parse_VASP(VASP_path, hdf5_path, parse_types)

VASP_path är en sträng som signalerar var data ska läsas ifrån, hdf5_path är en sträng som specificerar var hdf5 filen ska sparas och parse_types antingen är en lista med strängar som signalerar vilka parsningstyper som ska utföras eller strängen "All" för att inikera att alla parstyper ska köras.

5.1.3 parse_ELK

För att köra parsningsfunktioner för inläsning av filer från ELK körs funktionen parse_ELK. Funktionen tar in tre argument på följande form:

parse_ELK(ELK_path, hdf5_path, parse_types)

ELK_path är en sträng som signalerar var data ska läsas ifrån, hdf5_path är en sträng som specificerar var hdf5 filen ska sparas och parse_types antingen är en lista med strängar som signalerar vilka parsningstyper som ska utföras eller strängen "All" för att inikera att alla parstyper ska köras.

6 ENVISIoN GUI

Det grafiska gränssnittet har utvecklats för att underlätta körningen av de flesta visualisering som ENVISIoN tillåter. Genom att köra Inviwo i bakgrunden kan användaren få tillgång till de inställningarna som anses relevanta för visualiseringen i fråga.

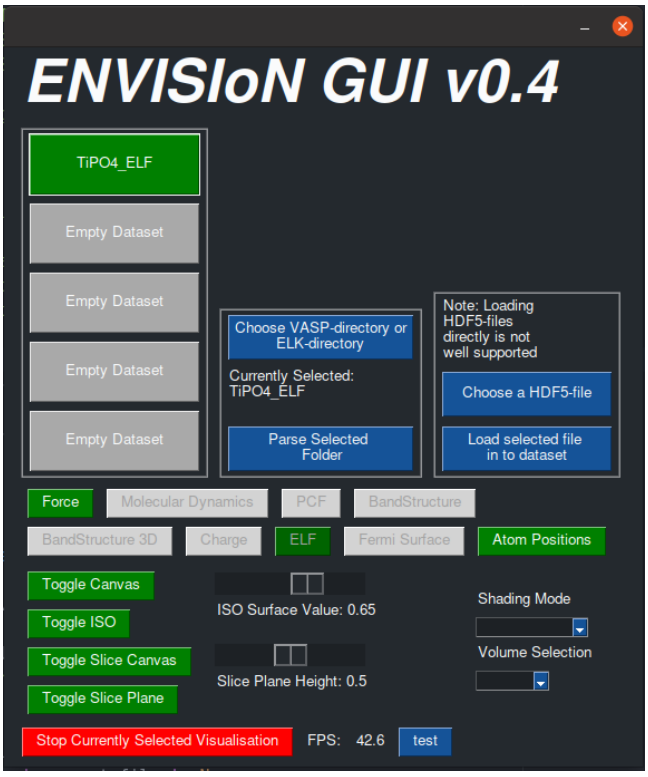
GUI:t är skrivet i Python och använder sig av paketet PySimpleGUI för att generera de grafiska elementen.

6.1 Kommunikation med envisionpy

GUI:t är uppbyggt så att alla förfrågningar gällande visualiseringar skickas via de EnvisionMain funktioner som beskrivs i 5.1.

6.2 Utseende

När GUI.py skriptet körs öppnas GUI.



Figur 31: Utseende på GUI.

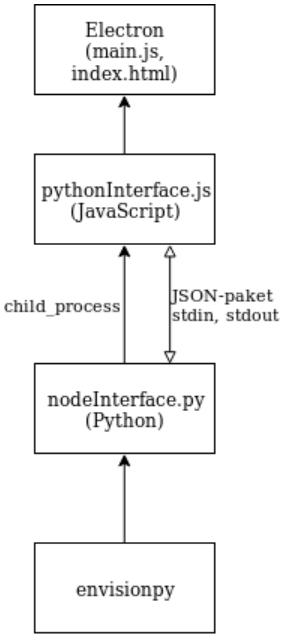
7 ENVISIoN Legacy GUI

Här följer information om ENVISIoNs gamla GUI.

Det grafiska användargränssnittet har skapats för att underlätta användandet av ENVISIoN. GUI:t möjliggör att ENVISIoN kan köras utan att öppna Inviwos användarfönster.

GUI:t är utvecklat som en websida och körs med hjälp utav Electron. Gränssnittet är skrivet med HTML, CSS, och JavaScript.

7.1 Kommunukation med envisionpy



Skiss över GUI-systemet

För att GUI-systemet ska kunna använda sig av envisionpy så används node-modulen *child_process*. *child_process* tillåter att man från JavaScript startar en pythonprocess som kör ett specificerat skript.

För att kommunicera mellan processerna så kan python-processens stdin och stdout användas. JavaScript- och Python-processerna skickar JSON-objekt kodade som strängar på detta sätt. När ett JSON-paket tas emot så parsas det och funktioner körs beroende på innehållet. Detta görs i filerna *pythonInterface.js* och *nodeInterface.py*.

Från JavaScript så startas en *child_process* som kör pythonskriptet *nodeInterface.py*. Detta skript sätter upp kommunikationen med JavaScript och initierar en instans av envisionpy.EnvisionMain.

7.1.1 JSON-paket specifikation

JSON-objekten som skickas via stdin och stdout från och till python är på följande form:

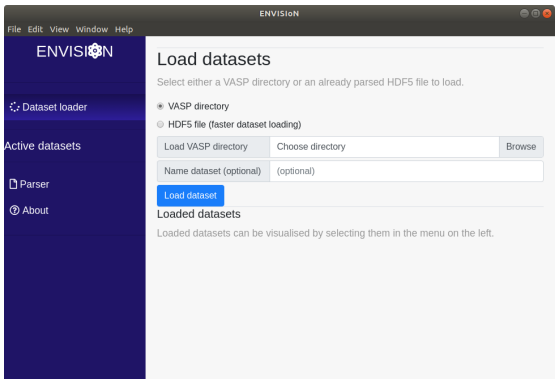
{tag: TAG_STRING, data: DATA} där

TAG_STRING: Är en sträng som specificerar vad datapaketet har att göra med. I nuläget så används följande taggar. *"envision request"* då en visualisering ska påverkas. *"parse request"* då parsning ska utföras. *"response"* då paketet innehåller svarsinformation om en utförd funktion.

DATA är någon godtycklig data. Exakt vad den innehåller varierar stort.

7.2 Utseende

När ENVISIoN-applikationen körs öppnas det grafiska gränssnittet.



GUI utseende vid start i Linux

8 Referenser

References

[1] Inviwo (hämtad 2019-05-10)

[2] API (hämtad 2019-05-16)

[3] BSD2 (hämtad 2019-05-10)

[4] C++ (hämtad 2019-01-28).

[5] Data Structures (hämtad 2019-05-17).

[6] Solid State Physics, Neil Ashcroft och David Mermin, 1976, s. 141.

[7] Git (hämtad 2019-01-28).

[8] GUI (hämtad 2019-05-10)

[9] How To Use HDF5 Files in Python (hämtad 2019-02-26).

[10] Molekyldynamik (hämtad 2021-04-19)

[11] Python (hämtad 2019-01-28)

[12] Python3 (hämtad 2019-05-10)

[13] PyQT (hämtad 2019-05-16)

[14] Python Arrays (hämtad 2019-05-21).

[15] What is UNIX? (hämtad 2019-05-21).

[16] wxPython (hämtad 2019-05-16)

[17] wxPython Documentation (hämtad 2019-05-17)

[18] Quick Start Guide (hämtad 2019-02-26).

[19] Radial distribution function, , (hämtad 2019-03-03).

[20] The HDF Group, Hierarchical Data Format, version 5 1997-2019 (hämtad 2018-01-28).

[21] The HDF Group. High Level Introduction to HDF5. 23 Sept. 2016 (hämtad 2019-01-28).

[22] Unittest (hämtad 2019-03-06).

[23] VASP (hämtad 2019-02-26).

9 Appendix A - ENVISIoNs HDF5-filstruktur