

# ENVISIoN teknisk dokumentation

© 2017 - Josef Adamsson, Robert Cranston, David Hartman, Denise Härnström, Fredrik Segerhammar. *(Teknisk dokumentation - release 1)*

© 2018 - Anders Rehult, Andreas Kempe, Marian Brännvall, Viktor Bernholtz. *(Teknisk dokumentation - release 2)*

© 2019 - Linda Le, Abdullatif Ismail, Anton Hjert, Lloyd Kizito and Jesper Ericsson. *(Teknisk dokumentation - release 3)*

© 2017 – 2019 - Rickard Armiento, Johan Jönsson

## Innehåll

<b>1</b>	<b>Bakgrund</b>	<b>2</b>
1.1	Definitioner	3
<b>2</b>	<b>Översikt av systemet</b>	<b>5</b>
2.1	Ingående delsystem	5
<b>3</b>	<b>Parsersystemet</b>	<b>6</b>
3.1	Bakgrundskunskap	6
3.1.1	VASP	6
3.1.2	HDF5-format	8
3.2	ENVISIoNs HDF5-fil	9
3.3	Skrivning till HDF5-fil	11
3.4	Inläsning av VASP-filer	13
3.4.1	Incarparser	13
3.4.2	Volymparser	14
3.4.3	Tillståndstäthetsparser	14
3.4.4	Enhetscellsparser	15
3.4.5	Parkorrelationsfunktionsparser	15
3.4.6	parse_all	16
3.5	Testning	16
<b>4</b>	<b>Visualiseringssystemet</b>	<b>16</b>
4.1	Nätverk	16
4.1.1	Nätverk för visualisering av parkorrelationsfunktionen	16
4.1.2	Bandstruktur	18
4.1.3	Tillståndstäthet	19
4.2	NetworkHandlers	20
4.2.1	VolumeNetworkHandler	20
4.2.2	UnitcellNetworkHandler	22

4.2.3	ChargeNetworkHandler	23
4.2.4	ELFNetworkHandler	26
4.2.5	ParchgNetworkHandler	26
4.2.6	Plannerade NetworkHandlers	28
4.3	Datastrukturer	28
4.3.1	Point	28
4.3.2	Function	28
4.4	Processorer	28
4.4.1	Krystallstruktur	29
4.4.2	HDF5	30
4.4.3	2D	32
4.5	Properties och widgets	35
4.5.1	IntVectorproperty	35
4.5.2	IntVectorPropertyWidget	35
<b>5</b>	<b>GUI</b>	<b>36</b>
5.1	Utseende	36
5.2	Pythonberoenden	36
5.2.1	wxPython definitioner	36
5.3	Översikt över gränssnittet	38
5.4	Hjälpklasser	39
5.4.1	GeneralCollapsible	39
5.4.2	VolumeCollapsible	40
5.4.3	SliceControlCollapsible	43
5.4.4	BackgroundCollapsible	45
5.4.5	UnitcellCollapsible	45
5.5	Parsningsmenyn	46
5.6	Visualiseringsmenyer	48
5.6.1	ChargeFrame	48
5.6.2	ELFFrame	49
5.6.3	ParchgFrame	49
5.6.4	2D-visualiseringar i grafer	51
5.7	Inviwointeraktion	54
5.7.1	parameter_utils.py	54
<b>6</b>	<b>Appendix A - ENVISIoNs HDF5-filstruktur</b>	<b>55</b>
<b>7</b>	<b>Appendix B - Sökvägar till filer relevanta för GUI:t</b>	<b>56</b>

## 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 [[Inviwo](#)].
- **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 definierar 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 [[API](#)].
- **BSD2:** En licens för öppen källkod [[BSD2](#)].
- **C++:** Ett programmeringsspråk [[C++](#)]. I Inviwo används C++ för att skriva programkod till processorer.
- **Python3:** Ett programmeringsspråk [[Python](#), [Python3](#)]. 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 [[Fermi-energi](#)].
- **Git:** Ett decentraliserat versionshanteringssystem [[Git](#)].
- **GUI:** (Graphical User Interface) Ett grafiskt användargränssnitt [[GUI](#)].

- **PyQT:** En python-modul för GUI-programmering [[PyQT](#)].
- **wxPython:** En samling av python-moduler för GUI-programmering [[wxPython](#)].
- **PKF** En förkortning på Parkorrelationsfunktionen. Vilket ibland slarvigt kan anges synonymt som RDF, Radial Distribution Function [[RadialDistributionFunction](#)].
- **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. [[HDFGroup](#), [HDFGroup2](#)].  
De övriga objektstyperna går inte igenom i detalj i detta dokument, men finns väl beskrivna i *High Level Introduction to HDF5* [[HDFGroup2](#)].
- **VASP:** The Vienna Ab initio simulation package, ett program för modellering på atomnivå, för t.ex. elektronstruktursberäkningar och kvantmekanisk molekylodynamik [[VASP](#)].
- **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 [[WhatIsArray](#)].
- **UNIX** - Benämning av en grupp operativsystem som härstammar från UNIX System from Bell Labs [[WhatIsUNIX](#)].

## 2 Översikt av systemet

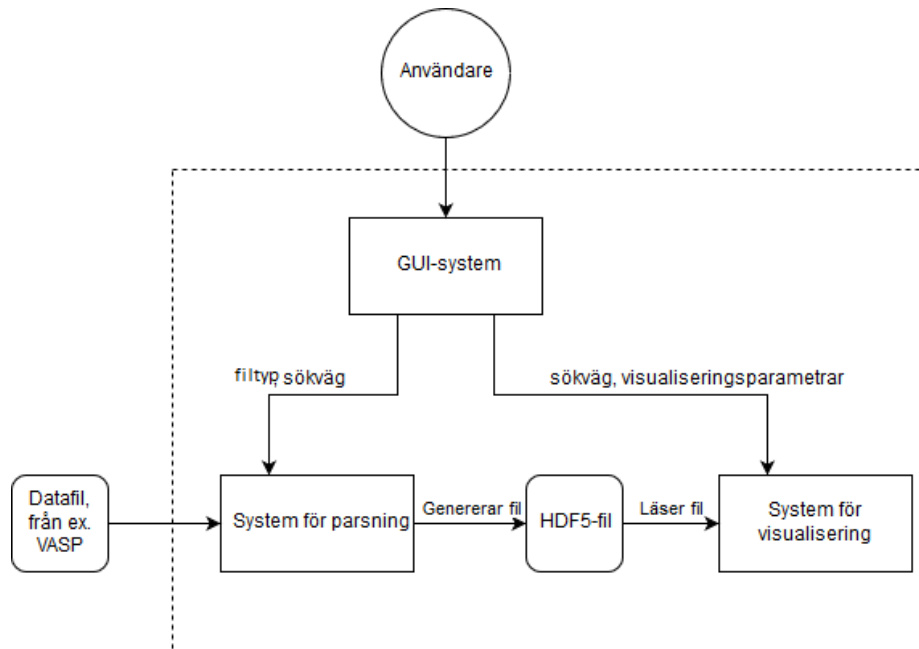


Figure 1: Enkel skiss över ENVISIoN systemet

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 parsning av datafiler från exempelvis VASP, 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 parsing-del där textfiler genererade från beräkningsprogrammet VASP skall översättas till det, med vår mjukvara, kompatibla filformatet HDF5.

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.

## 3 Parsersystemet

Parsersystemets 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 parsersystemet har implementerats, samt redogör bakgrundskunskaper om HDF5 och VASP.

### 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 beräkningsprogram som använder sig av Hartree-Fock metoden eller täthetsfunktionalteori (DFT) för att approximera en lösning för Schrödingerekvationen för mångpartikelfallet [[QuickStartGuide](#)]. 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:

- INCAR innehåller information, i form av flaggor över hur beräkningar ska ske.
- POSCAR innehåller data om enhetscellen 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

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

[illegible]

7

Bilden 2 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 HDF5-format

Vid hantering av stora mängder data, sådana genererade av beräkningsprogram som VASP, är HDF5-formatet mycket användbart. Det gör specificering 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 pekars av flera *groups* [HDFGroup2].

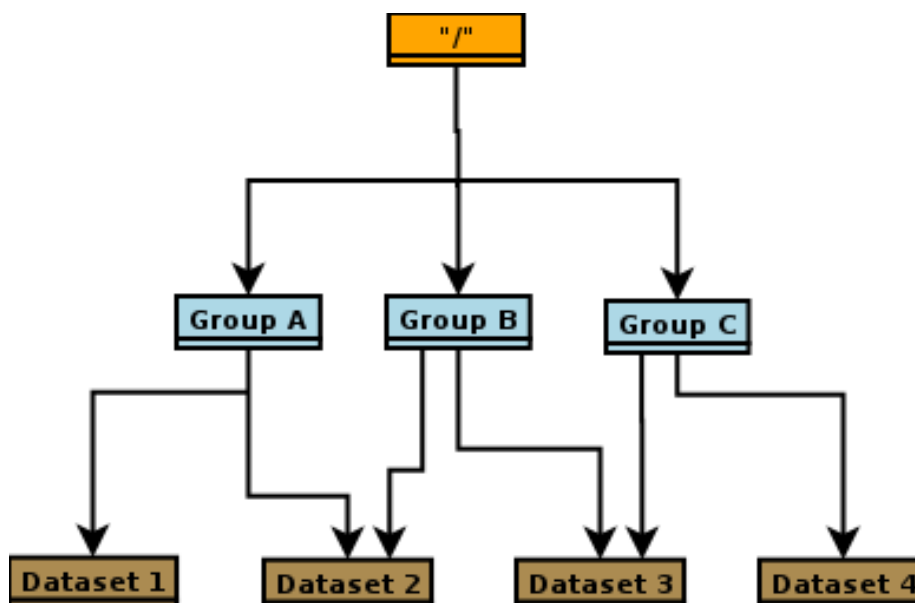


Figure 3: Schematisk bild över HDF5 struktur

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 minneshantering av ett dataset. I dess defaultläge exempelvis är dataset sparade kontinuerligt. Slutli-





I diagram 5 nedan representeras olika grupper (*groups*) av lådor med pilar (förutom lådorna vars brödtext är angiven i parentes), 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 3.1.2.

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 5 saknar viss information för DOS. 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 läsligt namn på fältet.
- QuantitySymbol är symbol som representerar storheten.
- Unit är storhetens fysikaliska enhet.

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 flaggan. 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 behandlar 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 rubrik sec:skrivning till 4.4.2. 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 parser-systemet. 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 grundämnes-beteckning 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 gittervektorer i ett dataset med namn *basis*.

Parametrar:

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

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. 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:** Skalar 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* [[dict](#)]. 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* [[dict](#)]. 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

### 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 parser-systemet gör. Typiskt återfinns en pythonmodul för varje egenskap hos ett system som ska parsas. Nedan listas alla sådana moduler.

#### 3.4.1 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: `envision.parser.vasp.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.

### 3.4.2 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: `envision.parser.vasp.charge(h5file, vasp_dir)`

Funktionsanrop vid parsning av ELFCAR-data: `envision.parser.vasp.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.

### 3.4.3 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. Flaggora 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 incarpaseren 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: `envision.parser.vasp.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.

#### 3.4.4 Enhetscellsparser

Enhetscellsparsen 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 parsen i första hand i POTCAR och i andra hand i POSCAR.

Funktionsanrop: `envision.parser.vasp.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.

#### 3.4.5 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: `envision.parser.vasp.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.

### 3.4.6 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 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. Mappen innehåller för tillfället enbart tester för parsersystemet för PKF (det är både skrivning och läsningsfunktioner som testas). Testfiler för PKF parsern skapades med hjälp av pythonmodulen *unittest* [Unittest]. Detta test testar bland annat undantagshanteringen och viktiga returvärden hos olika funktioner hos parsersystemet för PKF. Testet kontrollerar exempelvis att parsersystemet kan hantera PCDAT-filer av olika utseenden.

Test för parsersystemet för PKF har implementerats med en testfil med namnet *test\_paircorrelation.py* samt en mapp vid namn *testdata*. I *testdata* finns det olika mappar med VASP-filer för olika system, 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 visualiseringssystemet 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 Nätverk för visualisering av parkorrelationsfunktionen

Ett nytt skript med processorer för visualisering av parkorrelationsfunktionen har utvecklats. Det nätverk som skapas av skriptet visas i figur 6.



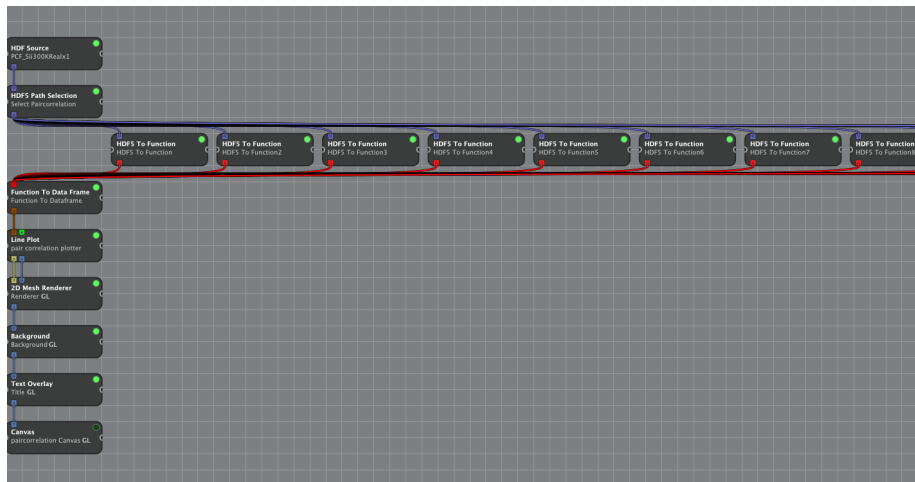


Figure 6: Nätverk för parkorrelationsfunktion.

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 processorn. 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 6 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 6. Den 2D-grafen som genereras av nätverken visas i figur 6.

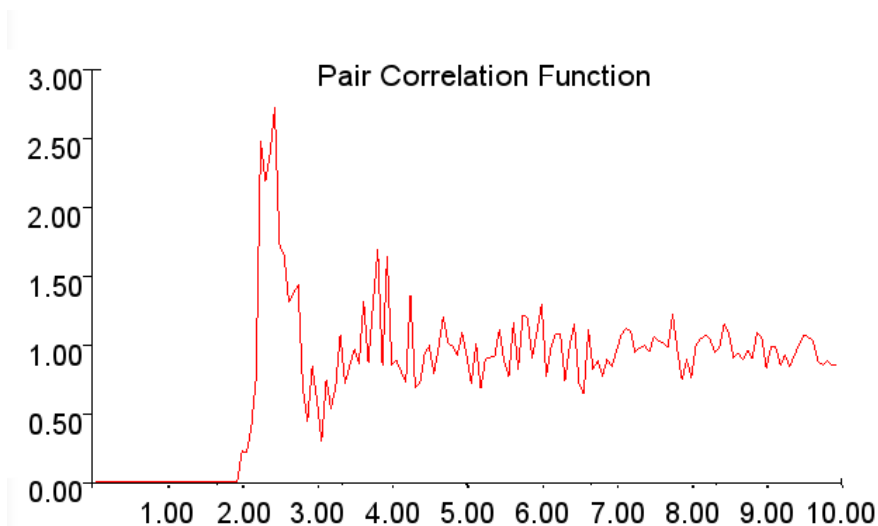


Figure 7: 2D-graf från parkorrelationsfunktion.

### 4.1.2 Bandstruktur

Nätverket startar med att öppna en HDF5-fil. Därefter kontrolleras om det finns en sökväg med namnet *Fermienergy* i filen, skulle sökvägen existera läggs en processor till som extraherar det värdet sparad i ett dataset. Sedan navigeras det genom HDF5-filen till platsen där alla band är sparade. Alla dessa band sparas i en DataFrame där varje kolumn innehåller alla värden för ett band. Skulle Fermienergin finnas i HDF5-filen kommer det värdet att subtraheras från alla värden i DataFrame. Sedan ritas alla band upp i en graf med samma värden på x-axeln. y-axeln får en rubrik med lämplig text, antingen *Energy* eller *Energy - Fermi energy*, för att sedan visualiseras i ett fönster.

Med den kunskapen gruppmedlemmarna besitter idag skulle inte samma tillvägagångssätt för visualiseringen tagits. Kontrollen av fermienergi skulle ske redan i parsern för bandstrukturen. Skulle Fermienergin hittas, subtraheras värdet redan innan all data för de olika banden lagras i ett dataset.

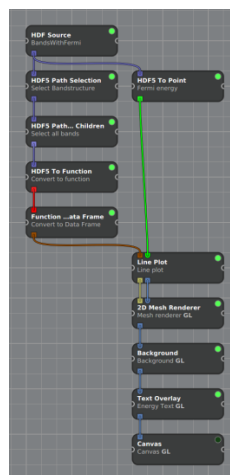
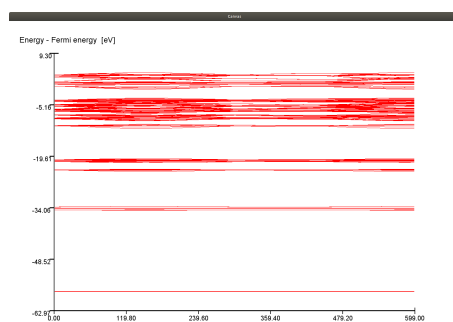
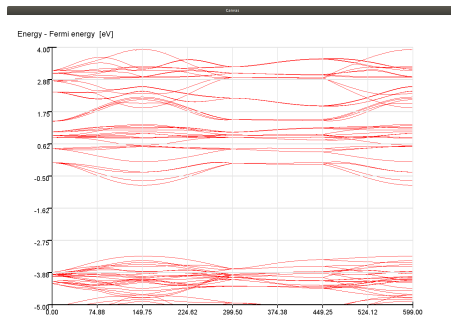


Figure 8: Nätverk för visualisering av bandstruktur.





Visualisering av bandstruktur för  $\text{TiPO}_4$ . (vänster) Visualisering av hela bandstrukturen som skapas när nätverket evalueras. (höger) En förstoring där endast energin mellan  $-4$  eV och  $5$  eV visas.

#### 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 4.1.3 visar total tillståndstäthet för titanfosfat,  $\text{TiPO}_4$ . Figur 9 visar nätverket som ger 2D-grafen i figur 4.1.3. Användaren kan även välja att visa en 2D-graf av den partiella tillståndstätheten med hjälp av samma nätverk.

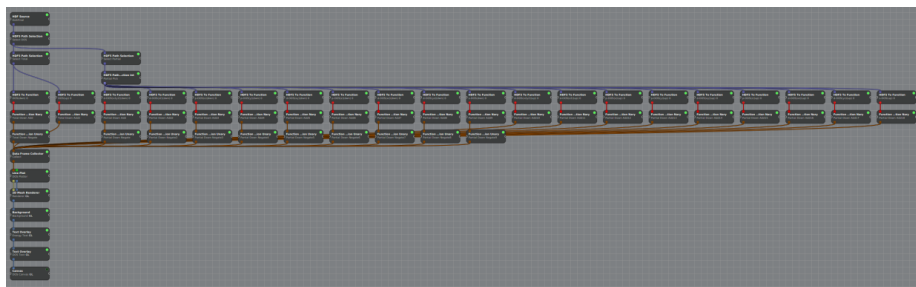
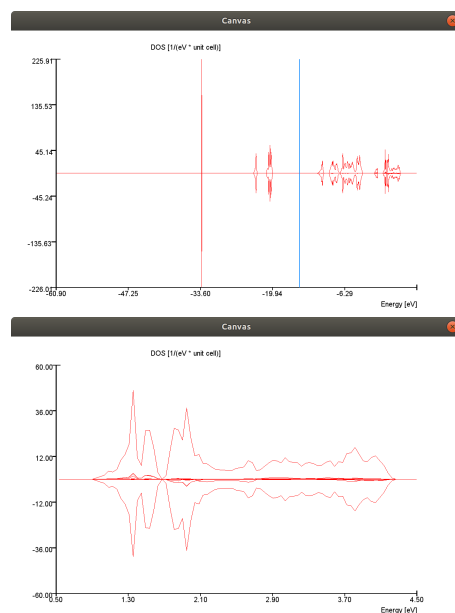


Figure 9: Nätverk för visualisering av tillståndstäthet.



*Visualisering av tillståndstätheten för TiPO4. (vänster) Visualisering av den totala tillståndstätheten med en blå hjälplinje för avläsning. (höger) Förstoring av visualiseringen av den totala tillståndstätheten.*

## 4.2 NetworkHandlers

För att andra delsystem enkelt ska kunna sätta upp och ändra parametrar i inwiwonätverken 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.

### 4.2.1 VolumeNetworkHandler

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

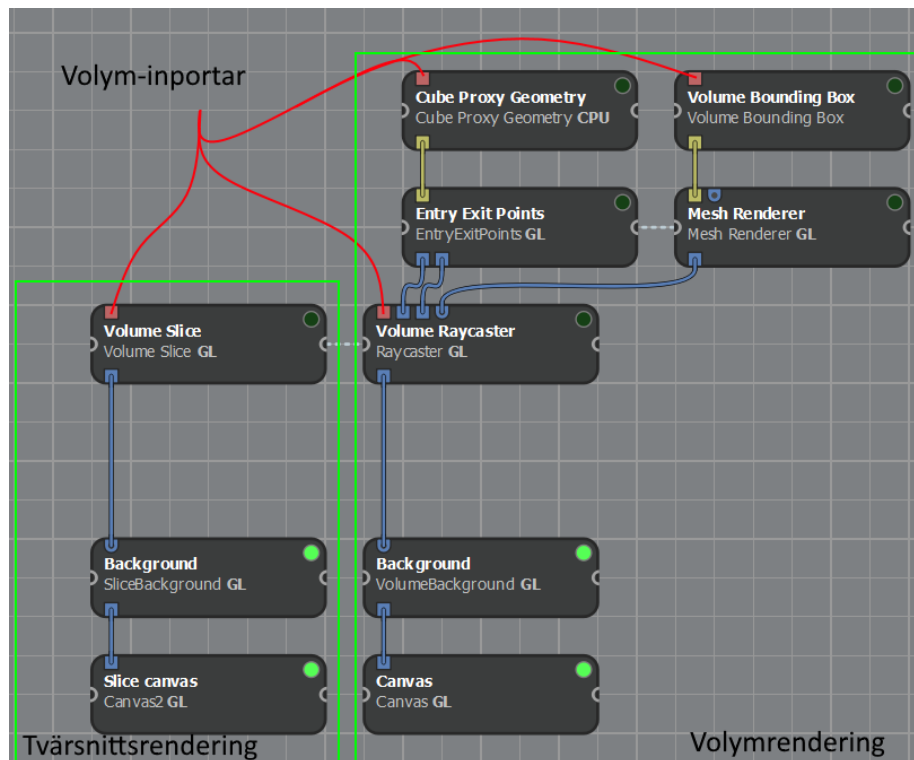


Figure 10: Nätverket som byggs upp då en VolumeNetworkHandler-instans initieras.

Som visas i figur 10 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 10 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 10 kommer att generera bilddata av den parallelepiped 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. Viktiga funktioner i *VolumeNetworkHandler*:

- **setup\_volume\_network:** Bygger upp nätverket som visat i figur 10. Notera att volymimportarna ej är anslutna.

- **connect\_volume:** Ansluter alla volym-inportarna till en specificerad volym-outputport. Detta måste göras innan en visualisering ska köras, annars har nätverket ingen volymdata att visualisera.
- **show\_volume\_dist:** Ritar upp ett nytt fönster med ett histogram över volymdistributionen i en specificerad HDF5-fil.
- **toggle\_slice\_canvas:** Tar bort eller lägger till *Slice Canvas*-processorn. För att aktivera eller inaktivera tvärsnittsrenderingen.

Förutom dessa funktioner har *VolumeNetworkHandler* funktioner för att ändra properties hos de processorer den initierat.

#### 4.2.2 UnitcellNetworkHandler

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

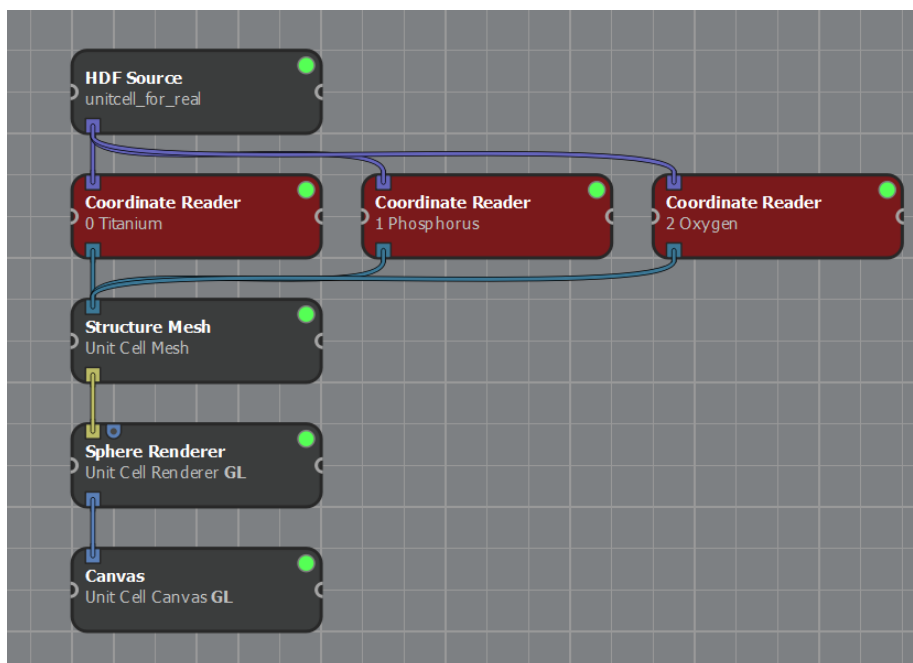


Figure 11: Nätverket som byggs upp då en UnitcellNetworkHandler-instans initieras.

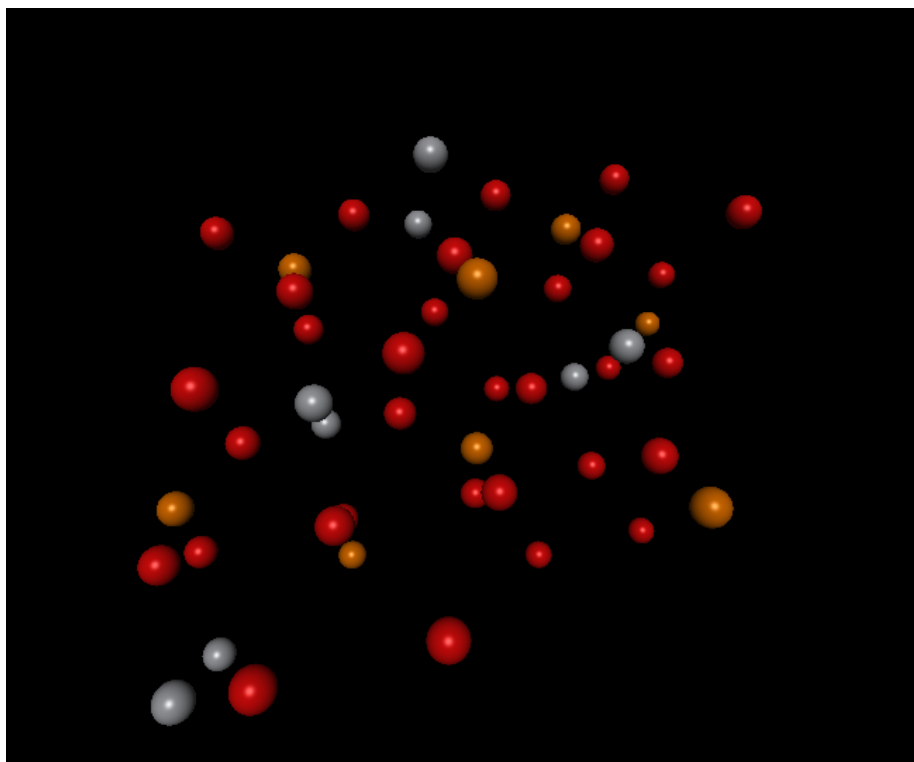


Figure 12: Resultande bild från nätverk i figur 11

*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. Koordinatdata 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*.

Viktiga funktioner i *UnitcellNetworkHandler*:

- **setup\_unitcell\_network:** Bygger upp nätverket som visat i figur 11.

Förutom dessa funktioner har *UnitcellNetworkHandler* funktioner för att ändra properties hos de processorer den initierat.

#### 4.2.3 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 *UnitcellNetworkHandler* och *VolumeNetworkHandler* för att hantera atompositions- respektive volymrenderingsaspekten av visualiseringen.

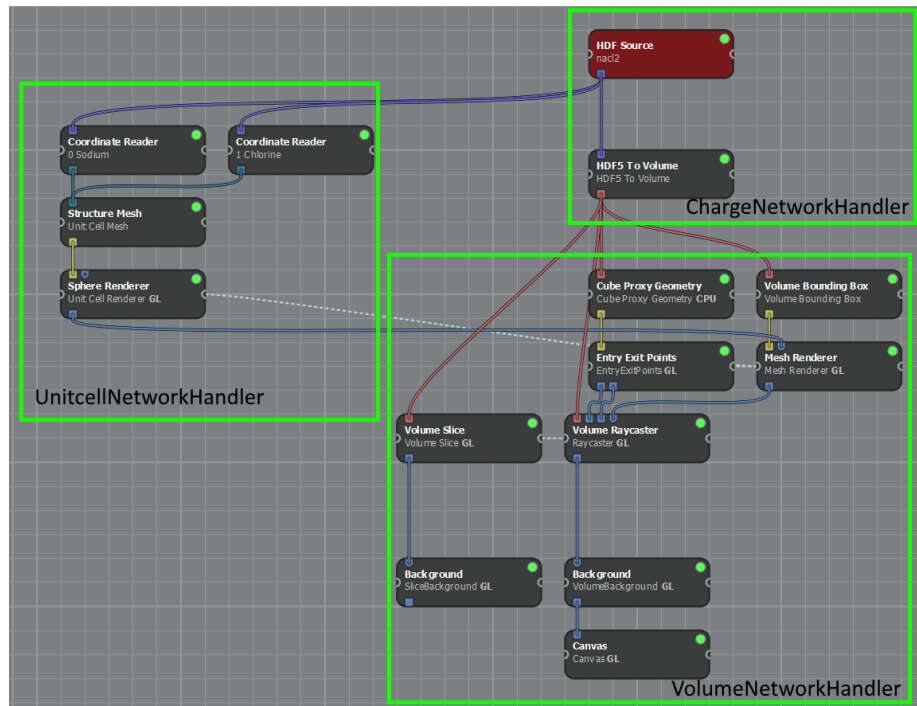


Figure 13: Nätverket som byggs upp då en ChargeNetworkHandler-instans initieras och HDF5-filen innehåller unitcell-data.



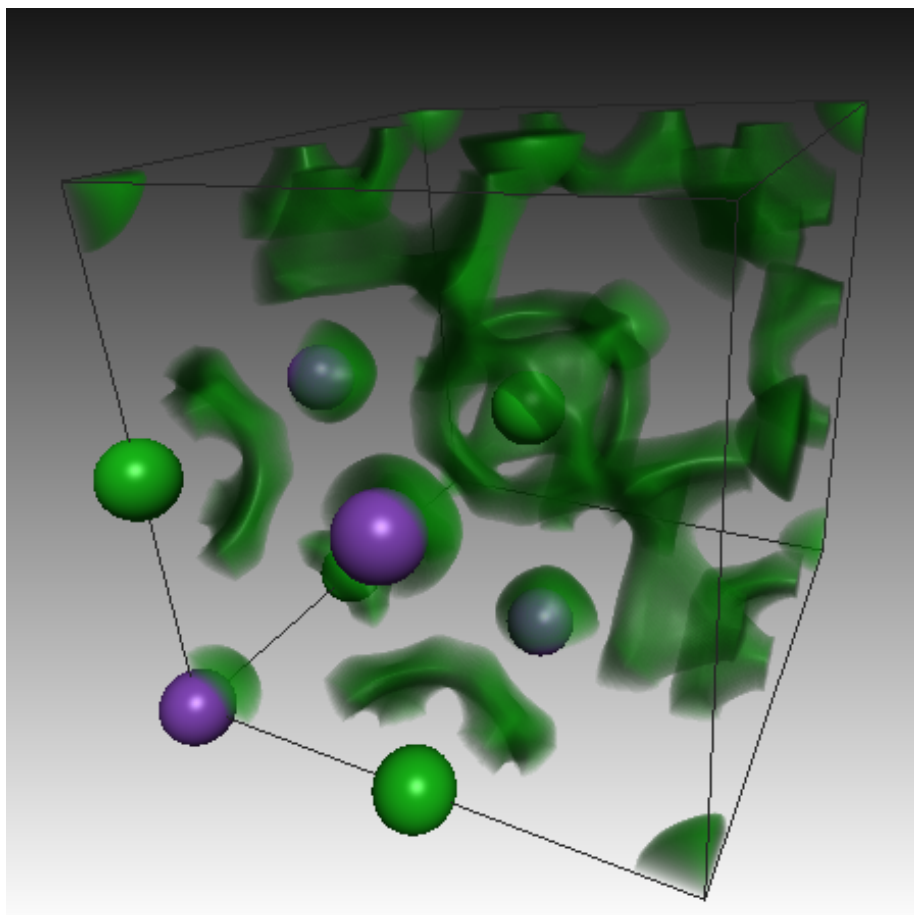


Figure 14: Resultande bild från nätverk i figur 13.

*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 initiera sina superklasser *VolumeNetworkHandler* och *UnitcellNetworkHandler*. Dessa sätter upp sina delar av nätverket som indikerat i figur 13.

En *HDF5 Source* sätts upp, denna ansluts till unitcell-delen av nätverket. En *HDF5 To Volume* sätts upp och ansluts 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.

Bilddatautporten från *Sphere Renderer* ansluts till *Mesh Renderer*. Detta gör att bilderna från de två processorerna slås samman och att både atompositioner och volymdata renderas i samma fönster. Även *Sphere Renderer*-processorns *Camera*-property ansluts till *Mesh Renderer* för att kameravinklarna ska vara identiska.

*ChargeNetworkHandler* inaktiverar som standard *Slice Canvas*:en och *Unitcell Canvas*:en. Dessa kan återaktiveras via sina respektive funktioner igen, exempelvis då en knapp i det grafiska gränssnittet klickas på.

Om HDF5-filen inte innehåller unitcell-data så kan *UnitcellNetworkHandler* inte initieras och kastar ett exception. Endast volymrenderingsdelen av visualiseringen initieras då och atompositionsvisualiseringen ignoreras.

Viktiga funktioner i *ChargeNetworkHandler*:

- **setup\_charge\_network:** Bygger upp nätverket som visat i figur 13.
- **get\_available\_bands:** Returnerar en lista med de möjliga bandvalen som är möjliga i HDF5-filen.

Förutom dessa funktioner har *ChargeNetworkHandler* funktioner för att ändra properties hos de processorer den initierat.

#### 4.2.4 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.

#### 4.2.5 ParchgNetworkHandler

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

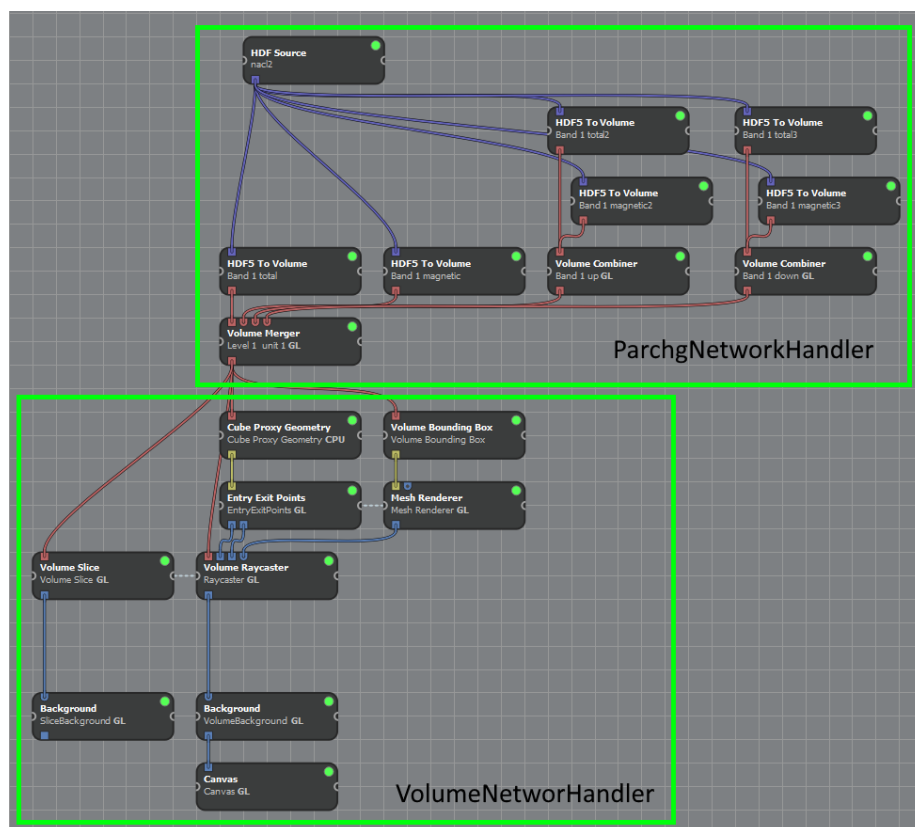


Figure 15: Nätverket som byggs av ParchgNetworkHandler (utan atompositionsrendering).

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.

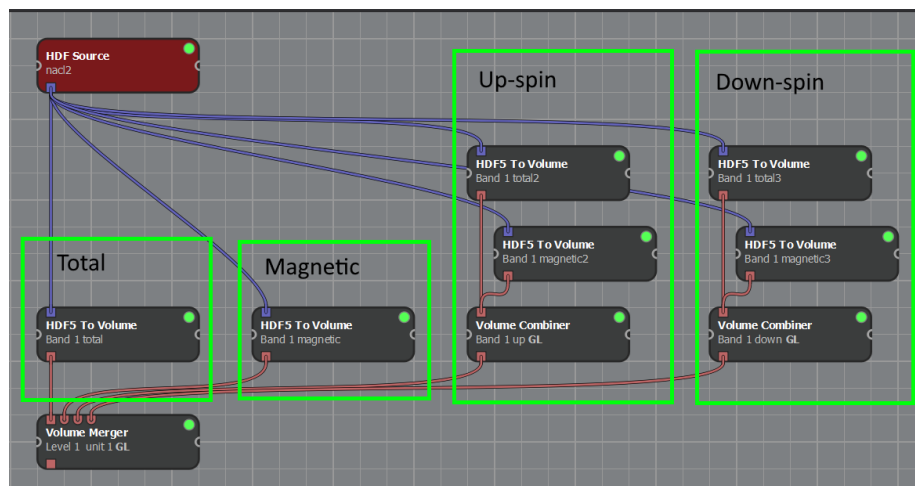


Figure 16: Exempel på nätverkets volymdatakälla med ett bandval för varje läge.

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

Volymdata från de olika bandvalen kombineras sedan med en *Volume Merger*-processor. *Volume Merger* kan summera 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. Volymdata från den sista *Volume Merger* skickas sedan till volymrenderingsnätverket.

Viktiga funktioner i *ParchgNetworkHandler*:

- **setup\_hdf5\_source:** Initierar *HDF Source*-processorn
- **setup\_band\_processors:** Sätter upp nätverket som hämtar ut och kombinerar volymdata baserat på bandval och lägen. Funktionen kan kallas flera gånger efter att nätverket har startats för att byta bandval och lägen.

#### 4.2.6 Plannerade NetworkHandlers

NetworkHandler-klasser har inte skrivits för alla visualiseringar, de gamla visualiseringsskripten används fortfarande för att starta de tvådimensionella visualiseringarna. För att underlätta underhåll av systemet så bör dessa färdigställas i framtiden. I nuläget finns funktionaliteten för att starta och styra dessa visualiseringar utspridd mellan flera olika filer på olika platser.

- **LinePlotNetworkHandler:** Skulle hantera den generella delen av en 2D-graf visualisering. Styr allt som har med 2D-grafen att göras, som skalning, axlar på grafen, med mera.
- **BandstructureNetworkHandler:** Ärver LinePlotNetworkHandler och sätter upp den specifika delen för bandstructure visualiseringen. Skulle styra HDF5-källan och bandval.
- **DOSNetworkHandler:** Ärver LinePlotNetworkHandler och UnitcellNetworkHandler och sätter upp den specifika delen för tillståndstäthets visualiseringen. Skulle styra HDF5-källan och val av tillstånd.
- **PCFNetworkHandler:** Ärver LinePlotNetworkHandler och sätter upp den specifika delen för parkorrelationsfunktions visualiseringen. Skulle styra HDF5-källan och val av tidssteg.

### 4.3 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.

#### 4.3.1 Point

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

#### 4.3.2 Function

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

### 4.4 Processorer

För att kunna omvandla den data som översatts från VASP-beräkningar till en visualisering krävs processorer som utför specifika uppgifter. Figur 2 demonstrerar ett typiskt utseende på en processor.

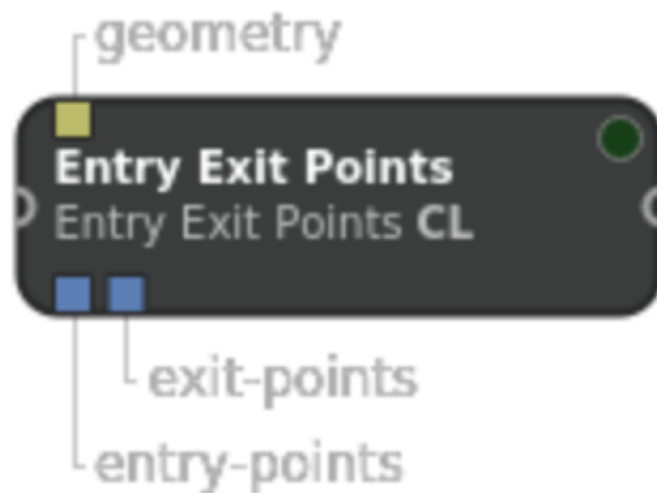


Figure 17: Exempel på en processors utseende.

De färgade rutorna till vänster på processorn i figur 17 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.

#### 4.4.1 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. Utdata från CoordinateReader är  $n$  stycken `vec3`.

Inport:

- `Hdf5::Inport inport_`

Utport:

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

Properties:

- `StringProperty path_`

**StructureMesh** Atompositionsdata 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 radiieproperty 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

#### 4.4.2 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 utökad 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\_
- IntSizeTPProperty 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\_
- IntSizeTPProperty 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 HDF5Source-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\_, metadata 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:

- DataOutput< std::vector<Point> > pointVectorOutput\_

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:

- DataInput< hdf5::Handle, 0, true> hdf5HandleFlatMultiInput\_

Utport:

- DataOutput< std::vector<Function> > functionVectorOutput\_

Properties:

- BoolProperty implicitXProperty\_
- OptionPropertyString xPathSelectionProperty\_
- OptionPropertyString yPathSelectionProperty\_
- BoolProperty xPathFreezeProperty\_
- BoolProperty yPathFreezeProperty\_
- IntSizeTProperty xNamePrependParentsProperty\_
- IntSizeTProperty yNamePrependParentsProperty\_

#### 4.4.3 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 ( $g_i(x) = 1/f_i(x)$ ). Operatören appliceras på funktioner på inporten, en i taget, och skriver respektive resultat på utporten.

Inport:

- DataFrameInput dataframeInput\_

Utport:

- DataFramOutput dataframeOutput\_



Properties:

- `OptionPropertyString operationProperty_`

**FunctionOperationNary** Denna processor implementerar en operator med variabel aritet (engelska n-ary), antingen addition/summa ( $g(x) = \sum_i f_i(x)$ ) eller multiplikation/produkt ( $g(x) = \prod_i f_i(x)$ ). Operatoren 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:

- `DataFramOutput dataframOutput_`

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 linjegrav. 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 Properties och widgets**

### **4.5.1 IntVectorproperty**

Denna property består av en vektor av int-värden.

### **4.5.2 IntVectorPropertyWidget**

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

## 5 GUI

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

### 5.1 Utseende

Det grafiska användargränssnittet skall byggas upp av en grupperingsmeny med möjlighet att fälla ut undermenyer. Fönstret öppnas med menyerna infällda. För att fälla ut en meny skall pilen till vänster om rubriken klickas på. Exemplet nedan visar hur parser-menyn hålls infälld medan visualiserings-menyn är utfälld.

### 5.2 Pythonberoenden

Då Pythons standardbibliotek inte innefattar all, till GUI:t, önskad funktionalitet krävs installation och importering av andra bibliotek och moduler. De bibliotek som använts vid utvecklandet är:

- H5py
- Matplotlib
- Numpy
- wxPython

H5py är det bibliotek som används för läsning och skrivning till hdf5-filer. Det är framförallt parser-systemet som har användning av detta bibliotek. Under utvecklingen av parameterstyrning hos visualiseringar lades styrning av överföringsfunktionspunkter till. I Inviwo kan ett histogram, en widget, åskådliggöras för att se hur volym-datan är distribuerad för att kunna placera dessa punkter relevant. Då denna widget ligger gömd i Inviwo, vilket gör det svårt att utnyttja denna funktionalitet, underlätade ett externt bibliotek visningen av histogram. Matplotlib möjliggör histogram-funktionen genom modulen pyplot. Numpy-biblioteket innehåller bland annat vetenskapliga beräkningar samt behållare för lagring och behandling av data. Det bibliotek som utgör den stora delen av det utvecklade användargränssnittet är wxPython.

#### 5.2.1 wxPython definitioner

GUI-biblioteket wxPython innehåller ett stort antal klasser och funktioner. Beroende på vilket funktionalitet som vill uppnås implementeras användning av vissa delar av wxPython. De klasser som använts under utvecklingen av ENVISIoN listas nedan [[wxPythonDoc](#)].

- **wx.App:** Klass som möjliggör applikationskörning.
- **wx.Frame:** Klassen för fönstret som det grafiska användargränssnittet finns i.
- **wx.Panel:** Klass som etablerar en del av fönstret där kontroller och element kan placeras.

- **wx.lib.scrolledpanel.ScrolledPanel:** En panelklass som möjliggör skrollning och automatisk skroll-uppdatering.
- **wx.Sizers:** En abstrakt klass som används för att placera underfönster i huvudfönstret.
  - **wx.BoxSizer:** En underklass till wx.Sizer som har en enkel geometrisk form.
- **wx.CollapsiblePane:** Detta är en klass för kollapsbara menyer, som expanderar och kollapsar vid musklick.
- **wx.MessageDialog:** Klass för att visa meddelanden för användaren.
- **wx.StaticText:** Klass för att visa fast text i gränssnittet.
- **wx.Button:** Klass för att skapa knappar och ge dessa funktion vid klick.
- **wx.TextCtrl:** Klass för inmatning och läsning av text.
- **wx.Choice:** Klass för skapande och visande av lista samt möjligheten av välja objekt i lista.
- **wx.ComboBox:** Klass som kombinerar funktioner för wx.Choice och wx.TextCtrl
- **wx.DirDialog:** Klass för att öppna filhanterare och i den välja en mapp.
- **wx.FileDialog:** Klass för att öppna filhanterare och i den välja en fil av viss filtyp.
- **wx.Slider:** Klass för att skapa skjutreglage.
- **wx.CheckBox:** Klass för att skapa kryssrutor med på/av alternativ.
- **wx.ColourPickerCtrl:** Klass för att välja färg genom ett separat fönster med färgskalor.
- **wx.Colour:** Färgklass med RGB-värde som innehåller.
- **wx.Size:** Storleksklass med pixelstorlek i höjdled och bredd.
- **wx.LogError:** Inbyggd felhantering i wxPython.
- **Event-hantering:** Hantering av händelser i GUI:t, såsom knapptryck, reglageändringar och textändringar.
  - **Bind-funktionen:**
  - **wx.EVT\_COLLAPSIBLEPANE\_CHANGED:** Signal som skickas av wx.CollapsiblePane vid kollaps eller expansion.
  - **wx.EVT\_BUTTON:** Signal som skickas av wx.Button vid knapptryck.
  - **wx.EVT\_TEXT\_ENTER:** Signal som skickas av textfälten då enter-knappen trycks på tangentbordet.
  - **wx.EVT\_COMBOBOX:** Signal som skickas av wx.ComboBox när objekt i lista väljs.

- **wx.EVT\_TEXT:** Signal som skickas av wx.TextCtrl när texten ändras i rutan.
- **wx.EVT\_SLIDER:** Signal som skickas av wx.Slider när reglaget flyttas.
- **wx.EVT\_CHOICE:** Signal som skickas av wx.Choice när ett objekt väljs i listan.
- **wx.EVT\_KILL\_FOCUS:** Signal som skickas när ett objekt tappat fokus.
- **wx.EVT\_COLOURPICKER\_CHANGED:** Signal som skickas när en färg har valts i färgnateringsfönstret.

### 5.3 Översikt över gränssnittet

När ENVISIoN-applikationen körs öppnas det grafiska gränssnittet. I figur 5.3 visas hur GUI:t ser ut i Windows och i Linux vid start.



*Startläge för ENVISIoN, Windows och Linux.*

GUI:t är utvecklat som en wx.App. Denna klass har en wx.Frame, vilket är hela det fönstret som visas. Detta fönster har i sin tur en wx.lib.scrolledpanel.ScrolledPanel vilket är en panel som möjliggör skrollning och att placera objekt och lägga till underfönster i GUI:t. I fönsterklassen finns även två kollapsbara menyer för parsning och visualisering. Det är dessa två som är synliga i figur 5.3.

I appendix A illustreras sökvägarna, utgående från toppmappen *ENVISIoN* till de filer som är relevanta för GUI:t.

## 5.4 Hjälpklasser

Det finns många likheter mellan vad som ska styras från gränssnittet mellan de olika visualiseringarna. För att abstrahera koden och för att minska kodupprepning så har vissa klasser skrivits som kan användas till olika visualiseringsmenyer.

### 5.4.1 GeneralCollapsible

För att skapa de kollapserbara menyerna som gränssnittet i stor del bygger på så har en klass skapats för det kallad *GeneralCollapsible*. Klassen ärver wxPythons *wx.CollapsiblePane* och får mycket av sin funktionalitet därifrån, men funktioner har lagts till för att kunna bygga strukturer där kollapserbara menyerna har egna kollapserbara menyerna under sig.

Klassen används aldrig direkt utan ärvs istället av andra klasser som använder sig av den för att bygga upp sin del av gränssnittet.

Viktiga funktioner:

- **add\_item:** Funktionen används för att lägga till en godtycklig wxPython-widget under menyens sizer. Notera att denna funktion inte ska användas för att lägga till *GeneralCollapsible*-element.
- **add\_sub\_collapsible:** Används för att lägga till ett annan instans av en *GeneralCollapsible* klass under menyn.
- **on\_collapse:** Funktionen som kallas då man fäller ut eller in menyn. Det enda funktionen gör är att kalla på *update\_collapse*-funktionen. Funktionen kan överridas i subklasser men det är då viktigt att även de kallar på *update\_collapse*, annars så uppdateras inte layouten korrekt.
- **update\_collapse:** Denna funktion ser till att alla element flyttas och ändrar storlek korrekt efter att en meny har fällts ut eller in.

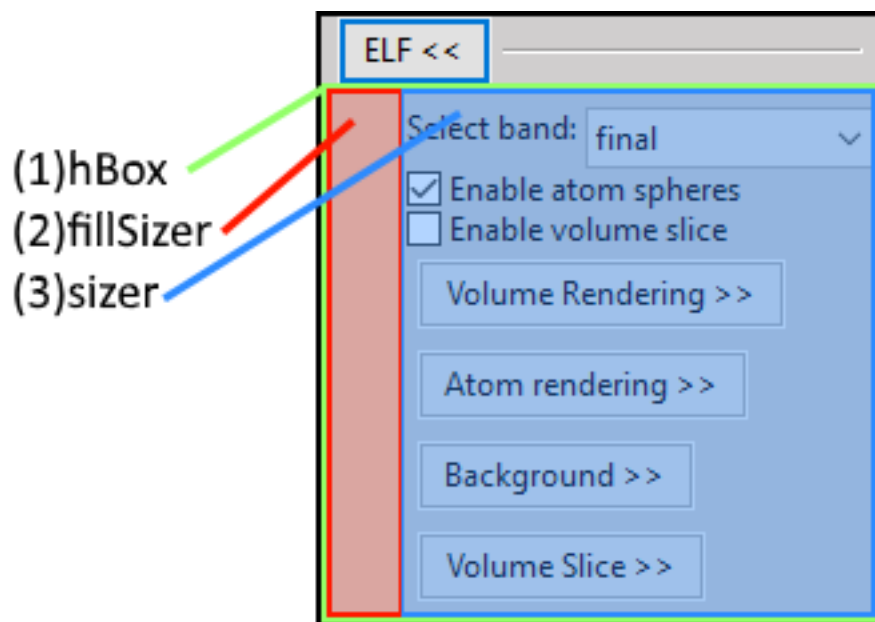


Figure 18: GeneralCollapsibles sizer struktur.

Ett *GeneralCollapsible*-objekts form då den är tillagd på ett fönster byggs upp av tre sizer-objekt, som visat i figur 18. *hBox* är en horisontell sizer som sätts till *wx.CollapsiblePanels* huvudsizer. På denna läggs *fillSizer* och *sizer* till. *fillSizer* fungerar bara för att fylla ut vänsterkanten så att underobjekt till menyn förskjuts en bit åt höger. *sizer* är den sizer som underobjekt sedan kommer att läggas till på.

#### 5.4.2 VolumeCollapsible

En kollapserbar meny för att styra en volymrenderingsaspekten av en visualisering. Denna används i både laddningstäthets- och i ELF-menyn (och bör även användas till partiell laddningstäthet då den läggs till i gränssnittet).

Klassen interagerar med ett *VolumeNetworkHandler*-objekt för att styra den del av inwonätverket som är relevant. *VolumeCollapsible* initierar inte sin egen *VolumeNetworkHandler* utan variabeln *networkHandler* måste sättas utifrån klassen innan den kan användas.

*VolumeCollapsible* låter en användare göra följande:

- Välja *shading mode* för volymrenderingen.
- Lägg till och ta bort transferfunktionspunkter med godtyckligt värde, transparens, och färg.
- Välja fullständig transparens före den lägsta transferfunktionspunkten.
- Visa ett histogram över volymdensitetsdistributionen i den aktiva volymdatan.
- Ladda och spara aktiv transferfunktion.



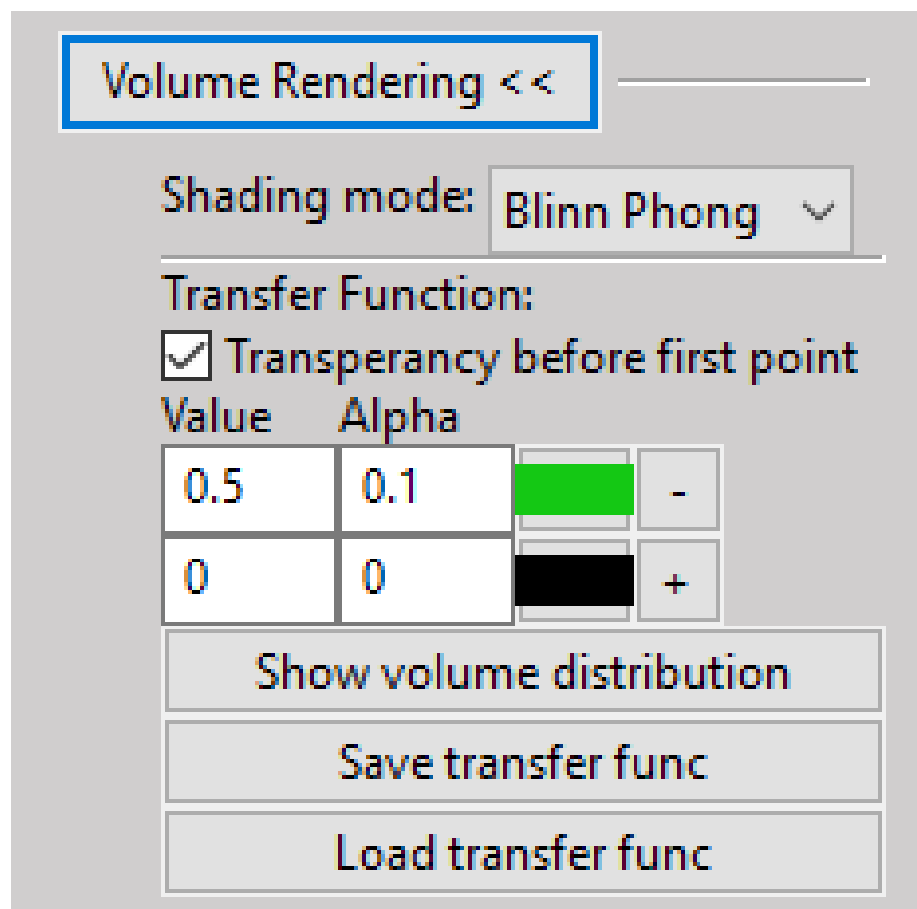


Figure 19: VolumeCollapsible, sizer-struktur.

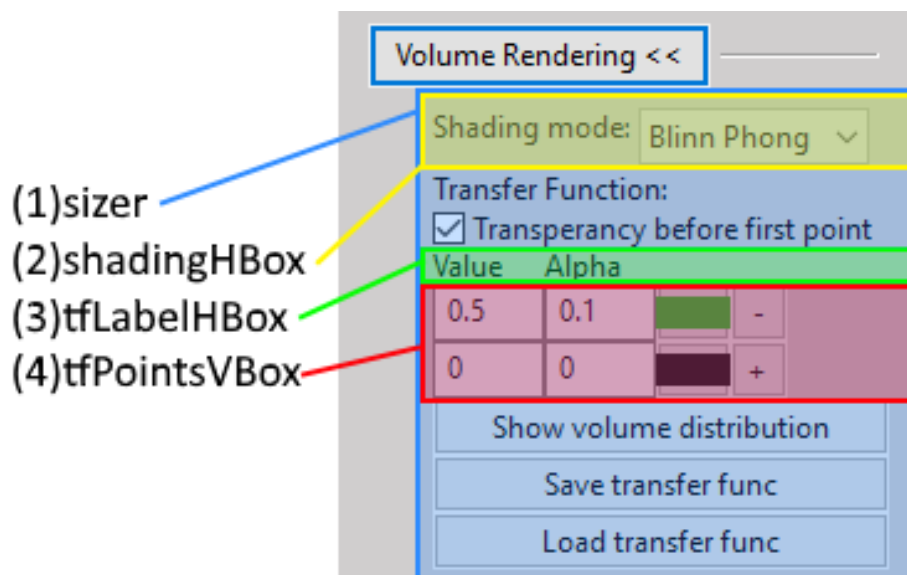


Figure 20: VolumeCollapsible, sizer-struktur.

**TFPointWidget:** För att förenkla och abstrahera GUI-strukturen så har en klass TFPointWidget definierats. Widgeten har två *wx.TextCtrl* textfält för att välja värde och transparens för punkten, en *wx.ColourPicker* för att välja färg och en knapp för att ta bort eller lägga till punkter. Klassen interagerar inte direkt med inwiwonätverket utan är bara till för att abstrahera GUI-strukturen. Funktioner finns för att hämta ut värden från textfält och färg.



Figure 21: Utseende för en TFPointWidget.

Viktiga funktioner i *VolumeCollapsible*:

- **add\_tf\_point:** Lägger till en transferfunktionspunkt i inwiwonätverkets raycasterprocessor. Lägger också till ett nytt *wx.TextCtrl*-element under *tfPointsVBox*-sizern. Binder också callbacks för *TFPointWidget*-objektets events.
- **remove\_tf\_point:** Tar bort en transferfunktionspunkt i inwiwonätverkets raycasterprocessor. Tar bort motsvarande *TFPointWidget*-objektet.
- **update\_tf\_point:** Ändrar en redan existerande transferfunktionspunkt. Detta görs genom att punkten först tas bort och en ny sedan läggs till med uppdaterade värden. Kallas då information i textfälten i någon av de tillagda *TFPointWidget*-objekten ändras.
- **set\_tf\_point\_color** Ändrar färgen för en transferfunktionspunkt. Kallas då färgen ändras i någon av de tillagda *TFPointWidget*-objekten.

- **update\_mask:** Sätter en så kallad *mask* på transferfunktionen så att bara värden över den första transferfunktionspunkteten är synliga.
- **load\_transfer\_function:** Öppnar ett dialogfönster för att välja en fil. Försöker sedan att transferfunktionsdata från den filen.
- **save\_transfer\_function:** Öppnar ett dialogfönster för att välja en fil. Skriver sedan transferfunktionsdata till den filen.

Övriga funktioner i klassen är callbacks för olika events som endast kör motsvarande funktion i *VolumeNetworkHandler*-objektet efter användarinteraktion.

### 5.4.3 SliceControlCollapsible

En kolliderbar meny för att styra en tvärsnittsaspekten av en visualisering. Denna används i både laddningstäthets- och i ELF-menyn (och bör även användas till partiell laddningstäthet då den läggs till i gränssnittet).

Klassen interagerar med ett *VolumeNetworkHandler*-objekt för att styra den del av inivonätverket som är relevant. *SliceControlCollapsible* initierar inte sin egen *VolumeNetworkHandler* utan variabeln *networkHandler* måste sättas utifrån klassen innan den kan användas.

*SliceControlCollapsible* låter en användare göra följande:

- Välja normal för tvärsnittsplanet.
- Välja tvärsnittsplanets höjd.

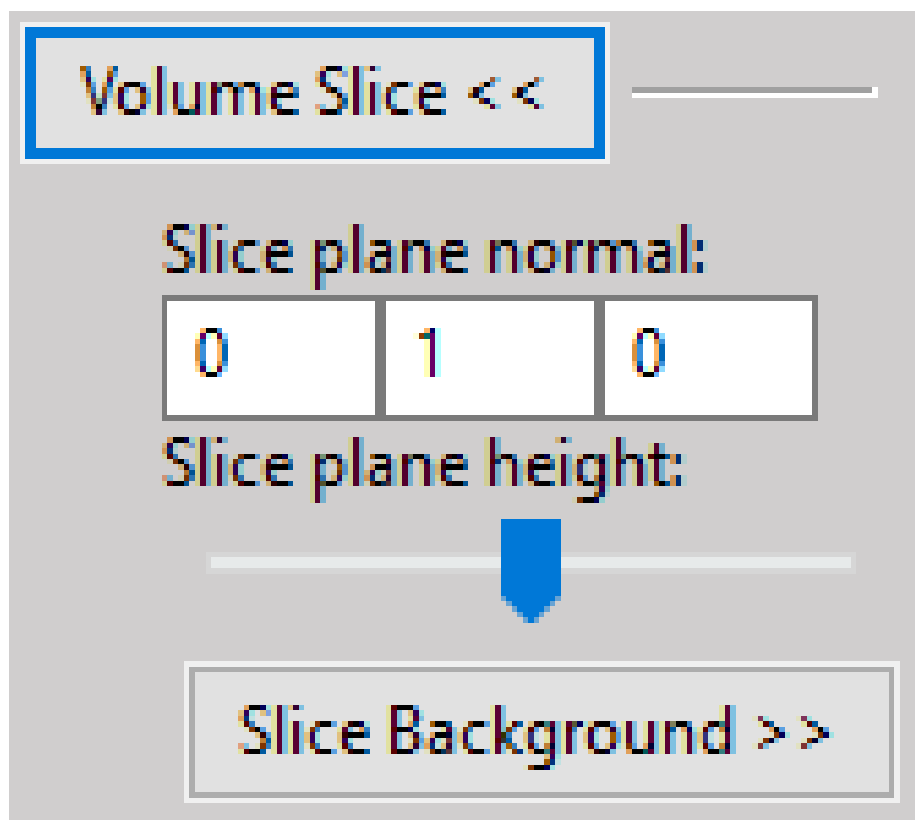


Figure 22: SliceControlCollapsible, sizer-struktur.

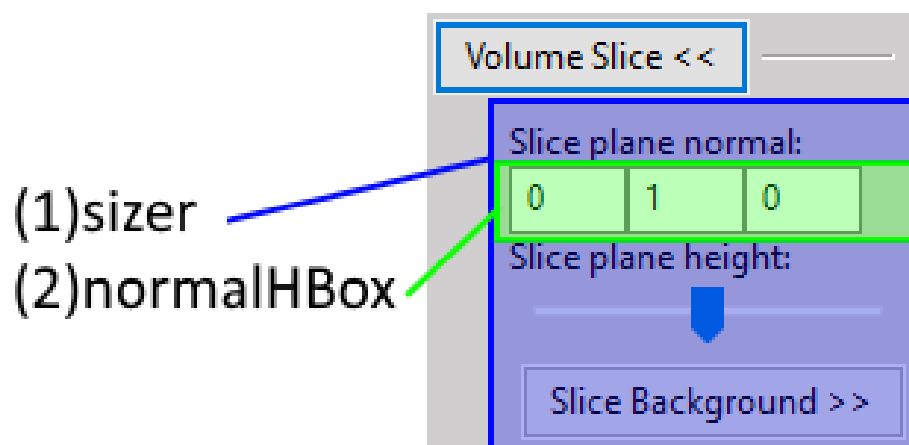


Figure 23: SliceControlCollapsible, sizer-struktur.

Funktioner i klassen är callbacks för olika events som endast kör motsvarande funktion i *VolumeNetworkHandler*-objektet efter användarinteraktion.

#### 5.4.4 BackgroundCollapsible

En kollapserbar meny för att styra en bakgrund i ett inwionätverk. Används i både *VolumeControlCollapsible* och *SliceControlCollapsible* för att styra olika bakgrunder.

Klassen interagerar med ett *VolumeNetworkHandler*-objekt för att kalla på funktioner för att ändra bakgrunder i de olika bilderna.

*BackgroundCollapsible* låter en användare göra följande:

- Välja bakgrundsstil.
- Välja de två färgerna för bakgrunden.
- Byta plats på färgerna.
- Välja *blend mode* för bakgrunden.

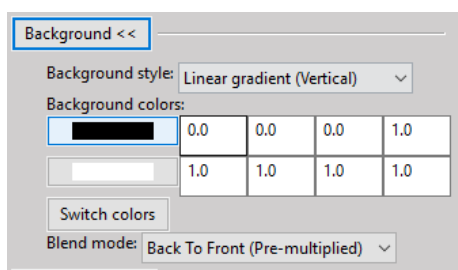


Figure 24: BackgroundCollapsible-objekt i fönster.

**BgColourWidget:** För att förenkla och abstrahera GUI-strukturen så har en klass *BgColourWidget* definierats. Widgeten en *wx.ColourPicker* där en färg kan väljas. Den har även fyra textfält där en färg manuellt kan väljas från ett RGBA-värde. Klassen har även funktioner för att hämta ut och sätta värden i textfälten. Två *BgColourWidget* används i *BackgroundCollapsible* för att hantera de två färgerna i bakgrunden.

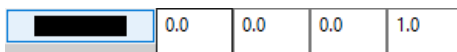


Figure 25: BgColourWidget-objekt i fönster.

#### 5.4.5 UnitcellCollapsible

En kollapserbar meny för att styra en atompositionsaspekten av en visualisering. Denna används i både laddningstäthets- och i ELF-menyn (och bör även användas till partiell laddningstäthet då den läggs till i gränssnittet).

Klassen interagerar med ett *UnitcellNetworkHandler*-objekt för att styra den del av inwionätverket som är relevant. *UnitcellCollapsible* initierar inte sin egen *UnitcellNetworkHandler* utan variabeln *networkHandler* måste sättas utifrån klassen innan den kan användas.

*UnitcellCollapsible* låter en användare göra följande:

- Välja radie för enskilda atomtyper.

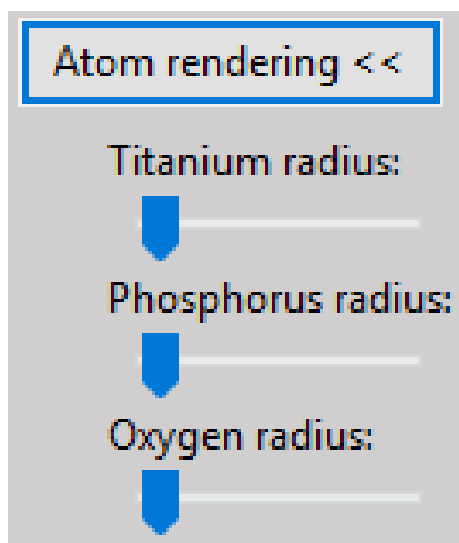


Figure 26: UnitcellCollapsible-objekt i fönster.

**UnitcellControlWidget:** För att förenkla och abstrahera GUI-strukturen så har en klass `UnitcellControlWidget` definierats. Widgeten består av en `wx.StaticText` för att skriva atomnamnet och en `wx.Slider` för att välja atomradie. Klassen interagerar med inwonätverket via samma `UnitcellNetworkHandler` som den `UnitcellCollapsible` den är tillagd på.

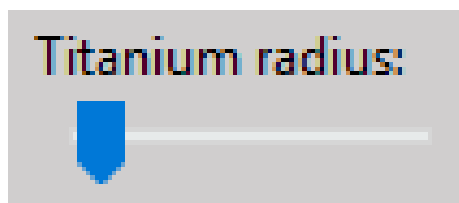
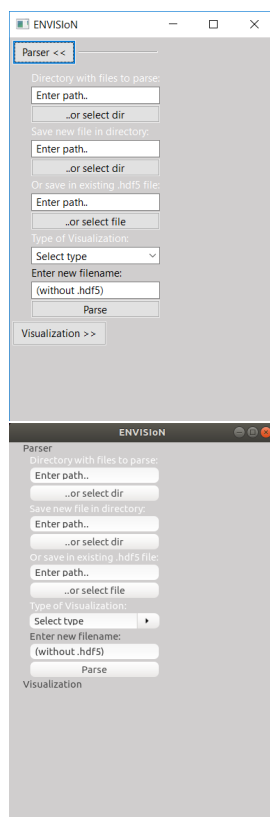


Figure 27: UnitcellControlWidget-objekt i fönster.

Då gränssnittet, och därmed `UnitcellCollapsible`-objektet, först initieras är inte en HDF5-fil än vald och ingen information om vilka atomslag som ska ingå i menyn finns. Funktionen `add_atom_control` används därför. Funktionen lägger till ett `UnitcellControlWidget`-objekt under menyn med ett definierat namn och index. Efter att en visualisering startas så kallas denna funktion för att lägga till alla atomer som visualiseringen innehåller.

## 5.5 Parsningsmenyn

Parser-systemet i ENVISIoN har inkorporerats i det grafiska gränssnittet. Detta förenklar användning av parsern då tillgång ges till alla parsning-skript genom kommandon på hög nivå. Filen där det grafiska gränssnittet har utvecklats heter `ParserPane.py`. När parsnings-menyn fälls ut, från start-fönstret, öppnas ett segment enligt figur 5.5.



#### *Parsermenyn i ENVISIoN, Linux och Windows.*

Överst i menyn väljs en mapp, innehållande relevanta beräkningsfiler, som önskas parsas. Detta går att välja genom att skriva sökvägen i textfältet, wx.TextCtrl, eller genom att trycka på *..or select dir*. Det senare alternativet öppnar en filhanterare som tillåter val av mapp. På samma sätt väljs i nästa del en mapp att spara en ny hdf5-fil där parsningsresultatet lagras. För att spara en ny fil måste ett filnamn anges under rubriken *Enter new filename:*. Ett alternativ till detta är om det redan existerar en hdf5-fil där resultatet önskas sparas. För detta väljs antingen den filen med filhanteraren, under *..or select file*, eller genom att skriva sökvägen till filen i rutan tillhörande knappen. En wx.ComboBox är tillagd som innehåller de parsningsval som är tillhandahållna av ENVISIoN. Dessa val innefattar:

- All
- Bandstructure
- Charge
- DoS - Density of States
- ELF - Electron Localization Function
- Fermi Energy
- MD - Molecular Dynamics
- Parchg - Partial Charge

- PCF - Pair Correlation Function
- Unitcell

När användaren är nöjd med sina val trycks parse-knappen längst ned och ett meddelande dyker upp på skärmen. Detta meddelande innehåller information om parsningen lyckades eller inte, och för vilken visualiserings-data parsningen lyckades, om den gjorde det.

Det finns huvudsakligen en viktig funktion i parser-skriptet:

- **parse\_pressed:** Den funktion där parsern aktiveras. Val av typ och lagringsval undersöks här. Här sker även felkontroll om parsningen lyckats eller inte.

Samtliga fält i parser-menyn som kan ändras har en kopplad funktion för händelsehantering.

De filer som GUI:t kommunicerar med i parser-skriptet är:

- bandstructure.py
- doscar.py
- md.py
- unitcell.py
- volume.py
- fermi.py
- parchg.py
- PCF.py
- fermiEnergy.py
- main.py

Samtliga dessa filer, förutom *main.py*, finns i mappen *ENVISIoN/envision/envision/parser/vasp*, *main.py* finns i *ENVISIoN/envision/envision*. Se appendix 7 för sökvägar relevanta för GUI:t.

## 5.6 Visualiseringsmenyer

Här beskrivs de olika visualiseringsmenyernas uppbyggnad och funktion.

### 5.6.1 ChargeFrame

En kollapserbar meny för att starta och styra en laddningstäthetsvisualisering. Har en *VolumeControlCollapsible*, *UnitcellCollapsible*, *BackgroundCollapsible*, och *SliceControlCollapsible* under sig tillsammans med kontroller för att välja band och aktivera slice och atomrendering.

Klassen tillgängliggör ett gränssnitt för användaren att interagera med ett *ChargeNetworkHandler*-objekt.

*ChargeFrame* låter en användare göra följande, utöver det som tillåts i dess underklasser:



- Starta och avsluta en visualisering (genom att fälla in och ut menyn).
- Välja aktivt atomband som ska visualiseras.
- Välja om atompositioner ska renderas eller inte.
- Välja om tvärsnitt ska visualiseras eller inte.

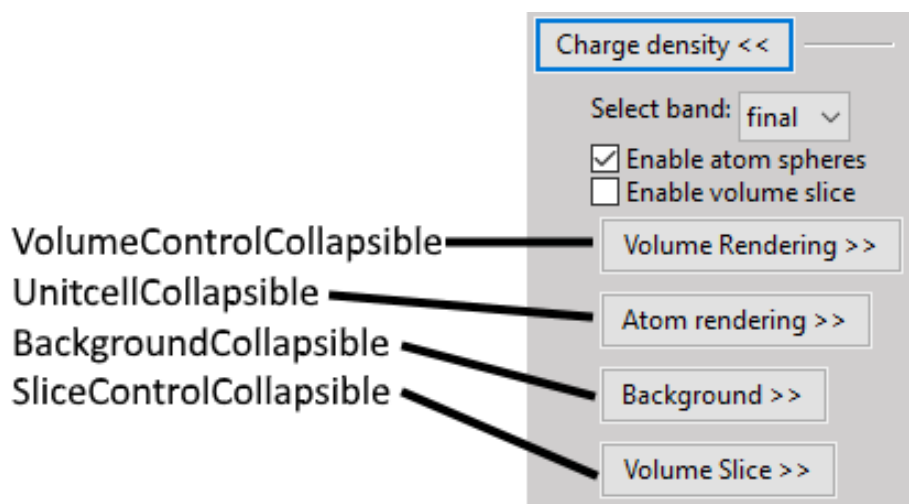


Figure 28: ChargeFrame i fönster.

Speciella funktioner i *ChargeFrame*:

- **on\_collapse:** Körs då ChargeFrame fälls ut eller ihop.
  - Om menyn fälls ut så försöker den att starta en visualisering genom att initiera ett *ChargeNetworkHandler*-objekt och att initiera dess undermenyer med detta.  
Om visualiseringen misslyckas att startas så fälls menyn ihop igen och nätverket rensas.
  - Om menyn fälls ihop så avslutas visualiseringen och nätverket rensas.
- **reset\_canvas\_positions** Sätter visualiseringens canvas-position baserat på fönstrets position.

### 5.6.2 ELFFrame

ELFFrame är identisk jämfört med ChargeFrame med undantaget att en *ELFNetworkHandler* används istället för *ChargeNetworkHandler* samt titeln på menyn.

### 5.6.3 ParchgFrame

En kollapserbar meny för att starta och styra visualiseringen av partiell laddningstäthet. Har en *VolumeControlCollapsible*, *UnitcellCollapsible*, *BackgroundCollapsible*, och

*SliceControlCollapsible* under sig tillsammans med kontroller för att välja aktiva band och lägen.

Klassen tillgängliggör ett gränssnitt för användaren att interagera med ett *ParchgNetworkHandler*-objekt.

*ParchgFrame* låter en användare göra följande, utöver det som tillåts i dess underklasser:

- Starta och avsluta en visualisering (genom att fälla in och ut menyn).
- Välja ett godtyckligt antal band som ska visualiseras.
- Välja om atompositioner ska renderas eller inte.
- Välja om tvärsnitt ska visualiseras eller inte.

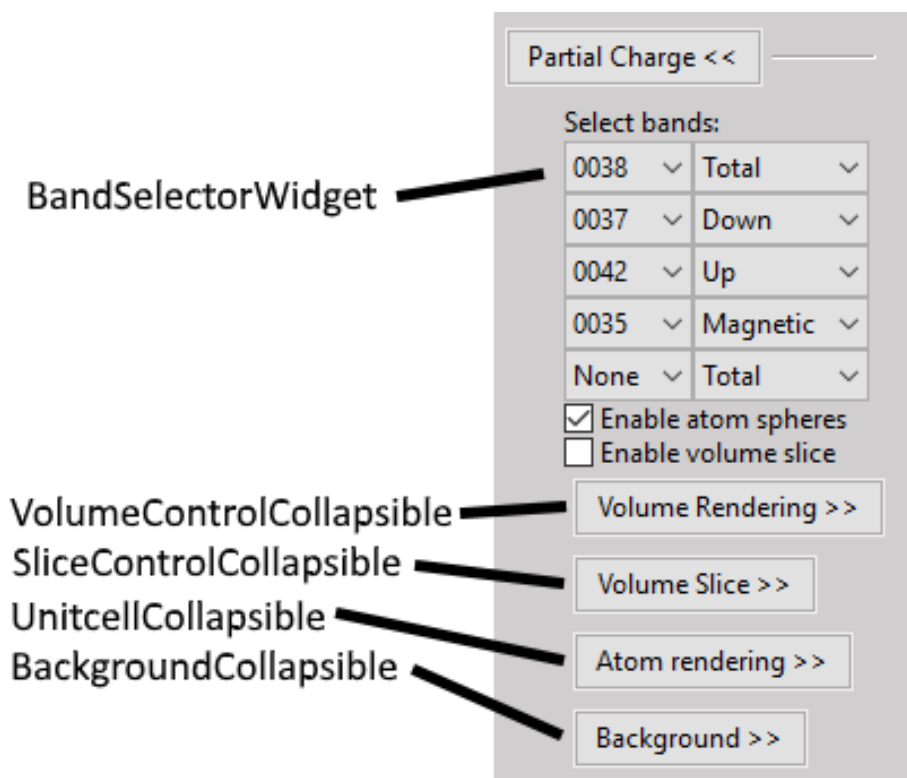


Figure 29: ParchgFrame i fönster.

Speciella funktioner i *ParchgFrame*:

- **on\_collapse:** Körs då ParchgFrame fälls ut eller ihop.
  - Om menyn fälls ut så försöker den att starta en visualisering genom att initiera ett *ParchgNetworkHandler*-objekt och att initiera dess undermenyer med detta.  
Om visualiseringen misslyckas att startas så fälls menyn ihop igen och nätverket rensas.

- Om menyn fälls ihop så avslutas visualiseringen och nätverket rensas.
- **reset\_canvas\_positions** Sätter visualiseringens canvas-position baserat på fönstrets position.
- **reload\_band\_processors** Läser valt band och läge i alla valda *BandSelector-Widget* och sätter dessa som aktiva.

### 5.6.4 2D-visualiseringar i grafer

Visualiseringar i tvådimensionella grafer i ENVISIoN har många saker gemensamt. Detta har gjort att gränssnitten för dessa tre visualiseringar, bandstruktur, parkorrelationsfunktionen och tillståndstäthet, utvecklades på nästan identiskt vis. Det finns dock några skillnader.

**BandstructureFrame** är klassen till den kollapsbara menyn för bandstrukturvisualiseringen. Figur 5.6.4 visar hur denna meny ser ut för både Windows och Linux. Under denna meny gömmer sig ett antal textfält och reglage.

The image shows a screenshot of the 'BandstructureFrame' menu in ENVISIoN. It is divided into two main sections: 'Bandstructure' and 'Density of States'. Each section contains several input fields and checkboxes for configuring the visualization. The 'Bandstructure' section includes fields for X Range, Y Range, Scale, Help line, Grid, X label, Y label, List of Y, Band 8, Enable all Y, Enable Y selection, and Y Selection Range. The 'Density of States' section includes fields for X Range, Y Range, Scale, Help line, Grid, Grid width, X label, Y label, Label count, List of Y, Partial choice, Enable all Y, Enable Y selection, and Y Selection Range.

Visualiseringsmenyn för bandstruktur, Linux och Windows.

**PCFFrame** är klassen till den kollapsbara menyn för parkorrelationsfunktions-visualiseringen. Även figur 5.6.4 visar hur denna meny ser ut för både Windows och Linux. Här syns tydligt hur lika menyerna för graf-visualiseringarna är vid jämförelse med bandstrukturmenyn.

PCF <<

X Range: 0.0 15.9375

Y Range: -0.379700050 4.17670011520

Scale: 0.8

☐ Help line

0.0

☐ Grid

0.002

☒ X label

☒ Y label

Label count: 5

☐ Enable all Y

☐ Enable Y selection

List of Y:

PCF for t\_38

▼ PCF

X Range: 0.0 15.9375

Y Range: -0.3797000 4.1767001

Scale: 0.8

☒ Help line

0.0

☒ Grid

0.002

☒ X label

☒ Y label

Label count: 5

☒ Enable all Y

☐ Enable Y selection

List of Y:

PCF for t\_38

Visualiseringsmenyn för parkorrelationsfunktionen, Windows och Linux.

**DosFrame** är klassen till den kollapsbara menyn för tillståndstäthetvisualiseringen. Figur 5.6.4 visar hur denna meny ser ut för Windows och Linux.

Density of States <<

X Range: -60.904102325 7.36689662933

Y Range: -226.0 226.0

Scale: 0.8

☐ Help line

0.0

☐ Grid

Grid width:

0.002

☒ X label

☒ Y label

Label count: 5

List of Y:

Partial 5 d-DOS(x2y2)(dwn) Added

Partial choice: 5

☐ Enable all Y

☒ Enable Y selection

Y Selection Range: 1:5,7-9,18

▼ Density of States

X Range: -60.90410 7.3668966

Y Range: -226.0 226.0

Scale: 0.8

☒ Help line

0.0

☒ Grid

Grid width:

0.002

☒ X label

☒ Y label

Label count: 5

List of Y:

Partial 5 d-DOS(x2y2)(dwn) Added

Partial choice: 5

☒ Enable all Y

☒ Enable Y selection

Y Selection Range: 1:5,7-9,18

Visualiseringsmenyn för tillståndstäthet, Windows och Linux.

**Gemensamt för 2D-visualiseringar i graf** är uppbyggnad och till största del dess funktion, se figur 5.6.4, 5.6.4 och 5.6.4. Alla dessa meny-klasser är av typen `GeneralCollapsible` och ärver därför de funktioner som tillhör denna generella klass. Utöver detta har varje visualiseringsklass egna egenskaper. Det som är möjligt att ändra i dessa visualiseringar är:

- Ändra synligt intervall för båda axlarna genom att sätta minsta och största synliga värde i textboxarna, vänster respektive höger, vid *X Range* och *Y Range*.
- Ändra skalningen för hela grafen genom att skriva ett decimaltal mindre än ett i rutan för *Scale*
- Aktivera eller inaktivera en hjälplinje. Denna hjälplinje kan flytta antingen med hjälp av manuell inmatning av x-värde i textrutan eller genom att dra i skjutreglaget. Vid flytt av skjutreglage uppdateras textrutan med det nya x-värdet där linjen placerats.
- Aktivera eller inaktivera ett rutnät. Detta rutnät är till för att, lättare, snabbt kunna läsa av värden på kurvan. Rutnätslinjernas tjocklek kan ändras genom att manuellt mata in ett värde mellan 0.0001 och 0.01 i textfältet under kryssrutan för *Grid*.
- Hantera etiketter utskrivna längs axlarna i grafen. Dels finns möjligheten av visa grafen både utan och med värden längs axlarna. Sedan finns även möjligheten att välja hur många sådan etiketter som skall finnas längs axlarna. Dessa placeras med jämna intervall från minsta synliga värde till största.
- Välja vilka linjer som skall visas i grafen. Det sista segmentet i visualiseringsfönstret för dessa visualiseringar handlar om val av data. Det visas för samtliga graf-visualiseringar, en lista med de data frames innehållande y-data som finns tillgängliga. Det finns två kryssrutor, en för att visa alla linjer och en för att välja en eller flera linjer. För att välja flera linjer kan intervall eller enstaka linjer väljas genom att skriva dess index i textrutan som öppnas när *Enable Y selection* kryssas i.

**Skillnader mellan 2D-visualiseringar i graf** är att tillståndstäthetsvisualiseringen har en möjlighet att välja vilken partiell tillståndstäthet som önskas visualiseras. Detta genom att skriva in ett heltal i textrutan för *Partial pick*. För både tillståndstäthet och parkorrelationsfunktionen kan enstaka linjer väljas i listan av data frames, för bandstruktur är denna lista enbart en visuell lista. För visualisering av tillståndstäthet, i fallet att enhetscell-data finns tillgänglig hdf5-filen, öppnas ett extra fönster med enhetscellens visualisering.

Samtliga dessa funktioner kommunicerar med visualiseringsnätverket via funktioner från hjälpfilen `paramterer_utils.py`, se kapitel 5.7.1. Viktiga funktioner som är speciella för graf-visualiseringar är:

- **`on_collapse(self, event = None)`:** Aktiveras vid kollaps eller expansion av varje meny. Startar visualisering eller rensar nätverket.
- **`start_vis(self)`:** Kollar om rätt data finns i given hdf5-fil. Kallar på visualliseringskriptet eller skickar felmeddelande

- **init\_DoS(self), init\_bandstructure(self) och init\_PCF(self):** Sätter alla parametrar i GUI:t till de som visualiseringen startas med.

Utöver dessa finns det funktioner som är kopplade till de element som är synliga i GUI:t och har en funktion att styra en egenskap hos visualiseringen.

## 5.7 Inviwointeraktion

För att interagera med inviwonätverket och påverka visualiseringarna så används två olika tillvägagångssätt. För de visualiseringar där *NetworkHandler*-klasser finns definierade så används dessa. Se kapitel 4.2. För återstående visualiseringar, PCF, DOS, och Bandstruktur, så används funktioner i en fil "parameter\_utils.py" för att interagera med inviwonätverket.

### 5.7.1 parameter\_utils.py

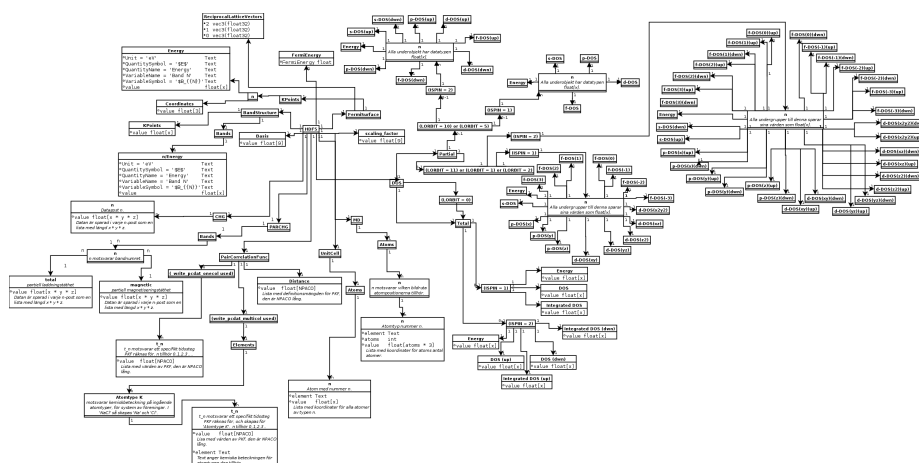
En fil *parameter\_utils.py* innehåller funktioner som sköter kommunikation med olika processorer i nätverket. Den generella strukturen på dessa funktioner är att de tar en processoridentitet i form av en sträng. I de fall att ett värde skall sättas är även detta värde en parameter. De funktioner som finns i denna fil hanterar till exempel fönsterposition för det fönster visualiseringarna öppnas i. I denna fil finns även funktionerna till styrning av parametrar i *lineplotprocessorn* som är relevanta för de, i GUI:t, existerande visualiseringarna. Viktiga funktioner som finns i *parameter\_utils* är:

- **clear\_processor\_network():** Rensar arbetsytan från processorer.
- **change\_scale(scaleValue,processor='Line plot'):** Ändrar skalningen av grafen i *lineplotprocessorn*.
- **set\_all\_data(processor='',setAll=True):** Sätter om alla linjer skall visas i grafen.
- **set\_yline\_range(option=1,processor='Line plot'):** Sätter vilka linjer, en eller flera, som skall ritas ut i grafen.
- **choose\_line(index=1,processor='Line plot'):** Sätter vilken linje, endast en, som skall visas i grafen.
- **set\_x\_range(value, type, processor='Line plot'):** Sätter vilket intervall som skall vara synligt på x-axeln.
- **set\_y\_range(value, type, processor='Line plot'):** Sätter vilket intervall som skall vara synligt på y-axeln.
- **set\_help\_line(value, processor='Line plot'):** Sätter var hjälp-linjen skall vara.
- **set\_grid(value=None,processor='Line plot'):** Sätter tjockleken på rutnätets linjer.
- **set\_canvas\_position(position = None, processor='Canvas'):** Sätter visualiseringsfönstrets position.
- **set\_label(value=None,processor='Line plot'):** Sätter hur många värden som ska skrivas ut på axlarna, borträknat minsta värdet.

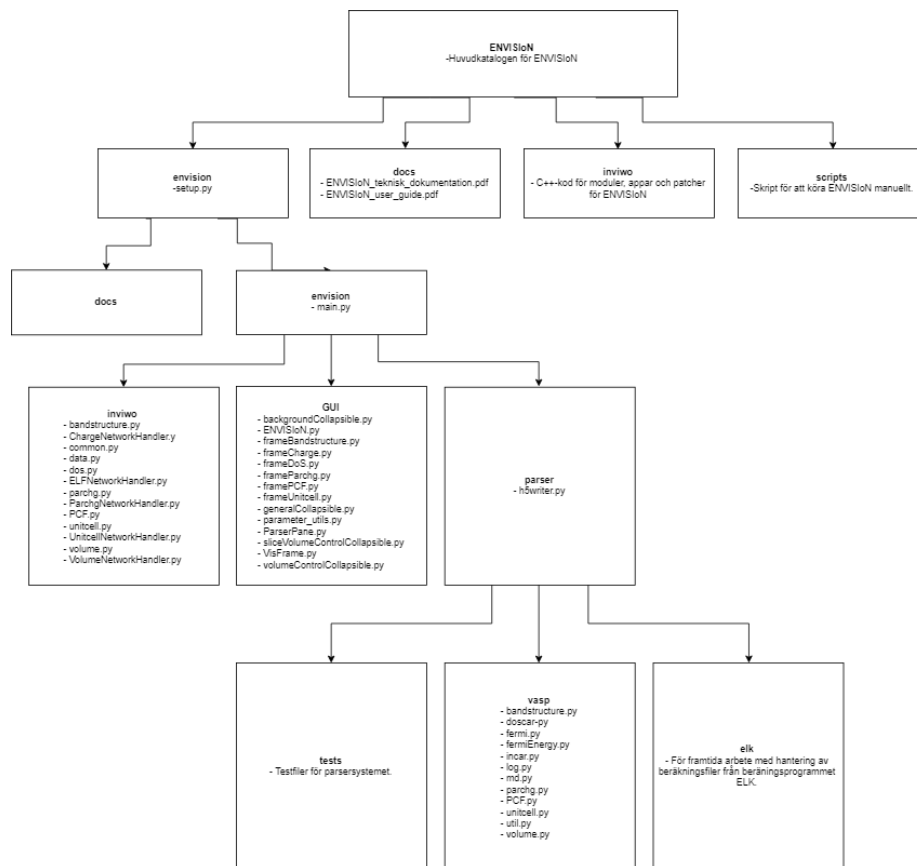
- **set\_partial\_value(option=1,processor='Line plot'):** För tillståndstäthet sätter denna funktion vilken partiell täthet som skall visas.

Samtliga funktioner i parameter\_utils.py som sätter ett värde har en motsvarande funktion som hämtar det värdet som vid tillfället är satt. Samtliga dessa funktioner är namngivna med stilen *get\_[vad som ska hämtas]* till exempel *get\_scale*.

## 6 Appendix A - ENVISIoNs HDF5-filstruktur



## 7 Appendix B - Sökvägar till filer relevanta för GUI:t



## References

- [Inviwo] *Inviwo* <https://inviwo.org/>, (h mtad 2019-05-10)
- [API] [https://www.ne.se/uppslagsverk/encyklopedi/l ng/api-\(data\)](https://www.ne.se/uppslagsverk/encyklopedi/l ng/api-(data)) (h mtad 2019-05-16)
- [BSD2] *BSD2*, <https://opensource.org/licenses/BSD-2-Clause> (h mtad 2019-05-10)
- [Cpp] *C++*, textit{<http://www.cplusplus.com/info/description/>} (h mtad 2019-01-28).
- [dict] *Data Structures*, <https://docs.python.org/3/tutorial/datastructures.html> (h mtad 2019-05-17).
- [Fermi-energi] *Solid State Physics*, Neil Ashcroft och David Mermin, 1976, s. 141.
- [Git] *Git*, <https://git-scm.com> (h mtad 2019-01-28).



[GUI]	<i>GUI</i> , <a href="https://www.ne.se/uppslagsverk/encyklopedi/lång/api-(data)">https://www.ne.se/uppslagsverk/encyklopedi/lång/api-(data)</a> (hämtad 2019-05-10)
[HowToUseHDF5FilesinPython]	<i>How To Use HDF5 Files in Python</i> , <a href="https://www.pythonforthe lab.com/blog/how-to-use-hdf5-files-in-python/">https://www.pythonforthe lab.com/blog/how-to-use-hdf5-files-in-python/</a> , (hämtad 2019-02-26).
[Python]	<i>Python</i> , <a href="https://www.python.org/">https://www.python.org/</a> , (hämtad 2019-01-28)
[Python3]	<i>Python3</i> <a href="https://docs.python.org/3/">https://docs.python.org/3/</a> , (hämtad 2019-05-10)
[PyQT]	<i>PyQT</i> <a href="https://www.riverbankcomputing.com/static/Docs/PyQt5/">https://www.riverbankcomputing.com/static/Docs/PyQt5/</a> , (hämtad 2019-05-16)
[WhatIsArray]	<i>Python Arrays</i> , <a href="https://www.programiz.com/python-programming/array#introduction">https://www.programiz.com/python-programming/array#introduction</a> , (hämtad 2019-05-21).
[WhatIsUNIX]	<i>What is UNIX?</i> , <a href="https://www.softwaretestinghelp.com/unix-introduction/">https://www.softwaretestinghelp.com/unix-introduction/</a> , (hämtad 2019-05-21).
[wxPython]	<i>wxPython</i> , <a href="https://wxpython.org/pages/overview/">https://wxpython.org/pages/overview/</a> , (hämtad 2019-05-16)
[wxPythonDoc]	<i>wxPython Documentation</i> , <a href="https://docs.wxpython.org/wx.1moduleindex.html">https://docs.wxpython.org/wx.1moduleindex.html</a> , (hämtad 2019-05-17)
[QuickStartGuide]	<i>Quick Start Guide</i> , <a href="http://docs.h5py.org/en/stable/quick.html#appendix-creating-a-file">http://docs.h5py.org/en/stable/quick.html#appendix-creating-a-file</a> , (hämtad 2019-02-26).
[RadialDistributionFunction]	<i>Radial distribution function</i> , <a href="https://en.wikipedia.org/wiki/Radial_distribution_function">https://en.wikipedia.org/wiki/Radial_distribution_function</a> , (hämtad 2019-03-03).
[HDFGroup]	<i>The HDF Group, Hierarchical Data Format, version 5 1997-2019</i> , <a href="https://support.hdfgroup.org/HDF5/">https://support.hdfgroup.org/HDF5/</a> , (hämtad 2018-01-28).
[HDFGroup2]	<i>The HDF Group. High Level Introduction to HDF5. 23 Sept. 2016</i> , <a href="https://support.hdfgroup.org/HDF5/Tutor/HDF5Intro.pdf">https://support.hdfgroup.org/HDF5/Tutor/HDF5Intro.pdf</a> , (hämtad 2019-01-28).
[Unittest]	<i>Unittest</i> , <a href="https://docs.python.org/3/library/unittest.html">https://docs.python.org/3/library/unittest.html</a> , (hämtad 2019-03-06).
[VASP]	<i>VASP</i> , <a href="https://www.vasp.at/index.php/about-vasp/59-about-vasp">https://www.vasp.at/index.php/about-vasp/59-about-vasp</a> , (hämtad 2019-02-26).